

**Einsatz von CFD-Codes  
für die Simulation  
von unfalltypischen  
Phänomenen im  
Sicherheitseinschluss:  
Validierung und gezielte  
Modellerweiterung**

**Einsatz von CFD-Codes  
für die Simulation  
von unfalltypischen  
Phänomenen im  
Sicherheitseinschluss:  
Validierung und gezielte  
Modellerweiterung**

Berthold Schramm  
Jörn Stewering  
Martin Sonnenkalb

September 2017

**Anmerkung:**

Das diesem Bericht zugrunde liegende FE-Vorhaben wurde mit Mitteln des BMWi unter dem Kennzeichen RS1526 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung des Auftragnehmers wieder und muss nicht mit der Meinung des Auftraggebers übereinstimmen.

**Deskriptoren**

CFD, CFX, OpenFOAM, Containment, H<sub>2</sub>-Verteilung, H<sub>2</sub>-Verbrennung, Passive Autokatalytische Rekombinatoren, Kondensation, Aerosole

## Kurzfassung

Im Rahmen des vom BMWi geförderten Projektes RS1526 hat die GRS ihre in den Projekten RS1500 und RS1181 begonnenen Arbeiten zur Erprobung und Validierung von CFD-Codes für die Simulation von unfalltypischen Phänomenen im Sicherheitseinschluss fortgesetzt.

Eines der Hauptziele war die Weiterentwicklung und Validierung von CFX-Modellen zur Simulation von unfalltypischen Vorgängen im Sicherheitseinschluss. Dazu wurde die Simulation des Sumpfes eines DWR untersucht. Hierzu wurden unterschiedliche Modellierungsarten (CFX-Mehrphasenströmung, Solid Block und Immersed Solid) anhand von Testbeispielen und der Nachrechnung des THAI-Experimentes TH-6 untersucht. Ein weiterer Arbeitspunkt war der Test von Wandfunktionen für die Wandkondensation. Die Sucec-Wandfunktionen wurden durch Nachrechnung von drei CONAN Versuchen, und durch Simulation von Panda4bis und THAI TH-2 validiert. Es wurde ein Volumen-kondensationsmodell vom IKE Stuttgart/ANSYS übernommen, getestet und teilweise modifiziert. Das modifizierte Volumen-kondensationsmodell wurde durch Versuchsnachrechnungen (Panda4bis, TH-2, TH-24) validiert. In RS1500 wurde ein Modell zur Simulation von passiven autokatalytischen Rekombinatoren entwickelt. Dieses Modell wurde erweitert, damit es mit dem Volumen-kondensationsmodell kompatibel ist. Die Erprobung von CFX hinsichtlich der Berücksichtigung von Phänomenen, die mit den im Verlaufe eines Unfalls in den Sicherheitseinschluss freigesetzten Spaltprodukten (Aerosole und Edelgase) verbunden sind, war eine weitere Zielsetzung dieses Vorhabens. Die Ergebnisse der Simulation wesentlicher Phänomene des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens im Sicherheitseinschluss mit CFD-Simulationen wurden dargestellt. Die Bildung und Auflösung von Leichtgasschichtungen ist weiterhin ein Forschungsschwerpunkt. Neben der Beteiligung an einem OECD/NEA Benchmark wurden drei Versuche aus dem aktuellen HYMERES Versuchsprogramm nachgerechnet (PANDA HP1\_2, PANDAHP1\_6 und MISTRA HM1-1). In RS1526 wurde die Simulation von H<sub>2</sub>-Verbrennungsvorgängen durch Implementation von Korrelationen zur Modellierung des Einflusses von thermo-diffusiven Flammeninstabilitäten weiterentwickelt. Weiterhin wurde die Validierungsbasis durch Nachrechnung von Versuchen aus den THAI-HD, ENACCEF und ProScience-Versuchsreihen erweitert.

Der in RS1500 erstellte Datensatz zur Simulation der Gasverteilung eines generischen DWR KONVOI Sicherheitsbehälters bei einem schweren Störfall mit H<sub>2</sub>-Freisetzung wurde um die in diesem Projekt erzielten Modellverbesserungen insbesondere die



Sumpfmmodellierung erweitert. Die hiermit erzielten Simulationsergebnisse wurden mit Ergebnissen einer gekoppelten COCOSYS/CoPool Rechnung verglichen.

Neben der Weiterentwicklung und Validierung von CFX sollte in diesem Projekt erstmals die Leistungsfähigkeit von OpenFOAM untersucht werden. Durch Nachrechnung der Versuche (TH-26, OECD/NEA Benchmark, Mini Panda) wurde die Leistungsfähigkeit von OpenFOAM mit CFX verglichen.

## Abstract

The GRS continued their work for the testing and validation of CFD-codes for the simulation of containment-typical phenomena in the framework of the BMWi sponsored project RS1526. This work started within the projects RS1181 and RS1500. A main goal of the project was the development and validation of CFX models for containment applications. Thus one topic was the simulation of the containment sump of a PWR. Different modelling strategies were tested (multiphase simulation, solid block, immersed solid) by the simulation of simplified examples and the TH-6 experiment. Another work item was the test of wall functions in case of wall condensation. The Sucec wall functions were validated by simulation of three CONAN experiments, Panda4bis and TH-2. A bulk condensation model developed by IKE Stuttgart/ANSYS was modified and validated by simulation of Panda4bis, TH-2 and TH-24. In a recent project a model for passive autocatalytic recombiners has been developed. This model has been extended in order to be compatible with the modified IKE/ANSYS bulk condensation model. Phenomena associated with the release of radioactive noble gases and aerosols during a severe accident into the containment should be taken into account in future CFX containment simulations, too. Thus the CFX modelling of major phenomena of this topic was investigated. The formation and the erosion of stable light gas layer is still an important research topic. GRS participated in an OECD/NEA Benchmark and three experiments of the HYMERES projects were simulated (PANDA HP1\_2, PANDA, HP1\_6 and MISTRA HM1-1). The simulation of H<sub>2</sub> combustion was improved by the implementation of correlations modelling the influence of thermo diffusive flame instabilities. The improved combustion model was validated by the simulation of experiments at the THAI, ProScience and ENACCEF facilities.

The model improvements achieved in this project are applied in the simulation of the gas distribution in a generic KONVOI containment. The simulation results were compared with the results of a coupled COCOSYS/CoPool calculation.

In addition to the validation of CFX OpenFOAM has been tested. The TH-26 experiment, Mini Panda and the OECD/NEA benchmark were simulated with OpenFOAM and the results were compared with experimental data and corresponding CFX calculations.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung .....</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Arbeitspunkt 1.1 – Entwicklung eines Sumpfmodells.....</b>	<b>3</b>
2.1	Einführung .....	3
2.2	Simulation eines einfachen Testbeispiels .....	4
2.3	Simulation der GES-Wanne.....	8
2.4	Testbeispiel zur Kombination von Sumpf und Volumencondensation .....	16
2.5	Nachrechnung des THAI-Versuchs TH-6.....	22
2.5.1	Experimenteller Aufbau.....	22
2.5.2	Modellierung mit CFX .....	23
2.5.3	Vergleich von Experiment und Simulation.....	27
2.5.4	Berücksichtigung der Kondensattemperatur / Energie bei der Solid-Block-Simulation .....	32
2.6	Zusammenfassung .....	34
<b>3</b>	<b>Arbeitspunkt 1.2 – Simulation von Kondensationsvorgängen mittels Wandfunktionen .....</b>	<b>37</b>
3.1	Einleitung.....	37
3.2	Überblick über die neu implementierten Wandfunktionen .....	38
3.3	Nachrechnung von CONAN-Versuchen.....	41
3.3.1	Beschreibung der CONAN-Versuche.....	41
3.3.2	Simulation mit CFX.....	42
3.3.3	Simulationsergebnisse.....	44
3.3.4	Zusammenfassung .....	53
3.4	Nachrechnung des Panda4bis-Experiments mit den Sucec-Wandfunktionen.....	54
3.4.1	Einleitung.....	54
3.4.2	Kurze Beschreibung des Experiments .....	55
3.4.3	Modellierung mit CFX .....	56
3.4.4	Simulationsergebnisse.....	58
3.4.5	Schlussfolgerungen Panda4bis.....	72

3.5	Simulation von TH-2 .....	73
3.6	Zusammenfassung .....	76
<b>4</b>	<b>Arbeitspunkt 1.3 – Validierung eines Volumenkondensationsmodells .....</b>	<b>79</b>
4.1	Einleitung.....	79
4.2	Beschreibung des Volumenkondensationsmodells .....	79
4.3	Experimentell bestimmte Tröpfchengröße .....	83
4.4	Einfluss des Tröpfchendurchmessers auf die Sinkgeschwindigkeit.....	86
4.5	Diskussion des Modellierungsansatzes und Schlussfolgerungen für die Nachrechnung von Experimenten.....	88
4.6	Simulation eines Testbeispiels mit dem unmodifizierten Volumenkondensationsmodell .....	89
4.7	Simulation des Panda4bis-Experiments mit unterschiedlichen Tröpfchengrößen und unterschiedlichen Einspeisebedingungen mit dem ursprünglichen Volumenkondensationsmodell .....	92
4.7.1	Kurze Beschreibung des Experiments .....	92
4.7.2	Modellierung mit CFX .....	94
4.7.3	Simulation mit der ursprünglichen Version des Volumenkondensationsmodells .....	95
4.7.4	Schlussfolgerungen .....	102
4.8	Modifikation des Volumenkondensationsmodells.....	102
4.9	Nachrechnung von Panda4bis mit dem modifizierten Volumenkondensationsmodell .....	105
4.9.1	Parameterstudie zum Einfluss der minimalen Phasengrenzflächendichte.....	105
4.9.2	Parameterstudie zum Einfluss des Tröpfchendurchmessers.....	110
4.9.3	Berücksichtigung der Sinkgeschwindigkeit der Wassertröpfchen und der Ablagerung von Tröpfchen an den Wänden.....	123
4.9.4	Unterdrückung von Volumenkondensation in Wandnähe.....	125
4.9.5	Zusammenfassung .....	134
4.10	Nachrechnung des THAI-Versuches TH-2 mit dem modifizierten IKE- Volumenkondensationsmodell .....	135
4.11	Nachrechnung des THAI-Experimentes TH-24 mit dem modifizierten IKE-Volumenkondensationsmodell .....	140

4.12	Zusammenfassung der Validierung des Volumenkondensationsmodells .....	143
<b>5</b>	<b>Arbeitspunkt 1.4 – Erweiterung des PAR-Modells in CFX um Verdampfungsvorgänge von Wassertröpfchen.....</b>	<b>147</b>
5.1	Einleitung.....	147
5.2	Modellannahmen und Verifikation anhand einer „Stand-Alone-Version“ des PAR-Modells .....	147
5.3	Kopplung des PAR-Modells mit CFX .....	155
5.4	Anwendung des PAR-Modells mit Wand- und Volumenkondensationsmodell in CFX .....	158
5.5	Zusammenfassung .....	161
<b>6</b>	<b>Arbeitspunkt 1.5 – Modellierung wesentlicher Vorgänge des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens im Sicherheitseinschluss.....</b>	<b>163</b>
6.1	Einleitung.....	163
6.2	Sedimentation von Aerosolpartikeln und Ablagerung auf Oberflächen...	164
6.2.1	Einfache Testrechnung .....	164
6.2.2	Nachrechnung der KAEVER-Experimente .....	166
6.3	Ausbreitung von Aerosolpartikeln mit der Gasströmung.....	172
6.3.1	Berechnung eines Testbeispiels .....	172
6.3.2	Vergleich des Algebraic Slip Model (ASM) mit einem Particle-Tracking Modell.....	174
6.3.3	Nachrechnung eines STORM-Experimentes (ISP-40) .....	176
6.3.4	Berechnung für einen Impaktor.....	181
6.4	Agglomeration von Aerosolpartikeln .....	185
6.5	Ausbreitung radioaktiver Edelgase .....	189
6.5.1	Modellierung radioaktiver Edelgase in CFX .....	189
6.5.2	Berechnung eines einfachen Testbeispiels.....	191
6.5.3	THAI TH-2 mit zusätzlicher Einspeisung von Xe, Kr und CsI .....	197
6.6	Ergänzende Analyse zur Partikelstatistik .....	201
6.7	Zusammenfassung .....	207

<b>7</b>	<b>Arbeitspunkt 1.6 – Leichtgasschichtung .....</b>	<b>211</b>
7.1	Teilnahme am OECD/NEA-PSI Benchmark zur Auflösung einer stabilen Leichtgasschichtung .....	211
7.1.1	Kurze Versuchsbeschreibung .....	211
7.1.2	CFD-Gitter .....	212
7.1.3	CFD-Modelle .....	215
7.1.4	Simulationsergebnis .....	216
7.1.5	Zusammenfassung .....	222
7.2	Nachrechnung des HYMERES-Versuches HP1_2 (horizontale Einströmung) .....	223
7.2.1	Geometrie, Start- und Randbedingungen .....	223
7.2.2	Durchführung einer Gitterstudie .....	227
7.2.3	Vergleich von CFX-Ergebnissen mit experimentellen Daten .....	234
7.2.4	Einfluss der Strahlung bzw. Strahlungsabsorption .....	238
7.2.5	Zusammenfassung .....	242
7.3	Fortführung der Arbeiten zur Simulation der Gasverteilung – Nachrechnung HP1_6 .....	242
7.3.1	Experimenteller Versuchsaufbau .....	242
7.3.2	Überblick über die durchgeführten Arbeiten .....	245
7.3.3	CFD-Geometrie und numerische Parameter .....	246
7.3.4	Durchführung einer Gitterstudie .....	247
7.3.5	Ergebnisse der Gitterstudie .....	250
7.3.6	Parameterstudie zum Gittereinfluss im Einlassrohr .....	254
7.3.7	Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten .....	264
7.3.8	Einfluss (der Vernachlässigung) des Wärmestrahlungsmodells .....	274
7.3.9	Einfluss des Konvergenzkriteriums .....	279
7.3.10	Einfluss des Turbulenzmodells .....	280
7.3.11	Zusammenfassung HP1-6 .....	289
7.4	AP 1.7 MISTRA HM1-1 Benchmark .....	291
7.4.1	Einleitung .....	291
7.4.2	Verwendete Modelle .....	293

7.4.3	Gitterstudie .....	294
7.4.4	Vergleich mit experimentellen Daten.....	300
7.4.5	Parameterstudie zum Einfluss von Luftfeuchtigkeit .....	302
7.4.6	Einfluss der Wandemissivität auf das Simulationsergebnis .....	307
7.4.7	Zusammenfassung .....	310
7.5	Zusammenfassung zu AP1.6 Schichtungsauflösung .....	311
<b>8</b>	<b>AP 1.7 – Fortsetzung der Validierung und Weiterentwicklung des H<sub>2</sub>-Verbrennungsmodells .....</b>	<b>313</b>
8.1	Einleitung.....	313
8.2	Verwendete Modelle bei der Simulation von H <sub>2</sub> -Verbrennungen.....	313
8.3	Laminare Flammgeschwindigkeit .....	318
8.3.1	Laminare Flammgeschwindigkeit bei H <sub>2</sub> /Luft Gemischen bei Standardbedingungen .....	320
8.3.2	Temperatur und Druckabhängigkeit der laminaren Flammgeschwindigkeit.....	323
8.3.3	Anhängigkeit der laminaren Flammgeschwindigkeit vom Dampfgehalt .....	326
8.4	THAI HD-2R/HD-12 Experimente .....	329
8.4.1	Beschreibung des Experiments .....	329
8.4.2	Gitterstudie .....	336
8.4.3	Simulationsergebnisse bei Verwendung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammgeschwindigkeit .....	339
8.4.4	Zusammenfassung Nachrechnung HD-12/HD2-R .....	343
8.5	THAI HD-7 Experiment .....	343
8.5.1	Versuchsbeschreibung .....	343
8.5.2	Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten .....	345
8.5.3	Zusammenfassung .....	349
8.6	THAI HD-10 Experiment .....	350
8.6.1	Versuchsbeschreibung .....	350
8.6.2	Simulationsergebnisse HD-10.....	352
8.6.3	Zusammenfassung HD-10 .....	359
8.7	ENACCEF .....	359



8.7.1	Versuchsbeschreibung .....	359
8.7.2	Gitterstudie .....	361
8.7.3	Simulationsergebnisse.....	363
8.7.4	Zusammenfassung .....	369
8.8	ProScience V15.....	370
8.8.1	Versuchsbeschreibung .....	370
8.8.2	CFD-Gitter und Gitterstudie .....	373
8.8.3	Simulationsergebnisse.....	376
8.8.4	Zusammenfassung ProScience V15.....	382
8.9	MITHYGENE-ETSON Benchmark .....	383
8.9.1	Versuchsbeschreibung .....	383
8.9.2	Gitterstudie .....	384
8.9.3	Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten .....	388
8.9.4	Zusammenfassung MITHYGENE-ETSONBenchmark .....	394
8.10	Untersuchung zur Modellierung der turbulenten Verlöschung.....	394
8.10.1	Einleitung.....	394
8.10.2	Experimentelle Beschreibung und CFX-Setup .....	395
8.10.3	Vergleich von CFX-Ergebnissen mit experimentellen Daten .....	396
8.10.4	Variation des kritischen Geschwindigkeitsgradienten Gcrit .....	399
8.10.5	Berücksichtigung der H <sub>2</sub> -Konzentration.....	401
8.10.6	Zusammenfassung und Fazit.....	404
8.11	Zusammenfassung .....	405
<b>9</b>	<b>Arbeitspunkt 2 – Vergleich der Leistungsfähigkeit von OpenFOAM und CFX.....</b>	<b>411</b>
9.1	Allgemeine Gegenüberstellung von CFX und OpenFOAM.....	411
9.2	Nachrechnung des THAI-Versuches TH-26 mit OpenFOAM .....	413
9.2.1	Experimentelles Setup.....	413
9.2.2	Geometrie und Randbedingungen .....	414
9.2.3	Vergleich von OpenFOAM mit CFX und experimentellen Ergebnissen ..	416
9.3	Nachrechnung des OECD/PANDA-Benchmarks mit OpenFOAM.....	420

9.3.1	Experimentelles Setup.....	420
9.3.2	Geometrie und Randbedingung.....	421
9.3.3	Vergleich von OpenFOAM mit CFX und experimentellen Ergebnissen ..	422
9.4	Einfluss der gravitationsbedingten Turbulenzproduktion .....	425
9.4.1	Analysen anderer Institute .....	425
9.4.2	GRS-Analysen (OECD/PANDA) .....	427
9.4.3	GRS-Analysen (TH-26).....	432
9.5	Nachrechnung des Mini-Panda-Benchmarks mit OpenFOAM.....	436
9.5.1	Experimentelles Setup.....	436
9.5.2	Geometrie und Randbedingungen .....	437
9.5.3	Durchführung einer Gitterstudie .....	439
9.6	Einfluss des Buoyancy-Turbulenz-Terms.....	443
9.6.1	Einfluss der Zeitschrittweite (Courant-Zahl) .....	446
9.6.2	Detaillierter Vergleich mit CFX.....	451
9.7	Weitere Untersuchungen zur Eignung von OpenFoam für Containment-Simulationen.....	458
9.8	Ergänzungen zur numerischen Stabilität von OpenFOAM .....	461
9.9	Zusammenfassung und Fazit.....	462
<b>10</b>	<b>AP 3.1 – Simulation der Gasverteilung und der Sumpfbildung im Sicherheitsbehälter eines DWR KONVOI .....</b>	<b>465</b>
10.1	Darstellung des Störfall-Szenarios.....	465
10.2	CFX-Datensatz .....	467
10.2.1	Durchführung einer Gitterstudie .....	469
10.2.2	Durchführung einer Zeitschrittstudie .....	479
10.2.3	Einfluss des (IKE-)Volumenkondensationsmodells .....	481
10.2.4	Einfluss des Sumpfes in CFX (Solid-Block).....	483
10.3	COCOSYS-Datensatz .....	487
10.3.1	Einfluss des Sumpfes in COCOSYS .....	490
10.3.2	Vergleich zwischen CFX und COCOSYS-Ergebnissen.....	492
10.3.3	Vergleich von CFX mit CoPool.....	498
10.4	Zusammenfassung und Fazit.....	513

<b>11</b>	<b>Zusammenfassung .....</b>	<b>515</b>
	<b>Anhang A.....</b>	<b>527</b>
	<b>Literatur .....</b>	<b>529</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis.....</b>	<b>537</b>
	<b>Tabellenverzeichnis.....</b>	<b>565</b>

# 1 Einleitung

Zur 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 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 oder NURETH, 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 CFX, bereits in europäischen Genehmigungsverfahren für Auslegungsrechnungen zukünftiger KKW (EPR, AP1000) angewendet und von den Behörden in den Verfahren generell akzeptiert. Aus diesen Gründen sind 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 RS1526 hat die GRS ihre in den Projekten RS1500 und RS1181 begonnenen Arbeiten zur Erprobung und Validierung von CFD-Codes für die Simulation von unfalltypischen Phänomenen im Sicherheitseinschluss fortgesetzt. Eines der Hauptziele im Arbeitspaket 1 ist die *Weiterentwicklung und Validierung von CFX-Modellen zur Simulation von unfalltypischen Vorgängen im Sicherheitseinschluss*. Folgende Themen wurden bearbeitet:

- In einem Arbeitspunkt wurde die Simulation des Sumpfes eines DWR untersucht. Hierzu wurden unterschiedliche Modellierungsarten (CFX-Mehrphasenströmung, Solid Block und Immersed Solid) anhand von Testbeispielen und der Nachrechnung des THAI-Experimentes TH-6 untersucht (siehe Kap. 2).
- Die RWTH Aachen hat im Rahmen des Projekts FKZ 1501407 Wandfunktionen für die Wandkondensation getestet und in CFX implementiert. Die Sucec-Wandfunktionen wurden durch Nachrechnung von drei CONAN Versuchen und durch Simulation von Panda4bis validiert (siehe Kap. 0).
- Das IKE Stuttgart und ANSYS haben zusammen zwei unterschiedliche Volumen-kondensationsmodelle entwickelt. Die GRS hat das 1-Fluid-Modell als für die An-

wendungen am geeignetsten identifiziert und durch Versuchsnachrechnungen (Panda4bis, TH-2, TH-24) getestet und teilweise modifiziert (siehe Kap. 0).

- In RS1181 und RS1500 wurde die Simulation von H<sub>2</sub>-Verbrennungsvorgängen sowie von Passiven Autokatalytischen Rekombinatoren (PAR) untersucht. Diese Arbeiten wurden ebenfalls im aktuellen Projekt fortgeführt (siehe Kap. 0 und Kap. 8).
- Die Erweiterung von CFX um die Berücksichtigung der im Verlaufe eines Unfalls in den Sicherheitseinschluss freigesetzten Spaltprodukte (Aerosole und Edelgase) war eine der wesentlichen Zielsetzungen dieses Vorhabens. Erste Ergebnisse der Simulation wesentlicher Phänomene des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens im Sicherheitseinschluss mit CFD-Simulationen sind dargestellt (siehe Kap. 0).
- Die Bildung und Auflösung von Leichtgasschichtungen ist weiterhin ein Forschungsschwerpunkt. Neben der Beteiligung an einem OECD/NEA Benchmark wurden drei Versuche aus dem aktuellen HYMERES Versuchsprogramm nachgerechnet (siehe Kap. 0).

Neben der Weiterentwicklung und Validierung von CFX soll im Arbeitspaket 2 in diesem Projekt erstmals die *Leistungsfähigkeit von OpenFOAM für containmenttypische Vorgänge* untersucht werden. OpenFOAM ist ein frei verfügbarer Open Source CFD Code, der insbesondere in Universitäten zunehmend zum Einsatz kommt. Durch Nachrechnung von drei Versuchen (TH-26, OECD-NEA Benchmark und MiniPanda-Benchmark) wurde die Leistungsfähigkeit von OpenFOAM mit CFX verglichen (siehe Kap. 0).

Im Arbeitspaket 3 wurden *Untersuchungen zu unfalltypischen Phänomenen bei reaktortypischen Randbedingungen und für anlagentypische Geometrie mit CFX* durchgeführt. Die Arbeiten hierzu sind in Kapitel 0 dokumentiert.

## 2            **Arbeitspunkt 1.1 – Entwicklung eines Sumpfmodells**

### 2.1           **Einführung**

Die Entwicklung von Kondensationsmodellen für Wand- und Volumen Kondensation in CFX wurde durch Arbeiten der Partner im CFD-Verbund mit Unterstützung von ANSYS in den zurückliegenden Vorhaben weiter vorangetrieben. Jetzt kann das bei der Kondensation gebildete Wasser weiterverfolgt werden. Offen war bisher die Einbeziehung der Simulation z. B. der Ausbildung von Wasservorlagen / Reaktorsümpfen in eine komplexe Simulationsumgebung für unfalltypische Phänomene im Sicherheitseinschluss.

In den bisherigen CFX-Simulationen wurden sich im Störfallablauf ausbildende Wasservorlagen/Sümpfe im Sicherheitsbehälter noch vernachlässigt. Diese starke Vereinfachung führt dazu, dass einige physikalische Effekte nicht berücksichtigt werden. So können an der Sumpfoberfläche je nach Temperatur, Druck und Gaszusammensetzung Kondensations- und Verdampfungsvorgänge ablaufen, die die Gasatmosphäre signifikant beeinflussen. Zudem wird ein Sumpf aufgrund seiner hohen Wärmekapazität gegenüber dem Gas Temperaturänderungen entgegenwirken.

Mit den Arbeiten soll ein für Containment-Simulationen geeignetes Sumpfmodell entwickelt werden. Ziel eines Modells ist die genaue Simulation der oben genannten physikalischen Effekte. Allerdings ist darauf zu achten, dass der benötigte Rechenaufwand in einem vertretbaren Umfang bleibt, so dass für eine großskalige komplexe Geometrie (wie z. B. Sicherheitsbehälter eines DWR) eine Berechnung mit vertretbarem Aufwand und CPU-Bedarf möglich bleibt.

Ziel dieses Arbeitspunktes ist der Test und Vergleich unterschiedlicher Modellierungsarten für die Simulation eines Reaktorsumpfes im Sicherheitseinschluss. Hierbei sollen sowohl die Möglichkeiten von mehrphasigen Simulationen, wie auch vereinfachte Sumpfmodellierungen untersucht werden:

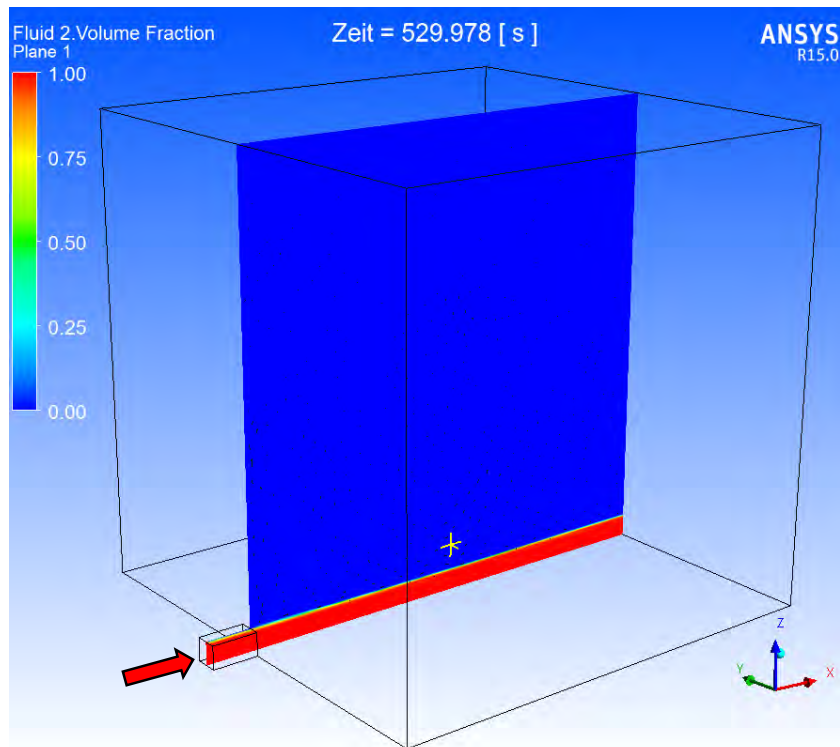
- **Multiphase-Simulation:** Dieses bedeutet bei CFX, dass mehrere Phasen (gasförmig und flüssig) nebeneinander existieren. Hierbei unterscheidet man homogene Modelle, in denen beide Phasen ein gemeinsames Geschwindigkeitsfeld, Temperaturfeld etc. haben, von inhomogenen Modellen, in denen beide Phasen jeweils ein eigenes Feld haben.

- **Immersed Solid:** Dieses ist eine Berechnungs-Option in CFX, bei welcher ein Festkörper dem Fluid überlagert werden kann. Der Festkörper wird dabei nicht durch einen Solid Block modelliert, sondern es wird an der Position des Immersed Solid dem Fluid ein zusätzlicher Impuls verliehen. Dieser verdrängt dann das Fluidvolumen im Raum. Hier könnte der Festkörper den ansteigenden Sumpffüllstand repräsentieren. Nachteil dieser Methode ist, dass kein Wärmeaustausch mit diesem Immersed Solid möglich ist.
- **Solid Block:** Als weitere Möglichkeit kann der Sumpf auch durch einen einfachen (unbeweglichen) Festkörper repräsentiert werden. Dieser kann die Wärmekapazität und Wärmeleitungseigenschaften von Wasser bekommen. So kann die Volumenverdrängung, wie auch Wärmeleitung simuliert werden, nicht jedoch konvektiver Wärme- und Massentransport im Sumpf und auch kein sich ändernder Füllstand des Sumpfes.

Im Folgenden wird zunächst die mehrphasige Modellierung anhand eines einfachen Testbeispiels und dann anhand eines Experimentes (GES-Wanne) untersucht bzw. validiert. Daraufhin wird auch die Kopplung der mehrphasigen Simulationen mit weiteren Modellen (Volumenkondensation, Strahlung) untersucht. Später folgen dann Rechnungen mit vereinfachten Modellen (Solid Block und Immersed Solid). Im Abschluss werden diese unterschiedlichen Modellierungsarten noch an einem THAI-Versuch (TH-6) getestet und Schlussfolgerungen für die Anwendbarkeit der Modelle gezogen.

## 2.2 Simulation eines einfachen Testbeispiels

Als erstes Testbeispiel wurde eine würfelförmige Geometrie mit den Kantenlängen 10 m x 10 m x 10 m gewählt (siehe Abb. 2.1). Dieser Raum ist zunächst nur mit Luft gefüllt. Durch eine Öffnung im unteren Bereich strömt Wasser in den Raum ein. Der Massenstrom wird langsam hochgefahren bis auf 100 kg/s ab  $t = 100$  s. In Abb. 2.1 ist die Öffnung und die Einströmrichtung des Wassers mit einem roten Pfeil gekennzeichnet. Die Rechnungen liefen so lange, bis ein Füllstand von 1 m (gelbes Kreuz) erreicht wurde.



**Abb. 2.1** Testbeispiel für die Mehrphasenmodelle

Zunächst wurde eine Rechnung mit einem homogenen Mehrphasenmodell durchgeführt. Homogen bedeutet in diesem Fall, dass für die beiden vorhandenen Phasen Luft und Wasser nur ein Gleichungssystem verwendet wird. Alle weiteren Berechnungsparameter finden sich in Tab. 2.1.

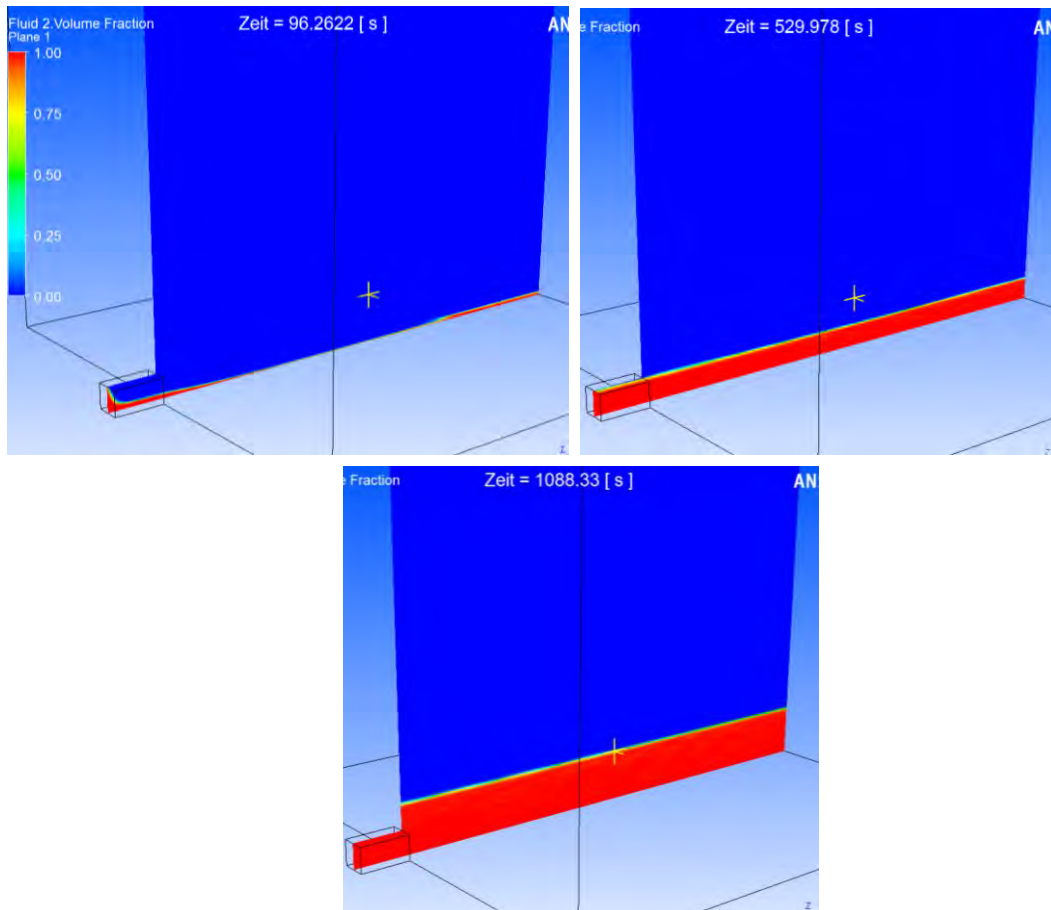
**Tab. 2.1** Infobox Testbeispiel „Mehrphasenmodell homogen“

Experiment	Testbeispiel
Phänomene	Mehrphasenströmung
Elementzahl	620.375
Materialien	2 Phasen: Air ideal Gas (gasförmig), Water (flüssig)
Mehrphasenmodell	Homogen
Wärmetransfer	Homogen
Turbulenzmodell	SST
Fluid Pair Models	Oberflächenspannung: 0.07 N/m Kein „Interphase Transfer“ Kein „Mass Transfer“
Konvergenz	RMS < 1.0e-4
CFX-Version	15.0

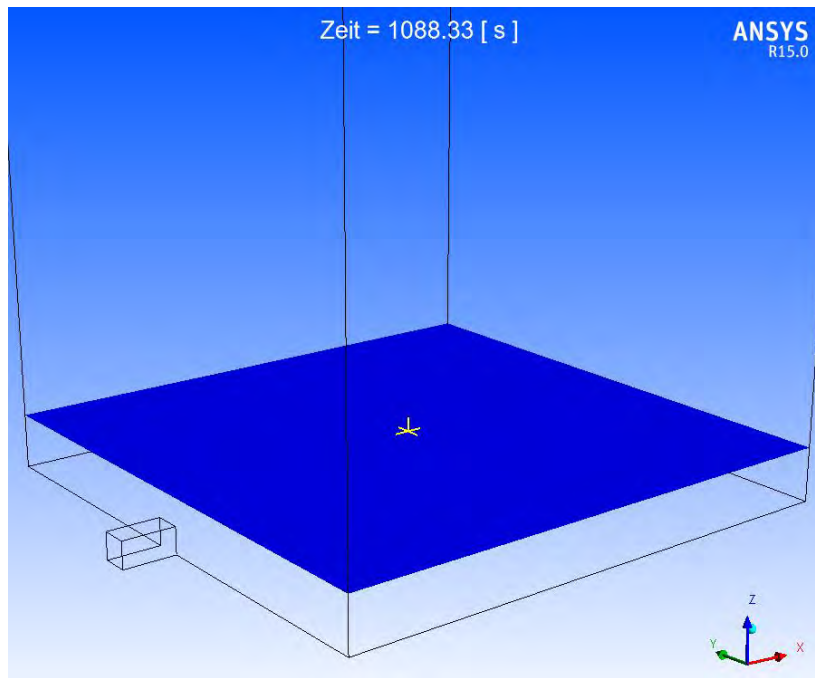


In Abb. 2.2 ist dargestellt, wie sich die Testgeometrie durch das von links unten einfließende Wasser langsam auffüllt. Bei ca. 1100 s erreicht der Füllstands-Pegel dann die 1-Meter-Marke (gelbes Kreuz). Der Auffüllvorgang erscheint zunächst plausibel und die Wasseroberfläche lässt sich zu jedem Zeitpunkt auch durch eine Iso-Fläche darstellen (siehe Abb. 2.3). Die Rechnung ist insgesamt gut konvergiert.

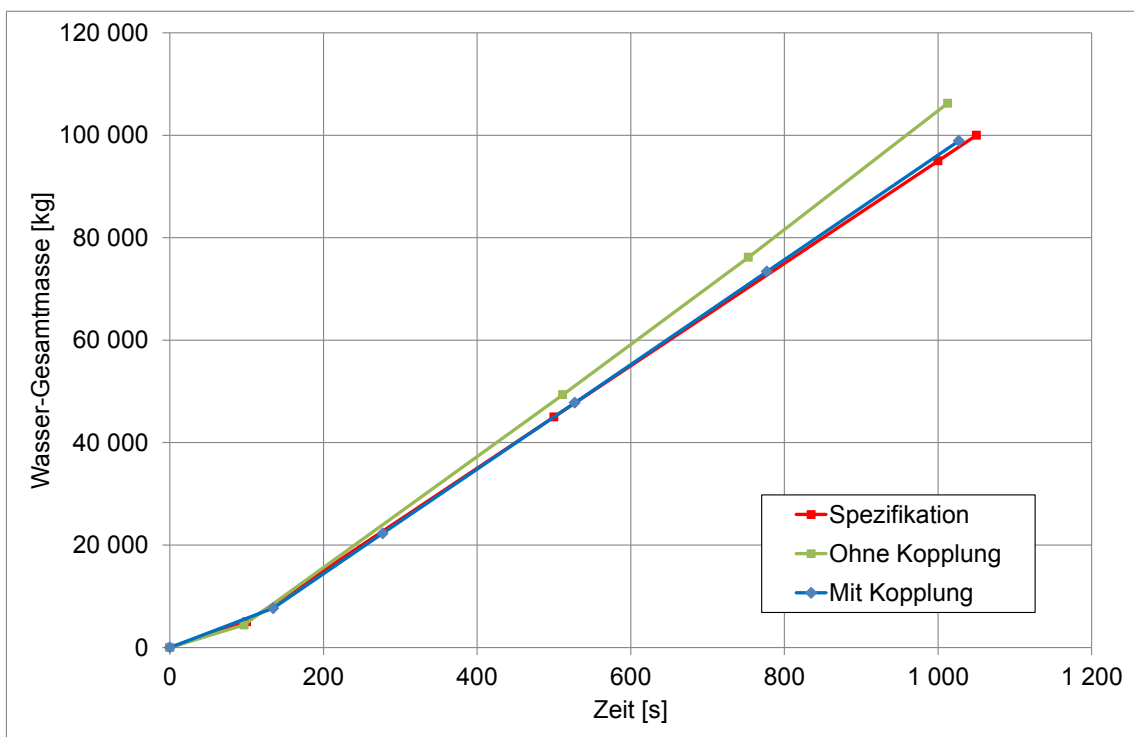
In Abb. 2.4 wird die integrale Wassermasse in der Simulation mit der spezifizierten Einspeisemenge verglichen. Hier sind zwei Rechnungsergebnisse aufgeführt. Eine Rechnung wurde ohne die Option „Volume Fraction Coupling“ in der Multiphase-Control durchgeführt, die andere Rechnung mit der genannten Option. Es zeigt sich, dass diese Kopplung notwendig ist, damit die berechnete Wassermasse mit der spezifizierten Einspeisemenge übereinstimmt. Die Verwendung der genannten Option in CFX ergab sich durch eine Diskussion mit ANSYS, dem Programmierer.



**Abb. 2.2** Auffüllvorgang der Testgeometrie



**Abb. 2.3** Darstellung der Wasseroberfläche als Iso-Fläche



**Abb. 2.4** Vergleich der integralen Wassermasse in der Simulation mit der spezifizierten Einspeisemenge

Als nächstes wurde eine Rechnung mit einem inhomogenen Mehrphasenmodell durchgeführt. Inhomogen bedeutet in diesem Fall, dass für die beiden vorhandenen Phasen Luft und Wasser jeweils ein eigenes Gleichungssystem gelöst wird. Dieses führt nur zu einer deutlichen Erhöhung der Rechenzeiten, die sich gegenüber dem homogenen Fall mehr als verdoppeln (siehe Tab. 2.2), bei gleichen inhaltlichen Ergebnissen. Aus diesem Grund wird für die weiteren Untersuchungen das homogene Modell verwendet.

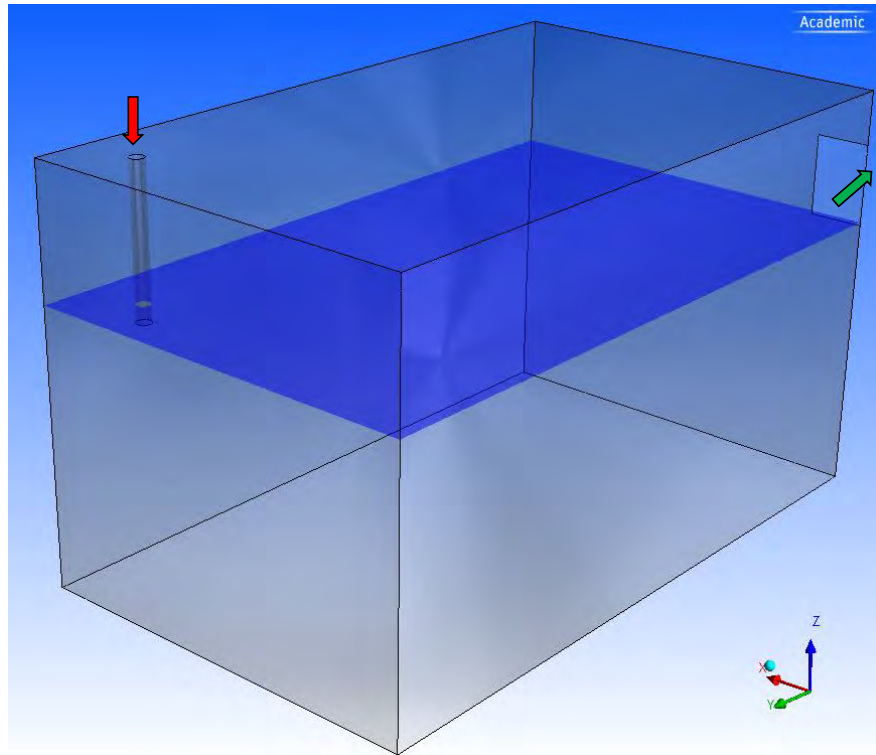
**Tab. 2.2** Rechenzeiten für unterschiedliche Modellvarianten

<b>Multiphase-Model</b>	<b>CPU-Zeit [Tage]</b>
Homogen	91
Inhomogen	191

### **2.3 Simulation der GES-Wanne**

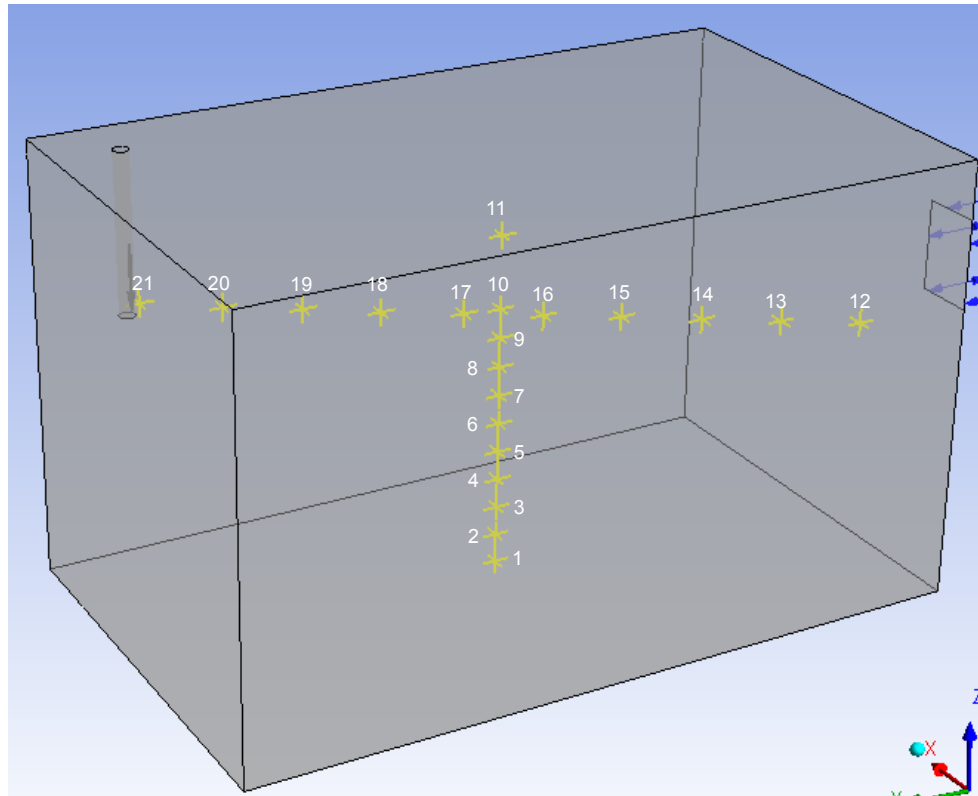
Als weiteres Testbeispiel soll ein Experiment zur thermischen Schichtung in einer Wasservorlage nachgerechnet werden, welches im Rahmen des CoPool-Projektes zur Validierung genutzt wurde /GES 10/, /ZEM 10/. Ziel dieser Arbeiten sind weitere Tests bzw. Validierungen der Mehrphasenmodelle, insbesondere in Hinblick auf die Simulation von thermischen Schichtungen im Containment-Sumpf.

In Abb. 2.5 ist die sogenannte GES-Wanne dargestellt; hierbei wurde nur der strömungstechnisch wichtige Teil modelliert. Es handelt sich um einen Stahlbehälter mit einer Länge von 2.5 m und einer Breite und Höhe von jeweils 1.5 m. In die Wanne wurde zunächst kaltes Wasser mit ca. 10 °C bis zu einer Höhe von 1.0 m eingefüllt. Die Wasseroberfläche ist in Abb. 2.5 blau dargestellt. Dann wird durch ein Einlassrohr (roter Pfeil) warmes Wasser mit ca. 63 °C in die Kaltwasservorlage eingebracht. Der Massenstrom für das Warmwasser beträgt 1 kg/s. Im Bild rechts dargestellt ist ein Überlauf, an dem das überschüssige Wasser wieder ablaufen kann (grüner Pfeil). Später wurde noch ein weiteres Experiment mit einer Prallplatte unterhalb des Einlasses durchgeführt, um den Impuls des eingespeisten Wassers zu bremsen. Als Validierungsexperiment für CFX wurde hier jedoch das Experiment ohne Prallplatte verwendet.



**Abb. 2.5** GES-Wanne mit Einlass (roter Pfeil) und Überlauf (grüner Pfeil)

In der GES-Wanne sind zahlreiche Temperaturmessstellen eingerichtet, anhand derer man den zeitlichen Verlauf der Temperaturen und auch das Schichtungsverhalten von kaltem und warmem Wasser messen und untersuchen kann. In Abb. 2.6 sind die Positionen und die Nummerierungen dieser Temperaturmessstellen in der Wanne eingezeichnet. Alle Messstellen bis auf Messstelle Nr. 11 befinden sich unterhalb der Wasseroberfläche. An Position Nr. 11 wird die Lufttemperatur gemessen.



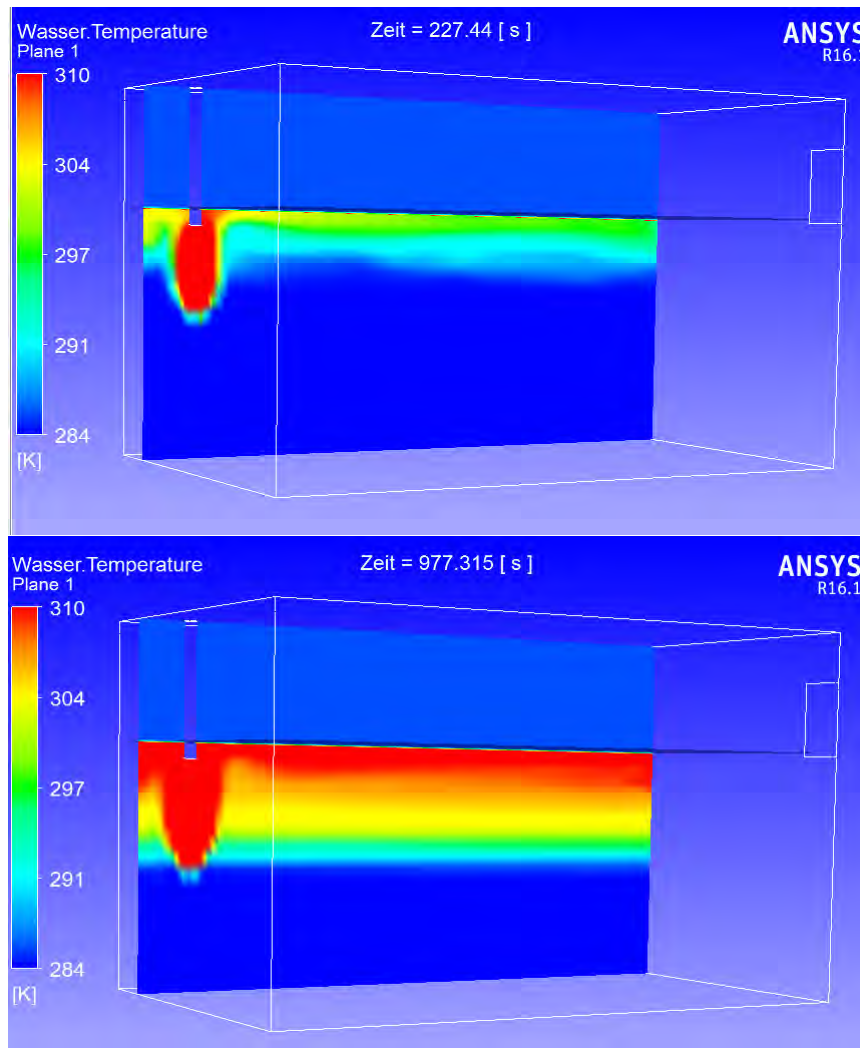
**Abb. 2.6** Position und Nummerierung der Temperaturmessstellen

Für die CFX-Simulation wurde wieder eine Mehrphasenströmung mit den zwei Komponenten Luft (gasförmig) und Wasser (flüssig) angenommen. Sowohl das Mehrphasenmodell, als auch der Wärmetransfer wurden homogen behandelt. Das Berechnungsgitter hatte eine Elementzahl von 471 366 (grob) bzw. 778 167 Elementen (fein). Es wurde insbesondere in der Nähe der Luft/Wasser-Grenzfläche verfeinert. Als Turbulenzmodell wurde das SST-Modell verwendet. Außerdem war es für die Berechnung wichtig, bei den Materialparametern des Wassers die Temperaturabhängigkeit der Dichte zu integrieren. Standardmäßig ist hier für „Water“ nur eine konstante Dichte angegeben. Weitere Berechnungsparameter finden sich in der Infobox Tab. 2.3.

**Tab. 2.3** Infobox GES-Wanne

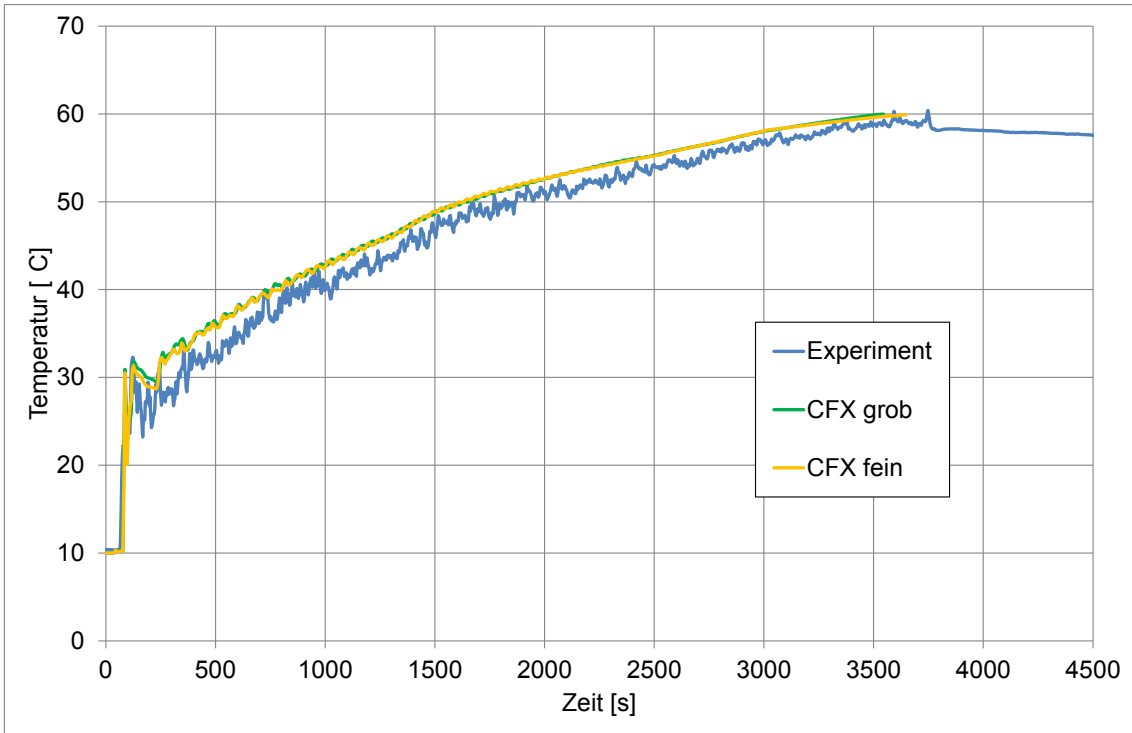
Experiment	GES-Wanne
Phänomene	Mehrphasenströmung, Temperaturschichtung
Elementzahl	471 366 und 778 167
Materialien	2 Phasen: Air ideal Gas (gasförmig), Water (flüssig)
Mehrphasenmodell	Homogen
Wärmetransfer	Homogen
Turbulenzmodell	SST
Fluid Pair Models	Keine Oberflächenspannung Kein „Interphase Transfer“ Kein „Mass Transfer“
Konvergenz	RMS < 1.0e-4
CFX-Version	16.1

In Abb. 2.7 sind die mit CFX berechnete Einspeisung von warmem Wasser und die Ausbreitung der höheren Temperaturen in der GES-Wanne für unterschiedliche Zeitpunkte dargestellt. Gut zu erkennen sind der warme Einspeisestrahle auf der linken Seite sowie die Herausbildung der Temperaturschichtung in der GES-Wanne. Dies entspricht dem erwarteten Verhalten. Der Überlauf befindet sich auf der rechten Seite. Ein quantitativer Vergleich der berechneten Temperaturen mit den gemessenen Werten wird im Folgenden diskutiert.

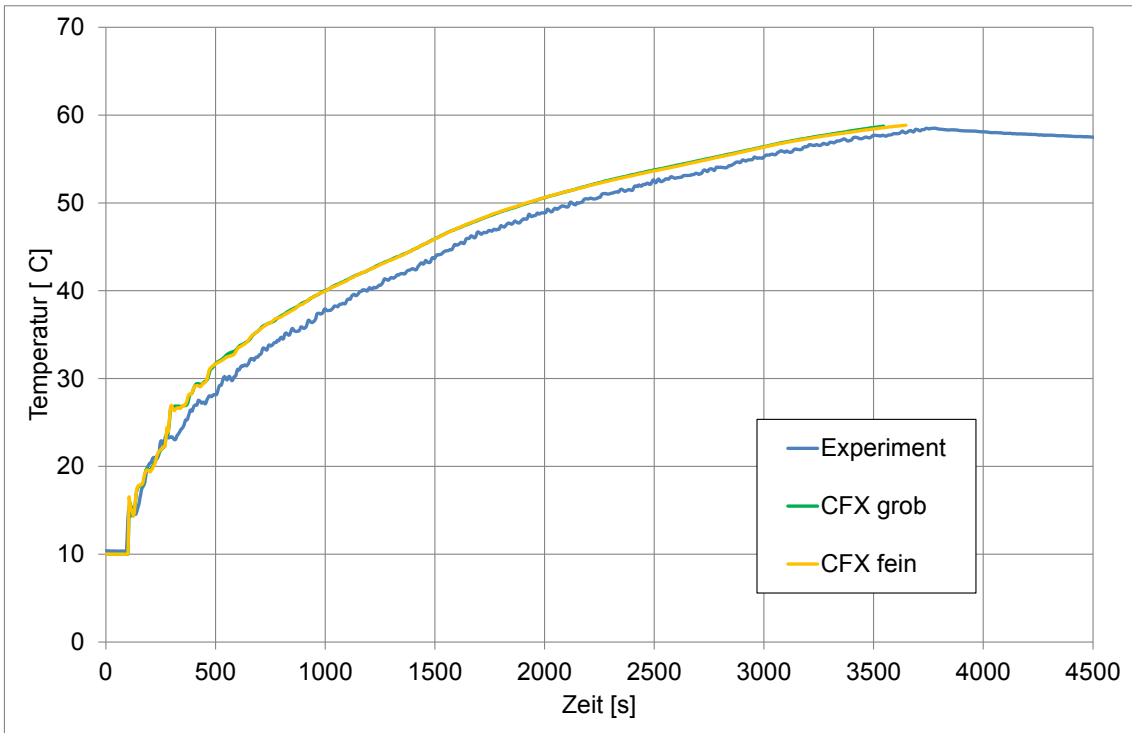


**Abb. 2.7** Einspeisung und Ausbreitung von warmem Wasser in der GES-Wanne (CFX-Simulation)

Abb. 2.8 zeigt den Temperaturverlauf an Messstelle 21, die sich nahe am Einlass befindet (siehe auch Abb. 2.6). Hier zeigt sich ein sehr ähnlicher Verlauf von simulierten und experimentellen Temperaturen. Die simulierten Temperaturen liegen dabei leicht oberhalb der experimentellen Werte. Dies gilt sowohl für die Rechnung mit dem groben Gitter, wie auch für die Rechnung mit dem feinen Gitter. Die Kurven der beiden Rechnungen sind fast deckungsgleich. Abb. 2.9 und Abb. 2.10 zeigen die Temperaturen an den Messstellen 10 und 12. Diese Messstellen 10 und 12 liegen beide etwas unterhalb der Wasseroberfläche (Höhe 0.95 m). Messstelle 10 liegt in der Mitte des Behälters und Messstelle 12 liegt nahe dem Auslass. Auch hier liegen die Temperaturen etwas zu hoch, insgesamt ist die Übereinstimmung mit dem Experiment aber sehr gut.

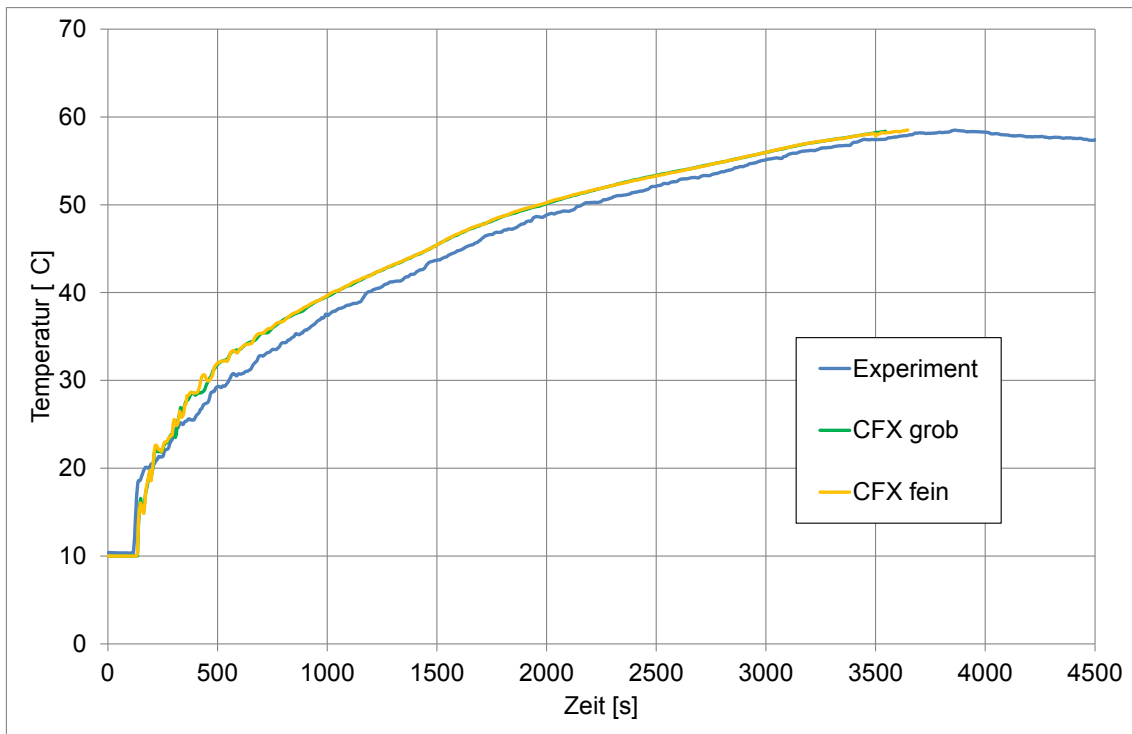


**Abb. 2.8** Temperaturverlauf an Messstelle 21 (nahe Einlass, Höhe: 0.95 m)



**Abb. 2.9** Temperaturverlauf an Messstelle 10 (Mitte oben, Höhe: 0.95 m)

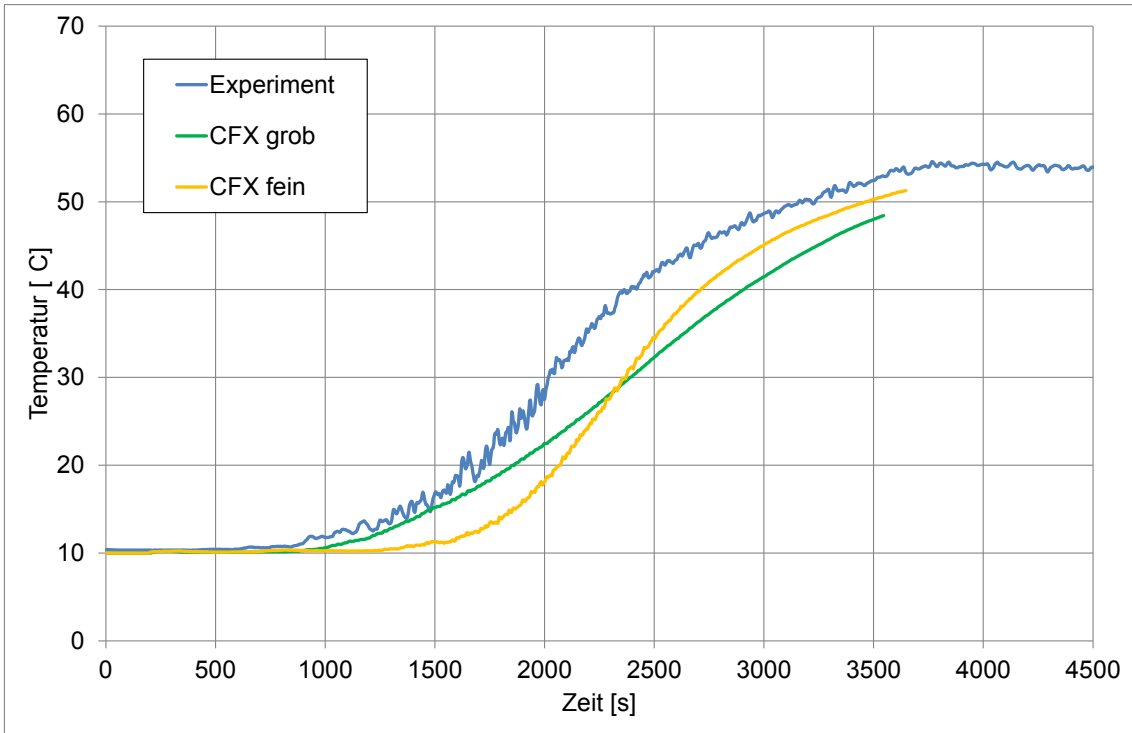




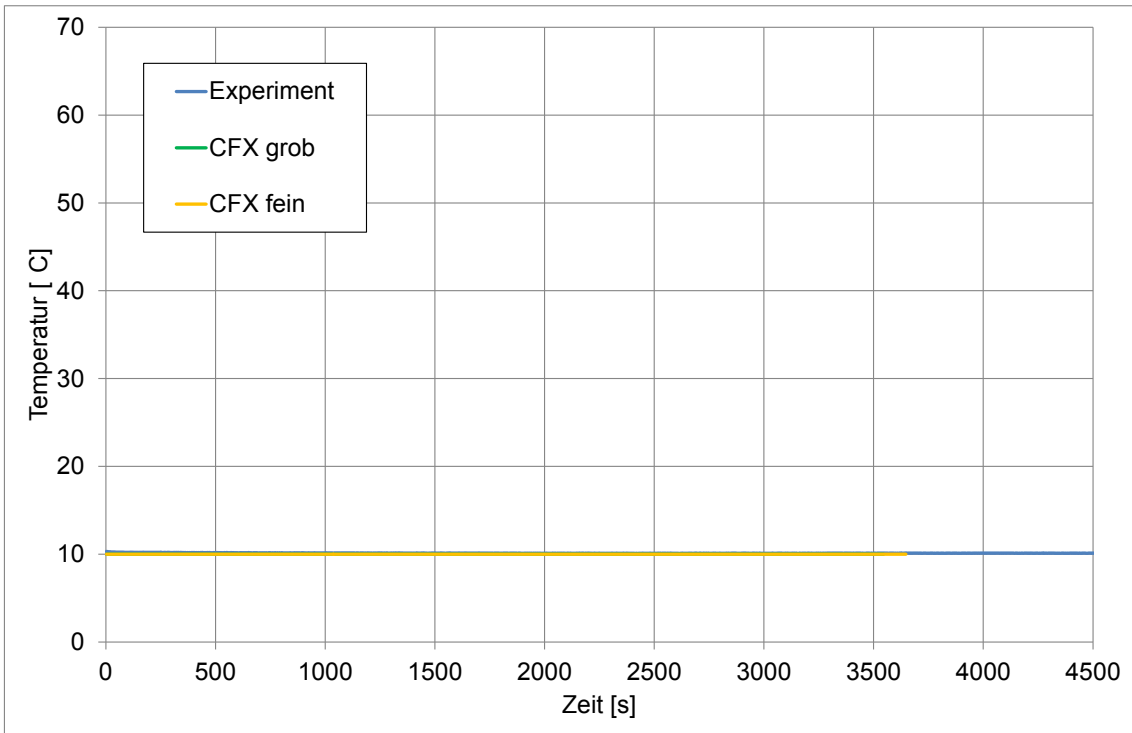
**Abb. 2.10** Temperaturverlauf an Messstelle 12 (nahe Auslass, Höhe: 0.95 m)

Nun sollen die Messstellen betrachtet werden, die in der Mitte des Behälters tiefer unten im Wasser liegen. Messstelle 6 liegt etwa in halber Wasserhöhe bei 0.55 m (siehe Abb. 2.11). Da diese Messstelle genau innerhalb des Grenzbereiches zwischen warmer und kalter Schicht liegt, ist hier der Temperaturverlauf am schwierigsten zu simulieren. Hier zeigt sich in beiden Simulationen ein etwas späterer Temperaturanstieg als im Experiment. Die Rechnung mit dem feinen Gitter zeigt erst etwas niedrigere Temperaturen als die Rechnung mit grobem Gitter. Ab etwa  $t = 2500$  s liegt sie dann aber näher am Experiment. Abgesehen von der Verzögerung wird der Temperaturanstieg von beiden Rechnungen jedoch qualitativ gut wiedergegeben. Gerade an einer solchen Stelle zeigt sich jedoch, dass noch keine Gitterunabhängigkeit erreicht wurde. Sinnvoll wäre, eine weitere Gitterverfeinerung gerade in dieser Zone durchzuführen.

Die Messstelle 1 liegt noch tiefer, fast am Grund der GES-Wanne bei 0.05 m. Im Experiment findet hier kein Temperaturanstieg statt (siehe Abb. 2.12). In der Simulation wird das Verhalten genauso wiedergegeben.

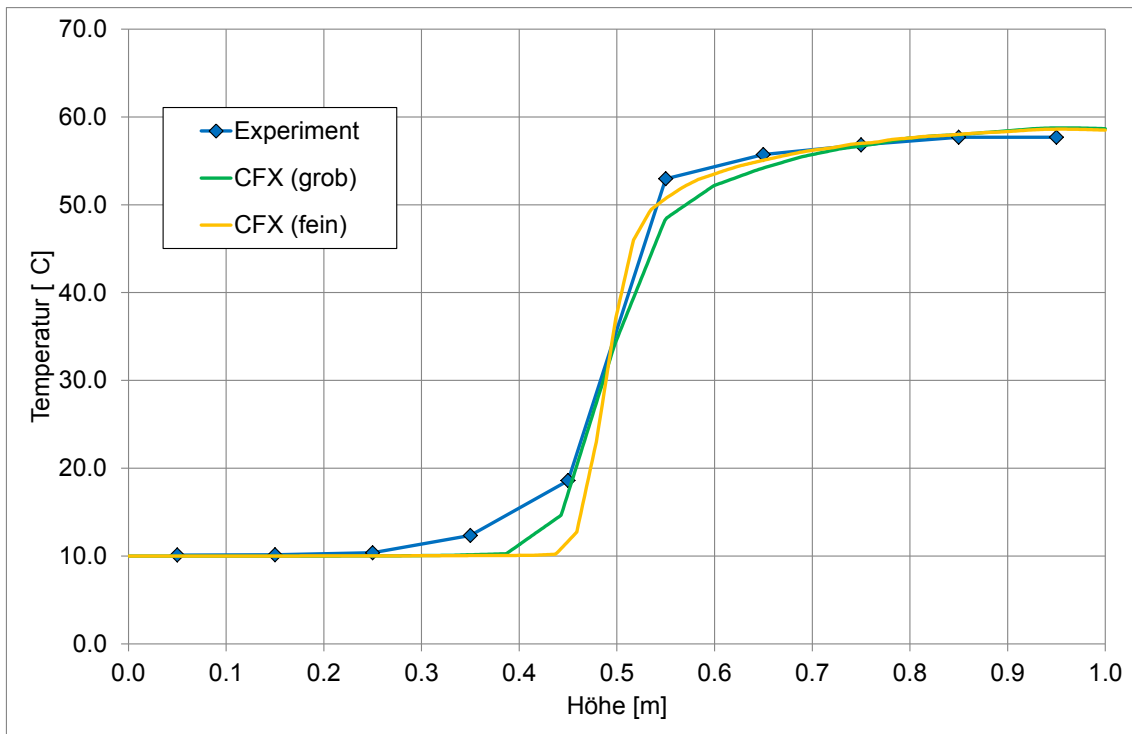


**Abb. 2.11** Temperaturverlauf an Messstelle 6 (Behältermitte, Höhe: 0.55 m)



**Abb. 2.12** Temperaturverlauf an Messstelle 1 (Behältermitte, Höhe: 0.05 m)

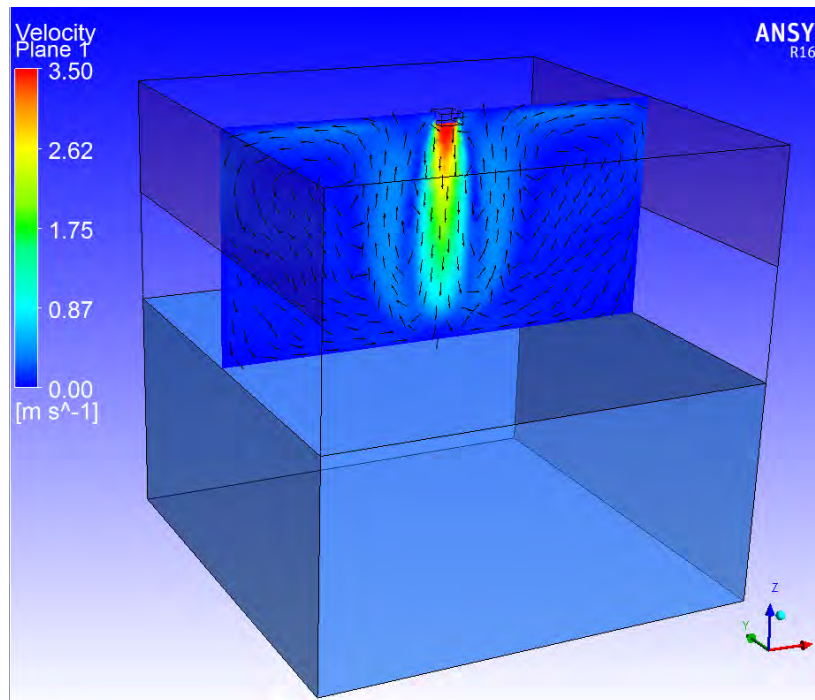
Abb. 2.13 zeigt das vertikale Temperaturprofil gegen Ende der Warmwasser-Einspeisung etwa bei  $t = 3550$  s. Hier zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und CFX-Rechnung.



**Abb. 2.13** CFX-Validierung: Vertikales Temperaturprofil bei  $t = 3550$  s (Experiment ohne Prallplatte)

## 2.4 Testbeispiel zur Kombination von Sumpf und Volumenkondensation

Um die Kombination von Sumpf und Volumenkondensationsmodell auszuprobieren, wurde ein einfaches Testbeispiel entwickelt, welches in Abb. 2.14 dargestellt ist. Im oberen Teil des Testvolumens (1 m x 1 m x 1 m) strömt Dampf von oben nach unten in das Volumen ein (6.0 g/s). Der Dampfstrahl berührt die Oberfläche des Sumpfes, der die gesamte untere Hälfte des Testvolumens einnimmt. Nach der Wechselwirkung und Umlenkung des Dampfstrahls mit bzw. an der Sumpfoberfläche bewegt sich der Dampf wieder nach oben, wo er durch zwei seitlich gelegene Auslässe (hier schwach violett dargestellt) das Volumen verlassen kann.



**Abb. 2.14** Testbeispiel zur Kombination von Sumpf und Volumenkondensationsmodell

Mit diesem Beispiel wurden drei Variationen gerechnet:

**Solid Block:** Hierbei wird der Sumpf durch einen Festkörper mit der Dichte und den thermischen Eigenschaften von Wasser simuliert.

**Immersed Solid:** Eine spezielle Option in CFX, bei der das (Gas-)Volumen durch einen Festkörper überlagert wird. In den überlagerten Bereichen bekommt das Gas dann eine entsprechende Impulsquelle (z. B. wird der Dampfstrahl abgebremst). Ein Wärmeaustausch mit dem überlagerten Festkörper ist allerdings nicht möglich.

**Multiphase:** Hier wurde eine „echte“ Mehrphasenrechnung mit Wasser als Sumpfphase gerechnet.

In Abb. 2.15 werden die Ergebnisse dieser drei unterschiedlichen Sumpfmodellierungen miteinander verglichen.

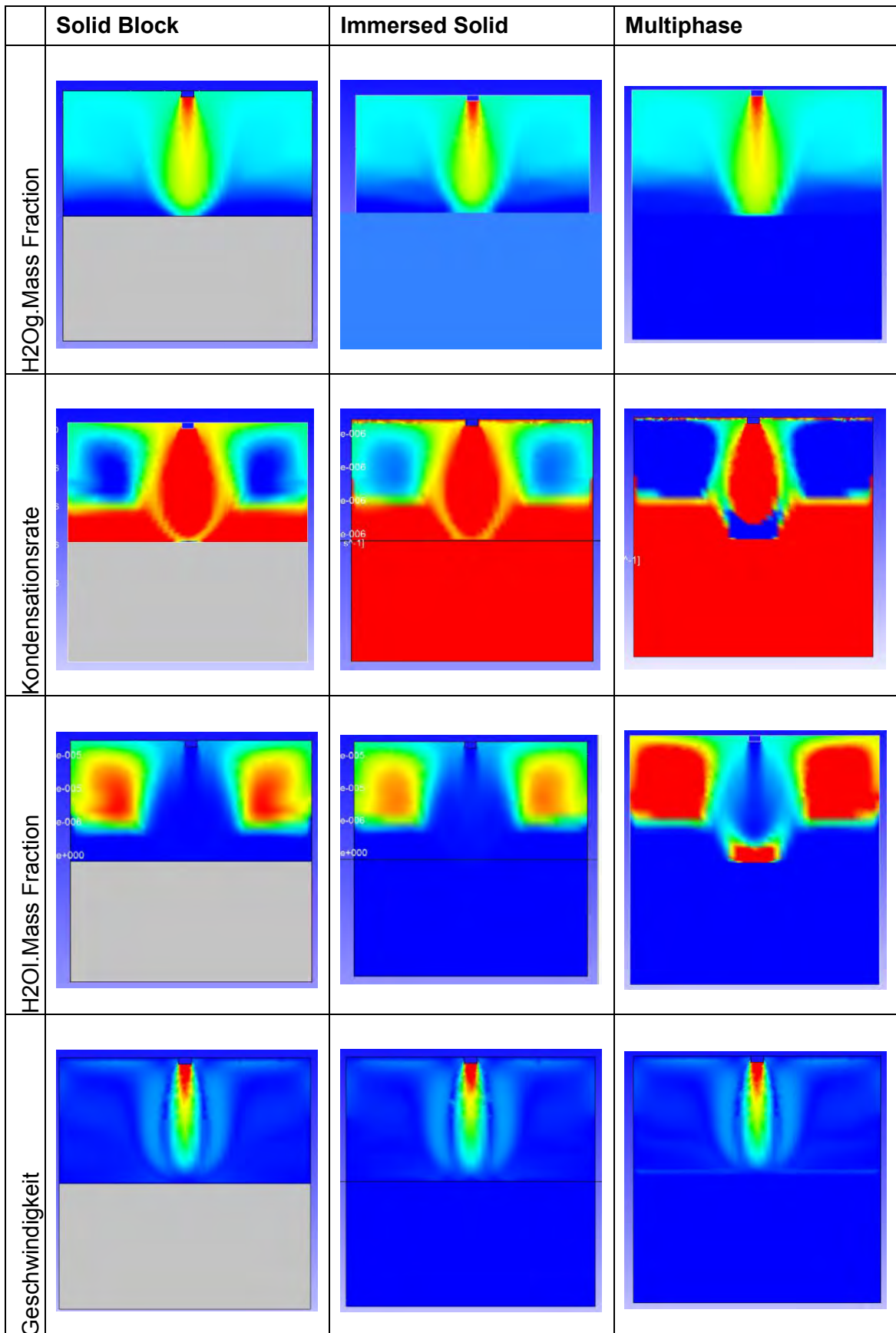
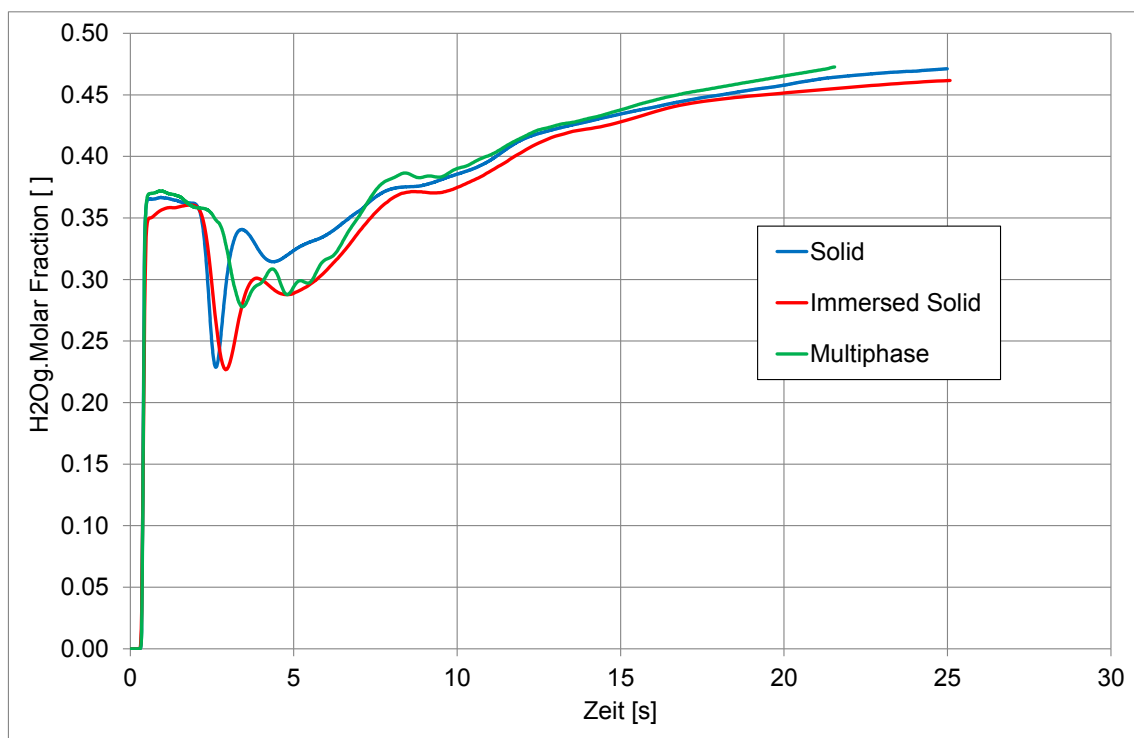


Abb. 2.15 Vergleich der unterschiedlichen Sumpfm modellierungen (t = 20 s)

Alle drei Modellierungen zeigen eine ähnliche Verteilung des Dampfes im freien Volumen ( $H_2O_g$  Mass Fraction, siehe Abb. 2.15 oben). Betrachtet man die Kondensationsraten in Abb. 2.15 (Mitte), so fällt auf, dass sich die Raten bei der Solid-Rechnung und bei der Immersed-Solid-Rechnung ähneln, während bei der Multiphase-Rechnung verhältnismäßig höhere Kondensationsraten auftreten (hier bedeutet die Farbe blau eine höhere Rate). Der genaue Grund für diese höhere Kondensationsrate bei der Multiphase-Rechnung ist allerdings nicht klar. Entsprechend sieht man bei den durch die Kondensation gebildeten Nebeltröpfchen die höchsten Konzentrationen in der Multiphase-Rechnung ( $H_2O_l$  Mass Fraction, Abb. 2.15 unten). Eine direkte Kondensation an der Wasseroberfläche findet aber nur bei der Rechnung mit dem Solid Block und der Multiphase-Rechnung statt.

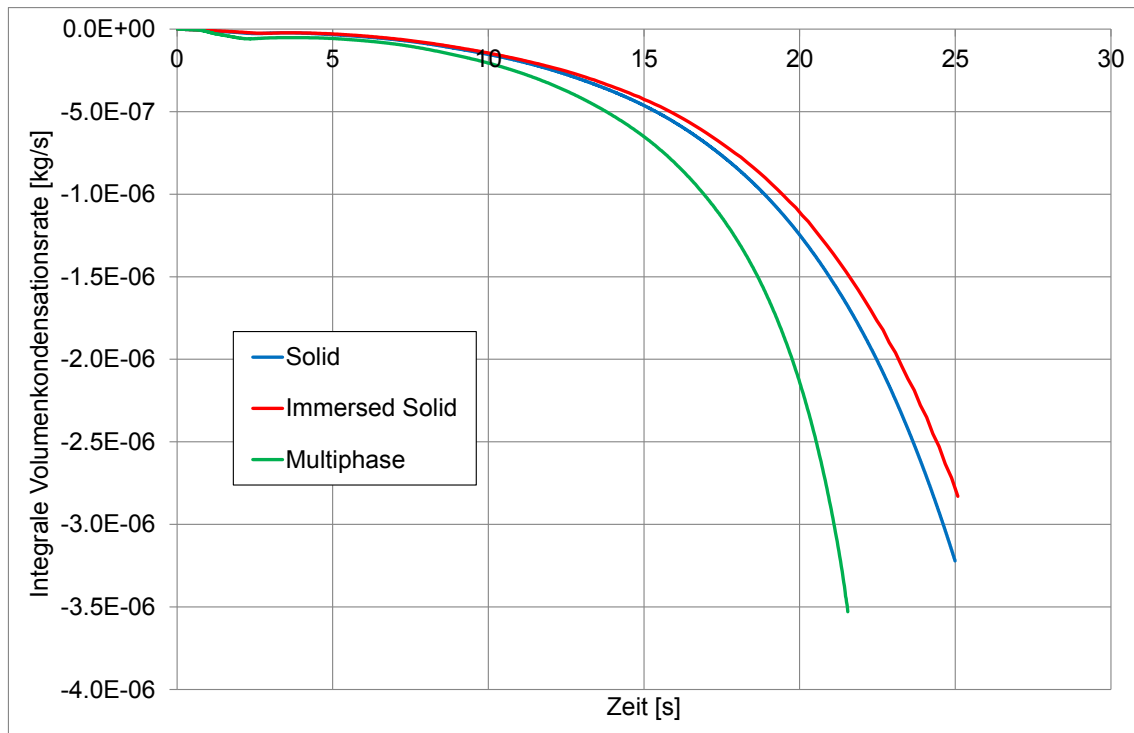
Ein vergleichbares Bild zeigt sich auch bei Betrachtung der Monitorpunkte. In Abb. 2.16 ist die Dampfkonzentration an einem Monitorpunkt kurz über der Sumpfoberfläche dargestellt. Diese ist für die drei Berechnungsarten relativ ähnlich.



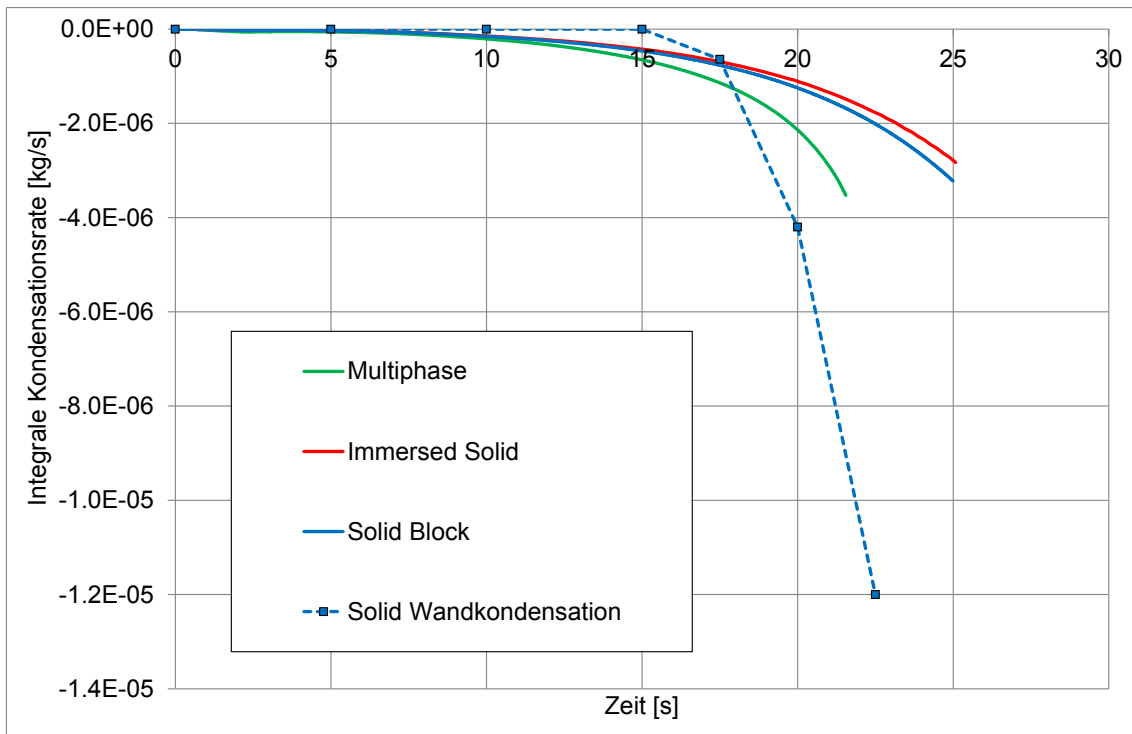
**Abb. 2.16** Dampfkonzentration kurz über der Sumpfoberfläche

Betrachtet man hingegen die integrale Volumenkondensationsrate in Abb. 2.17, so sieht man eine deutliche Erhöhung dieser Rate gerade bei der Multiphase-Rechnung. Verwendet man bei der Solid-Block-Rechnung zusätzlich die Wandkondensation (ANSYS-Modell) an der Wasseroberfläche, so zeigt sich hier zusätzlich noch eine rela-

ktiv hohe Wandkondensation (siehe Abb. 2.18), die teilweise sogar oberhalb der Kondensationsrate bei der Multiphase-Rechnung liegt. Die Kondensation an der Sumpfoberfläche kann also entweder in einer Multiphase-Rechnung durch die oberflächen- nahe Volumen- kondensation oder in einer Solid-Block-Rechnung durch die Wandkondensation am Solid Block berechnet werden. In der Immersed-Solid-Rechnung ist eine Kondensation an der Sumpfoberfläche nicht berechenbar.



**Abb. 2.17** Integrale Volumen- kondensationsrate

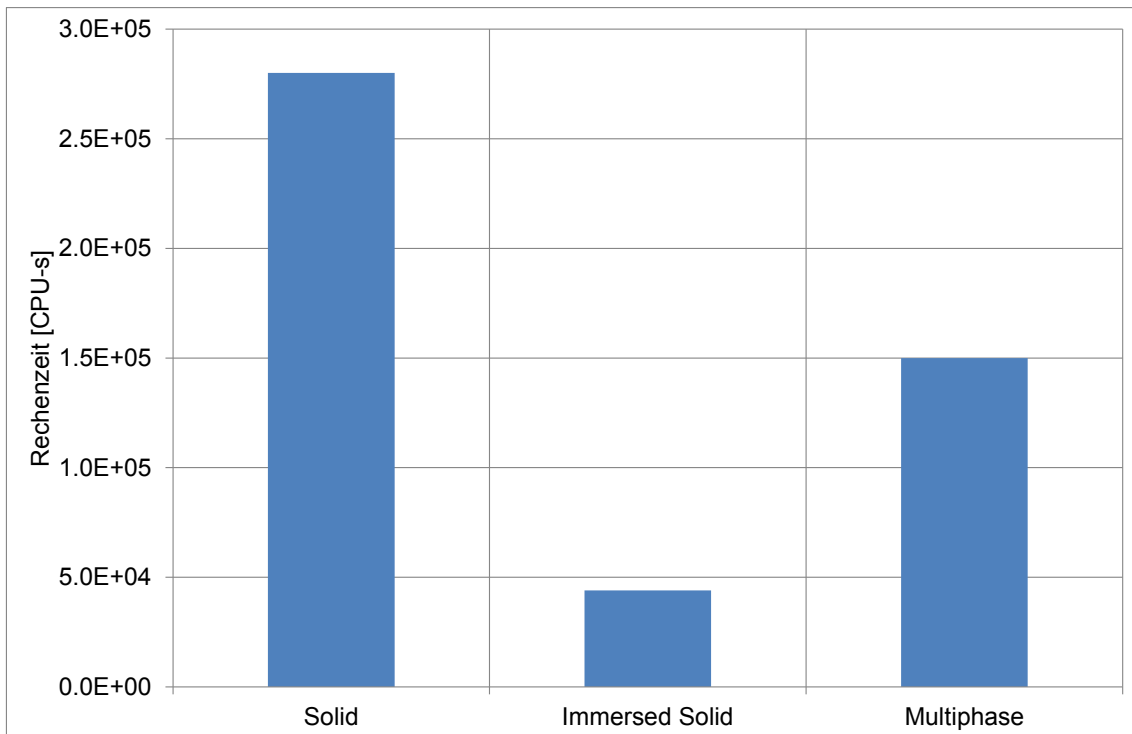


**Abb. 2.18** Einschalten der Wandkondensation beim Solid-Block-Modell

Betrachtet man die Rechenzeiten (Abb. 2.19), so zeigt sich die höchste Rechenzeit für die Solid-Rechnung und die niedrigste Rechenzeit für die Immersed-Solid-Rechnung. Diese Reihenfolge erstaunt etwas, insbesondere hätte man eine höhere Rechenzeit für die Multiphase-Rechnung erwartet, da hier mehr Gleichungen gelöst werden müssen. Ob diese Verteilung der Rechenzeiten typisch ist oder an einer Besonderheit dieses Testbeispiels liegt, ist nicht klar.

Wichtig zu erwähnen ist weiterhin, dass die Solid-Block-Rechnung die höchste Berechnungs-Stabilität aufwies. Sowohl bei der Immersed-Solid-Rechnung als auch bei der Multiphase-Rechnung kam es immer wieder zu Problemen und Abstürzen. Die Multiphase-Rechnung ließ sich nicht parallelisieren und stürzte spätestens bei 22 s ab. Auch andere Multiphase- und Immersed-Solid-Rechnungen zeigten immer wieder Instabilitäten. Dieser Aspekt der Stabilität kann bei der praktischen Arbeit wichtig für die Modellwahl sein, da hier die Stabilität einer Rechnung einen hohen Stellenwert hat.



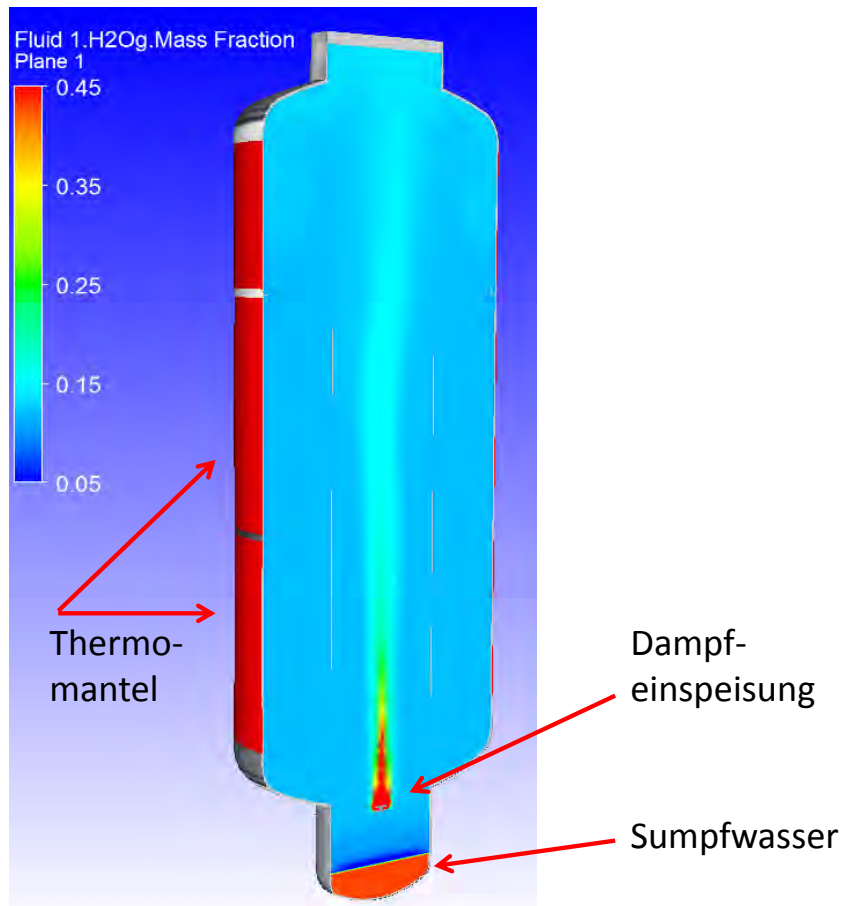


**Abb. 2.19** Vergleich der Rechenzeiten für 20 Sekunden Problemzeit

## 2.5 Nachrechnung des THAI-Versuchs TH-6

### 2.5.1 Experimenteller Aufbau

Zur weiteren Erprobung der Sumpfmmodellierung wurde das THAI-Experiment TH-6 nachgerechnet. In Abb. 2.20 ist das Experiment TH-6 dargestellt. Die Thermomäntel wurden zum Vorheizen des THAI-Behälters auf eine Temperatur von ca. 60 °C genutzt. Sie wurden aber mit Beginn der Dampfeinspeisung abgeschaltet. Die Dampfeinspeisestelle befand sich im unteren Bereich des THAI-Behälters, hier wurde eine Dampfmenge von ca. 36 g/s mit einer ansteigenden Temperatur (von 100 bis 124 °C) eingespeist. Im unteren Bereich befindet sich der Sumpf, dessen Füllstand in diesem Experiment beobachtet wurde. Durch Kondensation im THAI-Behälter stieg der Füllstand des Sumpfes innerhalb von etwa 3.5 Stunden um etwa 20 cm an. Dies entspricht einer Kondensatmenge von etwa 290 Litern. Hierbei handelt es sich hauptsächlich um Kondensat, welches an der Decke und an den Außenseiten des Behälters entstand. Weiteres Kondensat, das am Innenzylinder entstand, wurde in einer Kondensatrinne aufgefangen und aus dem THAI-Behälter abgeleitet. Weitere experimentelle Details finden sich im THAI-Abschlussbericht zum TH-6 Experiment (/KAN 03/).



**Abb. 2.20** Schnittdarstellung des Experimentes TH-6

### 2.5.2 Modellierung mit CFX

In Tab. 2.4 sind die verwendeten Modelle und numerischen Parameter dargestellt. Für die Wandkondensation wurde das ANSYS-Modell verwendet, während für die Volumenkondensation ein modifiziertes IKE-Modell verwendet wurde (siehe Kapitel 0, AP1.3). Die Diffusionskoeffizienten wurden mit einer Korrelation nach Fuller bestimmt und es wurde das SST-Turbulenzmodell verwendet. Es wurden 2 Modellierungsansätze für den Containmentsumpf getestet:

- **Solid:** Der Sumpf wurde hierbei durch einen Solid Block dargestellt. Dieses Sumpf-Solid hat die Dichte und Wärmeleitungsigenschaften von Wasser bekommen. Bei diesem vereinfachten Modell wurde der Füllstand des Sumpfes konstant gelassen, was dem experimentellen Ablauf nicht vollumfänglich Rechnung trägt.
- **Multiphase:** Es wird eine Multiphase-Simulation durchgeführt. Die erste Phase ist die Gasphase, die aus mehreren Komponenten besteht. Neben den Gasen

Luft ( $X_{\text{air}}$ ) und Wasserdampf ( $X_{\text{H}_2\text{Og}}$ ) enthält diese Phase auch die Wassertröpfchen ( $X_{\text{H}_2\text{Ol}}$ ). Das Absinken der Tröpfchen wird mittels Algebraic-Slip-Modell simuliert. Die zweite Phase ist das Sumpfwasser. Für jede Phase werden Momentum- und Energieerhaltungsgleichungen gelöst (inhomogenes Modell). Für die Grenzfläche des Wasserpools zum Gasraum wird die „Free-Surface“-Option verwendet. Weiterhin wird an der Sumpfoberfläche eine Senke für die herabfallenden Wassertröpfchen eingefügt.

In Abb. 2.22 sind die unterschiedlichen Modellierungstypen dargestellt. Im Zwischenbericht von RS1526 wurden die Simulationen detailliert vorgestellt /SCH 16/. Bei der dort vorgestellten Multiphase-Simulation gab es noch erhebliche Probleme (sehr langsam, Konvergenz- und Stabilitätsprobleme, Fehler bei dem Sumpffüllstand etc.). Bei den anschließenden Arbeiten wurden bei der Multiphase-Simulation oben genannte Modelle als geeignet identifiziert. Zudem wurden einige kleinere Änderungen im Volumenkonversionsmodell (Multiphase-Version) vorgenommen, um die numerische Stabilität zu erhöhen. Insbesondere wurde Volumenkonensation/Verdampfung im Fall eines sehr niedrigen Gasanteils unterbunden. Weiterhin wurde die Gitterqualität insbesondere im Bereich der Einspeisung und des Sumpfes verbessert.

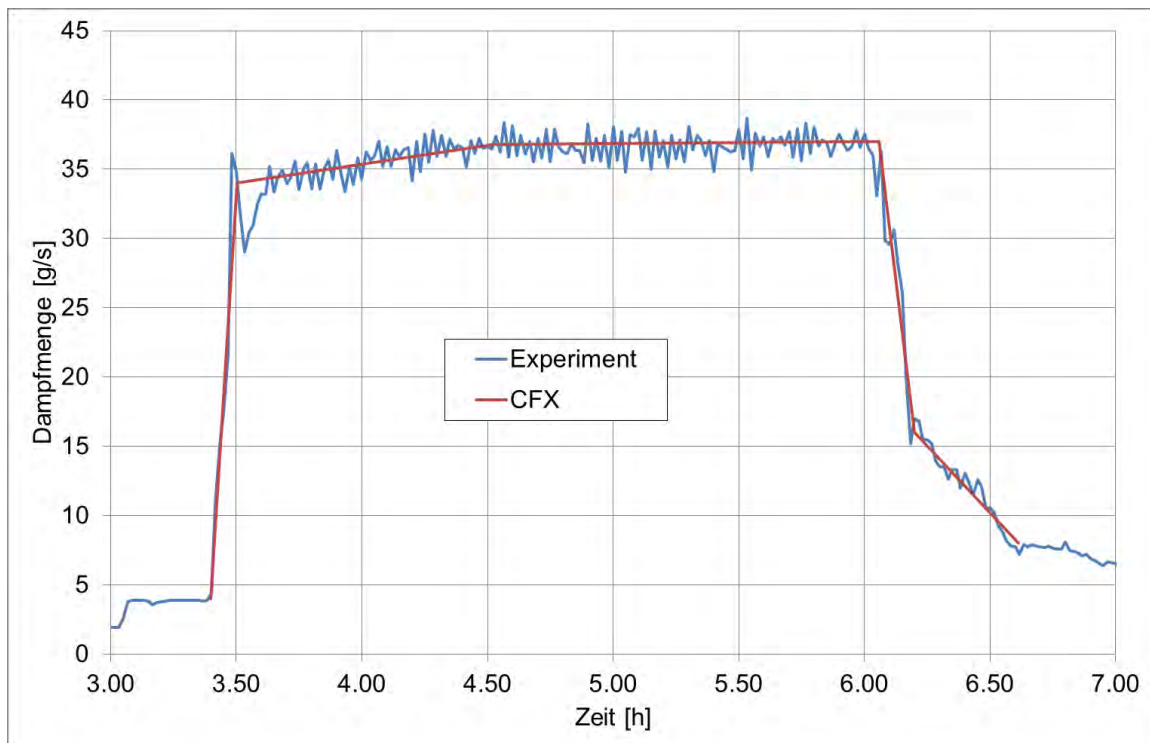
**Tab. 2.4** Infobox TH-6 Experiment

Experiment	THAI-Experiment TH-6
Phänomene	Kondensation, Sumpfbildung
Elementzahl	1 416 880 Hexagons
Wandkondensation	ANSYS-Modell
Volumenkondensation	Modifiziertes IKE-Modell
Diffusionskoeffizient	Nach Fuller
Turbulenzmodell	SST
Konvergenz	RMS < 1.0e-4
CFX-Version	17.0
Wärmestrahlung	Discrete Transfer, Gray, 32 Strahlen

Um eine möglichst gute Vergleichbarkeit der unterschiedlichen Modellierungsarten hinsichtlich der Simulationsergebnisse aber auch der benötigten Rechenzeit zu gewährleisten, wurde die Simulation mit der Sumpfmmodellierung als „Solid Block“ mit dem verbesserten Gitter wiederholt. Da die Sumpfmmodellierung als „Immersed Solid“ aufgrund der Modellschwächen als nicht geeignet erscheint, wurde diese Rechnung nicht mehr

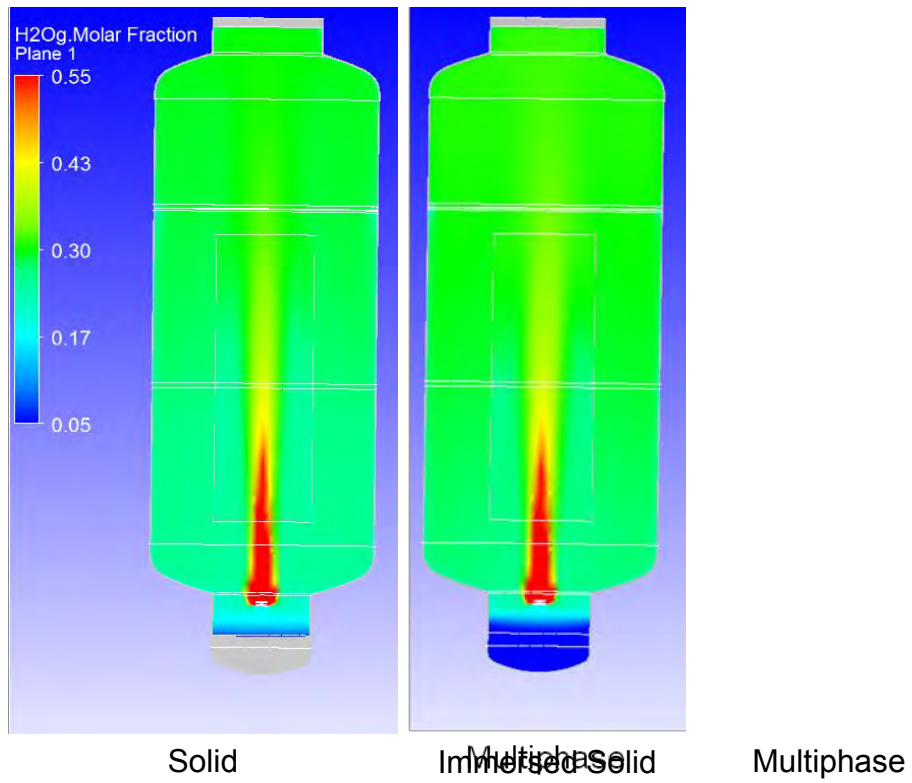
wiederholt. Im Folgenden wird nur noch auf die beiden Simulationen („Solid“, „Multiphase“) mit den neuesten Modellen und dem verbesserten Gitter eingegangen.

In den Simulationen wird die Phase des Experiments nachgerechnet, in der Dampf eingespeist wurde (ab  $t_0 = 3.43$  h). Die Initialisierung erfolgt anhand der experimentellen Messwerte. Der Massenstrom der Dampfeinspeisung wurde in der Simulation geglättet (Abb. 2.21).

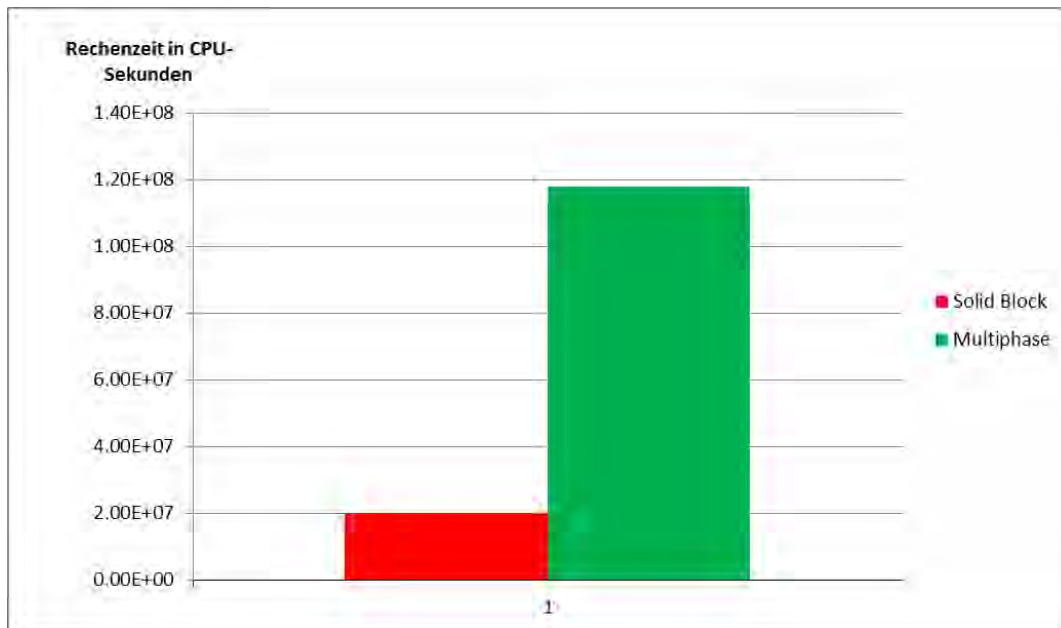


**Abb. 2.21** Dampfeinspeisung in Experiment und Simulation

In Abb. 2.23 werden die Rechenzeiten miteinander verglichen. Es zeigt sich, dass die Solid-Rechnung in etwa um einen Faktor 6 schneller ist als die Multiphase-Rechnung. Ursache hierfür ist neben der größeren Anzahl an Erhaltungsgleichungen, die bei der Multiphase-Rechnung gelöst werden (17 gegenüber 11), auch der etwas kleinere mittlere Zeitschritt (0.097 s gegenüber 0.19 s).



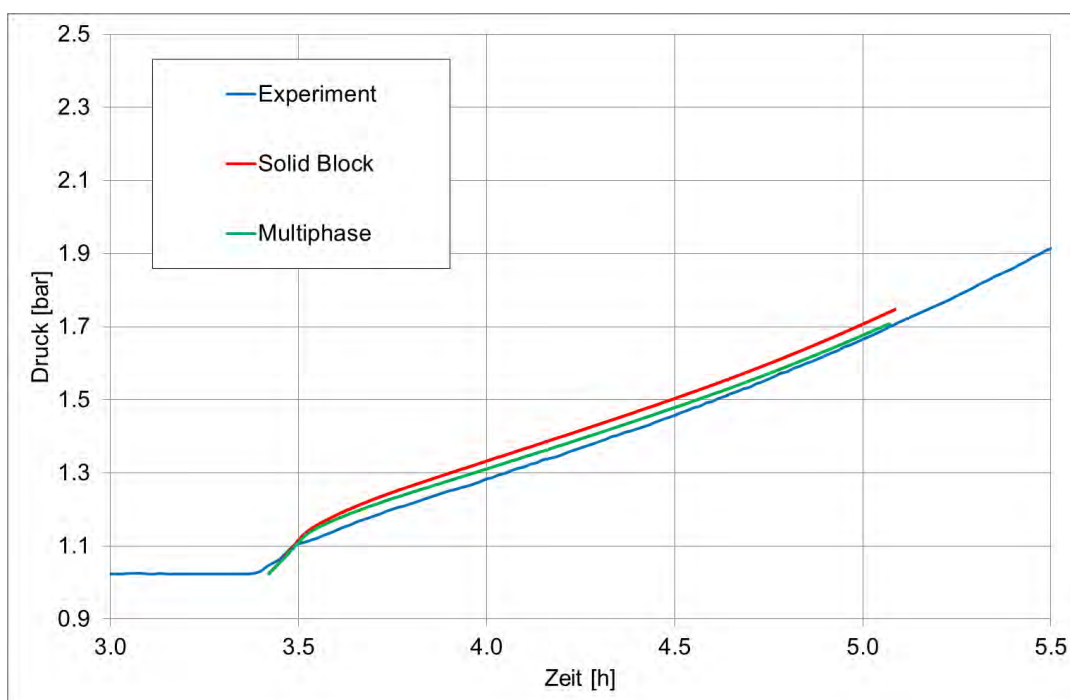
**Abb. 2.22** Vergleich der unterschiedlichen Sumpfmmodellierungen



**Abb. 2.23** Rechenzeiten für 50 s Problemzeit bei unterschiedlicher Sumpfmmodellierung

### 2.5.3 Vergleich von Experiment und Simulation

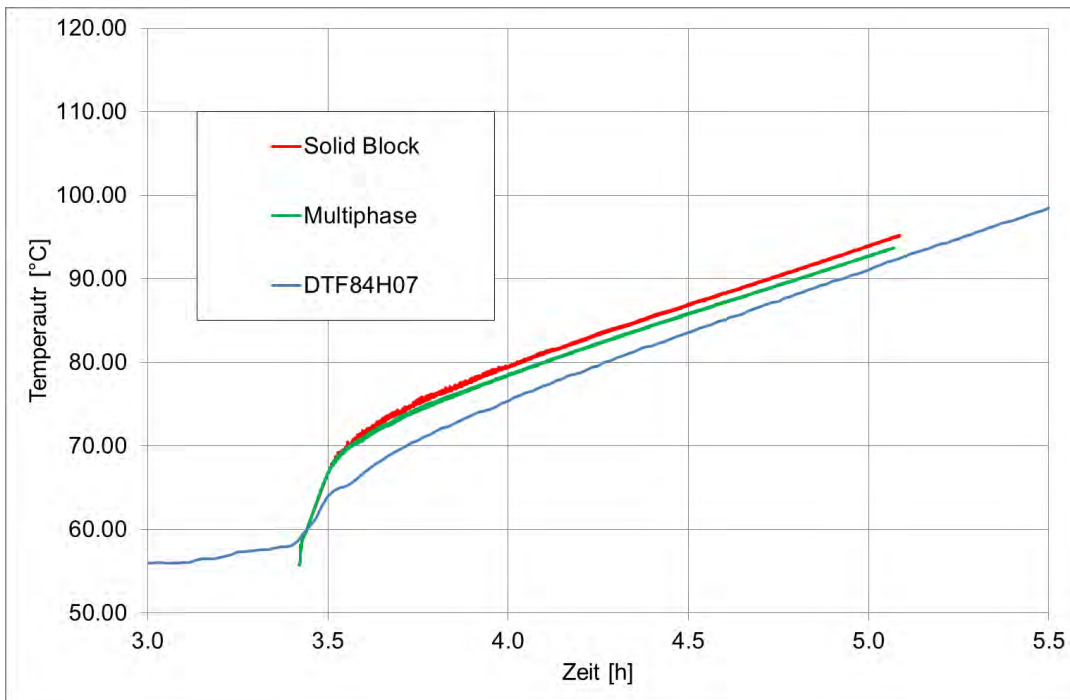
In Abb. 2.24 wird der berechnete Druckverlauf mit den experimentellen Daten verglichen. Beide Simulationen stimmen gut mit dem Experiment überein. Die größte Abweichung zwischen Experiment und Simulationen tritt zu Beginn der Simulation auf ( $dP \sim 0.05$  bar). Der Druck steigt in beiden Simulationen in der Anfangsphase etwas stärker als im Experiment an. Der Druckanstieg nach  $t = 3.5$  h ist in beiden Simulationen sehr ähnlich. Bei der Multiphase-Simulation ist er etwas schwächer. Dadurch verringert sich die Abweichung zwischen Simulation und Experiment im Verlauf der Zeit. Es zeigt sich, dass die Verdrängung des Luftvolumens durch den Sumpf wenig Einfluss auf den Druckverlauf hat. Vielmehr hängt der Druckverlauf im Wesentlichen von der Wandkondensation und der Wärmeabgabe durch die Behälterwände nach außen ab. Da aufgrund der notwendigen Interpolationen der Startbedingungen die Temperatur nicht exakt mit dem Experiment übereinstimmt, ist die stärkere Abweichung zu Beginn der Simulation verständlich.



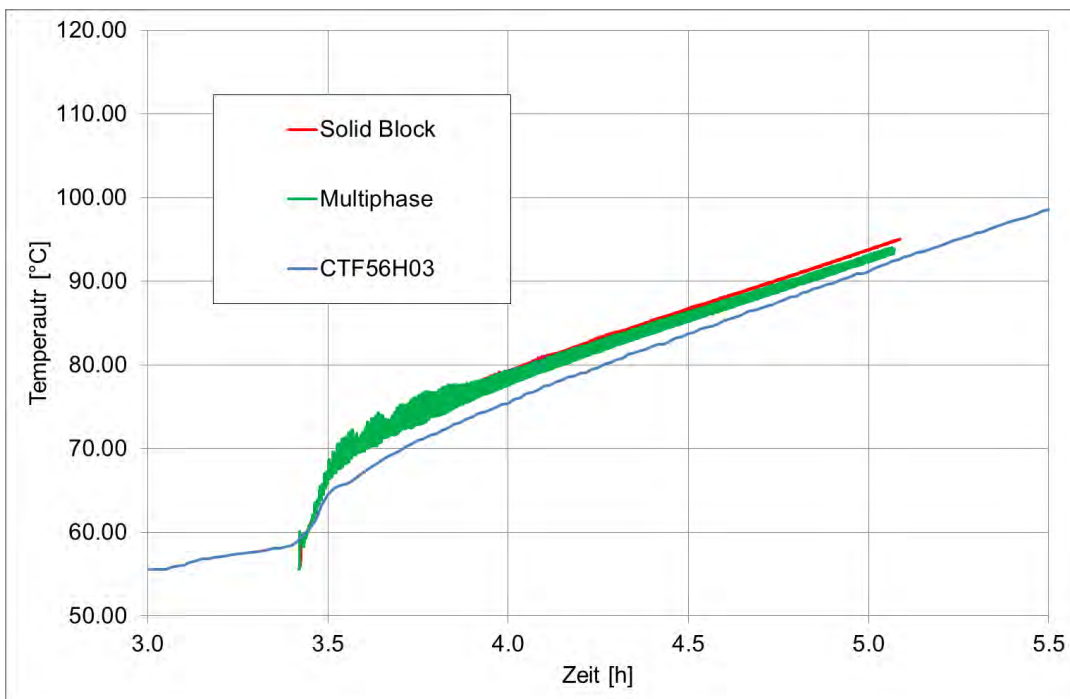
**Abb. 2.24** Druckverlauf beim Experiment TH-6

In Abb. 2.25 bis Abb. 2.28 ist der Temperaturverlauf in unterschiedlichen Höhen dargestellt. Generell passen hier die simulierten Werte gut zu den experimentellen Daten, wobei die Temperaturen im oberen Bereich ( $H = 8.4$  m bzw.  $H = 5.6$  m) etwas zu hoch sind. Im unteren Bereich ist die Übereinstimmung mit dem Experiment sehr gut. Bei allen Messstellen ist der Temperaturanstieg bei der Multiphase-Simulation etwas schwächer

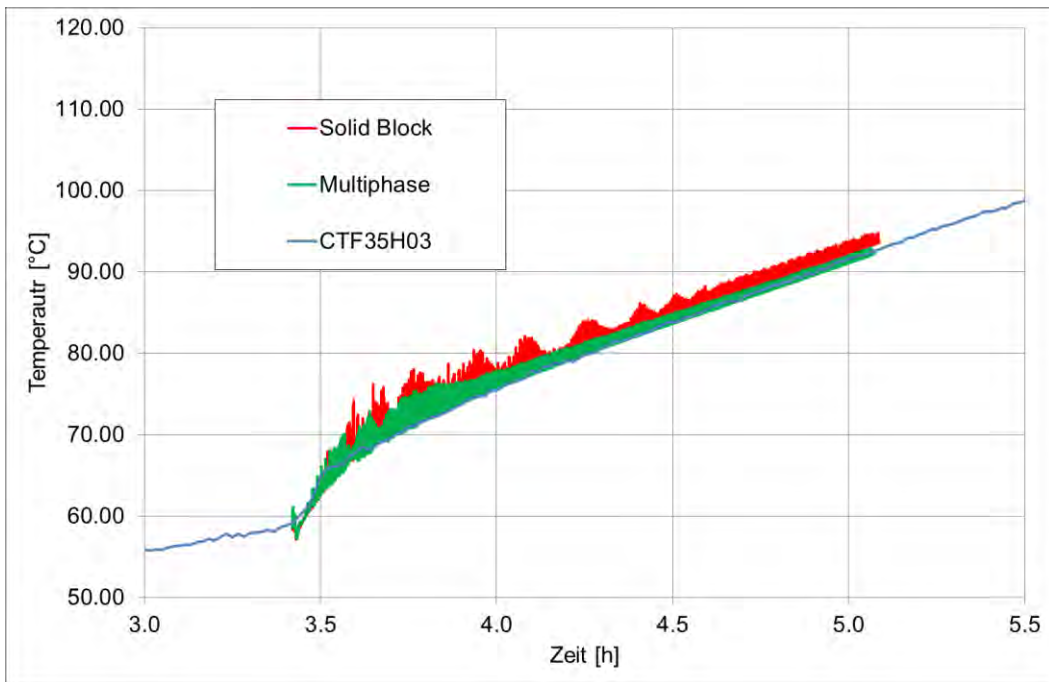
cher. Der Unterschied zur Simulation mit der Solid-Block-Modellierung beträgt nach knapp 2 h maximal 1 K.



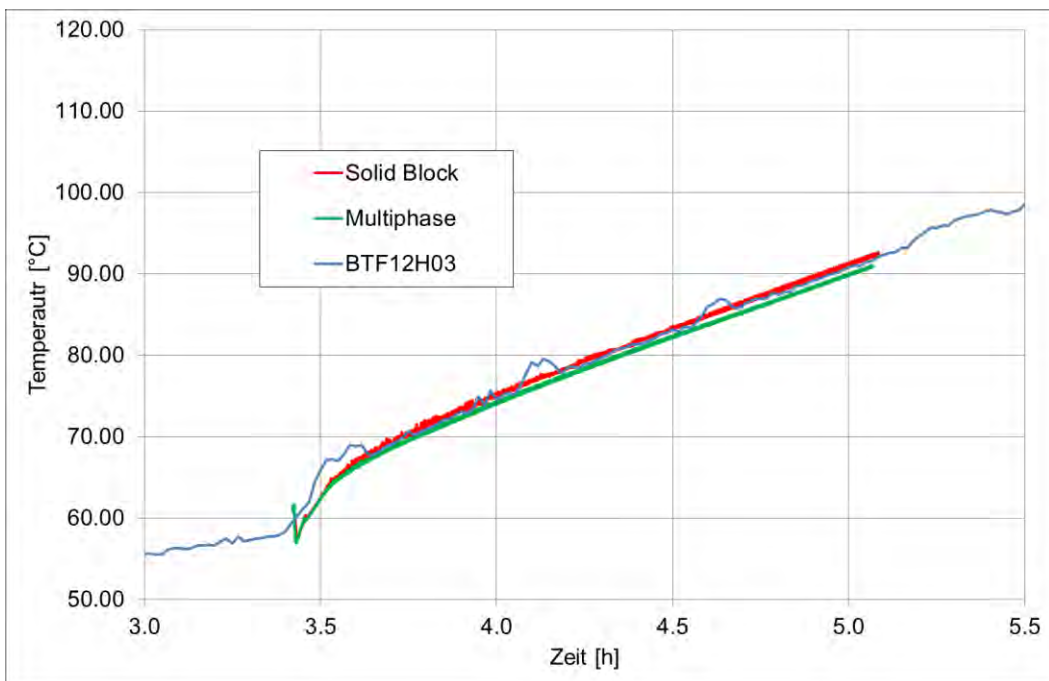
**Abb. 2.25** Temperaturverlauf in 8.4 m Höhe



**Abb. 2.26** Temperaturverlauf in 5.6 m Höhe



**Abb. 2.27** Temperaturverlauf in 3.5 m Höhe



**Abb. 2.28** Temperaturverlauf in 1.2 m Höhe

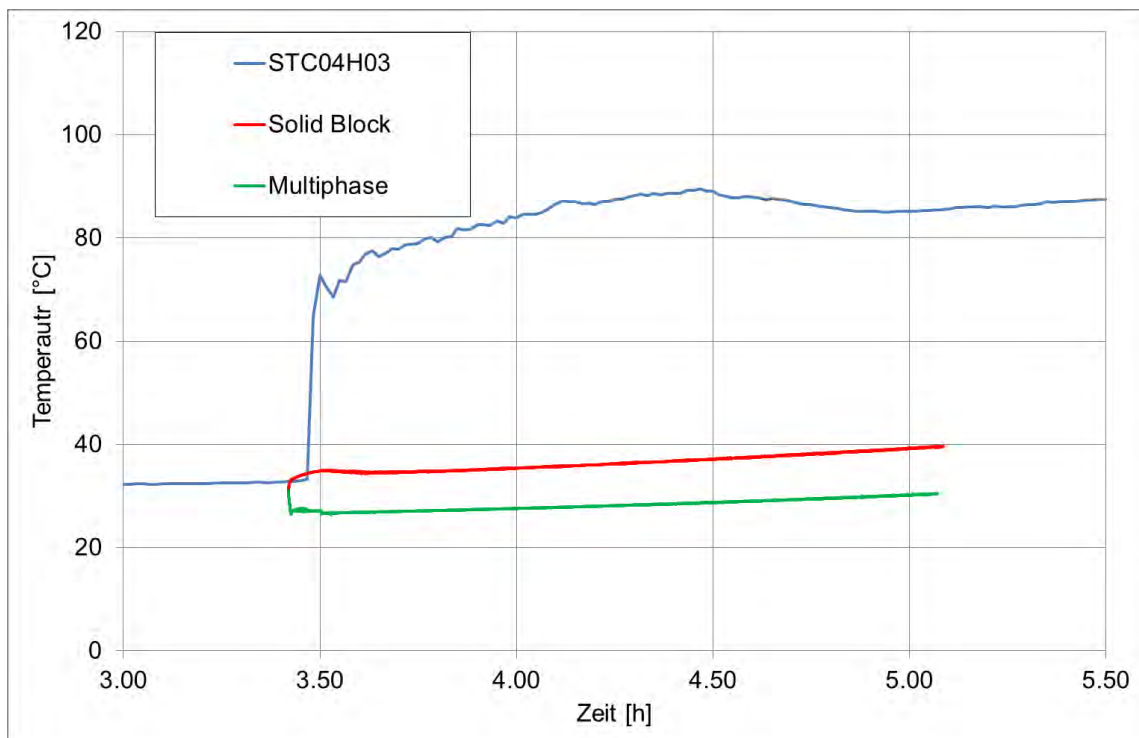
Bei den Temperaturen in 0.4 m Höhe (siehe Abb. 2.29) zeigt sich ein deutlicher Unterschied zwischen den experimentellen Werten und den Simulationsdaten. Im Experiment liegt diese Messstelle bei Beginn der Dampfeinspeisung ( $t = 3.4$  h) noch in der Gasphase, unmittelbar oberhalb der Sumpfoberfläche. Der plötzliche Temperatur sprung bei  $t = 3.5$  h im Experiment lässt sich aber nur schwer durch das von den Wän-



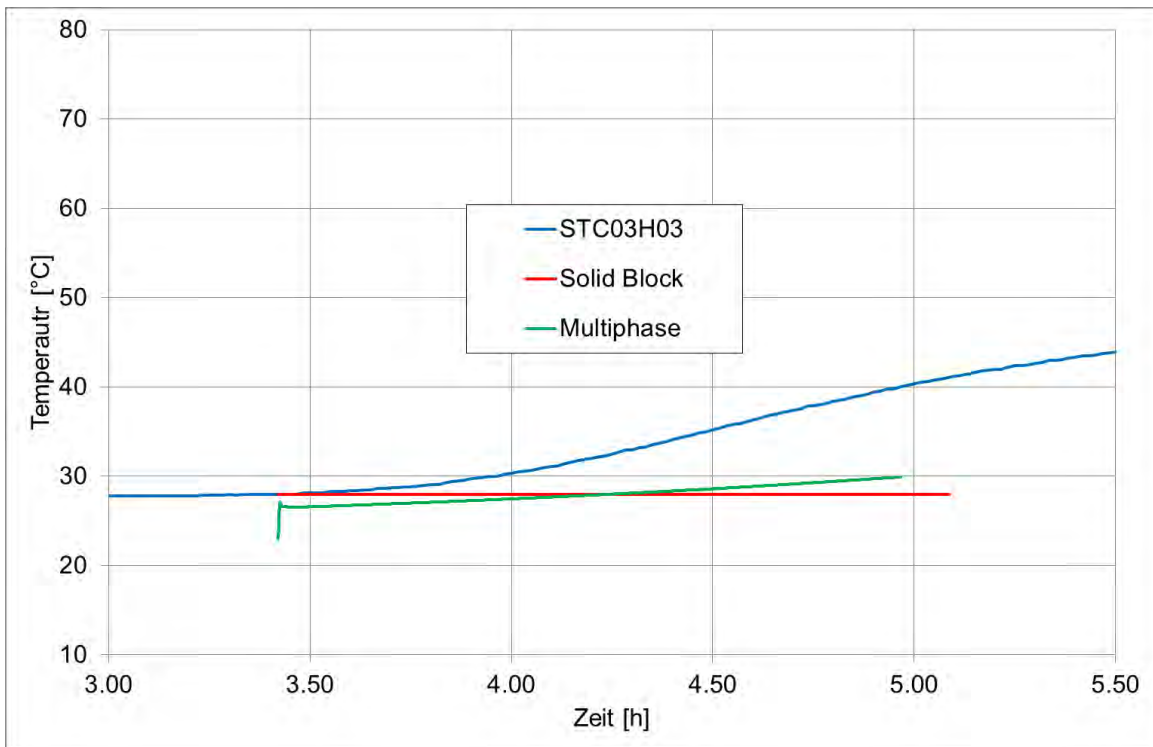
den ablaufende Kondensat erklären, da die Wände zu diesem Zeitpunkt noch eine deutlich niedrigere Temperatur haben (siehe Abb. 2.31). Insofern sollte diesem Messpunkt auch nicht zu viel Gewicht beigemessen werden.

Die Temperaturen innerhalb des Sumpfwassers in 0.3 m Höhe werden in Abb. 2.30 dargestellt. Hier zeigt sich für das Solid und die Multiphase-Rechnung wieder eine Unterschätzung. Ein Grund für die Unterschätzung der Temperaturen (insbesondere an der Sumpfoberkante) ist, dass im Experiment warmes bis heißes Kondensat in den Sumpf läuft. Die genaue Temperatur des zufließenden Kondensats und die räumliche Verteilung der Einspeisung sind nicht bekannt. Die Temperatur dürfte sich aber an den Wandtemperaturen orientieren, die im Laufe des Experimentes von ca. 60 °C auf über 100 °C ansteigen (aufgeheizt durch den eingespeisten Dampf, siehe z. B. Abb. 2.31).

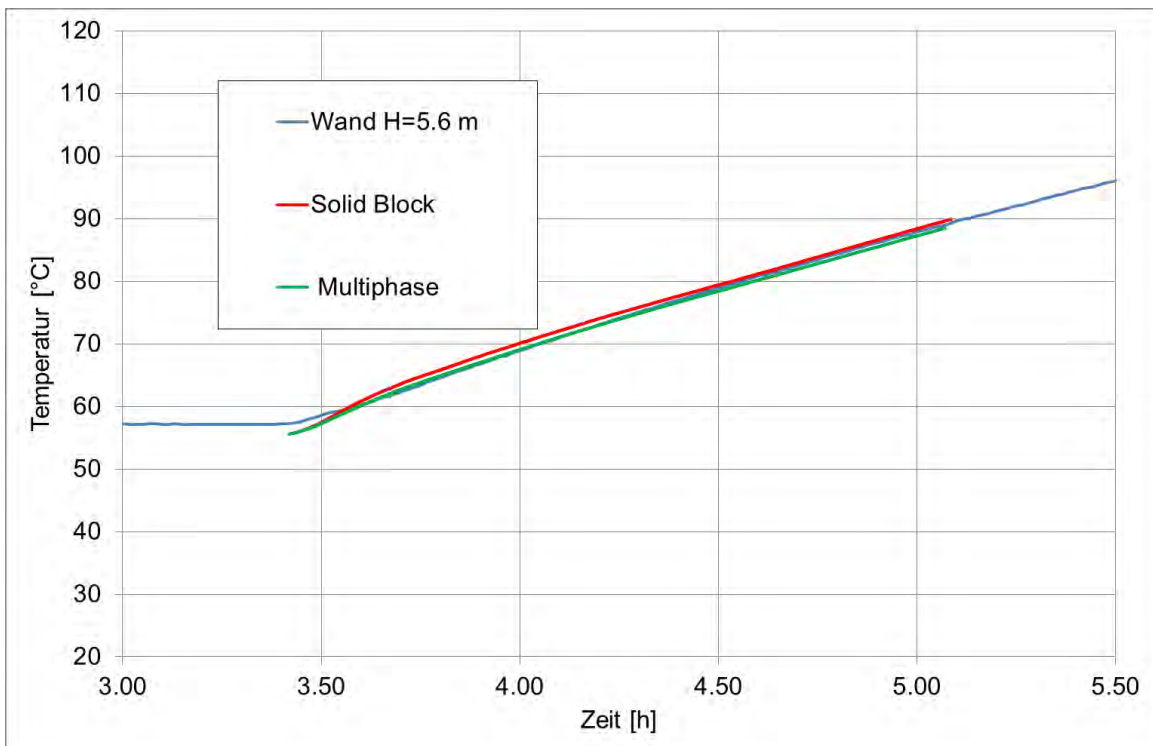
Aufgrund der Unsicherheit bezüglich des Einspeiseortes erfolgt in der Multiphase-Simulation die Wassereinspeisung über eine Volumenquelle räumlich homogen verteilt. Die Masse der Einspeisung entspricht der Wandkondensationsrate, die Temperatur der mittleren Wandtemperatur. Wie im Experiment erfolgt bei der der Multiphase-Rechnung ein Temperaturanstieg im Sumpf bei der Höhe  $H = 0.3$  m. Allerdings ist der Anstieg in der Simulation deutlich schwächer. Die Abweichungen lassen sich dabei sicher auch auf die ungenaue Abbildung der Wassereinspeisung zurückführen.



**Abb. 2.29** Temperaturverlauf an der Sumpfoberfläche (0.4 m Höhe)



**Abb. 2.30** Wassertemperatur im Sumpf in 0.3 m Höhe



**Abb. 2.31** Wandtemperaturen in 5.6 m Höhe

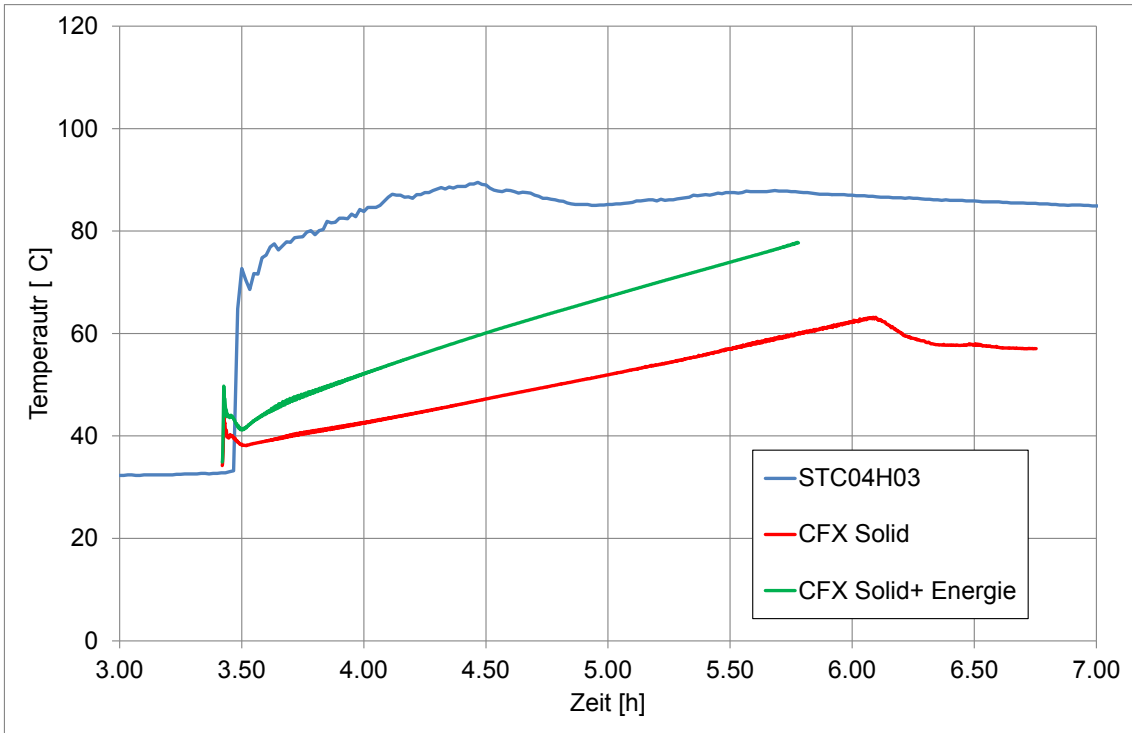
#### 2.5.4 Berücksichtigung der Kondensattemperatur / Energie bei der Solid-Block-Simulation

In einer weiteren Berechnung wurden die erhöhte Kondensattemperatur und die damit zusätzlich in den Sumpf eingespeiste Energie berücksichtigt. Diese Parameterstudie wurde mit einem älteren CFD-Gitter und Eingabedatensatz durchgeführt.

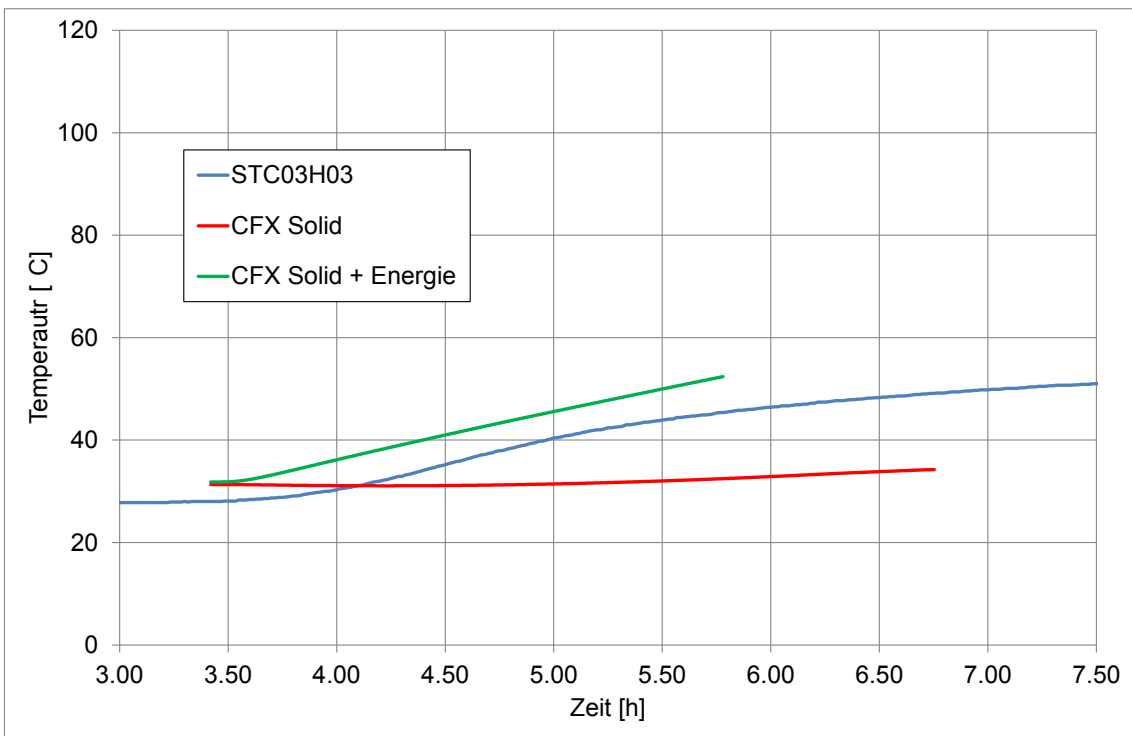
Die Kondensattemperatur wurde (vereinfacht) bestimmt durch die Temperatur der Wand, an der die Kondensation stattfindet. Hierbei wurde (nur) die Solid-Rechnung wiederholt und dabei zusätzlich in die Sumpfoberfläche die folgende Energiemenge eingespeist:

$$Q = \Delta T \cdot c_p \cdot R_K \quad (2.1)$$

Hierbei ist  $\Delta T$  die Temperaturdifferenz zwischen der mittleren Wandtemperatur (an der das Kondensat entsteht) und der mittleren Temperatur an der Sumpfoberfläche (in die das Kondensat einfließt),  $c_p$  die spezifische Wärmekapazität von Wasser und  $R_K$  die Wandkondensationsrate (also alles Kondensat, das in den Sumpf fließt). In Abb. 2.32 und Abb. 2.33 sind die Temperaturen an der Sumpfoberfläche bzw. innerhalb des Sumpfes dargestellt. Es zeigt sich, dass bei der Berechnung mit einer Berücksichtigung dieser zusätzlichen Energien die Temperaturen besser zu den experimentellen Werten passen. Allerdings wird insbesondere der steile Anstieg an der Sumpfoberfläche durch diese Simulation auch nicht wiedergegeben (siehe Abb. 2.32). Hier ist zumindest auch ein kritisches Hinterfragen dieses Messwertes angeraten.



**Abb. 2.32** Temperatur an der Sumpfoberfläche (0.4 m)



**Abb. 2.33** Temperatur innerhalb des Sumpfes (0.3 m)

## 2.6 Zusammenfassung

Im vorliegenden Kapitel wurden die Möglichkeiten zur Simulation eines Sumpfes in einem Containment mit CFX untersucht. Dabei wurden sowohl realistische Mehrphasensimulationen, als auch Rechnungen mit zwei vereinfachten Sumpfmolellen (Solid Block und Immersed Solid) durchgeführt und miteinander verglichen. Der Schwerpunkt lag dabei auf den Mehrphasensimulationen. Zu den durchgeführten Vergleichen zählen sowohl zwei Testbeispiele als auch die Experimente GES-Wanne und THAI TH-6. In Tab. 2.5 findet sich ein tabellarischer Überblick zu den Untersuchungsergebnissen.

Das Auffüllen eines Sumpfes hat in Testbeispielen gut funktioniert. Hier ist es nur für die Massenerhaltung wichtig, die Volume-Fraction-Kopplung einzuschalten. Auch bei der GES-Wanne hat die Berechnung der Temperaturschichtung gute Ergebnisse gezeigt. Der Versuch TH-6 konnte sowohl mit der Mehrphasensimulation als auch mit einer Simulation, bei der der Sumpf als Solid-Block simuliert wurde, in guter Übereinstimmung mit dem Experiment gerechnet werden. Bei der Simulation der Wassertemperatur gibt es Abweichungen. Diese können aber darauf zurückgeführt werden, dass unsicher ist, wo und mit welcher Temperatur das Kondensat in den Sumpf einfließt.

Die Verwendung eines Solid Blocks anstelle des Sumpfwassers ist eine gute Möglichkeit, wenn der Sumpffüllstand vorgegeben und einigermaßen konstant ist. Hier gibt es die wenigsten numerischen Schwierigkeiten und der Wärmeaustausch sowie die Kondensation an der Sumpfoberfläche können sehr gut simuliert werden. Hierbei muss aber beachtet werden, dass innerhalb des Sumpfes kein konvektiver Wärmeaustausch simuliert werden kann. Sofern keine homogene Temperaturverteilung vorliegt, ist davon auszugehen, dass die Oberflächentemperatur des Sumpfes nicht exakt berechnet werden kann. Einer starken Veränderung des Füllstandes kann bei dieser Modellierung dadurch Rechnung getragen werden, dass die Simulation unterbrochen wird. Es erfolgt dann ein Restart der Simulation mit einem leicht modifizierten CFD-Gitter, bei der die Größe des Solid Blocks angepasst wurde. Mit dieser Methode kann zwar die Volumenänderung des Gases/Wassers durch die veränderte Wasserhöhe berücksichtigt werden, bei der Initialisierung im Bereich der geänderten Wasseroberfläche gibt es allerdings Unsicherheiten. Eine genaue Simulation des Auffüllvorganges ist deshalb mit dieser Methode nicht möglich.

Das Auffüllen des Sumpfes lässt sich prinzipiell mit einem Immersed Solid simulieren. Dies funktioniert bei langsamen Auffüllgeschwindigkeiten stabil, bei höheren Ge-

schwindigkeiten gibt es Probleme mit der numerischen Stabilität. Nachteil bei dieser Methode ist, dass kein Wärmeaustausch mit dem Immersed Solid möglich ist und somit die gesamte Energiebilanzierung im Sumpf und auch die Kondensation an der Sumpfoberfläche fehlerhaft werden. Es ist nicht geplant, diese Methode weiterzuverfolgen.

Ist eine genaue Berechnung der Temperaturverteilung im Sumpf notwendig oder muss eine Änderung des Wasserstands genau simuliert werden, so sollte eine Mehrphasensimulation durchgeführt werden. In diesem Fall ist aber mit einer deutlichen Erhöhung der Rechenzeit zu rechnen.

**Tab. 2.5** Vergleich der unterschiedlichen Sumpfmmodellierungsarten

<b>Modellierungstyp</b>	<b>Multiphase</b>	<b>Immersed Solid</b>	<b>Solid</b>
Verdrängung des Volumens	Kontinuierliches Auffüllen möglich	Kontinuierliches Auffüllen möglich	Konstantes Wasservolumen, Restart mit geändertem Füllstand möglich
Kondensation an der Sumpfoberfläche	Ist möglich. Kondensationsrate wird durch Volumenkonensation bestimmt. Wärmeaustausch zwischen Luft und Wasser findet statt	Ist nicht möglich, da kein Wärmeaustausch mit dem Immersed Solid stattfindet	Ist gut möglich. Die Kondensationsrate wird durch Wandkondensation bestimmt
Temperaturschichtung im Sumpf	Gute Qualität bei GES-Wanne, bei TH-6 fehlen Details zur Wassereinspeisung, daher nur homogene Einspeisung über Volumenquelle	Mittlere Qualität (TH-6)	Mittlere Qualität (TH-6 mit zusätzlicher Energieeinspeisung)
Berechnungsgeschwindigkeit	Langsam	Schnell (TH-6)	Schnell (TH-6)
Numerische Stabilität	Etwas instabiler als Modellierung als Solid Block	Mittlere Stabilität – eher gut bei langsamer Sumpffüllgeschwindigkeit	Gute Stabilität



### **3           Arbeitspunkt 1.2 – Simulation von Kondensationsvorgängen mittels Wandfunktionen**

#### **3.1           Einleitung**

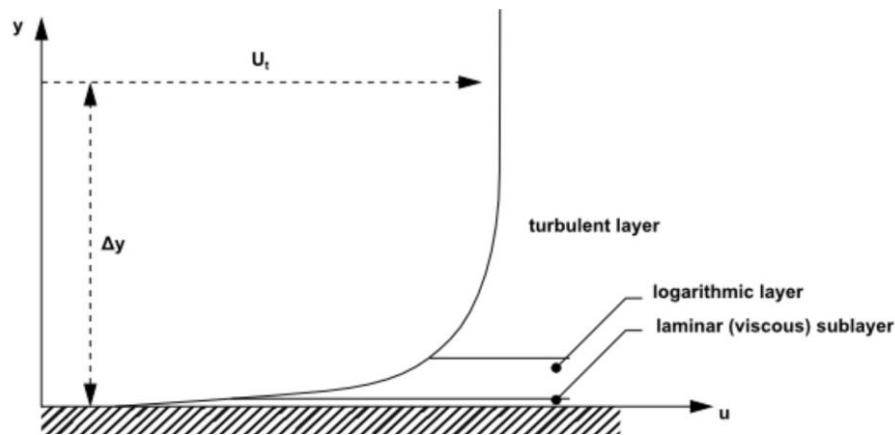
In CFD-Simulationen besteht die Möglichkeit die Gasströmung in unmittelbarer Wandnähe detailliert zu simulieren. Dazu ist aber ein sehr feines CFD-Gitter in diesem Bereich nötig, da sich die Strömung schon bei geringer Änderung des Wandabstands deutlich ändert (siehe Abb. 3.1). Für viele Anwendungen ist eine räumliche Auflösung dieses Bereichs zu aufwendig. Die Strömung in diesem Bereich lässt sich aber durch wenige Parameter wie Wandabstand, Strömungsgeschwindigkeit außerhalb der Grenzschicht, etc. beschreiben. Deshalb sind in CFX Korrelationen (Wandfunktionen) implementiert, die die Strömung in diesem Bereich approximieren. Bei Verwendung dieser Wandfunktionen braucht der wandnahe Bereich nicht mehr im CFD-Gitter detailliert aufgelöst zu werden, was zu einer deutlichen Rechenzeiterparnis führt.

Die in CFX implementierten Wandfunktionen berücksichtigen keine Wandkondensation und den damit verbundenen Stofftransport. Simulationen von Experimenten, wie den CONAN Versuchen, zeigen, dass bei einer zu groben räumlichen Diskretisierung ( $y^+ > 10$ ) und der Verwendung der in CFX implementierten Wandfunktionen teilweise deutliche Abweichungen in Bezug auf die Wandkondensationsrate und damit auch auf Größen wie Druck, Gaszusammensetzung und Temperatur zu erwarten sind. Eine feine räumliche Diskretisierung der wandnahen Schicht ist aber bei der Simulation eines Containments aufgrund des damit verbundenen hohen Rechenaufwands kaum möglich.

Im Rahmen des Vorhabens 1501407 „Weiterentwicklung von CFD-Modellen zur 3D-Simulation der Wasserstoffverteilung im Sicherheitseinschluss“ wurden von der RWTH Aachen Wandfunktionen ausgewählt und implementiert, die den wandnahen Bereich der Strömung im Fall von Wandkondensation modellieren /LEH 14/, /ALL 16/. Nach umfangreichen Literaturrecherchen und Tests wurden die Sucec-Wandfunktionen als am geeignetsten für Containment-Anwendungen identifiziert. Im Rahmen dieses Arbeitspunkts wurden die Sucec-Wandfunktionen am Beispiel von drei CONAN-Versuchen und des Panda4bis-Experiments getestet. Anhand des Vergleichs mit experimentellen Daten und CFX-Simulationen, bei denen die in CFX implementierten Wandfunktionen verwendet wurden, sollte deren Leistungsfähigkeit untersucht werden.



Hierbei kamen CFD-Gitter mit unterschiedlicher Auflösung der wandnahen Schicht zum Einsatz.



**Abb. 3.1** Tangentialgeschwindigkeit  $u$  in Abhängigkeit vom Wandabstand  $y$  /CFX 16/.

### 3.2 Überblick über die neu implementierten Wandfunktionen

Die wandnahe Schicht der turbulenten Strömung kann in zwei Schichten unterteilt werden (Abb. 3.1). Unmittelbar an der Wand liegt die viskose/laminare Grenzschicht, in der die molekulare Viskosität die dominante Rolle beim Impuls- und Wärmetransport spielt. Etwas weiter entfernt liegt eine Übergangsschicht zur turbulenten Schicht, die auch als logarithmische Schicht bezeichnet wird, in der turbulente Effekte bereits dominieren.

Bei Simulationen mit dem Low-Reynolds-Ansatz wird ein sehr feines Gitter senkrecht zur Wand verwendet, so dass Details der wandnahen Schichten simuliert werden. Dieser Ansatz ist genau, erfordert allerdings eine sehr hohe Anzahl von Zellen und einen entsprechend hohen Rechenaufwand. Turbulenzmodelle wie das SST-Modell ( $\omega$ -gleichungsbasiert) sind für diesen Ansatz geeignet. Bei Verwendung von Wandfunktionen brauchen die wandnahen Schichten nicht detailliert im CFD-Gitter aufgelöst zu werden, sondern sie werden durch Korrelationen modelliert. Dies führt zu einer deutlichen Rechenzeiterparnis, kann aber auch Modellierungsfehler mit sich bringen, wenn die Annahmen, die bei der Herleitung der Korrelationen getroffen werden, nur bedingt erfüllt sind. In CFX wurde für  $\omega$ -gleichungsbasierte Turbulenzmodelle (z. B. SST) ein "Automatic Wall Treatment" implementiert. Je nach lokaler Gitterfeinheit findet ein Übergang zwischen dem Low-Reynolds-Ansatz und der Anwendung von Wandfunktionen statt.

Die beim SST-Modell verwendeten Wandfunktionen basieren auf einer Erweiterung des Ansatzes von Lander und Spalding [LAN 74]. Es wird die dimensionslose Tangentialgeschwindigkeit  $u^+$  in Abhängigkeit vom dimensionslosen Wandabstand  $y^+$  modelliert. Beide Größen sind wie folgt definiert:

$$y^+ = \frac{\rho \Delta y u_\tau}{\mu} \quad (3.1)$$

Wobei  $u_\tau$  die Tangentialgeschwindigkeit im Abstand  $\Delta y$  von der Wand ist,  $\rho$  ist die Dichte,  $\mu$  die Viskosität des Gases und  $\tau_w$  die Wandschubspannung.

Beim SST-Modell wird  $u^+$  wie folgt modelliert:

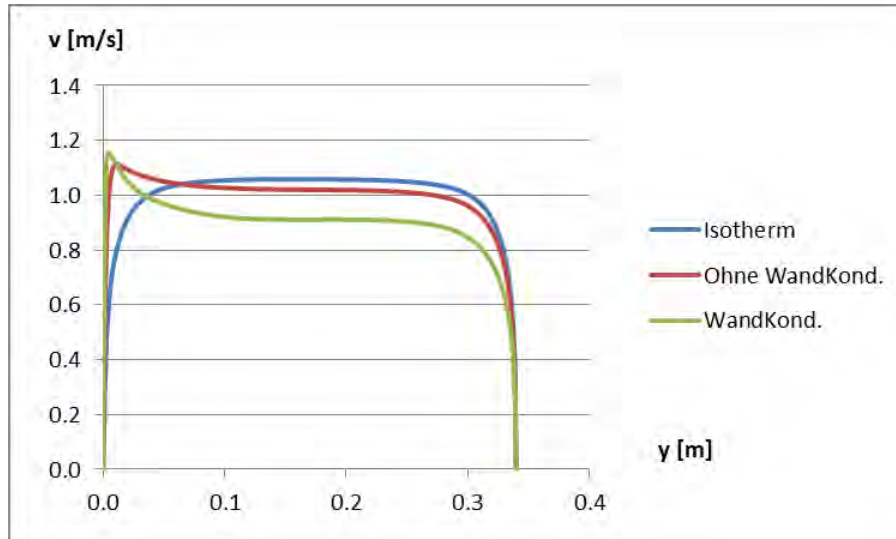
- In der viskosen Grenzschicht:  $u_{vis}^+ = y^+$
- In der logarithmischen Schicht:  $u_{log}^+ = \frac{1}{k} \ln(y^+) + C$

Wobei  $k$  die Von-Karman-Konstante ist ( $k = 0.41$ ) und  $C$  eine von der Wandrauigkeit abhängige Konstante ( $C = 5.2$  bei einer glatten Wand).

Mit Hilfe einer Blending-Funktion wird  $u^+$  aus den folgenden beiden Termen berechnet:

$$\left(\frac{1}{u^+}\right)^4 = \left(\frac{1}{u_{vis}^+}\right)^4 + \left(\frac{1}{u_{log}^+}\right)^4 \quad (3.2)$$

In Abb. 3.2 ist erkennbar, wie Wärmeleitung und Massentransport (Wandkondensation) das Geschwindigkeitsprofil an der Wand modifizieren. Deshalb sind die in CFX implementierten Wandfunktionen bei Wandkondensation nicht geeignet, den wandnahen Bereich genau abzubilden. Für eine genaue Simulation muss entweder der Low-Reynolds-Ansatz verwendet werden, was aber mit einem sehr feinen CFD-Gitter in Wandnähe verbunden und damit auch sehr rechenzeitintensiv ist, oder aber die Wandfunktionen für die Momenten- und Temperaturgleichung müssen im Fall von Wandkondensation modifiziert werden. Nach Literaturrecherchen und Tests wurden die Sucec-Wandfunktionen von der RWTH Aachen als am geeignetsten für Containment-Anwendungen identifiziert.



**Abb. 3.2** Strömungsgeschwindigkeit parallel zur Wand in Abhängigkeit vom Wandabstand

Bei den Sucec-Wandfunktionen wird die wandnahe Schicht wie folgt modelliert:

$$u_{log}^+ = 8.75 y^{+1/7} + \frac{v_w^+}{4} (8.75 y^{+1/7})^2 \quad (3.3)$$

Mit der wandnormalen Geschwindigkeit  $v_w^+$

$$v_w^+ = \frac{\dot{m}}{\rho} \cdot \frac{1}{u^*} \quad (3.4)$$

$\dot{m}$  ist der Kondensationsmassenstrom und für  $u^*$  ergibt sich:

$$(u^*)^4 = \left( \sqrt{\frac{\mu}{\rho} \left| \frac{\Delta u}{\Delta y} \right|} \right)^4 + (\sqrt{a_1 k})^4 \quad (3.5)$$

$$F_u = -\rho u_\tau u^* \quad (3.6)$$

$F_u$  ist der Fluss in der Momentengleichung und er wird beim SST-Modell mit „Automatic Wall Treatment“ durch diese Korrelation berechnet. Dabei ist  $a_1$  eine Modellkonstante ( $a_1 = 0.31$ ). Für die Wandfunktion der Temperaturgleichung ergibt sich

$$T^+ = (6y^{+0.1709} + b) + \frac{v_w^+}{4} (6y^{+0.1709} + b)^2$$

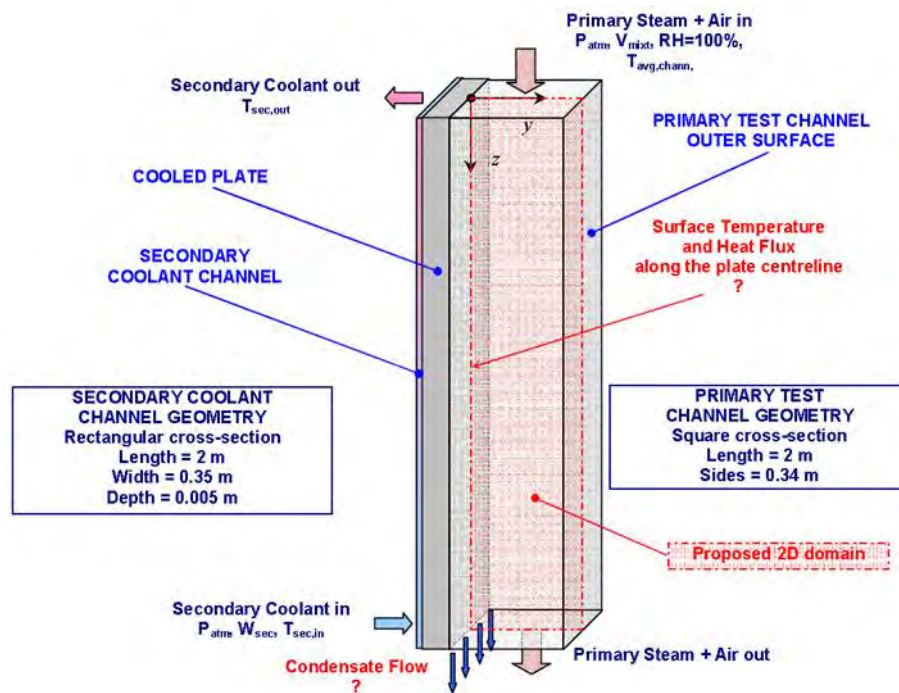
$$b = 13.2Pr - 9.37 \quad (3.7)$$

wobei  $Pr = 0.8$  angenommen wird.

### 3.3 Nachrechnung von CONAN-Versuchen

#### 3.3.1 Beschreibung der CONAN-Versuche

In Abb. 3.3 ist der Versuchsaufbau für die CONAN-Experimente dargestellt. Hierbei wird ein Dampf/Luft-Gemisch in einen Schacht mit quadratischer Grundfläche von oben eingespeist. Der Dampfgehalt entspricht einer 100%igen Sättigung und ist damit direkt an die Eintrittstemperatur des Gases gekoppelt.



**Abb. 3.3** Versuchsaufbau für die CONAN-Experimente (SARNET-Benchmark Nr. 2 / Bild: /AMB 09/)

Der Dampf kann an einer gekühlten Metalloberfläche kondensieren und das (dampf-ärmere) Gemisch tritt dann am unteren Ende des Schachtes wieder aus. Die Metallplatte wird auf der Außenseite mit Hilfe von Wasser gekühlt. Gemessen werden die räumlich-integrierte Kondensationsmasse, die mittlere Temperatur an der Kühlwandoberfläche entlang einer Linie und der integrale Wärmestrom in die Platte. Die Randbedingungen bleiben während eines Versuchs konstant. Es wurden unterschiedliche Versuche durchgeführt, bei denen die Strömungsgeschwindigkeit durch den Kanal, der Dampfgehalt, die Temperatur des eintretenden Gases und die Temperatur des Kühlmittels variiert wurden. Aus den zahlreichen CONAN-Versuchen wurden exemplarisch

drei Versuche ausgewählt (Tab. 3.1), bei denen der Dampfgehalt und die Eintrittstemperatur variiert wurden, was zu einer unterschiedlich starken Kondensation an der Wand führt.

**Tab. 3.1** Randbedingungen bei den nachgerechneten CONAN-Versuchen

	$T_{\text{ein}}$	$V_{\text{ein}}$	$T_{\text{Wand}}$	Molenbruch $\text{H}_2\text{Og}$
P10-V25-T30	75.6 °C	2.57 m/s	31.0 °C	0.39
P20-V25-T30	91.5 °C	2.59 m/s	32.2 °C	0.732
P30-V25-T30	97 °C	2.63 m/s	37.1 °C	0.897

### 3.3.2 Simulation mit CFX

Bei den CFX-Simulationen wurde nur der Strömungskanal mit der gekühlten Wand simuliert. Die Strömung des Kühlmittels wurde nicht berechnet, sondern es wurde an der Außenseite der gekühlten Wand eine Temperaturrandbedingung vorgegeben (Tab. 3.1,  $T_{\text{Wand}}$ ). Die gegenüberliegende Kanalwand wird als adiabat angenommen. Um Rechenzeit zu sparen, wird nur ein 1 cm dicker Querschnitt des Kanals berechnet, und an den Seitenflächen werden Symmetrierandbedingungen gesetzt. Dies ist zulässig, da diese Wände ebenfalls als adiabat angenommen werden können und der Einfluss dieser Seitenwände auf globale Größen, wie die Gesamtkondensationsrate, zu vernachlässigen ist. Am Einlass wurden die Geschwindigkeit und die Temperatur des Gases (Tab. 3.1,  $T_{\text{ein}}$ ,  $V_{\text{ein}}$ ), am Auslass wird die Druckrandbedingung  $p = 1$  bar vorgegeben.

Die Wandkondensationsrate wurde mit dem ANSYS-Wandkondensationsmodell berechnet. Luft und Dampf wurden als ideale Gase modelliert. Das SST-Turbulenzmodell einschließlich der „Production and Dissipation“ Terme wurde bei allen Simulationen verwendet. Es wurde für alle Fälle jeweils eine Simulation mit den in CFX implementierten Wandfunktionen und eine mit den Sucec-Wandfunktionen durchgeführt. Die Sucec-Wandfunktionen wurden per CEL-Expression in CFX implementiert. Diese Implementation ist einfach und lässt erwarten, dass auch in zukünftigen CFX-Versionen eine problemlose Übertragung der CELs möglich ist.

Ziel ist es zu untersuchen, wie sich die Wandfunktionen bei unterschiedlich feinen CFD-Gittern verhalten. Deshalb wurde eine systematische Verfeinerung im Gasraum an der Grenzfläche Gas/Kühlplatte durchgeführt. Die Dicke der ersten Gaszelle variiert

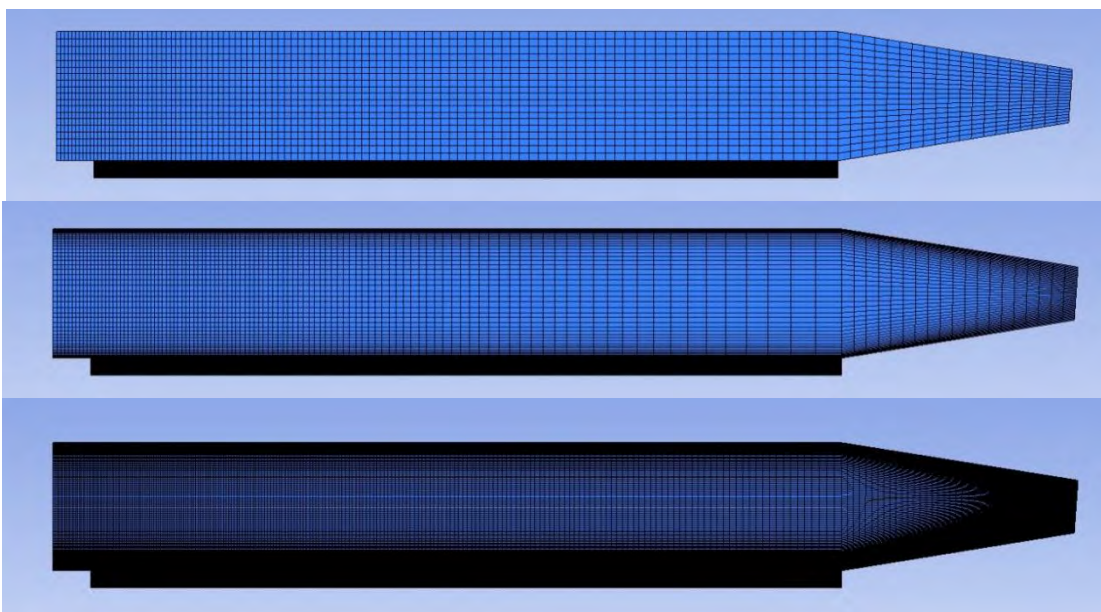
von 0.02 m bis 5.0e-5 m. Für die Kühlplatte wurde bei allen Simulationen ein in y-Richtung äquidistantes Gitter mit 30 Stützstellen ( $dy \sim 1.55 \text{ mm}$ ) verwendet. Die Kennzahlen der Gitter sind in Tab. 3.2 zu finden. Die Gitter mit  $dy < 1 \text{ mm}$  wurden weiter verfeinert, um die Gitterabhängigkeit zu untersuchen (Tab. 3.3). In Abb. 3.4 und Abb. 3.5 ist die lokale Gitterverfeinerung bei unterschiedlichen Gittern zu sehen.

**Tab. 3.2** Zelldicke  $dy$  der 1. Gaszelle an der gekühlten Platte, Anzahl der Zellen in y- und z-Richtung

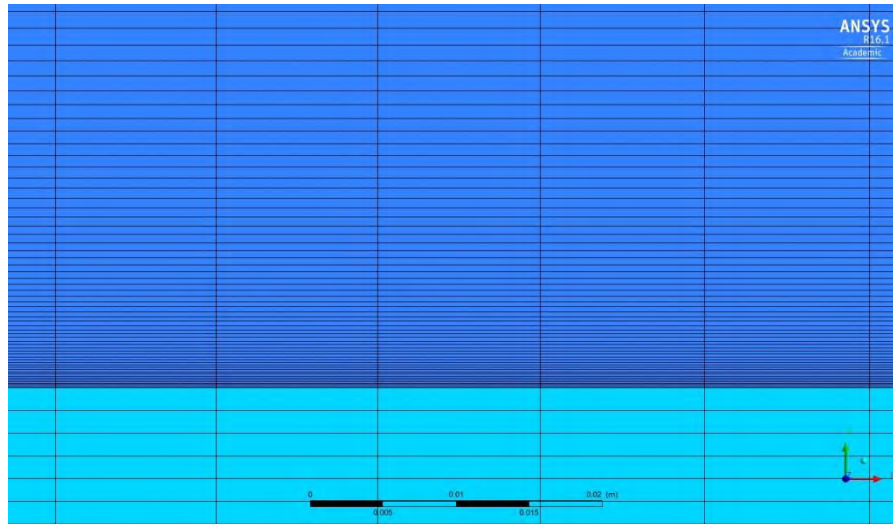
Gitter Nr.	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$dy \text{ [m]}$	2.0e-2	1.0e-2	5.0e-3	2.0e-3	1.0e-3	5.0e-4	2.0e-4	1.0e-4	5.0e-5
$n_y$	20	20	25	40	50	120	150	170	200
$n_z$	110	110	110	110	110	220	220	220	220

**Tab. 3.3** Zelldicke  $dy$  der 1. Gaszelle an der gekühlten Platte, Anzahl der Zellen in y- und z-Richtung bei weiterer Gitterverfeinerung

Nr.	6 fein	7 fein	8 fein	9 fein
$dy \text{ [m]}$	5.0e-4	2.0e-4	1.0e-4	5.0e-5
$n_y$	200	300	340	400
$n_z$	400	400	400	400



**Abb. 3.4** CFD-Gitter bei Nr. 2 (oben), Nr. 5 (Mitte), Nr. 8 (unten)



**Abb. 3.5** Ausschnitt des CFD-Gitters an der Grenzfläche bei Gitter Nr. 8

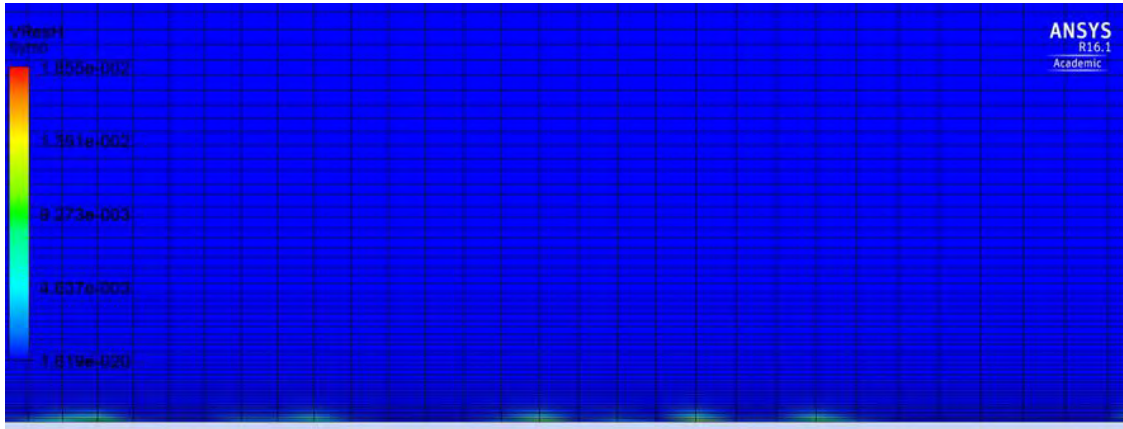
### 3.3.3 Simulationsergebnisse

Alle drei CONAN-Versuche konnten unabhängig vom verwendeten CFD-Gitter mit den in CFX implementierten Wandfunktionen simuliert werden. Die transiente Simulation geht nach 100 s – 300 s in die stationäre Lösung über. Das sehr strenge Konvergenzkriterium von Max-Residuum  $< 1.0e-4$  konnte eingehalten werden, nachdem die Strömung sich der stationären Lösung genähert hat. Die Temperaturmessstellen unmittelbar an der Kühlplattenoberfläche und die Gesamtkondensationsrate ändern sich nicht mehr. Bei einigen Simulationen wurde zur Überprüfung ein Vergleich der transienten Lösung mit einer Steady-State Simulation vorgenommen. Falls beide Simulationen hinreichend konvergiert waren, waren die Monitorgrößen gleich. Um sicherzustellen, dass die exakte Lösung für die Oberflächentemperatur und die Kondensationsrate getroffen wurde, musste das Konvergenzkriterium bei Steady-State Simulationen deutlich kleiner als bei transienten Simulationen gewählt werden ( $1.0e-5$  –  $1.0e-6$ ). Bei feinen Gittern war es bei Steady-State Simulationen schwierig, eine konvergente Lösung zu finden, bei transienten Simulation war dies bei den CFX-Wandfunktionen in allen Fällen möglich. Bei den Sucec-Wandfunktionen war es dagegen auch bei einer transienten Simulation nicht möglich, bei  $y^+ < 7$  (entspricht  $dy < 5.0e-4$  m) eine hinreichende Konvergenz zu erreichen.

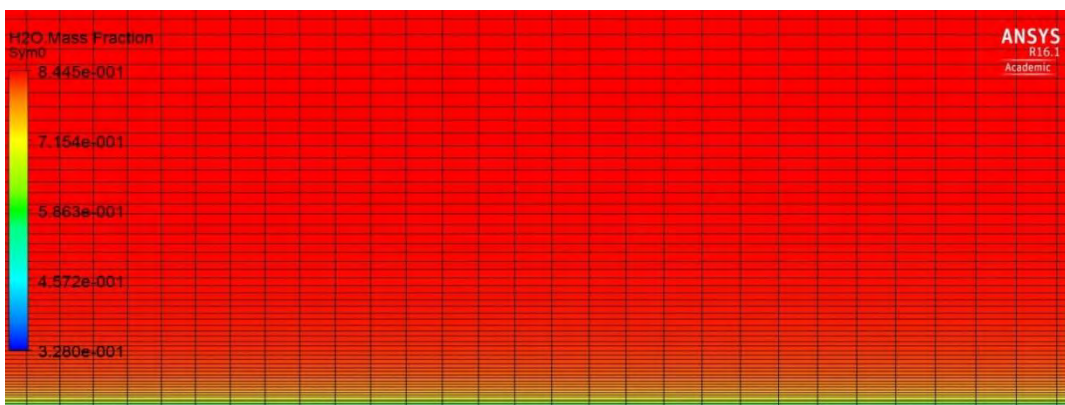
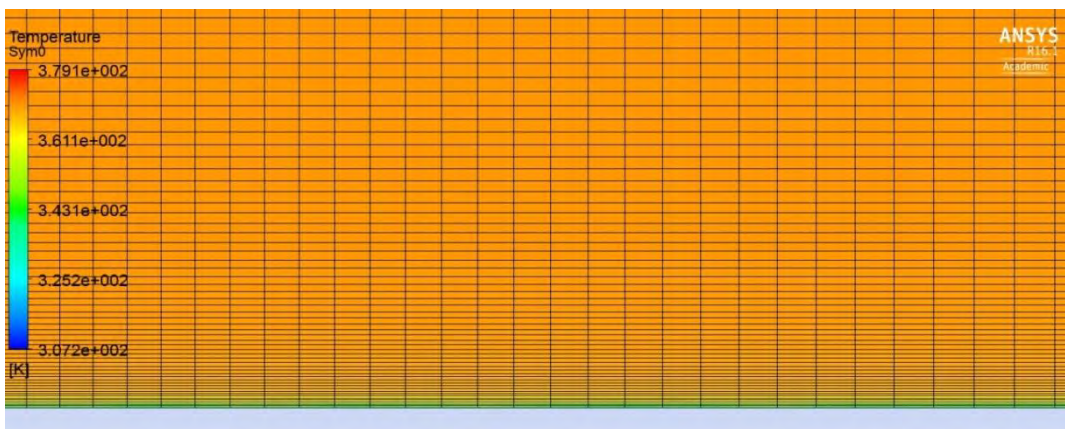
In Abb. 3.6 ist das Residuum der Energiegleichung bei einer nicht konvergierten Simulation mit der Sucec-Wandfunktion zu sehen. Fast im ganzen Rechengebiet wird eine sehr gute Konvergenz erreicht (blau), nur unmittelbar an der Kühlplatte gibt es Stellen



an denen keine konvergente Lösung gefunden wird (grün). Die Temperatur und der Dampfgehalt dagegen erscheinen auch in diesen Bereichen physikalisch sinnvolle Werte zu liefern (Abb. 3.7). Trotzdem wurde darauf verzichtet, diese Simulationen in die Auswertung aufzunehmen, da unklar ist, wie groß der numerische Fehler insbesondere bei der Kondensationsrate ist.



**Abb. 3.6** Residuum der Energiegleichung bei einer nicht konvergierten Simulation mit der Sucec-Wandfunktion



**Abb. 3.7** Temperatur (oben) und Dampfmassenbruch (unten)

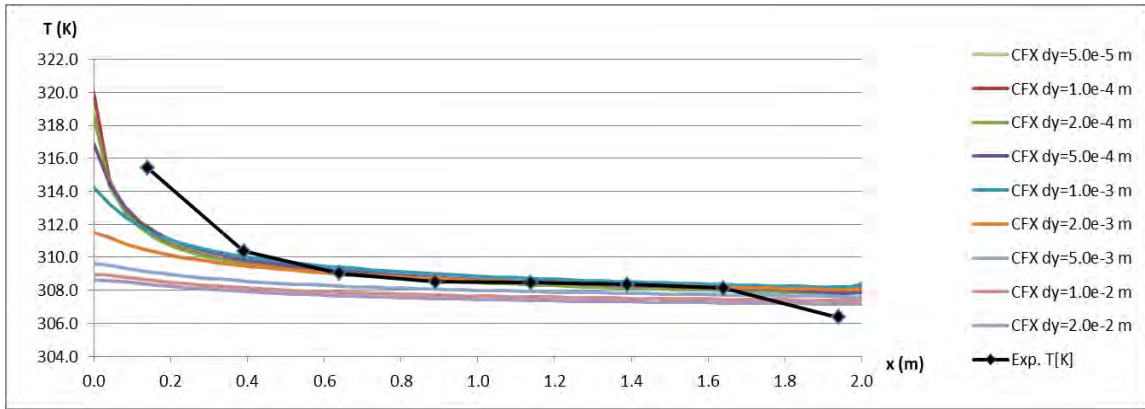


### 3.3.3.1 CONAN-Versuch P10T30V25

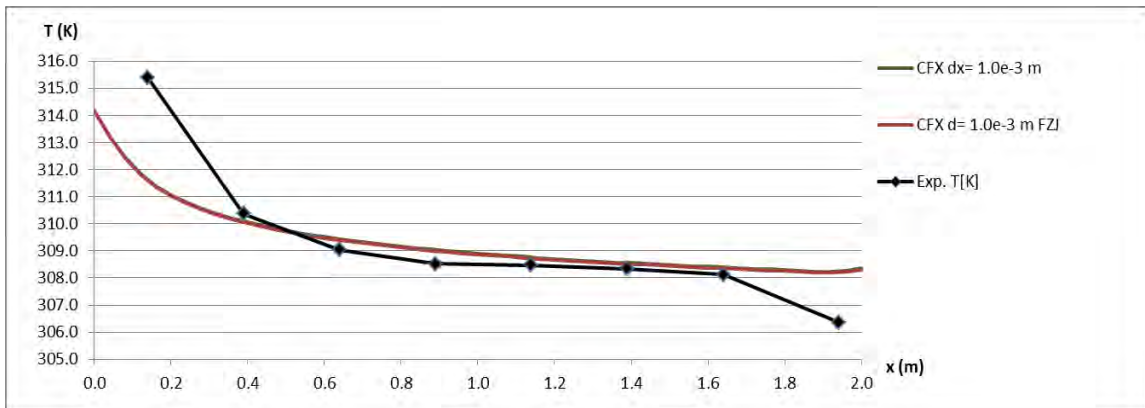
In Abb. 3.8 ist das Temperaturprofil an der Oberfläche der Kühlplatte in Abhängigkeit vom CFD-Gitter dargestellt. Die Simulationen mit einer Zelldicke  $dy \leq 2.0e-3$  m (Nr. 4 – Nr. 9, Tab. 3.2) sind in der Lage, die Oberflächentemperatur in guter Übereinstimmung mit dem Experiment zu simulieren. An der ersten und der letzten Messstelle treten aber Abweichungen auf. Bei der ersten Messstelle nimmt die Abweichung mit zunehmender Gitterfeinheit ab, der Effekt der Temperaturerhöhung am Beginn des Kanals wird bei feinerem Gitter zunehmend besser abgebildet. Die Temperaturabsenkung der letzten Messstelle wird von keiner Simulation abgebildet. Ursache hierfür ist, dass die Randbedingungen an der Kühlplatte und auch das Strömungsprofil am Einlass nur eine Näherung darstellen. Bei den gewählten Randbedingungen ist nicht zu erwarten, dass es am Ende des Kanals zu einer solchen Temperaturabsenkung kommt.

Ein Vergleich der Oberflächentemperatur bei Verwendung der Sucec- und der CFX-Wandfunktionen zeigt, dass das Temperaturprofil bei allen untersuchten Gittern für beide Wandfunktionen nahezu identisch ist (Abb. 3.9, Abb. 3.10).

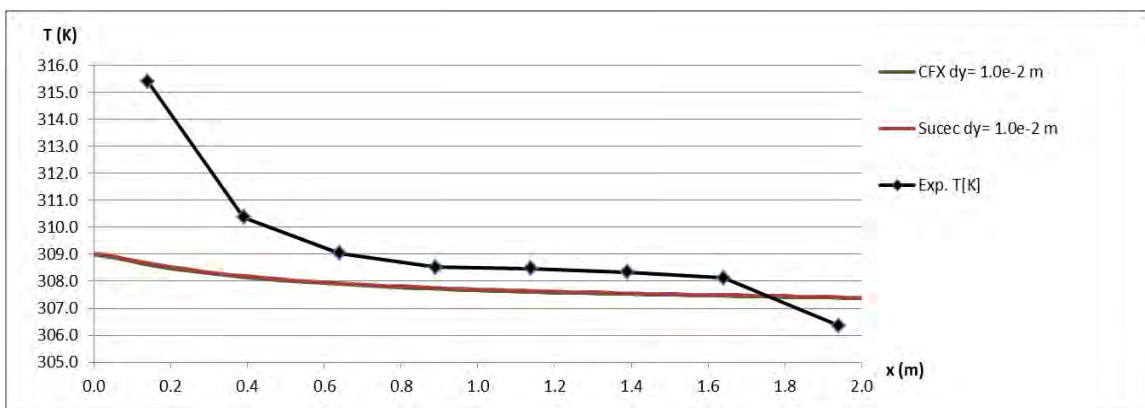
Die Simulationen, die eine Low-Reynolds-Modellierung verwenden, sind in der Lage, die integrale Kondensationsrate in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment zu berechnen. Die Simulation mit dem feinsten Gitter (Nr. 9,  $dy = 5.0e-5$  m) ist in der Lage, die Kondensationsrate nahezu exakt zu berechnen (Abb. 3.11), bei Verwendung eines gröberen Gitters nimmt die Abweichung zu. Bei den Simulationen mit Gittern für die  $dy > 2.0e-3$  m (Gitter 4;  $\sim y^+ > 15$ ) wird die Kondensationsrate unterschätzt, wobei die Abweichung bei gröberen Gittern (Nr. 1 – 3) weiter zunimmt. Für diese Simulationen kommen die Wandfunktionen zum Einsatz. Bei Verwendung der Sucec-Wandfunktionen kann der Fehler geringfügig verringert werden, aber die Abweichung Simulationen-Experiment ist viel größer, als die Unterschiede aufgrund der beiden verschiedenen Wandfunktionen.



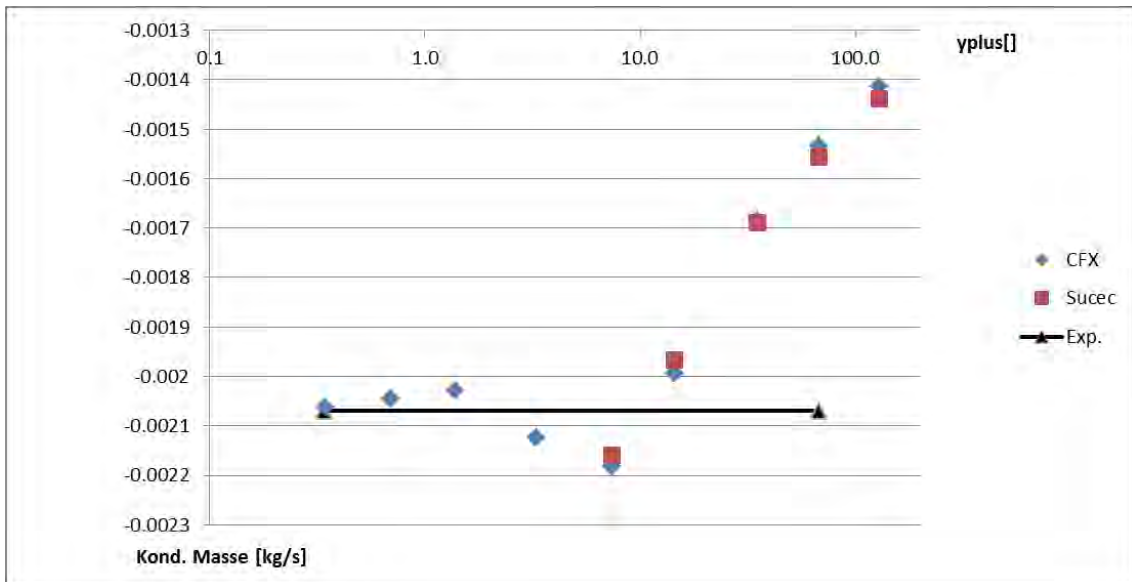
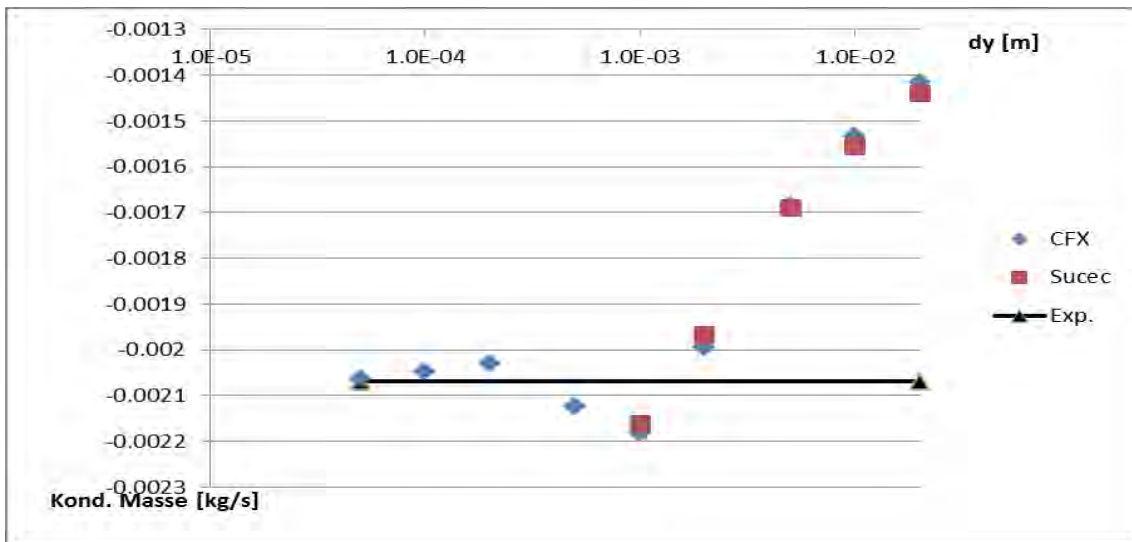
**Abb. 3.8** P10T30V25: Oberflächentemperatur bei Verwendung der CFX-Wandfunktionen in Abhängigkeit vom CFD-Gitter



**Abb. 3.9** P10T30V25: Oberflächentemperatur bei den CFX-Wandfunktionen und den Sucec-Wandfunktionen bei Verwendung des CFD-Gitters Nr. 5



**Abb. 3.10** P10T30V25: Oberflächentemperatur bei den CFX-Wandfunktionen und den Sucec-Wandfunktionen bei Verwendung des CFD-Gitters Nr. 2



**Abb. 3.11** P10T30V25: Kondensationsrate über der Zelldicke  $dy$  der ersten Gaszelle (oben) und über  $y^+$  (unten)

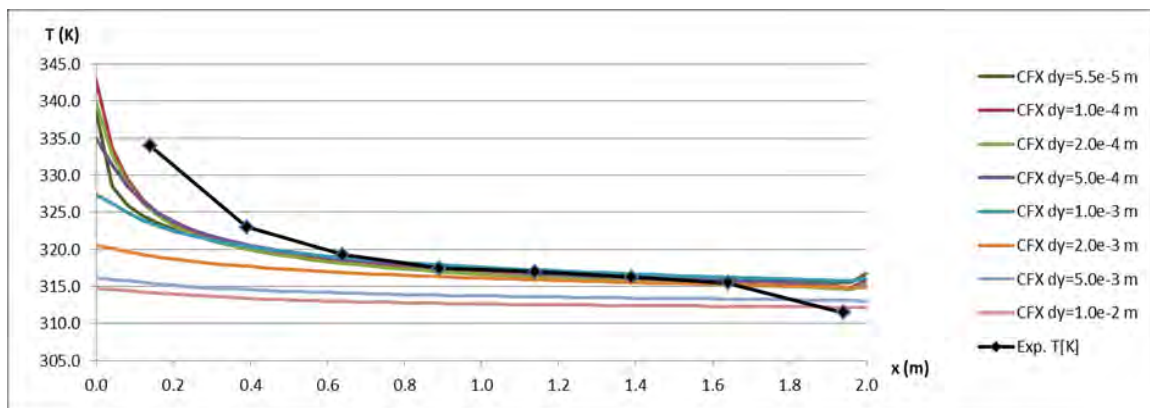
### 3.3.3.2 CONAN-Versuche P20T30V25 und P30T30V25

Bei diesen beiden Versuchen hat sich gezeigt, dass bei feineren Gittern eine Erhöhung der Stützstellenzahl (Tab. 3.3) zu einer weiteren Verringerung der numerischen Fehler führt (Abb. 3.13, Abb. 3.16, Abb. 3.20).

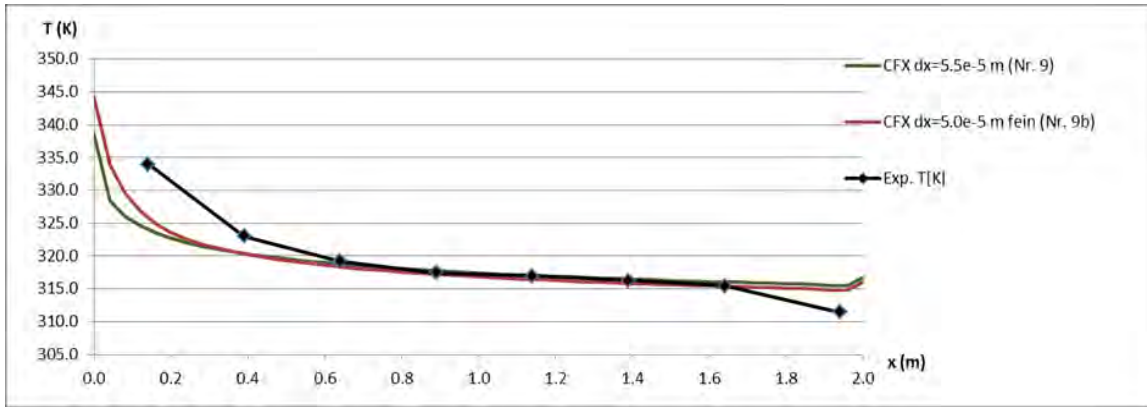
Die Ergebnisse für diese beiden Versuche mit höherer Dampfkonzentration und damit auch höherer Wandkondensationsrate sind ähnlich zu den vorherigen Ergebnissen. Wie schon bei P10T30V25 nimmt mit zunehmender Gitterfeinheit die Genauigkeit bei

der Berechnung der Oberflächentemperatur zu (Abb. 3.12, Abb. 3.17). Ab einer Gitterfeinheit von  $dy \leq 1.0e-3$  m kann die Oberflächentemperatur in der Mitte des Kanals in guter Übereinstimmung mit dem Experiment beschrieben werden, wobei bei P30T30V25 eine leichte Überschätzung beobachtet wird. An den Kanalenden wird – aus denselben Gründen wie bei P10T30V25 – die Temperatur weniger gut getroffen. Mit zunehmender Kondensationsrate führt die Sucec-Wandfunktion bei groben Gittern (Abb. 3.15, Abb. 3.19) zu einer leichten Verbesserung bei der Vorhersage der Oberflächentemperatur, allerdings besteht weiterhin eine deutliche Abweichung vom Experiment. Bei feineren Gittern (Abb. 3.14, Abb. 3.18) ist die Verbesserung gering, die Abweichung zum Experiment ist aber bei beiden Simulationen kleiner.

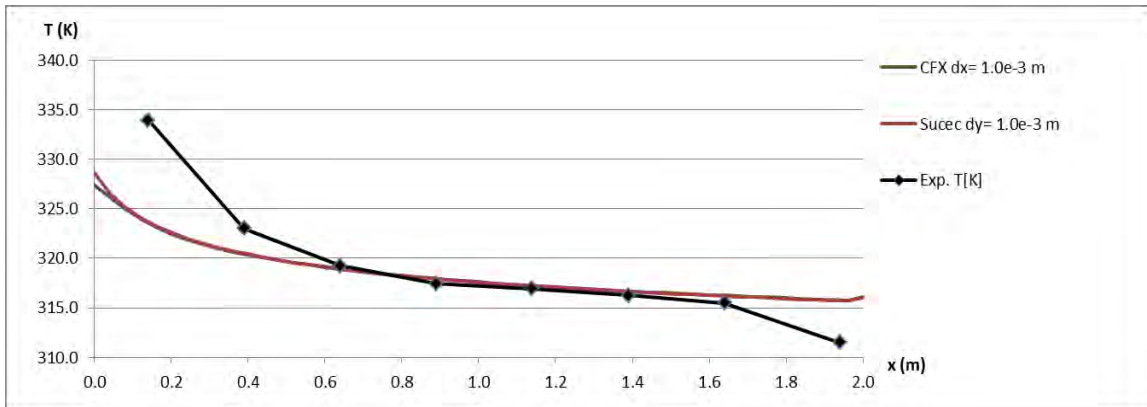
Beim P20T30V25 wird die Kondensationsrate bei Verwendung eines sehr feinen Gitters (Gitter Nr. 5 – Nr. 9) in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Bei P30T30V25 kommt es dagegen zu einer Überschätzung der Kondensationsrate. Bei Verwendung von gröberen Gittern wird in beiden Versuchen die Kondensationsrate unterschätzt. Wenn anstelle der CFX-Wandfunktionen die Sucec-Wandfunktionen verwendet werden, kann eine leichte Verbesserung erzielt werden.



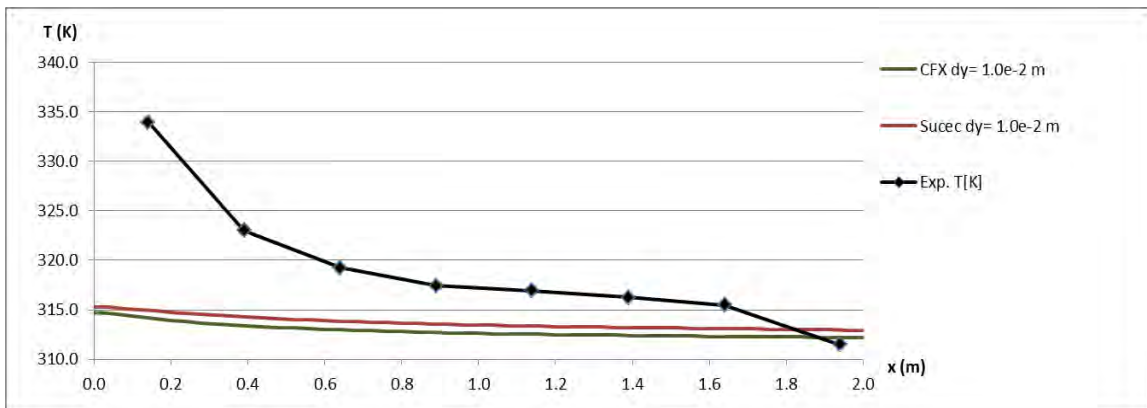
**Abb. 3.12** P20T30V25: Oberflächentemperatur bei Verwendung der CFX-Wandfunktionen in Abhängigkeit vom CFD-Gitter



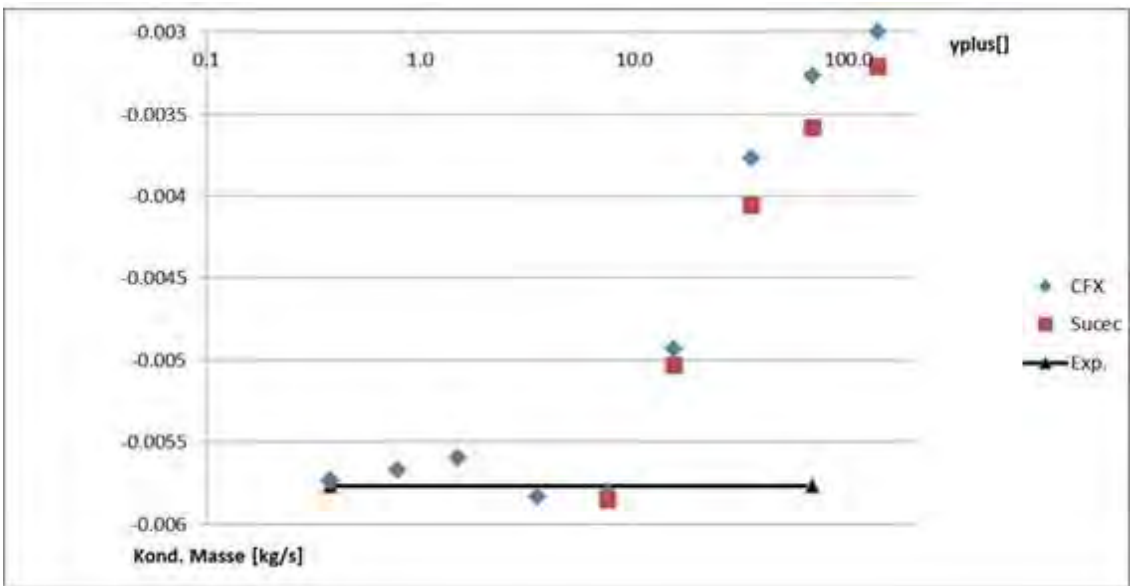
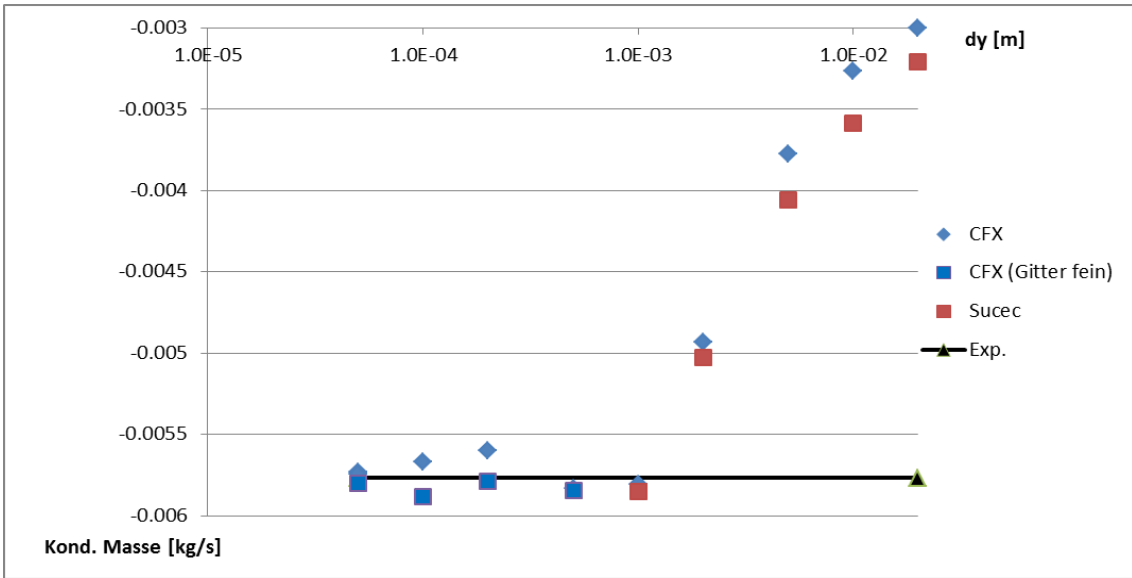
**Abb. 3.13** P20T30V25: Oberflächentemperatur bei den CFX-Wandfunktionen bei Verwendung der CFD-Gitter Nr. 9 und Nr. 9b



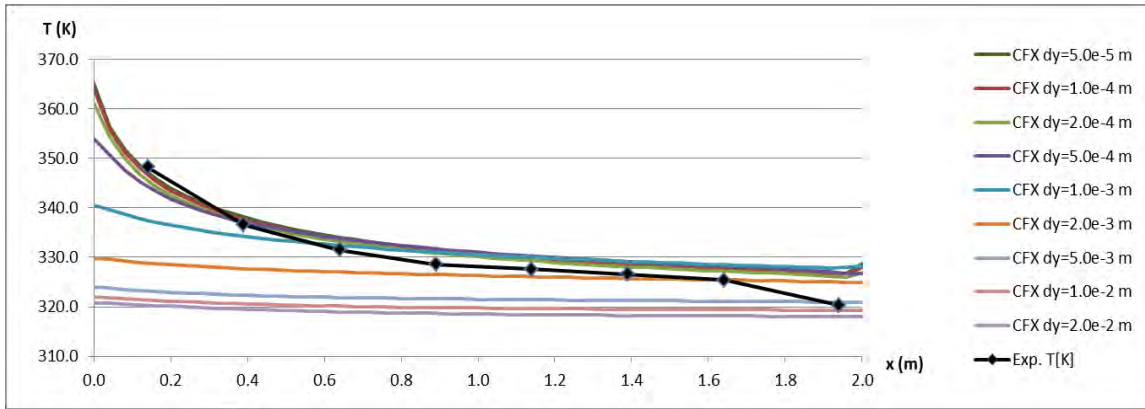
**Abb. 3.14** P20T30V25: Oberflächentemperatur bei den CFX-Wandfunktionen und den Sucec-Wandfunktionen bei Verwendung des CFD-Gitters Nr. 5



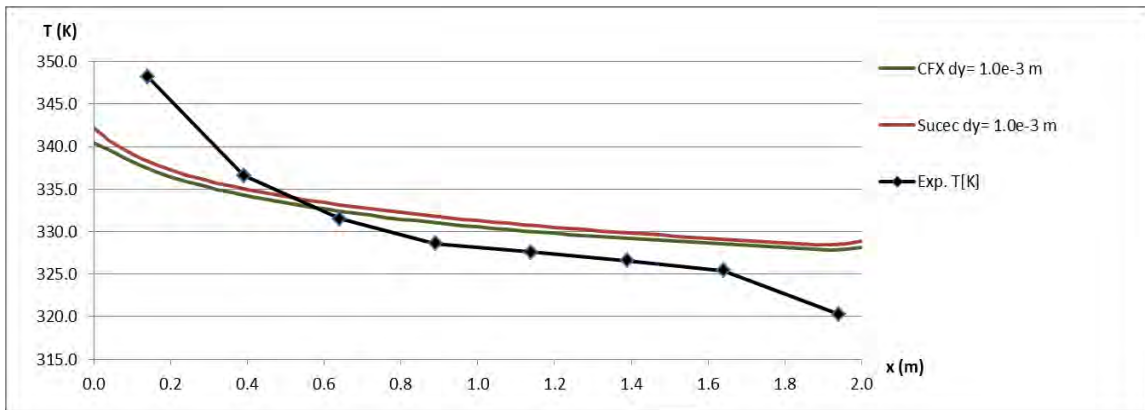
**Abb. 3.15** P20T30V25: Oberflächentemperatur bei den CFX-Wandfunktionen und den Sucec-Wandfunktionen bei Verwendung des CFD-Gitters Nr. 2



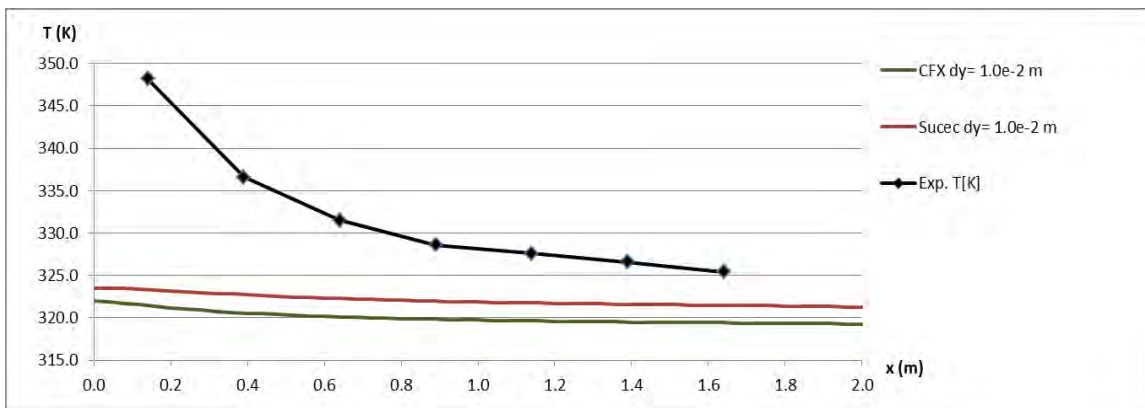
**Abb. 3.16** P20T30V25: Kondensationsrate über der Zelldicke  $dy$  der ersten Gaszelle (oben) und über  $y^+$  (unten)



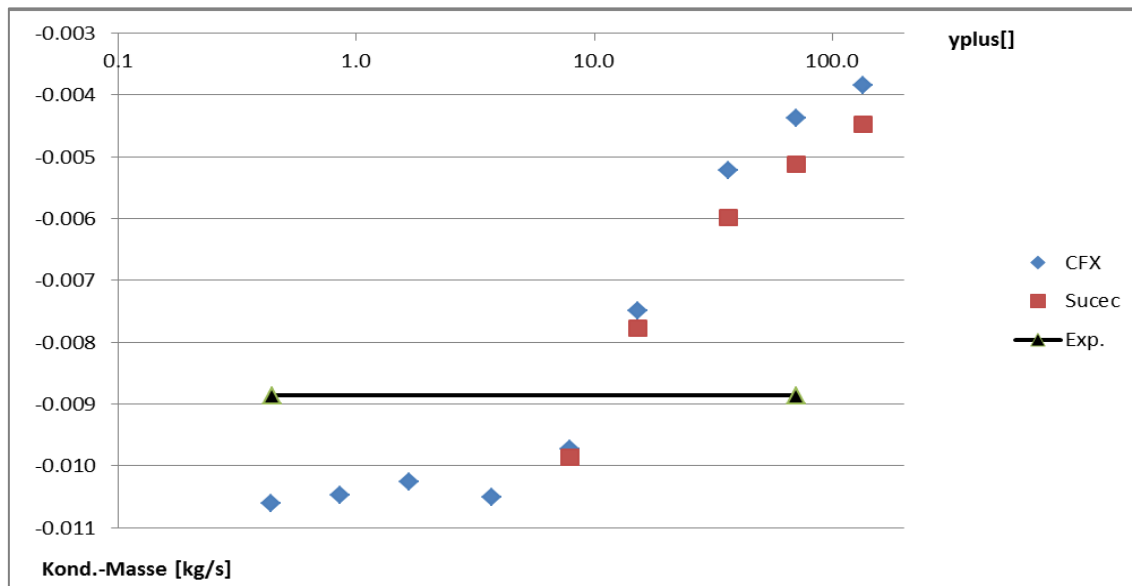
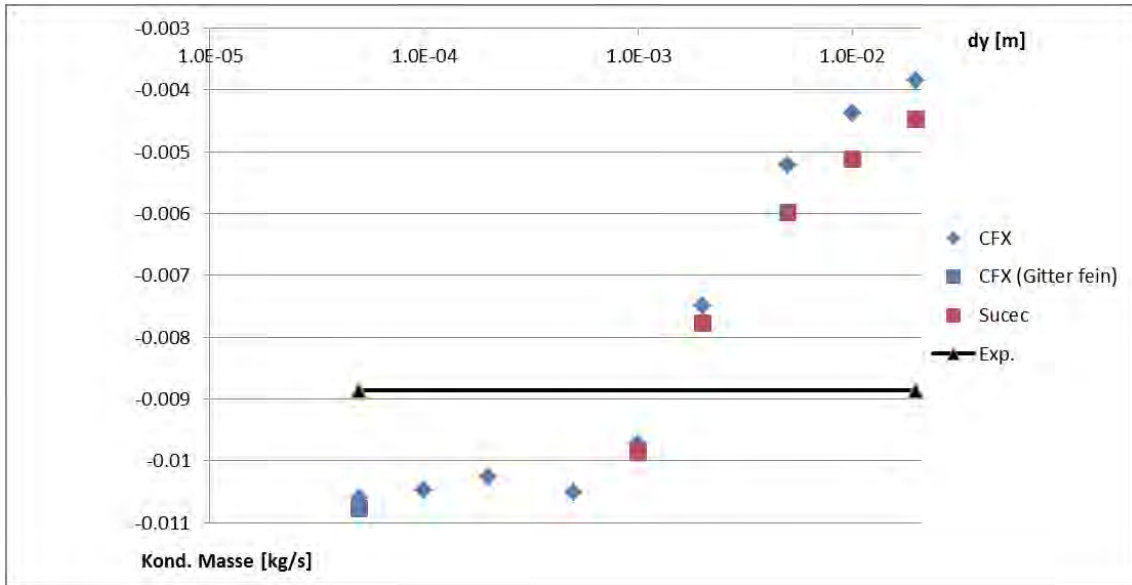
**Abb. 3.17** P30T30V25: Oberflächentemperatur bei Verwendung der CFX-Wandfunktionen in Abhängigkeit vom CFD-Gitter



**Abb. 3.18** P30T30V25: Oberflächentemperatur bei den CFX-Wandfunktionen und den Sucec-Wandfunktionen bei Verwendung des CFD-Gitters Nr. 5



**Abb. 3.19** P30T30V25: Oberflächentemperatur bei den CFX-Wandfunktionen und den Sucec-Wandfunktionen bei Verwendung des CFD-Gitters Nr. 2



**Abb. 3.20** P30T30V25: Kondensationsrate über der Zelldicke  $dy$  der ersten Gaszelle (oben) und über  $y^+$  (unten)

### 3.3.4 Zusammenfassung

Die CONAN-Versuche P10T30V25, P20T30V25 und P30T30V25 wurden mit CFX-16 bei Verwendung des SST-Turbulenzmodells nachgerechnet, wobei jeweils die in CFX implementierten Wandfunktionen und die Sucec-Wandfunktionen zum Einsatz kamen. Durch eine Variation der Gitterfeinheit ( $5.0e-5 \text{ m} \leq dy \leq 0.02 \text{ m}$ ) konnte untersucht werden, wie sich die Wandfunktionen bei unterschiedlicher Gitterfeinheit auswirken, wobei angemerkt sei, dass bei den feinsten Gittern der Low-Reynolds-Ansatz beim SST-



Modell zur Anwendung kommt. Bei den Simulationen mit der Sucec-Wandfunktion wurde für sehr feine Gitter ( $dy < 1.0e-3 \text{ m} / y^+ < 10$ ) keine konvergente Lösung erzielt, bei Verwendung der in CFX implementierten Wandfunktionen konnte dagegen bei allen Simulationen Konvergenz erreicht werden. Bei gröberen Gittern ( $dy \geq 5.e-3 \text{ m} / y^+ > 30$ ) konnte durch Verwendung der Sucec-Wandfunktion eine leichte Verbesserung bei der Vorhersage der Wandkondensationsrate und auch bei dem Oberflächentemperaturprofil erzielt werden. Es verbleibt aber in allen Fällen noch eine unterschiedlich große Abweichung von den experimentellen Werten. Der Unterschied zwischen den Ergebnissen mit CFX-Wandfunktionen und denen mit Sucec-Wandfunktionen nimmt mit zunehmender Stärke der Kondensation zu, was physikalisch sinnvoll erscheint, da in diesem Fall auch das Geschwindigkeits-/Temperaturprofil in der wandnahen Schicht an der gekühlten Wand stärker durch die Kondensation modifiziert wird. Die erzielten Ergebnisse stehen im Einklang mit den Erkenntnissen der RWTH Aachen /LEH 14/, /ALL 16/.

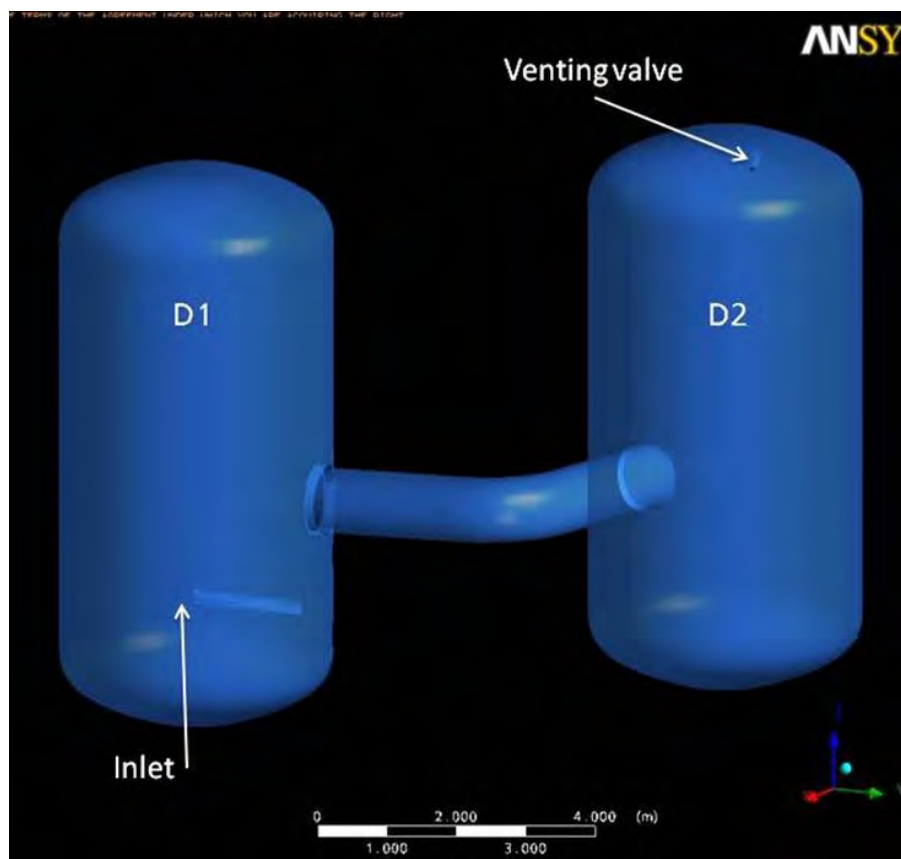
### **3.4 Nachrechnung des Panda4bis-Experiments mit den Sucec-Wandfunktionen**

#### **3.4.1 Einleitung**

Neben der Erprobung der Sucec-Wandfunktionen anhand der CONAN-Experimente soll auch noch eine Validierung anhand des Panda4bis-Experiments erfolgen. Das Experiment unterscheidet sich nicht nur hinsichtlich seiner Größe deutlich von den CONAN-Experimenten. Während bei den CONAN Experimenten eine konvektive Strömung parallel zu einer gekühlten Wand vorlag, liegen beim Panda4bis sehr unterschiedliche Strömungsverhältnisse an den Wänden vor: Ein heißer Dampfstrahl trifft auf eine kühlere Wand, es gibt Bereiche mit einer starken Strömung parallel zur kühleren Wand (z. B. im Verbindungsrohr) und Bereiche, in denen nur eine sehr schwache Strömung an der Wand vorliegt. Aufgrund der unterschiedlichen Strömungsbedingungen ist das Experiment geeignet, die Sucec-Wandfunktionen für containmentähnliche Bedingungen zu validieren. Neben der genauen Berechnung der Wandkondensationsrate soll auch die numerische Stabilität untersucht werden.

### 3.4.2 Kurze Beschreibung des Experiments

Zu Beginn des Versuchs befindet sich in beiden Behältern (Abb. 3.21) Luft mit einer Temperatur von ca. 76 °C. Im unteren Bereich des ersten Behälters befindet sich ein horizontales Rohr, durch das Dampf mit einem Massenstrom von ~ 54 g/s und einer Temperatur von ca. ~108° C eingespeist wird (Abb. 3.22). Durch ein Ventil im oberen Bereich des 2. Behälters wird der Druck konstant auf 1.3 bar gehalten. Durch die niedrigere Temperatur der Luft und der Behälterwände treten im Laufe des Experiments Kondensationsvorgänge auf. Die Dampfkonzentration und die Temperatur werden an verschiedene Messstellen im ersten (D1) und zweiten Behälter (D2) sowie im Verbindungsrohr gemessen. Das Experiment wurde bereits im Rahmen der Forschungsprojekte RS1181 und RS1500 simuliert. In den entsprechenden Abschlussberichten /SCH 10/, /SCH 14//SCH 10/ sowie in den Berichten /ZBO 06/ und /AUB 05/ sind weitere Einzelheiten zum Experiment zu finden.

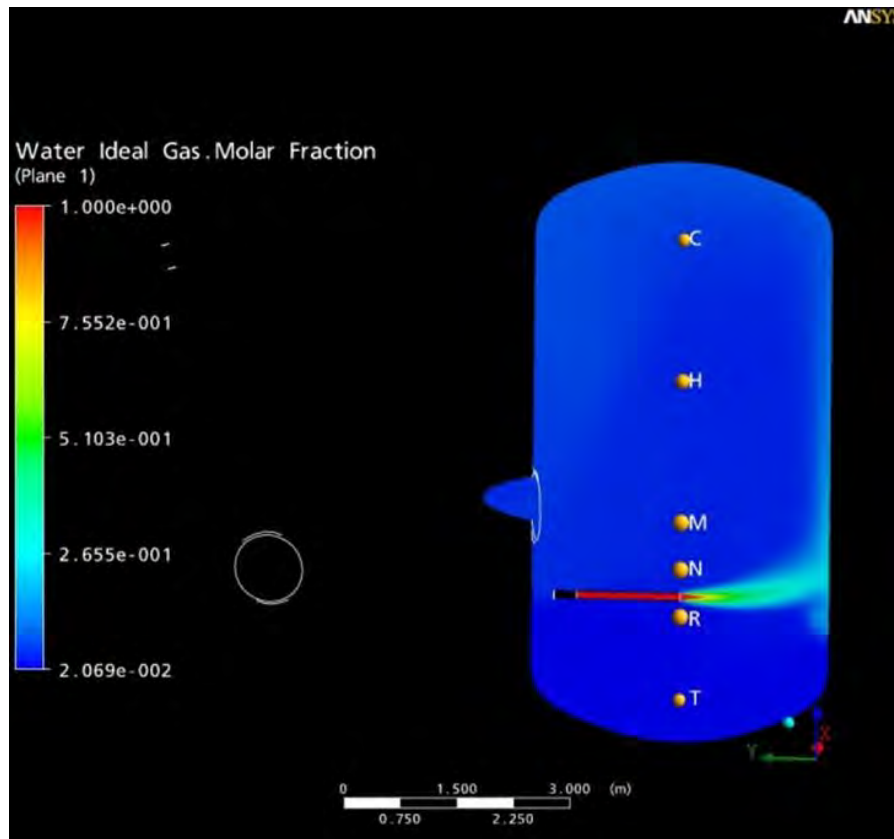


**Abb. 3.21** Vereinfachte Geometrie des Panda4bis Experiments

### 3.4.3 Modellierung mit CFX

Die Simulation des Experiments erfolgte mit den Standardmodellen. Die Turbulenz wurde mit dem SST-Modell (einschließlich des Produktion- und des Dissipation-Terms) modelliert. Die Diffusion von Wasserdampf in Luft wurde mit der Fuller-Korrelation berechnet. Die Wärmestrahlung wurde mit dem Discrete-Transfer-Modell simuliert. Der Absorptionskoeffizient für Dampf wurde durch eine in RS1500 /SCH 14/ hergeleitete Korrelation ( $T, P$ ) berechnet. Bei den hier vorherrschenden Temperaturen und Drücken ergibt sich ein Absorptionskoeffizient von ca.  $1 \text{ m}^{-1}$ . Die Starttemperatur für das Gas wurde durch Interpolation der Messstellen initialisiert. Es wurde eine mittlere Wandtemperatur von  $76.5 \text{ }^\circ\text{C}$  angenommen. Die Wandkondensation wird mit dem in ANSYS implementierten Wandkondensationsmodell berechnet, Volumenkondensation und Verdampfung mit dem modifizierten IKE-Volumenkondensationsmodell einschließlich des Algebraic Slip Modells für die Tröpfchen (siehe Kapitel 0).

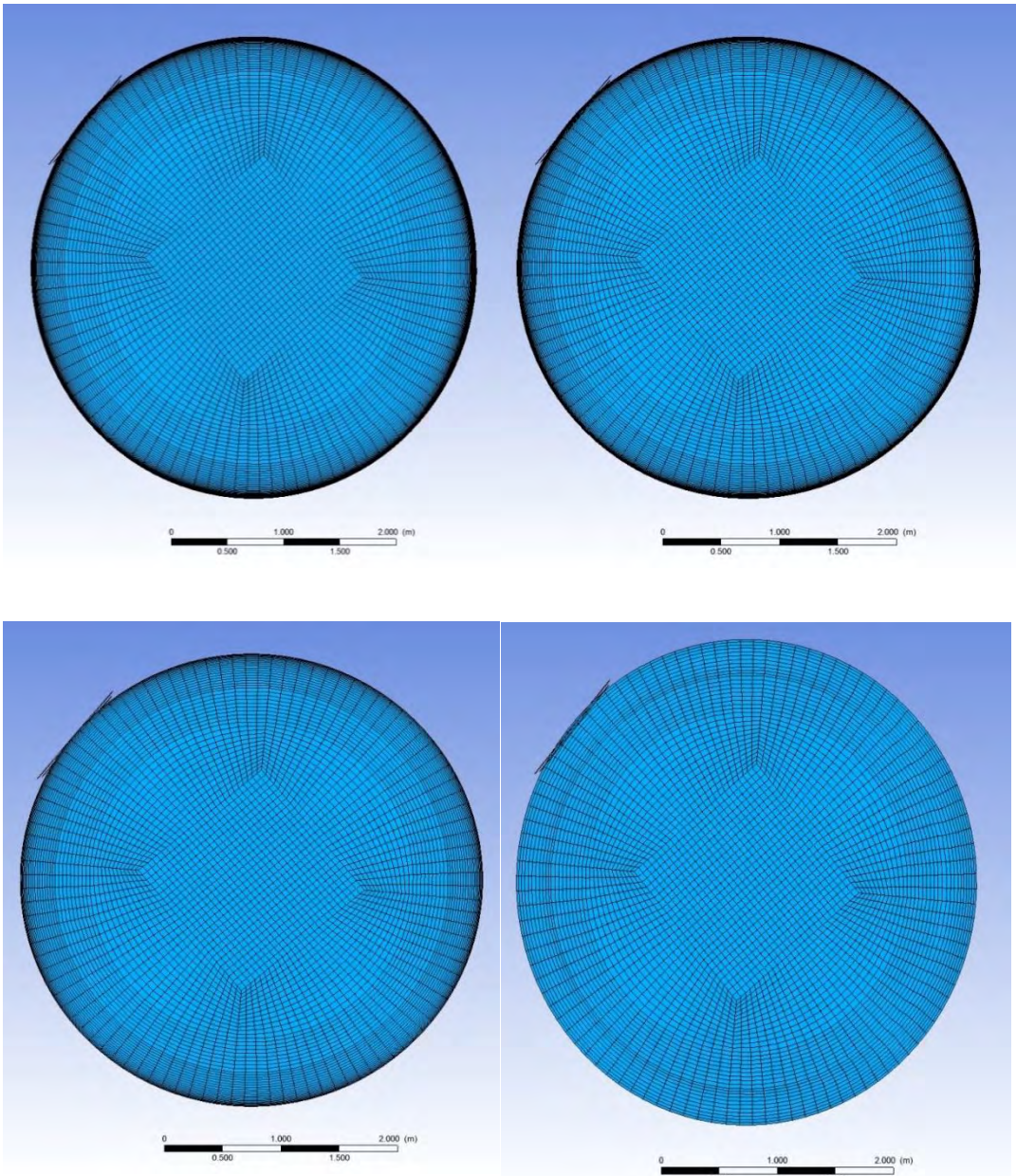
Die Nachrechnungen erfolgten auf vier unterschiedlichen CFD-Gittern (Tab. 3.4), jeweils mit den in CFX implementierten Wandfunktionen und mit den Sucec-Wandfunktionen. Alle Gitter bestehen ausschließlich aus Hexaedern. Die Gitterfeinheit parallel zu den Behälterwänden ist in allen Gittern gleich. Die Gitterfeinheit an der Grenzfläche Gas/Wand ist allerdings unterschiedlich. Die Dicke der ersten Gaszelle variiert im Bereich  $5.0\text{e-}4 \text{ m} \leq dy \leq 2.0\text{e-}2 \text{ m}$ . In Abb. 3.23 ist die horizontale Vernetzung im 1. Behälter zu sehen.



**Abb. 3.22** Schnitt durch den ersten PANDA-Behälter mit Darstellung einer Auswahl der Messpunkte

**Tab. 3.4** CFD-Gitter bei Panda4bis

Nummer	dy [m]	Anzahl der Zellen in Millionen
1	5.0e-4	1.586
2	1.0e-3	1.496
3	5.0e-3	1.230
4	2.0e-2	1.018



**Abb. 3.23** CFD-Gitter in der Gas-Domain im 1. PANDA-Behälter bei den Gittern Nr. 1 (oben links), Nr. 2 (oben rechts), Nr. 3 (unten links) und Nr. 4 (unten rechts)

### 3.4.4 Simulationsergebnisse

Alle Simulationen konnten ohne numerische Probleme durchgeführt werden. Unabhängig von der Wahl der Wandfunktionen kam es im Verlauf der Simulationen zu Schwankungen im Strömungsfeld, die dazu führen, dass die Zeitschrittweite auf unter 0.01 s absank, während ohne diese Schwankungen auch mit Zeitschritten von 0.05 s –

0.1 s eine konvergente Lösung erzielt werden konnte. Die Schwankungen sind insbesondere beim feinsten Gitter (Nr. 1) am stärksten ausgeprägt.

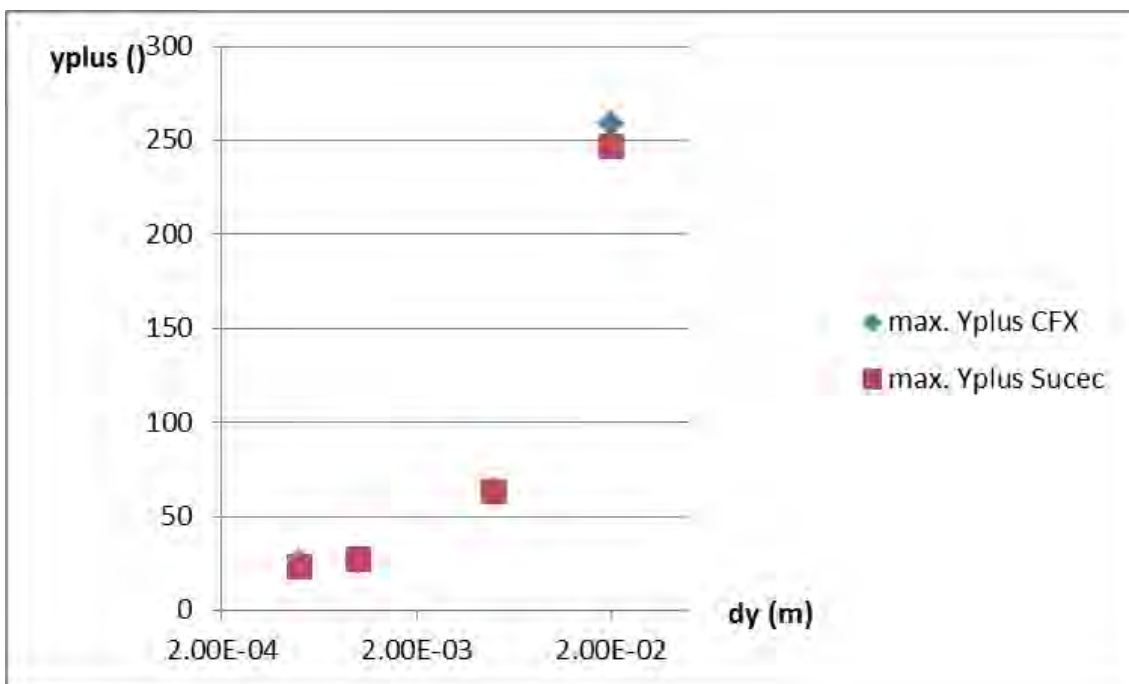
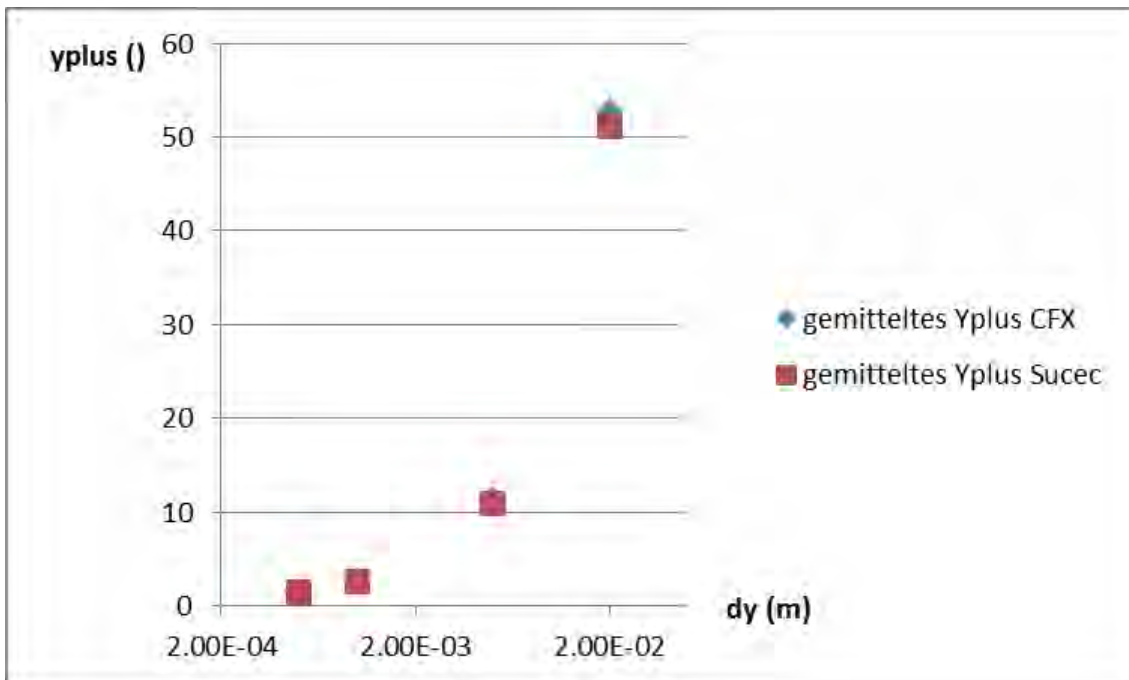
Die  $y^+$ -Werte für die Simulationen wurden für unterschiedliche Zeitpunkte ausgewertet. Da sich die Dampfeinspeisung in den PANDA-Behälter im zeitlichen Verlauf des Experiments nur geringfügig ändert, sind die in Abb. 3.24 dargestellten Werte für  $y^+$  repräsentativ. Es ist allerdings zu beachten, dass die  $y^+$ -Werte räumlich stark schwanken (Abb. 3.25). Bei allen Simulationen gibt es Bereiche, in denen die Wandfunktionen zum Einsatz kommen ( $\max. y^+ > 20$  bei Simulationen mit  $dy = 5.0e-4$  m) und Bereiche, in denen  $y^+ < 1$  ist. Im Gegensatz zu den CONAN-Experimenten lässt sich der Einfluss der Wandfunktionen auf das Simulationsergebnis bei unterschiedlicher Gitterfeinheit nicht mehr so einfach interpretieren.

Die wichtigste Zielgröße beim Vergleich ist die Wandkondensationsrate, da das Ziel der vorliegenden Arbeiten ist, Wandfunktionen zu implementieren, bei denen die Wandkondensationsrate auch bei gröberer räumlicher Diskretisierung in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet wird.

Abgesehen von den zeitlichen Oszillationen sind die räumlich integrierten Wandkondensationsraten bei allen Simulationen sehr ähnlich (Abb. 3.26). Es sind praktisch keine Unterschiede zwischen Simulationen mit dem „Automatic Wall Treatment“ von CFX und den Sucec-Wandfunktionen zu erkennen (Abb. 3.27 – Abb. 3.30). Da ein quantitativer Vergleich aufgrund der Oszillationen schwierig ist, wurde zusätzlich eine zeitliche Integration vorgenommen. Die in Abb. 3.31 bis Abb. 3.36 dargestellten Massen entsprechen dem bis zum jeweiligen Zeitpunkt durch Wandkondensation gebildeten Wasser. Die Kondensatmassen sind bei Wahl des gleichen Gitters nahezu unabhängig von der Wahl der Wandfunktionen. Bei Verwendung des größten Gitters (Nr. 4) ist die Wandkondensationsrate etwas niedriger als bei den übrigen Simulationen, die Volumenkondensationsrate ist dagegen etwas höher (Abb. 3.37). Eine Erklärung hierfür ist, dass in unmittelbarer Wandnähe ( $dy = 5.0e-3$  m) Volumenkondensation nicht stattfinden soll und Wassertröpfchen in diesem Bereich durch einen zusätzlichen Term in der Erhaltungsgleichung verschwinden. Dadurch wird sichergestellt, dass die Tröpfchenkonzentration an der Wand klein bleibt, weil das ANSYS-Wandkondensationsmodell bei Vorliegen von nicht gasförmigen Stoffen an der Wand die Kondensationsrate zu niedrig berechnet (siehe Abschnitt 4.9.4). Bei den feineren Gittern (Nr. 1 – Nr. 3) liegt dieser Bereich ohne Volumenkondensation in einer bzw. mehreren Gitterzellen. Beim größten Gitter (Nr. 4) ist die Zelldicke mit 0.02 m viermal so groß wie dieser Bereich,

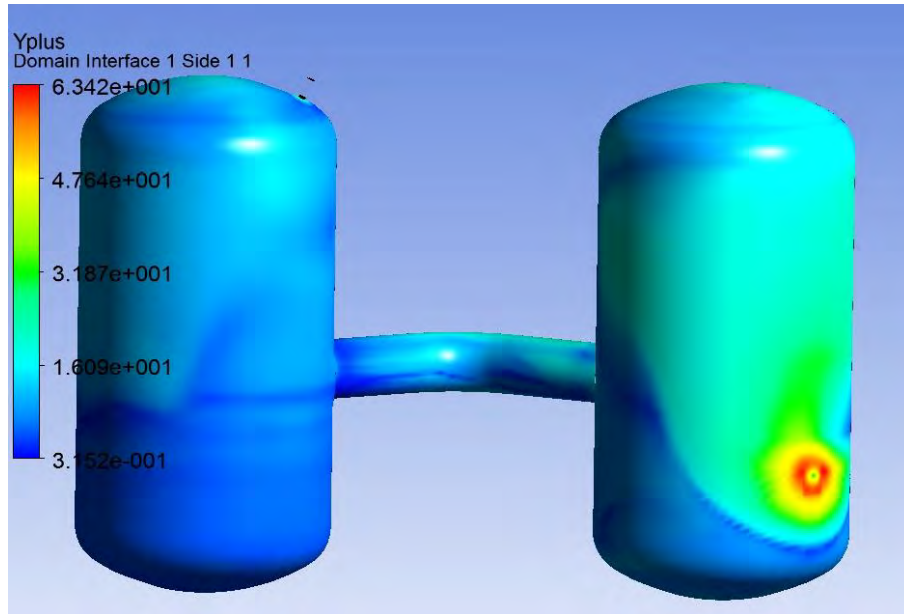
was nicht dem Modellierungsansatz entspricht. Eigentlich hätte bei dieser Simulation der Bereich ohne Volumen Kondensation auf mindestens 0.02 m vergrößert werden müssen. Um die Modellierung in allen Fällen gleich zu halten, wurde aber darauf verzichtet.

Wie schon die integrale Wandkondensationsrate sind die Dampfkonzentrationen und Temperaturen an fast allen Monitorpunkten nahezu unabhängig von der Wahl der Wandfunktionen. Exemplarisch ist dies anhand des Punktes DW1 B20 im 1. Behälter dargestellt (Abb. 3.38 – Abb. 3.41). Ausnahme ist der untere Bereich des 2. Behälters (DW2 R20, Abb. 3.42 – Abb. 3.45). Dieser Bereich ist aber wenig zur Modellvalidierung geeignet, da das an den Wänden nach unten laufende Kondensatwasser nicht simuliert wird. Dies ist laut /CAC 07/ ein Prozess, der die Dampfkonzentration im unteren Bereich des 2. Behälter beeinflusst, da das abfließende Wasser teilweise wieder verdampft. Ein detaillierter Vergleich von Simulationsergebnissen mit experimentellen Daten und zusätzlichen Parameterstudien ist in Kapitel 4.9 und im Abschlussbericht von RS1500 /SCH 14/ zu finden.

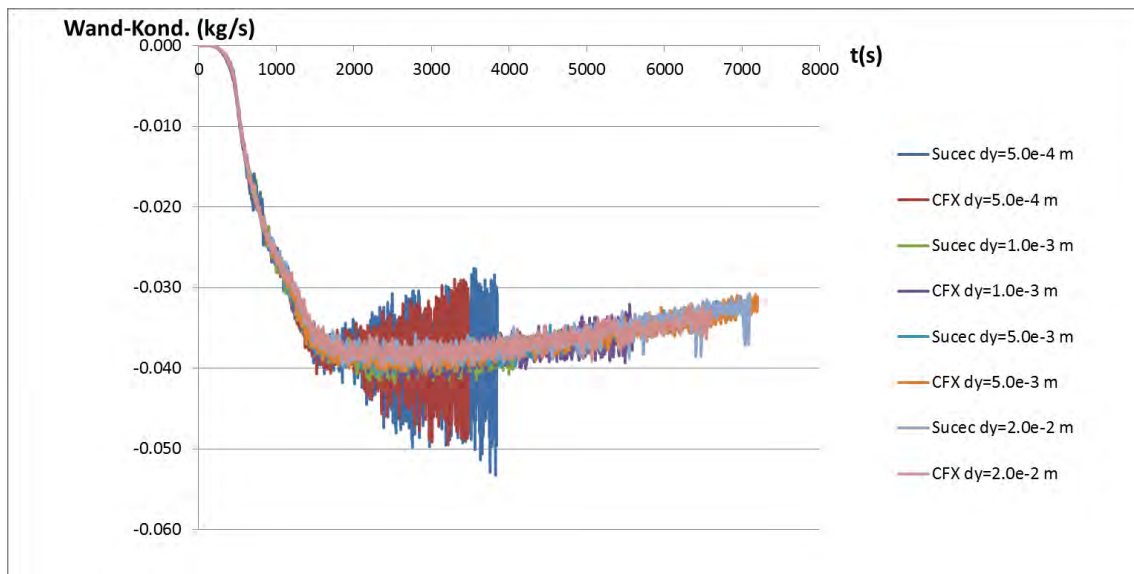


**Abb. 3.24** Mittleres (oben) und maximales (unten)  $y^+$  bei unterschiedlich feiner Gitterauflösung in Wandnähe (Auswertzeitpunkt  $t = 2000$  s)

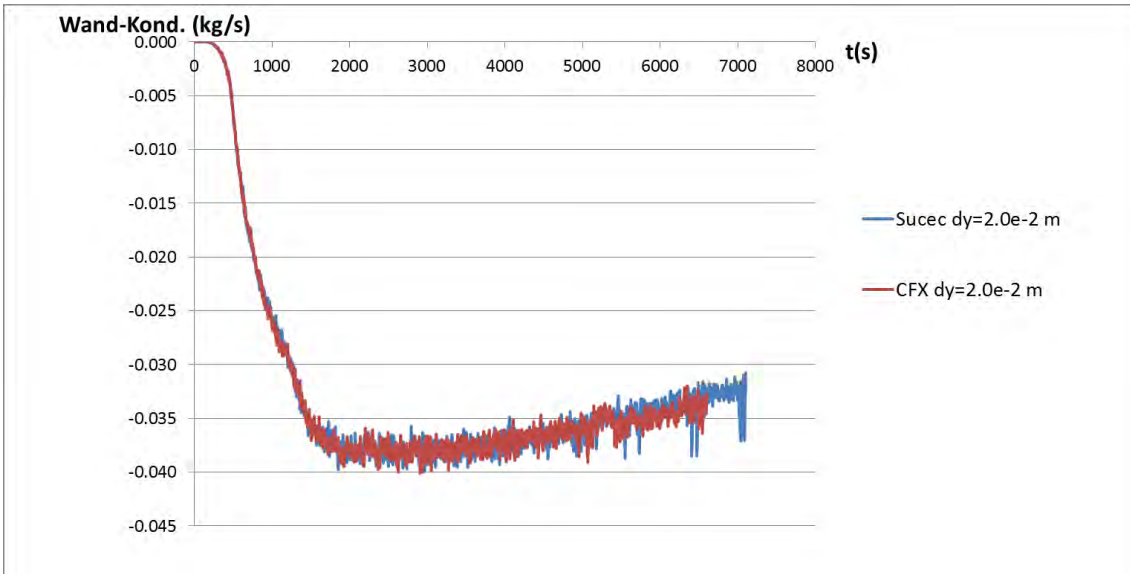




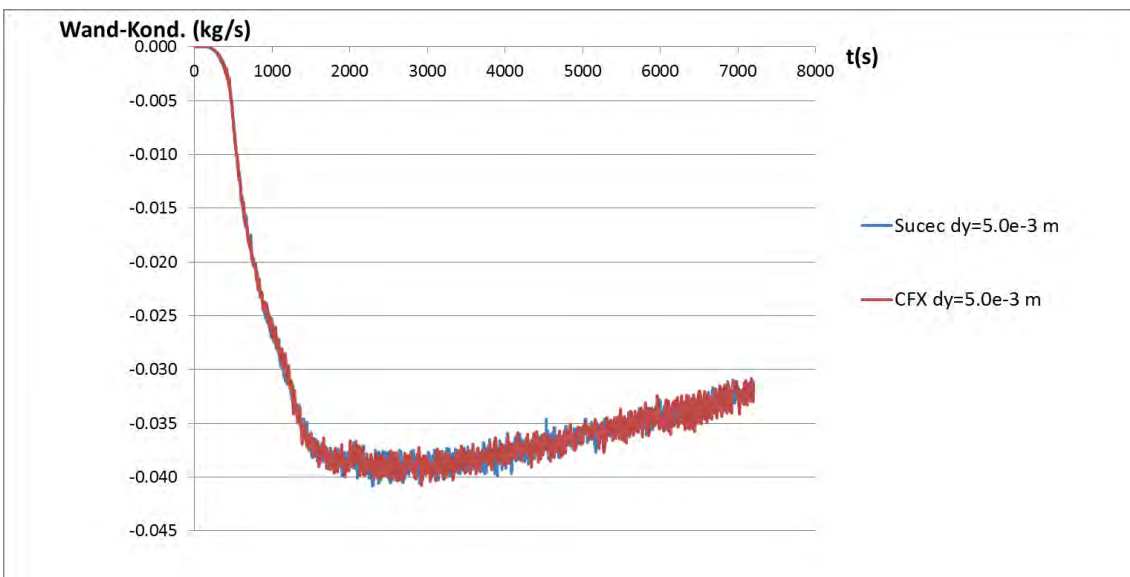
**Abb. 3.25**  $y^+$  nach 1500 s bei der Simulation mit den Sucec-Wandfunktionen bei der Simulation mit  $dy = 5.0e-3$  m



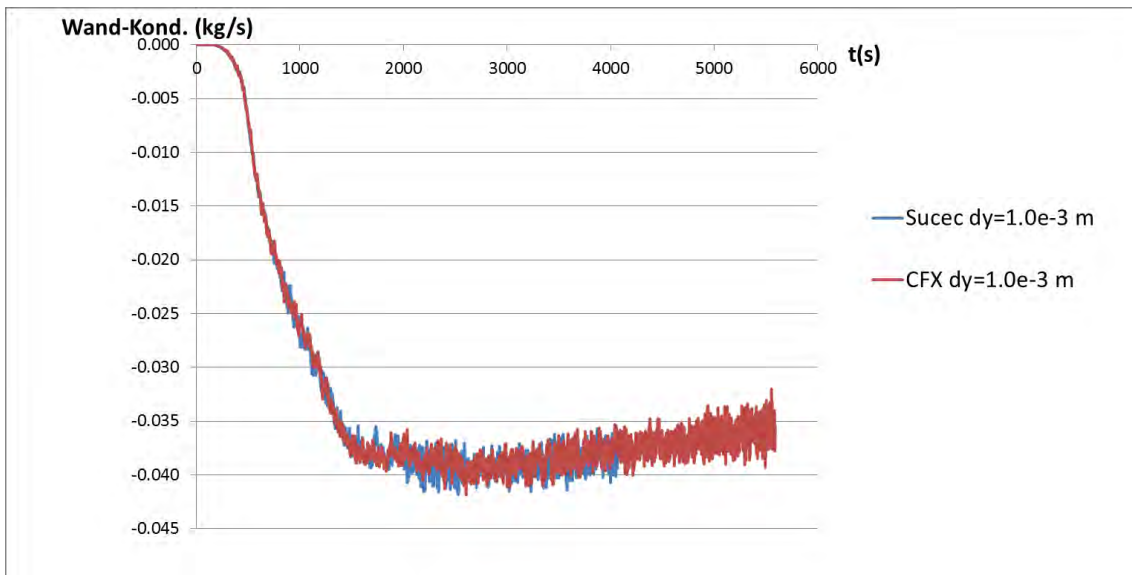
**Abb. 3.26** Räumlich integrierte Wandkondensationsrate bei unterschiedlicher Gitterverfeinerung bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX



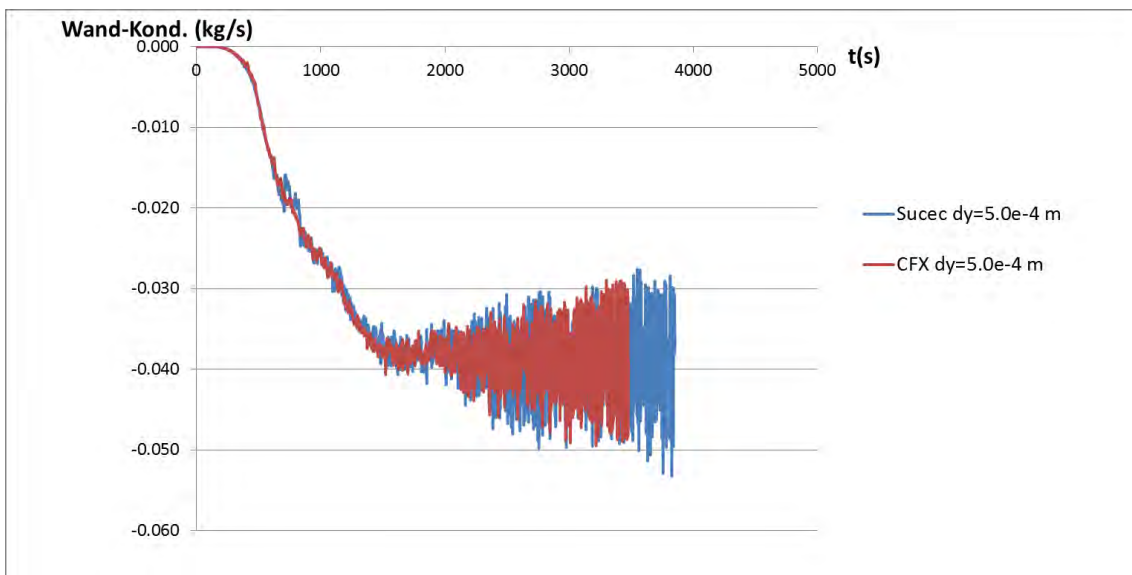
**Abb. 3.27** Räumlich integrierte Wandkondensationsrate bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und  $dy = 0.02 \text{ m}$



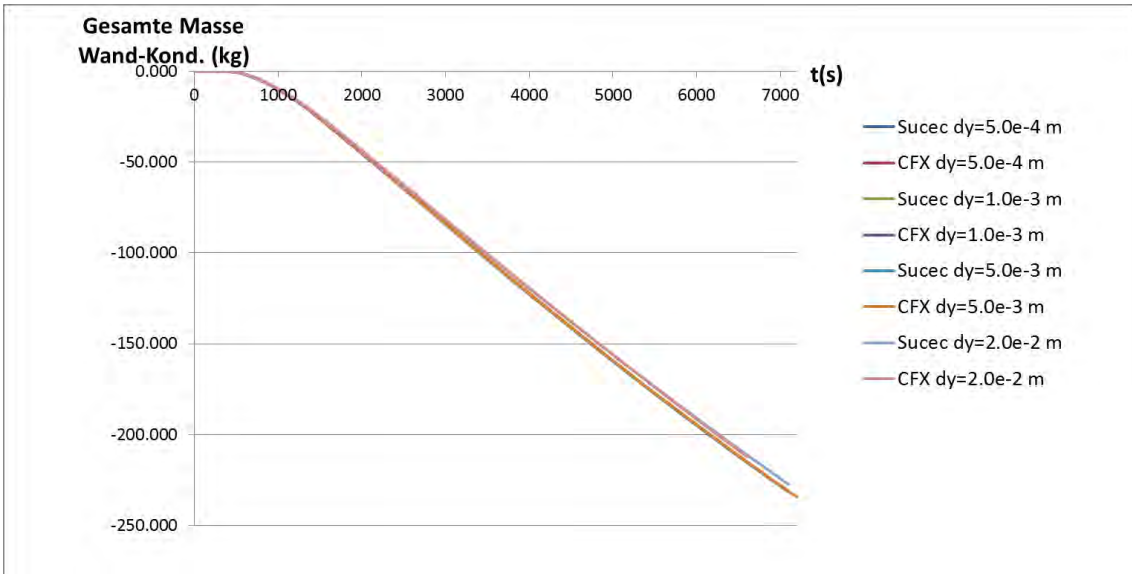
**Abb. 3.28** Räumlich integrierte Wandkondensationsrate bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und  $dy = 5.0e-3 \text{ m}$



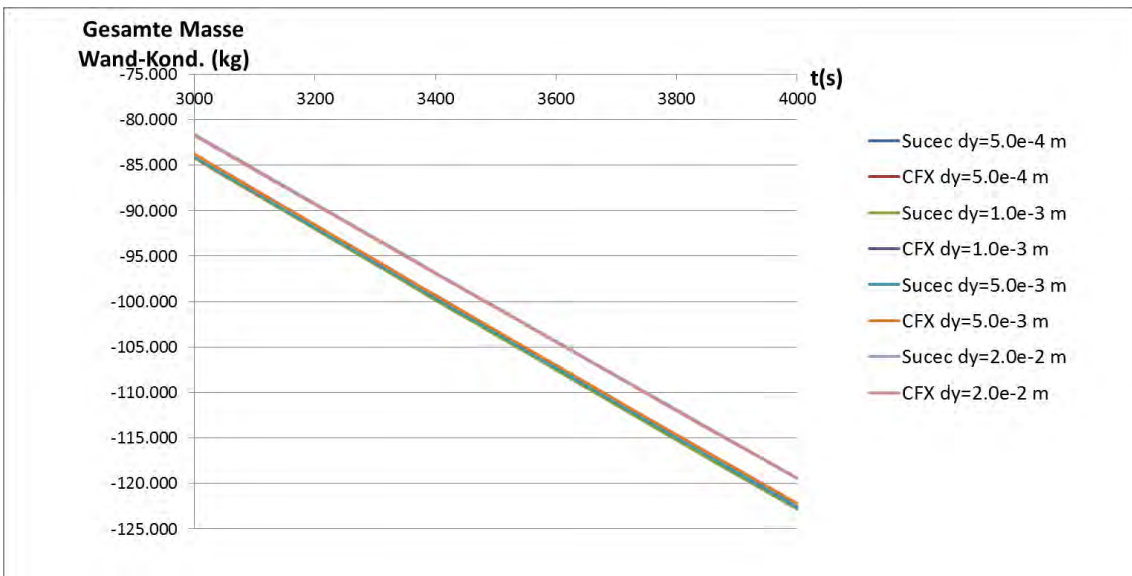
**Abb. 3.29** Räumlich integrierte Wandkondensationsrate bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und  $dy = 1.0e-3$  m



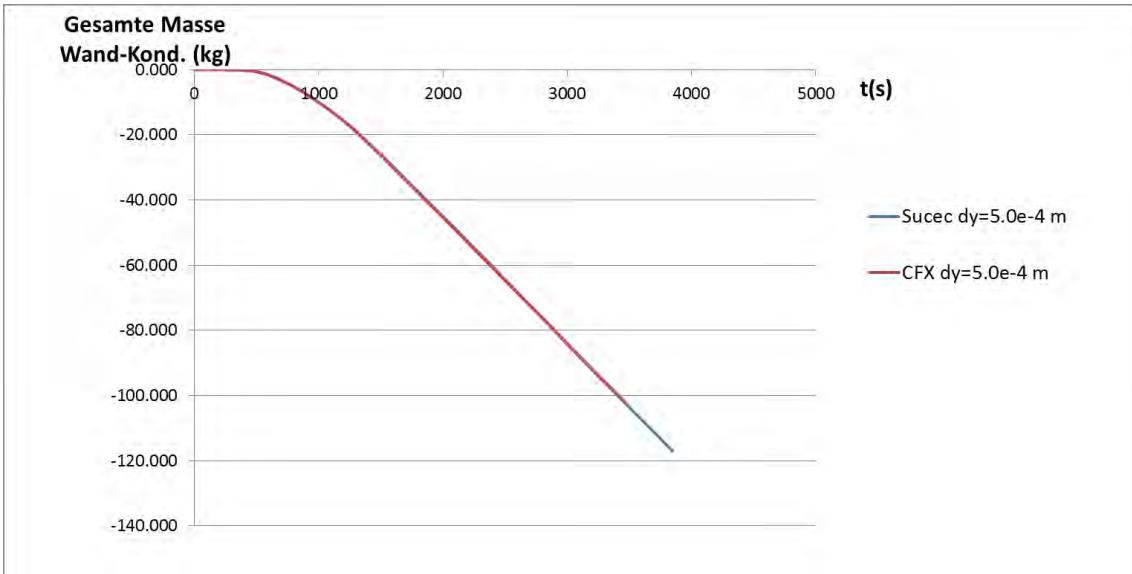
**Abb. 3.30** Räumlich integrierte Wandkondensationsrate bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und  $dy = 5.0e-4$  m



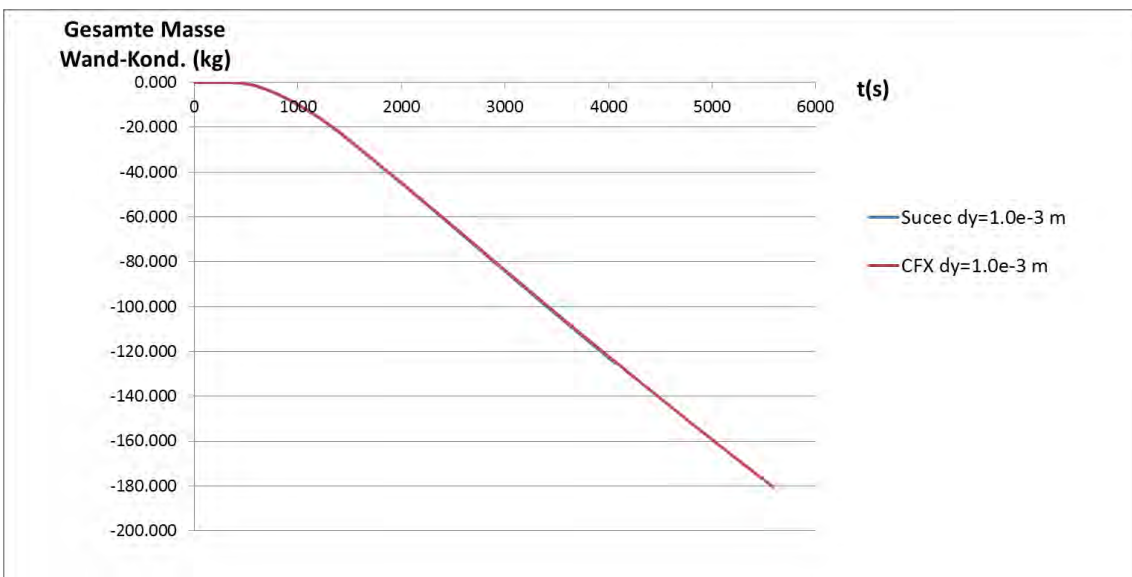
**Abb. 3.31** Räumlich und zeitlich integrierte Wandkondensationsrate bei unterschiedlicher Gitterfeinerung bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX



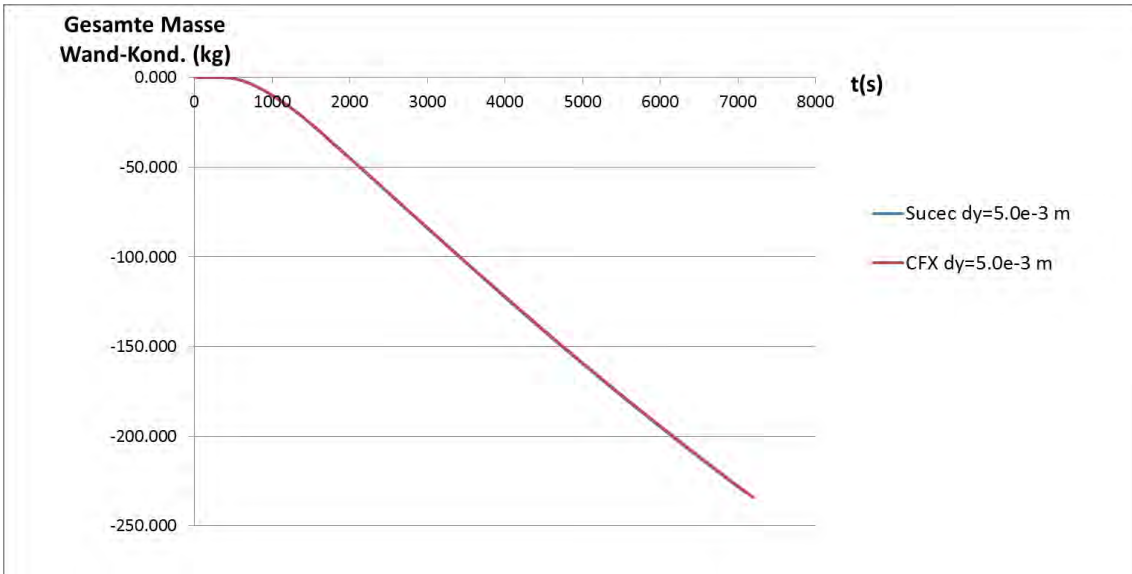
**Abb. 3.32** Räumlich und zeitlich integrierte Wandkondensationsrate bei unterschiedlicher Gitterfeinerung bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX (Zeitbereich: 3000 s – 4000 s)



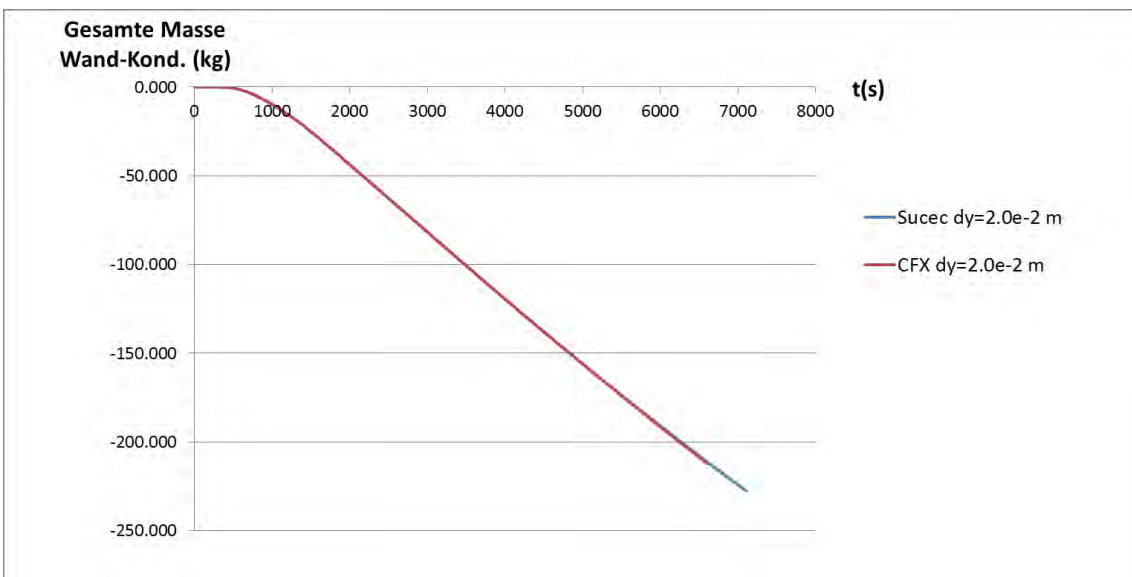
**Abb. 3.33** Räumlich und zeitlich integrierte Wandkondensationsrate bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und  $dy = 5.0e-4$  m



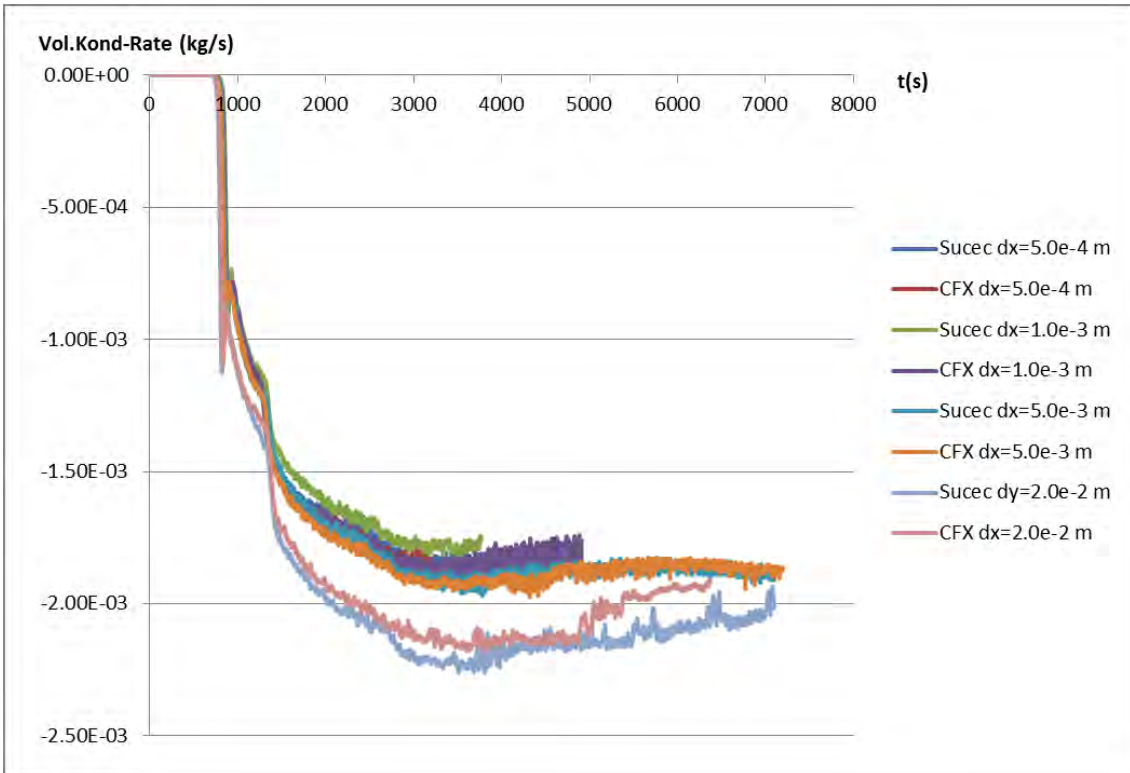
**Abb. 3.34** Räumlich und zeitlich integrierte Wandkondensationsrate bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und  $dy = 1.0e-3$  m



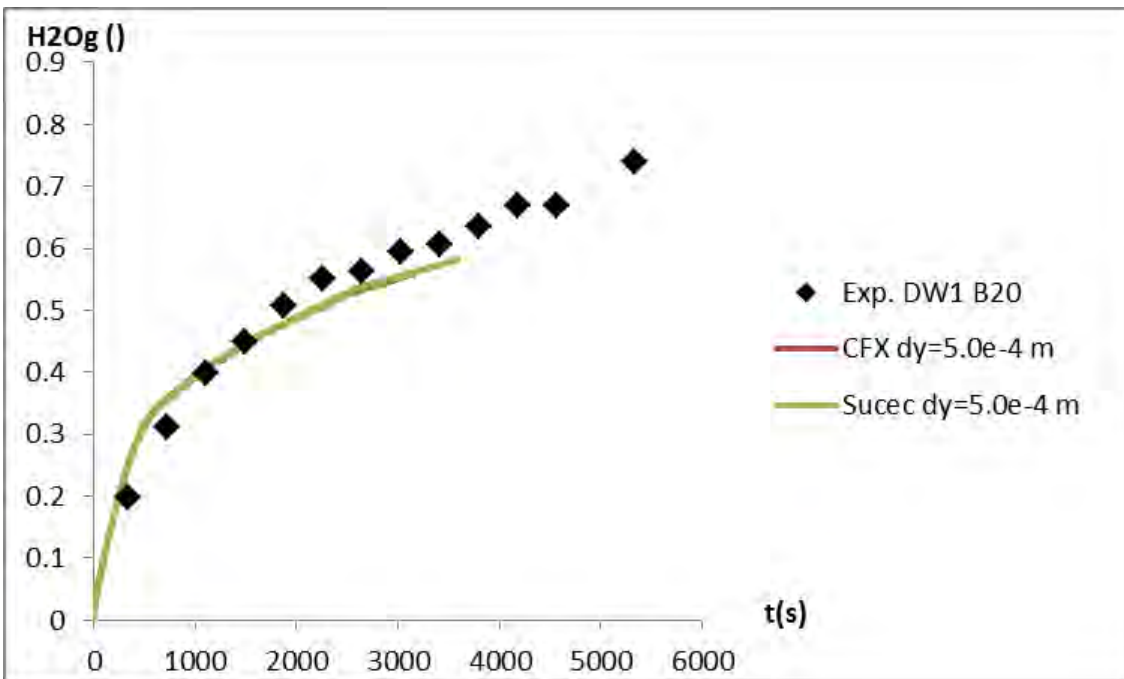
**Abb. 3.35** Räumlich und zeitlich integrierte Wandkondensationsrate bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und  $dy = 5.0 \times 10^{-3}$  m



**Abb. 3.36** Räumlich und zeitlich integrierte Wandkondensationsrate bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und  $dy = 0.02$  m

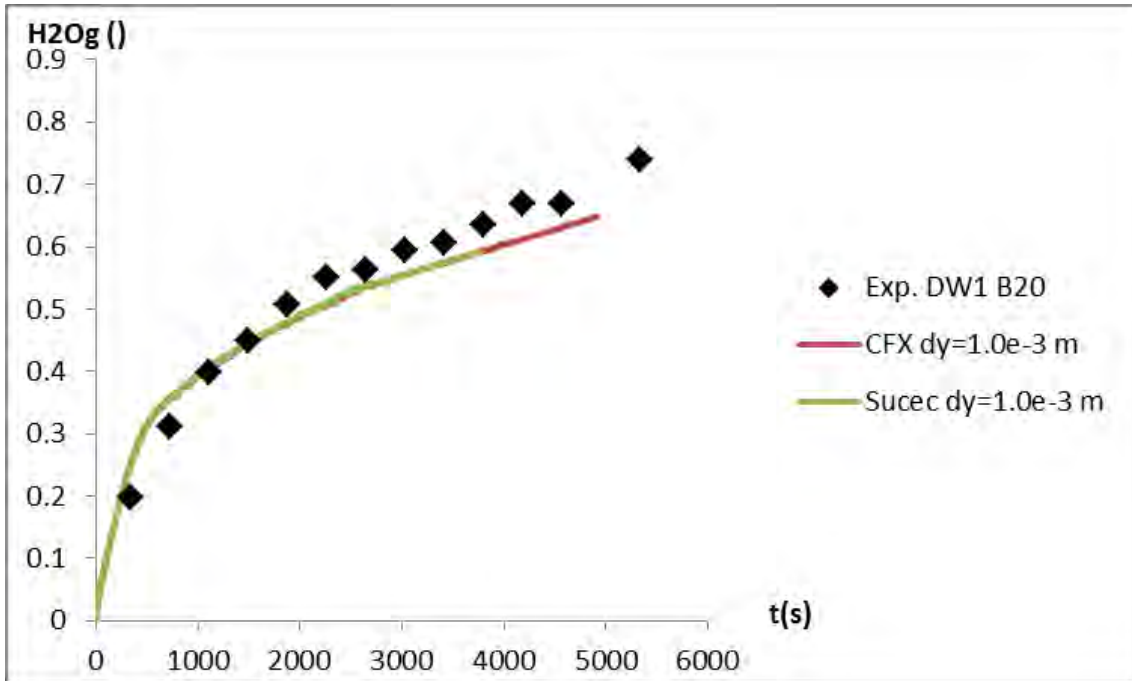


**Abb. 3.37** Volumenkondensationsrate bei unterschiedlicher Gitterverfeinerung bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX

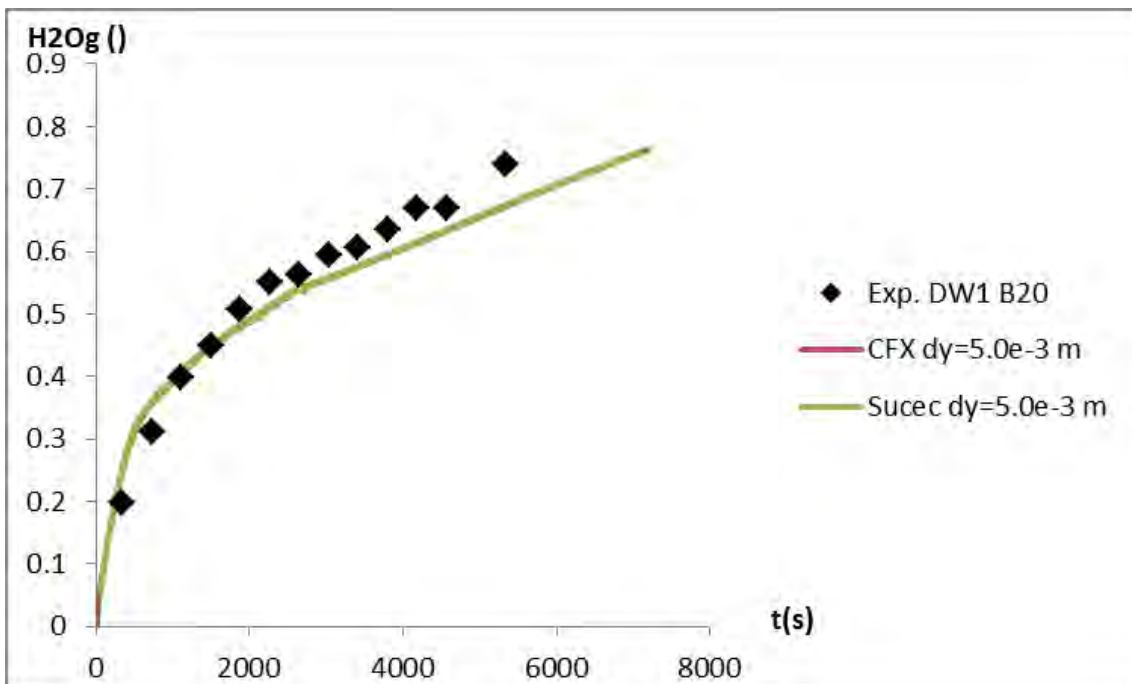


**Abb. 3.38** Molenbruch des Dampfes bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und  $dy = 5.0e-4$  m



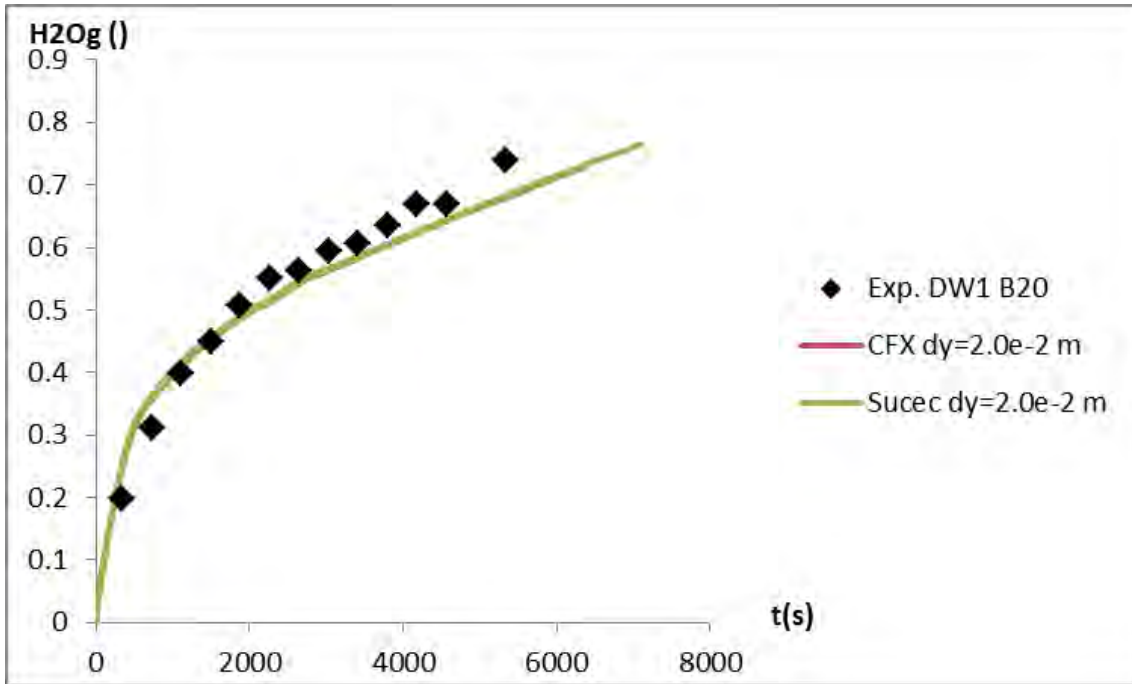


**Abb. 3.39** Molenbruch des Dampfes bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic-Walltreatment“ in CFX und  $dy = 1.0e-3$  m

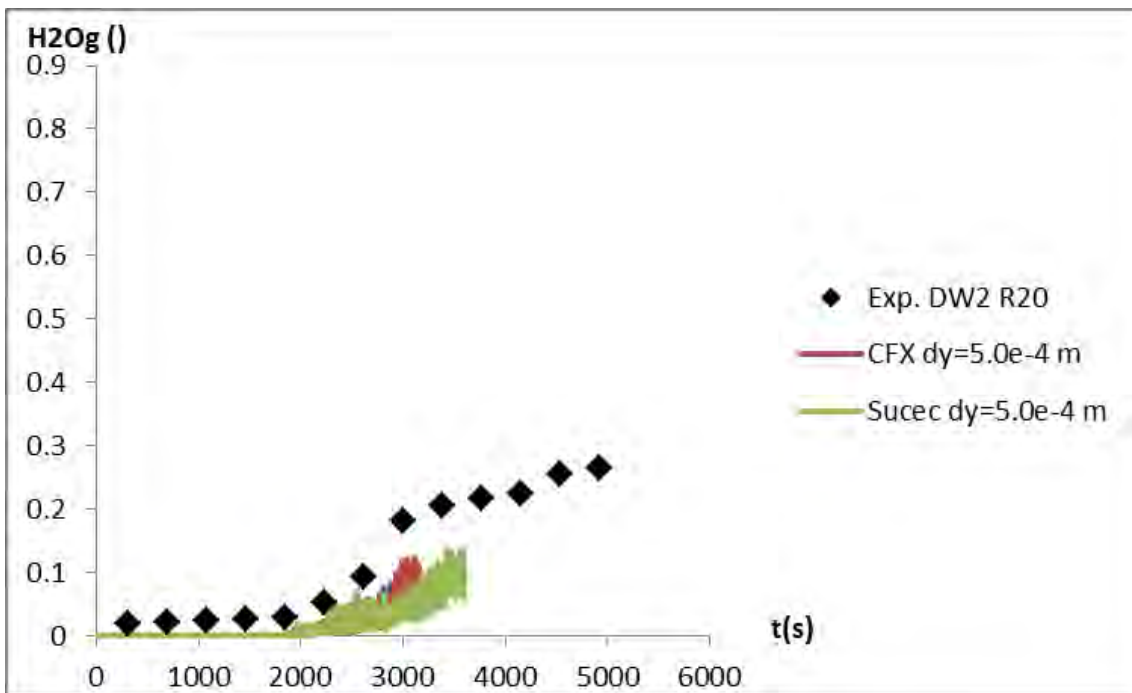


**Abb. 3.40** Molenbruch des Dampfes bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic-Walltreatment“ in CFX und  $dy = 5.0e-3$  m

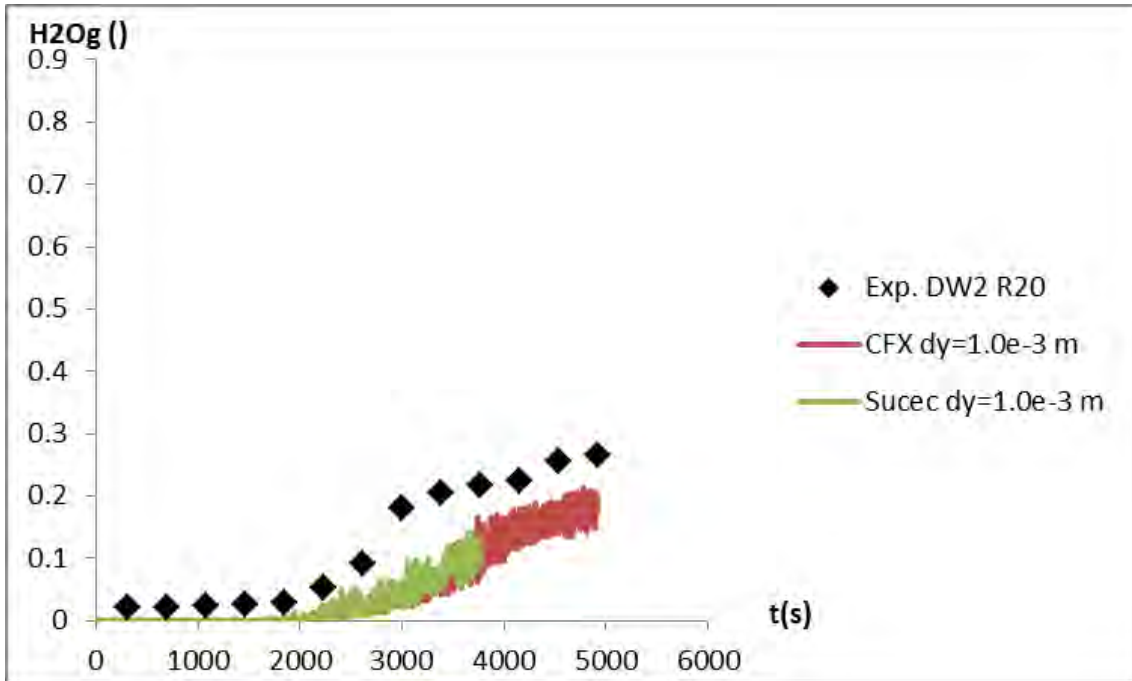




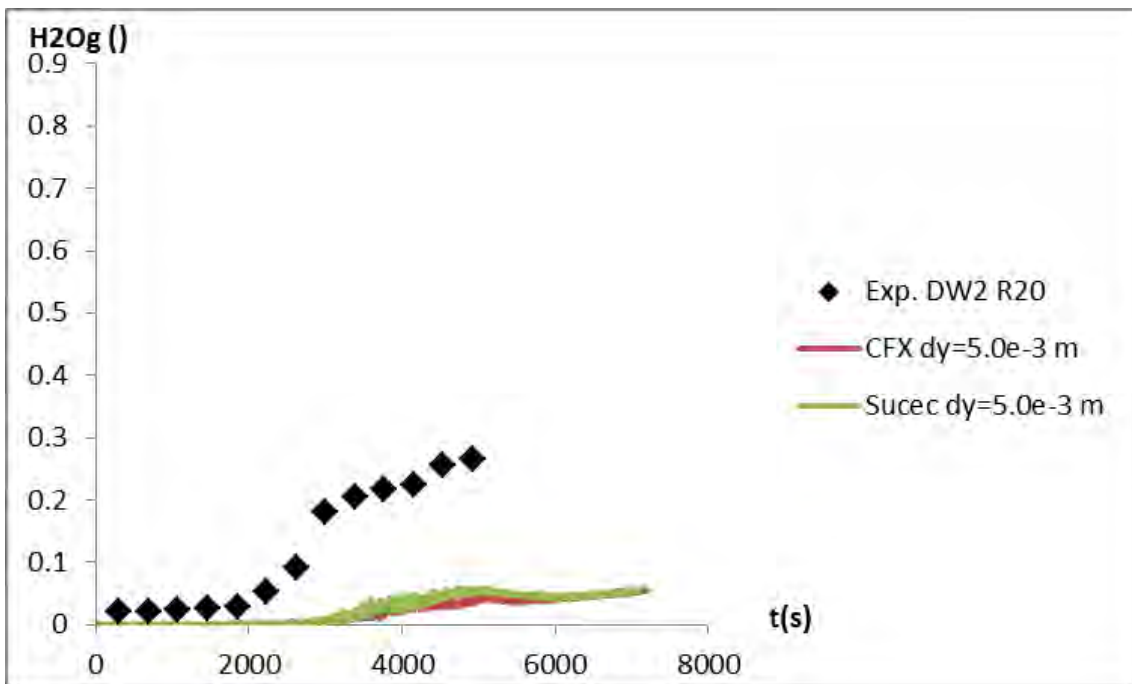
**Abb. 3.41** Molenbruch des Dampfes bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic-Walltreatment“ in CFX und  $dy = 0.02 \text{ m}$



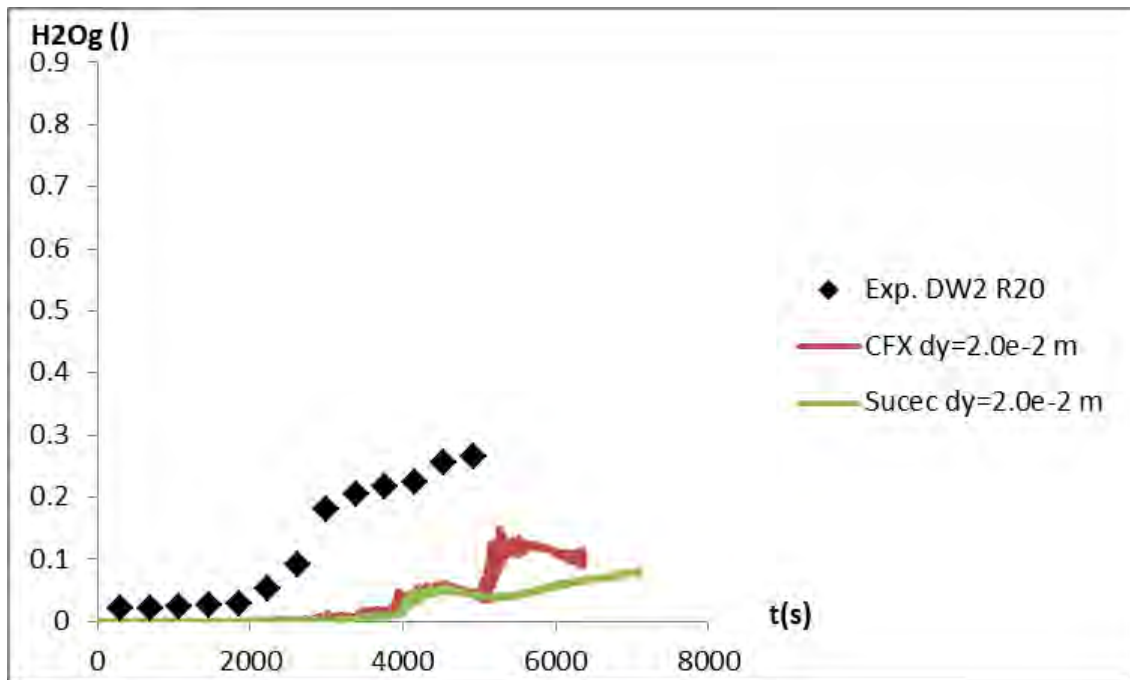
**Abb. 3.42** Molenbruch des Dampfes bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic-Walltreatment“ in CFX und  $dy = 5.0 \cdot 10^{-4} \text{ m}$



**Abb. 3.43** Molenbruch des Dampfes bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und  $dy = 1.0e-3$  m



**Abb. 3.44** Molenbruch des Dampfes bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic-Walltreatment“ in CFX und  $dy = 5.0e-3$  m



**Abb. 3.45** Molenbruch des Dampfes bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic-Walltreatment“ in CFX und  $dy = 0.02$  m

### 3.4.5 Schlussfolgerungen Panda4bis

Das Experiment Panda4bis wurde sowohl mit dem in CFX implementierten „Automatic Wall Treatment“ als auch mit den Sucec-Wandfunktionen simuliert. Hierbei kam das SST Turbulenzmodell zum Einsatz, bei dem mit Hilfe einer Blending-Funktion bei kleinen  $y^+$ -Werten der Low-Reynolds-Ansatz verwendet wird. Es kamen vier unterschiedliche CFD-Gitter zum Einsatz, bei denen die Gitterfeinheit in Wandnähe von  $5.0e-4$  m bis  $0.02$  m variiert wurde. Alle Simulationen konnten ohne numerische Probleme durchgeführt werden. Alle Simulationen liefern sehr ähnliche Simulationsergebnisse für die integrale Wandkondensationsrate, für die Dampfkonzentrationen und für die Temperaturen an den Messstellen. Bei einem gegebenen CFD-Gitter unterscheiden sich die Ergebnisse, die mit den in CFX implementierten Wandfunktionen erzielt werden, nur minimal von denen, die mit den Sucec-Wandfunktionen berechnet werden. Einzige Ausnahme ist der untere Bereich des 2. PANDA-Behälters. Hier hängen die Simulationsergebnisse sowohl vom CFD-Gitter als auch von der Wahl der Wandfunktionen ab. In diesem Bereich werden aber in den CFX-Simulationen nicht alle relevanten physikalischen Phänomene simuliert. Das an den Behälterwänden nach unten laufende Kondensatwasser, welches teilweise wiederverdampft, kann gegenwärtig nicht berechnet

werden. Deshalb ist eine Modellvalidierung anhand der dort gemessenen Dampfkonzentrationen und Temperaturen nicht erfolgversprechend.

### 3.5 Simulation von TH-2

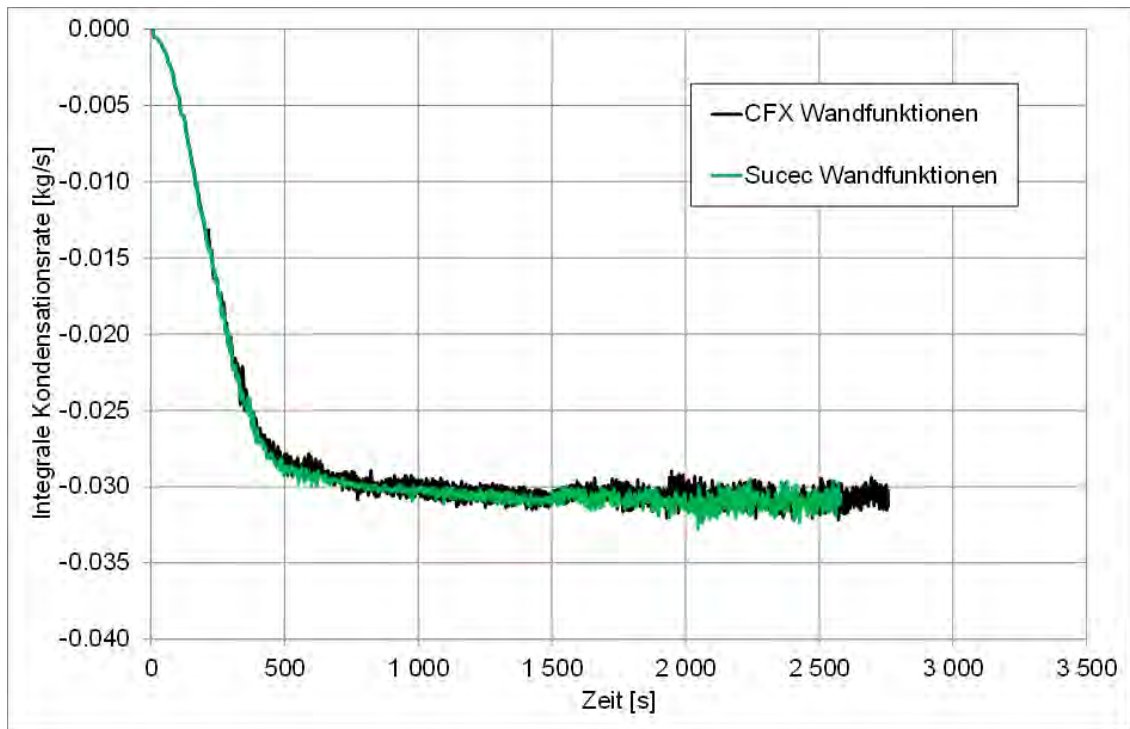
Um die Wandfunktionen des FZ-Jülich zu testen, wurde weiterhin der THAI-Versuch TH-2 mit den standardmäßig in CFX vorhandenen Wandfunktionen und mit den Sucec-Wandfunktionen berechnet und die beiden Ergebnisse miteinander verglichen. Alle weiteren Modelloptionen bei diesen Berechnungen entsprechen den Standards (SST-Turbulenz, Wärmestrahlung, IKE-Volumenkondensation, ...). Eine Übersicht hierzu findet sich in Tab. 3.5.

**Tab. 3.5** Infobox TH2-Experiment (Wandfunktionen-Rechnung)

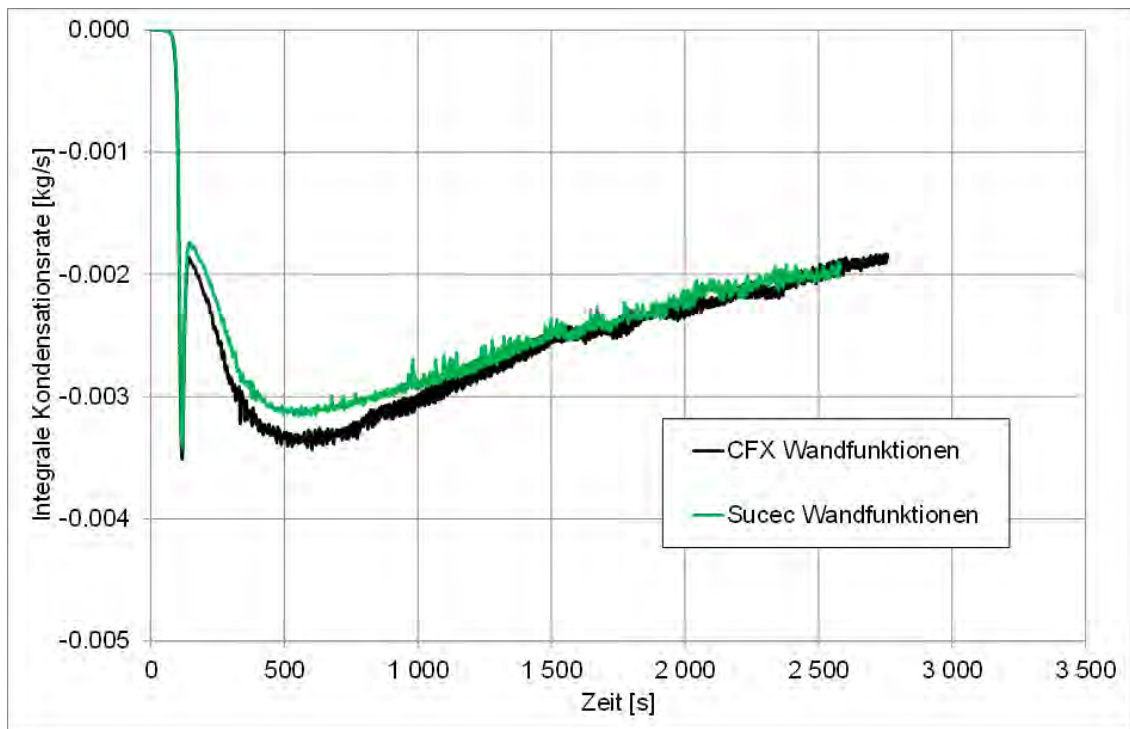
Experiment	THAI TH-2
Phänomene	Wand- und Volumen-Kondensation
Elementzahl	450 237
Materialien	Air Ideal Gas, H <sub>2</sub> Og, H <sub>2</sub> OI
Turbulenzmodell	SST
Diffusionskoeffizient	Nach Fuller
Wärmestrahlung	Discrete Transfer, Gray, 64 Strahlen
Wandkondensation	ANSYS-Modell
Volumenkondensation	Modifiziertes IKE-Modell
Konvergenz	RMS < 0.0001
CFX-Version	16.1
Wandfunktionen	<b>Mit CFX- und Sucec-Wandfunktionen</b>

In Abb. 3.46 bis Abb. 3.50 werden die Ergebnisse der beiden Rechnungen in unterschiedlichen Diagrammen miteinander verglichen. Insgesamt finden sich nur geringe Unterschiede. Bei der Wandkondensationsrate finden sich leicht höhere Werte etwa zum Zeitpunkt  $t = 500$  s (siehe Abb. 3.46). Der größte relative Unterschied besteht noch bei den Volumenkondensationsraten (siehe Abb. 3.47). Beim Druck findet sich ebenfalls im Bereich um 500 s eine leichte Erhöhung gegenüber der Rechnung mit den CFX-Wandfunktionen (siehe Abb. 3.48). Bei den Temperaturen in unterschiedlichen Höhen sind kaum Differenzen zwischen den beiden Rechnungen zu beobachten (siehe Abb. 3.49 und Abb. 3.50). Insgesamt sind die Rechnungen jedoch recht ähnlich und die Sucec-Wandfunktionen haben nur geringen Einfluss auf die Ergebnisse. Es kann

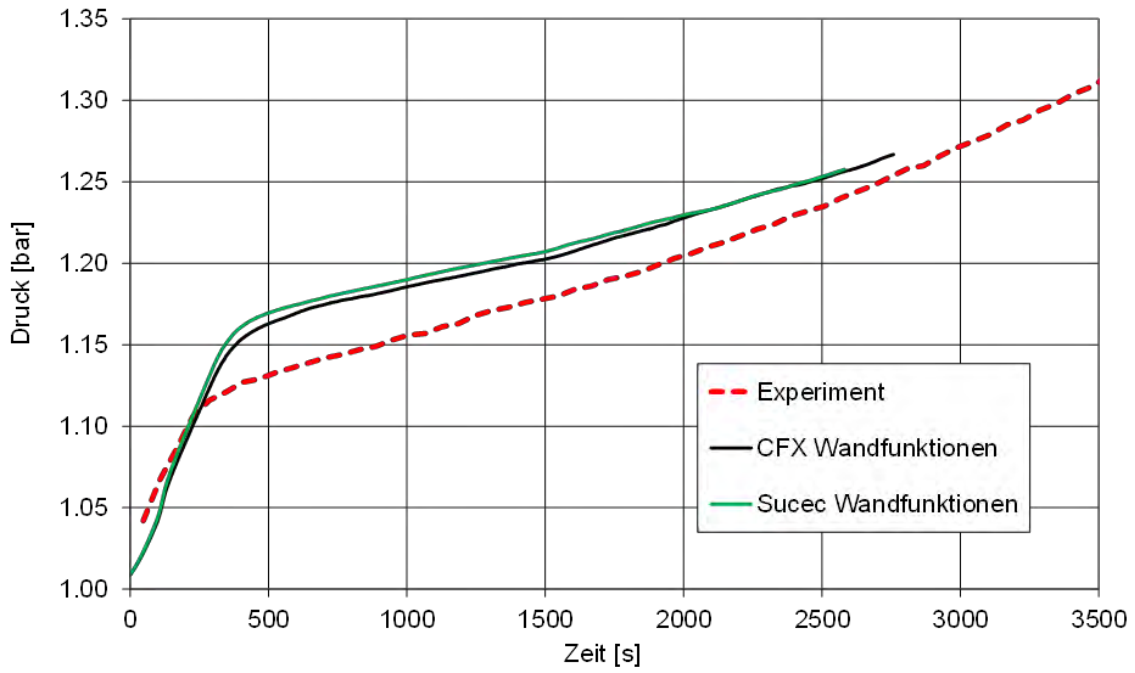
weder von einer deutlichen Verbesserung noch von einer deutlichen Verschlechterung in Bezug auf das Experiment gesprochen werden.



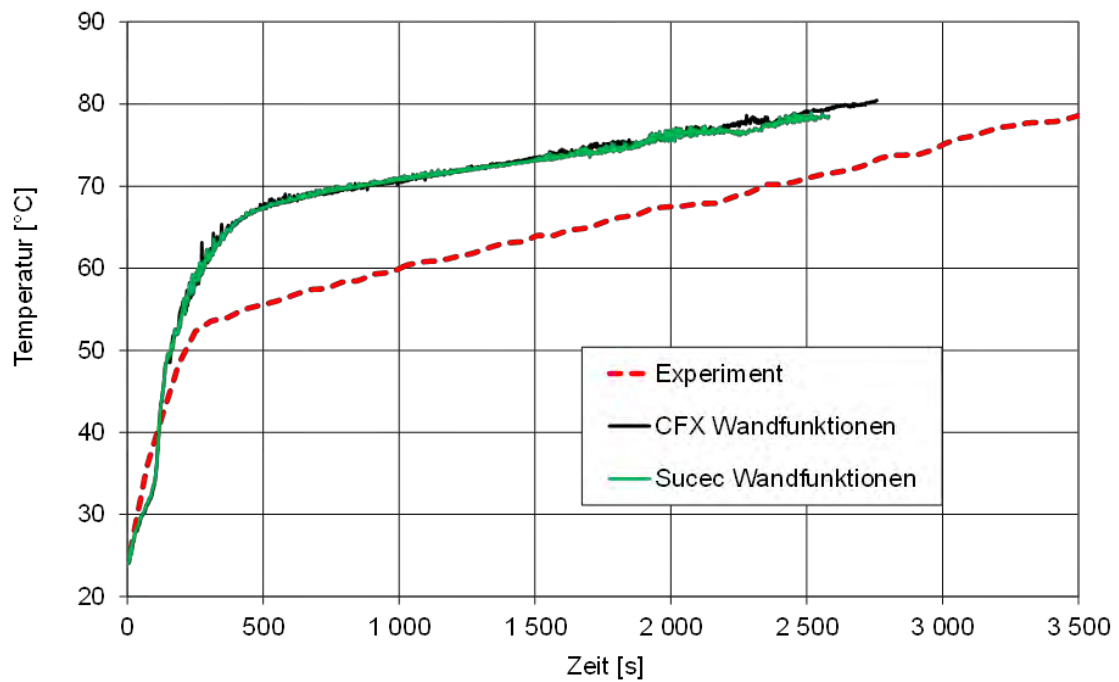
**Abb. 3.46** Integrale Wandkondensationsrate mit CFX- und FZJ-Wandfunktionen



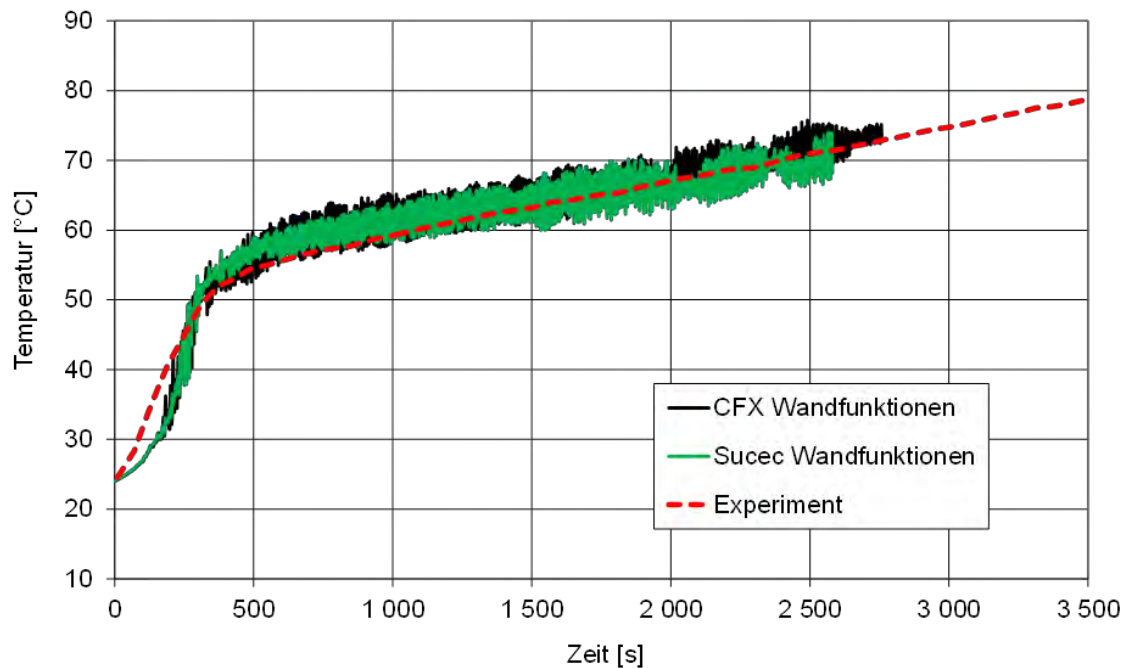
**Abb. 3.47** Integrale Volumenkondensationsrate



**Abb. 3.48** Druckverlauf



**Abb. 3.49** Temperaturverlauf in 8.4 m Höhe



**Abb. 3.50** Temperaturverlauf in 6.3 m Höhe

### 3.6 Zusammenfassung

Im Rahmen eines Forschungsvorhabens an der RWTH Aachen wurden nach umfangreichen Literaturstudien und Testrechnungen die Sucec-Wandfunktionen ausgewählt, um den Einfluss von Wandkondensation auf die Wandfunktionen zu berücksichtigen. Die Sucec-Wandfunktionen wurden über CEL-Expressions in CFX implementiert. Diese Implementation ist einfach und lässt erwarten, dass auch in zukünftigen CFX-Versionen eine problemlose Übertragung der CELs möglich ist.

Die CONAN-Versuche P10T30V25, P20T30V25 und P30T30V25 wurden mit CFX-16 bei Verwendung des SST-Turbulenzmodells nachgerechnet, wobei jeweils die in CFX implementierten Wandfunktionen und die Sucec-Wandfunktionen zum Einsatz kamen. Durch eine Variation der Gitterfeinheit konnte untersucht werden, wie sich die Wandfunktionen bei unterschiedlicher Gitterfeinheit auswirken. Bei den Simulationen mit der Sucec-Wandfunktion wurde für sehr feine Gitter keine konvergente Lösung erzielt, bei Verwendung der in CFX implementierten Wandfunktionen konnte dagegen bei allen Simulationen Konvergenz erreicht werden. Bei größeren Gittern konnte durch Verwendung der Sucec-Wandfunktion eine leichte Verbesserung bei der Vorhersage der Wandkondensationsrate und auch bei dem Oberflächentemperaturprofil erzielt werden. Es verbleibt aber in allen Fällen noch eine große Abweichung von den experimentellen

Werten. Der Unterschied zwischen den Ergebnissen mit CFX-Wandfunktionen und denen mit Sucec-Wandfunktionen nimmt mit zunehmender Stärke der Kondensation zu, was physikalisch sinnvoll erscheint, da in diesem Fall auch das Geschwindigkeits-/Temperaturprofil in der wandnahen Schicht an der gekühlten Wand stärker durch die Kondensation modifiziert wird.

Weiterhin wurde das Panda4bis-Experiment sowohl mit dem in CFX implementierten „Automatic Wall Treatment“ als auch mit den Sucec-Wandfunktionen simuliert. Es kamen vier unterschiedliche CFD-Gitter zum Einsatz, bei denen die Gitterfeinheit in Wandnähe von  $5.0e-4$  m bis 0.02 m variiert wurde. Alle Simulationen konnten ohne numerische Probleme durchgeführt werden. Alle Simulationen liefern sehr ähnliche Simulationsergebnisse für die integrale Wandkondensationsrate, für die Dampfkonzentrationen und für die Temperaturen an den Messstellen. Bei einem gegebenen CFD-Gitter unterscheiden sich die Ergebnisse, die mit den in CFX implementierten Wandfunktionen erzielt werden, nur minimal von denen, die mit den Sucec-Wandfunktionen berechnet werden. Einzige Ausnahme ist der untere Bereich des 2. PANDA-Behälters. In diesem Bereich werden aber in den CFX-Simulationen nicht alle relevanten physikalischen Phänomene simuliert. Deshalb ist eine Modellvalidierung anhand der dort gemessenen Dampfkonzentrationen und Temperaturen nicht erfolgversprechend. Die Nachrechnung des TH-2 Experiments hat ebenfalls keine signifikanten Unterschiede zwischen der Simulation mit den in CFX implementierten Wandfunktionen und den Sucec-Wandfunktionen gezeigt.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass die Sucec-Wandfunktionen für die Simulation von containmenttypischen CFD-Anwendungen geeignet sind, allerdings ist die Verbesserung, die mit ihnen erzielt werden kann, eher als gering einzuschätzen. Weitere Modellverbesserungen sind deshalb notwendig. An der RWTH Aachen/FZ Jülich laufen gegenwärtig umfangreiche experimentelle und analytische Arbeiten. Sobald hier ein signifikanter Fortschritt erzielt wird, wäre es sinnvoll, den neuen verbesserten Modellierungsansatz zu validieren.





## **4           Arbeitspunkt 1.3 – Validierung eines Volumenkondensationsmodells**

### **4.1           Einleitung**

Im Rahmen von BMWi geförderten Vorhaben haben ANSYS und das IKE Stuttgart gemeinsam zwei unterschiedlich komplexe Volumenkondensationsmodelle entwickelt. Beide Volumenkondensationsmodelle gehen davon aus, dass für einen Kondensationsprozess Kondensationskeime vorliegen müssen. Als Kondensationskeime dienen ausschließlich bereits vorhandene Wassertröpfchen. Keimbildungsprozesse werden nicht modelliert. Die Kondensationsrate hängt neben der Gaszusammensetzung, der Temperatur und dem Druck auch von der lokal vorhandenen Grenzflächendichte Tröpfchen/Gas ab. Bei der Ein-Fluid-Modellierung werden die Wassertröpfchen als zusätzliche Komponente in der CFX-Simulation simuliert. Die Tröpfchen haben dieselbe Geschwindigkeit (ohne Erweiterung um das Algebraic Slip Modell) und dieselbe Temperatur wie das umgebende Gas. Bei der Zwei-Fluid-Modellierung wird in CFX eine Mehrphasensimulation durchgeführt. Gas und Wassertröpfchen können eine unterschiedliche Temperatur haben und es ist eine Relativgeschwindigkeit der Tröpfchen zum umgebenden Gas möglich (Tröpfchen können „ausregnen“).

Die Zwei-Fluid-Modellierung wurde bereits am IKE getestet. Simulationen des TH-2 und des TH-13 Experiments haben gezeigt, dass bei Auswahl geeigneter Parameter die Experimente in guter Übereinstimmung mit experimentellen Daten simuliert werden konnten /ZHA 13/, /ZHA 14/. Aufgrund der sehr hohen Rechenzeit war es allerdings nicht möglich, die Gasverteilung in einem Modellcontainment mit einer 2-Fluid-Modellierung der Volumenkondensation zu simulieren. Ziel der Arbeiten ist es, ein Volumenkondensationsmodell für Containment-Anwendungen zu validieren und geeignete Modellparameter anhand von Versuchsnachrechnungen zu bestimmen. Deshalb haben sich die durchgeführten Versuchsnachrechnungen auf die Ein-Fluid-Modellierung beschränkt. Aufgrund zahlreicher Modellparameter mussten umfangreiche Parameterstudien durchgeführt werden. Aufgrund der Ergebnisse wurde das Modell modifiziert und mit dem Algebraic Slip Modell gekoppelt.

### **4.2           Beschreibung des Volumenkondensationsmodells**

Bei Vermischungsvorgängen von zwei unterschiedlich heißen Gasen kann das resultierende Gasgemisch unterhalb der Taulinie im Molier-Diagramm liegen, obwohl beide

Komponenten oberhalb der Geraden liegen. In diesem Fall liegt der Partialdruck des Dampfes  $p_{H_2Og}$  im Gemisch oberhalb des Sättigungsdampfdruckes  $p_{H_2O,sat}$ . Bei Vorliegen von Kondensationskeimen scheidet sich der überschüssige Dampf als Wasser an deren Oberfläche ab. Als Kondensationskeime können hydrophile Staubpartikel, Aerosole oder auch bereits vorhandene Flüssigkeitströpfchen dienen. Bei Vorliegen entsprechender Bedingungen kann es auch zu Keimbildungsprozessen kommen. Das Volumenkondensationsmodell geht von folgenden Modellannahmen aus: Als Kondensationskeime dienen ausschließlich bereits vorhandene Flüssigkeitströpfchen, an deren Oberfläche sich das Kondenswasser anlagert. Keimbildungsprozesse werden (gegenwärtig) nicht modelliert. In der 1-Fluid-Modellierung werden der Wasserdampf ( $H_2Og$ ), das flüssige Wasser ( $H_2Ol$ ) und die übrigen nicht kondensierbaren Gase ( $H_2$ , Luft, ...) als unterschiedliche Komponenten definiert, für die die Erhaltungsgleichungen gelöst werden. Bei diesem Modell haben alle Materialien dieselbe Temperatur und dieselbe Geschwindigkeit. Insgesamt werden für das Fluidvolumen drei Erhaltungsgleichungen für die Momente, eine für den Druck, eine für die Energie und jeweils eine für jede Komponente gelöst. (Bis auf eine, die sich aus der Formel ergibt, dass die Summe der Massenbrüche eins ergeben muss). Zusätzlich können Erhaltungsgleichungen für das Turbulenzmodell und das Strahlungsmodell zu lösen sein.

Zur Bestimmung der Kondensationsrate  $S_{H_2O}$  wird folgender Ansatz gewählt:

$$S_{H_2O} = k_c \cdot \rho_g \cdot \beta \cdot (Y_{H_2Og}^* - Y_{H_2Og}^{*Sat}) \quad (4.1)$$

Der Stoffübergangskoeffizient  $k_c$  berechnet sich wie folgt:

$$k_c = \frac{Sh \cdot D_{H_2O,Luft}}{\bar{d}} \quad (4.2)$$

$$Sh = 2$$

$D_{H_2O,Luft}$  ist die Diffusionskonstante von Wasserdampf in Luft,  $\bar{d}$  ist der mittlere Tröpfchendurchmesser und Sh ist die Sherwood-Zahl. Es wird angenommen, dass die Sherwood-Zahl konstant 2 ist.

$\rho_g$  ist die Dichte der Gasphase

$$\rho_g = \frac{P_{abs} \cdot MM_{gasmix}}{R \cdot T} \quad (4.3)$$

$P_{abs}$  ist der absolute Druck,  $R$  die Gaskonstante und  $MM_{gasmix}$  die mittlere molare Masse des Gasgemischs.

$\beta$  ist die Phasengrenzflächendichte:

$$\beta = n\pi\bar{d}^3 \quad (4.4)$$

Wobei  $n$  die Anzahldichte der Tröpfchen ist.

$Y_{H_2Og}^*$  und  $Y_{H_2Og}^{*sat}$  sind der Massenbruch des Wasserdampfes und der Sättigungsdampfdruck bezogen auf die Gasphase. Das Volumen, das die Wassertröpfchen einnehmen, wird vernachlässigt.

Im vereinfachten Fall, dass nur ein Wasserdampf/Wassertröpfchen/Luft-Gemisch vorliegt, können  $MM_{gasmix}$  und  $Y_{H_2Og}^*$  wie folgt berechnet werden:

$$MM_{gasmix} = X_{H_2O}^* MM_{H_2O} + (1 - X_{H_2O}^*) MM_{Luft}$$

$$X_{H_2Og}^* = \frac{X_{H_2Og}}{X_{H_2Og} + X_{Luft}} \quad (4.5)$$

$$Y_{H_2Og}^* = X_{H_2Og}^* \cdot \frac{MM_{H_2O}}{MM_{gasmix}}$$

Mit der Volumen Kondensation ist die Freisetzung der latenten Wärme verknüpft. Bei der Definition von Quelltermen für Massenbrüche  $Y_{H_2Og}$  und  $Y_{H_2Ol}$  (negatives Vorzeichen) erfolgt die Wärmefreisetzung in CFX entsprechend der unterschiedlichen Enthalpien automatisch.

Verdampfungsvorgänge können analog zur Kondensation berechnet werden. Allerdings muss sichergestellt werden, dass Verdampfung nur auftreten kann, falls lokal auch eine ausreichende Masse an Wassertröpfchen vorhanden ist. Innerhalb eines Zeitschritts  $dt$  darf maximal der Anteil  $f_{max}$  der lokal vorhandenen Wassertröpfchen verdampfen. Aus numerischen Gründen wurde  $f_{max}$  etwas kleiner als 1 gewählt.

$$S_{H_2O}^{EvapMax} = f_{max} \cdot \frac{\rho \cdot Y_{H_2Ol}}{dt} \quad (4.6)$$

$$f_{max} = 0.99$$

Bei diesem Modellansatz wird noch eine Information über den mittleren Tröpfchenradius  $\bar{d}$  und über die Anzahldichte  $n$  der Tröpfchen benötigt. Aus dem lokalen Massenbruch  $Y_{H_2O}$  ergibt sich zusammen mit der lokalen Dichte  $\rho$  eine Abhängigkeit von  $n$  und  $\bar{d}$ , so dass noch eine unabhängige Größe im Gleichungssystem modelliert werden muss.

$$\rho Y_{H_2O} = n \cdot \frac{1}{6} \pi \bar{d}^3 \cdot \rho_{H_2O} \quad (4.7)$$

Im von IKE/ANSYS entwickelten Modell gibt es für diese unabhängige Größe drei unterschiedliche Modellierungsansätze:

1.  $\bar{d} = \text{konst.}$
2.  $n = \text{konst.}$
3. Es wird eine zusätzliche Erhaltungsgleichung für  $n$  gelöst.

Diskussionen mit ANSYS und IKE Stuttgart haben ergeben, dass der 1. Modellierungsansatz am realistischsten erscheint. Aus Überlegungen zum Tröpfchenwachstum in Wolken erscheint ein Tröpfchenradius von ca. 20  $\mu\text{m}$  als realistisch [DEV 14]. Der Tröpfchenradius, der erreicht wird, hängt von kleinskaligen Turbulenzen ab. Die Strömung in Wolken und in Containment-Anwendungen wird sich allerdings hinsichtlich der Turbulenz quantitativ unterscheiden, so dass diese Größe nur ein erster Anhaltspunkt sein kann.

Falls die Tröpfchenkonzentration sehr klein ist, werden Kondensationsvorgänge unterdrückt. Dies ermöglicht es dem Modell, den Fall zu simulieren, dass wegen fehlender Kondensationskeime keine Kondensation stattfindet. Ebenso wird Kondensation unterdrückt, falls die Wasserkonzentration sehr hoch ist. Dies wird in CFX durch folgende Expressions realisiert:

*Disp Volume Fraction Min = 1e-8*

*Disp Volume Fraction Max = 0.634*

*Disp Interfacial Area Density Switch =*

*if(Disp Volume Fraction <= Disp Volume Fraction Min,0,1)\**

*if(Disp Volume Fraction >= Disp Volume Fraction Max,0,1)*

### 4.3 Experimentell bestimmte Tröpfchengröße

In einigen THAI-Experimenten (TH-7, TH23-3 und TH23-4) wurden lokal die Tröpfchengröße und die Anzahldichte mit einem hochauflösenden Spektral-Photometer (FASP-Messungen) bestimmt. In den gegenwärtig zur Verfügung stehenden Experimenten wurde die Tröpfchengröße nur an einem Ort gemessen; ein umfassendes Bild über die Tröpfchenverteilung im THAI-Behälter ist deshalb nicht möglich. Deshalb können die Messergebnisse nicht zur Entwicklung und Validierung eines komplexen Modells für  $n / \bar{d}$  dienen. Sie können aber Hinweise geben, welche der drei Modellannahmen realistisch ist und in welcher Größenordnung sich die Tröpfchenradien bewegen. Es ist allerdings zu berücksichtigen, dass die Messdaten nicht abdeckend für alle möglichen Zustände/Phänomene sind. So konnte bei keiner der Messungen ein „Ausregnen“ von Kondensat beobachtet werden, wie es bei hohen Tröpfchenkonzentrationen eigentlich erwartet wird.

Die Experimente zeigen für  $n / \bar{d}$  :

- Der Tröpfchendurchmesser in den drei Experimenten (TH-7, TH23-3, TH-23-4) ist näherungsweise konstant. In TH-7 variiert er zwischen 1  $\mu\text{m}$  und 2  $\mu\text{m}$  (nur in der Anfangsphase werden kurzzeitig 4  $\mu\text{m}$  erreicht (Abb. 4.1)). In TH23-3 und TH-23-4 variiert der Durchmesser nur geringfügig von 1.3  $\mu\text{m}$  – 1.4  $\mu\text{m}$  (Abb. 4.2 – Abb. 4.4).
- In TH-7 passt der Verlauf der Volumenkonzentration nicht zur Annahme, dass die Anzahl der Tröpfchen konstant ist und sich bei Kondensation nur der Tröpfchendurchmesser vergrößert. Im Zeitraum 4000 s – 6000 s sinkt die Volumenkonzentration von ca.  $5.0\text{e-}6$  auf nahezu 0 ab, während der Tröpfchenradius nur von  $\sim 1.5 \mu\text{m}$  auf 1  $\mu\text{m}$  absinkt (Abb. 4.1). In TH-23-4 ist der Tröpfchenradius im Zeitraum 0 h – 2 h nahezu konstant. Die Volumenkonzentration variiert von  $5\text{e-}6 \text{ [m}^3/\text{m}^3]$  bis  $8.7\text{e-}6 \text{ [m}^3/\text{m}^3]$ .

Daraus lässt sich schlussfolgern:

- Diese experimentellen Daten legen nahe, dass der Modellierungsansatz (Nr. 2), bei dem  $n = \text{konst.}$  angenommen wird, wenig geeignet ist, die Experimente zu beschreiben.
- Die Annahme eines konstanten Tröpfchendurchmessers ist zumindest für einen vorgegebenen Ort eine gute Näherung.

- Tröpfchendurchmesser in der Größenordnung von  $1\ \mu\text{m}$  –  $5\ \mu\text{m}$  erscheinen als erste Annahme sinnvoll.

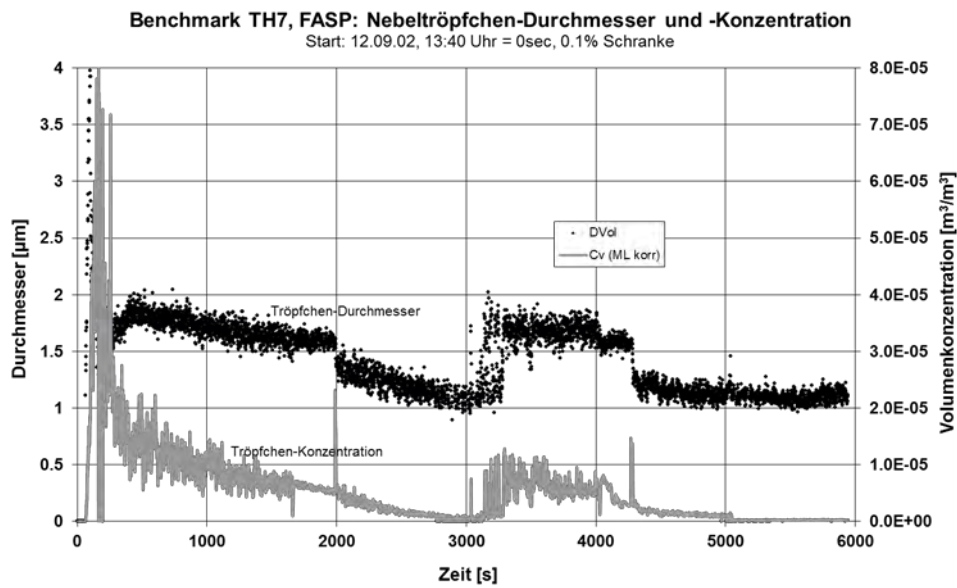


Abb. 4.1 TH-7: FASP-Messung (Höhe 8.4 m; Radius 0.7 m)

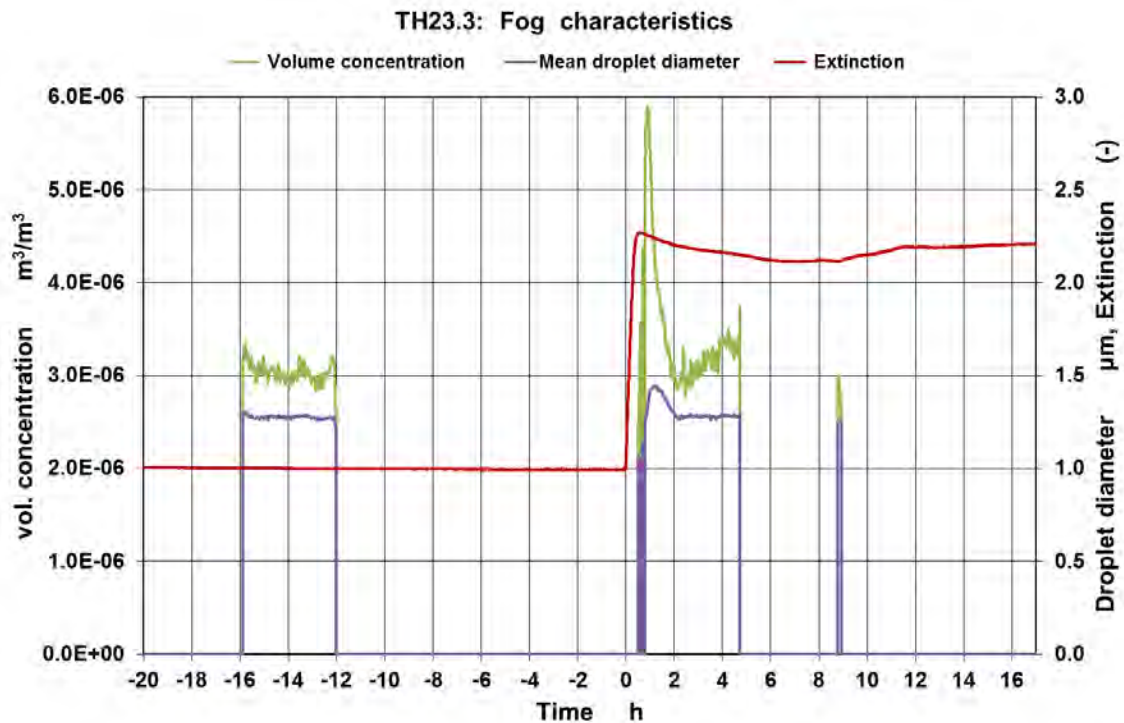


Abb. 4.2 TH23.3: FASP-Messung (Höhe 4.2 m, Radius 1.42 m)

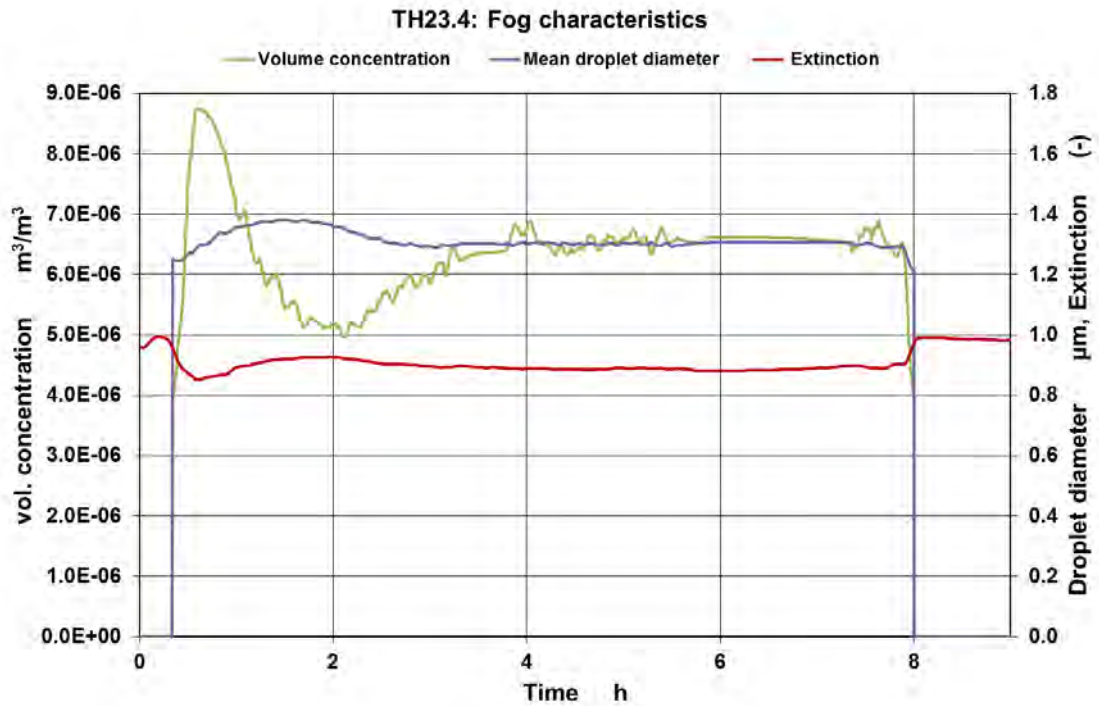


Abb. 4.3 TH23.4: FASP-Messung (Höhe 4.2 m, Radius 1.42 m)

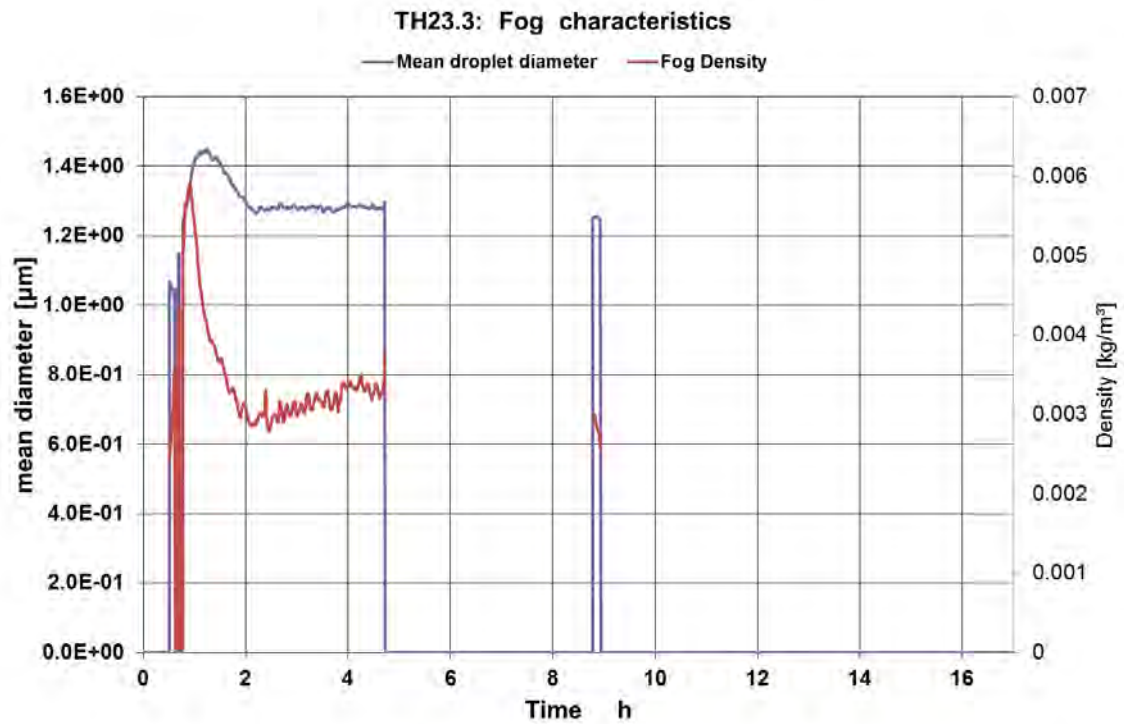


Abb. 4.4 TH23.3: FASP-Messung (Höhe 4.2 m, Radius 1.42 m)



#### 4.4 Einfluss des Tröpfchendurchmessers auf die Sinkgeschwindigkeit

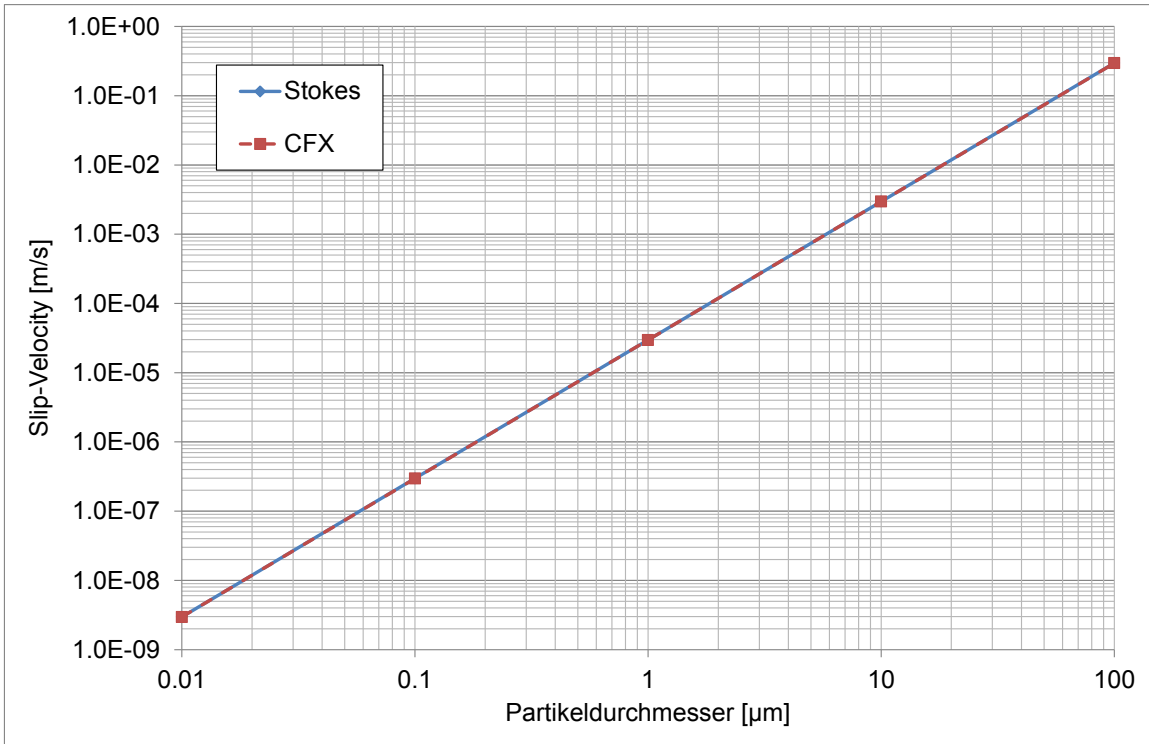
Die Wassertröpfchen haben eine um ungefähr 1000-fach höhere Dichte als das umgebende Gas. Deshalb werden die Tröpfchen sich relativ zur Gasphase nach unten bewegen. Diese Relativgeschwindigkeit  $v_{slip}$  führt zu einer der Sinkgeschwindigkeit entgegengesetzten Widerstandskraft, die mit zunehmendem  $v_{slip}$  zunimmt. Nach einer anfänglichen Beschleunigung stellt sich eine konstante Relativgeschwindigkeit ein, bei der sich die beiden Kräfte kompensieren. Diese Geschwindigkeit kann für kleine Partikel mit dem Stokes-Gesetz beschrieben werden /HIN 99/:

$$V_{slip} = \frac{\rho_p d^2 g}{18\eta} \quad (4.8)$$

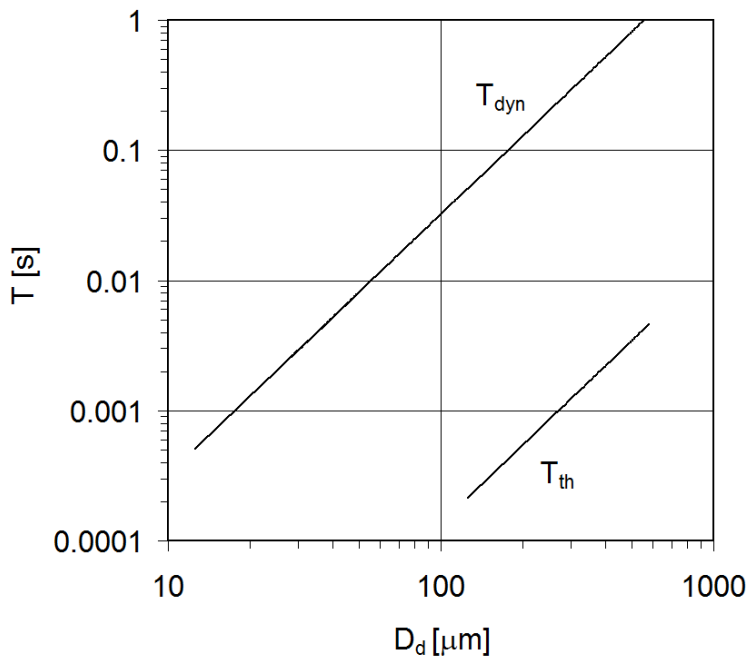
Hierbei ist  $\rho_p$  die Dichte des Partikels/Tröpfchens,  $d$  der Durchmesser,  $g$  die Gravitationsbeschleunigung und  $\eta$  die Viskosität des Gases.

Für Wassertröpfchen in der Luft ergibt sich, dass sehr kleine Tropfen eine nahezu vernachlässigbare Sinkgeschwindigkeit haben. Für Tröpfchen mit für  $\bar{d} = 1 \mu\text{m}$  ergibt sich eine vernachlässigbare Sinkgeschwindigkeit von  $3.0\text{e-}5 \text{ m/s}$ , während größere Tröpfchen von  $\bar{d} = 100 \mu\text{m}$  sehr schnell ausregnen ( $v_{slip} \sim 0.3 \text{ m/s}$ ). (Es sei angemerkt, dass für so schnelle Sinkgeschwindigkeiten das Stokes-Gesetz streng genommen nicht gültig ist. Es ist nur gültig für langsame Sedimentation bei einer Reynolds-Zahl kleiner als eins. Bei höherer Reynolds-Zahl muss auch die Entstehung von Wirbeln berücksichtigt werden, für turbulente Strömungen ist der Strömungswiderstand  $\sim v^2$ ).

In CFX besteht mit dem Algebraic Slip Modell (ASM) die Möglichkeit, die relative Sinkgeschwindigkeit von Partikeln/Tröpfchen auch bei einer 1-Fluid-Modellierung zu simulieren. Neben der Vorgabe einer Sinkgeschwindigkeit, kann  $v_{slip}$  auch von CFX bei Vorgabe eines Tröpfchendurchmessers berechnet werden;  $v_{slip}$  stimmt dabei mit der Stokes-Korrelation überein (Abb. 4.5). Der Vorteil gegenüber einer 2-Fluid-Modellierung (Multiphase-CFX-Simulation) ist der viel geringere Rechenaufwand. Der Nachteil ist, dass die Wechselwirkung der Teilchenbewegung mit dem Gas auf den Strömungswiderstand beschränkt wird. Das Modell geht als Näherung davon aus, dass die Gleichgewichtssinkgeschwindigkeit unendlich schnell erreicht wird und Tröpfchen und Gas die gleiche Temperatur haben. Für kleine Wassertröpfchen sind diese Näherungen gerechtfertigt, da sich das Gleichgewicht bei der Geschwindigkeit, bei der Temperatur und der Sinkgeschwindigkeit in sehr kleinen Zeitskalen einstellt (Abb. 4.6).



**Abb. 4.5** Sinkgeschwindigkeit von Tröpfchen nach der Stokes-Korrelation und bei CFX-Simulation mit dem Algebraic-Slip-Modell



**Abb. 4.6** Thermische  $T_{\text{th}}$  und dynamische Antwortzeit  $T_{\text{dyn}}$  in Abhängigkeit vom Tröpfchendurchmesser /LAU 14/

#### 4.5 Diskussion des Modellierungsansatzes und Schlussfolgerungen für die Nachrechnung von Experimenten

Die Kondensationsrate hängt neben der Differenz der Dampfkonzentration zu den Sättigungsbedingungen auch von der Grenzflächendichte der bereits vorhandenen Wassertröpfchen ab. Da Keimbildungsprozesse und andere Kondensationskeime wie hydrophile Staubpartikel/Aerosole vernachlässigt werden, kann Volumen Kondensation nur stattfinden, wenn bereits lokal Wassertröpfchen vorliegen. Das führt zu dem Problem, dass in den meisten Versuchen zu Beginn keine Tröpfchen vorliegen, sondern dass oft sogar kein nennenswerter Dampfgehalt vorliegt. Würde als Startbedingung  $Y_{\text{H}_2\text{O}} > 0$  gewählt, so kommt es zur Verdampfung. Dadurch erhöht sich  $Y_{\text{H}_2\text{Og}}$  und die Temperatur verringert sich. Am Ende dieses Prozesses wird sich eine Temperatur und Wasserdampfkonzentration eingestellt haben, die nicht dem Experiment entspricht, und falls  $Y_{\text{H}_2\text{O}}$  klein gewählt wurde, werden in vielen Fällen die Wassertröpfchen wieder verschwunden sein. Um dieses Problem zu umgehen, kann eine untere Schranke für die Verdampfung definiert werden. Falls  $Y_{\text{H}_2\text{O}} < Y_{\text{H}_2\text{O}_{\text{Min}}}$ , findet keine Verdampfung statt. Die Wassertröpfchenkonzentration zu Beginn der Simulation muss kleiner als diese Schranke gewählt werden ( $Y_{\text{H}_2\text{O}}(t = 0 \text{ s}) \leq Y_{\text{H}_2\text{O}_{\text{Min}}}$ ). Für ein einströmendes Gas ergibt sich dasselbe Problem wie für die Startbedingungen. Werden keine Wassertröpfchen eingespeist, so werden zu Beginn vorhandene Tröpfchen aus dem Bereich des Einlasses verdrängt, so dass im Extremfall keine Kondensation in diesem Bereich mehr stattfinden kann. Problematisch bei dieser Modellierung ist, dass sie strenggenommen nicht mit der Physik übereinstimmt. Es gibt folglich keinen physikalisch begründbaren Wert für die Anfangströpfchenkonzentration und die untere Schranke für die Verdampfung. Es ist zu berücksichtigen, dass bei zu großen Werten der Fehler, der bei der Modellierung gemacht wird, zu groß wird (Dichte von Tröpfchen ist um Faktor  $\sim 1000$  höher als der des Gases). Bei zu kleinen Konzentrationen wird die Volumenkonzentration nur sehr zögerlich einsetzen. Der Einfluss dieser Größen wird in Abschnitt 4.6 näher untersucht. Um diese Probleme zu umgehen wurde das Volumen Kondensationsmodell durch die GRS modifiziert (siehe Abschnitt 4.8).

#### 4.6 Simulation eines Testbeispiels mit dem unmodifizierten Volumen-kondensationsmodell

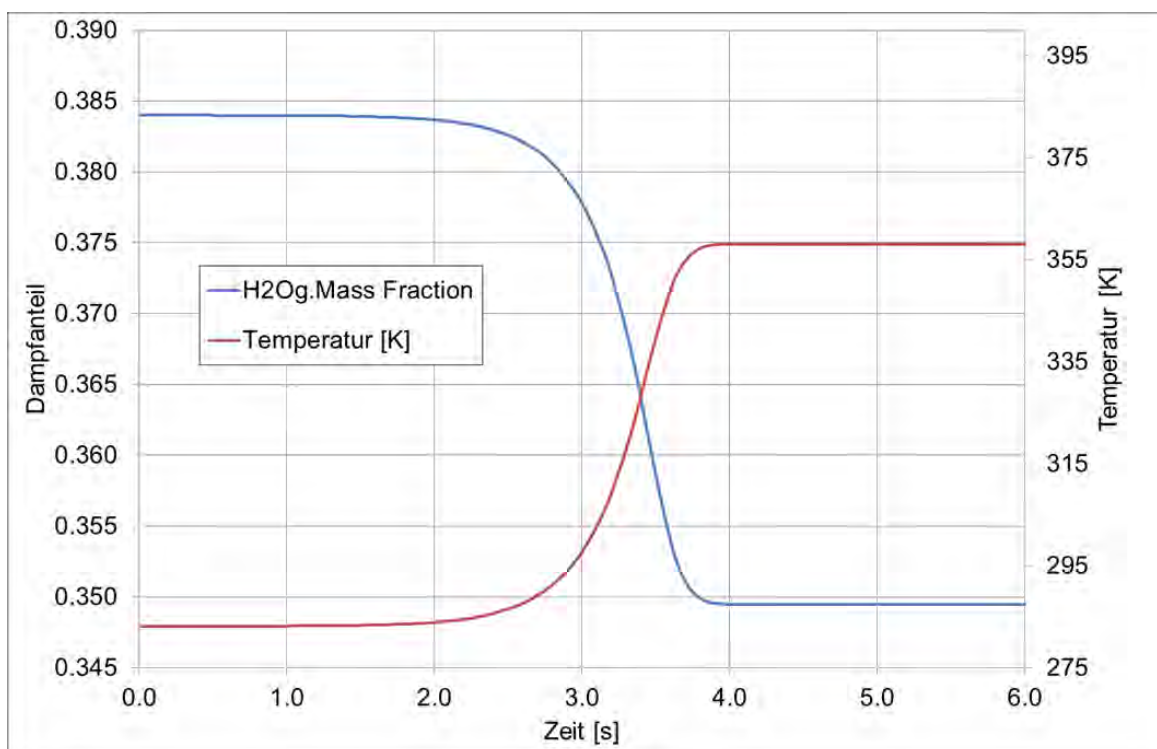
Zunächst wurde das vom IKE neu entwickelte einphasige Volumen-kondensationsmodell anhand eines einfachen Testbeispiels studiert. Hierbei handelt es sich um eine Ein-Raum-Geometrie mit den Maßen 0.6 m x 1.0 m x 0.58 m. Zu Beginn der transienten Simulation liegt ein homogenes Gasgemisch vor, dessen Dampfkonzentration von (50 Vol.-%) einem Dampf-Partialdruck entspricht, der deutlich oberhalb des Sättigungsdampfdrucks bei 10 °C liegt. Die Wände werden als adiabat angenommen. Daher kann das Einstellen von Sättigungsbedingungen nur durch Volumen-kondensation erfolgen. In der Simulation wird der Verlauf der Dampfkonzentration, der Tröpfchenkonzentration und der Temperatur in Abhängigkeit von verschiedenen Modellparametern ( $\bar{d}$ ,  $Y_{\text{H}_2\text{O}}(t = 0 \text{ s})$ ) untersucht. Zudem wird der Einfluss der Modellparameter auf die Numerik (Zeitschrittweite, Konvergenzverhalten) untersucht.

Die Modellannahme eines konstanten Tröpfchendurchmessers (Option 1,  $\bar{d} = \text{konst.}$ ) scheint am ehesten mit den Experimenten übereinzustimmen (siehe Abschnitt 4.3) und wurde in Diskussionen mit IKE/ANSYS als favorisierte Option identifiziert. Bei der Simulation wurde deshalb von einem konstanten Tröpfchendurchmesser ausgegangen. Bei dieser Modellannahme muss der Nutzer den Tröpfchendurchmesser  $\bar{d}$  und die initiale Wassertröpfchenmasse  $Y_{\text{H}_2\text{O}}$  vorgeben. Der Einfluss dieser beiden Größen wird durch eine Parameterstudie untersucht. In Tab. 4.1 sind die verschiedenen Parameter-variationen und die Ergebnisse der Rechnungen angegeben. Wie erwartet zeigt sich, dass sich unabhängig vom initialen Wasseranteil und dem Tropfendurchmesser bei allen Rechnungen (nahezu) der gleiche Gleichgewichtszustand (Temperatur nachher, Dampfanteil nachher) einstellt.

**Tab. 4.1** Durchgeführte Parametervariationen (Temperatur vorher: 10°C, Dampfanteil vorher: 0.5 [Molar Fraction])

Rechnung	Wasser vorher	Tropfendurchmesser	Dichte vorher	Temp. nachher	Dampfanteil nachher	Zeit zum Gleichgewicht	Notwendige Zeitschrittweite
	[Mass-Fraction]	[mm]	[kgm <sup>-3</sup> ]	[K]	[Molar-Fraction]	[s]	[s]
1	1.0e-06	0.200	0.9976	358.1	0.456	4.5	
2	1.0e-05	0.200	0.9976	358.1	0.456	3.2	2.0e-02
3	1.0e-04	0.200	0.9977	358.1	0.456	2.5	

Rechnung	Wasser vorher	Tropfendurchmesser	Dichte vorher	Temp. nachher	Dampfanteil nachher	Zeit zum Gleichgewicht	Notwendige Zeitschrittweite
4	1.0e-03	0.200	0.9984	358.1	0.455	2.0	
5	1.0e-02	0.200	1.0060	358.2	0.451	1.0	
6	1.0e-05	0.150	0.9976	358.1	0.456	1.9	
7	1.0e-05	0.100	0.9976	358.1	0.456	0.8	
8	1.0e-05	0.050	0.9976	358.1	0.456	0.2	
9	1.0e-05	0.010	0.9976	358.1	0.455	0.015	1.0e-04
10	1.0e-05	0.001	0.9976	358.1	0.455	9.0e-05	1.0e-06

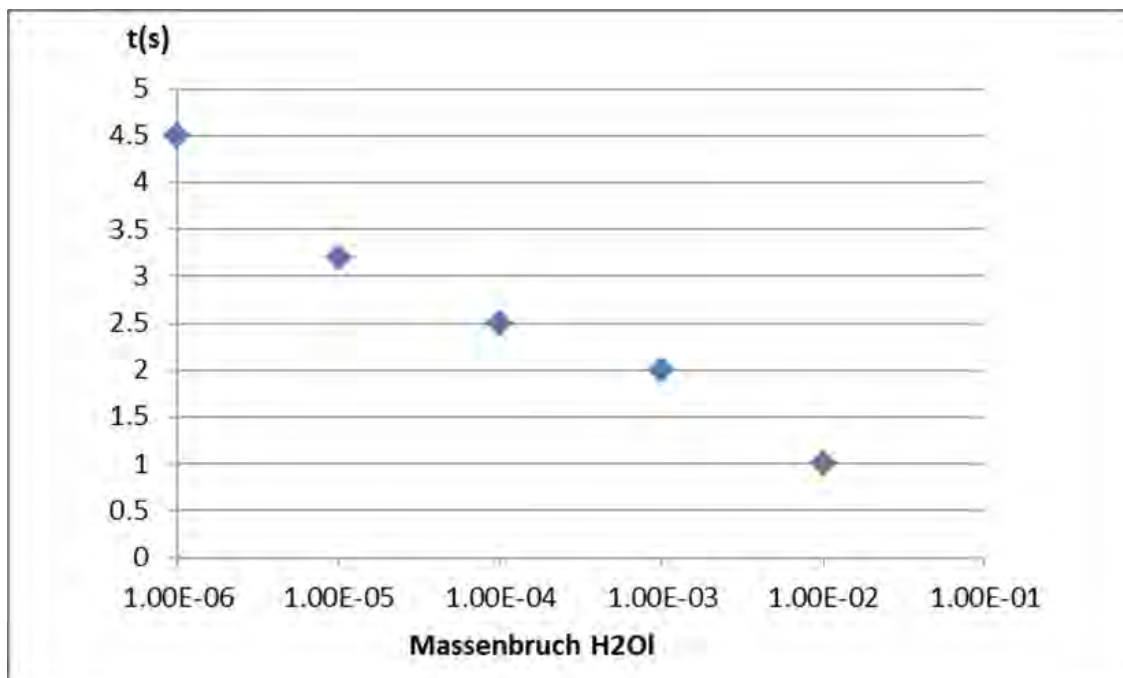


**Abb. 4.7** Dampfkonzentration und Temperatur über der Zeit

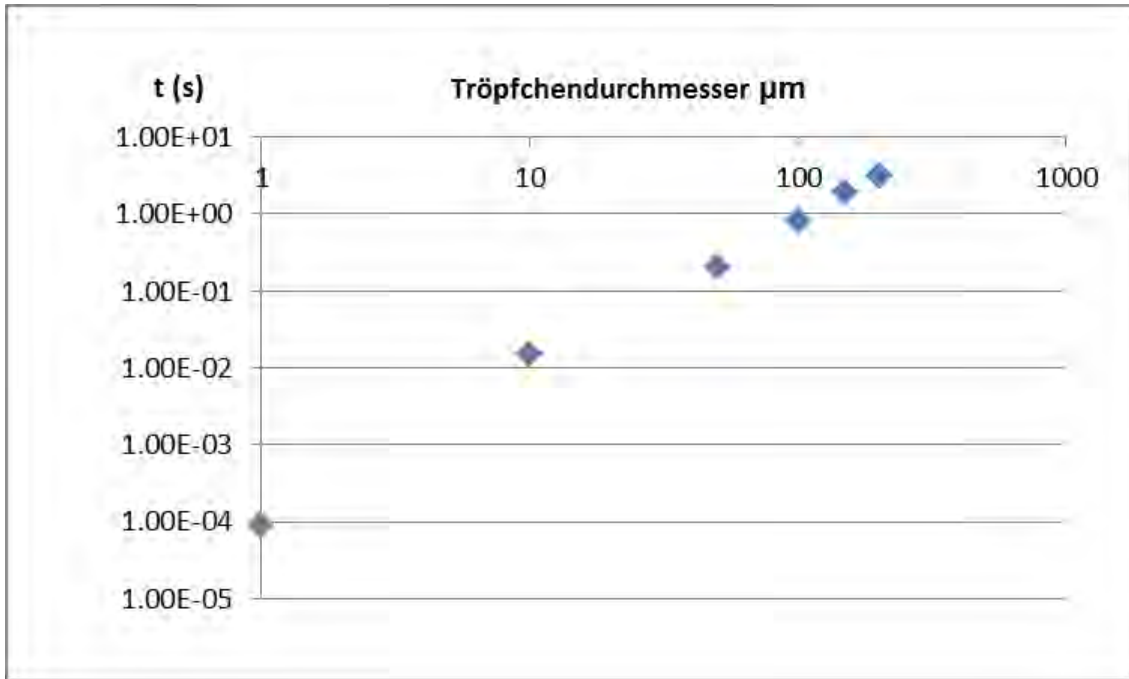
Allerdings variiert die Zeit, bis sich dieses Gleichgewicht und die notwendige Zeitschrittweite für eine konvergente Rechnung einstellen. In Abb. 4.8 ist die Abhängigkeit der Zeit bis zum Gleichgewicht ( $t_{GW}$ ) vom initialen Wasseranteil dargestellt. Es zeigt sich, dass sich der Gleichgewichtszustand mit zunehmendem initialen Wasseranteil schneller einstellt. Die Abhängigkeit ist allerdings relativ schwach. Obwohl sich  $Y_{H_2O}(t = 0 \text{ s})$  von  $1.0e-6$  auf  $1.0e-2$  um einen Faktor  $10^4$  ändert, nimmt die benötigte Zeit nur um ca. einen Faktor 4 ab. Es ergibt sich näherungsweise eine Abhängigkeit  $t_{GW} \sim \log(Y_{H_2O}(t = 0 \text{ s}))$ . Die Ursache für die Verringerung von  $t_{GW}$  ist, dass es mehr Kondensationskeime (Nebeltröpfchen) und damit mehr Oberfläche zum Kondensieren

des Dampfes gibt. Auch bei einem kleineren Tröpfchendurchmesser (und damit mehr Partikeln) steht eine größere Oberfläche für die Kondensation zur Verfügung als bei einem großen Tröpfchendurchmesser (und dabei weniger Partikeln). Hierdurch verringert sich wiederum die Zeit bis zum Einstellen des Gleichgewichtszustandes. Das ist in Abb. 4.9 dargestellt.

Allerdings ist es für die Rechnungen mit sehr kleinem Tröpfchendurchmesser notwendig, eine sehr kleine Zeitschrittweite zu wählen, damit die Energie- und Massenbilanzgleichungen konvergieren (z. B. Zeitschrittweite  $1.0 \times 10^{-6}$  s bei einem Tröpfchendurchmesser von  $1.0 \mu\text{m}$ , siehe Tab. 4.1). Diese sehr kleinen Zeitschrittweiten sind für die Nachrechnung von Experimenten oder eines Containment-Störfalles ungeeignet.



**Abb. 4.8** Abhängigkeit der Zeit bis zum Einstellen des Gleichgewichts vom initialen Wasseranteil (Tropfendurchmesser 0.2 mm)

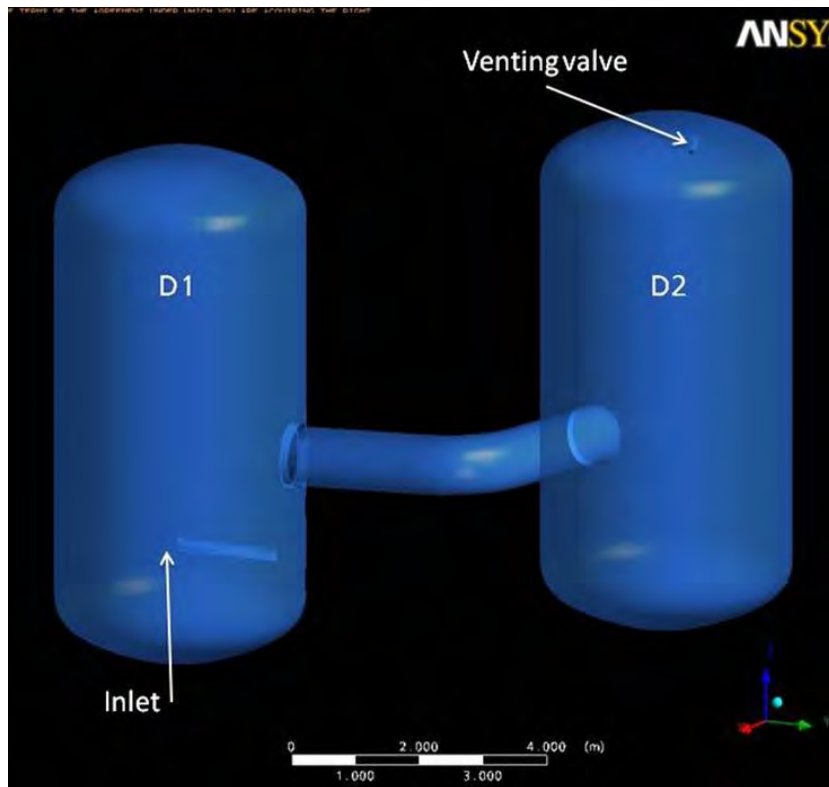


**Abb. 4.9** Abhängigkeit der Zeit bis zum Einstellen des Gleichgewichts vom Tropfendurchmesser (initialer Wasseranteil  $1.0\text{e-}5$ )

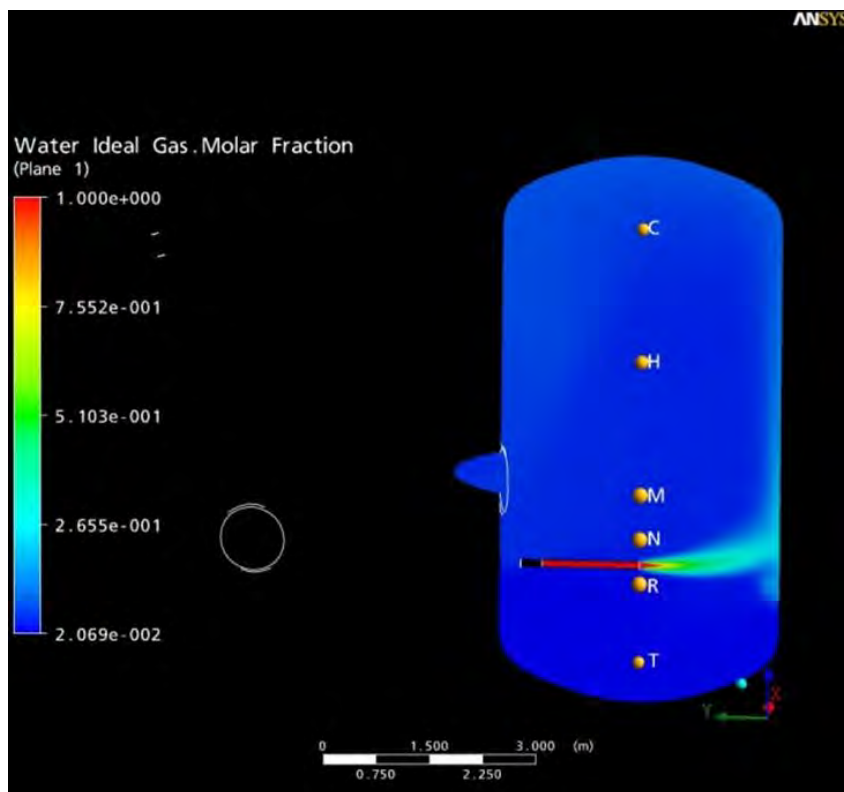
#### 4.7 Simulation des Panda4bis-Experiments mit unterschiedlichen Tröpfchengrößen und unterschiedlichen Einspeisebedingungen mit dem ursprünglichen Volumenkondensationsmodell

##### 4.7.1 Kurze Beschreibung des Experiments

Zu Beginn des Versuchs befindet sich in beiden Behältern Luft mit einer Temperatur von ca.  $76\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Im unteren Bereich des ersten Behälters befindet sich ein horizontales Rohr, durch das Dampf mit einem Massenstrom von  $\sim 54\text{ g/s}$  und einer Temperatur von ca.  $108\text{ }^{\circ}\text{C}$  eingespeist wird (Abb. 3.21, Abb. 3.22). Durch ein Ventil im oberen Bereich des 2. Behälters wird der Druck konstant auf  $1.3\text{ bar}$  gehalten. Durch die niedrige Temperatur der Luft und der Behälterwände treten im Laufe des Experiments Kondensationsvorgänge auf. Die Dampfkonzentration und die Temperatur werden an verschiedenen Messstellen im ersten (D1) und zweiten Behälter (D2) sowie im Verbindungsrohr gemessen. Das Experiment wurde bereits im Rahmen der Forschungsprojekte RS1181 und RS1500 simuliert. In den entsprechenden Abschlussberichten /SCH 10/ und /SCH 14/ sowie in den Berichten /ZBO 06/ und /AUB 05/ sind weitere Einzelheiten zum Experiment und der Simulation mit CFX zu finden.



**Abb. 4.10** Vereinfachte Geometrie des Panda4bis Experiments



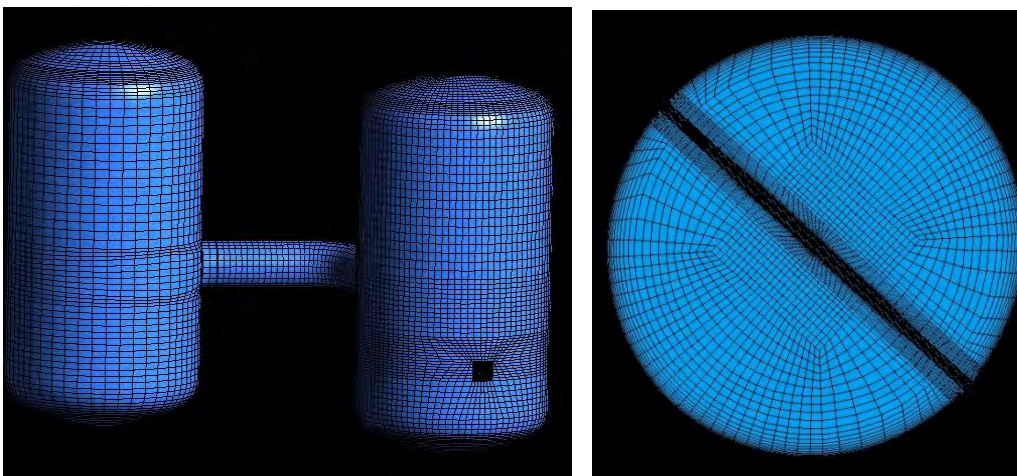
**Abb. 4.11** Schnitt durch den ersten PANDA-Behälter. Dargestellt ist eine Auswahl der Messpunkte



#### 4.7.2 Modellierung mit CFX

Die Simulation des Experiments erfolgte mit den Standardmodellen. Die Turbulenz wurde mit dem SST-Modell (einschließlich des Produktion- und des Dissipation-Terms) modelliert. Die Diffusion von Wasserdampf in Luft wurde mit der Fuller-Korrelation berechnet. Die Wärmestrahlung wurde mit dem Discrete-Transfer-Modell simuliert. Der Absorptionskoeffizient für Dampf wurde durch eine in RS1500 /SCH 14/ hergeleitete Korrelation (T, P) berechnet. Bei den hier vorherrschenden Temperaturen und Drücken ergibt sich ein Absorptionskoeffizient von ca.  $1 \text{ m}^{-1}$ . Die Starttemperatur für das Gas wurde durch Interpolation der Messstellen initialisiert. Es wurde eine mittlere Wandtemperatur von  $76.5 \text{ °C}$  angenommen. Um zu prüfen, ob die Abweichungen bei den Dampfkonzentrationen auf die geringere Wandtemperatur im Verbindungsrohr zurückzuführen sind, wurde nachträglich noch eine Simulation mit einer genaueren Wandtemperaturinitialisierung durchgeführt. Die Wandkondensation wurde mit dem in ANSYS implementierten Wandkondensationsmodell berechnet, Volumenkondensation und Verdampfung mit dem zu validierenden Volumenkondensationsmodell.

Es wurde ein hybrides CFD-Gitter verwendet. Es bestand aus ca. 568 000 strukturierten und ca. 6000 unstrukturierten Elementen. Um die Wandkondensation möglichst genau simulieren zu können, wurde das Gitter in Wandnähe verfeinert (Abb. 4.12). Da die Parameterstudien aufgrund der Vielzahl der notwendigen Simulationen sehr rechenintensiv waren, wurde auf eine weitere Gitterverfeinerung verzichtet. Das Gitter entspricht bis auf einige kleiner Änderungen (lokale Verfeinerungen) dem in RS1500 genutzten Gitter. Weitere Details und eine Gitterstudie sind in /SCH 14/ und /SCH 10/ zu finden.



**Abb. 4.12** In den Parameterstudien verwendetes CFX-Gitter

### 4.7.3 Simulation mit der ursprünglichen Version des Volumenkondensationsmodells

Im Folgenden wird der Versuch mit unterschiedlichen Modellparametern mit der ursprünglichen Version des Volumenkondensationsmodells nachgerechnet. Bei allen Simulationen wird von der Modellannahme eines konstanten Tröpfchendurchmessers ausgegangen. Als Durchmesser wurde  $\bar{d} = 200 \mu\text{m}$ ,  $50 \mu\text{m}$ , und  $10 \mu\text{m}$  angenommen. Wie in Abschnitt 4.5 ausgeführt, kann Volumenkondensation in der ursprünglichen Version des Volumenkondensationsmodells nur stattfinden, wenn bereits Tröpfchen vorliegen. Deshalb wird für den Zeitpunkt  $t = 0 \text{ s}$  ein Tröpfchenmassenbruch von  $1.0\text{e-}5$  angenommen. Bis auf eine Simulation mit  $\bar{d} = 200 \mu\text{m}$  wird am Einlassrohr der gleiche Tröpfchenanteil eingespeist. Um zu untersuchen, welchen Einfluss die Tröpfcheneinspeisung auf das Simulationsergebnis hat, werden bei einer Simulation (Inlet0) keine Tröpfchen eingespeist.

Im Folgenden werden die über die Fläche integrierten Wandkondensationsraten und die über das Volumen integrierten Volumenkondensationsraten sowie die Temperatur und die Dampfkonzentration an unterschiedlichen Monitorpunkten verglichen, um den Einfluss der Modellparameter beim Volumenkondensationsmodell zu untersuchen.

Die Simulation mit dem kleinsten Tröpfchenradius  $\bar{d} = 10 \mu\text{m}$  ist nach ca. 622 s aufgrund numerischer Probleme abgebrochen (Abb. 4.13). Da bei weiterer Verringerung des Tröpfchendurchmessers die Kondensationsraten zunehmen, kann davon ausgegangen werden, dass die numerische Steifheit weiter zunimmt. Deshalb wurde darauf verzichtet.

Die beiden Simulationen ( $\bar{d} = 50 \mu\text{m}$  und  $\bar{d} = 200 \mu\text{m}$ ) mit Tröpfcheneinspeisung am Einlass zeigen qualitativ ein ähnliches Verhalten. Die Volumenkondensation setzt bei beiden Simulationen zu einem vergleichbaren Zeitpunkt ein: bei Tropfen mit  $50 \mu\text{m}$  nach 427 s und bei  $200 \mu\text{m}$  großen Tropfen nach 451 s. Allerdings erfolgt der Anstieg bei den kleineren Tropfen etwas schneller und die Kondensationsrate ist insgesamt etwas höher. Der Grund ist, dass bei gleicher Tröpfchenmasse im Fall von kleineren Tropfen die Phasengrenzfläche größer ist. Dies führt zu einer größeren Volumenkondensationsrate. Die beiden Simulationen mit Tröpfcheneinspeisung unterscheiden sich hinsichtlich der Temperatur an den Monitorpunkten kaum (Abb. 4.14).

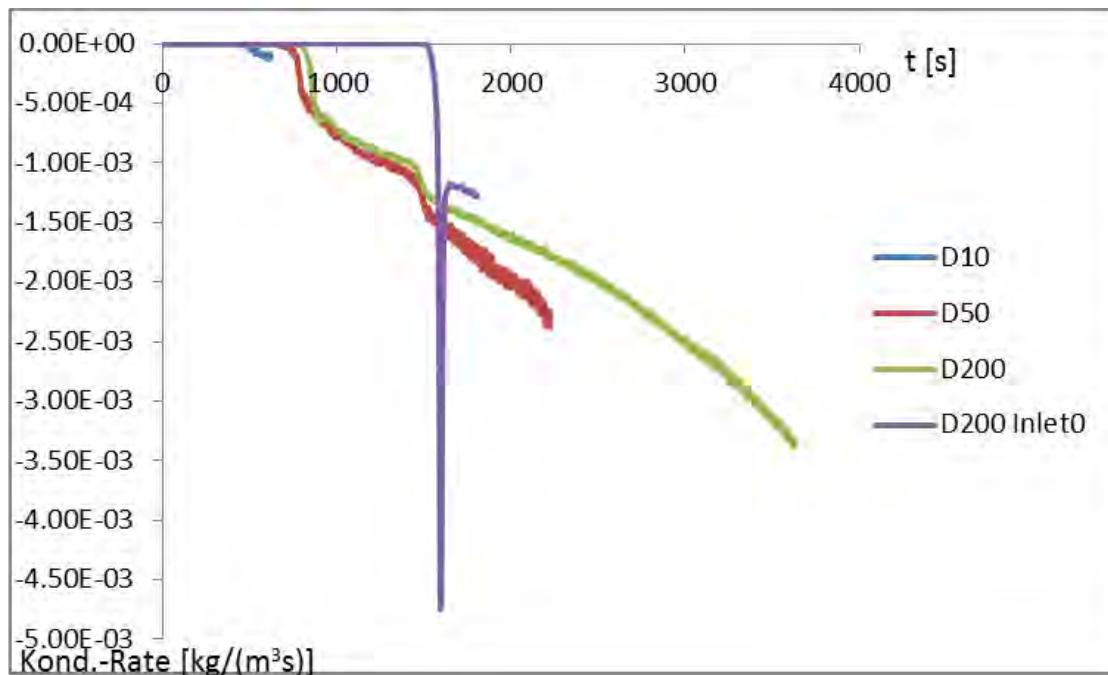
Zum Zeitpunkt  $t = 1500$  s findet bei der Simulation mit  $200\ \mu\text{m}$  großen Tropfen Volumen Kondensation in großen Teilen von D1, der oberen Hälfte des Verbindungsrohrs und Teilen von D2 statt (Abb. 4.16, Abb. 4.17). Sie ist besonders ausgeprägt im Bereich des Strahls und im Bereich der Behälterwände.

Die Simulation, bei der keine Tröpfchen am Einlass eingespeist (Inlet0 d200, Abb. 4.13) werden, zeigt ein deutlich unterschiedliches Verhalten. Bis  $1500$  s findet keine Volumen Kondensation statt. Bei  $1600$  s kommt es zu einem sehr starken Anstieg der Volumen Kondensation in Form eines kurzzeitigen Peaks, danach fällt die Rate auf einen Wert, der etwas unter dem der Simulation mit Wassertropfeneinspeisung liegt. Die fehlende Volumen Kondensation bis  $1500$  s bei der Simulation ohne Tröpfcheneinspeisung kann wie folgt erklärt werden: In den ersten  $400$  s liegt der Partialdruck von  $Y_{\text{H}_2\text{Og}}$  unterhalb vom Sättigungsdampfdruck, deshalb findet keine Kondensation statt. Ist  $Y_{\text{H}_2\text{O}l} = 0$  am Einlass, so werden durch die permanente Einspeisung die initial vorhandenen Wassertropfen verdrängt, so dass aufgrund fehlender Kondensationskeime im späteren Verlauf auch keine Volumen Kondensation stattfinden kann, auch wenn in diesem Bereich der Dampfpartialdruck den Sättigungsdampfdruck übersteigt. (Anmerkung: Um zu verhindern, dass aufgrund numerischer Ungenauigkeiten Volumen Kondensation auch bei fehlenden Kondensationskeimen starten kann, wird Volumen Kondensation unterhalb einer sehr kleinen Grenzflächendichte unterbunden).

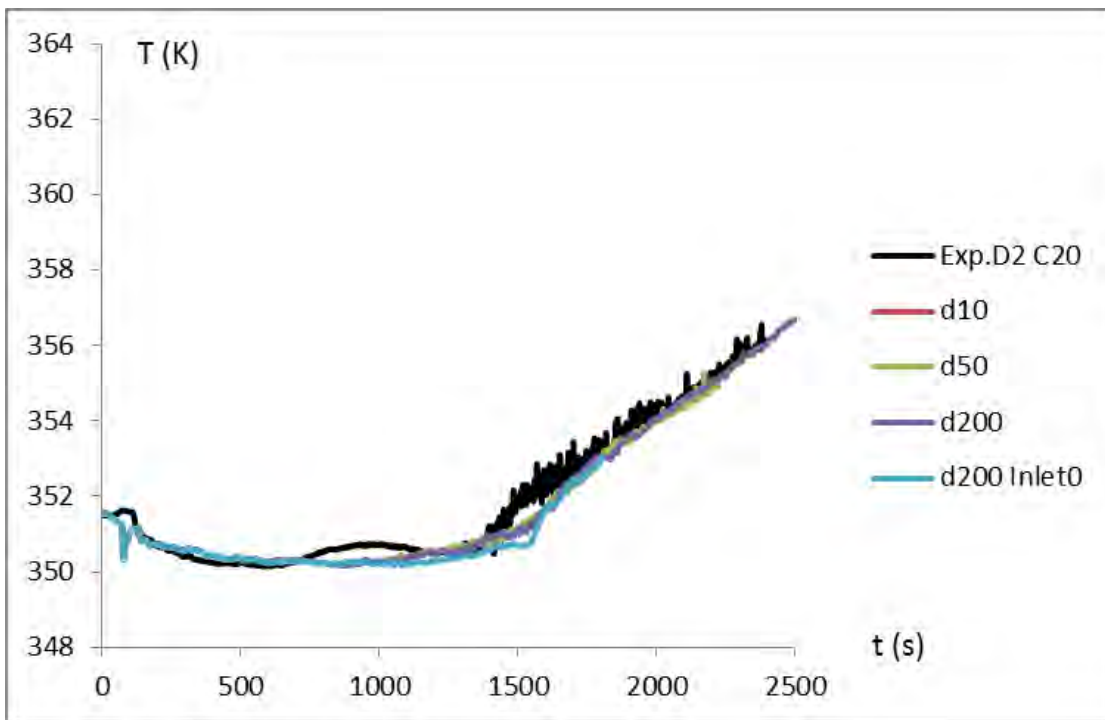
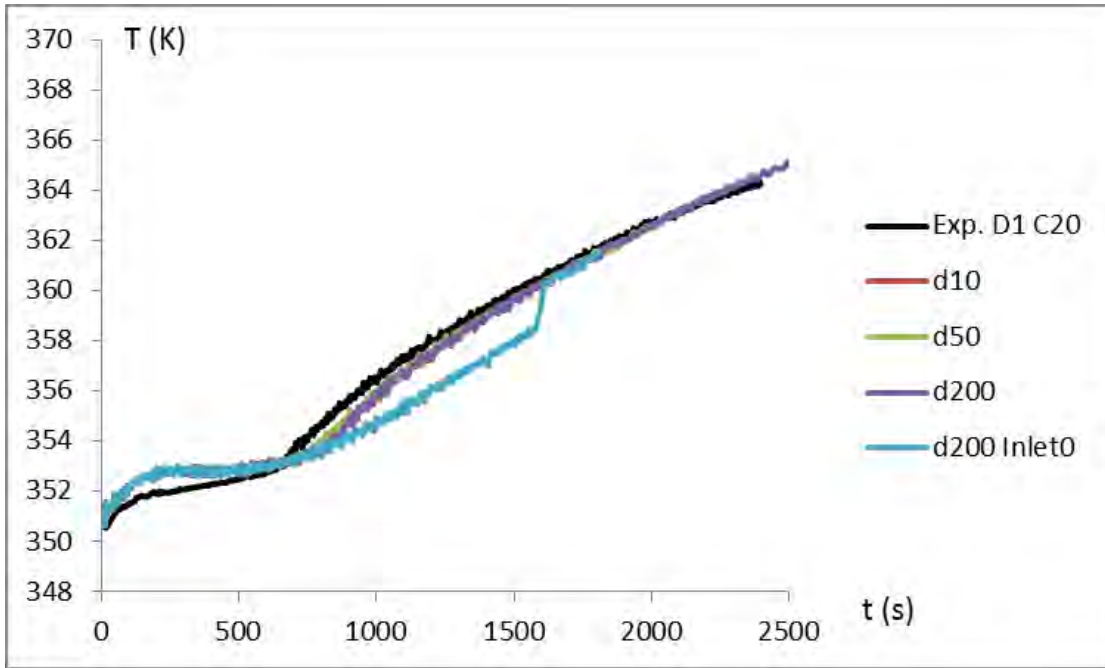
Nach  $1500$  s ist die Phasengrenzfläche im 1. Behälter und im oberen Bereich des Verbindungsrohrs 0. Nur im 2. Behälter (insbesondere im unteren Bereich) ist noch  $Y_{\text{H}_2\text{O}l} > 0$ . Entsprechend kann nur im 2. Behälter Volumen Kondensation stattfinden. Durch die Volumen Kondensation im 2. Behälter ist nach  $1550$  s  $Y_{\text{H}_2\text{O}l}$  und auch die Phasengrenzfläche in diesem Bereich stark angestiegen (Abb. 4.19). Durch die Gegenströmung werden durch das Verbindungsrohr verstärkt Tröpfchen in den 1. Behälter transportiert. Da in Teilen des 1. Behälters ein Dampfpartialdruck oberhalb des Sättigungsdampfdrucks vorliegt, setzt Volumen Kondensation ein, die dann die Phasengrenzfläche weiter vergrößert. Durch Vermischungsvorgänge verteilt sich  $Y_{\text{H}_2\text{O}l}$  im 1. Behälter und es kommt nach  $1600$  s in großen Teilen zu Volumen Kondensation. Durch diese starke Volumen Kondensation verringert sich die Dampfkonzentration etwas und die Temperatur steigt an (Abb. 4.14).

Die Temperatur am Messpunkt D C20 (oberer Bereich des 1. Behälters) liegt bei der Simulation ohne Tröpfcheneinspeisung bis zum Zeitpunkt  $1500$  s tiefer als bei der Simulation mit Tröpfcheneinspeisung und auch dem Experiment (Abb. 4.14). Der Unter-

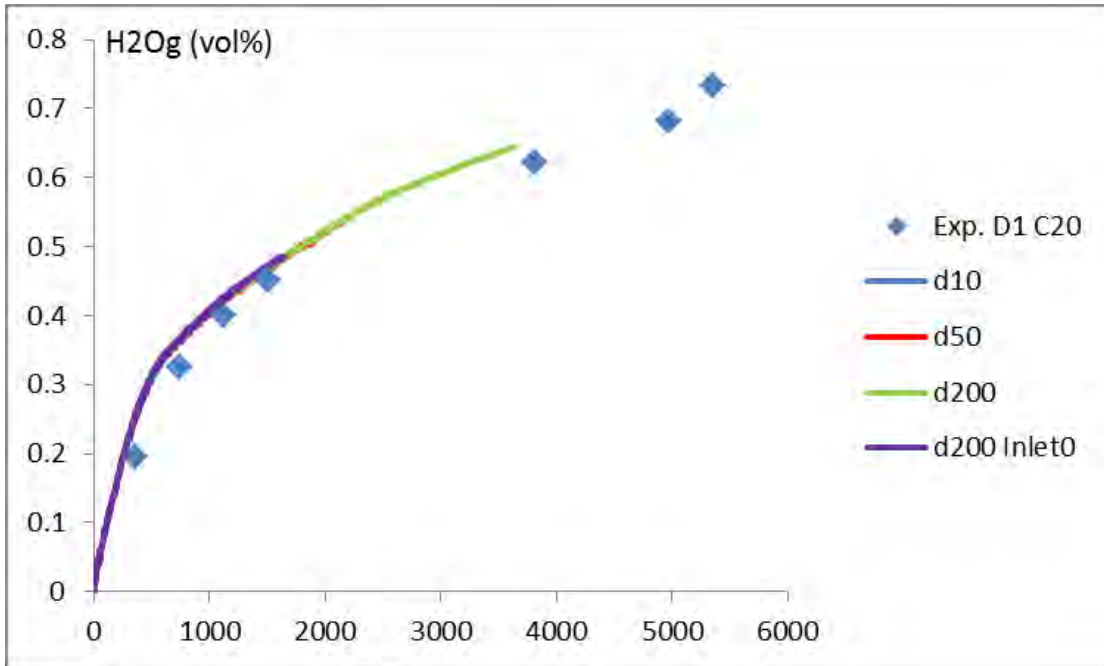
schied zwischen den beiden Simulationen lässt sich dadurch erklären, dass durch die Volumen Kondensation Wärme in die Gasphase freigesetzt wird. Die bessere Übereinstimmung bei der Temperatur legt den Schluss nahe, dass die Rechnung mit Tropfeneinspeisung die Volumen Kondensationsrate besser simuliert. Zudem wird deutlich, dass Volumen Kondensation einen nicht zu vernachlässigenden Einfluss auf die Gas-temperatur hat. Die Abhängigkeit der Dampfkonzentration von den Parametern des Vo-lumen Kondensationsmodells ist allerdings so schwach, dass in Abb. 4.15 keine signifi-kante Abhängigkeit der Dampfkonzentration vom Volumen Kondensationsmodell beobachtet werden kann.



**Abb. 4.13** Volumen Kondensationsrate bei unterschiedlichem Tröpfchenradius und unterschiedlichen Einspeisebedingungen



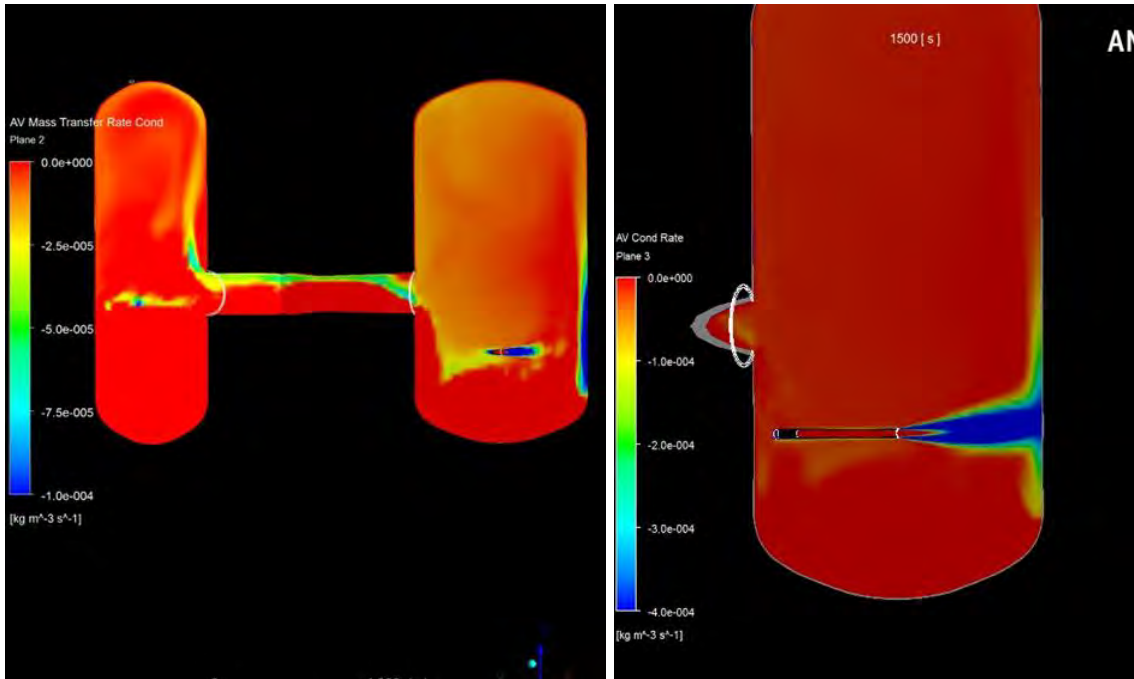
**Abb. 4.14** Temperaturverlauf an den Messpunkten D1C20 und D2C20



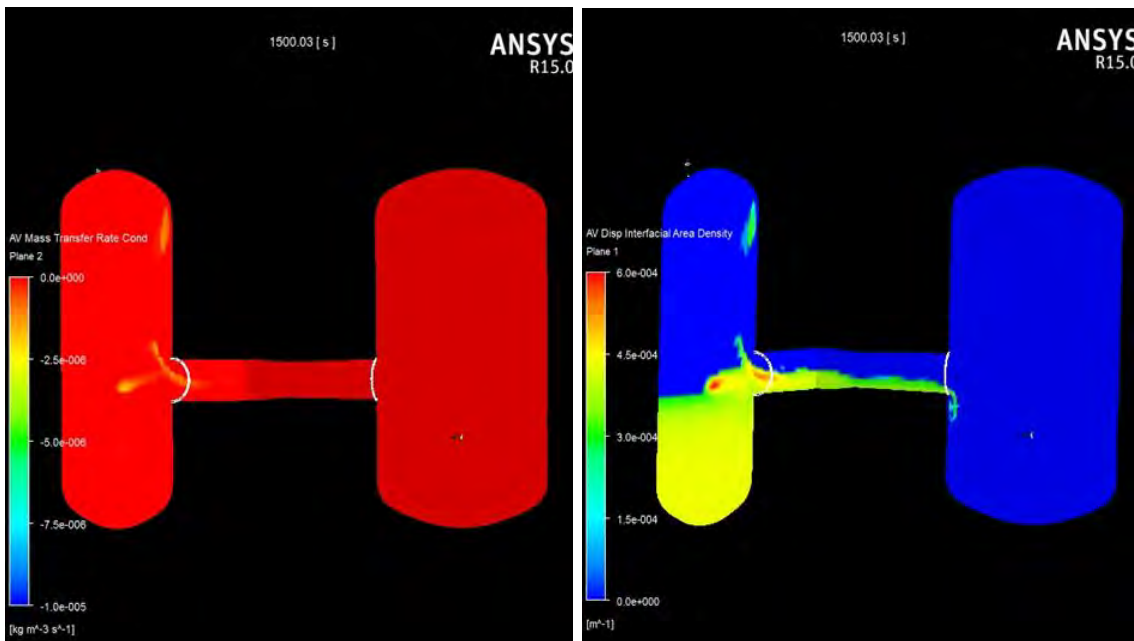
**Abb. 4.15** Dampfkonzentration in Abhängigkeit vom Volumenkondensationsmodell



**Abb. 4.16** Iso-Surface Volumenkondensationsrate =  $1e-4 \text{ kg/ (m}^3\text{/s)}$  bei der Simulation mit Tröpfcheneinspeisung d200 zum Zeitpunkt  $t = 1500 \text{ s}$

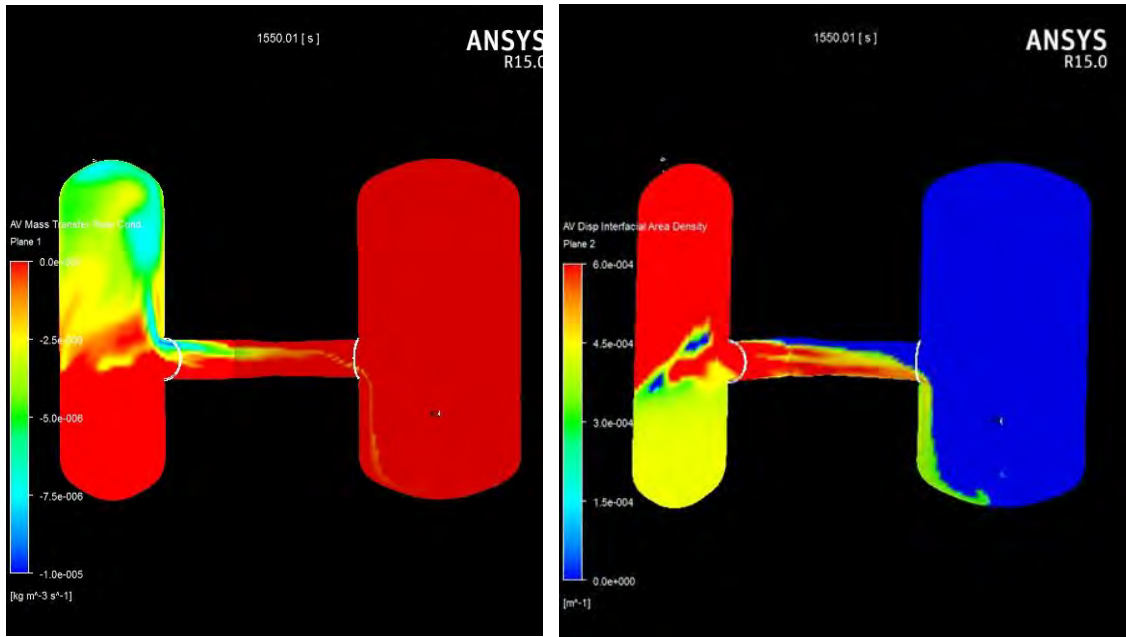


**Abb. 4.17** Volumenkondensationsrate bei der Simulation mit Tröpfcheneinspeisung d200 zum Zeitpunkt  $t = 1500$  s

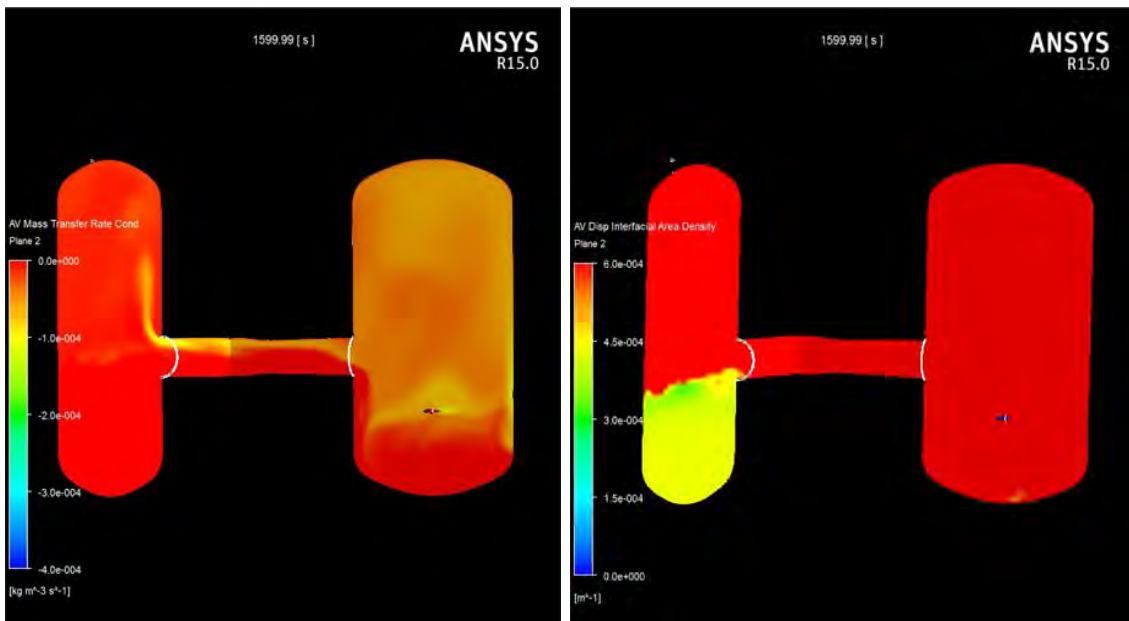


**Abb. 4.18** Volumenkondensationsrate und Phasengrenzfläche nach 1500 s bei der Simulation ohne Tröpfcheneinspeisung





**Abb. 4.19** Volumenkondensationsrate und Phasengrenzfläche nach 1550 s bei der Simulation ohne Tröpfcheneinspeisung



**Abb. 4.20** Volumenkondensationsrate und Phasengrenzfläche nach 1600 s bei der Simulation ohne Tröpfcheneinspeisung



#### 4.7.4 Schlussfolgerungen

Das Volumenkondensationsmodell ist bei Wahl geeigneter Start- und Randbedingungen in der Lage, die bei der Volumenkondensation ablaufenden Prozesse zu simulieren. Die Tröpfchendurchmesser müssen allerdings größer als die in Experimenten beobachteten  $1\ \mu\text{m} - 2\ \mu\text{m}$  gewählt werden, ansonsten kann es zu numerischen Schwierigkeiten (Programmabbruch bei  $10\ \mu\text{m}$ ) kommen und/oder die Zeitschritte müssen in der Simulation sehr klein gewählt werden. Dies ist aber für lange transiente Vorgänge nicht praktikabel. Die Wahl des Tröpfchendurchmessers hatte einen nur moderaten Einfluss auf die integrale Volumenkondensationsrate und für die sicherheitstechnisch relevanten Größen  $Y_{\text{H}_2\text{Og}}$  und  $T$  konnte an den Monitorpunkten nur ein schwacher Einfluss des Tröpfchendurchmessers festgestellt werden.

Voraussetzung war allerdings, dass im Gegensatz zu den experimentellen Randbedingungen als Startbedingung  $Y_{\text{H}_2\text{O}} > 0$  gewählt wurde, ebenso musste am Einlass  $Y_{\text{H}_2\text{O}} > 0$  gesetzt werden. Um zu verhindern, dass die Tropfen sofort wieder verdampfen, muss Verdampfung bei  $Y_{\text{H}_2\text{O}} \leq Y_{\text{H}_2\text{O}}(t = 0\ \text{s})$  unterdrückt werden. Diese Vorgehensweise ist eigentlich unphysikalisch und kann im Einzelfall zu Fehlern/Ungenauigkeiten führen (es ändert sich z. B. die Dichte etc.). Wegen dieser Modellschwächen wurden die im Folgenden beschriebenen Änderungen am Modell vorgenommen.

#### 4.8 Modifikation des Volumenkondensationsmodells

In der ursprünglichen Version des Volumenkondensationsmodells besteht die Möglichkeit, dass keine Kondensation stattfindet, weil keine Kondensationskeime (= Wassertropfen) vorliegen. Keimbildungsprozesse werden allerdings nicht simuliert. Das Volumenkondensationsmodell soll zukünftig für Containment-Anwendungen genutzt werden. Für diese Anwendungen ist allerdings kaum davon auszugehen, dass in größeren Raumbereichen keinerlei Kondensationskeime vorliegen. Hydrophile Staubpartikel und Aerosole können als Ausgangspunkt für Volumenkondensation dienen. Deshalb wird bei der Modifikation des Volumenkondensationsmodells davon ausgegangen, dass immer eine kleine Phasengrenzfläche  $\beta_{\text{min}}$  vorliegt, an der Volumenkondensation stattfinden kann:

$$\text{Disp Interfacial Area Density Min} = 1.0\text{e-}4\ [\text{m}^{-1}]$$

$$\text{Disp Volume Fraction Max} = 0.634$$

*Disp Interfacial Area Density Switch =*  
*if(Disp Volume Fraction >= Disp Volume Fraction Max,0,1)*  
*Disp Interfacial Area Density Calc = 3\*Disp Volume Fraction/Disp Radius*  
*Disp Interfacial Area Density =*  
*(Disp Interfacial Area Density Calc+ Disp Interfacial Area Density Min)*  
*\*Disp Interfacial Area Density Switch*

Mit dieser Modifikation ist es nicht mehr notwendig,  $Y_{H_2O}(t = 0 \text{ s}) > 0$  zu wählen, deshalb braucht auch die Verdampfung für kleine  $Y_{H_2O}$  nicht mehr unterdrückt zu werden. Aus numerischen Gründen wird die Verdampfung für sehr kleine Tropfenkonzentrationen allerdings unterdrückt.

*Evap Switch Mass Fraction = 1.0e-8*  
*Evap Switch = if(H<sub>2</sub>OI.Mass Fraction < Evap Switch Mass Fraction,0,1)*

Die Größe "Disp Interfacial Area Density Min" ist in aller Regel wegen fehlender Informationen zu den vorhandenen Kondensationskeimen nicht bekannt. Bei den anschließenden Validierungssimulationen wird der Einfluss dieser Größe durch Parametervariationen untersucht.

Die Validierungsrechnungen haben gezeigt, dass eine Begrenzung der Volumenkonkondensationsrate aus numerischen Gründen notwendig ist. In sehr seltenen Fällen (insbesondere in Wandnähe) kam es bei einer hohen lokalen Grenzflächendichte  $\beta$  zu sehr hohen Kondensationsraten und zu einer Divergenz des Regelalgorithmus. Der Hintergrund ist, dass die Kondensationsrate als Differenz der aktuellen lokalen Dampfkonzentration vom aktuellen Sättigungsdampfdruck (Temperatur, Druck) berechnet wird.

$$S_{H_2O} = F(\beta) \cdot (Y_{H_2Og}^* - Y_{H_2Og}^{*Sat}) \quad (4.9)$$

Allerdings wird bei der Kondensation die latente Wärme frei, die zu einer Temperaturerhöhung und damit auch zu einer Erhöhung des Sättigungsdampfdrucks führt. Ist  $F(\beta)$  nicht hinreichend klein, so kommt es innerhalb eines Zeitschritts zu einer Überschätzung der Kondensationsrate. Um dieses Problem zu umgehen, wurde die Änderung der Dampfkonzentration innerhalb eines Zeitschritts limitiert.

*Mass Transfer Rate Clip= if (Mass Transfer Rate > Max Mass Transfer Rate, Max Mass Transfer Rate, Mass Transfer Rate)*

*Mass Transfer Rate Clip 2= if (Mass Transfer Rate Clip < (-1\*Max Mass Transfer Rate), -1\*Max Mass Transfer Rate, Mass Transfer Rate Clip)*

*Max Mass Transfer Rate =Max dH2O\*Density/max(Time Step Size, Time Step Min)*

*Max dH2O=0.01*

*Time Step Min=0.075 [s]*

Mit dieser Modifikation konnten bei den Validierungsrechnungen numerische Probleme vermieden werden. Sollten bei zukünftigen Arbeiten erneut numerische Probleme auftreten, so muss die Formulierung des Quellterms überarbeitet werden. Dazu sind zwei Modifikationen in Betracht zu ziehen:

1. Die Änderung des Sättigungsdampfdrucks durch die latente Wärme sollte berücksichtigt werden.
2. Der Regelalgorithmus (momentan D-Regler) kann durch numerisch robusteres Verfahren (z. B. PID-Regler) ersetzt werden.

Die hohe Volumen Kondensationsrate insbesondere in Wandnähe erscheint physikalisch nicht sinnvoll bzw. widerspricht dem Modellierungskonzept der Wandkondensation. Zudem gibt es hierbei ein Problem mit dem ANSYS-Wandkondensationsmodell (in der Version CFX-16 sowie in älteren Versionen). Zur Berechnung der Wandkondensationsrate wird der Dampfmassenbruch verwendet, ohne zu berücksichtigen, dass es sich bei  $H_2O$  um eine Flüssigkeit handelt. Dadurch kann es bei hohen Tröpfchenkonzentrationen an der Wand zu einer Unterschätzung der Wandkondensationsrate kommen (siehe auch Abschnitt 4.9.2.3).

Durch das Modellieren des Ausregens bei hohen Tropfenkonzentrationen und durch eine Senke für Tropfen an den Wänden soll dies zukünftig vermieden werden. Es wurde auch getestet, welchen Einfluss das Unterdrücken von Volumen Kondensation bei einem geringeren Wandabstand als 5 mm hat (siehe Abschnitt 4.9.4 ff.).

Im Laufe der Arbeiten hat sich gezeigt, dass bei überhitztem Dampf die Verdampfungsrate falsch berechnet wurde. Bei stark überhitzten Bedingungen kann es hierbei zu numerischen Fehlern kommen (Division durch Null) oder aber zu einem Vorzeichenfehler (statt Verdampfung findet Kondensation statt).

Deshalb wird die Expression *H2Og Molfrac Sat* (Molenbruch des Dampfes bei Sättigungsbedingungen) auf eins begrenzt, statt auch größere Werte zuzulassen (Original:  $P_{sat}/\text{Absolute Pressure}$ ):

$$H_2O_g \text{ Molfrac Sat} = \min(1, P_{\text{sat}}/\text{Absolute Pressure}) \quad (4.10)$$

#### 4.9 Nachrechnung von Panda4bis mit dem modifizierten Volumenkon- densationsmodell

Mit den in Abschnitt 4.8 beschriebenen Modifikationen wurde das Experiment erneut nachgerechnet. Bei der Modellierung gibt es zwei unbekannte Konstanten: den mittleren Tröpfchendurchmesser und die minimale Phasengrenzflächendichte  $\beta$ . Für beide Parameter wurden in den Abschnitten 4.9.1 und 4.9.2 Parameterstudien durchgeführt. Dabei haben sich ein Tröpfchendurchmesser  $d = 200 \mu\text{m}$  und eine minimale Phasengrenzflächendichte  $\beta_{\text{min}} = 1.0\text{e-}4 \text{ m}^{-1}$  als geeignete Werte herausgestellt. Sofern nicht ausdrücklich andere Werte verwendet wurden, werden diese beiden Werte verwendet.

Als erstes wird der Einfluss von  $\beta_{\text{min}}$  und  $d$  untersucht. Dann soll unter Verwendung des Algebraic Slip Modells (ASM) das Absinken von Wassertröpfchen in der Simulation berücksichtigt werden. Im letzten Abschnitt wird die Unterdrückung von Volumen Kondensation in Wandnähe behandelt.

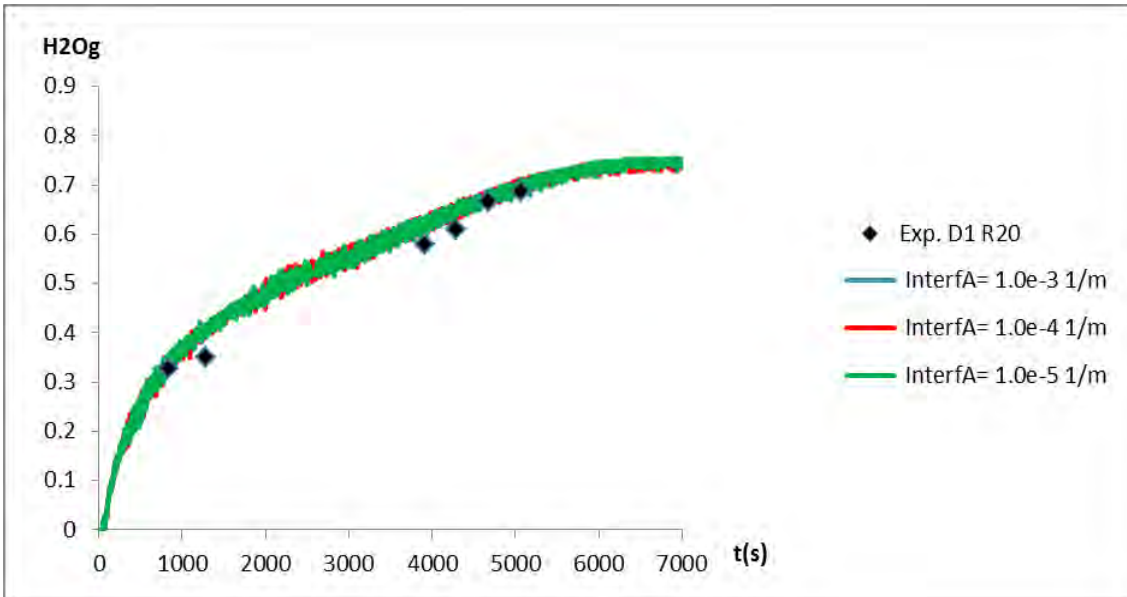
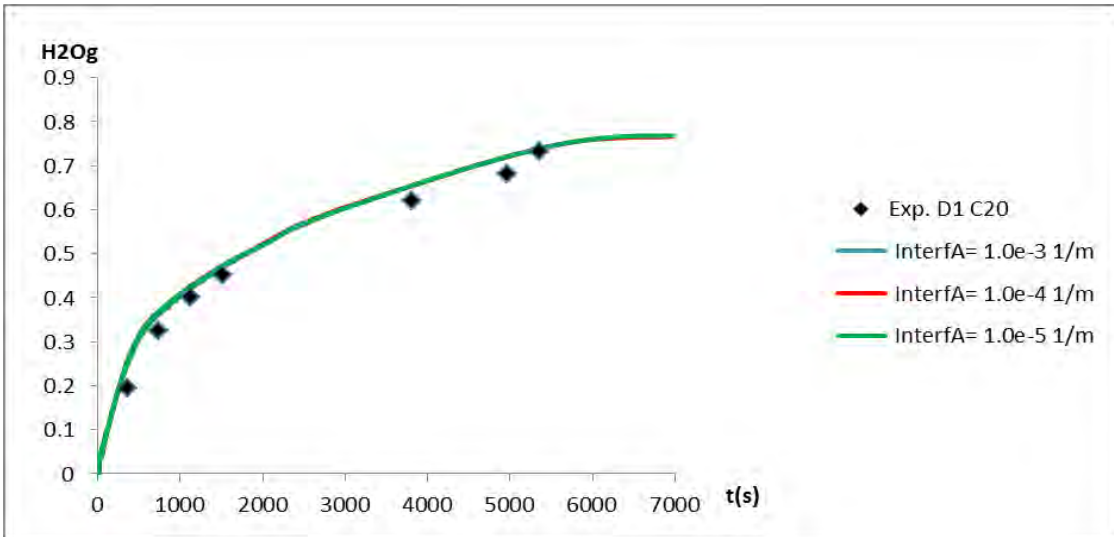
##### 4.9.1 Parameterstudie zum Einfluss der minimalen Phasengrenzflächendichte

Um Volumen Kondensation unabhängig von bereits vorhandenen Wassertröpfchen zu ermöglichen, wurde das Volumen Kondensationsmodell dahingehend modifiziert, dass eine minimale Phasengrenzfläche  $\beta_{\text{min}}$  existiert. Da die Größe von  $\beta_{\text{min}}$  nicht bekannt ist, soll untersucht werden, wie groß der Einfluss dieser Größe auf das Simulationsergebnis ist. Es wurden drei Simulationen mit unterschiedlichen  $\beta_{\text{min}}$  durchgeführt. Der Tröpfchendurchmesser betrug bei allen Simulationen  $200 \mu\text{m}$ .

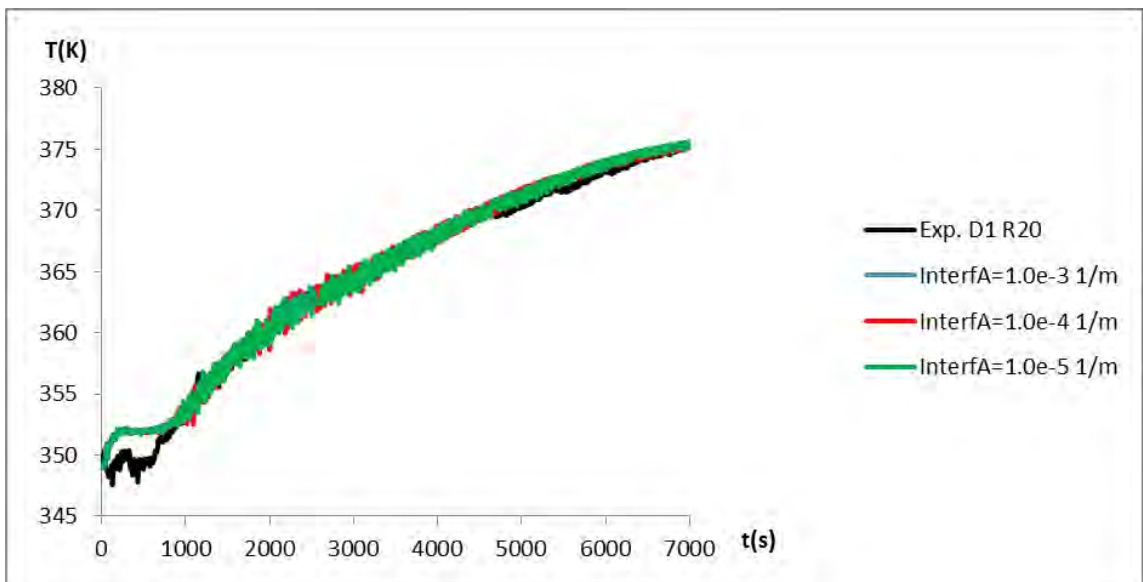
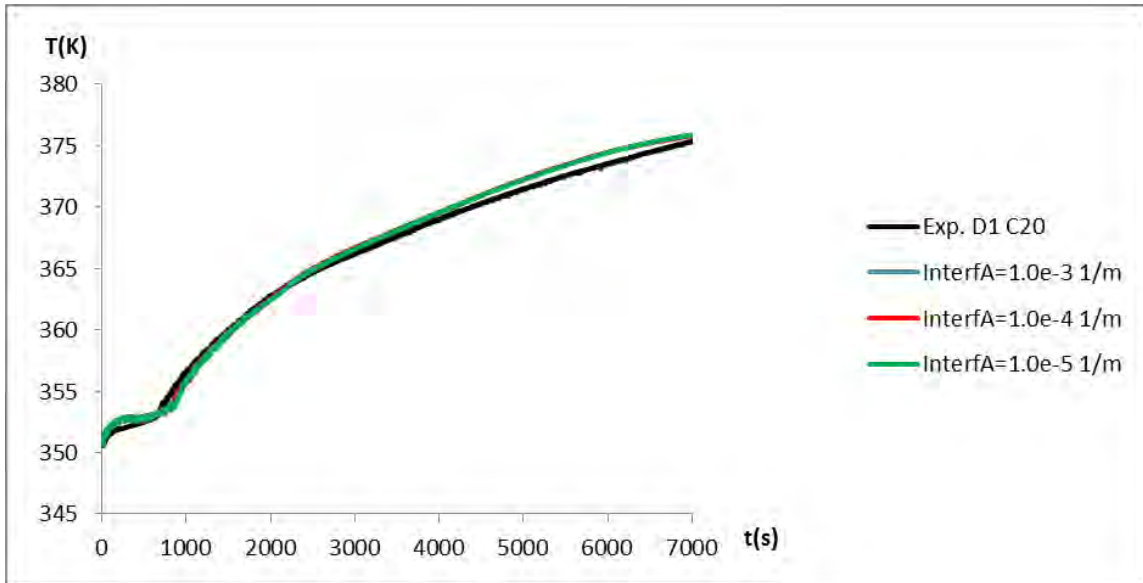
Es zeigt sich, dass sich bei allen Simulationen das Volumenintegral über die lokalen Volumen Kondensationsraten und die lokalen Volumenverdampfungsraten bis ca.  $6000 \text{ s}$  nicht signifikant unterscheidet (Abb. 4.23). Auch nach  $6000 \text{ s}$  sind die Unterschiede zwischen den drei Simulationen im zeitlichen Mittel gering. Erwartungsgemäß sind deshalb auch die Dampfkonzentrationen und auch die Temperaturen an den einzelnen Messstellen nahezu identisch. Nach  $6000 \text{ s}$  kommt es bei den Volumen Kondensations-/Verdampfungsraten zu starken Oszillationen. Die Volumen Kondensation findet dabei in unmittelbarer Nähe zu den Behälterwänden statt und ersetzt die Wandkon-

densation. In diesem Bereich liegen sehr hohe Tröpfchenkonzentrationen vor, was zu sehr hohen Quelltermen und numerischen Oszillationen führt. Nach dem Modellierungskonzept sollte der unmittelbare Wandbereich (1. Gaszelle) durch das Wandkondensationsmodell modelliert werden. Zudem ist bei hohen  $Y_{\text{H}_2\text{O}}$  (es werden maximale Werte von über 0.9 erreicht) mit einem Ausregnen der Tröpfchen zu rechnen. Dies wird bei den hier beschriebenen Simulationen ohne das Algebraic Slip Modell nicht berücksichtigt (siehe dazu auch Abschnitt 4.9.3).

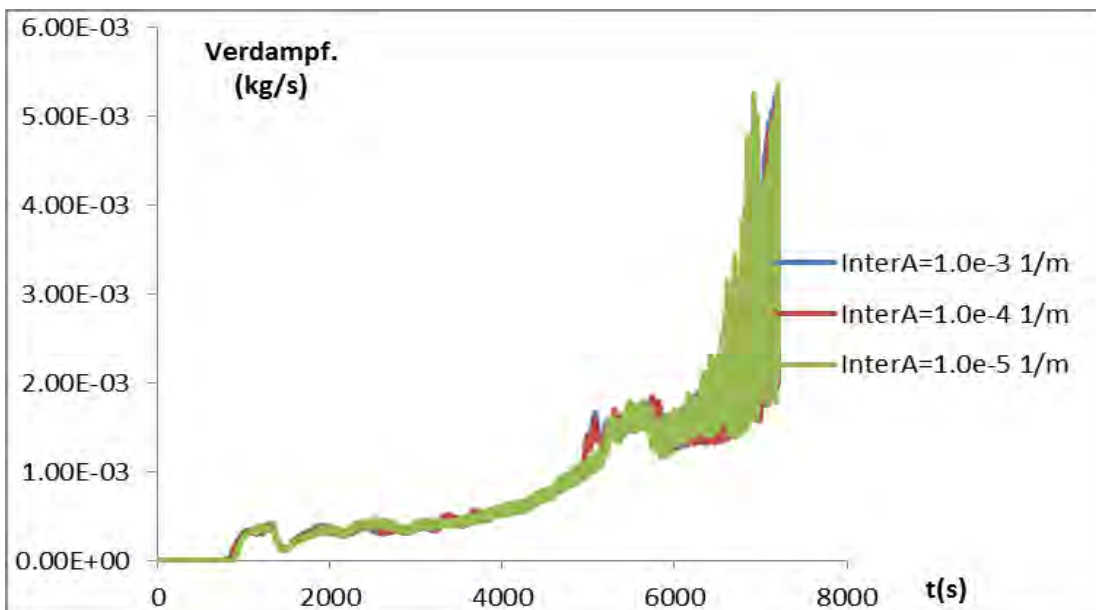
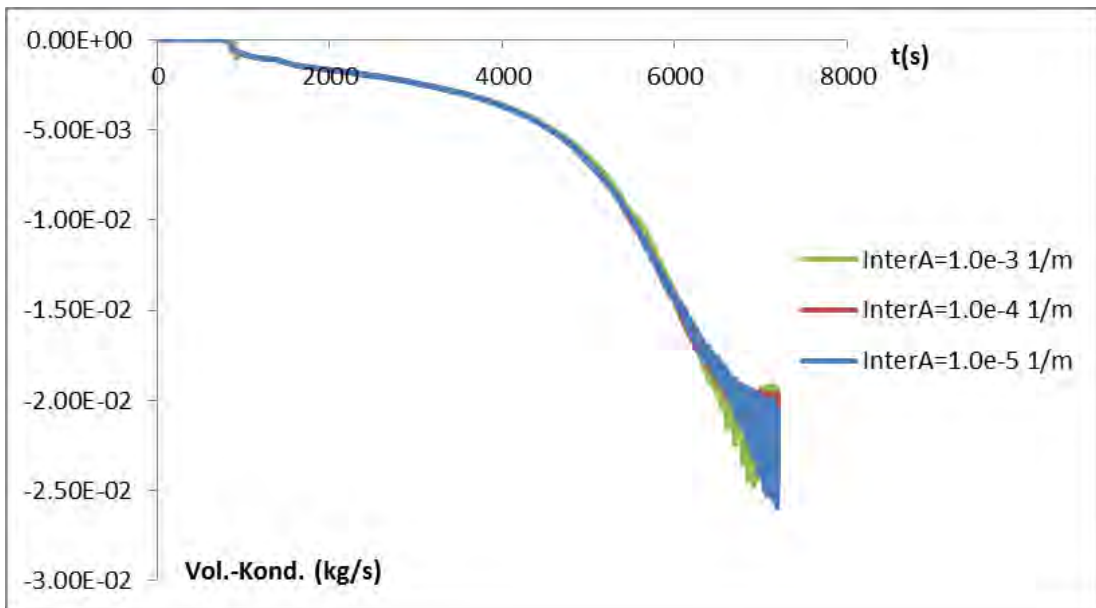
Die Wahl von  $\beta_{\text{min}}$  hat keinen deutlichen Einfluss auf die benötigte Rechenzeit und zeigt keine eindeutige Abhängigkeit (Tab. 4.2). Bei Vergleich der Rechenzeit ist zu berücksichtigen, dass die Simulationen mehrfach gestoppt und neu gestartet wurden und die Anzahl der CPUs im Bereich 4 – 16 CPUs variierte und daher kein exakter Vergleich möglich ist. Zusammengefasst kann festgestellt werden, dass für Werte von  $1.0\text{e-}5 \text{ m}^{-1} < \beta_{\text{min}} < 1.0\text{e-}3 \text{ m}^{-1}$  die Simulationsergebnisse nahezu identisch sind und das Experiment in guter Übereinstimmung simuliert wurde (Abb. 4.21, Abb. 4.22). Deshalb wird für zukünftige Simulationen ein  $\beta_{\text{min}} = 1.0\text{e-}4 \text{ m}^{-1}$  gewählt.



**Abb. 4.21** Dampfkonzentrationen bei unterschiedlicher minimaler Phasengrenzfläche



**Abb. 4.22** Temperatur bei unterschiedlicher minimaler Phasengrenzfläche



**Abb. 4.23** Räumliches Intergral der Volumen Kondensation (links) und der Volumenverdampfung bei unterschiedlicher minimaler Phasengrenzfläche

**Tab. 4.2** Benötigte CPU-Zeit in CPU-Sekunden in Abhängigkeit von  $\beta_{\min}$  ( $\text{m}^{-1}$ )

$\beta_{\min}$ ( $\text{m}^{-1}$ )	CPU (s)
1.0e-5	3.24e+7
1.0e-4	3.74e+7
1.0e-3	3.46e+7



## 4.9.2 Parameterstudie zum Einfluss des Tröpfchendurchmessers

### 4.9.2.1 Zielsetzung

Die Messungen des Tröpfchendurchmessers in den THAI-Experimenten legen nahe, einen konstanten Tröpfchendurchmesser von  $1\ \mu\text{m}$  –  $2\ \mu\text{m}$  zu wählen. Die Untersuchungen anhand eines Testbeispiels (siehe Abschnitt 4.6) haben aber gezeigt, dass die Geschwindigkeit, mit der sich die Sättigungsbedingungen bei der Volumenkondensation einstellen, sehr stark von Tröpfchendurchmesser abhängt, bei einem Tröpfchendurchmesser von  $1\ \mu\text{m}$  hat sich das Gleichgewicht schon nach  $1.0\text{e-}4\ \text{s}$  eingestellt, während bei  $d = 100\ \mu\text{m}$  dazu etwa  $1\ \text{s}$  notwendig war. Entsprechend mussten die Zeitschrittweiten bei  $d = 1\ \mu\text{m}$  in der Ordnung von  $1.0\text{e-}6\ \text{s}$  gewählt werden. Bei transienten Simulationen von mehreren  $1000\ \text{s}$  Problemzeit ist es nicht möglich, mittlere Zeitschrittweiten in der Größenordnung von  $1\ \text{ms}$  oder noch kleiner zu wählen. Das muss bei der Wahl von  $d$  berücksichtigt werden. Im Folgenden wird eine Parameterstudie durchgeführt, bei der der Tröpfchenradius von  $2\ \mu\text{m}$  –  $200\ \mu\text{m}$  variiert wird. Es wird untersucht, wie das Simulationsergebnis und die benötigte Rechenzeit vom Tröpfchenradius abhängen.

### 4.9.2.2 Einfluss auf die benötigte Rechenzeit

Es hat sich gezeigt, dass sich die benötigte Rechenzeit stark erhöht, falls kleinere Tröpfchendurchmesser verwendet werden (Tab. 4.3). Mit abnehmendem Durchmesser erhöht sich die Phasengrenzflächendichte bei gegebenen  $Y_{\text{H}_2\text{O},\text{l}}$ , dies führt wiederum dazu, dass die Kondensations- und Verdampfungsraten größer sind. Um trotzdem eine konvergente Lösung zu erhalten und um ein Überschwingen beim Regelalgorithmus zum Einstellen der Gleichgewichtsbedingungen zu vermeiden (Änderung des Sollwerts für  $Y_{\text{H}_2\text{O},\text{g}}$  durch die frei werdende latente Wärme wird innerhalb eines Iterationsschritts nicht berücksichtigt), müssen im Fall von kleinen Tröpfchendurchmessern viel kleinere Zeitschritte gewählt werden. Dies führt zu einer Vervielfachung des Rechenaufwands. Bis auf die Simulation  $d = 200\ \mu\text{m}$  wurden alle Simulationen vorzeitig abgebrochen. Die benötigten Zeitschritte sind bei den Simulationen für eine längere Zeit deutlich unter  $0.01\ \text{s}$  gesunken. Eine erfolgreiche Simulation des Experiments in einer annehmbaren Zeit (max. 1 – 2 Monate auf 8 CPUs) war nicht mehr zu erwarten.

**Tab. 4.3** Benötigte Rechenzeit in CPU-Sekunden für die Berechnung des Experiments im angegebenen Simulationszeitbereich

d (µm)	Simulationszeit (s)	CPU-Zeit (s)
200	7200	3.74e7
50	3740	5.49e7
10	1420	2.96e7
2	575	1.93e7

#### 4.9.2.3 Einfluss auf Kondensations- und Verdampfungsraten

Die integralen Massentransferraten unterscheiden sich in den ersten 1500 s nur schwach (Abb. 4.24). Der Betrag der integralen Volumenkondensations- und Verdampfungsraten nimmt aber mit abnehmendem Tröpfchenradius zu (Abb. 4.25, Abb. 4.26). In der Anfangsphase liegen die betragsmäßig höchsten Kondensations- und Verdampfungsraten im Bereich des Dampfjets. Durch Vermischungsvorgänge kondensiert der einströmende heiße Dampf. Sobald die dabei entstehenden Wassertröpfchen in Bereiche mit niedrigem  $Y_{\text{H}_2\text{Og}}$  transportiert werden, kommt es zur Verdampfung, so dass sich räumlich gemittelt die Kondensations- und Verdampfungsraten im Bereich des Dampfjets weitgehend aufheben (Abb. 4.29, links). Daneben gibt es in diesem Zeitbereich noch Volumenkondensationsvorgänge vor den kalten Behälterwänden, auf die der Dampfstrahl trifft.

Nach ca. 1500 s unterscheidet sich der Volumentransfer zwischen der Simulation mit  $d = 50 \mu\text{m}$  und der mit  $d = 200 \mu\text{m}$  immer stärker, die Volumenkondensationsrate nimmt bei der Simulation mit dem kleineren Tröpfchendurchmesser viel stärker zu. Im späteren Zeitverlauf liegt das Maximum der Volumenkondensationsrate nicht mehr im Bereich des Dampfjets, sondern unmittelbar vor den kalten Behälterwänden, an denen auch Wandkondensation abläuft (Abb. 4.28, rechts).

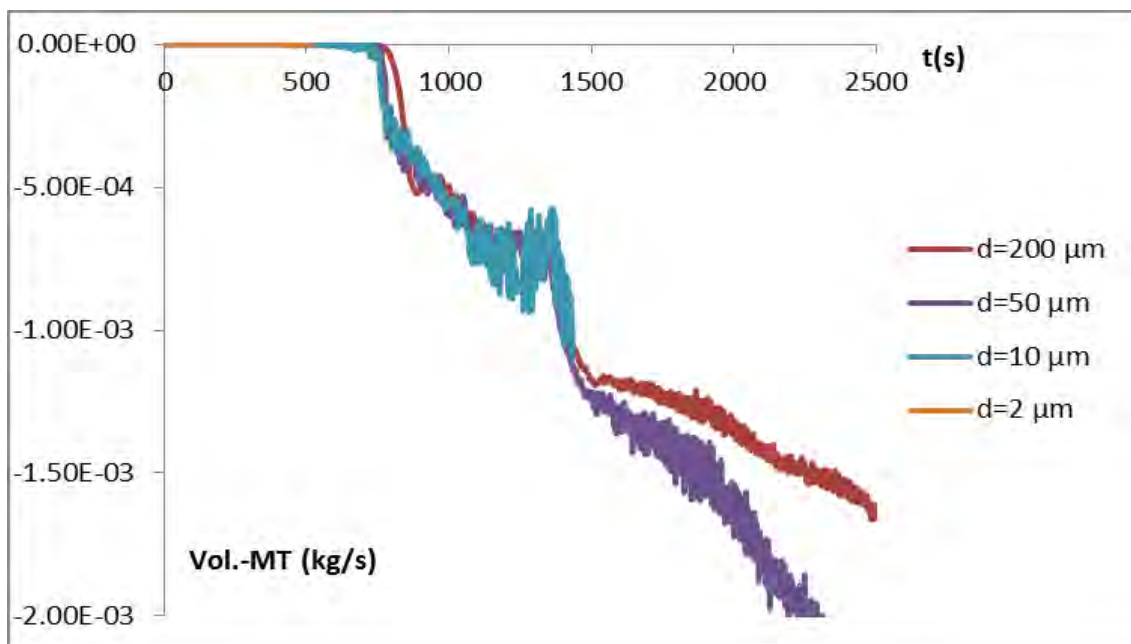
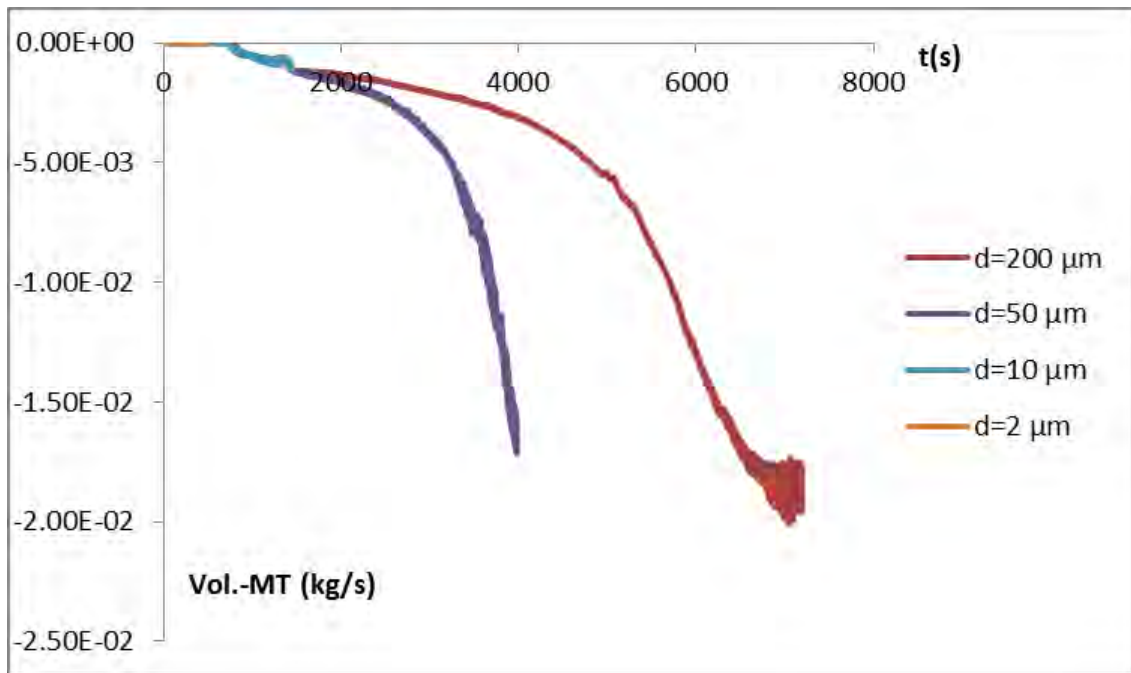
In den ersten 1500 s unterscheiden sich die integralen Wandkondensationsraten aller Simulationen kaum voneinander, auch die Simulation, bei der keine Volumenkondensation modelliert wurde, liefert die gleiche integrale Wandkondensationsrate (Abb. 4.27, links). Nach 2000 s nimmt die Wandkondensationsrate bei der Simulation mit  $d = 50 \mu\text{m}$  deutlich ab, nach 4000 s findet so gut wie keine Wandkondensation bei dieser Simulation statt. Deutlich schwächer nimmt die Wandkondensationsrate auch bei der Simulation mit  $d = 200 \mu\text{m}$  ab, hier gibt es nach ca. 6000 s nahezu keine

Wandkondensation mehr. Nach ca. 1500 s beginnt also die Volumenkondensation in unmittelbarer Wandnähe, die Wandkondensation zu verdrängen. Allerdings ist der Anstieg der Volumenkondensation nicht ausreichend, um den Rückgang bei der Wandkondensation zu kompensieren.

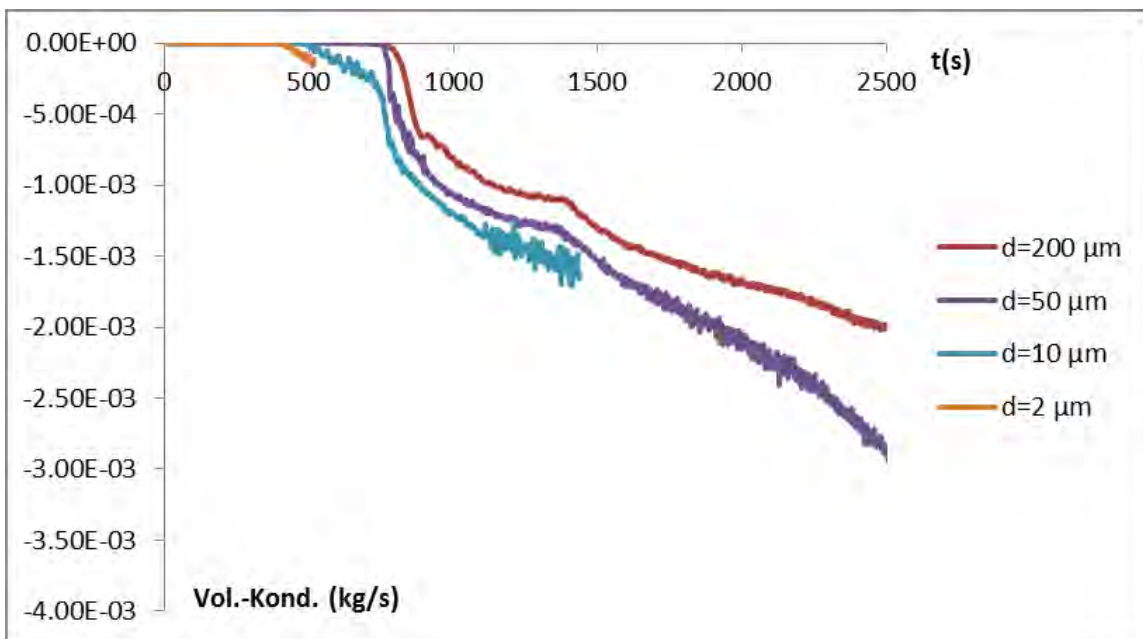
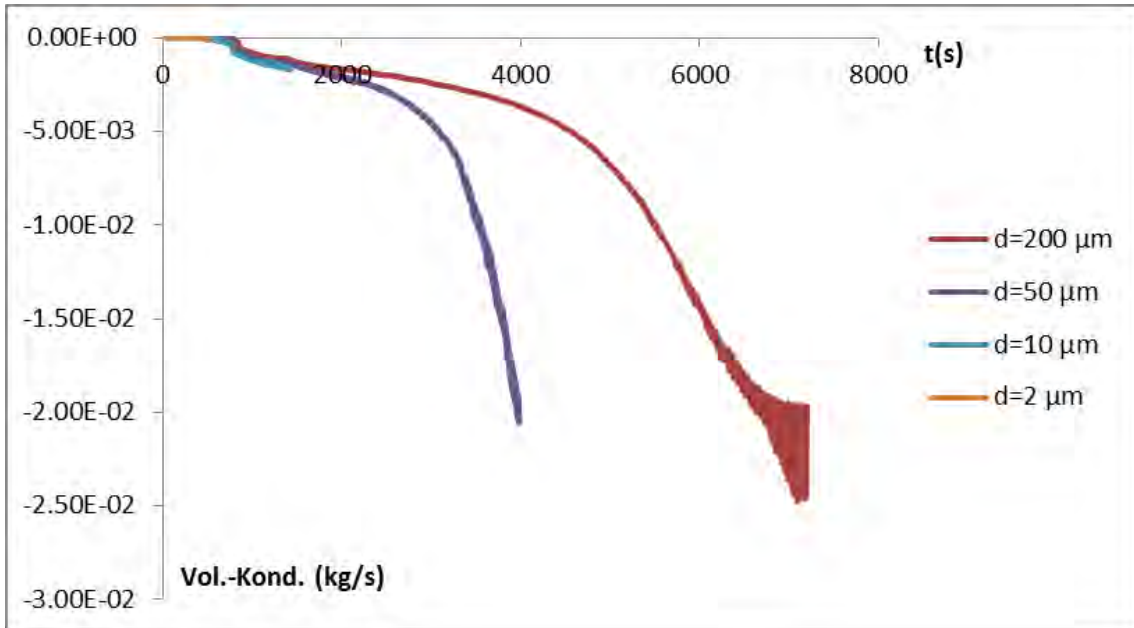
Die gesamte Kondensationsrate (Wandkondensation + Volumentransferrate) ist bei den Simulationen mit Volumenkondensationsmodell niedriger, als die integrale Wandkondensationsrate bei der Simulation ohne Volumenkondensationsmodell. Mit der starken Zunahme der Volumenkondensationsrate in unmittelbarer Wandnähe nimmt in diesem Bereich auch die Wassertröpfchenkonzentration zu (Abb. 4.32).

Die erhöhte Volumenkondensationsrate in der Gitterzelle, die unmittelbar an die Wand angrenzt, ist kritisch zu sehen. Nach dem Modellierungskonzept sollte hier das Wandkondensationsmodell für die Einstellung der Sättigungsbedingungen sorgen. Die Annahme, dass hier Tröpfchen vorliegen, ist nicht gegeben. Es wird sich an der Wand ein Wasserfilm anlagern, die Modellannahmen für das Volumenkondensationsmodell (Kondensationsrate von Tröpfchenoberfläche abhängig) sind nicht gegeben. Da im Wandkondensationsmodell der Wasserfilm nicht explizit in CFX simuliert wird, muss in diesem Raumbereich insbesondere bei sehr feinen Gittern (Zellbreite senkrecht zu Wand  $\sim 1$  mm und kleiner) mit Abweichungen zwischen CFX und dem Experiment gerechnet werden. Eine Simulation mit dem detaillierten Volumenkondensationsmodell ist in der an die Wand angrenzenden Gaszelle mit der Wandkondensationsmodellierung nicht kompatibel.

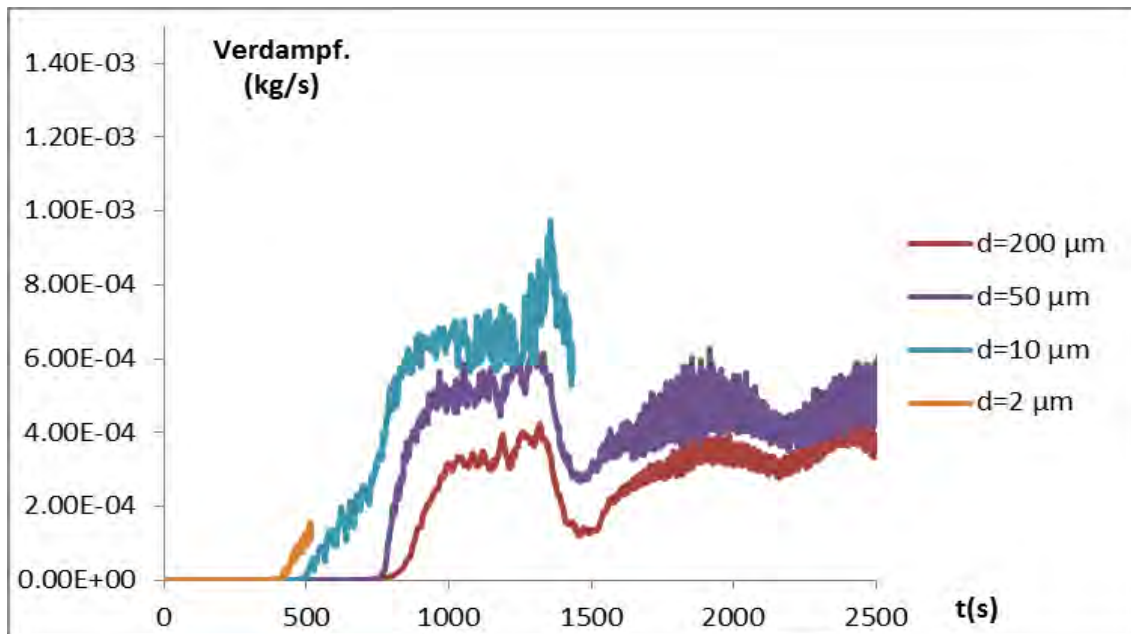
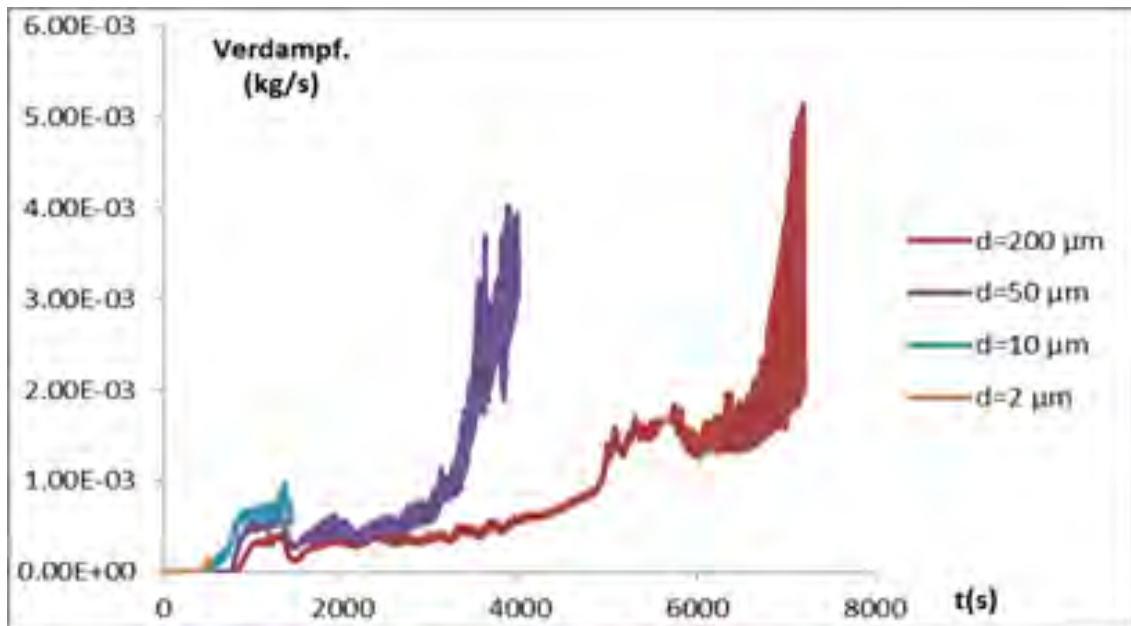
Insbesondere bei höheren  $Y_{H_2O_l}$  macht sich ein weiterer Fehler bemerkbar. Nach Informationen von ANSYS berücksichtigt das Wandkondensationsmodell nicht, dass es sich bei  $Y_{H_2O_l}$  um eine Flüssigkeit und kein Gas handelt. Zur Berechnung der Kondensationsrate ( $Y_{H_2O_g}$ , Sättigungsdampfdruck) darf nur die Gasphase berücksichtigt werden. Bezogen auf die Gasphase erhöht sich der  $Y_{H_2O_g}^*$  auf  $Y_{H_2O_g}^* = Y_{H_2O_g} / (Y_{H_2O_g} + Y_{Luft})$ . Im Volumenkondensationsmodell wird dieser Effekt berücksichtigt, während im Wandkondensationsmodell das zu kleine  $Y_{H_2O_g}$  zur Berechnung der Wandkondensationsrate verwendet wird. Das Volumenkondensationsmodell wird deshalb schon bei geringeren  $Y_{H_2O_g}$  Kondensation berechnen. Durch die bei der Volumenkondensation erzeugten Wassertröpfchen wird diese Abweichung des Wandkondensationsmodells noch verstärkt.



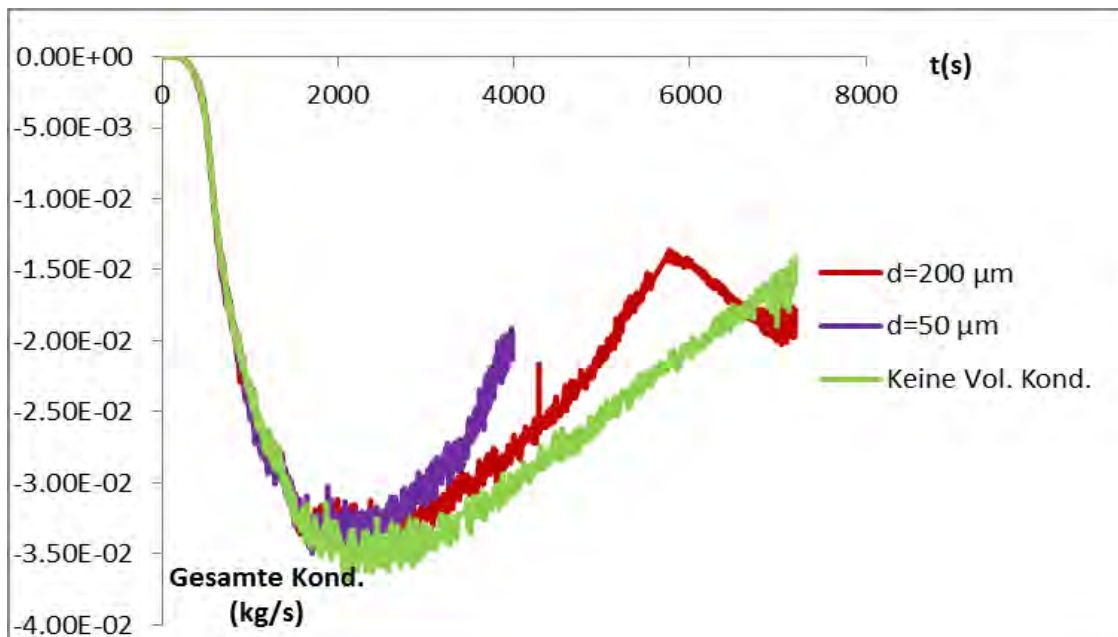
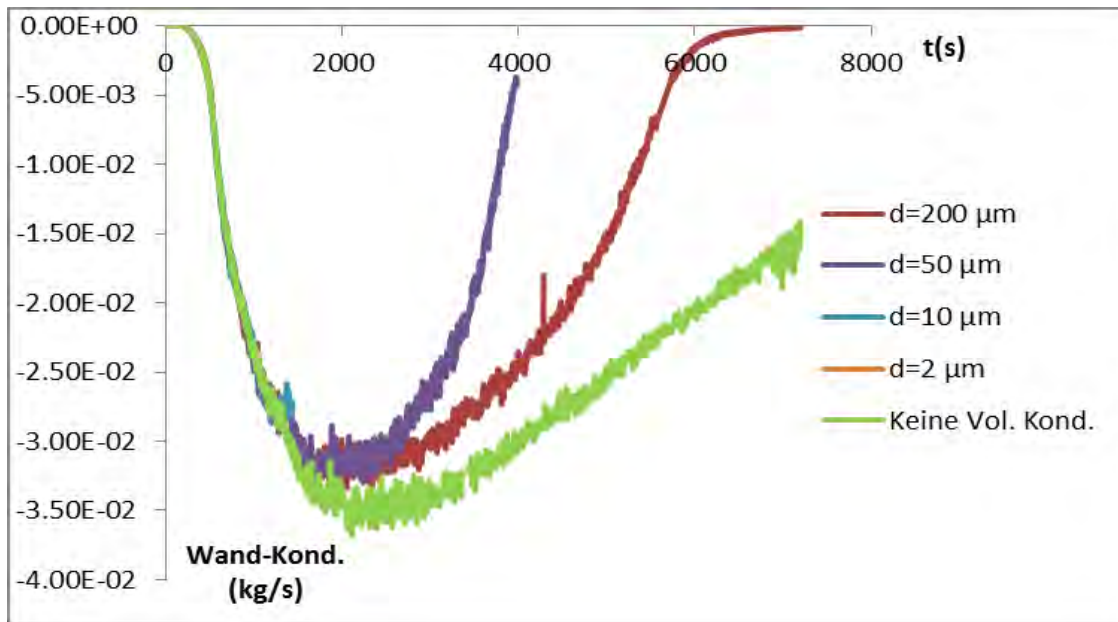
**Abb. 4.24** Integrale Massentransferrate (Kondensation + Verdampfung) bei unterschiedlichem Tröpfchendurchmesser (oben 0 – 8000 s, unten 0 – 2500 s)



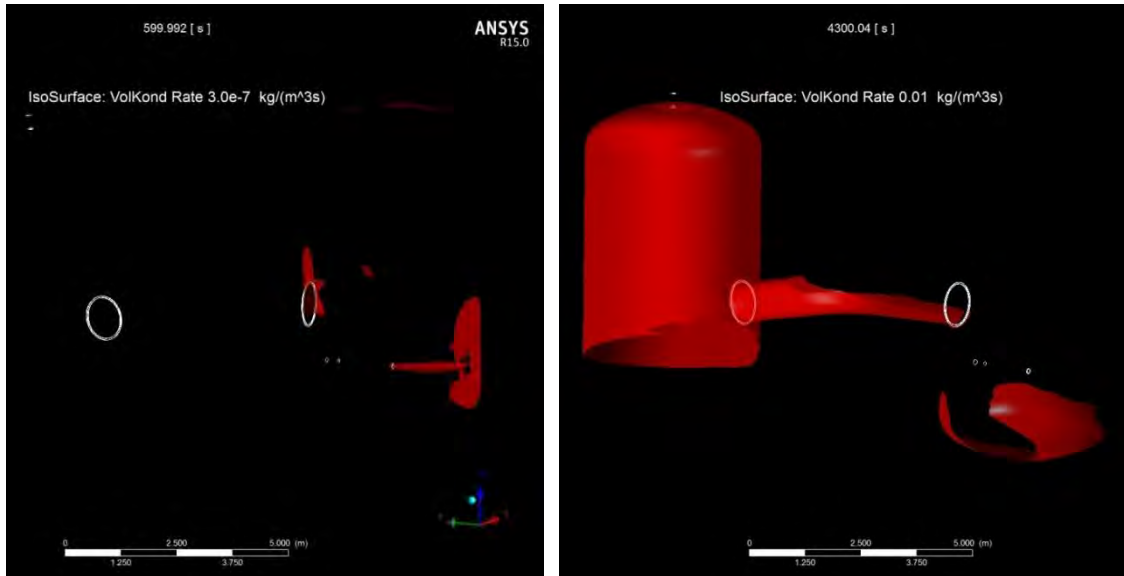
**Abb. 4.25** Integrale Volumenkondensationsrate bei unterschiedlichem Tröpfchen-durchmesser (oben 0 – 8000 s, unten 0 – 2500 s)



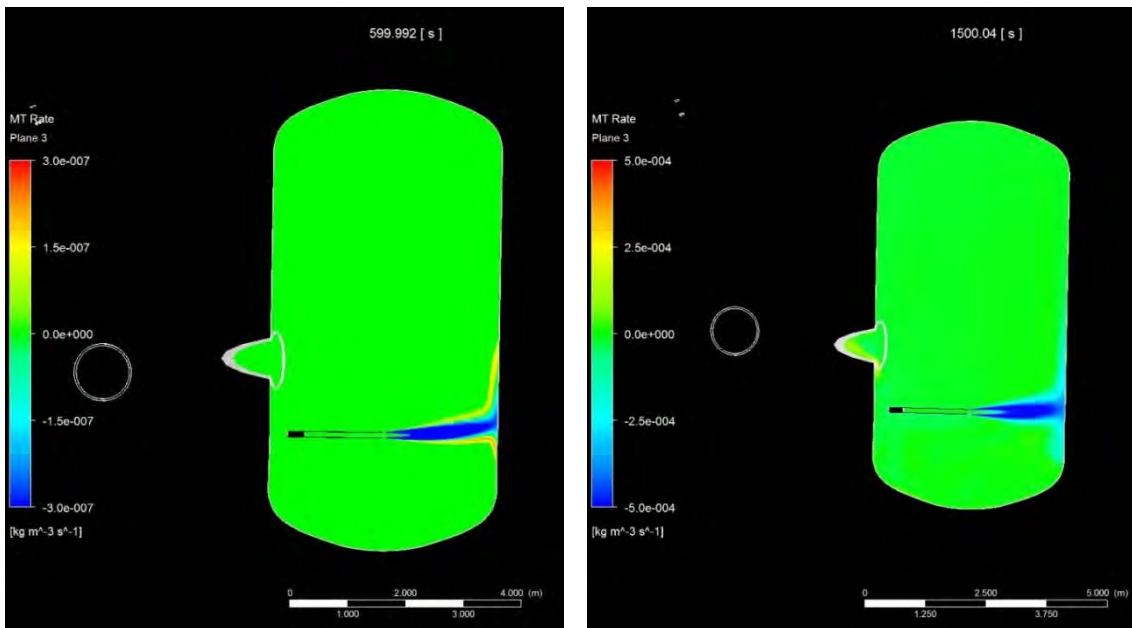
**Abb. 4.26** Integrale Volumenverdampfungsrate bei unterschiedlichem Tröpfchendurchmesser (oben 0 – 8000 s, unten 0 – 2500 s)



**Abb. 4.27** Integrale Wandkondensationsrate (oben) und gesamte Kondensationsrate (Wandkondensation + Volumenmassentransferrate; unten) bei unterschiedlichem Tröpfchendurchmesser und bei Simulation ohne Volumen-kondensationsmodell

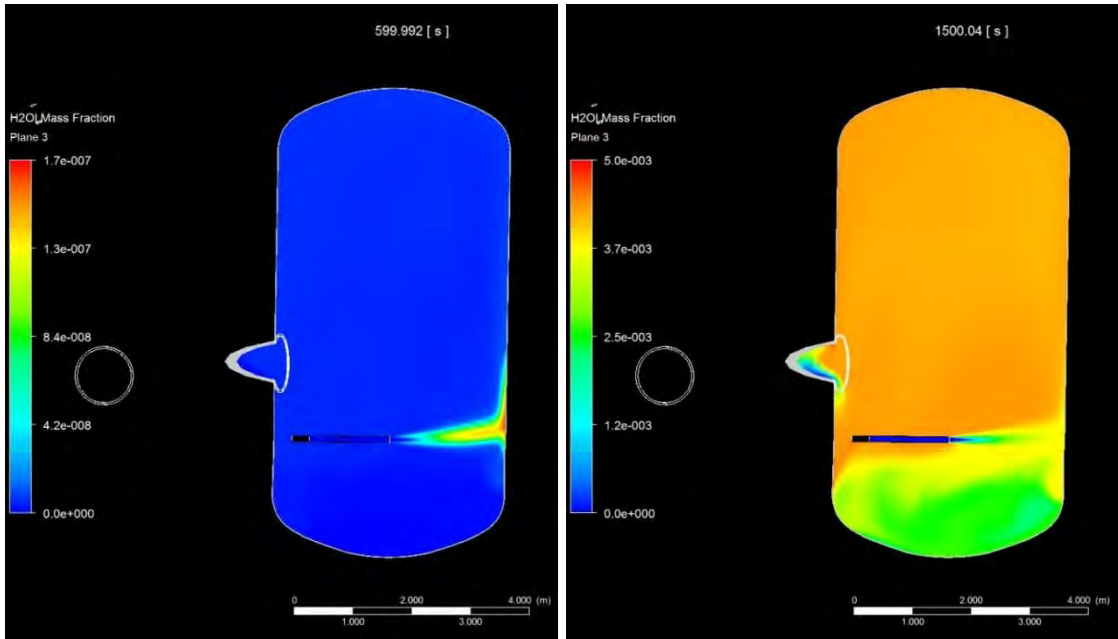


**Abb. 4.28** Isoflächen mit hohen Kondensationsraten links nach 600 s ( $3.0e-7$   $\text{kg}/(\text{m}^3\text{s})$ ), rechts nach 4300 s ( $0.01$   $\text{kg}/(\text{m}^3\text{s})$ ) bei der Simulation mit  $d = 200$   $\mu\text{m}$

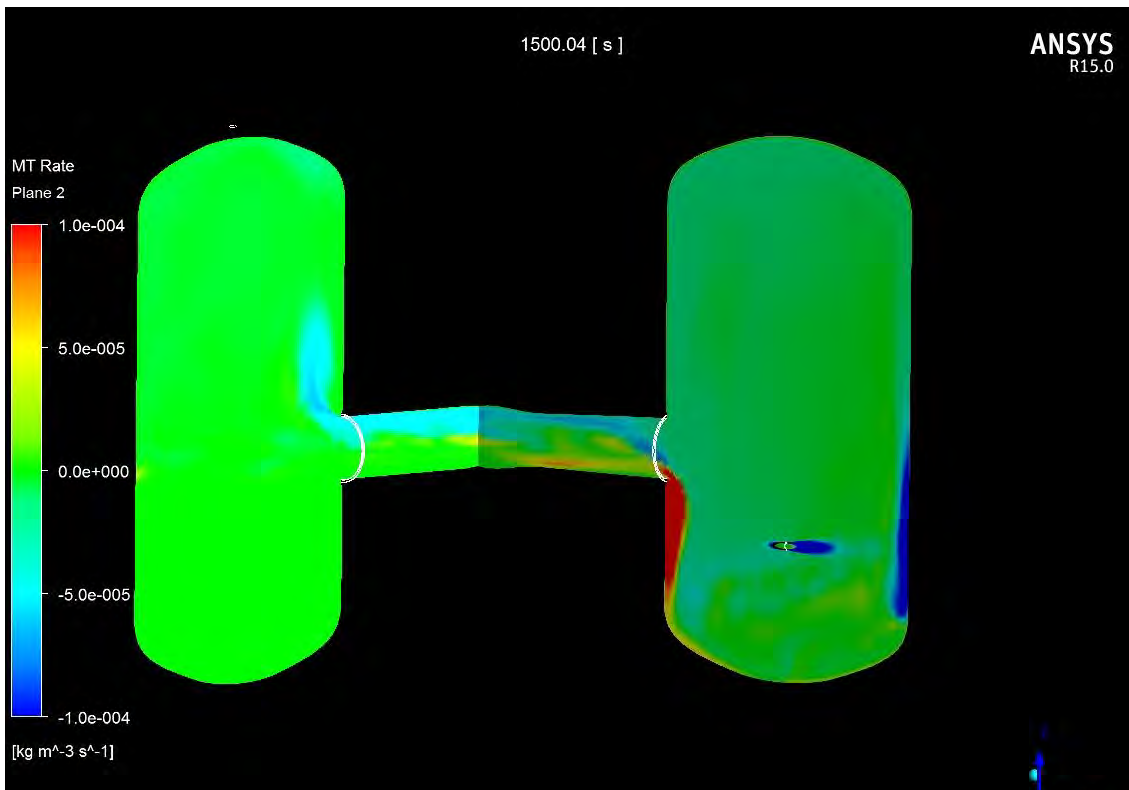


**Abb. 4.29** Volumen-Massentransferrate im 1. Behälter nach 600 s (links) und 1500 s (rechts) bei der Simulation mit  $d = 200$   $\mu\text{m}$





**Abb. 4.30** H<sub>2</sub>O-Massenbruch im 1. Behälter nach 600 s (links) und nach 1500 s (rechts) bei der Simulation mit  $d = 200 \mu\text{m}$



**Abb. 4.31** Volumen-Massentransferrate nach 1500 s bei der Simulation mit  $d = 200 \mu\text{m}$



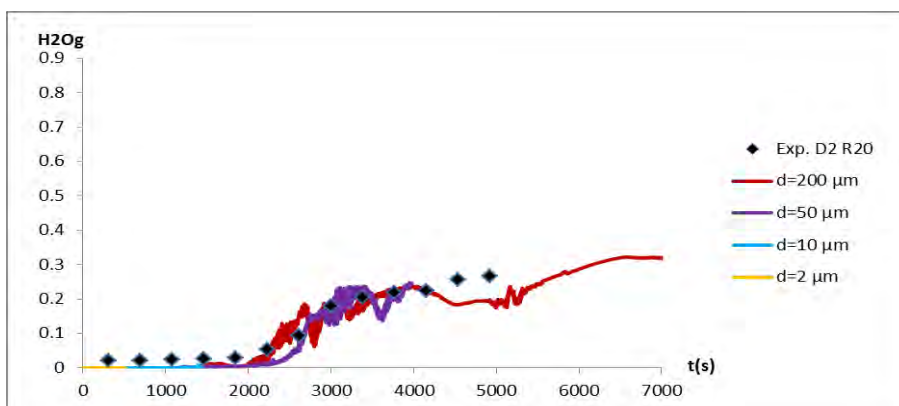
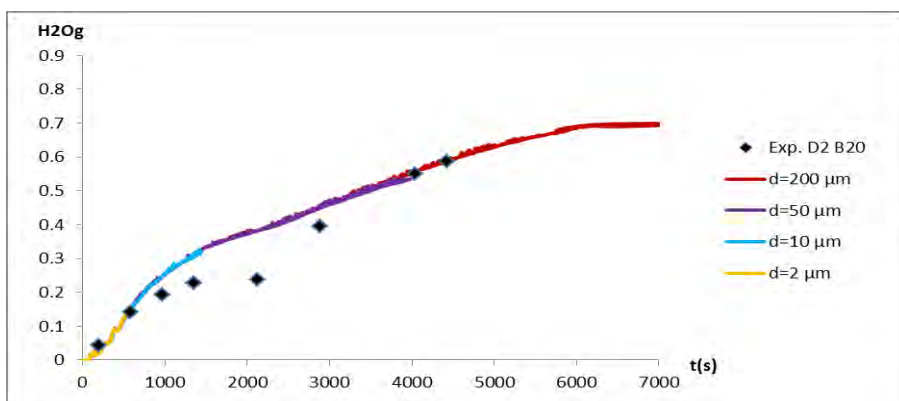
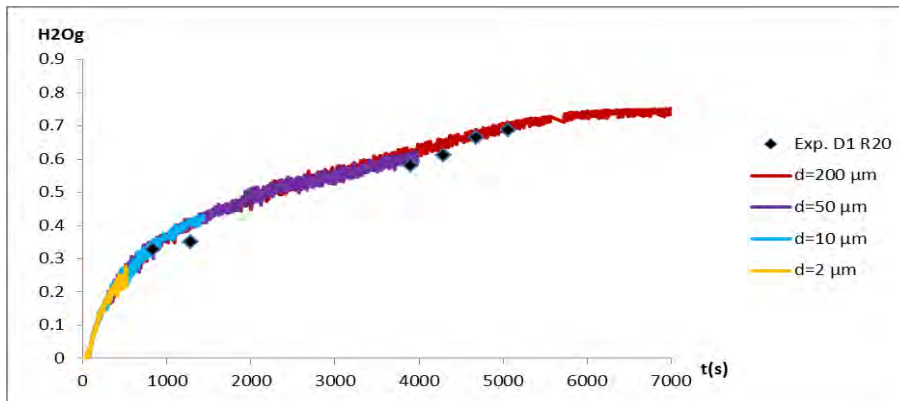
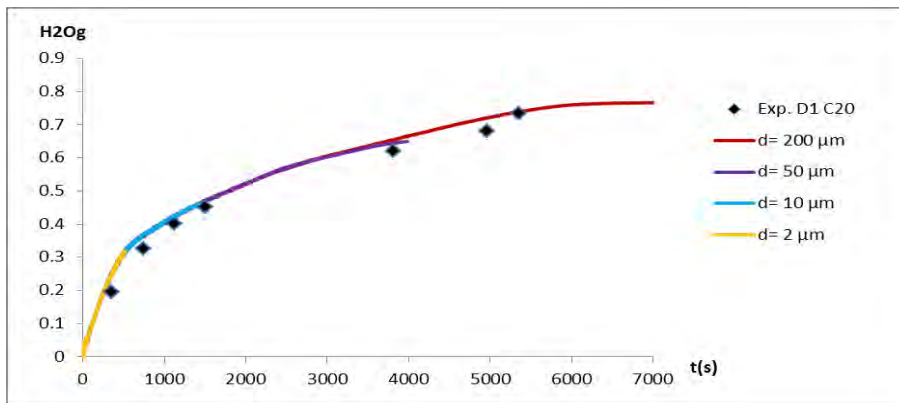
**Abb. 4.32** IsoSurface mit  $Y_{H_2O} = 0.05$  nach 5000 s bei der Simulation mit  $d = 200 \mu\text{m}$

#### 4.9.2.4 Einfluss auf die Temperatur und die Dampfkonzentration

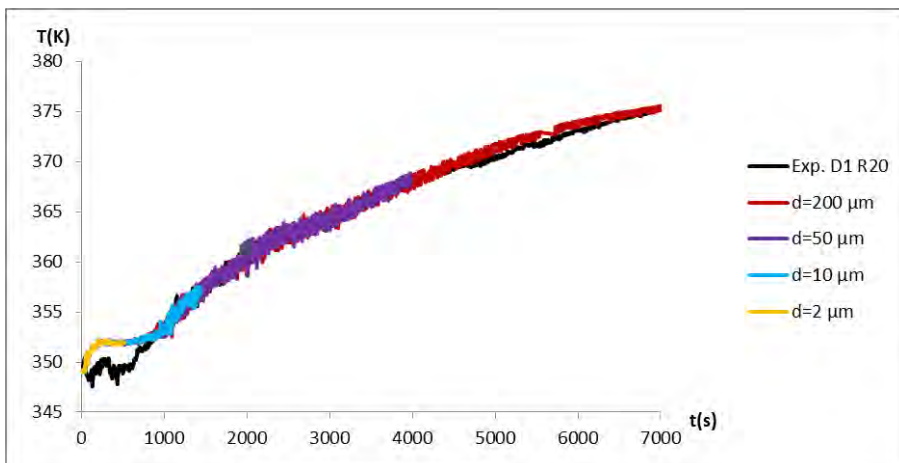
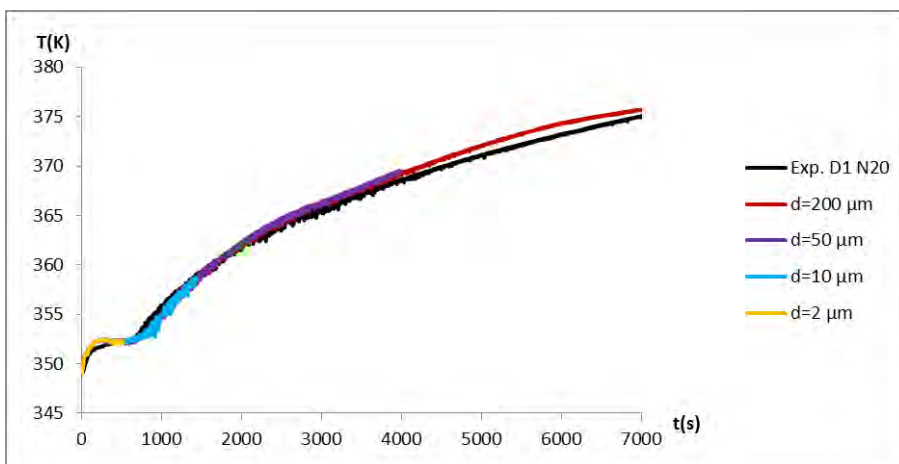
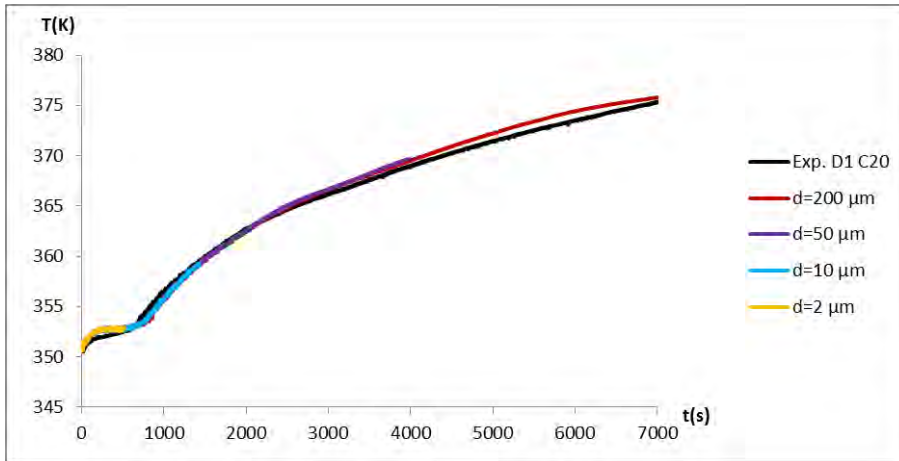
Die Wahl des Tröpfchendurchmessers hat im Panda4bis-Experiment keinen signifikanten Einfluss auf die Dampfkonzentration an den Monitorpunkten. In den ersten 2000 s sind keine nennenswerten Abweichungen zwischen den Simulationen festzustellen (Abb. 4.33). Die danach vorhandenen geringen Abweichungen bei einzelnen Monitorpunkten (z. B. D2 R20) zwischen den Simulationen mit  $d = 50 \mu\text{m}$  und  $d = 200 \mu\text{m}$  sind so gering, dass eine Aussage, welche der beiden Simulationen das Experiment besser reproduziert, nicht möglich/sinnvoll ist.

Für die Temperaturverläufe an den Monitorpunkten zeigt sich ebenfalls keine signifikante Abhängigkeit (Abb. 4.34, Abb. 4.35). Die Abweichungen zwischen den Simulationen  $d = 50 \mu\text{m}$  und  $d = 200 \mu\text{m}$  liegen in 1. Behälter bei weniger als 1 K.

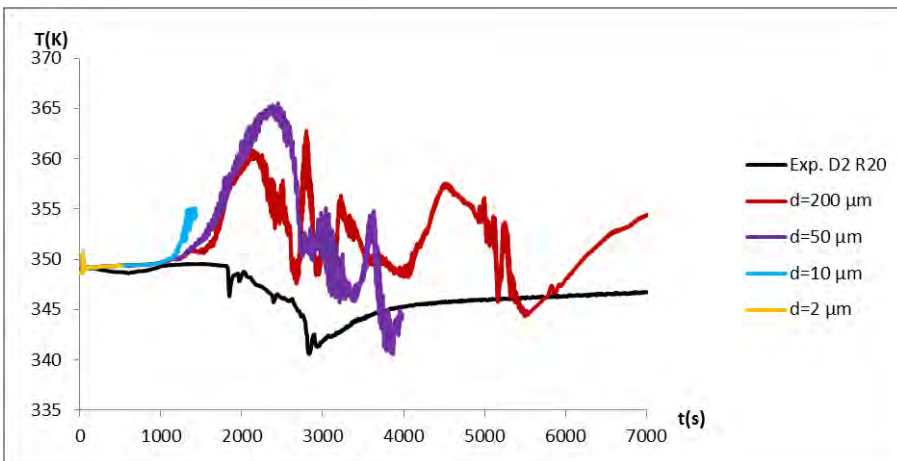
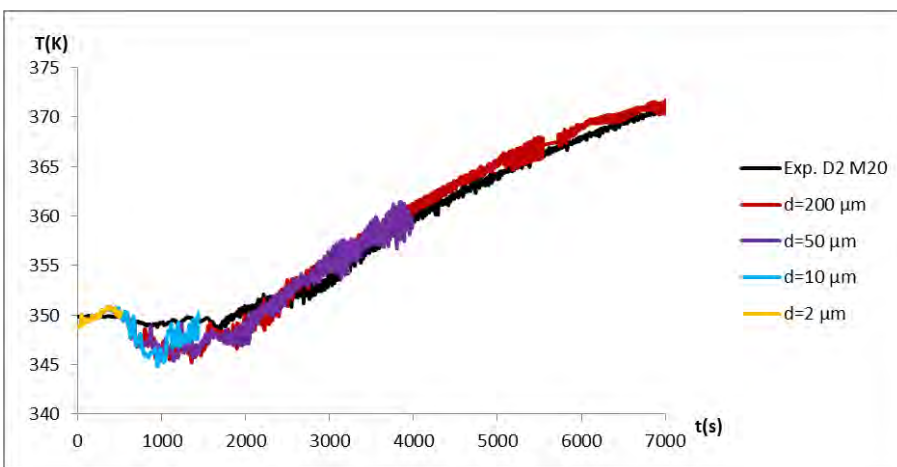
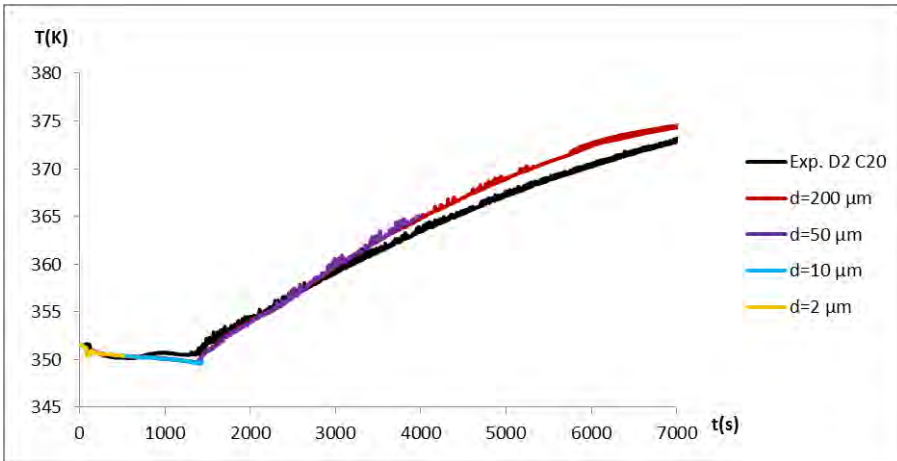
Nur an einigen Monitorpunkten in der unteren Hälfte des 2. Behälters gibt es deutlichere Unterschiede (z. B. D2 M20, D2 R20). Die qualitativen Verläufe sind aber für alle Simulationen gleich. Es gibt hier aber qualitative Unterschiede zum experimentellen Verlauf. Der Temperaturabfall von 2500 s – 3000 s in D2 R20 deutet auf Verdampfungsvorgänge hin. Laut Experimentatoren spielt für den Temperatur- und Dampfkonzentrationsverlauf in der unteren Hälfte des 2. Behälters auch Wasser eine Rolle, das im oberen Teil der Behälterwände durch Wandkondensation entsteht, nach unten läuft und dort teilweise wieder verdampft /CAC 07/.



**Abb. 4.33** Dampfkonzentration an unterschiedlichen Monitorpunkten



**Abb. 4.34** Temperatur an unterschiedlichen Messstellen



**Abb. 4.35** Temperatur an unterschiedlichen Messstellen

### 4.9.3 Berücksichtigung der Sinkgeschwindigkeit der Wassertröpfchen und der Ablagerung von Tröpfchen an den Wänden.

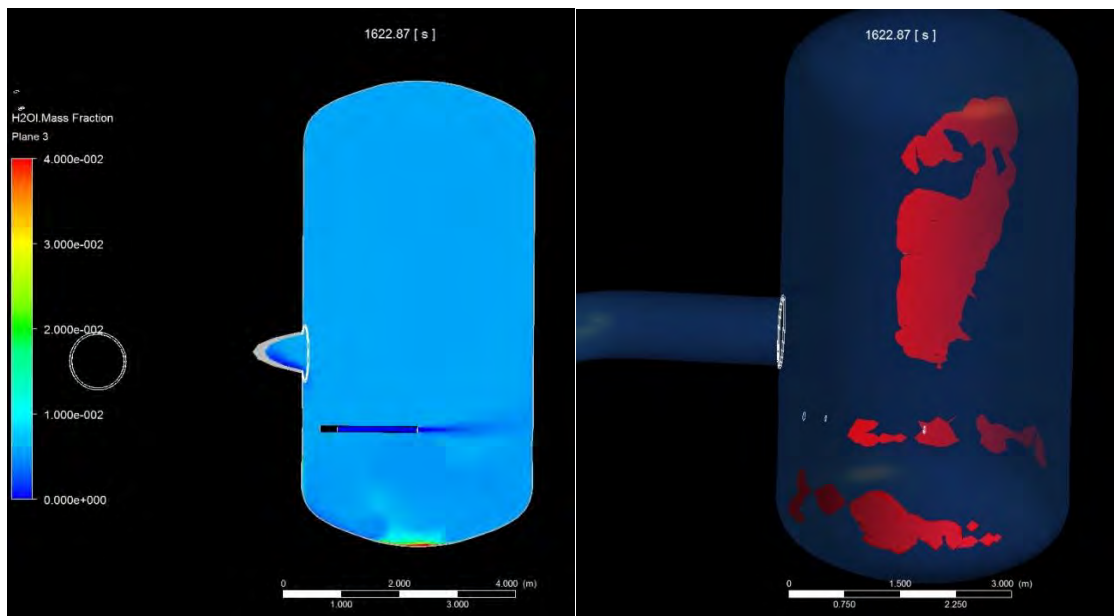
Wenn – wie in den FASP-Messungen in der THAI-Anlage – der Tröpfchendurchmesser 1 – 2  $\mu\text{m}$  beträgt, ist die Sinkgeschwindigkeit der Tröpfchen kleiner als 0.1 mm/s und kann deshalb in erster Näherung vernachlässigt werden. Es ist aber zu erwarten, dass es zu einem „Ausregnen“ kommt, sobald die Tröpfchenkonzentration zu hoch wird. Dazu liegen aber gegenwärtig keine Messwerte für containmenttypische Randbedingungen bzw. Strömungsverhältnisse vor. Eine vertiefte theoretische Betrachtung bzw. Übertragung von Messergebnissen und Erkenntnissen aus anderen wissenschaftlichen Disziplinen, insbesondere der Meteorologie, ist im Rahmen dieses Projekts nicht vorgesehen. Deshalb soll im Folgenden nur gezeigt werden, dass ein „Ausregnen“ mit Hilfe des Algebraic Slip Modells simuliert werden kann. Dazu wurden zwei unterschiedliche Abhängigkeiten zwischen  $Y_{\text{H}_2\text{O}}$  und dem Tröpfchenradius unterstellt (siehe Tab. 4.4). Zwischen den einzelnen Werten findet eine lineare Interpolation statt. An den Wänden wird für  $\text{H}_2\text{O}$  die Deposition-Randbedingung gewählt. Damit werden die Tröpfchen aus der Fluidphase herausgenommen und an der Wand deponiert. Die Motivation dafür ist,  $Y_{\text{H}_2\text{O}}$  in den wandnahen Zellen möglichst klein zu halten und zu verhindern, dass Wandkondensation durch Volumenkondensation ersetzt wird.

**Tab. 4.4** Unterstellte Zusammenhänge zwischen Tröpfchenradius  $d$  und Tröpfchenmassenbruch  $Y_{\text{H}_2\text{O}}$

$Y_{\text{H}_2\text{O}}$	Version 1: $d_{\text{ASM}}(\mu\text{m})$	Version 2: $d_{\text{ASM}}(\mu\text{m})$
0	1	1
0.05	1	
0.1	10	1
0.2	100	
0.5		10
1	100	100

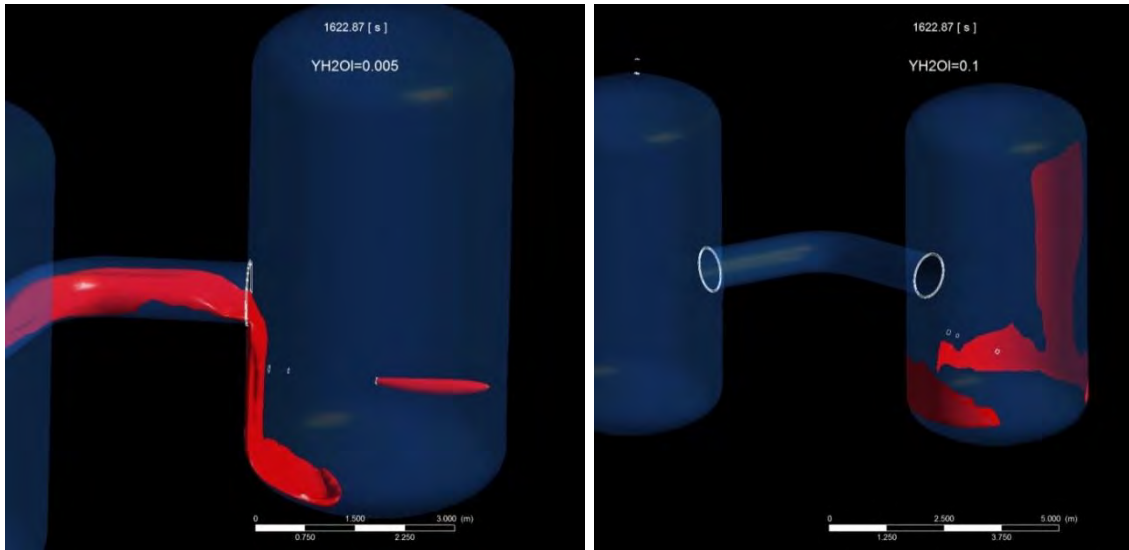
Die mit diesen Parametern durchgeführten Simulationen waren nur bedingt erfolgreich. Durch die Modellierung der Tröpfchen mit dem Algebraic Slip Modell sinken zwar die Tröpfchen verstärkt auf den Behälterboden (Abb. 4.36, links), die Deposition-Randbedingung an den Wänden für die  $Y_{\text{H}_2\text{O}}$  sorgt aber nicht dafür, dass  $Y_{\text{H}_2\text{O}}$  an den Wänden klein bleibt. In Abb. 4.37 sind Bereiche hoher Tröpfchenkonzentrationen zu sehen. In Bereichen, in denen die Volumenkondensation stattfindet, sind hohe Tröpf-

chenkonzentrationen zu beobachten. Die Bereiche mit der höchsten Tröpfchenkonzentration liegen in unmittelbarer Nähe der Behälterwände. Mit zunehmendem  $Y_{H_2O}$  nehmen auch die Kondensationsquellterme zu. Die Konvergenz insbesondere für die Transportgleichung für das  $H_2O$  wird schlechter. Für beide Korrelationen für die Abhängigkeit des Tröpfchendurchmessers im ASM-Modell wird die Konvergenz nach ca. 1500 s so schlecht, dass kleinere Zeitschritte gewählt werden müssen. Für die 1. Korrelation sinkt der Zeitschritt auf 0.01 s – 0.02 s, für die 2. Korrelation sogar auf 0.005 s. Die Konvergenz und damit die Zeitschrittweite sind sogar geringer als bei der Simulation ohne ASM-Modell. Die Bereiche mit hohen Residuen für  $Y_{H_2O}$  liegen ebenfalls unmittelbar an den seitlichen Behälterwänden (Abb. 4.36, rechts). Dass die Konvergenz bei den Simulationen mit dem ASM noch schlechter ist, kann dadurch erklärt werden, dass durch den erhöhten Tröpfchengehalt die Tröpfchen sich relativ zur Gasphase entlang der Wände abwärts bewegen. Bei der 2. Korrelation für die Tröpfchengröße im ASM Modell ist die Relativgeschwindigkeit wegen der größeren Werte für  $d_{ASM}$  noch größer, die Zeitschritte müssen noch kleiner gewählt werden. Da die Deposition-Randbedingung nicht den gewünschten Effekt hatte und Zeitschritte von 0.01 s oder kleiner eine Simulation des gesamten Experiments (7200 s) zu aufwändig machten, wurden die beiden Simulationen nach 1750 s bzw. 1630 s gestoppt.



**Abb. 4.36** Dargestellt sind Ergebnisse der Simulation mit dem Algebraic Slip Modell und der Korrelation 2 für den Tröpfchenradius. Links:  $Y_{H_2O}$  nach 1622 s; rechts: Regionen (rot) mit schlechter Konvergenz (Residuum  $Y_{H_2O} = 0.0005$ )





**Abb. 4.37** Dargestellt sind Isoflächen hoher  $Y_{H_2O}$  der Simulation mit dem Algebraic Slip Modell und der Korrelation 2 für den Tröpfchenradius. Links: Isofläche mit  $Y_{H_2O} = 0.005$ , rechts: Isofläche mit  $Y_{H_2O} = 0.1$

#### 4.9.4 Unterdrückung von Volumencondensation in Wandnähe

Insbesondere bei Simulationen, bei denen das ASM-Modell für die Tröpfchen aktiviert ist, führt die Volumencondensation in unmittelbarer Nähe der Behälterwände dazu, dass im späteren Verlauf der Simulation die Wandcondensation durch Volumencondensation ersetzt wird (Abb. 4.27). Zudem liefert das Wandcondensationsmodell aufgrund von Modellschwächen (siehe 4.9.2.3) bei Vorliegen eines signifikanten Tröpfchenmassenbruches eine zu niedrige Wandcondensationsrate. Um diese Fehler zu beheben, werden folgende zusätzliche Annahmen getroffen:

1. Unmittelbar an der Wand soll keine Volumencondensation stattfinden. Bei der nachfolgenden Simulation wurde der Wandabstand bis zu dem die Volumencondensation unterdrückt  $5.0e-3$  m gewählt. Im CCL wurde diese wie folgt realisiert:

$$\text{Mass Transfer Rate}_2 = \text{Mass Transfer Rate} * \text{step}((\text{Wall Distance} * -0.005 \text{ m}) * 1 [m^{-1}])$$

2. Unmittelbar an der Wand sollen die Wassertröpfchen verschwinden. Physikalisch kann dies damit begründet werden, dass sich die Tröpfchen in unmittelbarer Wandnähe auf der Wand ablagern und dort zusammen mit dem bei der



Wandkondensation gebildeten Kondensat einen Wasserfilm bilden. Im ANSYS-Wandkondensationsmodell wird dieser Wasserfilm nicht mit CFX im Rahmen einer Mehrphasenströmung explizit simuliert, sondern das gebildete Kondensat verschwindet aus dem Rechengebiet. Konsistent mit dem Wandkondensationsmodell sollen auch die Wassertröpfchen, die sich auf dem Wasserfilm ablagern, aus dem CFX Rechengebiet verschwinden. Dies erfolgt über einen Volumenquellterm (*Wall H2O red*) in der Kontinuitätsgleichung:

$$\text{Wall H2O red} = -0.1 \cdot \text{H2O.Mass Fraction} \cdot \text{Density} / \text{Time Step Size} \cdot \text{step}(\text{Wall Distance} \cdot -0.005 \text{ m}) \cdot 1 \text{ [m}^{-1}\text{]}$$

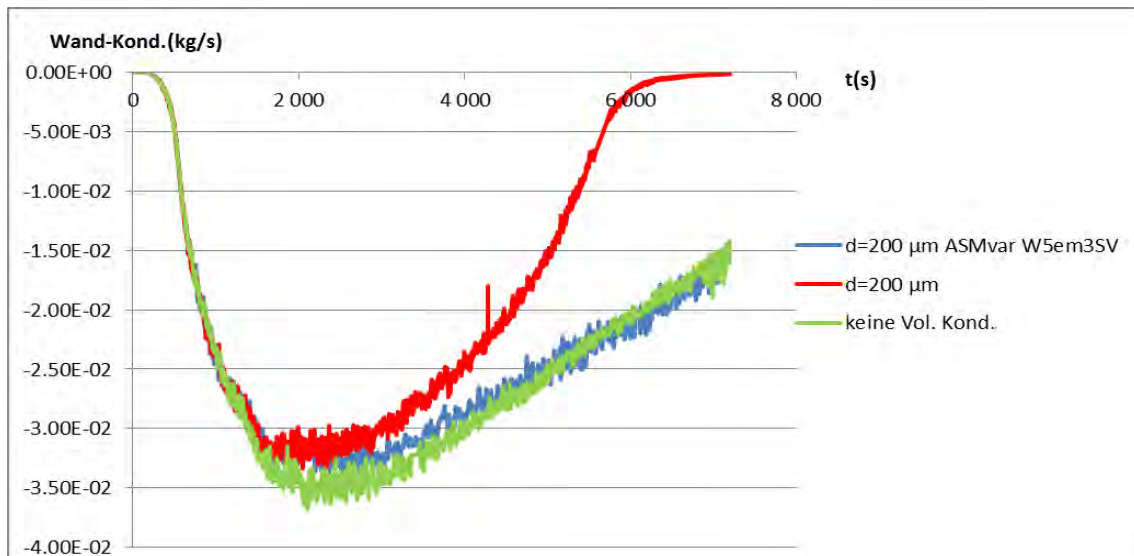
Um sicherzustellen, dass sich die Temperatur hierbei nicht ändert, muss beim Volumenquellterm die Option „Specific Mass Fraction and Local Temperature“ verwendet werden. Die Deposition Randbedingung für die Wassertröpfchen bleibt gesetzt.

Mit diesen zusätzlichen Modellannahmen wurde der Panda4bis-Versuch erneut nachgerechnet. Das Algebraic Slip Modell wurde aktiviert. Der Tröpfchendurchmesser für dieses Modell wurde in Abhängigkeit vom Tröpfchenmassenbruch entsprechend Tab. 4.4, Version1 gewählt.

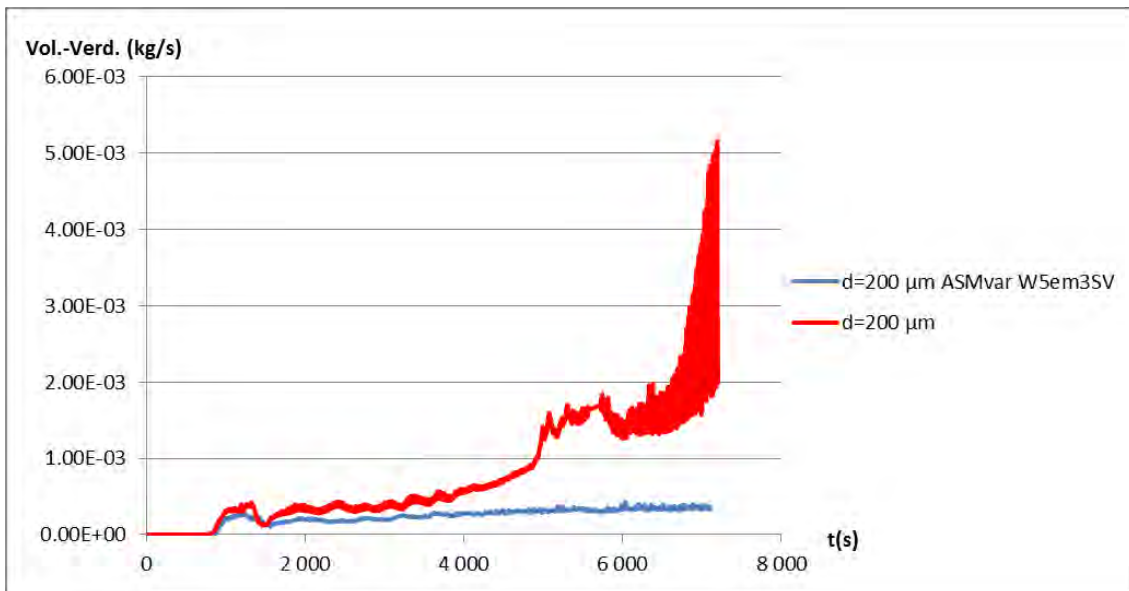
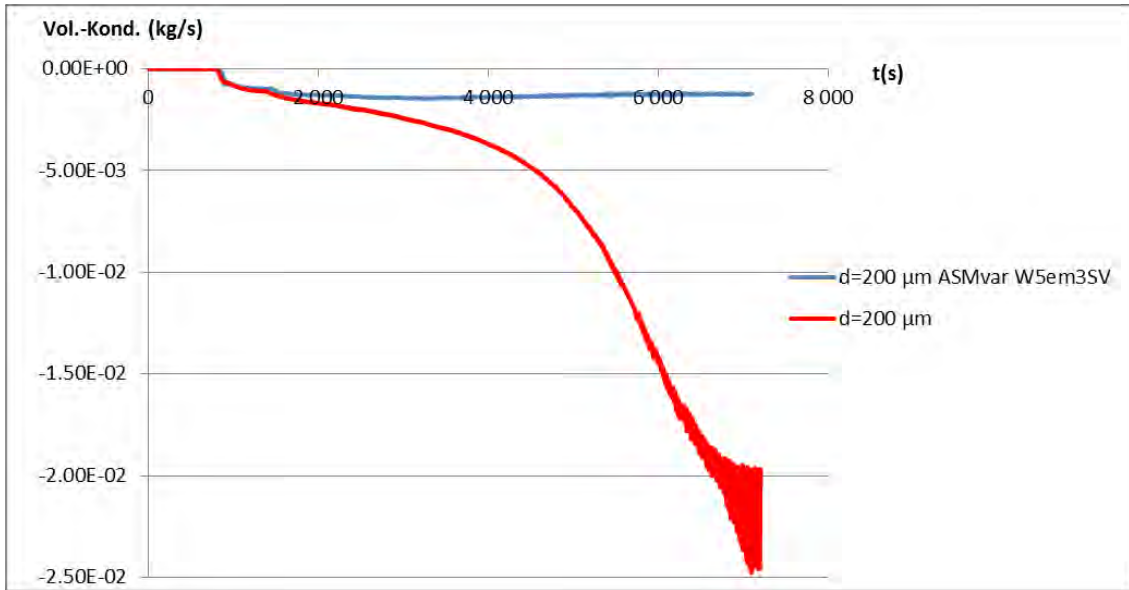
In Abb. 4.38 ist die Wandkondensationsrate zu sehen. Durch die Unterdrückung der Volumenkondensation in Wandnähe und die Verringerung der Tröpfchenkonzentration in diesem Bereich konnte erreicht werden, dass die Wandkondensationsrate nicht mehr ab 3000 s drastisch abnimmt und durch Volumenkondensation ersetzt wird. Die Wandkondensationsrate wird mit diesen Modellerweiterungen nur noch schwach durch die viel schwächere Volumenkondensation beeinflusst, sie unterscheidet sich integral nur wenig von der einer Simulation, bei der die Volumenkondensation vernachlässigt wird. Dementsprechend verbleibt mit diesen Modellmodifikationen die Volumenkondensation und (auch die Volumenverdampfung) während der gesamten Simulation auf einem Niveau, das in etwa eine Größenordnung kleiner ist als die Wandkondensation (Abb. 4.39). Ohne diese Modellerweiterung waren beide Prozesse um etwa eine Größenordnung größer. An den meisten Messstellen für die Dampfkonzentration unterscheidet sich die neue Simulation bis ca. 6000 s nur geringfügig von Rechnungen ohne ASM-Modell und ohne Begrenzung der Volumenkondensation in Wandnähe (Abb. 4.40, Abb. 4.41). Nach 6000 s flacht der Anstieg der Dampfkonzentration bei diesen älteren Simulationen ab, während er mit der Modellmodifikation mit etwa derselben Steigung weiter zunimmt. Unglücklicherweise liegen für diesen Zeitbereich keine aus-

reichenden experimentellen Daten vor, es kann keine Aussage getroffen werden, welche Kurve besser mit dem Experiment übereinstimmt. Einzig im unteren Bereich des 2. Behälters (siehe Abb. 4.40 und Abb. 4.41, D2 R20) ist schon zu einem früheren Zeitpunkt ein Unterschied zwischen den beiden Simulationen bei der Dampfkonzentration festzustellen. Bei der neuen Simulation wird die Dampfkonzentration etwas überschätzt, der qualitative Verlauf (schneller Anstieg zwischen 2000 s – 3000 s, danach langsamere aber kontinuierliche Erhöhung der Dampfkonzentration) wird richtig wiedergegeben. Bei der alten Simulation dagegen wird zwischen 2000 s – 4000 s die Dampfkonzentration in besserer Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet, es folgt aber nach 4000 s ein Abfall der Dampfkonzentration, der im Experiment nicht beobachtet wurde, was ein Indiz dafür ist, dass in dieser Simulation physikalische Prozesse ablaufen, die im Experiment nicht bzw. an einer anderen Stelle stattfinden. Es sei angemerkt, dass das Abfließen von dem bei der Wandkondensation gebildeten Wasser entlang der Behälterwände bisher nicht simuliert werden kann. Dies ist laut /CAC 07/ ein Prozess, der die Dampfkonzentration im unteren Bereich des 2. Behälter beeinflusst, da das abfließende Wasser teilweise wieder verdampft.

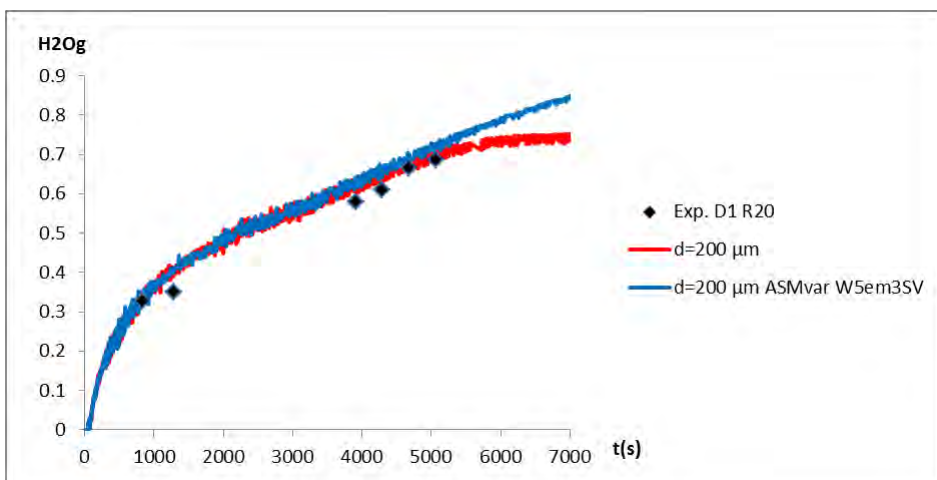
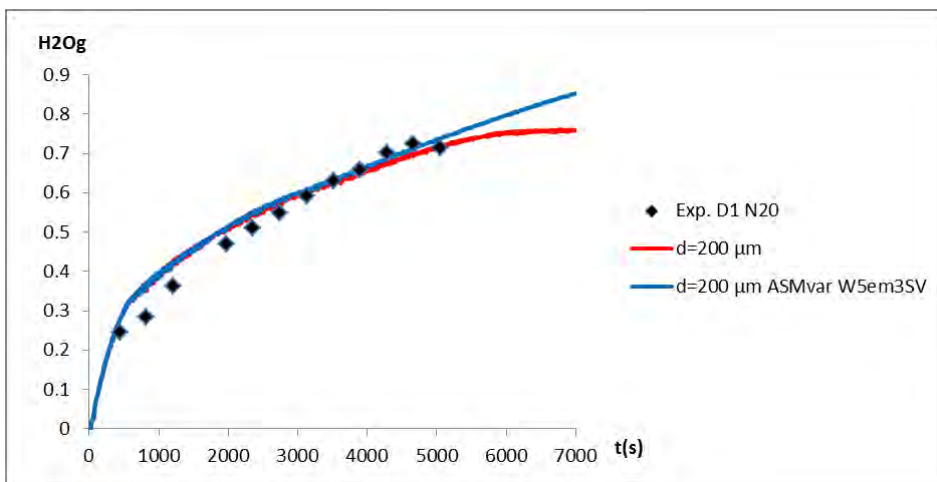
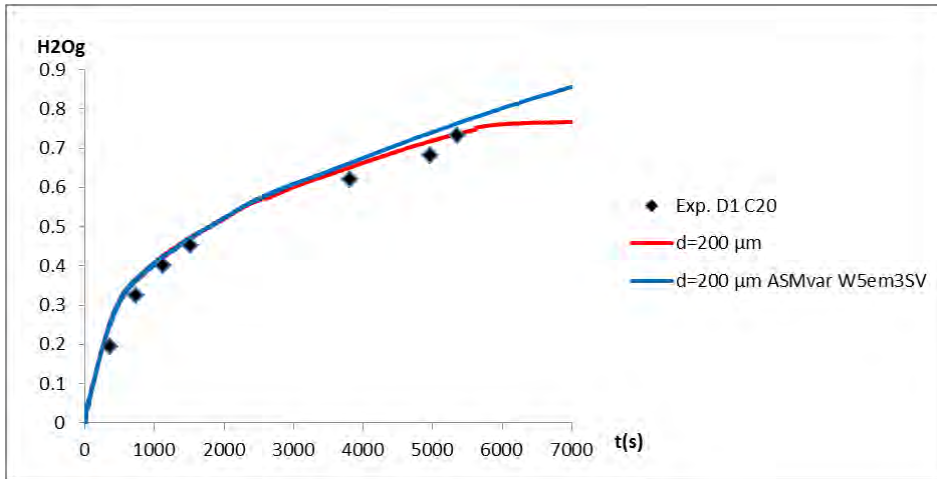
Abgesehen vom unteren Bereich des 2. Behälters (D2 R20) unterscheiden sich die Temperaturen der beiden Simulationen nur geringfügig (Abb. 4.42, Abb. 4.43). An einigen Messstellen wird die Temperatur von der alten Simulation geringfügig überschätzt. Bei der Simulation mit dem ASM-Modell und den zusätzlichen Modifikationen wird an diesen Punkten die Temperatur genauer berechnet. Am deutlichsten ist dies an der Messstelle D2 C20 (oberer Teil des 2. Behälters) zu sehen. Aber auch bei D1 C20 kann eine geringfügige Verbesserung von 4500 s – 6000 s beobachtet werden.



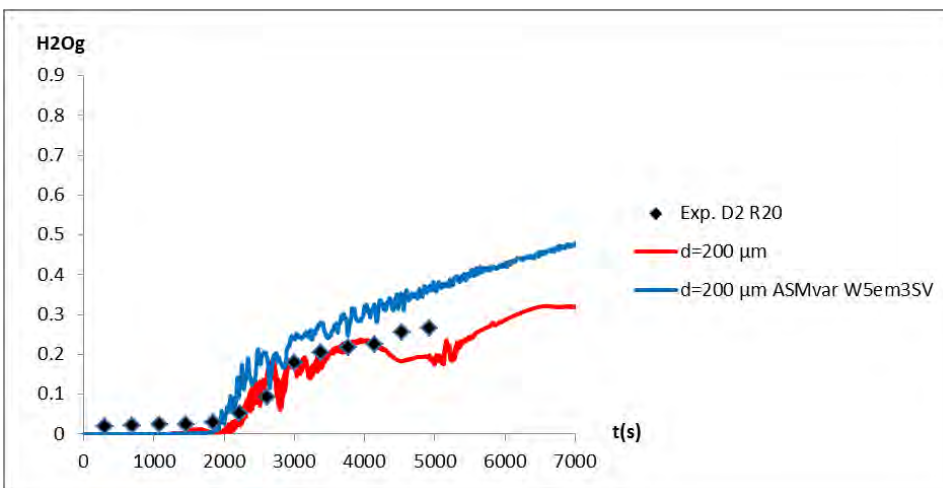
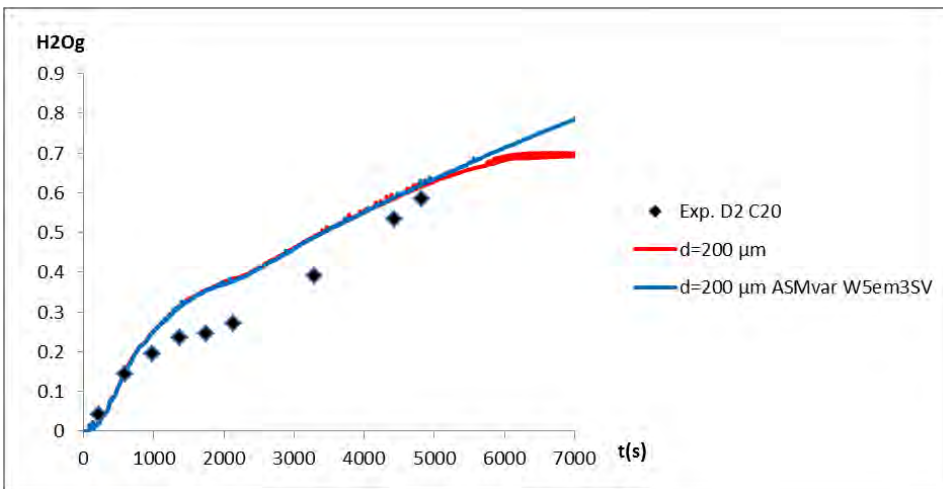
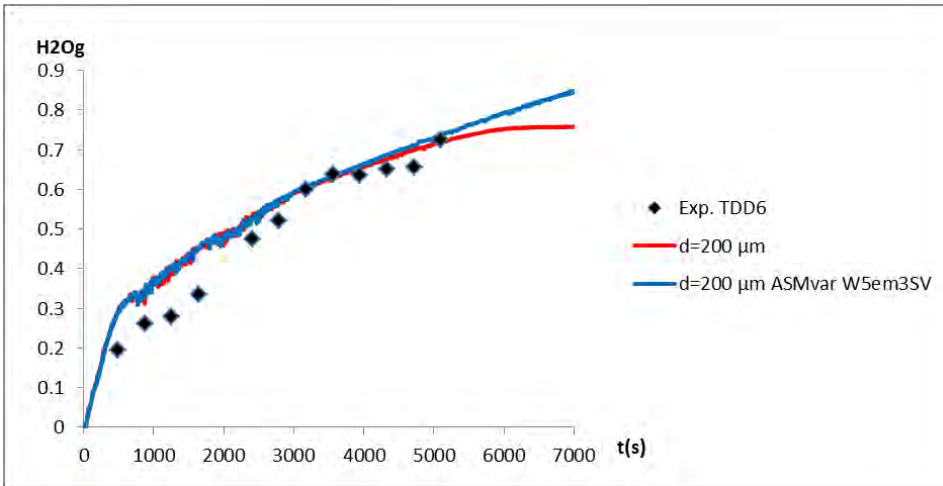
**Abb. 4.38** Wandkondensationsrate bei Simulation ohne ASM-Modell (rot) und bei Simulation mit dem ASM-Modell einschließlich der Einschränkung der Volumen Kondensation in Wandnähe (blau) und bei Simulation ohne Volumen Kondensationsmodell (grün)



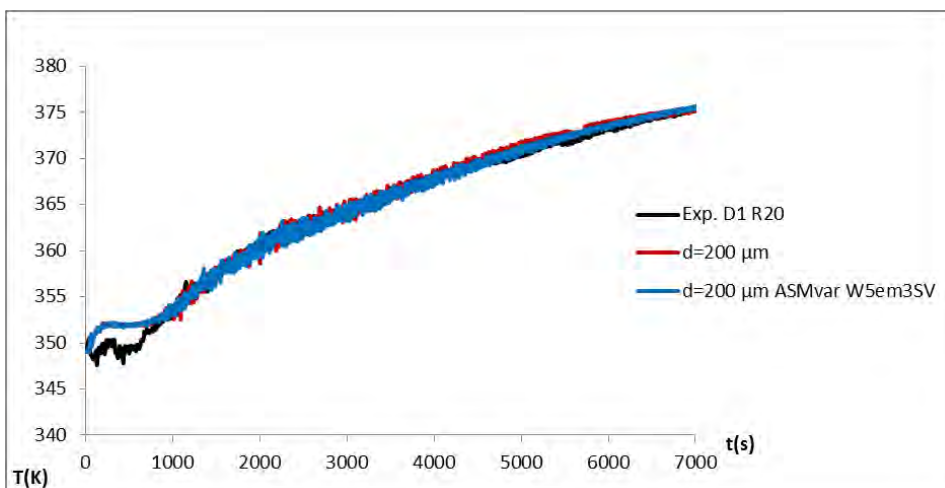
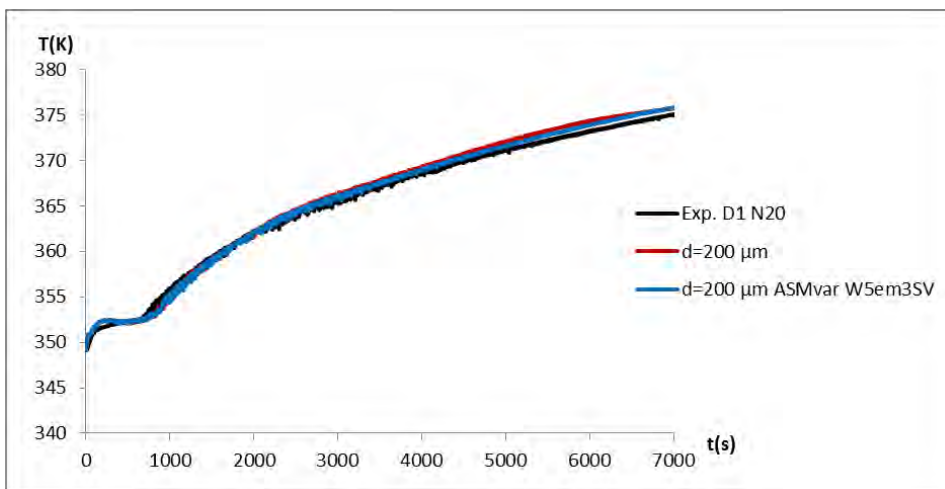
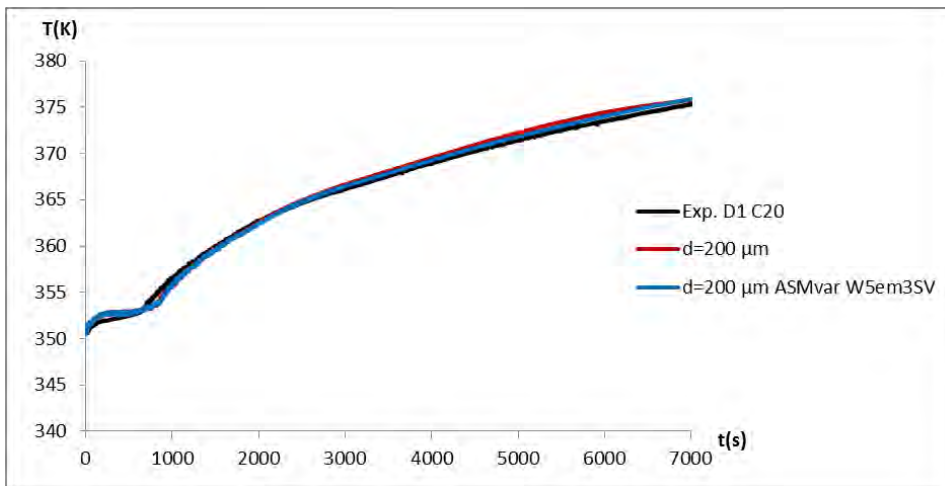
**Abb. 4.39** Volumen Kondensation (oben) und Volumenverdampfung (unten) bei Simulation ohne ASM-Modell und bei Simulation mit dem ASM-Modell einschließlich der Einschränkung der Volumen Kondensation in Wandnähe



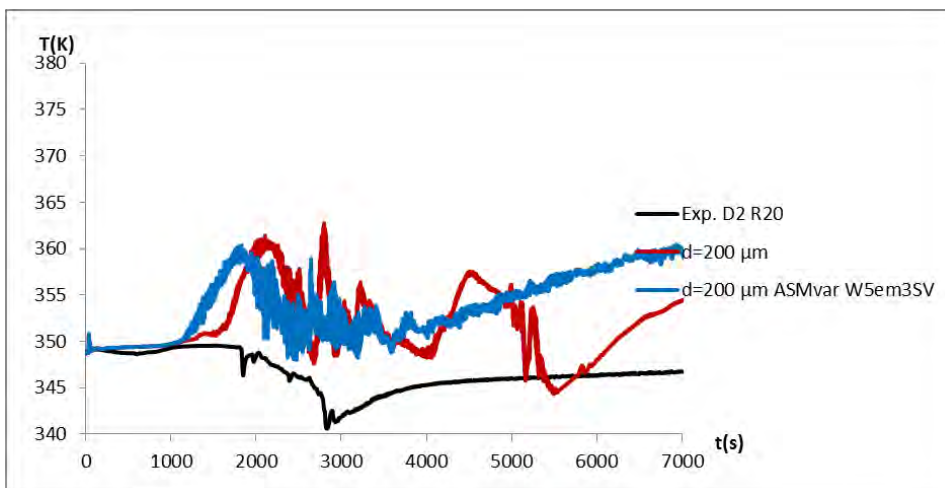
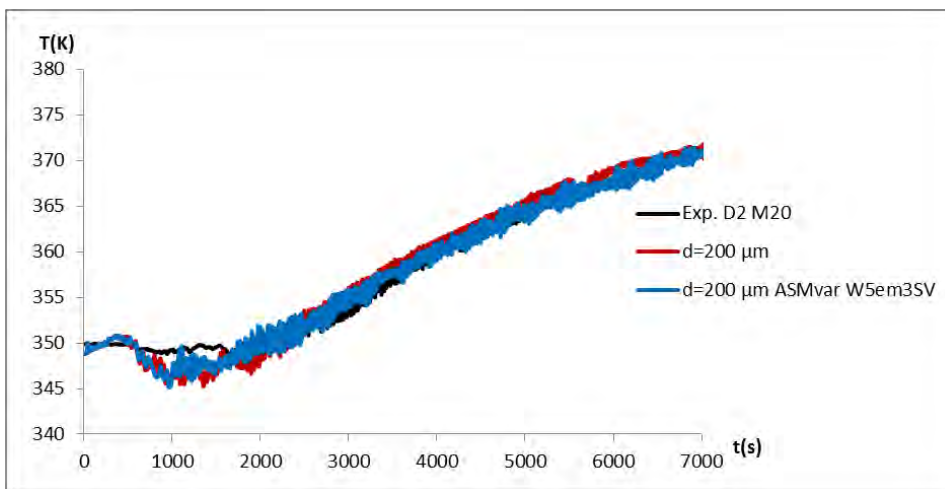
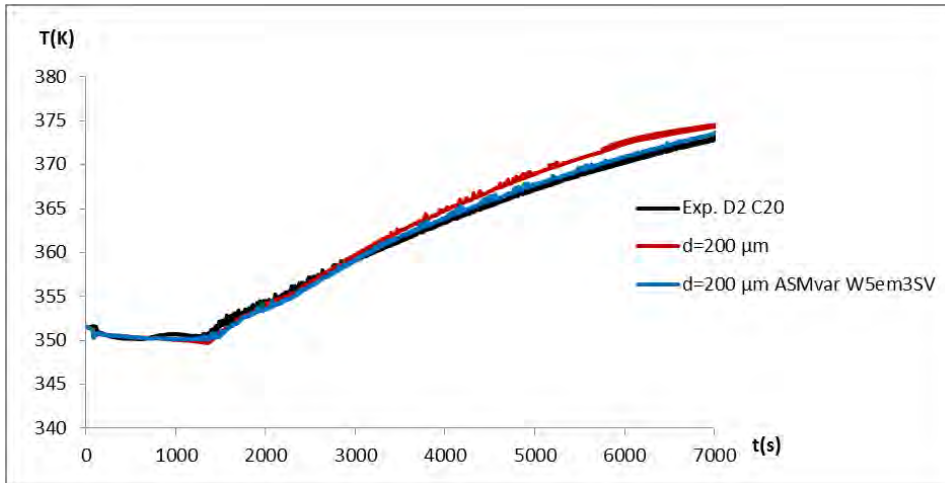
**Abb. 4.40** Wasserdampf-Modellbruch an unterschiedlichen Messstellen im Experiment, bei Simulation ohne ASM-Modell und bei Simulation mit dem ASM-Modell einschließlich der Einschränkung der Volumencondensation in Wandnähe



**Abb. 4.41** Wasserdampf-Modellbruch an unterschiedlichen Messstellen im Experiment, bei Simulation ohne ASM-Modell und bei Simulation mit dem ASM-Modell einschließlich der Einschränkung der Volumencondensation in Wandnähe



**Abb. 4.42** Temperatur an unterschiedlichen Messstellen im Experiment, bei Simulation ohne ASM-Modell und bei Simulation mit dem ASM-Modell einschließlich der Einschränkung der Volumen Kondensation in Wandnähe



**Abb. 4.43** Temperatur an unterschiedlichen Messstellen im Experiment, bei Simulation ohne ASM-Modell und bei Simulation mit dem ASM-Modell einschließlich der Einschränkung der Volumen Kondensation in Wandnähe



#### 4.9.5 Zusammenfassung

Anhand des Experiments Panda4bis wurde die Volumenkondensationsmodellierung des IKE Stuttgart validiert. Nach ersten Tests wurde das „1-Fluid“-Modell (Wassertröpfchen sind zusätzliche Komponente) ausgewählt, da beim „2-Fluid“-Modell (mehrphasige CFX-Simulation) die Rechenzeit deutlich höher ist und von einer ausreichenden Genauigkeit bei dieser Modellierung mit dem „1-Fluid“-Modell ausgegangen werden kann.

Bei diesem Volumenkondensations-/Verdampfungsmodell ist die Tröpfchengröße ein zentraler Parameter, der vom Nutzer gewählt werden muss. Sie bestimmt, wie schnell die Kondensations- und Verdampfungsvorgänge ablaufen. Experimentelle Daten zur Tröpfchengröße sind nur im geringen Umfang vorhanden. Die Daten deuten darauf hin, dass in vielen Fällen eine in etwa konstante Tröpfchengröße von wenigen  $\mu\text{m}$  realistisch ist. Es hat sich gezeigt, dass sich die benötigte Rechenzeit stark erhöht, falls kleinere Tröpfchendurchmesser verwendet werden. Simulationen mit Tröpfchengrößen  $d \leq 50 \mu\text{m}$  sind aufgrund des zu hohen Rechenaufwandes vorzeitig beendet worden. Mit  $d = 200 \mu\text{m}$  konnte der Versuch nachgerechnet werden.

In der ursprünglichen Version des Volumenkondensationsmodells besteht die Möglichkeit, dass keine Kondensation stattfindet, weil keine Kondensationskeime (= Wassertropfen) vorliegen. Keimbildungsprozesse werden allerdings nicht simuliert. Um überhaupt Volumenkondensation zu ermöglichen, muss zu Beginn der Simulation eine geringe Tröpfchenkonzentration vorliegen bzw. Tröpfchen eingespeist werden, obwohl dies nicht den experimentellen Bedingungen entspricht. Dies zieht weitere „unphysikalische“ Annahmen nach sich, wie z. B., dass die Verdampfung bei geringer Tröpfchenkonzentration zu unterdrücken ist. Das Volumenkondensationsmodell soll zukünftig für Containment-Anwendungen genutzt werden. Für diese Anwendungen ist allerdings nicht davon auszugehen, dass in größeren Raumbereichen keinerlei Kondensationskeime vorliegen. Deshalb wird bei der Modifikation des Volumenkondensationsmodells davon ausgegangen, dass immer eine kleine Phasengrenzfläche  $\beta_{\min}$  vorliegt, an der Volumenkondensation stattfinden kann. In einer Parameterstudie wurde  $\beta_{\min} = 1.0e-4 \text{ m}^{-1}$  als sinnvoller Wert identifiziert.

Bei Tröpfchendurchmessern von  $1 - 2 \mu\text{m}$  ist die Sinkgeschwindigkeit der Tröpfchen kleiner als  $0.1 \text{ mm/s}$  und kann deshalb in erster Näherung vernachlässigt werden. Es ist aber zu erwarten, dass es zu einem „Ausregnen“ kommt sobald die Tröpfchenkonzentration

zentration zu hoch wird. Dazu liegen aber gegenwärtig keine Messwerte für containmenttypische Randbedingungen / Strömungsverhältnisse vor. Das Absinken von Tröpfchen kann auch beim „1-Fluid“-Modell mit Hilfe des Algebraic Slip Modells (ASM) modelliert werden. Es wurde angenommen, dass für einen Tröpfchenmassenbruch, der kleiner als 0.05 ist, der für das ASM-Modell spezifizierte Tröpfchendurchmesser 1  $\mu\text{m}$  beträgt, bei höheren Konzentrationen steigt er an, was eine höhere Sinkgeschwindigkeit zur Folge hat. Eine weitere Überprüfung dieser Annahme durch experimentelle Daten und Versuchsnachrechnungen ist notwendig.

Die Volumen Kondensation in unmittelbarer Nähe der Behälterwände führt dazu, dass im späteren Verlauf der Simulation die Wandkondensation durch Volumen Kondensation ersetzt wird. Dafür ist u. a. das ANSYS-Wandkondensationsmodell verantwortlich, das bei Vorhandensein von Wassertröpfchen die Wandkondensationsrate unterschätzt. Im ANSYS-Modell wird bei Berechnung der Sättigungsbedingungen nicht berücksichtigt, dass Tröpfchen eine Flüssigkeit sind und kein Gas. Deshalb wurden zwei zusätzliche Modellannahmen getroffen. In unmittelbarer Wandnähe soll keine Volumen Kondensation/Verdampfung stattfinden und Wassertröpfchen sollen in diesem Bereich verschwinden, da sie sich an der Wand anlagern.

Mit diesen Modellmodifikationen wurde das Panda4bis-Experiment erfolgreich nachgerechnet. Der Einfluss des Volumen Kondensations-/Verdampfungsmodells auf die Temperatur und die Dampfkonzentration an den Messstellen war aber eher gering.

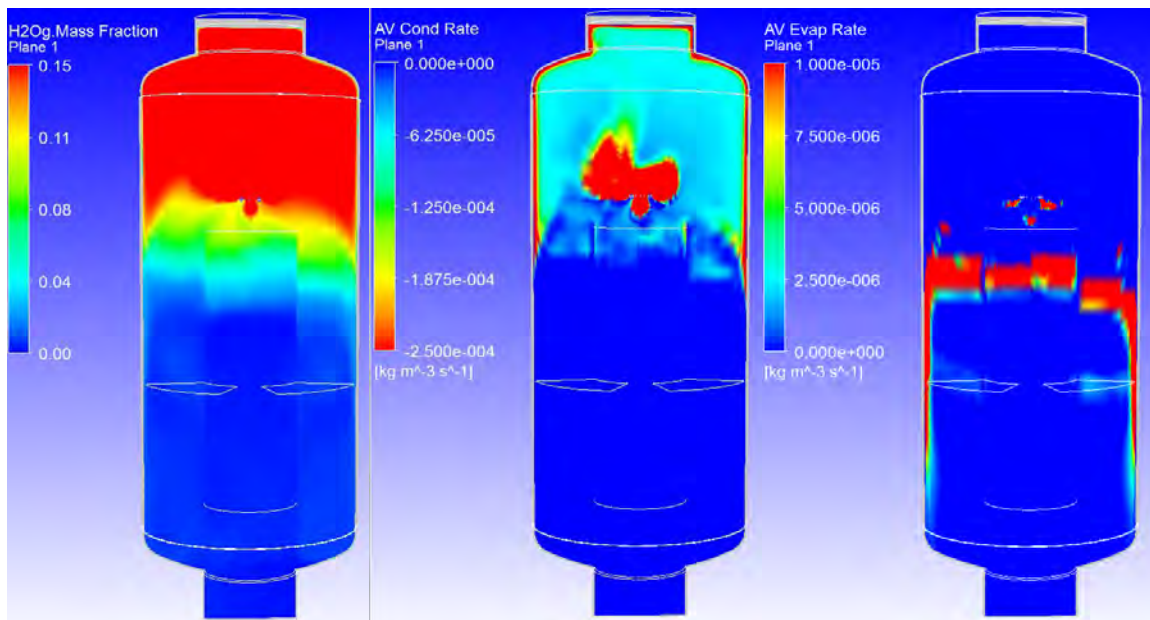
#### **4.10 Nachrechnung des THAI-Versuches TH-2 mit dem modifizierten IKE-Volumenkondensationsmodell**

Auch der THAI-Versuch TH-2 wurde mit dem modifizierten Volumen Kondensationsmodell nachgerechnet, um dieses zu validieren. Beim TH-2 handelt es sich um einen THAI-Versuch, bei dem im oberen Bereich Dampf in den Behälter eingespeist wurde. Weitere Details zu dem Versuch finden sich unter anderem in /KAN 03/ und /SCH 14/.

Bei der hier vorliegenden Nachrechnung mit CFX wurden die in Tab. 4.5 dargestellten Modifikationen bzw. Optionen gewählt.

**Tab. 4.5** Für die Nachrechnung von TH-2 gewählte Modelloptionen

Experiment	THAI TH-2
Phänomen	Kondensation
Elementzahl	450 237 (Gas + Wand)
Materialien	Air Ideal Gas, H <sub>2</sub> Og, H <sub>2</sub> Ol
Turbulenzmodell	SST
Diffusionskoeffizient	Nach Fuller
Wärmestrahlung	Discrete Transfer, Gray, 64 Strahlen
Volumenkondensationsmodell	IKE (modifiziert durch GRS)
Minimale Phasengrenzfläche $\beta_{\min}$	1.0e-4 [m <sup>-1</sup> ]
Tröpfchenradius d	Abhängig vom Tröpfchenmassenbruch $Y_{H_2O}$ : Version 1 in Tab. 4.4
Volumenkondensation in Wandnähe	Unterdrückt
ASM Modell	Eingeschaltet + Deposition an den Wänden
Wandkondensationsmodell	ANSYS-Modell
Konvergenz	RMS < 0.0001
ANSYS-Version	16.1



**Abb. 4.44** Dampfanteil (links), Kondensationsrate (Mitte) und Verdampfungsrate (rechts)

In Abb. 4.44 ist links der Dampfanteil, in der Mitte die lokale Kondensationsrate und rechts die lokale Verdampfungsrate dargestellt. Es zeigt sich, dass die Dampfkondensation hauptsächlich im oberen Teil des Behälters stattfindet, während die Wiederverdampfung von Kondensattröpfchen mehr im mittleren Bereich stattfindet. Weiterhin ist zu sehen, dass Kondensatropfen mit der abwärts gerichteten Strömung entlang der Wände nach unten transportiert werden. Da dort die Dampfkonzentration niedriger als die Sättigungsbedingung ist, kommt es dabei zur Wiederverdampfung.

In Abb. 4.45 wird der berechnete Druckverlauf im THAI-Behälter mit dem experimentellen Verlauf verglichen. Der hier berechnete Verlauf liegt zwar etwas oberhalb der experimentellen Werte. Er ist aber von der Genauigkeit her ähnlich zu dem, der bereits in früheren Arbeiten, z. B. mit der GRS-Volumenkondensation berechnet wurde (siehe auch /SCH 14/). Die Unterschiede zwischen beiden Rechnungen können aber auch mit unterschiedlichen Gittern bzw. weiteren numerischen Parametern (Zeitschrittweite u. ä.) zusammenhängen, deshalb soll der Vergleich an dieser Stelle nicht überstrapaziert werden.

Der berechnete Temperaturverlauf wird in Abb. 4.46 bis Abb. 4.48 für unterschiedliche Positionen im THAI-Behälter mit den experimentellen Werten verglichen. Im oberen Bereich des THAI-Behälters ist die Temperatur etwas zu hoch, während im unteren Bereich die berechnete Temperatur etwas zu niedrig ist. Diese berechneten Verläufe passen etwas besser zu den experimentellen Werten als die Temperaturen, die in früheren Arbeiten mit dem GRS-Volumenkondensationsmodell berechnet wurden /SCH 14/.

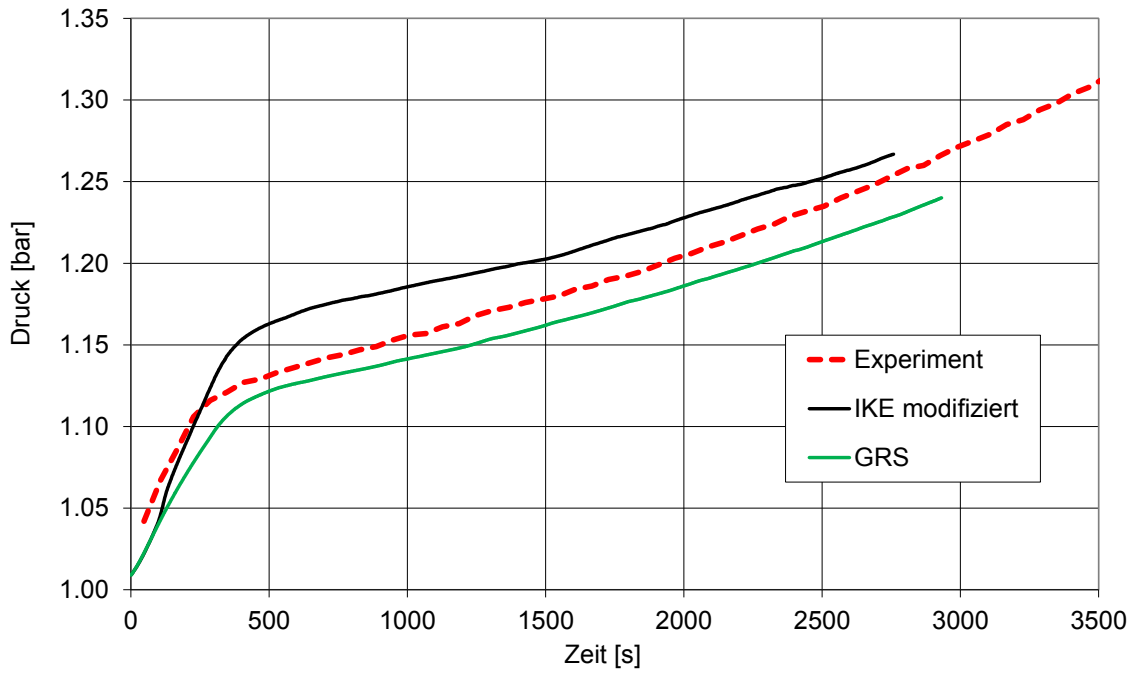


Abb. 4.45 Druckverlauf im THAI-Behälter

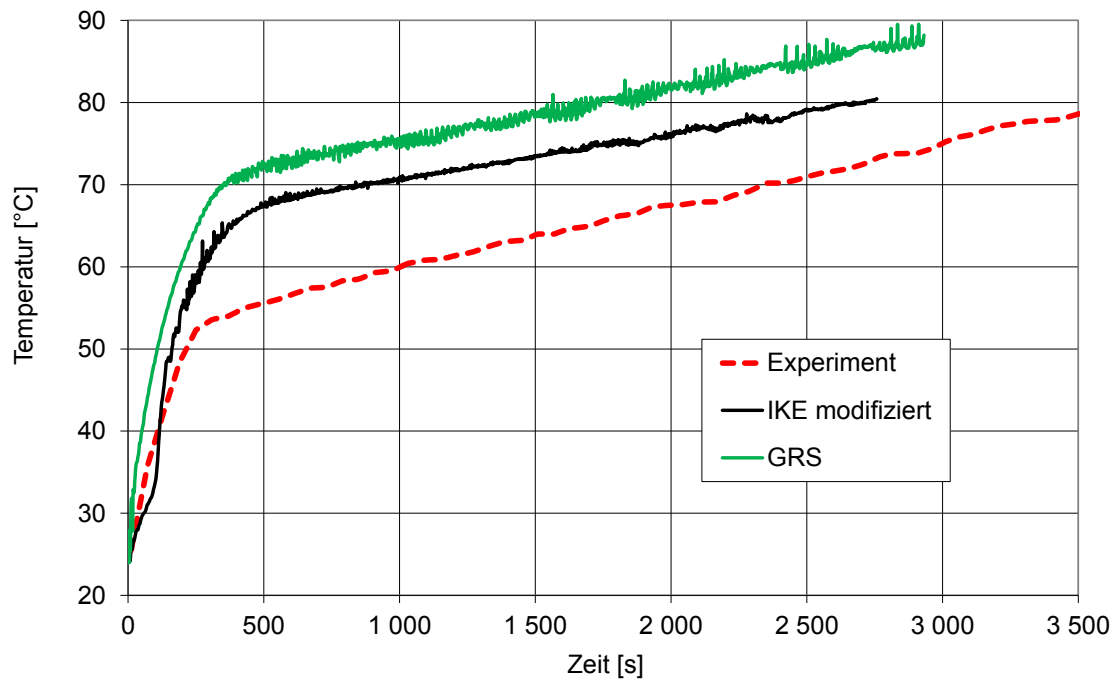
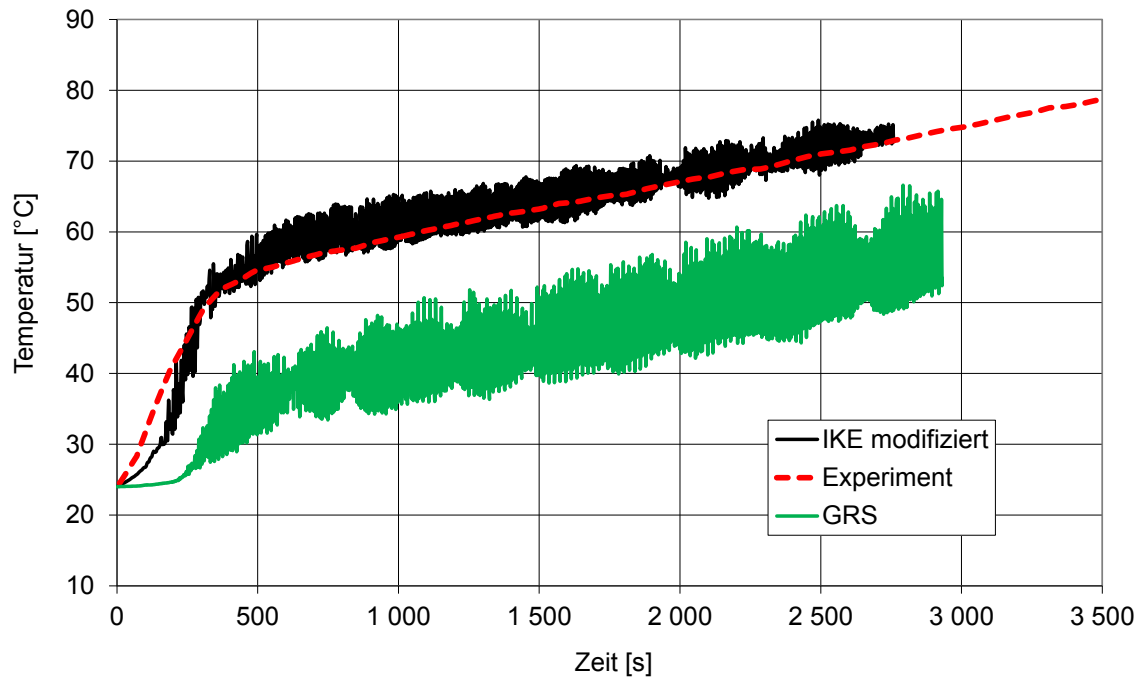
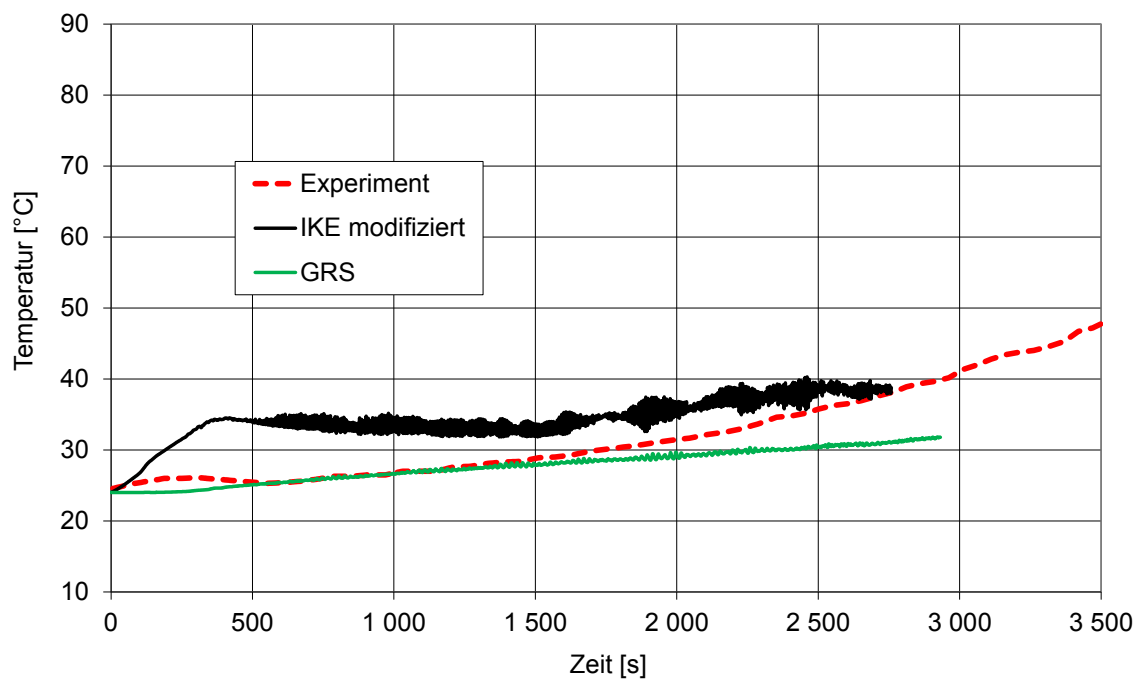


Abb. 4.46 Temperaturverlauf in 8.4 m Höhe



**Abb. 4.47** Temperaturverlauf in 6.3 m Höhe



**Abb. 4.48** Temperaturverlauf in 4.9 m Höhe

#### 4.11 Nachrechnung des THAI-Experimentes TH-24 mit dem modifizierten IKE-Volumenkondensationsmodell

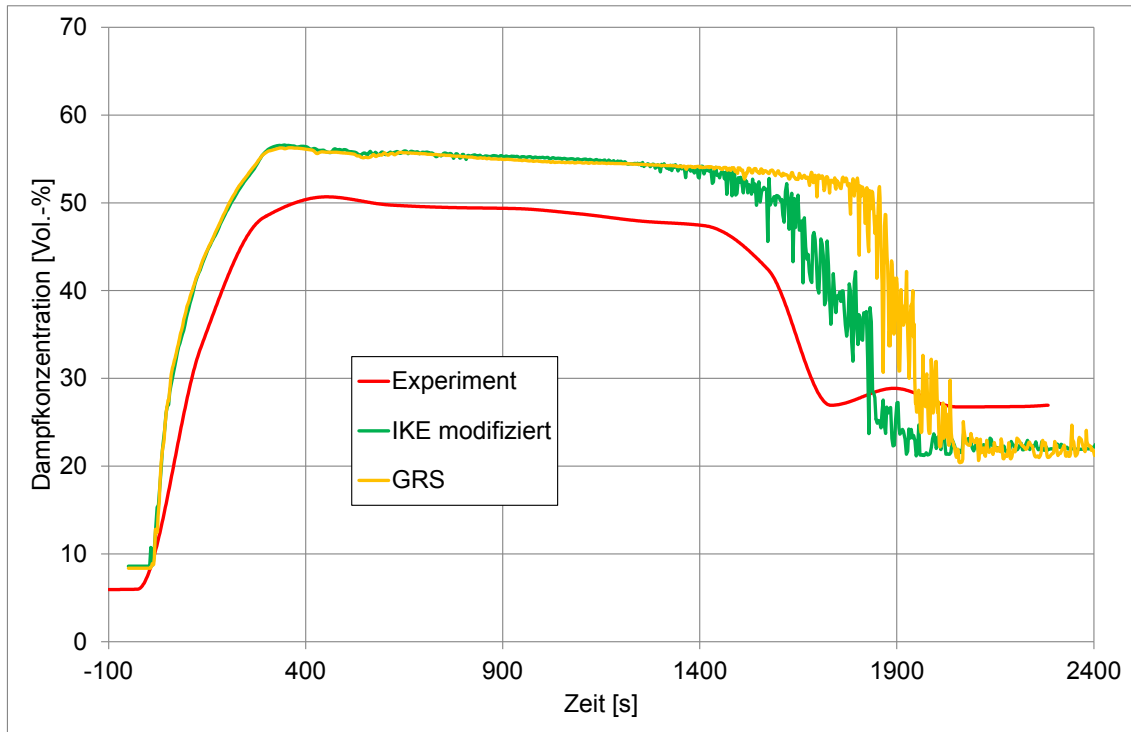
Als weiteres Validierungsexperiment für das modifizierte IKE-Volumenkondensationsmodell wurde das THAI-Experiment TH-24 gewählt /FIS 11/. Dieses Experiment behandelt die Bildung und Auflösung einer Dampfschichtung. Durch eine unterschiedliche Heizung bzw. Kühlung der Behälterwände wird hierzu eine Konvektionsströmung im THAI-Behälter erzeugt. Weitere Details zum Experiment finden sich unter anderem in einem früheren GRS-Bericht /SCH 14/. Die für die Nachrechnung hier verwendeten Modellparameter sind in Tab. 4.6 dargestellt.

**Tab. 4.6** Infofbox für das THAI TH-24 Experiment

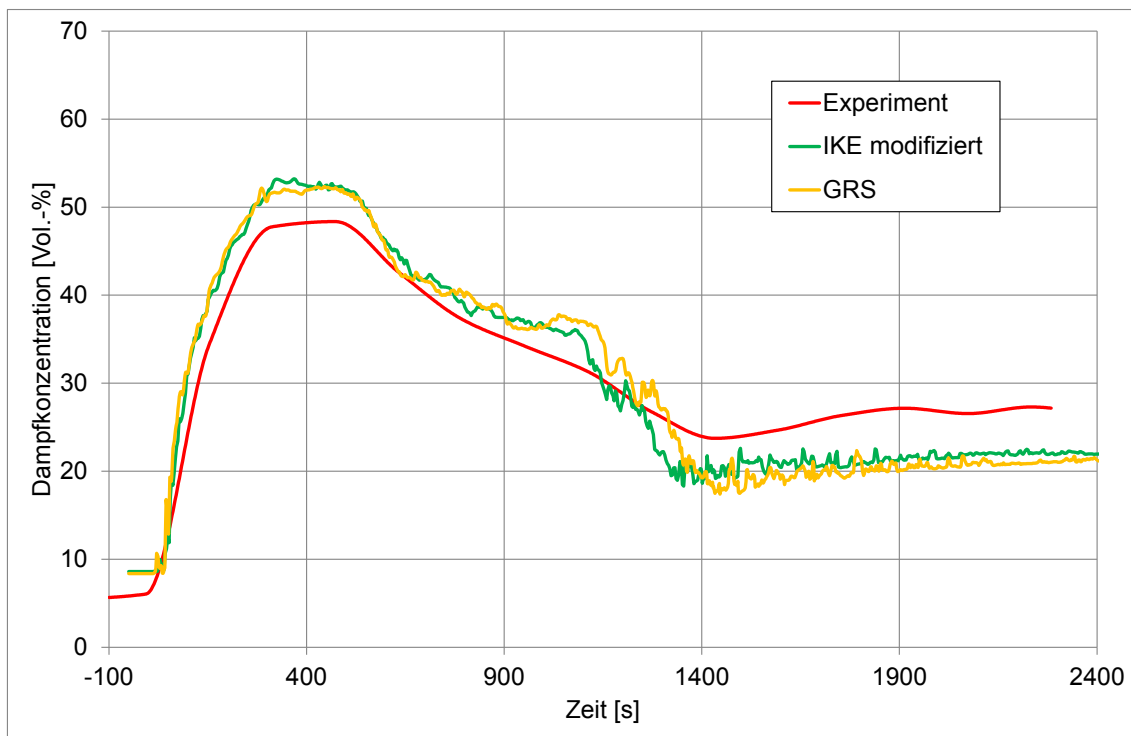
Experiment	THAI TH-24
Phänomen	Kondensation, Schichtungsbildung und Auflösung
Elementzahl	639 058
Materialien	Air Ideal Gas, H <sub>2</sub> Og, H <sub>2</sub> Ol
Turbulenzmodell	SST
Diffusionskoeffizient	Nach Fuller
Wärmestrahlung	Discrete Transfer, Gray, 64 Strahlen
Volumenkondensationsmodell	IKE (modifiziert durch GRS)
Minimale Phasengrenzfläche $\beta_{\min}$	$1.0e^{-4}$ [m <sup>-1</sup> ]
Tröpfchenradius d	Abhängig vom und Tröpfchenmassenbruch $Y_{H_2O}$ : Version 1 in Tab. 4.4
Volumenkondensation in Wandnähe	Unterdrückt
ASM Modell	Eingeschaltet + Deposition an den Wänden
Wandkondensationsmodell	ANSYS-Modell
Konvergenz	RMS < 0.0001
ANSYS-Version	16.1

In Abb. 4.49 und Abb. 4.50 sind der Verlauf der Dampfkonzentration in 8.7 m und 7.7 m Höhe im THAI-Behälter während des TH-24-Experimentes dargestellt. Gerade im oberen Bereich (8.7 m) liegt die Dampfkonzentration anfangs etwas zu hoch, prinzipiell ist der experimentelle Auf- und Abbau der Dampfschichtung durch die Simulation jedoch gut getroffen. Der Verlauf der Simulation entspricht in etwa dem Verlauf, der schon bei früheren Berechnungen von TH-24 mit einem Volumenkondensationsmodell der GRS beobachtet wurde /SCH 14/. Ähnliches kann man auch über den Temperatur-

und den Druckverlauf sagen (Abb. 4.51 und Abb. 4.52). Der Druckverlauf liegt hier unter den experimentellen Werten, entspricht damit aber dem Verlauf, der auch schon mit dem GRS-Volumenkondensationsmodell berechnet wurde.



**Abb. 4.49** Dampfkonzentration in 8.7 m Höhe

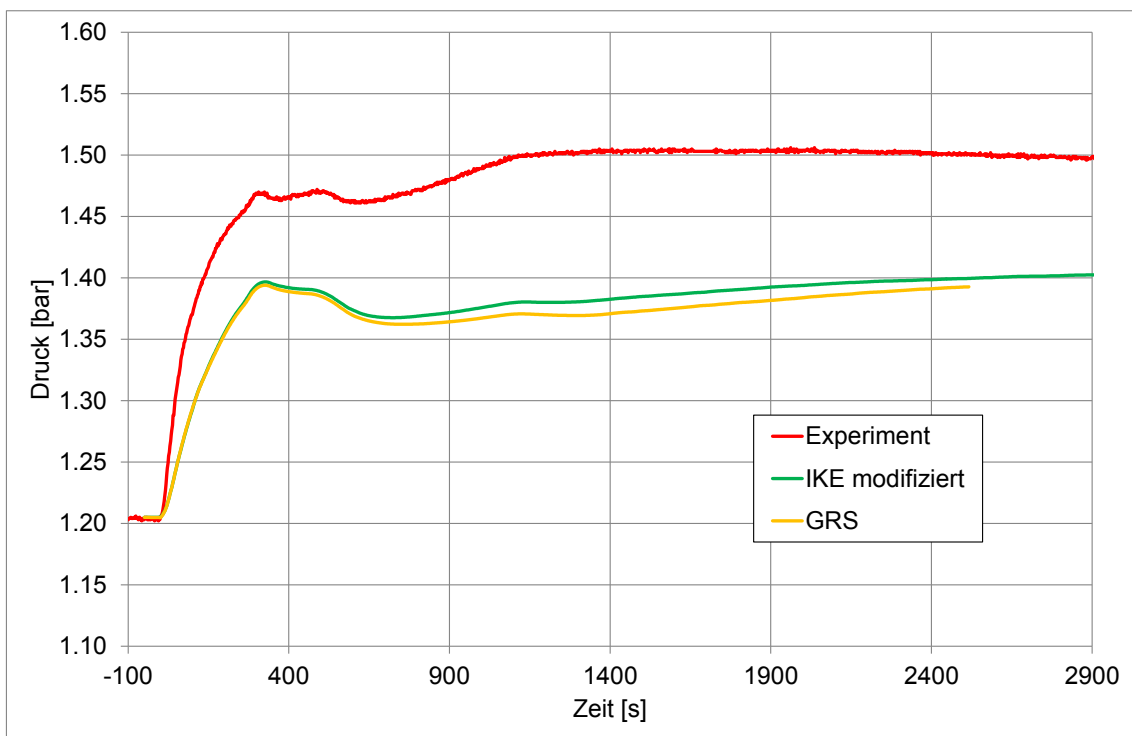


**Abb. 4.50** Dampfkonzentration in 7.7 m Höhe





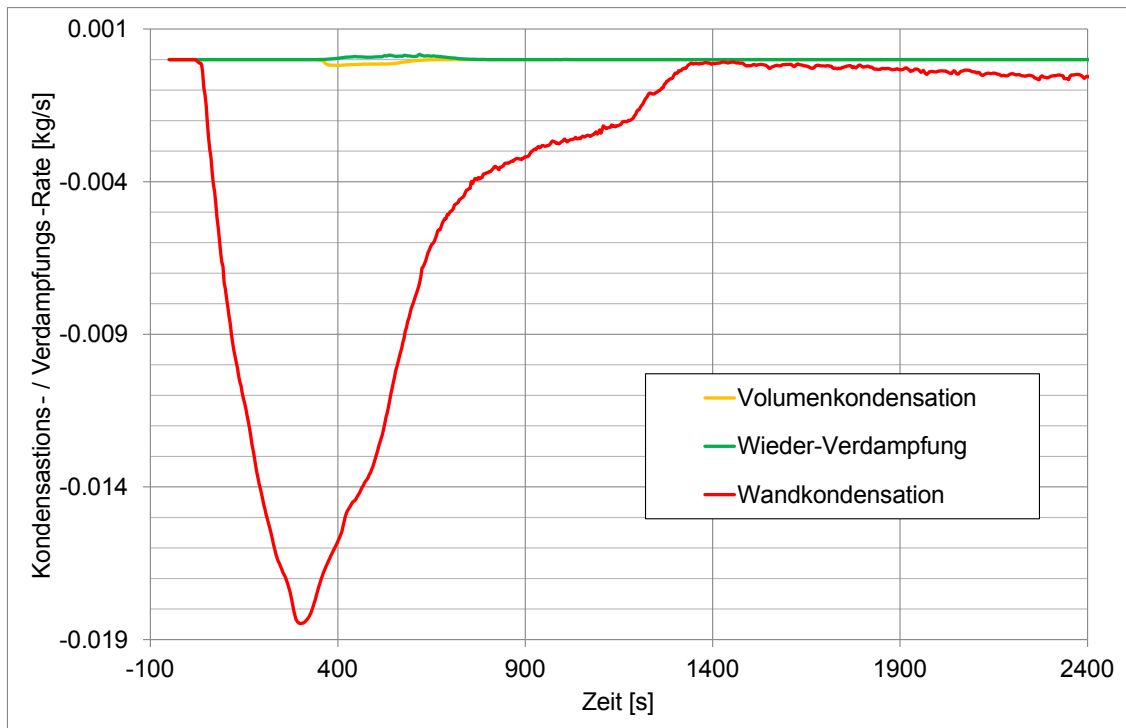
**Abb. 4.51** Temperaturverlauf in 7.0 m Höhe



**Abb. 4.52** Druckverlauf beim TH-24 Experiment

Im Gegensatz zum GRS-Modell kann das IKE-Modell die sich bildenden Nebeltröpfchen und auch deren Wiederverdampfung simulieren. Betrachtet man den in Abb. 4.53 dargestellten Vergleich von Volumen- und Wandkondensationsraten, so

sieht man, dass in diesem Experiment die Wandkondensation der dominierende Prozess ist. Aus diesem Grund haben die Veränderung des Volumenkondensationsmodells und die neu geschaffene Möglichkeit der Wiederverdampfung von Nebeltröpfchen nur einen geringen Einfluss auf den Gesamtverlauf von Druck, Dampfkonzentrationen oder Temperaturen in diesem Experiment. Insofern ist die Ähnlichkeit zu früheren Berechnungsergebnissen plausibel.



**Abb. 4.53** Vergleich von Volumen- und Wandkondensationsraten

#### 4.12 Zusammenfassung der Validierung des Volumenkondensationsmodells

Nach ersten Testsrechnungen wurde das „1-Fluid“-Modell (Wassertröpfchen sind zusätzliche Komponente) ausgewählt, da beim „2-Fluid“-Modell (mehrphasige CFX-Simulation) die Rechenzeit deutlich höher ist und von einer ausreichenden Genauigkeit beim 1 Fluid-Modell ausgegangen werden kann.

Bei diesem Volumenkondensations-/Verdampfungsmodell bestimmt die Tröpfchengröße wie schnell die Kondensations- und Verdampfungsvorgänge ablaufen. Die wenigen vorhandenen experimentellen Daten lassen den Schluss zu, dass oft eine in etwa konstante Tröpfchengröße von wenigen  $\mu\text{m}$  realistisch ist. Allerdings zeigen die durchge-

fürten Simulationen, dass sich die Rechenzeit stark erhöht, falls kleinere Tröpfchendurchmesser als  $100\ \mu\text{m}$  –  $200\ \mu\text{m}$  verwendet werden.

In der ursprünglichen Version des Volumenkonversionsmodells findet keine Kondensation statt, falls keine Kondensationskeime (= Wassertropfen) vorliegen. Um Volumenkonversion zu ermöglichen müssen unphysikalische Annahmen bei den Start- und Einspeisebedingungen gemacht werden. Um dies zu umgehen wurde das Volumenkonversionsmodell modifiziert. Es wird davon ausgegangen, dass immer eine kleine Phasengrenzfläche  $\beta_{\text{min}} = 1.0\text{e-}4\ \text{m}^{-1}$  vorliegt. kann auch Beim „1-Fluid“-Modell kann das Absinken von Tröpfchen mit dem Algebraic Slip Modells (ASM) simuliert werden. Für geringe Tröpfchenkonzentration (Massenbruch  $< 0.05$ ) wird ein Tröpfchendurchmesser von  $1\ \mu\text{m}$  angenommen. Für solch kleine Tröpfchen ist die Sinkgeschwindigkeit vernachlässigbar ( $v_{\text{sink}} \sim 0.1\ \text{mm/s}$ ). Bei höheren Tröpfchenkonzentrationen werden größere Tröpfchendurchmesser angenommen was höheren Sinkgeschwindigkeiten entspricht. Die Korrelation Tröpfchenkonzentration/Tröpfchendurchmesser bedarf einer weiteren experimentellen Überprüfung.

Die Volumenkonversion in unmittelbarer Nähe der Behälterwände führt dazu, dass im späteren Verlauf der Simulation die Wandkonversion durch Volumenkonversion ersetzt wird. Hauptgrund hierfür ist, dass das ANSYS-Wandkonversionsmodell bei Vorhandensein von Wassertropfen die Wandkonversionsrate unterschätzt, weil bei Berechnung der Sättigungsbedingungen nicht berücksichtigt wird, dass Tröpfchen eine Flüssigkeit sind und kein Gas.

Um die Auswirkungen hiervon zu minimieren werden zwei zusätzliche Annahmen getroffen. In unmittelbarer Wandnähe soll keine Volumenkonversion / Verdampfung stattfinden und Wassertropfen werden mit einem zusätzlichen Quellterm aus diesem Bereich entfernt. Dem liegt die Annahme zugrunde, dass sich Tropfen in unmittelbarer Wandnähe an diese anlagern.

Mit diesem modifizierten Modell wurde das Panda4bis-Experiment erfolgreich nachgerechnet. Der Einfluss des Volumenkonversions-/Verdampfungsmodells auf die Temperatur und die Dampfkonzentration an den Messstellen war aber eher gering. Eine Validierung anhand von TH-2 zeigt eine geringfügige Verbesserung bei der Vorhersage der Temperatur insbesondere in mittlerer Behälterhöhe ( $h = 6.3\ \text{m}$ ). Der Versuch TH-24 konnte ebenfalls erfolgreich mit dem modifizierten Volumenkonversions- und Verdampfungsmodell nachgerechnet werden. Hier zeigten sich ähnliche Ergebnisse bei

Temperatur und Gaszusammensetzung wie bei älteren Simulationen mit dem GRS-Volumenkondensationsmodell.



## **5           Arbeitspunkt 1.4 – Erweiterung des PAR-Modells in CFX um Verdampfungsvorgänge von Wassertröpfchen**

### **5.1           Einleitung**

Das von der GRS im Vorhaben RS1500 /SCH 14/ weiterentwickelte Modell für Passive Autokatalytische Rekombinatoren (PAR-Modell) war bisher noch nicht in der Lage, Wassertröpfchen, die in den PAR mit dem Gasmassenstrom eintreten, zu berücksichtigen. Ziel der hier beschriebenen Arbeiten ist es, das PAR-Modell so zu erweitern, dass es mit dem neuen Volumenkondensationsmodell kompatibel ist. Bei Verwendung dieses Volumenkondensationsmodells wird eine zusätzliche Komponente  $H_2O_l$  definiert, die die bei der Volumenkondensation entstehenden Wassertröpfchen repräsentiert (siehe Kapitel 0, AP1.3). Das PAR-Modell muss um diese Komponente erweitert werden. Neben der formalen Erweiterung des Modells müssen auch noch Annahmen getroffen werden, welchen Einfluss die Tröpfchen auf die Rekombination haben.

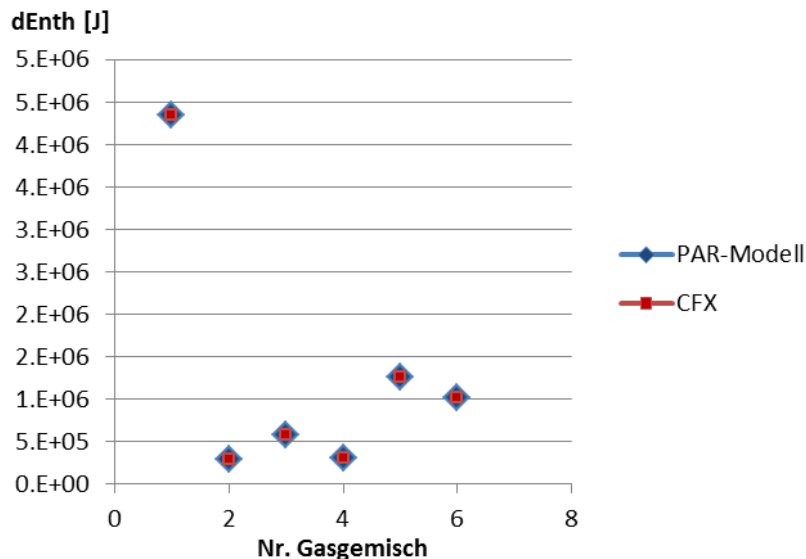
### **5.2           Modellannahmen und Verifikation anhand einer „Stand-Alone-Version“ des PAR-Modells**

In RS1500 wurde neben dem PAR-Modell für CFX auch eine „Stand-Alone-Version“ zu Testzwecken entwickelt. Die folgenden Modifikationen und Erweiterungen wurden in beiden Versionen umgesetzt.

Im bisherigen PAR-Modell wird davon ausgegangen, dass Erhaltungsgleichungen für die Komponenten  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ -Dampf ( $H_2O_g$ ) gelöst werden. Der Massenbruch für  $N_2$  ergibt sich aus der Forderung, dass die Summe über alle Massenbrüche eins sein muss. Im erweiterten PAR-Modell wird davon ausgegangen, dass eine Komponente mehr vorliegt ( $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O_g$ ,  $H_2O_l$  und  $N_2$ ). Entsprechend müssen die User-FORTRAN-Routinen zum Datenaustausch CFX-PAR-Modell erweitert und modifiziert werden.

Um die Austrittstemperatur aus dem PAR zu berechnen, müssen die Enthalpie und die Wärmekapazität des Gasgemischs im PAR-Modell berechnet werden. Für die gasförmigen Spezies werden die entsprechenden NASA-Polynome verwendet. Für die Wassertröpfchen wird – wie in CFX – eine konstante Wärmekapazität angenommen. Ein Vergleich der mit CFX berechneten Wärmekapazitäten und Enthalpien mit denen des PAR-Modells zeigt eine sehr gute Übereinstimmung. (Abb. 5.1).

Nr.	H <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> Og	H <sub>2</sub> OI	N <sub>2</sub>
1	1	0	0	0	0
2	0	1	0	0	0
3	0	0	1	0	0
4	0	0	0	1	0
5	0	0	0	0	1
6	0.1	0.1	0.1	0.3	1



**Abb. 5.1** Enthalpieänderung bei Temperaturerhöhung des Gasmisches von 300 K auf 600 K (Gaszusammensetzung gemäß Tabelle)

Das verwendete PAR-Modell basiert auf Korrelationen für die Abbaurate und die Effizienz, die an Experimenten (THAI-HR-Versuche, /KAN 09a/, /KAN 09b/) angepasst wurden. Bei diesen Experimenten wurde keine Tröpfchenkonzentration gemessen. Ob und in welchem Umfang bei den Versuchen mit Dampfeinspeisung Wassertröpfchen vorliegen und dann in den Rekombinator gelangt sind, ist unklar. Deshalb lassen sich aus diesen Versuchen keine Abhängigkeiten der Abbaurate und der PAR-Effizienz von der Tröpfchenkonzentration herleiten.

Aufgrund des Fehlens von Versuchsdaten soll das PAR-Modell durch einfache Annahmen so erweitert werden, dass es plausible Simulationsergebnisse liefert.

Bei einem aktiven PAR liegt die Temperatur im Bereich der Platten und am PAR-Auslass in der Regel deutlich über 100 °C. Es kann deshalb davon ausgegangen werden, dass Wassertröpfchen, die in den PAR eintreten, im PAR-Inneren verdampfen. Dazu ist die latente Wärme notwendig, wodurch sich die PAR-Austrittstemperatur entsprechend verringert. In der Regel sollte die Tröpfchenkonzentration in der Atmosphäre

klein sein, ansonsten ist generell mit einem Ausregnen der Tropfen zu rechnen. Bei kleiner Tröpfchenkonzentration kann in erster Näherung der Einfluss der Tröpfchen auf die Abbaurrate vernachlässigt werden. Tritt ein Wassertröpfchen in den aktiven PAR ein, so wird es aufgrund der erhöhten Temperatur verdampfen, wodurch sich die Gaszusammensetzung im Bereich der katalytischen Platten verändert. Im Modell wird davon ausgegangen, dass:

- Bei niedrigen Tröpfchenkonzentrationen alle Tröpfchen verdampfen:  $X_{H_2O}$  wird um  $X_{H_2O}$  erhöht.
- Die Gasaustrittstemperatur sinkt durch die für die Verdampfung benötigte latente Wärme verringert.
- Die Korrelation für die  $H_2$ -Abbaurrate und die Effizienz nicht modifiziert werden.

Falls allerdings durch den Verdampfungsvorgang die Gastemperatur signifikant verringert wird (hohe Tröpfchenkonzentration bei niedriger  $H_2/O_2$ -Konzentration), ist mit einem geringeren Massenstrom durch den PAR zu rechnen, da die treibende Kraft beim PAR der Auftrieb des durch die chemische Reaktion erhitzten Gases ist. Ohne ausreichende experimentelle Daten oder eine detaillierte Simulation der Strömung im Inneren des PARs kann hierzu keine belastbare Korrelation abgeleitet werden. Deshalb wird dieser Effekt bis auf weiteres vernachlässigt.

Es ist aber auch denkbar, dass an der PAR-Öffnung eine hohe  $H_2O$ -Konzentration und eine niedrige  $H_2$ -Konzentration vorliegen. Auch wenn dieser Fall keinen signifikanten Beitrag zum integralen  $H_2$ -Abbau leistet (wegen der geringen  $H_2$ -Konzentration ist die Abbaurrate gering), so muss trotzdem aus numerischen Gründen sichergestellt werden, dass auch in diesem Fall sinnvolle Werte für die Gaszusammensetzung und die Temperatur am PAR bereitgestellt werden. In diesem Fall kann eine vollständige Verdampfung der Tröpfchen dazu führen, dass es im Extremfall zu einer niedrigeren Ausgangstemperatur als Eingangstemperatur am PAR kommt, was unphysikalisch ist und sogar zu numerischen Schwierigkeiten führen kann (u. a. sind dann Stoffwerte nicht mehr gültig). In diesem Fall soll die Masse der Tröpfchen, die verdampft, beschränkt werden, so dass sichergestellt wird, dass die Austrittstemperatur größer als die Eintrittstemperatur ist. Liegt die Austrittstemperatur unter  $100\text{ °C}$  (bei  $P = 1\text{ bar}$ ) und entspricht die Dampfkonzentration nicht exakt den Sättigungsdampfbedingungen, so sorgt das Volumenkonversionsmodell dafür, dass sich durch Kondensation/Verdampfung die exakten Werte im Abgasplume einstellen.



Ohne eine detaillierte Simulation oder Versuchsdaten kann aber in diesem Fall keine verlässliche genaue Aussage über das PAR-Verhalten (Abbaurrate, H<sub>2</sub>-Austrittskonzentration und die Austrittstemperatur) getroffen werden.

Anhand von Stand-Alone-Simulationen des PARs wurde die korrekte Implementation des modifizierten PAR-Modells getestet. In Abb. 5.2 und Abb. 5.3 sind Simulationen mit folgenden PAR-Eintrittsbedingungen zu sehen:

$$T_{\text{ein}} = 340 \text{ K}$$

$$P = 1 \text{ bar}$$

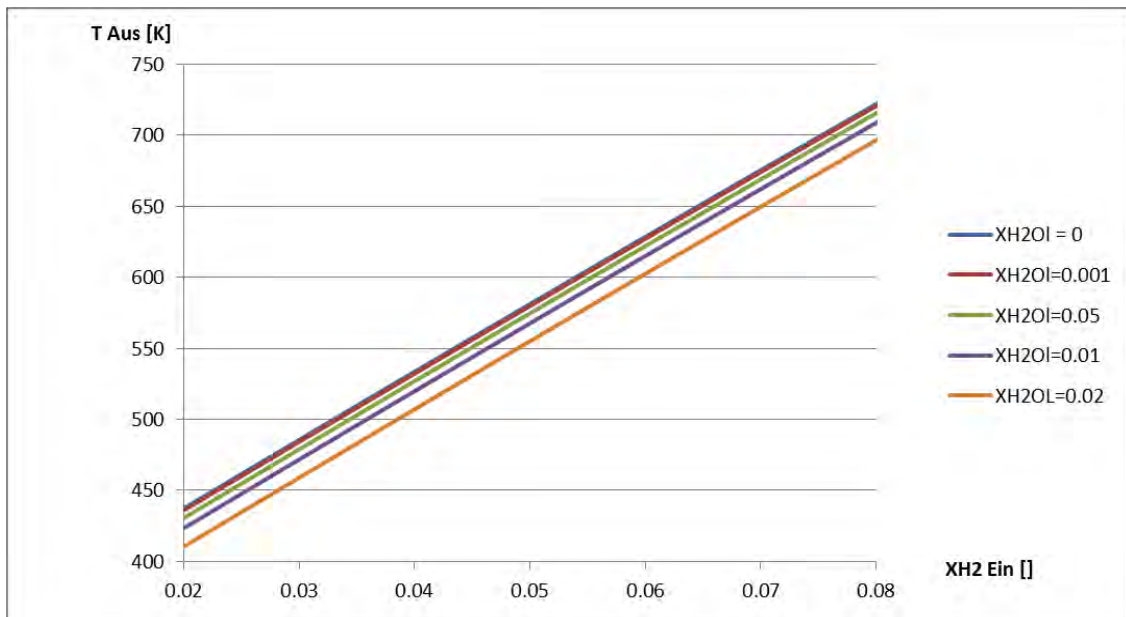
$$X_{\text{O}_2} = 0.2$$

$$X_{\text{H}_2\text{Og}} + X_{\text{H}_2\text{Ol}} = 0.4$$

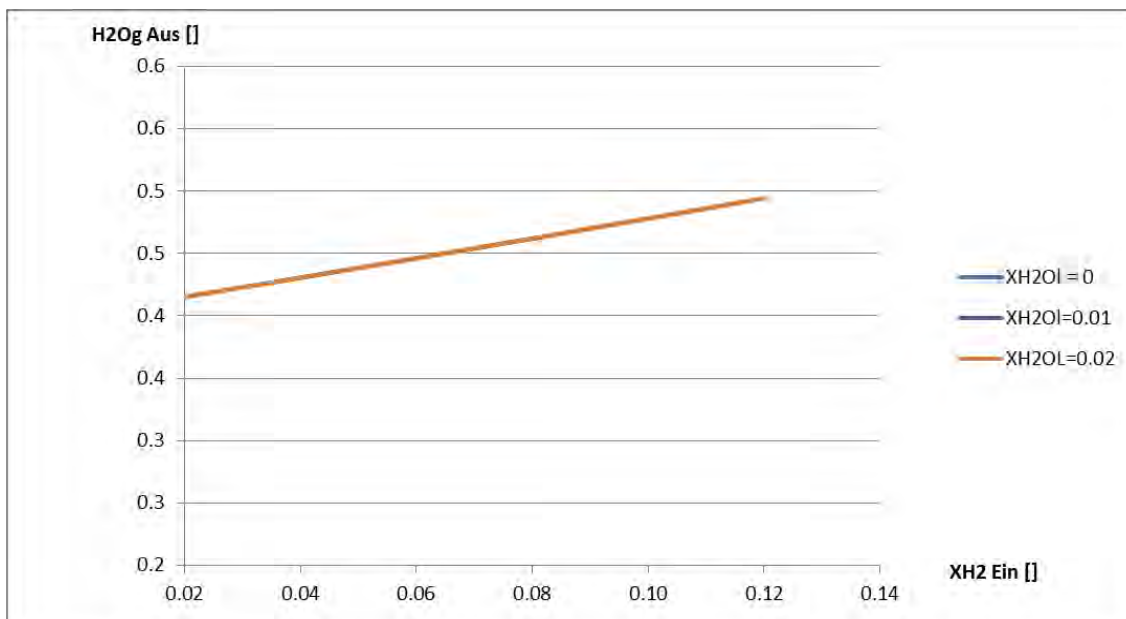
$$X_{\text{H}_2} = 0.02 \text{ bis } 0.08$$

$$X_{\text{H}_2\text{Ol}} \text{ konst.}$$

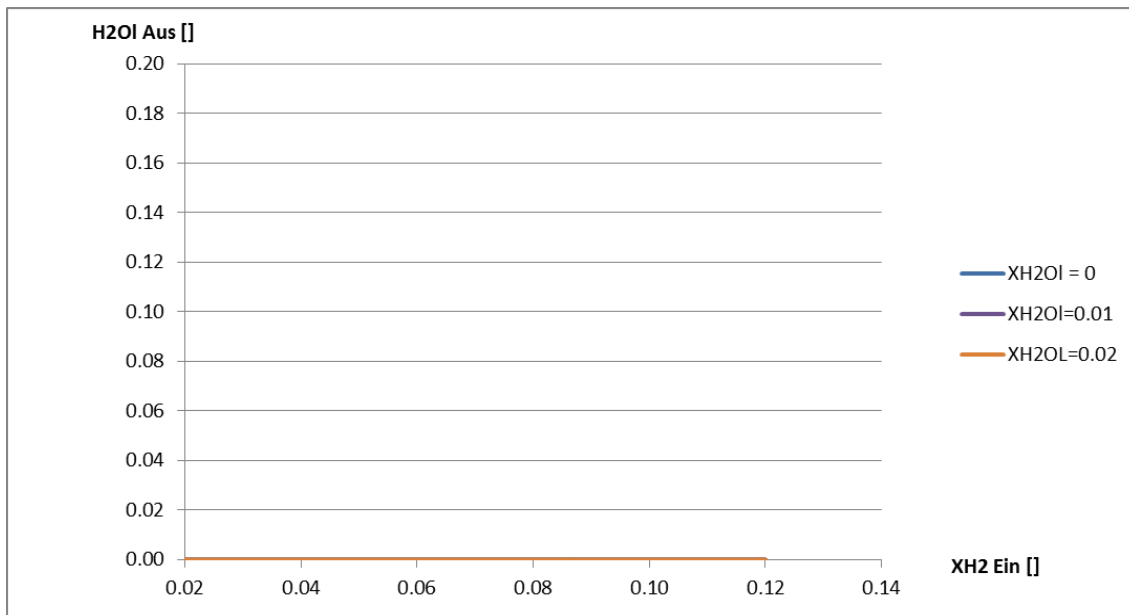
Die minimale H<sub>2</sub>-Eintrittskonzentration wurde auf 0.02 gesetzt, weil dies der Startwert für die Rekombination bei einem kalten Rekombinator ist. Bei diesen Simulationen wurden Wärmeverluste an die Rekombinatorplatten und an das Gehäuse vernachlässigt. Bei Berücksichtigung dieser Wärmeverluste kommt es zu einer Absenkung von T<sub>Aus</sub>, die abhängig ist vom hier berechneten T<sub>aus</sub> und von der aktuellen Temperatur der Strukturen.



**Abb. 5.2** „Stand-Alone“ PAR-Simulation, Austrittstemperatur des Gases in Abhängigkeit von H<sub>2</sub>-Molenbruch am PAR-Einlass



**Abb. 5.3** „Stand-Alone“ PAR-Simulation, H<sub>2</sub>Og Molenbruch am PAR-Auslass in Abhängigkeit von H<sub>2</sub>-Molenbruch am PAR-Einlass



**Abb. 5.4** „Stand-Alone“ PAR-Simulation, H<sub>2</sub>O<sub>1</sub> Molenbruch am PAR-Auslass in Abhängigkeit von H<sub>2</sub>-Molenbruch am PAR-Einlass

Bei den hier gewählten PAR-Eintrittsbedingungen werden alle in den PAR einströmenden Tröpfchen verdampft ( $X_{\text{H}_2\text{O}1} = 0$ ) (siehe Abb. 5.4). Dadurch erhöht sich die Dampfkonzentration am PAR-Auslass. Aus der PAR-Eintrittsbedingung  $X_{\text{H}_2\text{O}g} + X_{\text{H}_2\text{O}1} = 0.4$  ergibt sich eine konstante Dampfkonzentration bei gegebener H<sub>2</sub>-Konzentration am PAR-Auslass (Abb. 5.3), da sich nur die bei der chemischen Reaktion erzeugte H<sub>2</sub>Og-Masse ändert. Mit zunehmender H<sub>2</sub>-Eintrittskonzentration nimmt die durch die Reaktion freigesetzte Wärme zu und entsprechend erhöht sich die Austrittstemperatur. Entsprechend den Korrelationen ergibt sich für die hier simulierten H<sub>2</sub>-Eintrittskonzentrationen eine konstante Effizienz und eine näherungsweise lineare Abhängigkeit der Abbaurate. Entsprechend nimmt auch die Austrittstemperatur mit zunehmender H<sub>2</sub>-Eintrittskonzentration zu. Je höher die Tröpfchenkonzentration am Einlass, desto stärker ist die Temperaturabsenkung des Gases am PAR-Auslass.

Neben den oben angenommenen Randbedingungen (niedriges  $X_{\text{H}_2\text{O}1}$ , ausreichend H<sub>2</sub> und O<sub>2</sub>) sind auch Bedingungen mit hoher Tröpfchenkonzentration und niedriger H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> Konzentration denkbar. Auch wenn bei diesen Bedingungen der PAR nur wenig zum integralen H<sub>2</sub>-Abbau beiträgt, muss sichergestellt werden, dass das PAR-Modell auch bei solchen Bedingungen sinnvolle Ergebnisse liefert. Als Testbeispiel wurden folgende Randbedingungen gewählt:

$$T_{\text{ein}} = 340 \text{ K}$$

$$P = 1 \text{ bar}$$

$$X_{O_2} = 0.2$$

$$X_{H_{2Og}} + X_{H_{2Ol}} = 0.4$$

$$X_{H_2} = 0.0 \text{ bis } 0.08$$

$$X_{H_{2Ol}} \text{ variable}$$

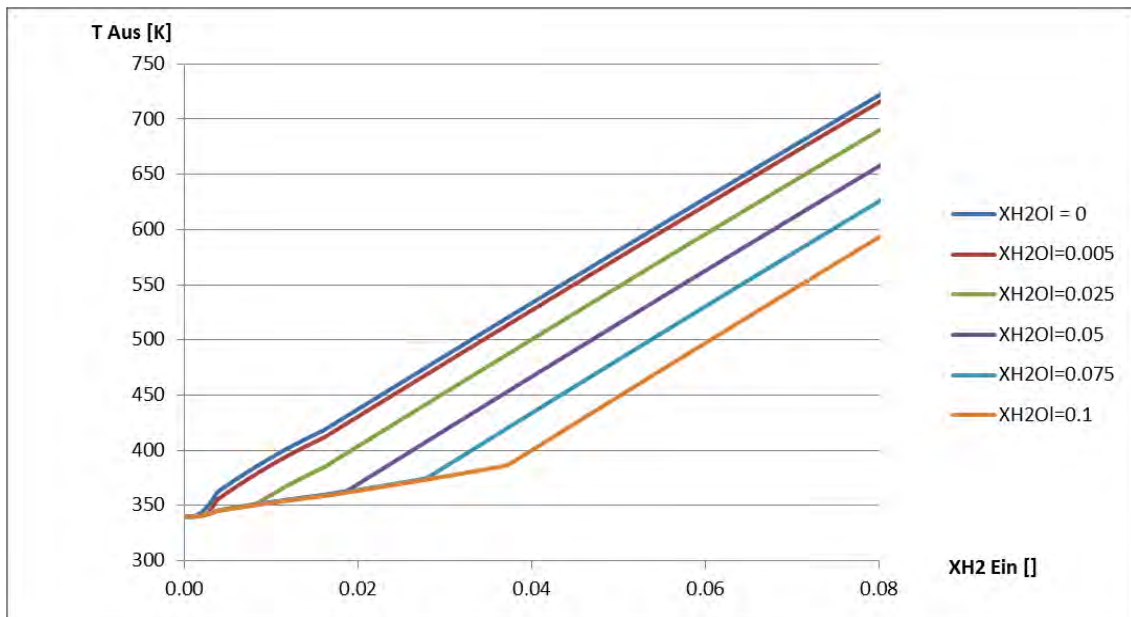
Bei diesen Simulationen wird ein „warmer“ Rekombinator unterstellt, die Rekombination beginnt entsprechend den Korrelationen aus RS1500 bereits bei einer  $H_2$ -Konzentration von 0.1 Vol.-%. Wärmeverluste an die Rekombinatorplatten/-Strukturen wurden wie schon bei den früheren Simulationen vernachlässigt.

Die Verifizierungsrechnungen des PAR-Modells zeigen folgende 3 Phasen bei einer gegebenen  $H_2O$ -Konzentration am PAR-Einlass:

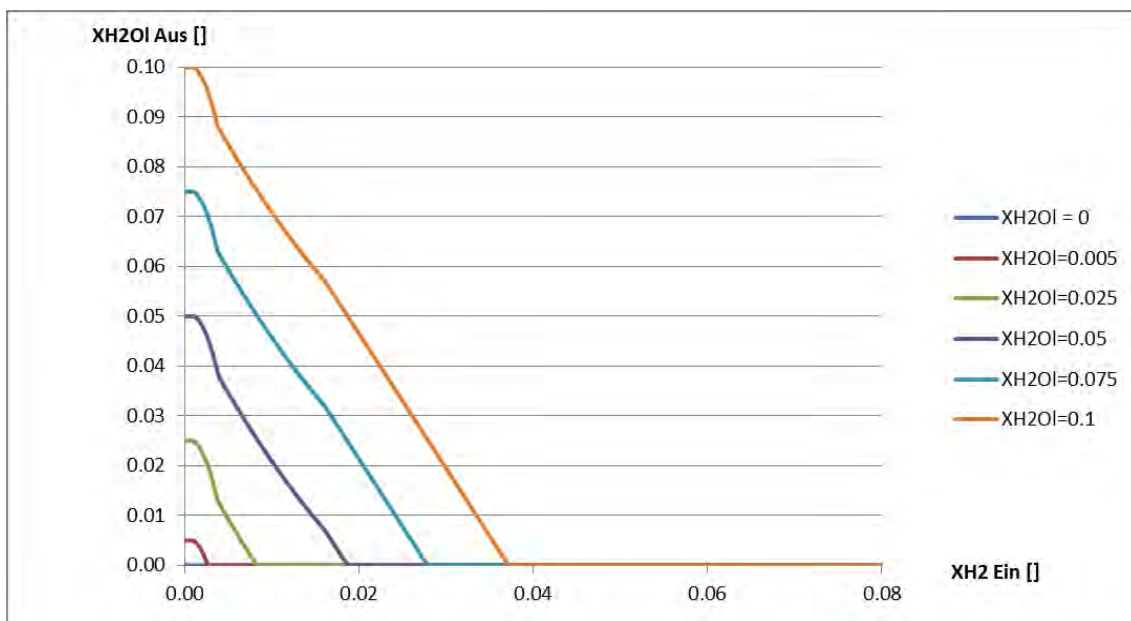
- Falls der Wasserstoff-Molenbruch kleiner als 0.001 ist, so findet keine Rekombination statt.  $T_{\text{aus}} = T_{\text{ein}}$  (, ebenso ist  $X_{H_{2Ol},\text{Aus}} = X_{H_{2Ol},\text{Ein}}$  (Abb. 5.5, Abb. 5.6)).
- In der folgenden Phase beginnt die Rekombination des PARs. Allerdings reicht die bei der Rekombination erzeugte Wärme nicht aus, um alle Wassertröpfchen zu verdampfen. In dieser Phase liegen auch am PAR-Auslass noch Tröpfchen vor. Ein Teil der bei der Reaktion erzeugten Wärme wird für die Verdampfung verwendet, der Rest führt zu einer Erhöhung der Gastemperatur. Je höher der Tröpfchenanteil im Gas, desto höher muss die  $H_2$ -Konzentration am Einlass sein, bis ausreichend Reaktionswärme erzeugt wird, um alle Wassertröpfchen zu verdampfen.
- In der dritten Phase ist die  $H_2$ -Eintrittskonzentration ausreichend hoch, alle Tröpfchen zu verdampfen. Am PAR-Auslass ist  $X_{H_{2Ol},\text{Aus}} = 0$ , je höher  $X_{H_{2Ol},\text{Ein}}$  war, desto niedriger ist die Temperatur am PAR-Auslass. Diese Phase wurde bereits im vorigen Verifikationsbeispiel getestet.

Es sei noch einmal betont, dass für hohe  $X_{H_{2Ol},\text{Ein}}$  und niedrige  $X_{H_2,\text{Ein}}/X_{O_2,\text{Ein}}$  die implementierten Korrelationen insbesondere für die 2. Phase nur bedingt verlässlich sind. Ein signifikanter Anteil der Reaktionswärme geht dem Gas durch Verdampfungsvorgänge verloren. Da der Auftrieb des heißen Gases den Massenstrom durch den Rekombinator bestimmt, ist in diesem Fall auch mit einer Reduktion der Abbauleistung zu rechnen. Dies wird bisher vernachlässigt, da keine Messdaten vorhanden sind. Zudem gibt es noch im Hinblick auf die Modellierung der Tröpfchen erhebliche Unsicherheiten (siehe Kapitel 0, AP1-3), wie zum Beispiel die Annahme für

den Tröpfchenradius und die Modellierung des Ausregnens bei hohen Tröpfchenkonzentrationen.



**Abb. 5.5** „Stand-Alone“ PAR-Simulation, Austrittstemperatur des Gases in Abhängigkeit von H<sub>2</sub>-Molenbruch am PAR-Einlass



**Abb. 5.6** „Stand-Alone“ PAR-Simulation, H<sub>2</sub>O-Molenbruch am PAR-Auslass in Abhängigkeit von H<sub>2</sub>-Molenbruch am PAR-Einlass

### 5.3 Kopplung des PAR-Modells mit CFX

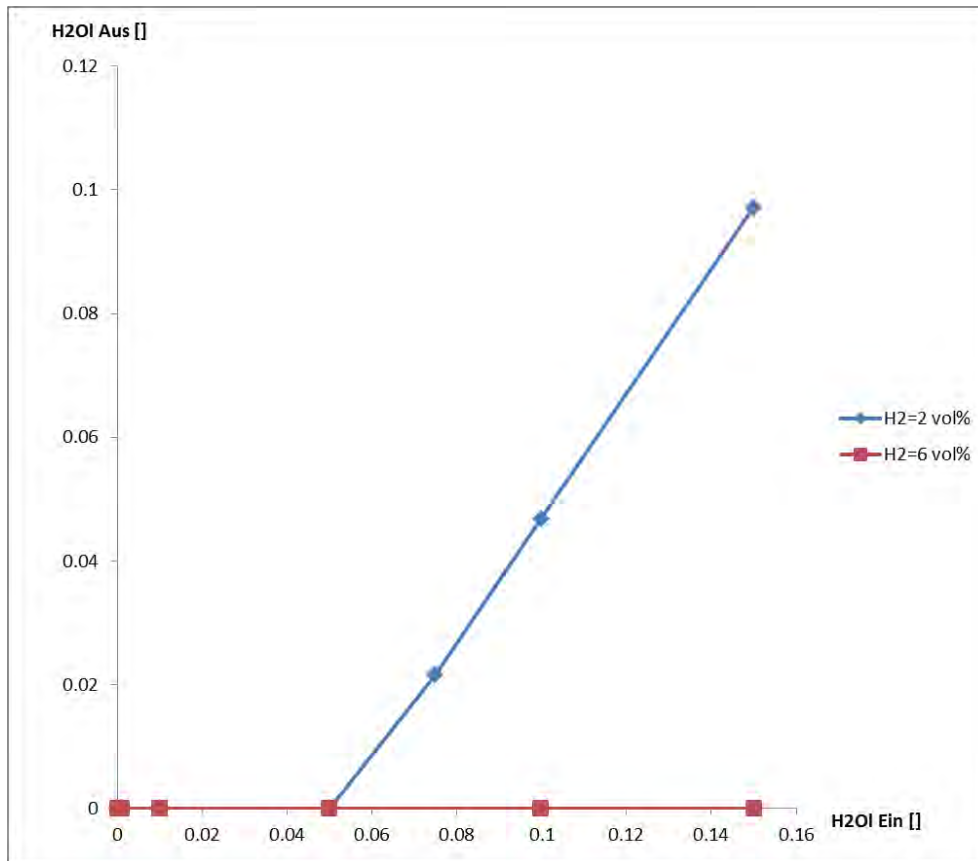
Im vorigen Abschnitt wurde die Funktionsweise des erweiterten PAR-Modells getestet. Das an CFX gekoppelte PAR-Modell wurde entsprechend den in Abschnitt 5.2 beschriebenen Korrelationen modifiziert. Im PAR-Modell wird davon ausgegangen, dass in CFX Erhaltungsgleichungen für die Spezies  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2Og$  und  $N_2$  (Constraint) gelöst werden. Falls auch Tröpfchen ( $H_2O_l$ ) in der CFX-Simulation vorhanden sind, muss die User Variable.  $VolKond = 1$  gesetzt werden. Wird diese Variable nicht gesetzt (oder ist  $VolKond < 1$ ), dann wird im PAR-Modell die  $X_{H_2O_l, Ein} = 0$  gesetzt. Damit ist sichergestellt, dass das neue PAR-Modell auch bei Simulationen ohne das neue Volumenkon-densationsmodell lauffähig ist. Zudem wurde eine zusätzliche User-FORTRAN Subrou-tine zum Auslesen des  $H_2O_l$ -Massenbruchs am PAR-Auslass erstellt.

Als abschließender Schritt soll im Folgenden die Kopplung des PAR-Modells mit CFX geprüft werden. Es wurden dazu mehrere CFX-Simulationen durchgeführt, bei denen eine homogene Gasverteilung, 1 bar Druck und eine Temperatur von 330 K vorlagen. Nach 1 s Problemzeit werden die Temperatur und die Gaszusammensetzung am PAR-Austritt verglichen. Bei allen Simulationen ist der  $O_2$ -Molenbruch  $X_{O_2, Ein} = 0.2$ ,  $X_{H_2Og}$  wird so gewählt, dass  $X_{H_2Og, Ein} + X_{H_2O_l, Ein} = 0.2$  beträgt.

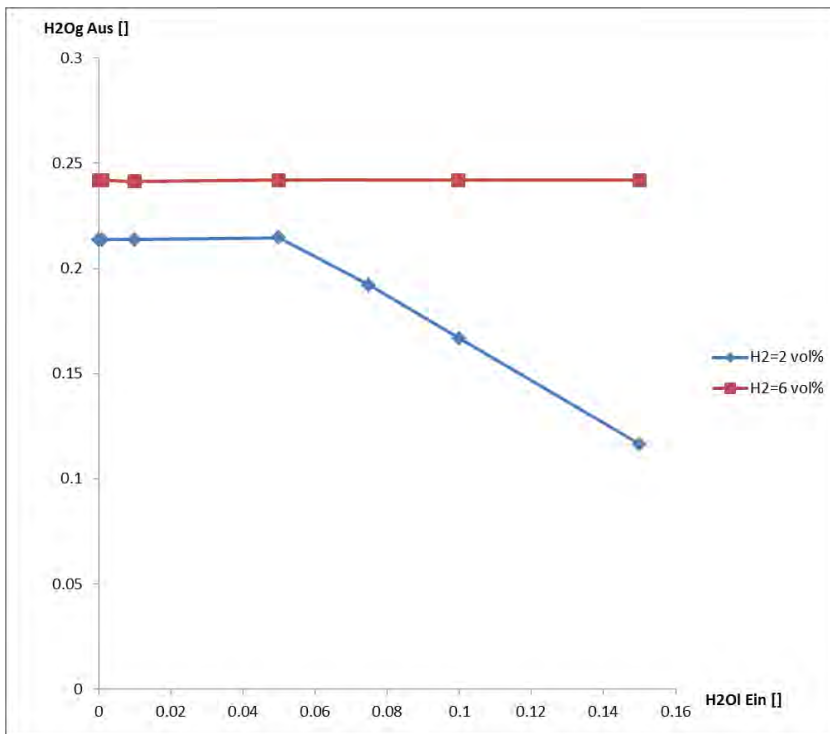
Im Gegensatz zu den Stand-Alone-Rechnungen werden Wärmeverluste an den Struk-turen (Gehäuse und Rekombinatorplatten) berücksichtigt. Dadurch ist die Gasaustritts-temperatur niedriger als bei den Stand-Alone-Simulationen.

Die Simulationsergebnisse zeigen auch bei der Kopplung mit CFX die implementierten Korrelationen (Abb. 5.7 – Abb. 5.10). Bei  $X_{H_2, Ein} = 0.06$  am PAR-Einlass wird ausrei-chend Wärme freigesetzt, um bei ( $0 < X_{H_2O_l, Ein} < 0.15$ ) alle Tröpfchen im PAR zu ver-dampfen. Entsprechend ist  $X_{H_2O_l, Aus} = 0$  am Auslass (Abb. 5.7). Da entsprechend den Korrelationen die Effizienz des Rekombinators nicht von der Tröpfchenkonzentration abhängt, ist am Auslass  $X_{H_2, Aus} =$  konstant für eine gegebene  $H_2$ -Eintrittskonzentration (Abb. 5.9). Mit dieser Annahme und der Bedingung  $X_{H_2Og} + X_{H_2O_l} = 0.2$  am Einlass ergibt sich auch für  $X_{H_2Og, Aus} = 0.242$  für alle Tröpfcheneintrittskonzentrationen bei  $X_{H_2, Ein} = 0.06$ . Die PAR-Austrittstemperatur  $T_{Aus}$  nimmt bei den Simulationen mit  $X_{H_2, Ein} = 0.06$  mit zunehmender Tröpfchenkonzentration näherungsweise linear ab (Abb. 5.10).

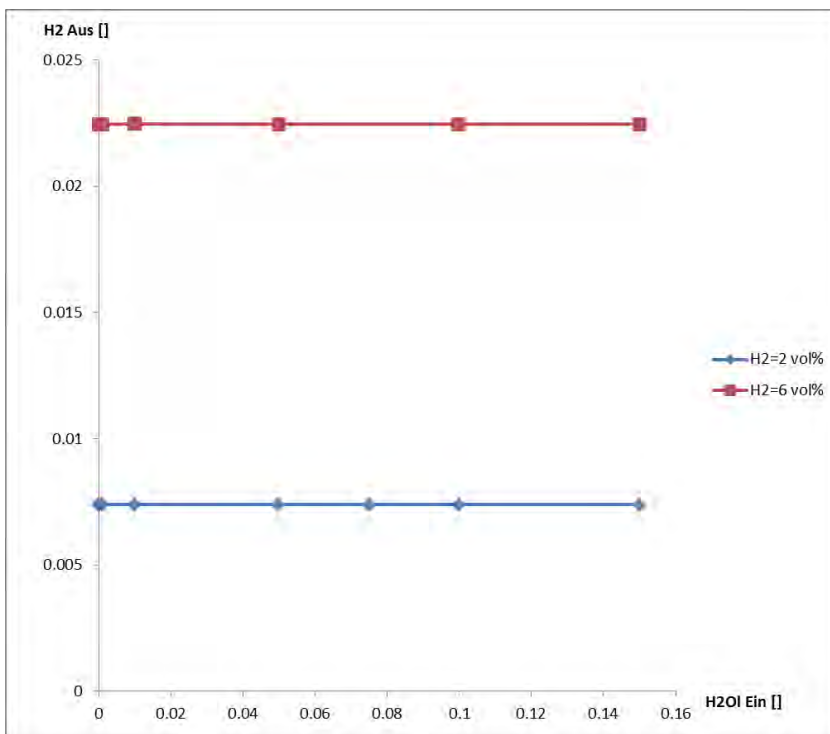
Bei der niedrigeren  $H_2$ -Eintrittskonzentration ( $X_{H_2, Ein} = 0.02$ ) reicht die bei der Rekombination freigesetzte Energie nur aus, um bis zu einem Tröpfchenmolenbruch von etwa  $X_{H_2O, Ein} = 0.05$  alle Tröpfchen zu verdampfen. Bei höheren  $X_{H_2O, Ein}$  verbleiben auch am Auslass noch Tröpfchen. (Abb. 5.7). Entsprechend ist in diesem Fall auch  $X_{H_2Og}$  niedriger (Abb. 5.8).



**Abb. 5.7** Tröpfchenmolenbruch am Auslass über dem Tröpfchenmolenbruch am Einlass bei einer konstanten  $H_2$ -Eintrittskonzentration

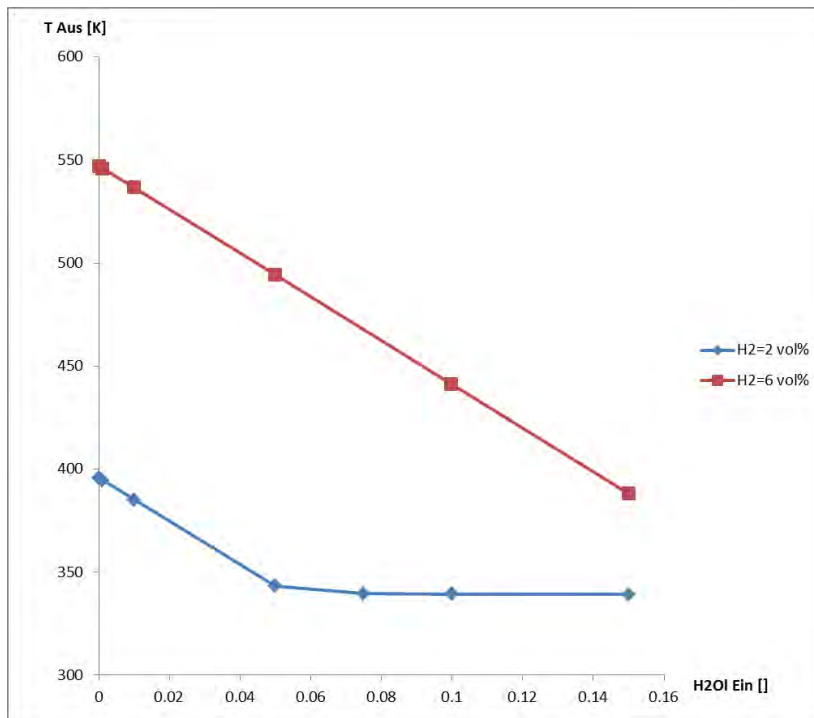


**Abb. 5.8** Dampfmolesbruch am PAR-Auslass über dem Tröpfchenmolesbruch am Einlass bei einer konstanten H<sub>2</sub>-Eintrittskonzentration



**Abb. 5.9** H<sub>2</sub>-Molesbruch am PAR-Auslass über dem Tröpfchenmolesbruch am Einlass bei einer konstanten H<sub>2</sub>-Eintrittskonzentration



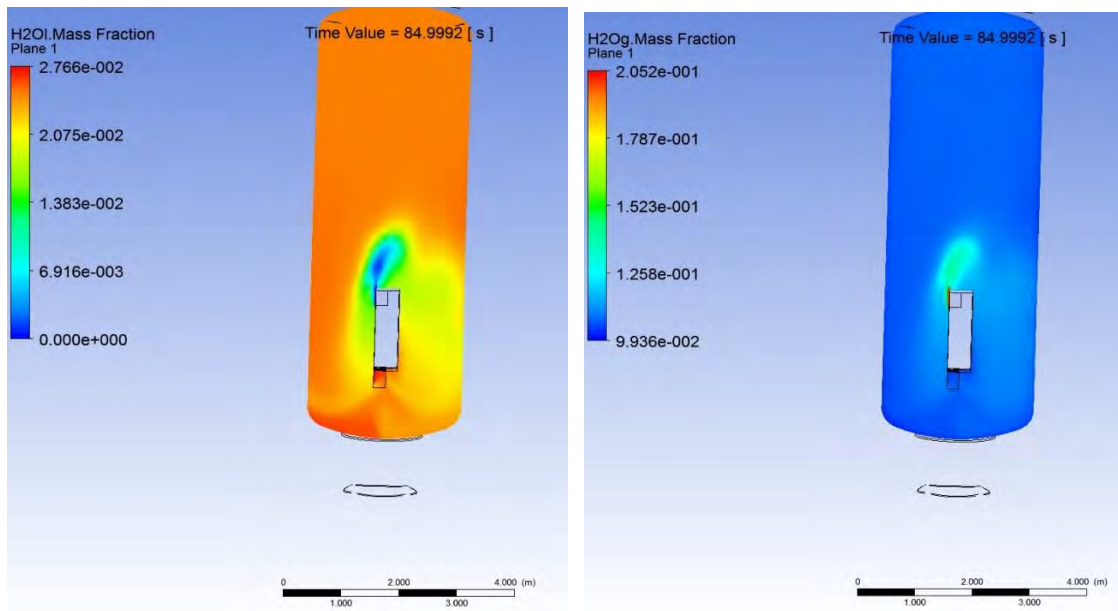


**Abb. 5.10** Gasaustrittstemperatur am PAR-Auslass über dem Tröpfchenmolenbruch am Einlass bei einer konstanten H<sub>2</sub>-Eintrittskonzentration

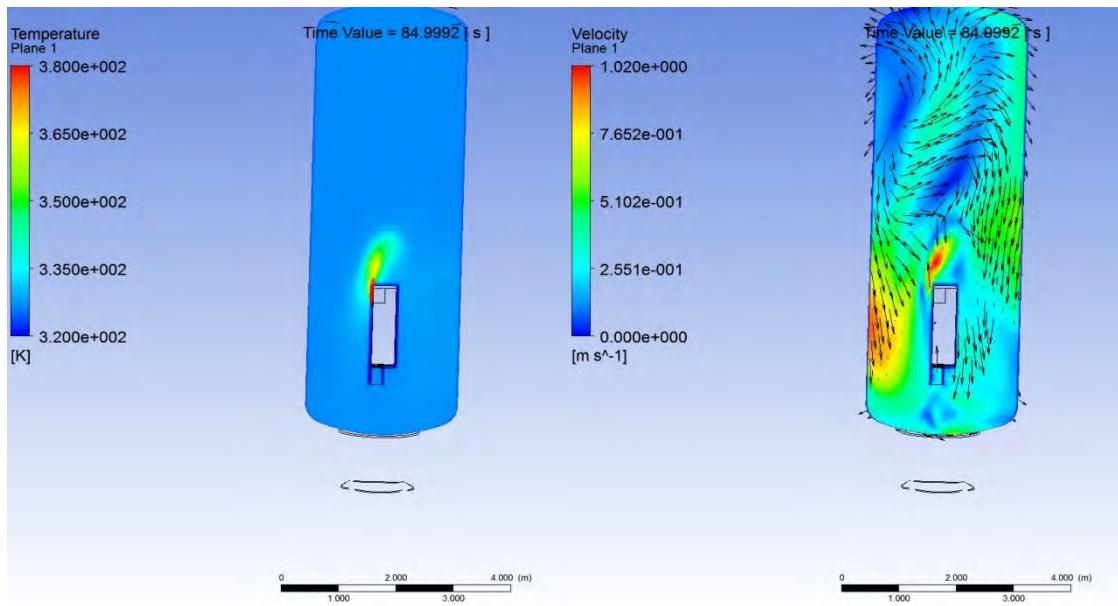
#### 5.4 Anwendung des PAR-Modells mit Wand- und Volumenkondensationsmodell in CFX

Mit den durchgeführten CFX-Simulationen wurde gezeigt, dass das PAR-Modell erfolgreich an CFX gekoppelt wurde. Anhand eines weiteren Testbeispiels soll gezeigt werden, dass das PAR-Modell zusammen mit dem Wand- und Volumenkondensationsmodell genutzt werden kann. Die Geometrie entspricht der der THAI-HR-Versuche. Die Randbedingungen wurden so gewählt, dass schon zu Beginn der Simulation der Rekombinator mit dem H<sub>2</sub>-Abbau beginnt (homogen  $X_{H_2} = 0.08$ ,  $X_{O_2} = 0.19$ ), und so, dass von Beginn an eine signifikante Anzahl von Tröpfchen vorliegt  $X_{H_2O_1} = 0.05$ . Dadurch ist sichergestellt, dass die für die Kopplung Volumenkondensationsmodell-PAR-Modell relevanten Phänomene (Tröpfchen werden von PAR angesaugt, Verdampfung von Tröpfchen durch Temperaturerhöhung) in signifikanten Maßen stattfinden. Da es bei dieser Simulation nur darum geht, zu zeigen, dass die Kopplung der beiden Modelle plausible Ergebnisse liefert, wurde ein relativ grobes CFD-Gitter (275 000 Zellen) verwendet; für eine exakte Simulation wäre sicherlich eine weitere Gitterverfeinerung, z. B. im Bereich des heißen Gasplumes am PAR-Austritt, notwendig.

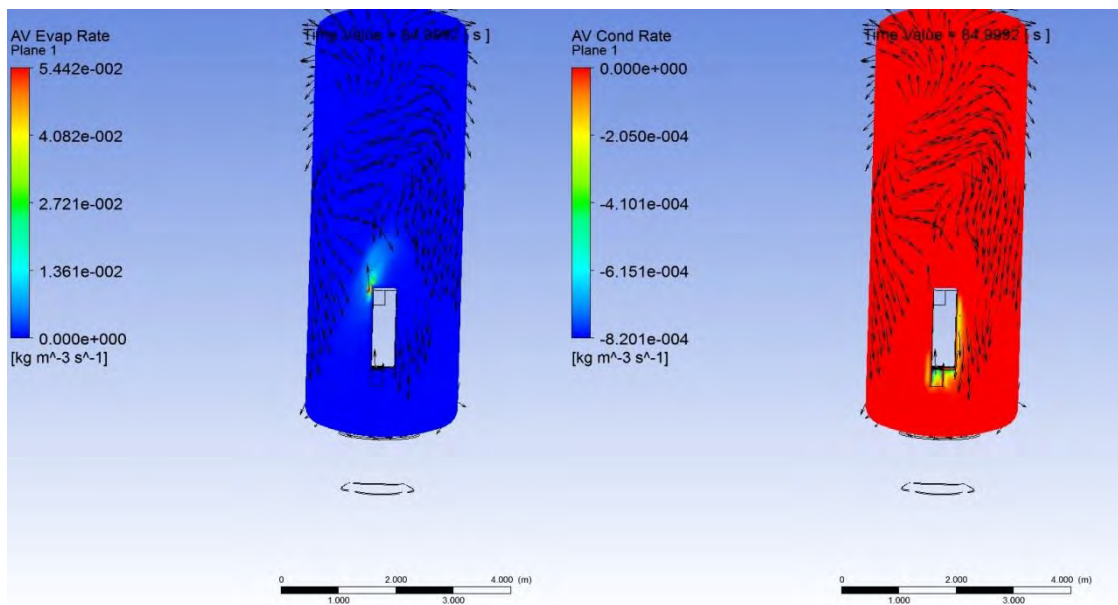
Die Simulationsergebnisse zeigen die gewünschten Effekte. Unmittelbar zu Beginn der Simulation findet eine Verdampfung im Volumen statt, da die initiale Dampfkonzentration etwas unterhalb der Sättigungsbedingungen lag. Das Gleichgewicht ist in weniger als 1 s hergestellt. Tröpfchen werden während der gesamten Simulation in den PAR eingesaugt, im PAR-Modell verdampfen sie und am PAR-Austritt strömt heißes Gas aus, das keine Tröpfchen mehr enthält (Abb. 5.11, Abb. 5.12). Das heiße Gas vermischt sich mit dem kälteren Gas, das Tröpfchen enthält, was zur Verdampfung der Tröpfchen führt (Abb. 5.13). Im Bereich des am Beginn der Simulation noch kalten PAR-Gehäuses kann es zu Volumenkondensation kommen (Abb. 5.13), wenn dampfreiches Gas entlangströmt.



**Abb. 5.11**  $X_{\text{H}_2\text{O}}$  (links) und  $X_{\text{H}_2\text{Og}}$  (rechts) nach 85 s



**Abb. 5.12** Temperatur (links) und Strömungsgeschwindigkeit (rechts) nach 85 s. Der maximale Temperaturwert auf der Skala wurde verringert, um den heißen Plume besser sichtbar zu machen.



**Abb. 5.13** Tröpfchenverdampfungsrate (links) und Volumenkondensationsrate (rechts) nach 85 s

## 5.5 Zusammenfassung

Das bestehende GRS PAR-Modell /SCH 14/ wurde so erweitert, dass es zusammen mit dem Volumenkondensationsmodell in CFX genutzt werden kann. Gegenwärtig stehen der GRS keine Versuchsdaten zur Verfügung, bei denen der Einfluss von Wassertröpfchen auf das Abbauverhalten eines aktiven PARs gemessen wurde. Deshalb wurden folgende einfache Modellannahmen gewählt:

- Bei niedrigen Tröpfchenkonzentrationen verdampfen alle Tröpfchen im PAR.
- Die Gasaustrittstemperatur wird durch die für die Verdampfung benötigte latente Wärme verringert.
- Die Korrelation für die H<sub>2</sub>-Abbaurrate und die Effizienz werden nicht modifiziert.

Die letzte Modellannahme gilt nur für kleine Tröpfchenkonzentrationen exakt, da sich durch die Verdampfung der Tröpfchen die Gastemperatur verändert und zusätzlich eine Dichteänderung mit dem Phasenwechsel einhergeht. Allerdings kann davon ausgegangen werden, dass bei den meisten Containment-Anwendungen die Tröpfchenkonzentration im Bereich der Rekombinatoren klein sein wird. Bei hohen Tröpfchenkonzentrationen ist generell mit einem „Ausregnen“ der Tröpfchen zu rechnen.

Das erweiterte PAR-Modell wurde durch Stand-Alone-Simulationen verifiziert und durch mehrere CFX-Simulationen wurde die Kopplung des erweiterten PAR-Modells mit CFX überprüft.



## 6      **Arbeitspunkt 1.5 – Modellierung wesentlicher Vorgänge des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens im Sicherheitseinschluss**

### 6.1      **Einleitung**

Die Erweiterung von CFX um die Berücksichtigung von Phänomenen und Wechselwirkungen mit im Verlaufe eines Unfalls in den Sicherheitseinschluss freigesetzten Spaltprodukten (Aerosolen und Edelgasen) ist eine der wesentlichen weiteren Zielsetzungen dieses Vorhabens. Es soll in den Arbeiten untersucht werden, inwieweit sich Aerosol- und Spaltproduktverhalten im Sicherheitseinschluss mit CFD-Simulationen sinnvoll und hinreichend detailliert abbilden lassen.

In Tab. 6.1 ist anhand einer Beispielrechnung dargestellt, welche radioaktiven Anteile eines Kerninventars innerhalb von 3 Stunden nach Beginn des Kernschadens in einem DWR durch ein unterstelltes Leck im Primärkreis in das Containment freigesetzt werden. Die leicht flüchtigen Aerosole Iod und Cäsium sowie die Edelgase Xenon und Krypton werden mit einem hohen Anteil - bezogen auf das Kerninventar - freigesetzt und gehören typischerweise mit zu den größten Produzenten von Nachzerfallswärme im Containment.

**Tab. 6.1**      Freisetzung radioaktiver Spaltprodukte in das Containment (Beispielrechnung: 50 cm<sup>2</sup> Leck im heißen Strang, DWR)

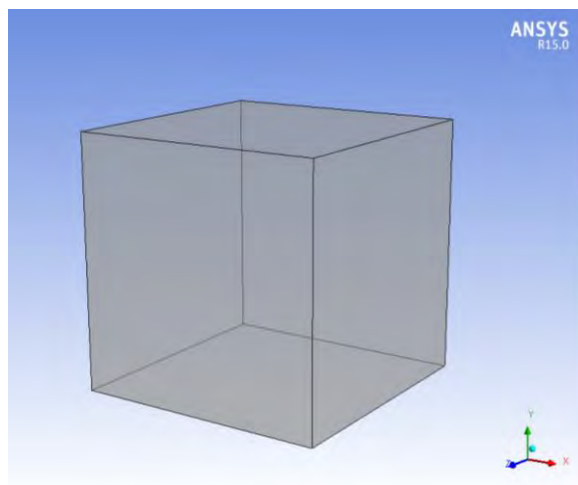
Element	Kerninventar	Freigesetzter Anteil 0- 3 Stunden	Freigesetzte Masse 0-3 Stunden	Spezifische Zerfallswärme	Freigesetzte Zerfallswärme 3 Stunden
	[kg]	[%]	[kg]	[kW / kg]	[kW]
Iod	15	45	6.75	227.34	1534.55
Xenon	326	100	326	1.50	489.00
Krypton	24	100	24	6.33	151.92
Cäsium	170	35	59.5	0.78	46.59
Tellur	0.032	15	0.0048	12.71	0.06
Strontium	0.022	3	0.00066	12.64	0.01
Quelle:	/GRS 89/	/NEE 97/		GRS	

Mit CFX sollen wesentliche aerosolphysikalische Vorgänge abgebildet werden. Im Folgenden wird zunächst auf das Sedimentations- und Ablagerungsverhalten von Partikeln eingegangen, danach wird die Ausbreitung von Aerosolpartikeln mit der Gasströmung untersucht. Weiterhin werden im Anschluss noch Analysen zum Verhalten radioaktiver Edelgase im Containment besprochen.

## 6.2 Sedimentation von Aerosolpartikeln und Ablagerung auf Oberflächen

### 6.2.1 Einfache Testrechnung

Anhand eines würfelförmigen Luftvolumens (siehe Abb. 6.1) wurde die Sinkgeschwindigkeit mit CFX für unterschiedliche Partikelgrößen berechnet. Hierbei wurde das Algebraic Slip Modell (ASM) verwendet. Weitere Details zu der Berechnung finden sich in Tab. 6.2. Die Berechnungen wurden für unterschiedliche Partikelgrößen von 0.01  $\mu\text{m}$  bis 100  $\mu\text{m}$  durchgeführt. In dem Volumen stellt sich jeweils eine der Partikelgröße entsprechende Sinkgeschwindigkeit ein.

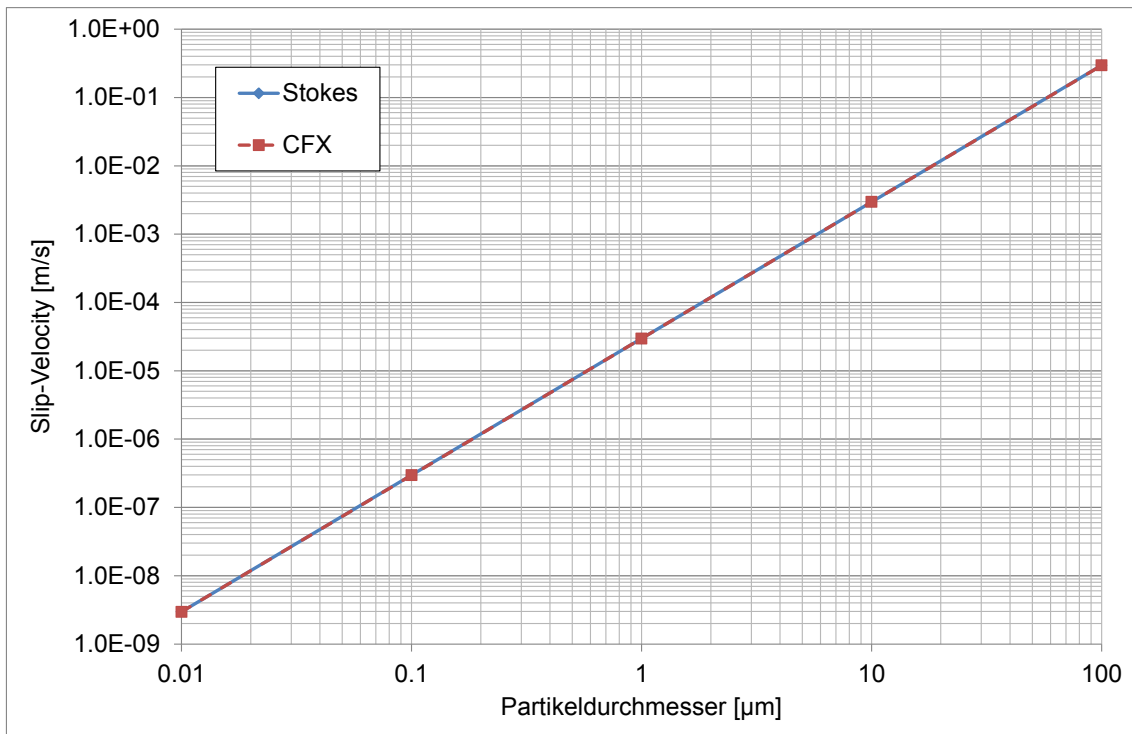


**Abb. 6.1** CFD-Volumen für die ASM-Testrechnungen (10 m x 10 m x 10 m)

**Tab. 6.2** Infobox für den Aerosol-Testfall

Experiment	Testgeometrie
Phänomene	Absinken von Aerosolpartikeln in unbewegter Luft
Elementzahl	195 112
Materialien	Air Ideal Gas, Water (Partikel)
Turbulenzmodell	SST
Aerosolmodell	Algebraic Slip Modell (ASM)
Konvergenz	RMS < 0,0001
CFX-Version	15.0

In Abb. 6.2 ist dargestellt, wie die Sinkgeschwindigkeit in CFX von der Partikelgröße abhängt. Hierbei beachte man die doppelt-logarithmische Darstellung.



**Abb. 6.2** Vergleich der CFX-Ergebnisse mit dem Stokes-Gesetz

Bei kleinen Partikeldurchmessern ist die Sinkgeschwindigkeit sehr klein, erst bei größeren Partikeldurchmessern von 10 bis 100 μm kommt die Sinkgeschwindigkeit in eine (messbare) Größenordnung von 3.e-03 bis 3.e-01 m/s bzw. 0.3 bis 30 cm/s. Ein aus der Literatur bekannter Zusammenhang ist das Gesetz von Stokes. Aus dem Stokes-Gesetz lässt sich die Sinkgeschwindigkeit von (Aerosol-)Partikeln in unbewegter Luft ableiten. Sie beträgt laut /HIN 99/:

$$V_{TS} = \frac{\rho_p d^2 g}{18\eta} \quad (6.1)$$

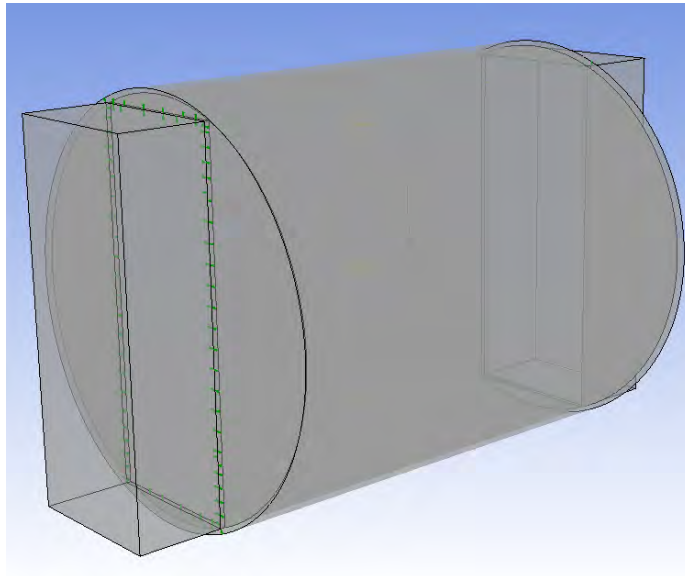
Hierbei ist  $\rho_p$  die Dichte des Partikels,  $d$  der Durchmesser,  $g$  die Gravitationsbeschleunigung und  $\eta$  die Viskosität der Luft. Ein Vergleich der sich hieraus ergebenden Geschwindigkeiten zeigt eine exakte Übereinstimmung mit den Werten aus der CFX-Berechnung.

Im folgenden Kapitel wird mit Hilfe des Algebraic Slip Modells (ASM) ein Experiment aus der KAEVER-Versuchsserie nachgerechnet.



## 6.2.2 Nachrechnung der KAEVER-Experimente

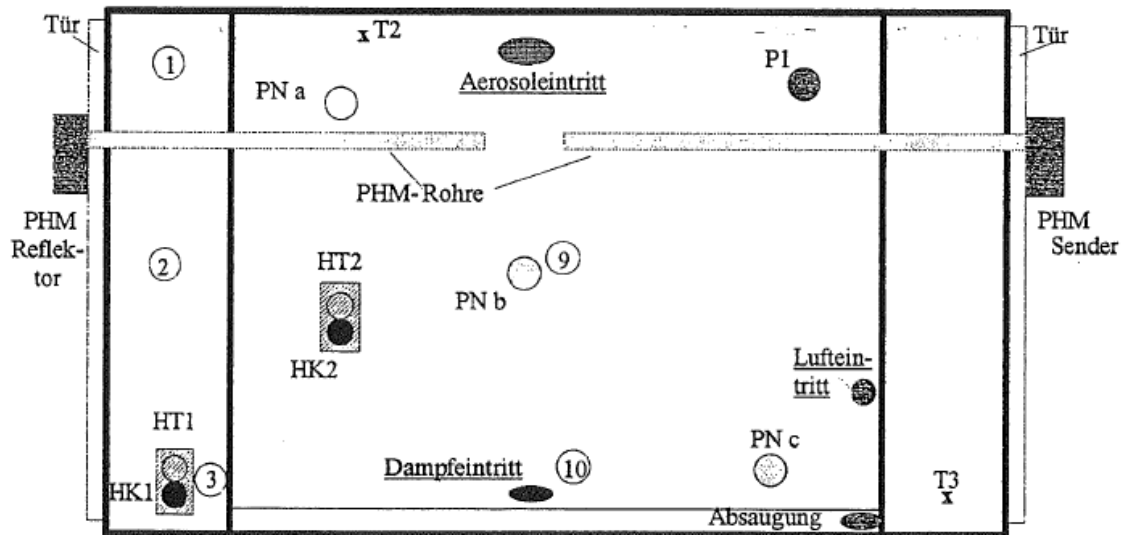
Die KAEVER-Experimente /POS 97/ untersuchen die Sedimentation und das Ablagerungsverhalten von CsI in einer reaktortypischen Geometrie. Es handelt sich hierbei um die Personenschleuse eines Kernkraftwerks (Durchmesser ca. 2 m, Länge ca. 3.5 m). Für die CFX-Rechnung wurde die Geometrie vereinfacht nachgebildet (siehe Abb. 6.3).



**Abb. 6.3** CFD-Geometrie für die Nachrechnung der KAEVER-Experimente

In Kürze lässt sich der experimentelle Ablauf wie folgt beschreiben:

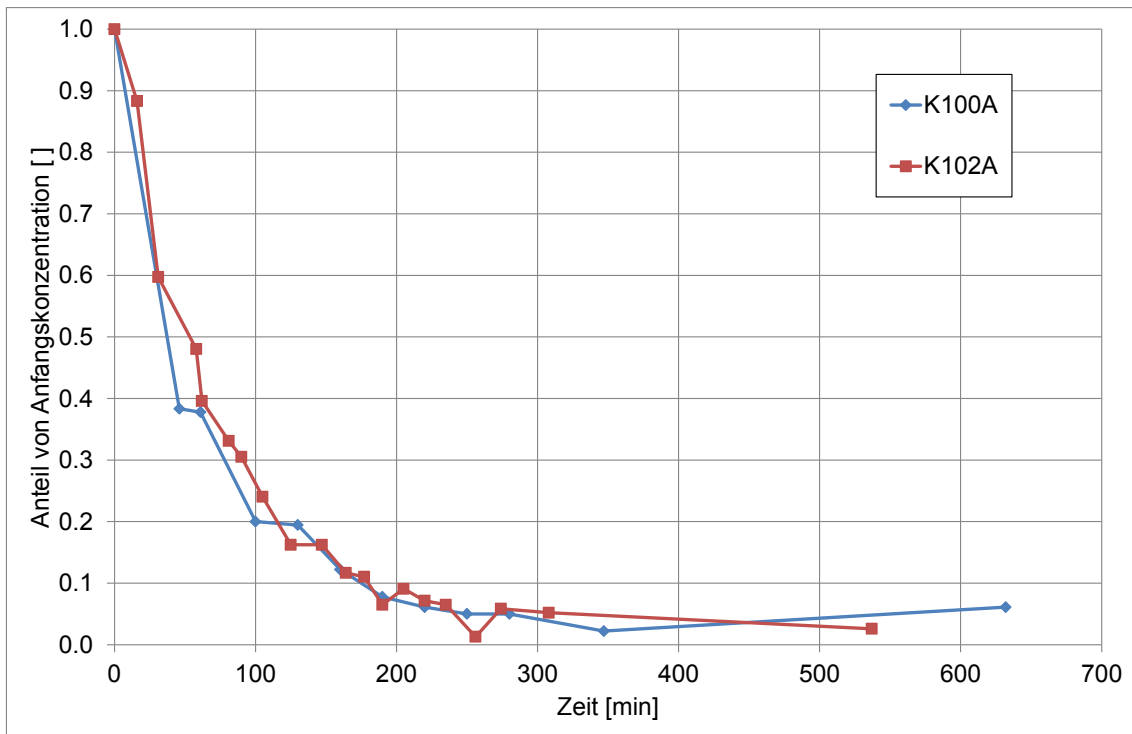
1. Einregelung der thermohydraulischen Bedingungen (Temperatur, Feuchte, Druck).
2. Inbetriebnahme der Aerosolgeneratoren und Verdampfung des eingebrachten Materials (in diesem Fall CsI).
3. Entnahme von Aerosolproben in vorgegebenen Zeitschritten (Messung mit Filtern, Impaktoren und APS). Für den Vergleich mit CFX werden die Werte der Filtermessung verwendet. In Abb. 6.4 ist die Position der Probeentnahmestellen (PN a, b, c) in der KAEVER-Geometrie dargestellt. Aus den hier gemessenen Werten wird aber nur eine mittlere luftgetragene CsI-Konzentration ermittelt.



- T2, T3, HT1, HT2 - Thermoelemente
- PN a, b, c - Probenahmestellen
- HK1, HK2 - Feuchtefühler
- P1 - Druckmessung

**Abb. 6.4** Position der Messinstrumentierung im KAEVER-Versuch (Bild aus /POS 97/)

Eine ausführliche Beschreibung der Experimente findet sich unter anderem bei /POS 97/. Um zunächst das Phänomen der (Dampf-)Kondensation an den Aerosolpartikeln auszuschließen, werden zuerst zwei KAEVER-Versuche mit trockener Atmosphäre nachgerechnet (K100A und K102A). Hierbei handelt es sich im Prinzip zweimal um den gleichen Versuch, der zur Überprüfung der Reproduzierbarkeit wiederholt wurde. Die initiale Csl-Konzentration unterscheidet sich leicht bei den beiden Versuchen (K100A:  $1.80 \text{ g/cm}^3$  und K102A:  $1.65 \text{ g/cm}^3$ ); dies sollte aber keinen oder einen nur sehr geringen Einfluss auf das Absinken und die Ablagerung der Partikel haben. Normiert man die gemessenen Werte auf Anteile der Anfangskonzentration, so ergibt sich das in Abb. 6.5 dargestellte zeitliche (gemittelte) Verhalten der luftgetragenen Csl-Konzentration in den beiden KAEVER-Versuchen. Die beiden Kurven liegen gut übereinander und die kleinen Abweichungen stellen vermutlich nur die experimentellen (Mess-)Unsicherheiten bei der Bestimmung der Csl-Konzentration dar.



**Abb. 6.5** (Normierter) zeitlicher Verlauf der Csl-Konzentration in den KAEVER-Experimenten

In Tab. 6.3 sind die Berechnungsparameter für die CFX-Berechnung dargestellt.

**Tab. 6.3** Infobox für das KAEVER-Experiment

Experiment	KAEVER K100A/K102A
Phänomene	Absinken von Aerosolpartikeln in unbewegter Luft
Elementzahl	275 807
Materialien	Air Ideal Gas, Csl (Partikel)
Turbulenzmodell	SST
Aerosolmodell	Algebraic Slip Modell (ASM)
Konvergenz	RMS < 0,0001
CFX-Version	15.0

Zu den Daten müssen noch mehrere Anmerkungen gemacht werden:

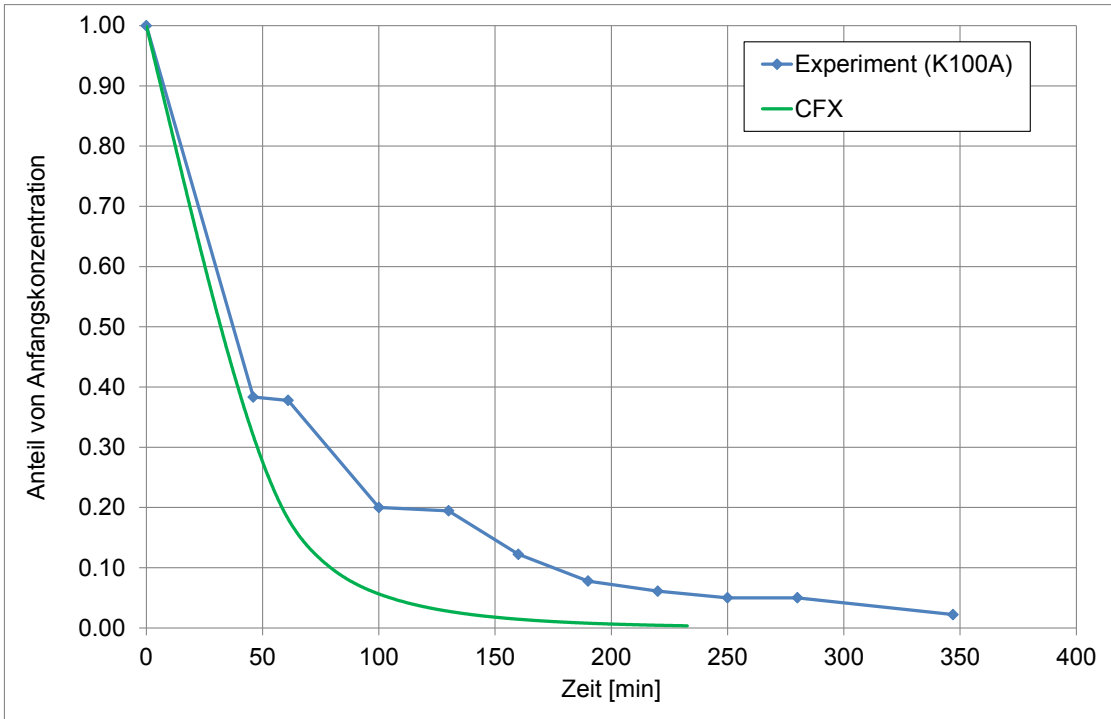
- Csl ist nicht standardmäßig in CFX als Material vorhanden. Aus der Literatur ergibt sich eine Dichte von  $4.51 \text{ g/cm}^3$  für einen soliden Festkörper /WIK 15b/. Bei einem Aerosolpartikel wird (bei COCOSYS) immer die Hälfte dieses Wertes als Dichte angenommen; in diesem Fall wurde in CFX eine Dichte von  $2.25 \text{ g/cm}^3$  verwendet.  $4.51 \text{ g/cm}^3$  ist der Literaturwert für das kompakte kristalline Csl. Im Aerosol sind die

Atome bzw. Moleküle allerdings lockerer gebunden. Hierzu liegen im aktuellen Experiment aber keine Messwerte vor. Bei den COCOSYS-Rechnungen hat sich die Annahme der halben Dichte (des kompakten kristallinen Csl) in diesem Fall als Richtwert bewährt.

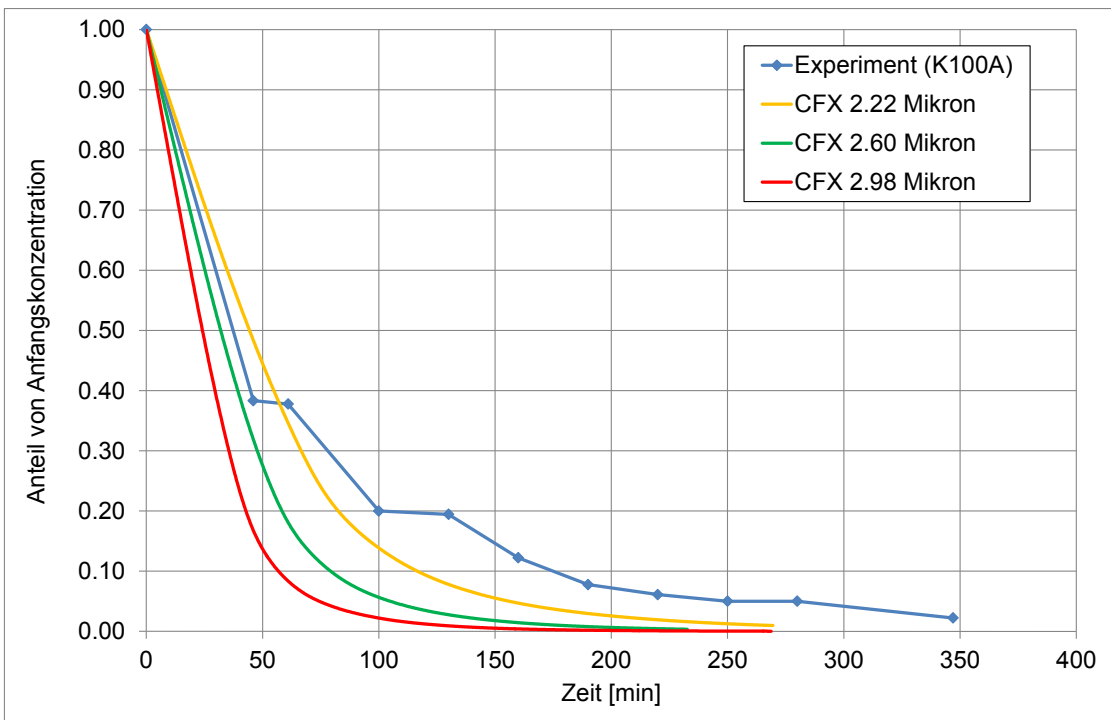
- In beiden Experimenten wurde zu mehreren Zeitpunkten und mit unterschiedlichen Messgeräten (Impaktor und APS) die Partikelgröße bestimmt. Aus allen diesen Werten ergibt sich (laut GRS-Rechnung) ein mittlerer Durchmesser von  $2.60 \mu\text{m} \pm 0.38 \mu\text{m}$  für die Csl-Partikel, der für die CFX-Berechnungen verwendet wird. Grundsätzlich liegt aber nicht ein fester Durchmesser, sondern wahrscheinlich eine Verteilung um den Mittelwert vor. In CFX wird zunächst nur mit dem Mittelwert gerechnet.

In Abb. 6.6 wird der mit diesen Werten in CFX berechnete Abfall der Csl-Konzentration mit den experimentellen Werten verglichen. Es zeigt sich auch ohne weitere Parameteranpassung schon eine gute Übereinstimmung der Kurvenverläufe, wobei CFX eine etwas schnellere Ablagerung der Partikel vorhersagt. Als zu variierende Parameter bieten sich hier noch der Partikeldurchmesser sowie die Csl-Dichte an, die beide mit einer Unsicherheit belegt sind.

Zunächst wurde der Partikeldurchmesser anhand seiner experimentellen Streuung mit  $2.60 \pm 0.38 \mu\text{m}$  variiert. Abb. 6.7 zeigt den Einfluss des Partikeldurchmessers auf das Ablagerungsverhalten. Wie zu erwarten, lagern sich Partikel mit größerem Durchmesser schneller und Partikel mit kleinerem Durchmesser langsamer ab. Das Verhalten bei kleinerem Durchmesser (gelbe Kurve) liegt näher beim experimentellen Verhalten als die beiden anderen Kurven.



**Abb. 6.6** Vergleich der CFX-Rechnung mit den experimentellen Daten des KAEVER-Versuches K100A

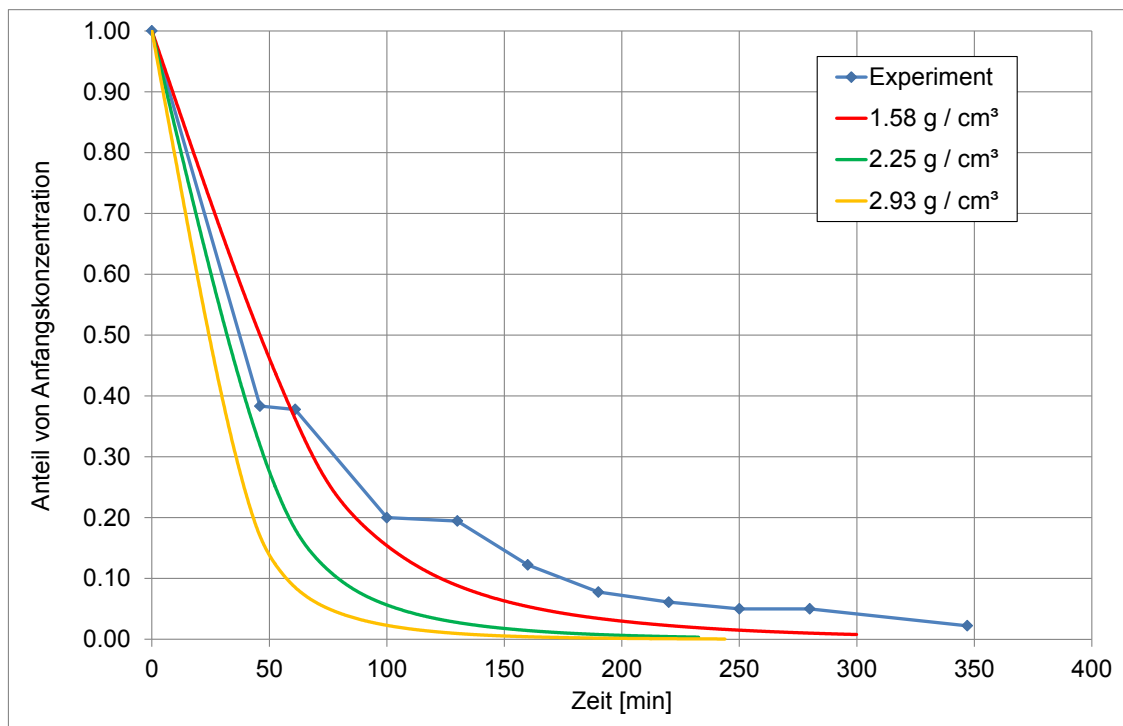


**Abb. 6.7** Einfluss des Partikeldurchmessers auf das Ablagerungsverhalten

Weiterhin wurde eine Variation der Csl-Dichte vorgenommen. Die bisher verwendete Dichte  $0.5 \times 4.51 \text{ g/cm}^3 = 2.25 \text{ g/cm}^3$  beruht ja auf einer in COCOSYS verwendeten

Abschätzung. Die wahre Dichte des Csl-Aerosols kann sicher noch  $\pm 30\%$  variieren. Entsprechend wurden im Rahmen einer weiteren Parametervariation noch zwei Rechnungen mit angenommenen Dichten von  $1.58 \text{ g/cm}^3$  und  $2.93 \text{ g/cm}^3$  durchgeführt. Das Ergebnis ist in Abb. 6.8 dargestellt. Hier zeigt sich bei einer kleineren Dichte (rote Kurve) eine langsamere Ablagerung der Aerosolpartikel, die besser zu der experimentellen Kurve passt.

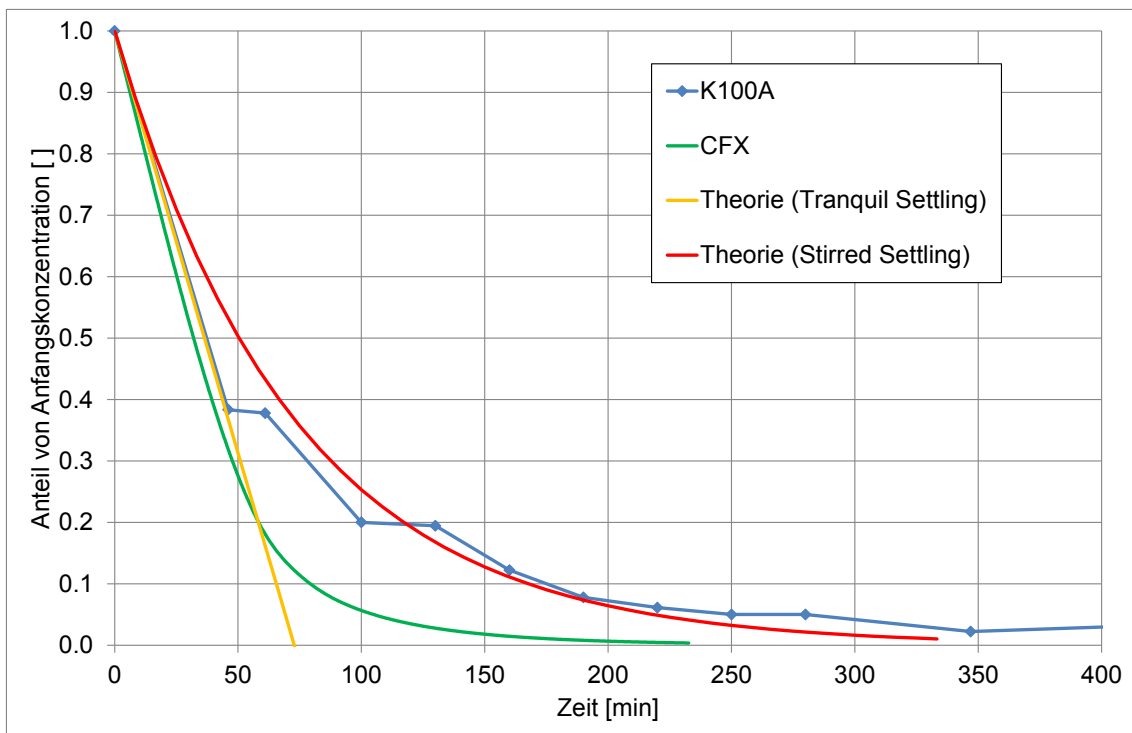
Insgesamt lässt sich sagen, dass sich das experimentell ermittelte Ablagerungsverhalten im Rahmen der bestehenden Unsicherheiten (experimentelle Messungen, Durchmesser, Dichte) gut mit CFX nachrechnen lässt. Tendenziell scheint die Ablagerung in CFX in diesem Experiment etwas zu schnell zu sein; dies sollte an weiteren Experimenten und mit anderen Aerosolen weiter untersucht werden.



**Abb. 6.8** Einfluss der Csl-Dichte auf das Ablagerungsverhalten

Als weitere Überlegung zum KAEVER-Experiment kann ein Vergleich mit theoretischen Werten für zwei Extremfälle unternommen werden. In einer völlig ruhigen Atmosphäre (Tranquil Settling) fallen alle Partikel nur mit ihrer Stokes-Geschwindigkeit und es entsteht eine Art Schichtung, so dass oben weniger Partikel in der Luft sind. Hier kann ein lineares Absinken der Partikelkonzentration berechnet werden. In einer ideal durchmischte Atmosphäre (Stirred settling) ist die Atmosphäre immer durchmischte und die mittlere Konzentration nimmt ab. Hier kann ein exponentieller Abfall berechnet werden.

In Abb. 6.9 werden die experimentellen Daten mit diesen beiden Werten verglichen. Es zeigt sich, dass die experimentellen Werte besonders gut zu der Kurve mit einer ideal durchmischten Atmosphäre (Stirred settling) passen. Ursache für die Durchmischung beim KAEVER-Experiment können Temperaturdifferenzen im Versuchsbehälter sein (Heizung des Aerosolgenerators, ...), die zu Gasbewegungen führen. Dies kann auch den Unterschied zu der CFX-Rechnung erklären, in welcher anfänglich von einer völlig ruhigen Atmosphäre ausgegangen wurde. Durch den Mitriss von Luft mit den Partikeln entsteht dann zu einem späteren Zeitpunkt (ca. ab Minute 70) eine Gasbewegung im KAEVER-Behälter.



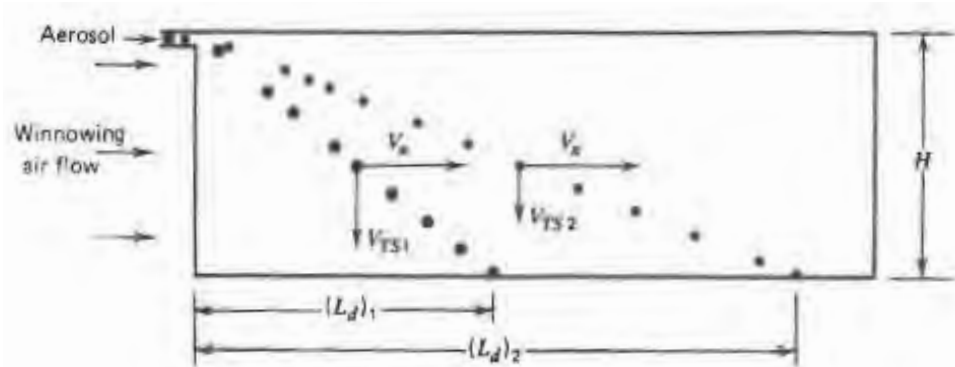
**Abb. 6.9** Vergleich des Experimentes mit theoretischen Werten

### 6.3 Ausbreitung von Aerosolpartikeln mit der Gasströmung

#### 6.3.1 Berechnung eines Testbeispiels

Im einfachsten Fall kommt zu der Sinkgeschwindigkeit noch eine zusätzliche Geschwindigkeitskomponente, z. B. eine horizontale Luftströmung hinzu. Die Aerosolausbreitung ist dann eine Überlagerung dieser beiden Geschwindigkeitskomponenten. In so genannten Aerosolspektrometern wird dieser Effekt genutzt, um (bei bekannter Aerosoldichte) den Partikeldurchmesser zu bestimmen. In Abb. 6.10 wird das Prinzip des

Aerosolspektrometers gezeigt. Partikel mit kleinerem Durchmesser legen eine größere Strecke bis  $L_d$  zurück als Partikel mit größerem Durchmesser.



**Abb. 6.10** Prinzip eines Aerosolspektrometers (Bild aus: /HIN 99/)

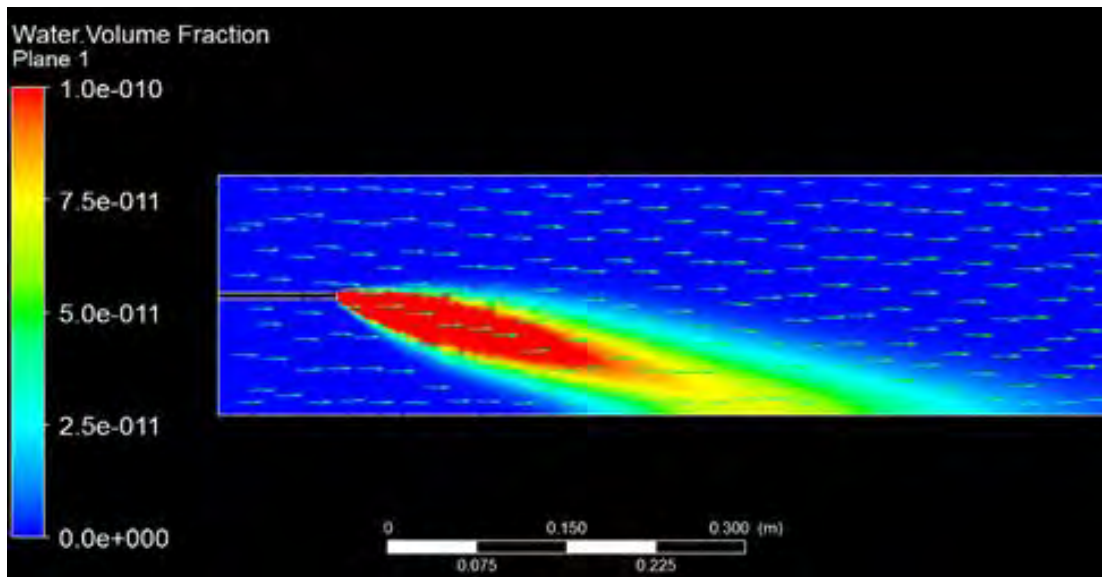
Mit Hilfe der vom Durchmesser abhängigen Sinkgeschwindigkeit  $V_{TS}$  und der Strömungsgeschwindigkeit des Luftstroms  $V_x$  lässt sich (vereinfacht) die Strecke  $L_d$  berechnen zu:

$$V_{TS} = \frac{\rho_p d^2 g}{18\eta} \quad \text{und} \quad L_d = \frac{H V_x}{V_{TS}} \quad (6.2)$$

$H$  ist hierbei die Höhe des Startpunktes über dem Boden. Eine solche Strömung wurde mit CFX simuliert. Mit  $H = 0.1$  m,  $V_x = 0.27$  m/s,  $V_{TS} = 0.074$  m/s (mit Wassertröpfchen von  $50 \mu\text{m}$ ) ergibt sich ein theoretischer Wert von  $L_d = 0.37$  m.

Das Ergebnis der CFX-Rechnung ist in Abb. 6.11 dargestellt. Hier lässt sich eine Wegstrecke von etwa  $L_d = 0.38$  m ablesen. Die Partikelverteilung und auch der Auftreffort sind etwas „verschmiert“, so dass keine exakte Bestimmung möglich ist. Die Ursache hierfür liegt unter anderem in turbulentem Massentransport. Grundsätzlich passt die zurückgelegte Wegstrecke aber gut zu dem theoretischen Wert.





**Abb. 6.11** Bewegung von Wassertröpfchen (Durchmesser 50  $\mu\text{m}$ ) in einer Luftströmung

### 6.3.2 Vergleich des Algebraic Slip Model (ASM) mit einem Particle-Tracking Modell

Neben dem Algebraic Slip Model (ASM) existieren auch noch weitere Modelle, die eine Berechnung des Verhaltens von luftgetragenen Aerosolen erlauben, z. B. so genannte Particle Tracking Modelle nach Lagrange. Im Folgenden werden die Eigenschaften der beiden Modellierungsarten miteinander verglichen:

#### Lagrange Particle Tracking:

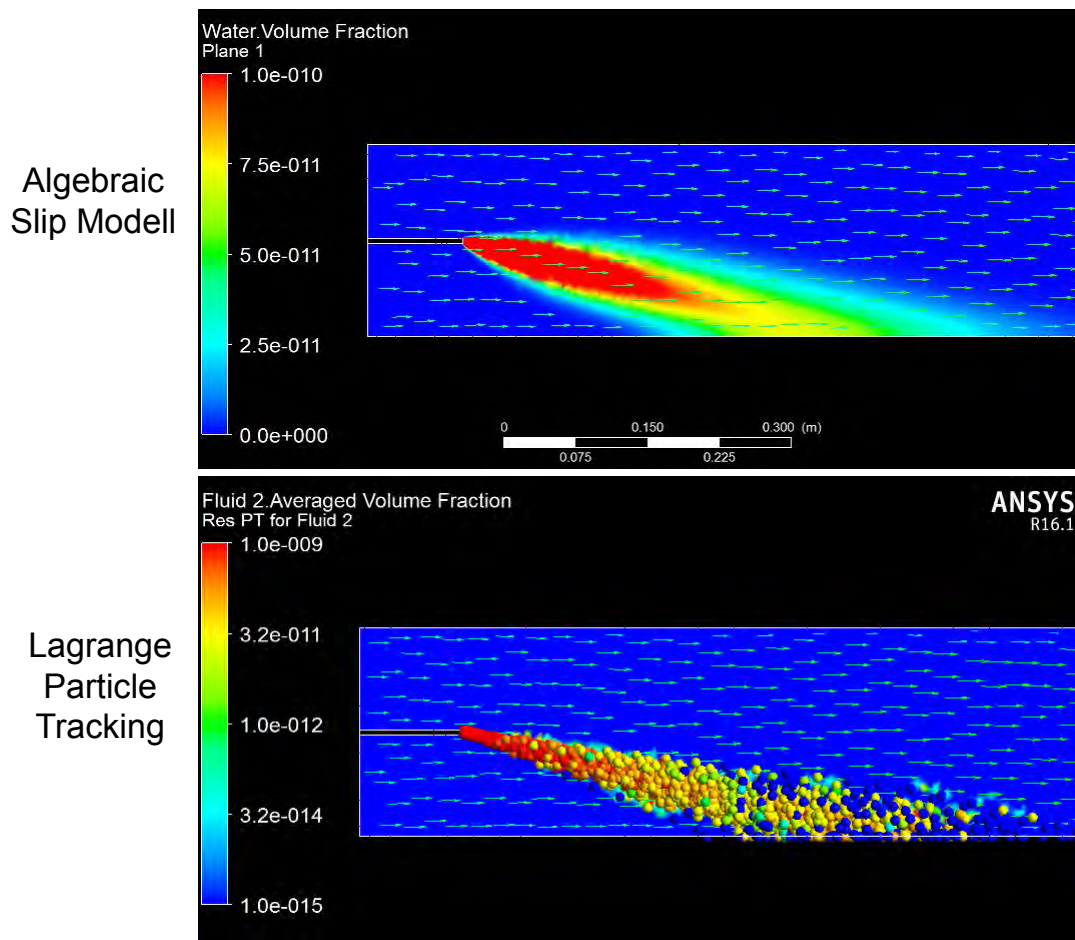
- Partikel werden in CFX durch eine neue Phase dargestellt.
- Partikel sind räumlich diskret.
- Einzelne Partikel repräsentieren dabei die Gesamtheit aller Partikel.
- Der Partikeldurchmesser kann als konstant oder als parametrisierte Verteilung angegeben werden.
- Komplette Informationen über einzelne Partikel sind verfügbar.
- Mehr Details für Wärme- und Massentransfer.
- Beschränkt auf Fälle mit geringer Partikeldichte.

- Geringere Kosten (Rechenzeit) bei einer größeren Anzahl von Partikelklassen.
- Hohe Kosten (Rechenzeit), wenn eine große Anzahl von Partikeln nachverfolgt (getrackt) werden muss.

#### **Algebraic Slip Modell:**

- Partikel werden in CFX durch eine neue Komponente dargestellt.
- Hierdurch sind die Partikel in einem bestimmten Raumbereich „verschmiert“.
- Der Partikeldurchmesser ist für eine Größenklasse konstant, eventuell muss mit mehreren Größenklassen gerechnet werden.
- Für jede Partikelklasse muss ein eigenes Gleichungssystem gelöst werden.
- Es ist nicht geeignet, falls andere Wechselwirkungskräfte als die „Drag Force“ eine Rolle spielen.
- Es ist ebenfalls nicht geeignet, wenn die Teilchen lange brauchen, um ihre finale Geschwindigkeit zu erreichen (z. B. große Teilchen im Gravitationsfeld).

Das im vorherigen Abschnitt analysierte Testbeispiel (Wassertröpfchen im Luftstrom) wurde noch ein weiteres Mal mit dem Lagrangeschen Particle Tracking Modell berechnet, um die relative Leistungsfähigkeit der beiden Modelle zu vergleichen. Dabei wurden die gleichen Randbedingungen gewählt (Luftstrom von 0.27 m/s, Wassertropfen mit Durchmesser 50  $\mu\text{m}$ ). Weiterhin wurden beim Particle Tracking Modell noch die Optionen „Fully Coupled“ sowie „Particle Dispersion“ eingeschaltet. Die erste Option besagt, dass eine wechselseitige Beeinflussung von Gas und Partikeln stattfindet. Im vorliegenden Fall einer geringen Partikeldichte haben diese aber kaum Einfluss auf die Gasströmung, was man an den Vektor-Pfeilen in Abb. 6.12 sieht. Das Einschalten der zweiten Option „(Turbulent) Particle Dispersion“ bedeutet, dass bei der Berechnung des Partikelweges durch das Gas dessen turbulente Geschwindigkeitsanteile berücksichtigt werden.



**Abb. 6.12** Vergleich des ASM mit dem Lagrange Particle Tracking Modell

In Abb. 6.12 wird die mit dem Tracking-Modell berechnete Tröpfchenbewegung mit der Berechnung mit dem ASM verglichen. Hier erkennt man den diskreten Charakter der Partikel (unten) im Vergleich zum ASM (oben). Die berechnete Fallgeschwindigkeit der Partikel beträgt 0.07 m/s und entspricht damit wieder dem Wert, den man mit dem Stokes-Gesetz erhält. Die zurückgelegte horizontale Wegstrecke bis zum Auftreffen auf den Boden ist erneut durch turbulente Schwankungen etwas verschmiert, entspricht mit ca. 0.39 m aber wieder in etwa dem theoretischen Wert.

### 6.3.3 Nachrechnung eines STORM-Experimentes (ISP-40)

Die STORM-Versuche wurden im Rahmen eines europäischen Forschungsprogramms am JRC in Italien durchgeführt. Dabei wurde die Ablagerung und Resuspension nicht-radioaktiver Aerosole untersucht. In Abb. 6.13 ist eine Gesamtdarstellung der Anlage dargestellt. Im oberen Bereich der Abbildung findet sich die Test-Sektion, in der die Aerosolablagerung (und Resuspension) stattfindet /CAS 99/. Es handelt sich hierbei um

ein Rohr mit einem (Innen-)Durchmesser von 63 mm und einer Länge von 5.055 m (siehe auch Abb. 6.14). Mit Hilfe eines Plasmabrenners wird ein  $\text{SnO}_2$ -Aerosol erzeugt und in der Mischkammer (Mixing Vessel) mit  $\text{N}_2$  und überhitztem Dampf gemischt. Das Gemisch wird anschließend durch die Teststecke geleitet, in welcher u. a. mit Hilfe eines Gamma-Densitometers die Ablagerung von  $\text{SnO}_2$  online gemessen wird.

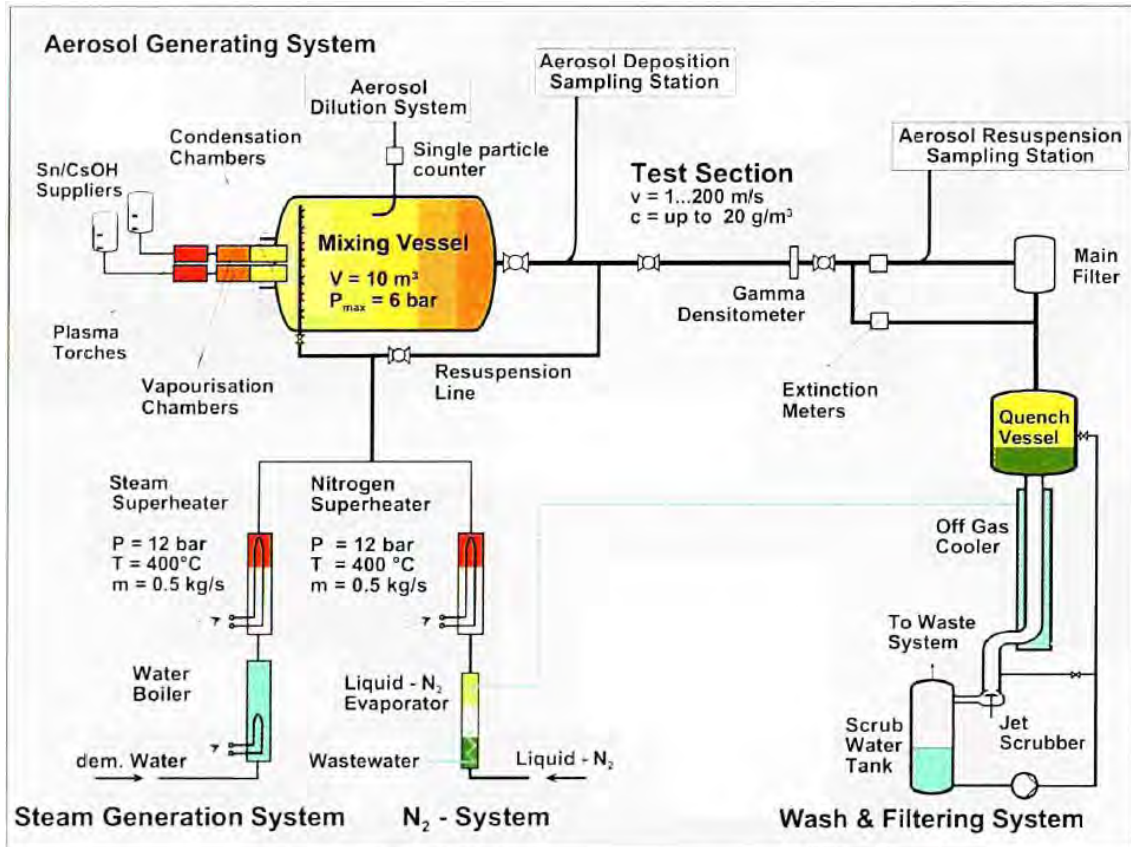
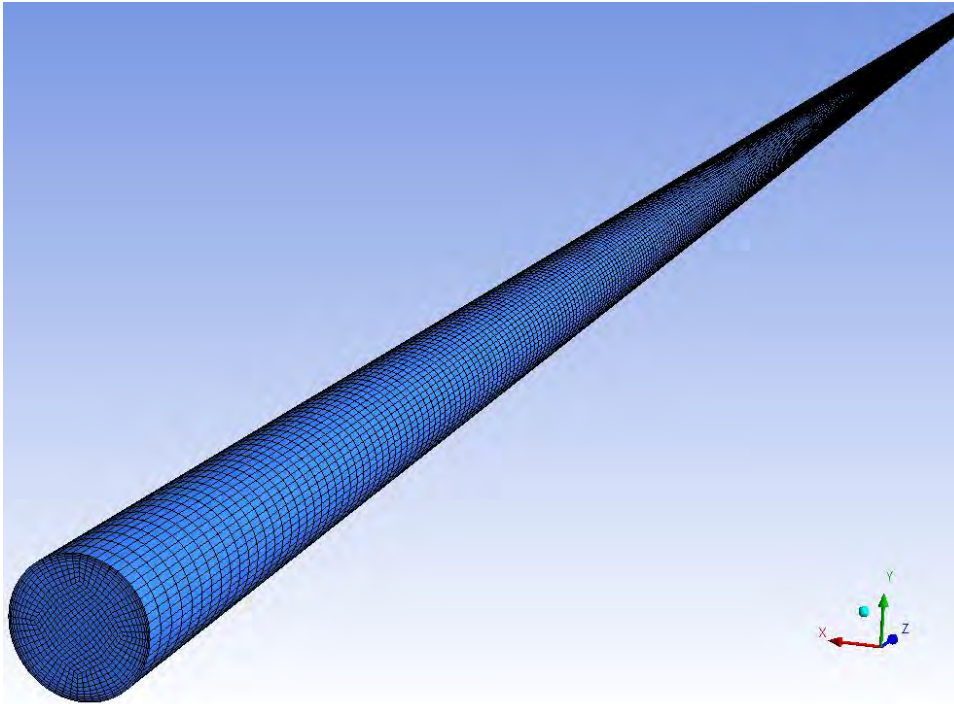


Abb. 6.13 STORM Versuchsanlage, schematische Gesamtdarstellung (Bild: /CAS 99/)



**Abb. 6.14** CFD-Gitter der Test-Sektion im STORM-Versuch

In der hier betrachteten Versuchsnachrechnung wird nur die Ablagerungsphase vom STORM-Experiment SD11 betrachtet, nicht die noch später im Experiment durchgeführte Resuspension (SR11). In Tab. 6.4 sind die Einspeiseraten zum STORM-Versuch SD11 dargestellt. Die Aerosolpartikel des SnO<sub>2</sub> haben einen Durchmesser von 0.43 µm mit einer Standardabweichung von 1.7 µm. Das SnO<sub>2</sub> Aerosol hat eine Dichte von etwa 4 g/cm<sup>3</sup> und eine Wärmeleitfähigkeit von 11 W/mK. Da hier die Aerosol-Dichte gemessen wurde, wird der volle Wert (4 g/cm<sup>3</sup>) in der Simulation verwendet.

**Tab. 6.4** Einspeiseraten zum STORM SD11-Versuch (nach /CAS 99/)

Aerosol	SnO <sub>2</sub>	3.83e-4 kg/s
Trägergase	Dampf	11.06 g/s
	N <sub>2</sub>	5.467 g/s
	Luft (zur Oxidation von Sn zu SnO <sub>2</sub> )	5.728 g/s
	He (Plasma-Gas)	0.119 g/s
	Ar (Plasma-Gas)	7.194 g/s

**Tab. 6.5** Infobox für das STORM-Experiment

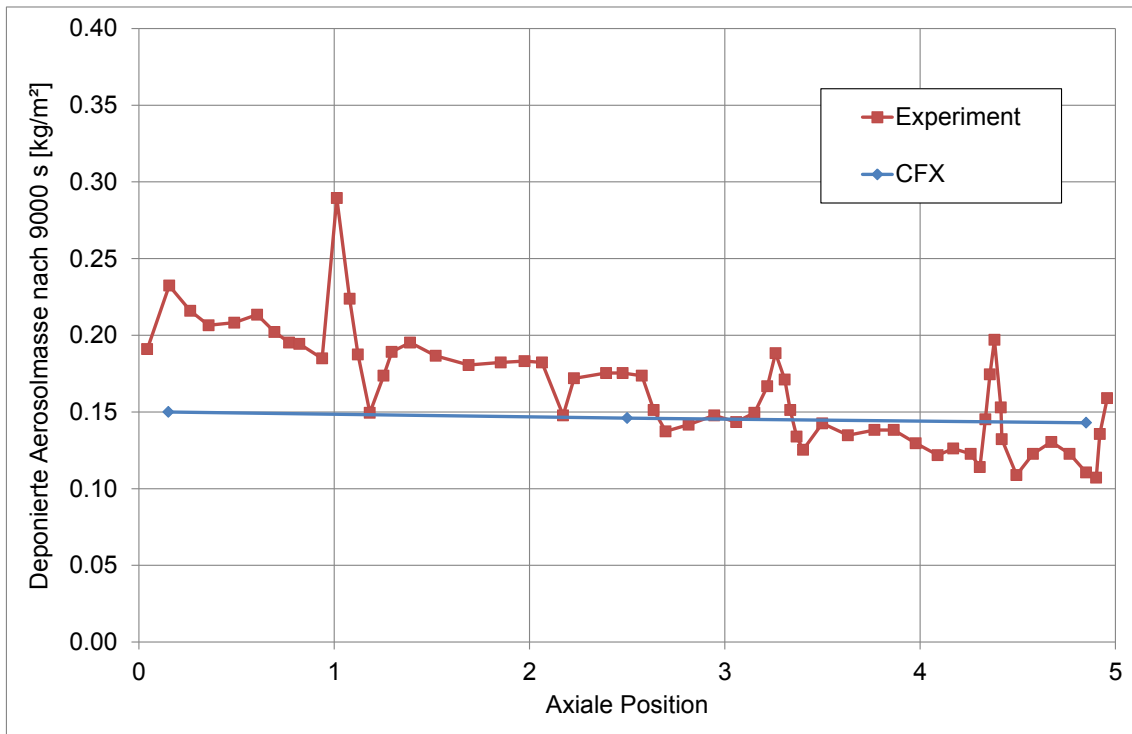
Experiment	STORM SD11 (ISP-40)
Phänomene	Ausbreitung und Absinken von Aerosolpartikeln in einer Luftströmung
Elementzahl	1 130 007
Materialien	Air Ideal Gas, Ar Ideal Gas, H <sub>2</sub> O, He Ideal Gas, N <sub>2</sub> Ideal Gas, SnO <sub>2</sub>
Turbulenzmodell	SST
Aerosolmodell	Algebraic Slip Modell (ASM)
Konvergenz	RMS < 0.0001
CFX-Version	15.0

In Tab. 6.5 sind die numerischen Parameter dargestellt, die in der CFX-Rechnung verwendet wurden. Bei den hier verwendeten Materialdaten (Durchmesser und Dichte) des SnO<sub>2</sub> ergibt sich in der CFX-Rechnung eine mittlere Sinkgeschwindigkeit von 2.0 e-5 m/s. Da die Teststrecke innerhalb von etwa 0.25 s durchströmt wird, entsteht durch das gravitationsbedingte Absinken nur eine sehr geringe Ablagerung von Partikeln in der Teststrecke (in 9000 s Versuchsdauer nur 0.34 g Ablagerung). Dies ist viel geringer als die im Test gemessenen 162 g. Ursache für die Ablagerung ist in diesem Fall nicht das gravitationsbedingte Absinken, sondern die durch einen Temperaturgradienten bedingte Thermophorese. Diese sorgt laut (/HIN 99/, S. 173) für eine zusätzliche Geschwindigkeitskomponente aus dem heißen Gas in Richtung der kälteren Rohrwand:

$$V_{th} = \frac{-3\eta C_c H \nabla T}{2\rho_g T} \quad (6.3)$$

Hierbei ist  $\eta$  die dynamische Viskosität,  $C_c$  der Cunningham-Faktor,  $H$  berücksichtigt den Effekt des Temperaturgradienten im Partikel (Details siehe /HIN 99/, S. 173),  $\nabla T$  der Temperaturgradient,  $\rho_g$  die Gasdichte und  $T$  die lokale Temperatur. Verwendet man diese Gleichung in der CFX-Rechnung, so ergibt sich hieraus ein Mittelwert für  $V_{th}$  von 2.78e-3 m/s, der deutlich höher als die gravitationsbedingte Sinkgeschwindigkeit ist. Diese zusätzliche Geschwindigkeitskomponente (in Richtung des Temperaturgradienten zur Rohrwand) wurde nun als Slip-Velocity im Algebraic Slip Modell von CFX

verwendet. Dadurch kommt es in der CFX-Rechnung zu einer Ablagerung von 146 g SnO<sub>2</sub> in der Teststrecke, was deutlich näher am experimentellen Wert von 162 g liegt. In Abb. 6.15 ist dargestellt, wie sich das Aerosol entlang der Achse im Rohr ablagert. Hier zeigt sich der größte Unterschied der CFX-Rechnung zum Experiment noch am Rohranfang.



**Abb. 6.15** Aerosoldeposition entlang der Rohr-Achse

Dieses Ergebnis liegt in einer ähnlichen Größenordnung zum experimentellen Ergebnis wie die Lumped-Parameter-Ergebnisse beim ISP-40 (siehe auch /CAS 99/). Allerdings gibt es noch eine ganze Reihe von unterschiedlichen Einflussfaktoren auf das Ergebnis, die hier jedoch nicht weiter berücksichtigt wurden:

- Berechnung des Temperaturgradienten zur Wand (hier geschehen über die Nusselt-Zahl, in Analogie zu ATHLET-CD)
- Variation von Partikeldurchmesser, Dichte und Wärmeleitfähigkeit
- Herausbildung einer Rohrströmung, Einlaufverhalten in CFX

Insgesamt lässt sich feststellen, dass eine Erweiterung von CFX um den Effekt der Thermophorese prinzipiell möglich ist und gute Ergebnisse verspricht, aber vor einer

Anwendung noch eine vertiefte Untersuchung erfordert, die im Rahmen des Projektes nicht vorgesehen ist.

Die Verwendung mehrerer Partikelklassen im ASM Modell ist rechenzeitaufwendiger, da für jede Klasse ein eigenes Material definiert werden muss, für das dann wieder ein Gleichungssystem gelöst werden muss. Möglicherweise erfolgsversprechender ist hier die Verwendung des Lagrangeschen Particle Trackings, da dort Partikelgrößenverteilungen angenommen und parametrisiert werden können. Diese Untersuchung wurde hier aber bisher nicht durchgeführt.

#### **6.3.4 Berechnung für einen Impaktor**

Impaktoren werden zur experimentellen Bestimmung von Partikelgrößen verwendet. Sie sind so konstruiert, dass der Gasstrom von oben in den Impaktor eintritt und dann um  $90^\circ$  zu den Seiten umgelenkt wird (siehe Abb. 6.16). Da die Partikel, abhängig von ihrer Masse, eine gewisse Trägheit haben, prallt ein Teil der Partikel gegen die unten liegende „Impaction Plate“ und bleibt dort hängen. Es handelt sich dabei um die größeren (und damit schwereren) Partikel, während die leichteren Partikel die Umlenkung um  $90^\circ$  „schaffen“, ohne die Prallplatte zu berühren. So findet eine Separation in unterschiedliche Größen- bzw. Gewichtsklassen statt. Moderne Impaktoren weisen meist mehrere Impaktorstufen auf, die jeweils eine bestimmte Partikelklasse herausfiltern. Später wird die Gesamtmasse der Partikel auf den einzelnen Impaktorstufen gewogen und so eine Häufigkeitsverteilung für die unterschiedlichen Größenklassen erstellt.



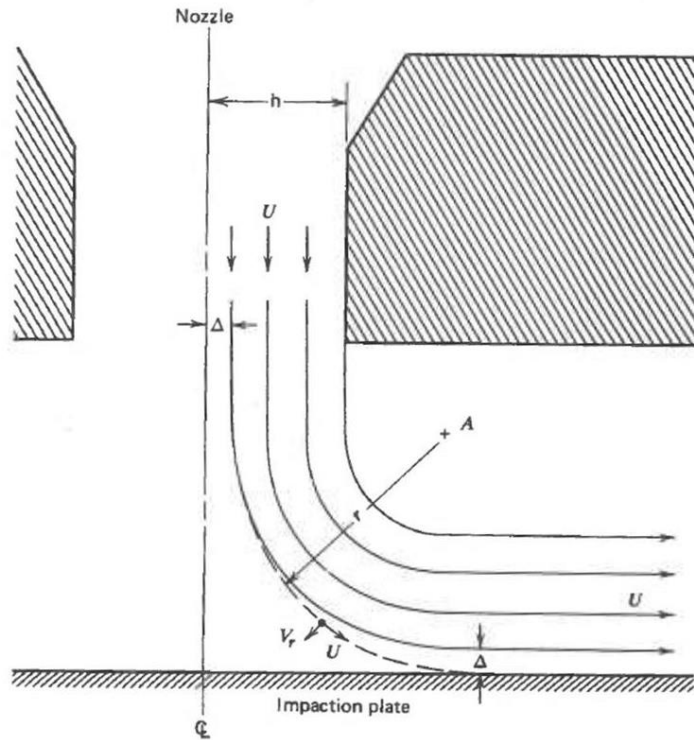


Abb. 6.16 Vereinfachtes Impaktor-Modell (Bild aus: /HIN 99/)

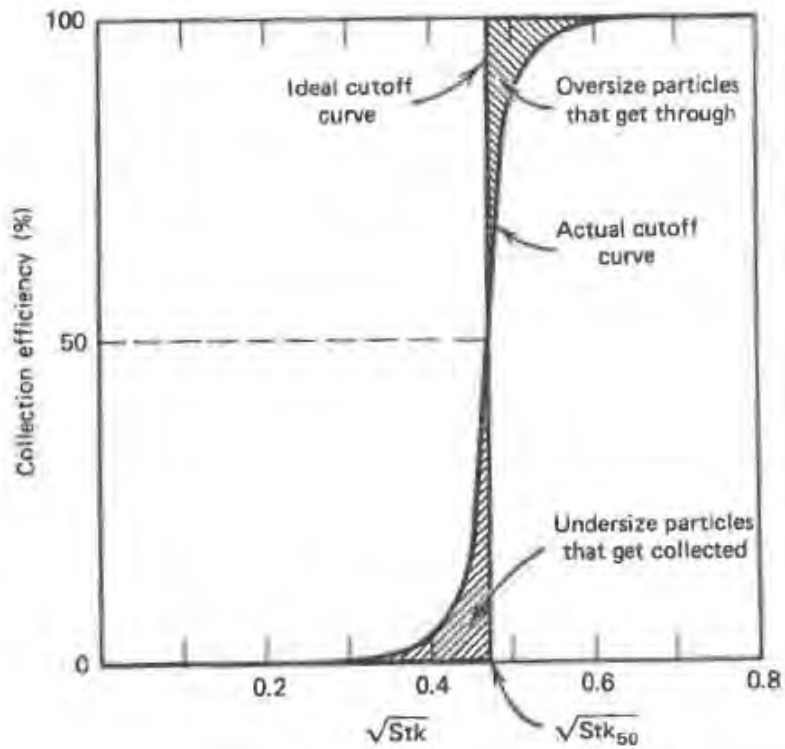


Abb. 6.17 Typische reale und ideale Cutoff-Kurven (Actual Curve / Ideal Curve, Bild aus: /HIN 99/)

Nach /HIN 99/ lässt sich ein Zusammenhang zwischen den Abmaßen des Impaktors und dem so genannten Cutoff-Durchmesser erstellen. Der Cutoff-Durchmesser definiert den Grenzwert, bei dem genau 50 % der Partikel mit diesem Partikeldurchmesser herausgefiltert werden. In einem idealen Impaktor bleiben alle Partikel mit größerem Durchmesser an der Prallplatte hängen und alle Partikel mit kleinerem Durchmesser gelangen ungestört durch diese Impaktorstufe. In Abb. 6.17 ist Collection-Effizienz beispielhaft aufgetragen. In einem idealen Impaktor ist dies eine scharfe Stufenfunktion (beim Cutoff-Durchmesser), in einem realen Impaktor gibt es jedoch immer auch etwas kleinere Partikel, die aufgefangen werden, und etwas größere Partikel, die durch die Impaktorstufe hindurchkommen. Nach /HIN 99/ gilt für den Cutoff-Durchmesser (idealer Wert):

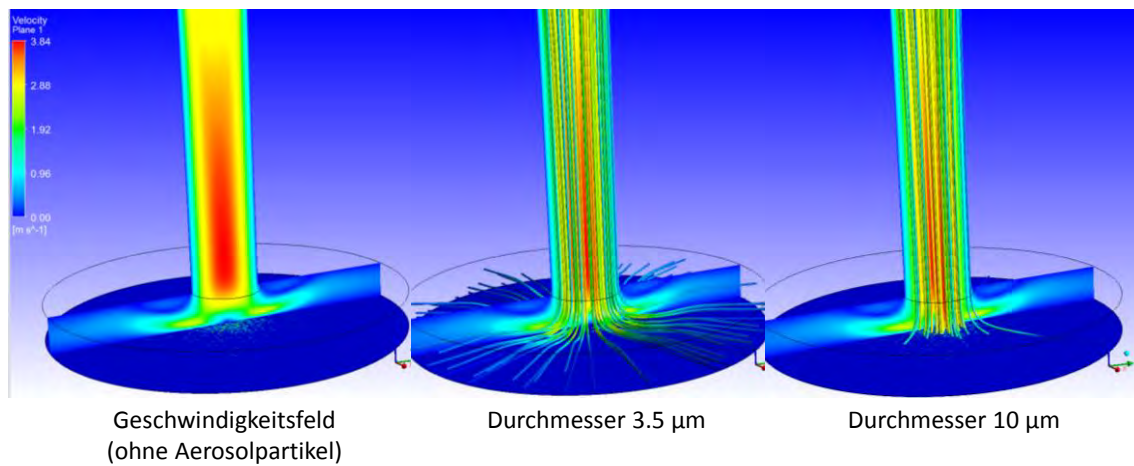
$$d_{50} = \left[ \frac{9\pi\eta D_j^3 (Stk_{50})}{4\rho_p Q C_c} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (6.4)$$

für eine Impaktorstufe mit rundem Jet. Hierbei ist  $\eta$  die Viskosität der Luft,  $D_j$  der Jet-Radius,  $Stk_{50}$  die Stokes-Zahl für 50 % Effizienz (siehe /HIN 99/),  $\rho_p$  die Dichte des Partikelmaterials,  $Q$  der Volumenstrom und  $C_c$  der Cunningham-Korrekturfaktor.

Dieser Zusammenhang soll mit einer CFX-Rechnung untersucht werden. Hierdurch kann validiert werden, ob CFX bei Verwendung des ASM-Modells und des Lagrange Partikel-Trackings sowohl die Ausbreitung von Aerosolen mit der Gasströmung als auch das Trägheitsverhalten von Aerosolen richtig wiedergibt. Mit Hilfe der Gleichung oben ergibt sich bei einem Volumenstrom von 0.1 l/m (Luft), einem Jet-Durchmesser von 1 mm und Wassertropfen als Partikel ein Cutoff-Durchmesser von etwa 4.22  $\mu\text{m}$  (ohne Cunningham-Korrektur 4.28  $\mu\text{m}$ ). Es wurden Simulationen mit unterschiedlichen Partikeldurchmessern durchgeführt. Hierbei wurde bei einer Simulationsreihe das Algebraic Slip Modell und bei einer zweiten Simulationsreihe das Lagrangesche Partikel-Tracking-Modell verwendet.

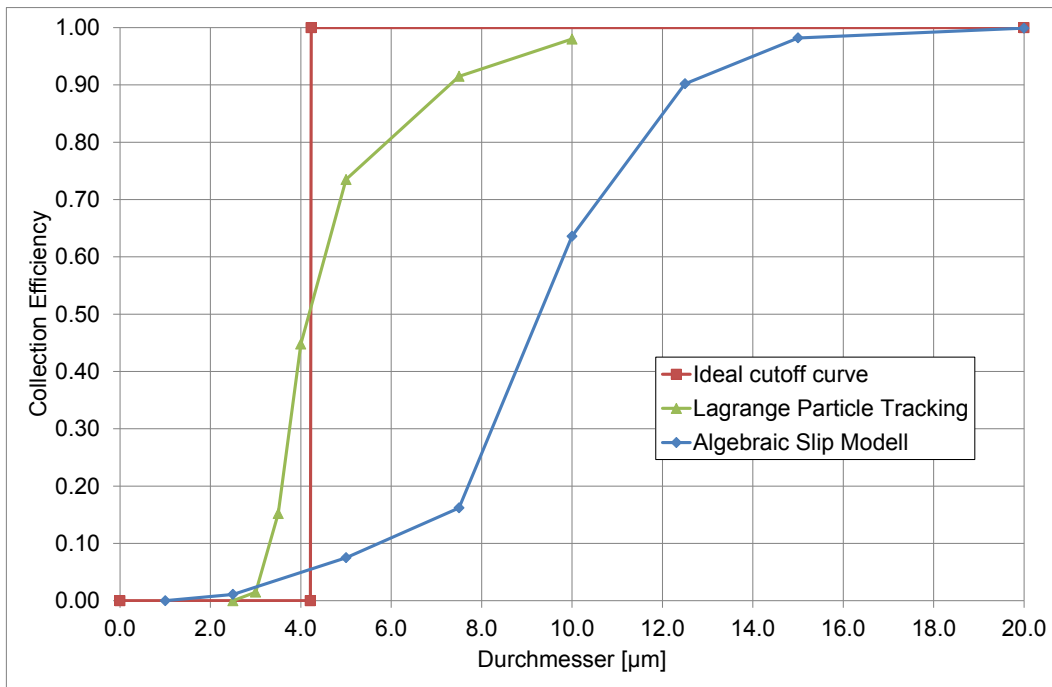
In Abb. 6.18 sind die Ergebnisse mit dem Partikel-Tracking-Modell beispielhaft dargestellt. Links im Bild sieht man zunächst das Geschwindigkeitsfeld (Luftstrom), das sich (ohne Wassertropfen) einstellt. Mit Hilfe des Tracking-Modells werden nun Partikelbahnen berechnet, und zwar einmal für Tropfen mit einem Durchmesser von 3.5  $\mu\text{m}$  (siehe Abb. 6.18, Mitte) und einmal für Tropfen mit einem Durchmesser von 10.0  $\mu\text{m}$  (siehe Abb. 6.18, rechts). Es zeigt sich, dass bei einem Durchmesser von 3.5  $\mu\text{m}$  noch viele Partikel die Strömungsumlenkung mitmachen, während bei einem Durchmesser von

10.0  $\mu\text{m}$  die meisten Partikel auf Grund ihrer Trägheitskräfte auf die unten liegende Prallplatte auftreffen.



**Abb. 6.18** Geschwindigkeitsfeld und Partikelbahnen in einer Impaktor-Stufe (CFX, Lagrange Partikel Tracking Modell)

In Abb. 6.19 ist der Verlauf der Collection-Effizienz über dem Partikeldurchmesser aufgetragen. Es zeigt sich, dass die Kurve mit dem Lagrange-Modell gut zu dem idealen Cutoff-Durchmesser von 4.22  $\mu\text{m}$  (siehe oben) passt, während mit dem ASM ein größerer Cutoff-Durchmesser berechnet wird. Mit dem ASM wird zwar der qualitative Verlauf richtig wiedergegeben, allerdings bei einem zu großen Partikeldurchmesser. In dieser Rechnung zeigte sich also, dass die Simulation von Partikelumlenkung und Trägheitskräften besser mit dem Lagrange Particle Tracking funktioniert.



**Abb. 6.19** Vergleich der Collection Efficiency (Ideal, Lagrange und ASM)

#### 6.4 Agglomeration von Aerosolpartikeln

Treffen zwei Aerosolpartikel aufeinander, so können sie sich zu einem größeren Partikel vereinigen. Dieser Prozess wird (bei Feststoffen) als Agglomeration bezeichnet. Es können die folgenden Agglomerationsprozesse unterschieden werden:

- Brownsche Agglomeration
- Gravitationsbedingte Agglomeration
- Turbulente Agglomeration

Im Folgenden soll prinzipiell untersucht werden, wie Agglomerationsprozesse in CFX modelliert werden können. Dabei wird zunächst nur die Brownsche Agglomeration betrachtet. Hierbei ist wiederum die Agglomeration von monodispersen Partikeln am einfachsten zu beschreiben. In /HIN 99/ wird folgender Ausdruck für die Änderung der Partikelzahl-Konzentration hergeleitet:

$$\frac{dN}{dt} = -K_0 N^2 \tag{6.5}$$

Dabei ist N die Partikelzahlkonzentration und  $K_0$  der Agglomerationskoeffizient, für den laut /HIN 99/ für Partikel > 0.1 µm gilt:

$$K_0 = 3.0 \cdot 10^{-16} C_C \text{ m}^3/\text{s} \quad (6.6)$$

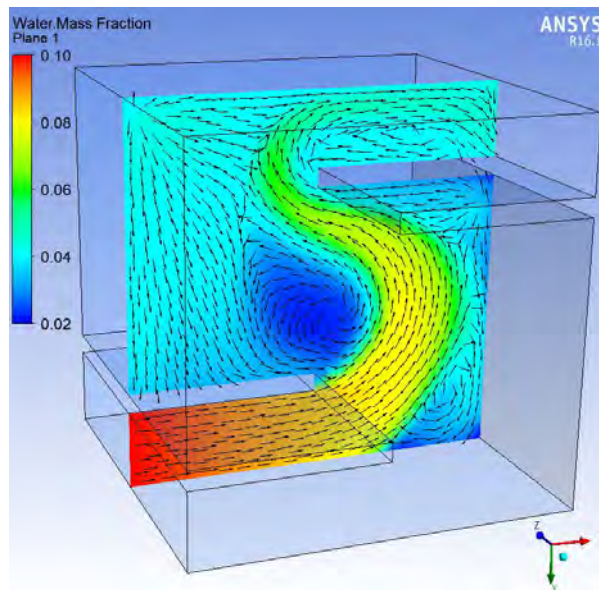
Hierbei ist  $C_C$  der Slip-Correction Faktor. Die genaue Herleitung ist der Literatur /HIN 99/ zu entnehmen. Es zeigt sich eine starke (quadratische) Abhängigkeit der Agglomeration von der Partikelzahldichte. Die Partikelgröße selber fließt nur (schwach) über den Slip-Correction-Faktor ein. Diese Korrektur ist für größere Partikel ( $> 5 \mu\text{m}$ ) vernachlässigbar.

Verwendet man das Algebraic Slip Modell von ANSYS-CFX, so kann die Agglomeration durch den Übergang in eine andere Partikelklasse beschrieben werden. Hierbei wird jede Partikelklasse in CFX durch ein eigenes Material dargestellt. Die Materialien unterscheiden sich nur durch den Partikeldurchmesser, der jeweils für das ASM-Modell angegeben wird. Bei monodispersen Partikeln verdoppeln sich die Masse und der Durchmesser um den Faktor  $2^{1/3} = 1.26$ . Als Beispiel werden drei Partikelklassen mit den zunehmenden Durchmessern definiert (siehe Tab. 6.6).

**Tab. 6.6** Unterschiedliche Partikelklassen für die Agglomeration

Partikelklasse	Durchmesser [ $\mu\text{m}$ ]
1	1.00
2	1.26
3	1.59

Die Primärpartikel (Partikelklasse 1) werden zusammen mit Luft in eine Testgeometrie eingespeist, in der die Strömung eine zweifache Umlenkung erfährt (siehe Abb. 6.20). Die Testgeometrie hat eine Seitenlänge von 1.0 m. Der Massenanteil der Primärpartikel am Einlass beträgt 0.1, dies entspricht einer Partikelzahldichte von etwa  $2.5\text{E}+14$  Partikeln/ $\text{m}^3$ . Die Einlassgeschwindigkeit beträgt 0.25 m/s.

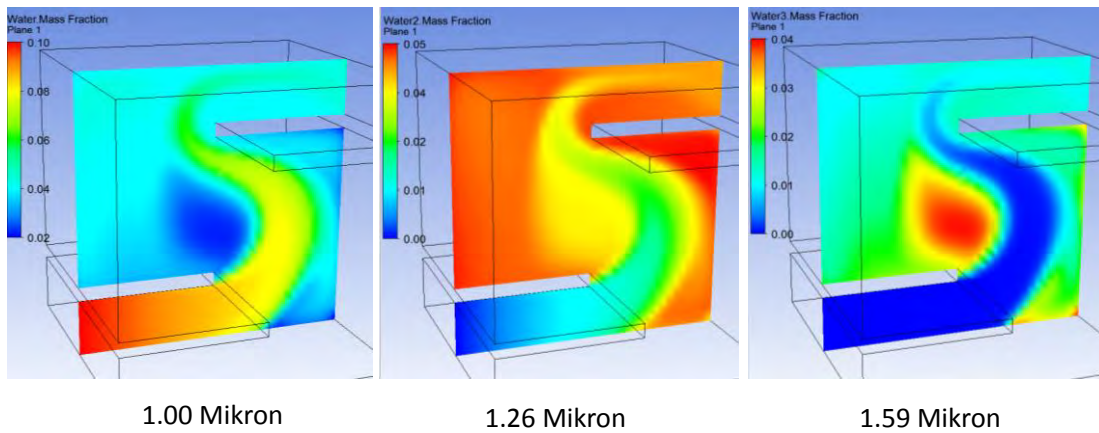


**Abb. 6.20** Testgeometrie für die Modellierung der Partikelagglomeration

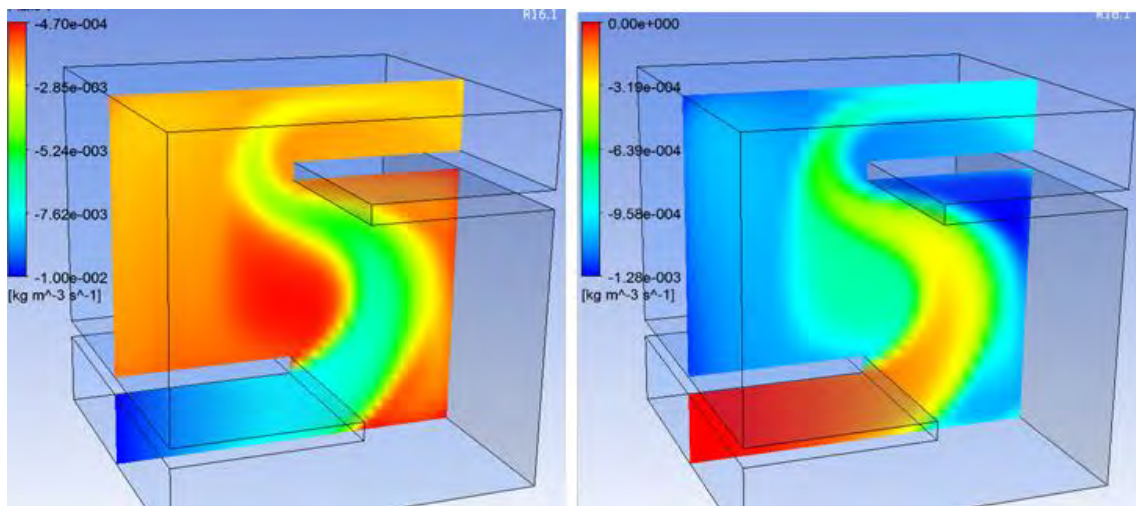
Für jede Partikelklasse wird einzeln zunächst die Partikelzahldichte und dann die Übergangsrate in die nächste Partikelklasse bestimmt. Die Werte von  $K_0$  wurden aus /HIN 99/, Tabelle 12.1 entnommen. Durch Massensenken und -quellen in CFX wird der Übergang zwischen den Partikelklassen dann realisiert. Das Ergebnis ist in Abb. 6.21 dargestellt. Am Einlass dominieren zunächst die Primärpartikel mit einem Durchmesser von  $1.0 \mu\text{m}$  (linkes Bild).

Die mit Hilfe der obigen Gleichungen berechnete Übergangsrate in die nächsten Partikelklassen ist in Abb. 6.22 dargestellt (hier in  $\text{kg}/\text{m}^3\text{s}$ , ein negativer Wert bedeutet eine Abnahme der ursprünglichen Klasse). In Abb. 6.21 (Mitte) ist dann die Verteilung für Partikel mit einem Durchmesser von  $1.26 \mu\text{m}$  dargestellt.

Durch die Agglomeration sinkt die Partikelzahldichte und so gibt es schon deutlich weniger Partikel in (Größen-) Klasse 2 als in 1. In Klasse 3 sind wiederum deutlich weniger Partikel als in Klasse 2. Dieses Absinken der Partikelzahldichte führt zu einer immer stärkeren Verlangsamung des Agglomerationsprozesses, bis die Partikelzahldichte so niedrig ist, dass (fast) keine Agglomerationen mehr stattfinden. Hinzu kommt, dass größere Partikel leichter nach unten sinken und sich am Boden ablagern.



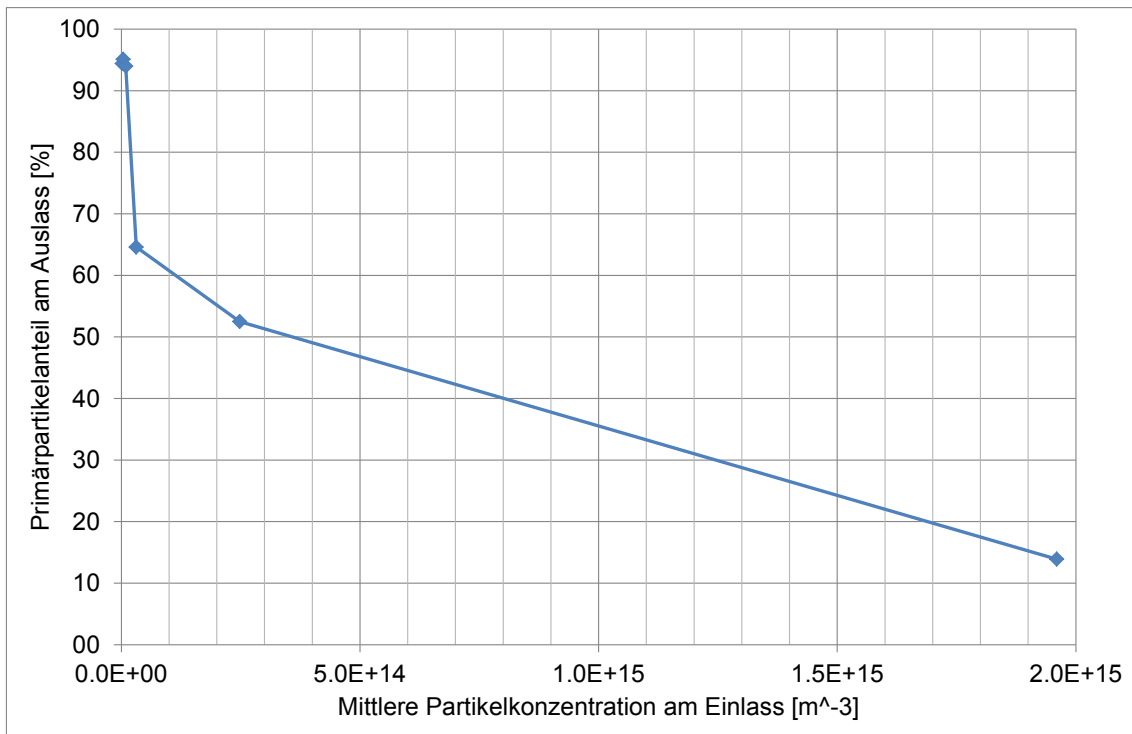
**Abb. 6.21** Die Agglomeration der Primärpartikel ( $1.0\ \mu\text{m}$ ) führt zu größeren Partikeln ( $1.26\ \mu\text{m}$  und  $1.59\ \mu\text{m}$ )



**Abb. 6.22** Agglomerations- und Übergangsrate (links: Klasse 1  $\rightarrow$  Klasse 2, rechts: Klasse 2  $\rightarrow$  Klasse 3)

Um den Einfluss der Partikelzahldichte auf den Agglomerationsprozess zu zeigen, wurde der Durchmesser der primär eingespeisten Partikel im Bereich von  $0.5\ \mu\text{m}$  –  $5.0\ \mu\text{m}$  variiert. Bei gleich bleibendem Massenanteil verändert sich im Einlass dadurch die Partikelzahldichte im Bereich von  $1.99\text{E}+12$  Partikel/ $\text{m}^3$  bis  $1.96\text{E}+15$  Partikel/ $\text{m}^3$ . Abb. 6.23 zeigt, dass mit steigender Partikelkonzentration am Einlass die Zahl der Agglomerationen zunimmt und somit der Anteil der Primärpartikel am Auslass entsprechend absinkt. Dies ist eine (qualitative) Verifikation des mit den Gleichungen beschriebenen Zusammenhangs.





**Abb. 6.23** Einfluss der initialen Partikelkonzentration auf die Agglomeration

## 6.5 Ausbreitung radioaktiver Edelgase

Neben den partikelförmigen Aerosolen spielen auch radioaktive Edelgase eine wichtige Rolle beim radioaktiven Quellterm bei einem Unfall. Ein Beispiel für ein solches Edelgas ist Xenon-133. Einen Monat nach dem Reaktorunglück von Fukushima zog eine Wolke dieses radioaktiven Gases um den Erdball (siehe Abb. 6.24). Im Folgenden soll am Beispiel von Xenon die (simulierte) Ausbreitung radioaktiver Edelgase mit und ohne Nachzerfallswärme untersucht werden. Anschließend wird anhand eines hypothetischen Beispiels (angelehnt an den THAI-Versuch TH-2) der Einfluss der Nachzerfallswärme von Xe, Kr und CsI (Einspeisung in den Behälter unterstellt) auf Temperaturen, Druck und Kondensation untersucht.

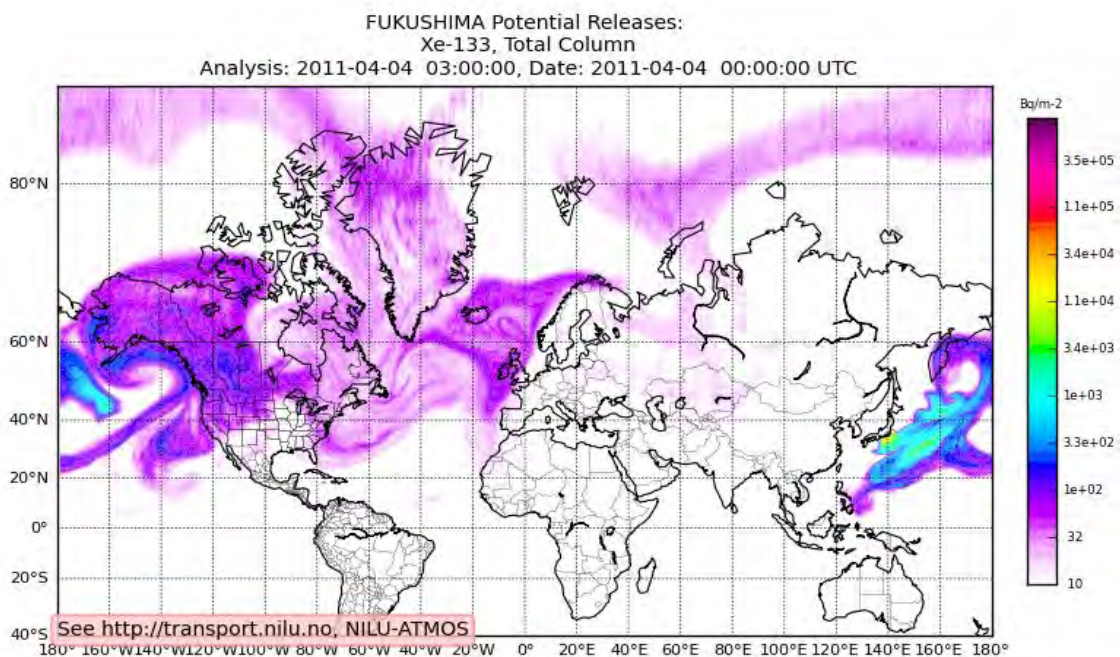
### 6.5.1 Modellierung radioaktiver Edelgase in CFX

Bei einem nuklearen Störfall treten als radioaktive Edelgase hauptsächlich Xenon und Krypton auf. In Tab. 6.1 sind für einen beispielhaften Störfall die frei werdenden Mengen an Xe und Kr sowie deren Zerfallswärme aufgelistet.

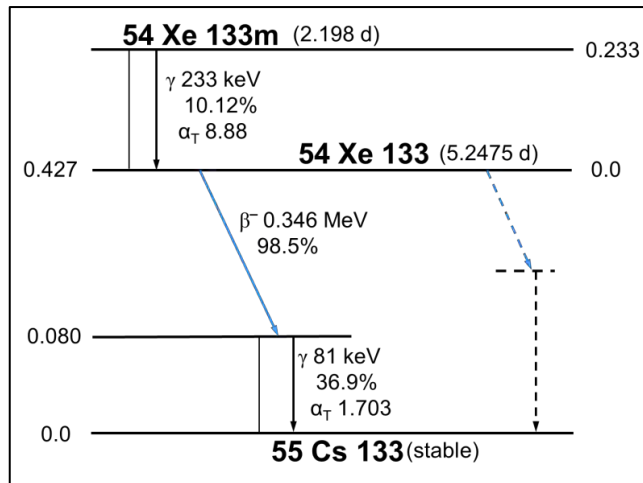


Xenon-133 hat im Grundzustand eine Halbwertszeit von 5.25 Tagen und zerfällt hauptsächlich (zu 98.5 %) über einen  $\beta^-$ -Zerfall (siehe Abb. 6.25). Das beim  $\beta^-$ -Zerfall frei werdende Elektron gibt seine Energie hauptsächlich im Nahbereich (bis ca. 50 cm um die Quelle herum) an die umgebende Luft ab. Das zusätzlich frei werdende Antineutrino nimmt die restliche Energie auf, verlässt dann aber das Containment weitgehend ohne weitere Wechselwirkung.

Radioaktive Edelgase können wie andere Gase ( $H_2$ ,  $O_2$ , ...) als ideale Gase simuliert werden. Für jedes Edelgas wird eine zusätzliche Erhaltungsgleichung (Massenbruch) gelöst. Um Rechenzeit zu sparen, können gegebenenfalls mehrere Edelgase zu einer Komponente zusammengefasst werden. Die Wärmefreisetzung durch  $\alpha$ - und  $\beta$ -Strahlung kann vereinfachend am Ort der Edelgase simuliert werden. Hierbei wird eine volumetrische Wärmequelle in CFX eingebaut, die proportional zum Xe- bzw. Kr-Massenbruch ist. Frei werdende  $\gamma$ -Strahlung kann prinzipiell über den „Radiation-Heat-Transfer“ in CFX modelliert werden. Diese Strahlungsart hat nur geringe Wechselwirkungen mit der Luft und wird ihre Energie hauptsächlich in den umgebenden Strukturen abgeben.



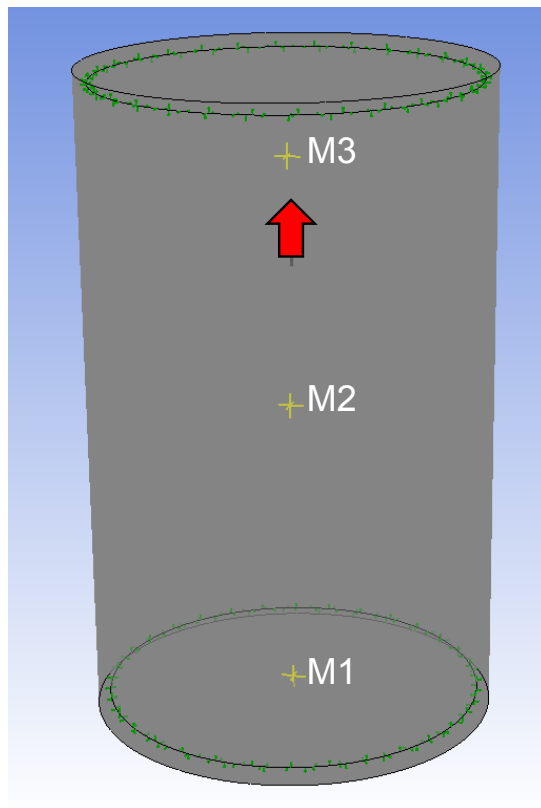
**Abb. 6.24** Xe-133 Emission nach der Katastrophe von Fukushima (Bild: /PSO 15/)



**Abb. 6.25** Zerfallsschema von Xe-133 (Bild: /NUC 15/)

### 6.5.2 Berechnung eines einfachen Testbeispiels

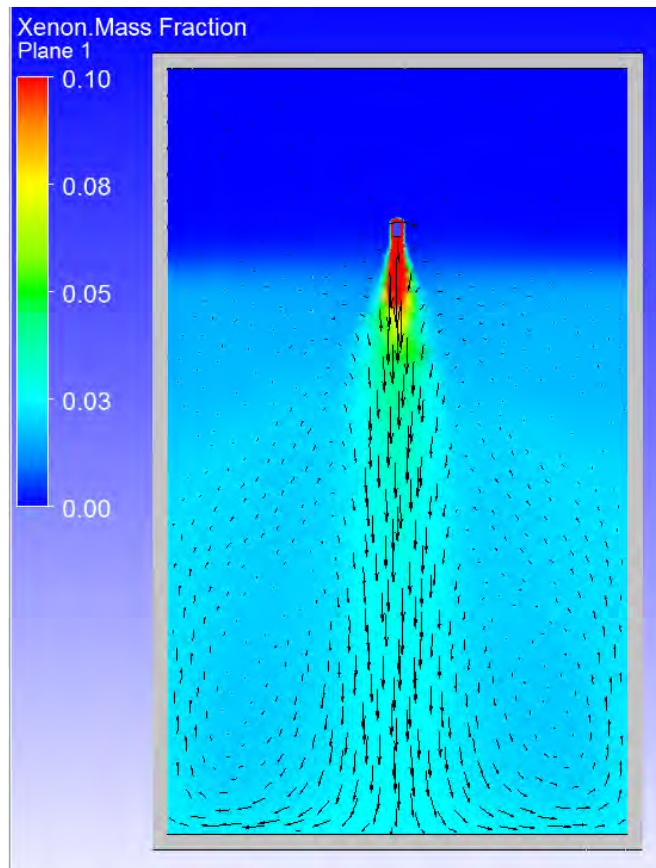
Zunächst sollte anhand eines Testbeispiels die Ausbreitung von Xenon in einem einfachen Volumen untersucht werden. Das zylinderförmige Beispielvolumen ist in Abb. 6.26 dargestellt (Durchmesser 6.0 m und Höhe 10 m). Der Einspeisepunkt und die Einspeiserichtung des Gases (nach oben) sind als roter Pfeil dargestellt. Weiterhin wurden drei Monitorpunkte eingebracht, an denen die Xenon-Konzentration und die Temperaturen überwacht werden. Das Volumen ist weiterhin von einer 20 cm dicken Stahlwand umgeben. Mit insgesamt 240 374 Elementen sind Geometrie und Volumen einigermaßen grob vernetzt, was aber ausreicht, da nur die prinzipiellen Verhaltensweisen untersucht werden sollen. Des Weiteren wurden die bisher üblichen Standardparameter für unsere CFX-Rechnungen verwendet (SST-Modell, Total Energy, ...).



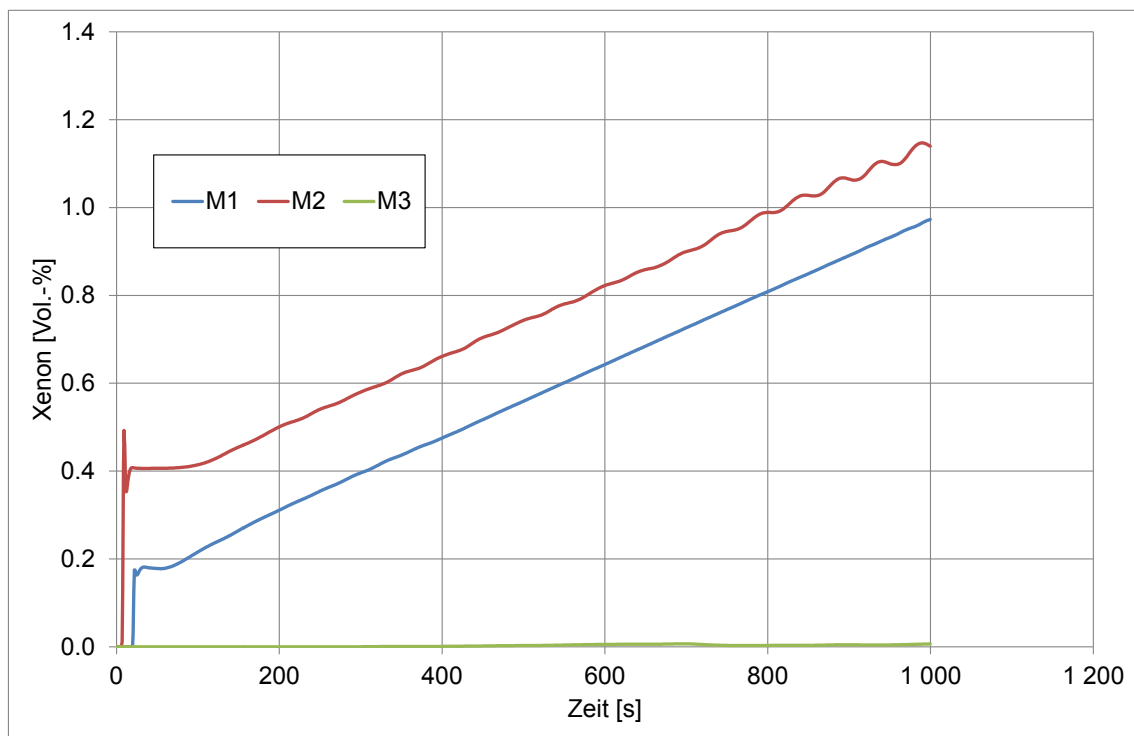
**Abb. 6.26** Testvolumen, Xenon-Einspeiseposition und Monitorpunkte

Als Startwerte wird angenommen, dass der Behälter ausschließlich mit Luft gefüllt ist, eine Temperatur von 25 °C und einen Druck von 1 bar hat. Da Xenon nicht in der CFX-Materialdatenbank vorhanden ist, wurde es als ideales Gas mit einer molaren Masse von 131.29 g/mol und einer spezifischen Wärmekapazität von 158 J/kgK eingebracht. Durch den Einlass werden 10 g/s mit einer Temperatur von 100 °C nach oben eingespeist. Zunächst wird angenommen, dass keine radioaktiven Zerfälle stattfinden und dadurch keine zusätzliche Wärme eingebracht wird.

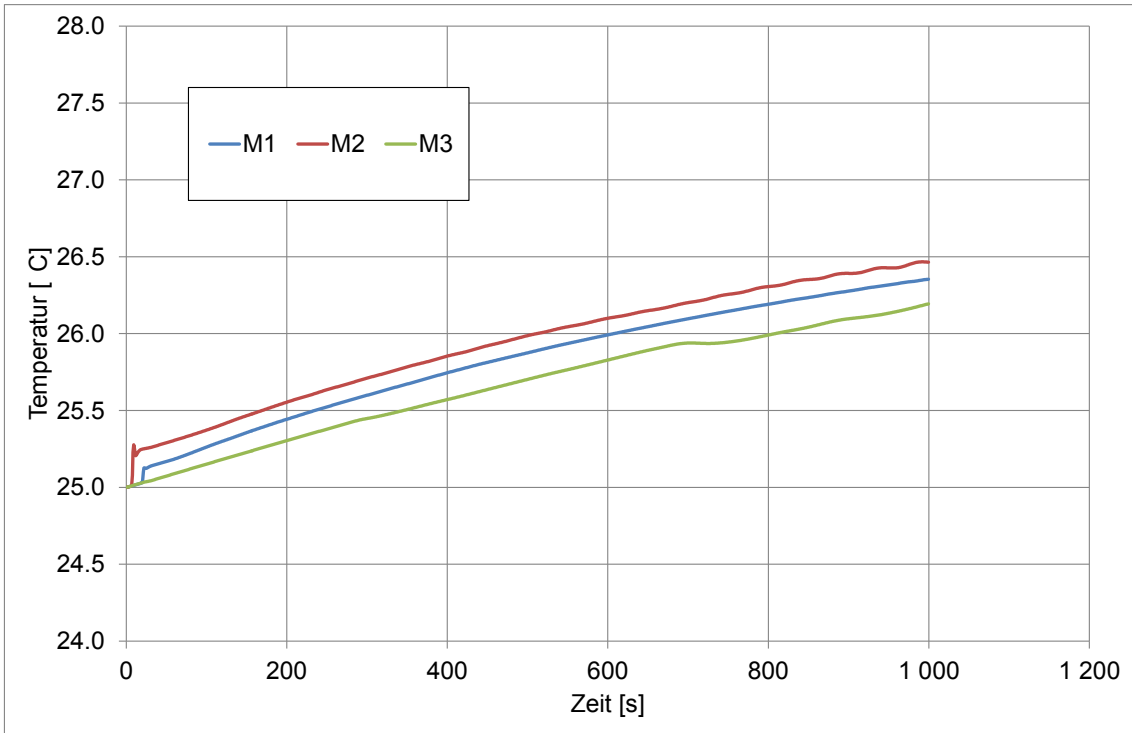
In Abb. 6.27 ist dargestellt, wie sich das Xenon im Testvolumen ausbreitet. Auf Grund der hohen Dichte des Xenons fällt das Gas (trotz der Einspeisung nach oben) zunächst im Behälter nach unten und füllt diesen von unten auf. Entsprechend zeigen die tieferliegenden Messpunkte M1 und M2 auch eine höhere Xenon-Konzentration an als der oben liegende Messpunkt M3 (siehe Abb. 6.28). Des Weiteren führt die Xenon-Einspeisung auch zu einer moderaten Temperatur- und Druck-Erhöhung im Testvolumen (siehe Abb. 6.29 und Abb. 6.30).



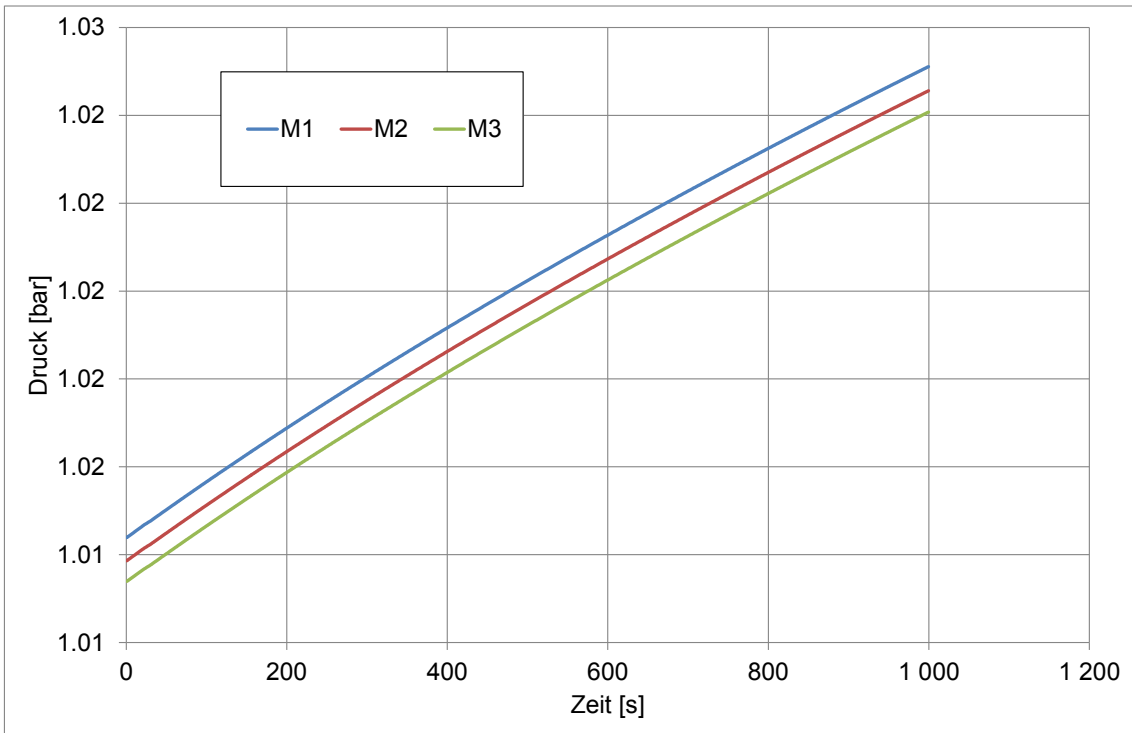
**Abb. 6.27** Ausbreitung des Xenons im Testvolumen (Zeitpunkt  $t = 500$  s)



**Abb. 6.28** Verlauf der Xenon-Konzentration an den drei Messpunkten



**Abb. 6.29** Temperaturverlauf im Testvolumen



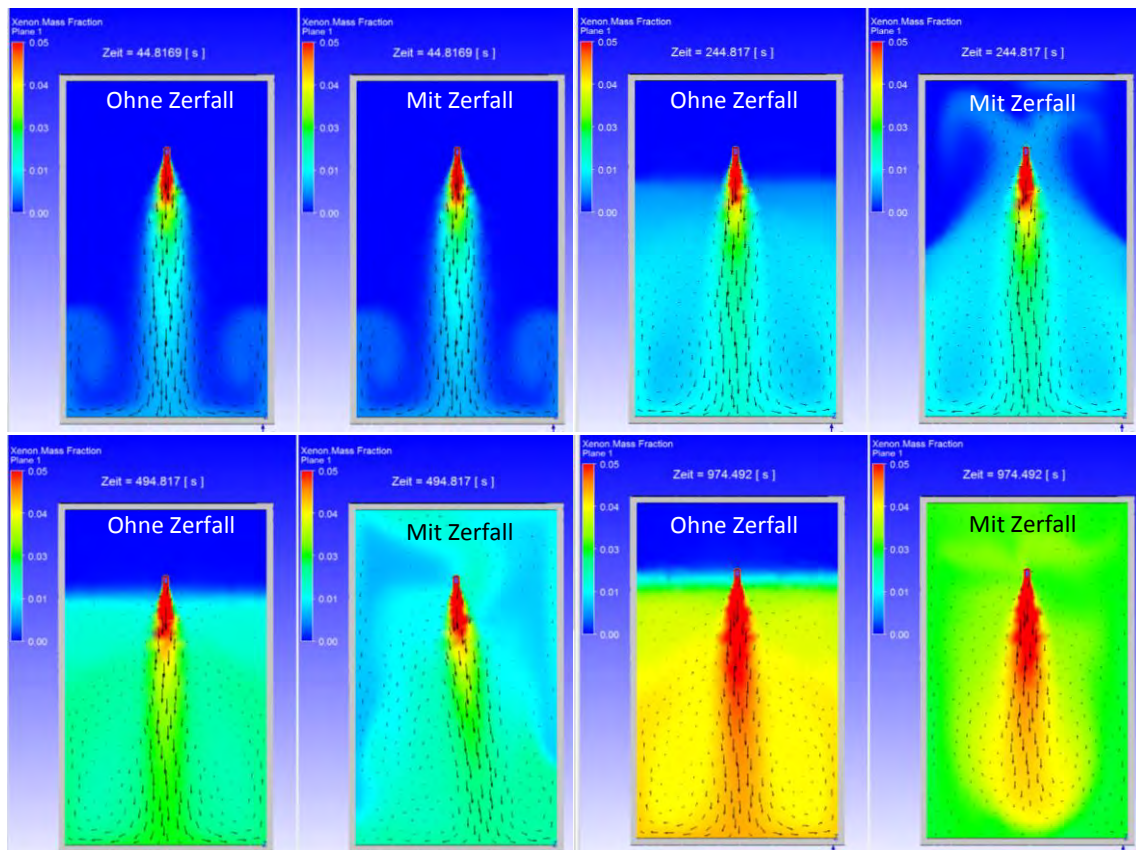
**Abb. 6.30** Druckverlauf im Testvolumen

Als weiterer Aspekt sollte untersucht werden, wie sich die durch radioaktive Zerfälle entstehende Wärme auf Temperatur- und Druckverlauf sowie auf die Gasverteilung auswirkt. Hierzu wurde eine weitere Rechnung durchgeführt. Da die Xenon-Isotope alle

mit hoher Wahrscheinlichkeit durch  $\beta^-$ -Zerfall in Cäsium umgewandelt werden, wird die freiwerdende Zerfallswärme im Nahbereich des Xenons an das umgebende Gas abgegeben. Dieses wird durch eine zusätzliche (volumetrische) Wärmequelle modelliert:

$$DecayHeat = Massenanteil_{Xe} \cdot Dichte \cdot 1732 [W kg^{-1}] \quad (6.7)$$

Die Größe DecayHeat hat die Einheit  $W/m^3$ . Dabei sind die  $1732 W/kg$  die spezifische Zerfallswärme des Xenon-Isotopengemisches (Quelle: COCOSYS). In Abb. 6.31 ist dargestellt, welchen Einfluss diese zusätzliche Zerfallswärme auf die Verteilung des Xenons im Testvolumen hat. Da das Gas eine höhere Wärme bzw. Temperatur hat, fällt es nicht mehr so leicht nach unten, sondern es steigt leichter in die oberen Bereiche des Testvolumens. Hierdurch wird eine stärkere Homogenisierung der Xenon-Konzentration im Behälter erreicht.



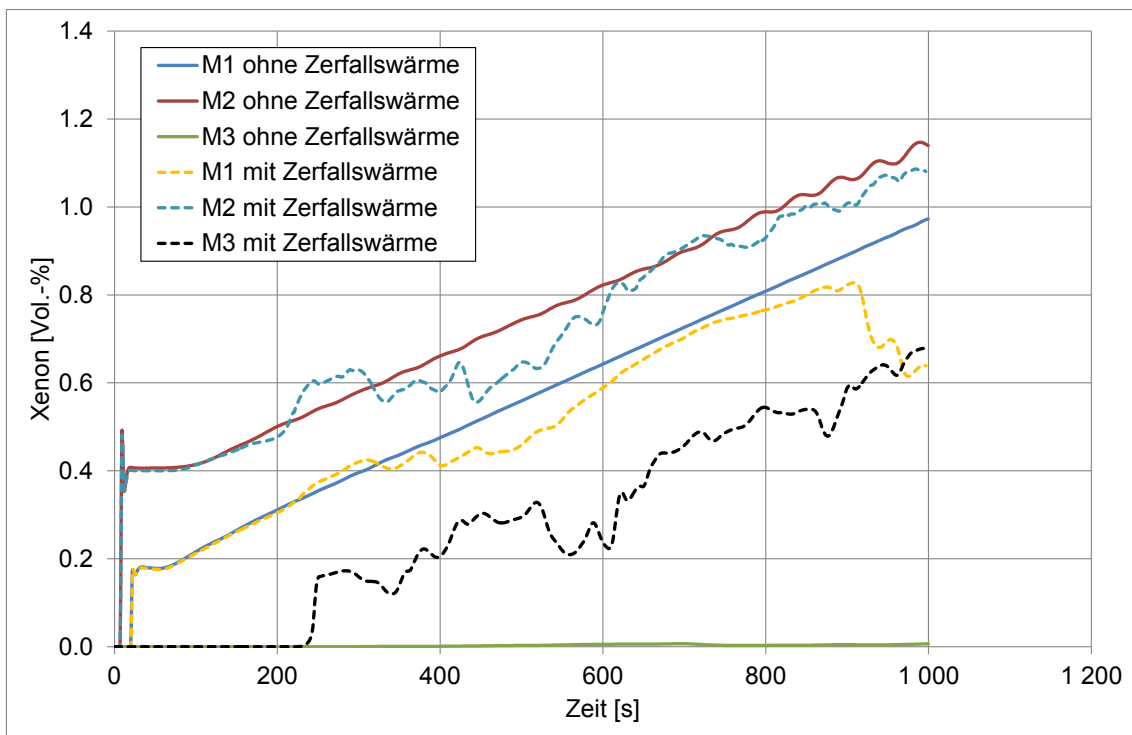
**Abb. 6.31** Ausbreitung von Xenon im Testvolumen mit und ohne Zerfallswärme zu vier unterschiedlichen Zeitpunkten.

In Abb. 6.32 wird die Xenon-Konzentration für die beiden Rechnungen an den drei Messpunkten miteinander verglichen. Hier zeigt sich insbesondere bei Messpunkt M3 (dieser liegt ganz oben im Testvolumen) bei der Rechnung mit Zerfallswärme ein deut-

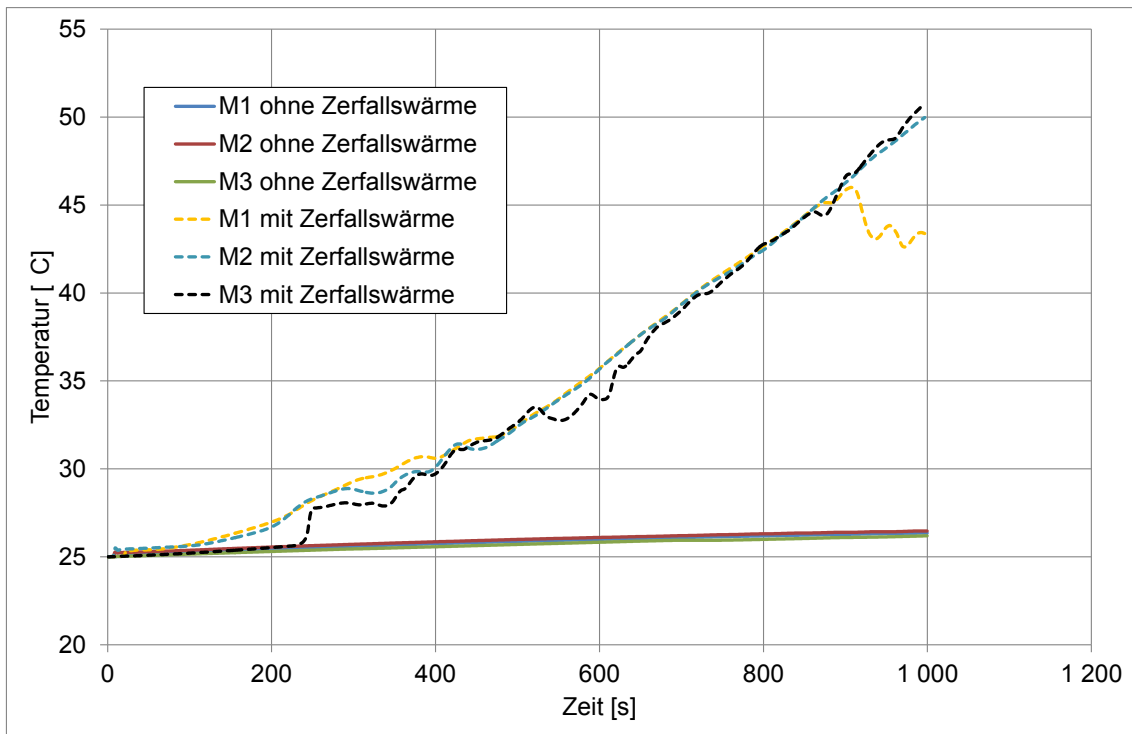


lich schnellerer Anstieg der Xenon-Konzentration. Dieser Anstieg bei M3 wird bei der Rechnung ohne Zerfallswärme gar nicht beobachtet.

Betrachtet man den Temperaturverlauf, so zeigt sich bei einer Berücksichtigung der Zerfallswärme ein deutlich steilerer Temperaturanstieg bei allen Messpunkten (siehe Abb. 6.33). Ähnlich verhält sich auch der Druckverlauf im Testvolumen. Insgesamt hat die zusätzliche Zerfallswärme also einen ziemlich deutlichen Einfluss auf die Größen Temperatur, Druck und Gaskonzentrationen.



**Abb. 6.32** Vergleich des Xenon-Konzentration bei den Rechnungen mit und ohne Berücksichtigung der Zerfallswärme



**Abb. 6.33** Temperaturverlauf mit und ohne Berücksichtigung der Zerfallswärme

### 6.5.3 THAI TH-2 mit zusätzlicher Einspeisung von Xe, Kr und CsI

Im Folgenden wird anhand eines hypothetischen Beispiels (angelehnt an den THAI-Versuch TH-2) der Einfluss der Zerfallswärme von Xe, Kr und CsI auf Temperaturen, Druck und Kondensation untersucht. Hierzu werden die in Tab. 6.1 genannten Freisetzungsmassen für das gesamte Containment auf den THAI-Behälter herunterskaliert ( $70\,000\text{ m}^3$ :  $60\text{ m}^3$ ). Daraus ergeben sich die in Tab. 6.7 dargestellten Freisetzungsmassen und die Nachzerfallswärme. Die freigesetzten Spaltprodukte werden folgendermaßen behandelt:

- Xenon und Krypton werden jeweils einzeln als ideale Gase modelliert.
- Iod und Cäsium werden zu CsI zusammengefasst, welches als Partikel-Medium modelliert wird. Diese Partikel erfahren zusätzlich eine durch das Algebraic Slip Modell beschriebene Sinkgeschwindigkeit aufgrund der Gravitation. Dabei wurde ein mittlerer Partikelradius von  $2\text{ }\mu\text{m}$  angenommen. Das bei einer vollständigen Reaktion von I (mit Cs) zu CsI übrig bleibende Cs wird in dieser Rechnung zunächst vernachlässigt.
- Tellur und Strontium werden wegen der geringen Freisetzungsmassen bzw. geringer Zerfallswärme in dieser Rechnung vernachlässigt.

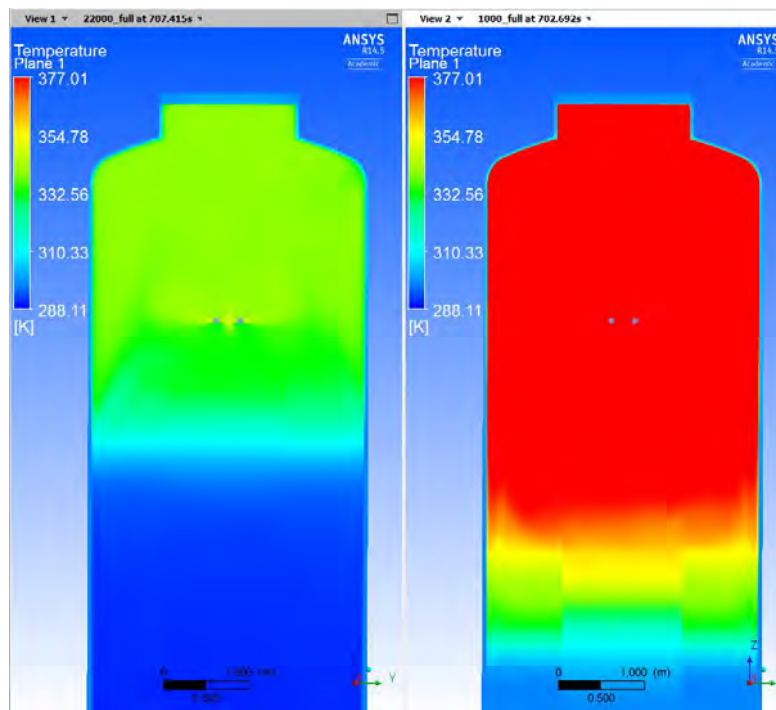


Damit die Rechnung nicht zu lange dauert, werden die genannten Massen innerhalb einer kurzen Zeitdauer (100 s) zusammen mit dem Dampf im TH-2 Versuch freigesetzt.

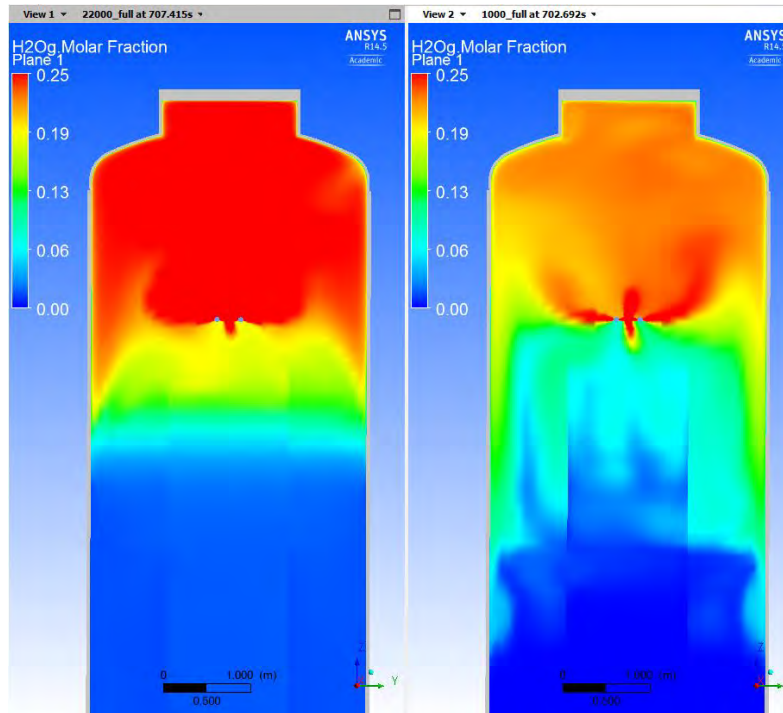
**Tab. 6.7** Auf das THAI-Behältervolumen skalierte Freisetzungsmassen für radioaktive Zerfallsprodukte (Vergleiche auch Tab. 6.1)

Element	Freigesetzte Masse	Spezifische Zerfallswärme	Freigesetzte Zerfallswärme
	[kg]	[kW / kg]	[kW]
Iod	0.0058	227.34	1.315
Xenon	0.2794	1.50	0.419
Krypton	0.0206	6.33	0.130
Cäsium	0.0510	0.78	0.040
Tellur	4.11E-06	12.71	0.000
Strontium	5.66E-07	12.64	0.000

In Abb. 6.34 wird die Temperaturverteilung bei  $t = 700$  s zwischen der Standardrechnung (ohne Spaltprodukte) und der neuen Rechnung (mit Xe, Kr und CsI) qualitativ verglichen. Es zeigt sich ein deutlicher Anstieg der Temperaturen im THAI-Behälter bei einer Berücksichtigung der frei werdenden Zerfallswärme. In Abb. 6.35 werden die jeweiligen Dampfkonzentrationsverteilungen bei  $t = 700$  s miteinander verglichen. Hier zeigt sich eine deutliche Veränderung der Dampf-Verteilung im THAI-Behälter.



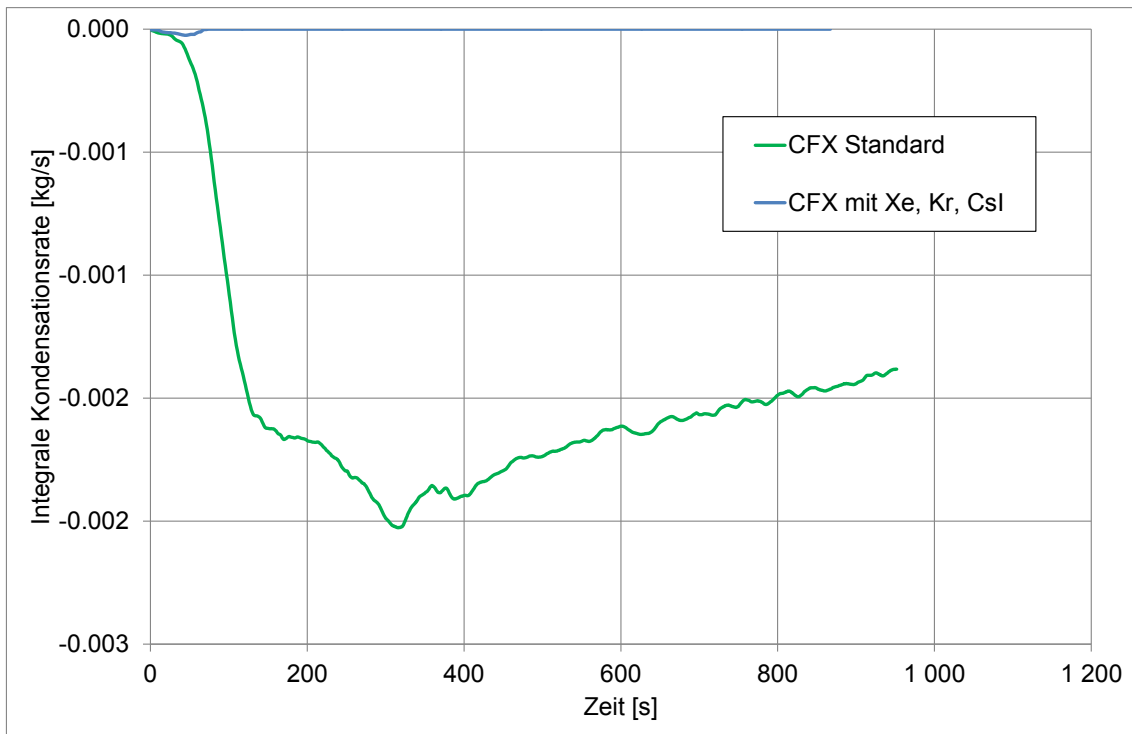
**Abb. 6.34** Temperaturverteilung (links: Standard, rechts: mit Xe, Kr, CsI)



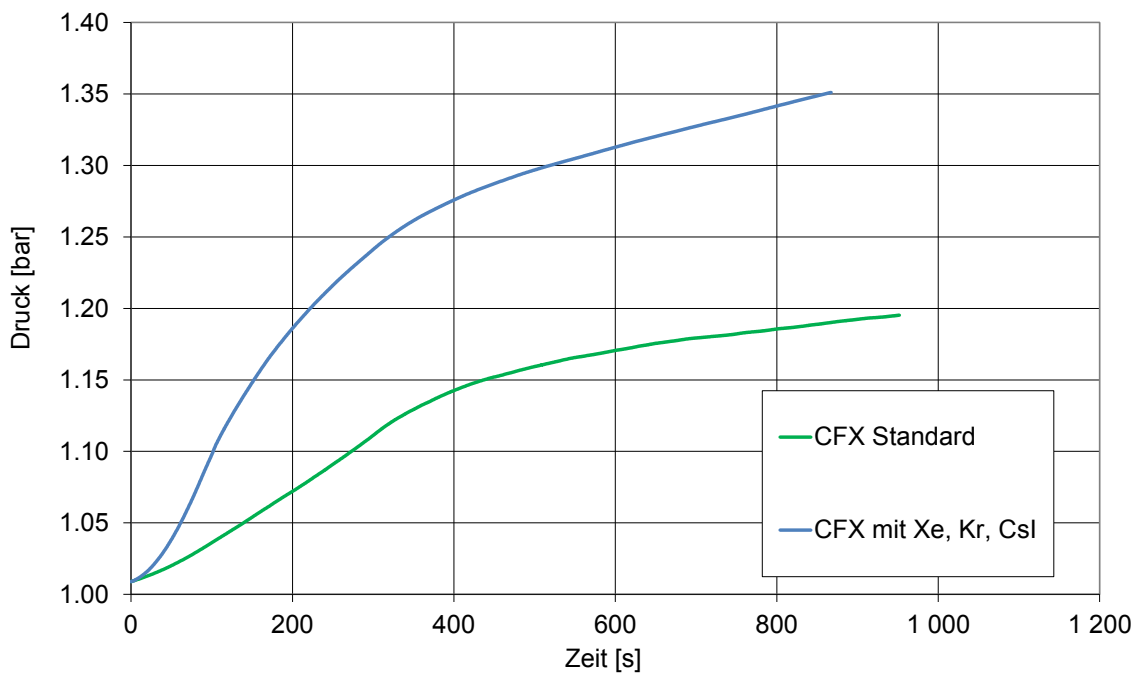
**Abb. 6.35** Dampfkonzentrationen (links: Standard, rechts: mit Xe, Kr, CsI)

Die Temperaturerhöhung durch die Zerfallswärme führt zu einer deutlichen Reduzierung der Volumenkondensationsrate fast auf 0 kg/s (siehe Abb. 6.36). Dafür steigt dann die Wandkondensationsrate entsprechend an (hier nicht gezeigt), so dass die gesamte Kondensationsrate etwa gleich bleibt. Weiterhin führt die zusätzliche Zerfallswärme zu einem starken Anstieg des Drucks im THAI-Behälter (siehe Abb. 6.37).

Die CsI-Partikel haben wegen ihres geringen Durchmessers (2  $\mu\text{m}$ ) auch nur eine relativ niedrige Sedimentationsgeschwindigkeit von ca.  $5.4\text{e-}4$  m/s. Diese fällt im Verhältnis zu den durch Ausströmung, Auftrieb usw. erzeugten Strömungsgeschwindigkeiten kaum ins Gewicht. Deshalb liegt im Gas eine ähnliche Verteilung der CsI-Partikel vor, wie beim Xe oder beim Kr. Allerdings kommt es an den Wänden des THAI-Behälters zu einer Ablagerung der CsI-Partikel, die nur bei diesen Partikeln auftritt, nicht jedoch bei den Edelgasen.



**Abb. 6.36** Einfluss der Zerfallswärme auf die Volumenkondensationsrate

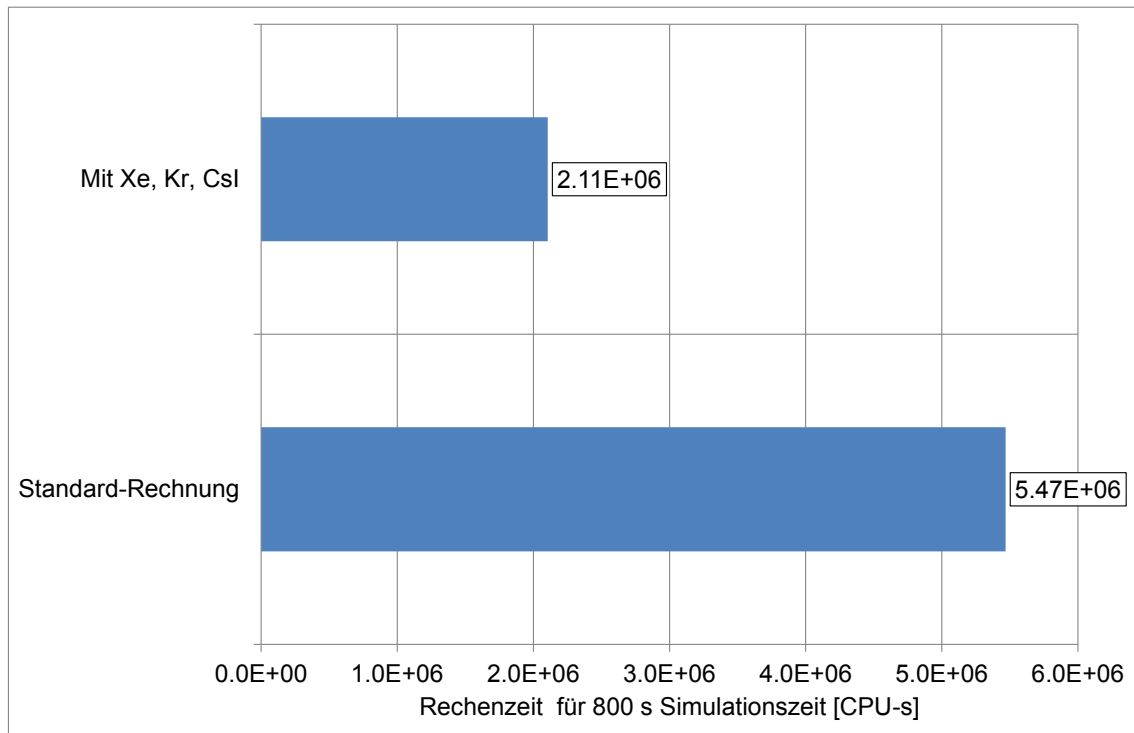


**Abb. 6.37** Einfluss der Zerfallswärme auf den Druck im THAI-Behälter

Prinzipiell hat diese Beispielrechnung gezeigt, dass die Verteilung radioaktiver Edelgase und von Aerosolen, die Abgabe von Zerfallswärme sowie die Sedimentation und Ablagerung von Aerosolen mit CFX gut berechenbar sind. Der Einfluss auf Größen wie

Temperatur, Druck, Kondensation, Gasverteilung usw. ist recht deutlich und sollte auch bei zukünftigen Unfall-Rechnungen im Containment berücksichtigt werden.

Betrachtet man noch den Vergleich der Rechenzeiten für die beiden Simulationen mit und ohne Spaltprodukte, so stellt sich heraus, dass die Berechnung mit Spaltprodukten sogar weniger Rechenzeit verbraucht als die Berechnung ohne Spaltprodukte (siehe Abb. 6.38). Grund hierfür ist möglicherweise die Reduzierung der Volumenkondensation und dadurch bedingt ein allgemein besseres Konvergenzverhalten.



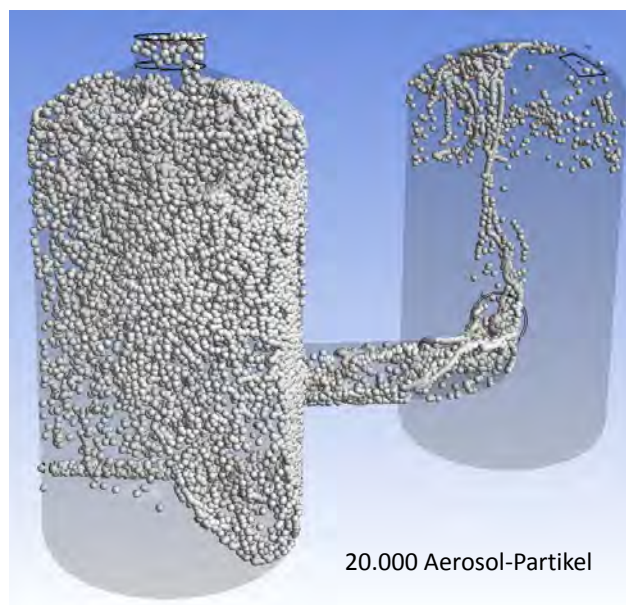
**Abb. 6.38** Vergleich der Rechenzeiten für 800 s Simulationszeit

## 6.6 Ergänzende Analyse zur Partikelstatistik

Wird in einem Störfall ein Aerosol freigesetzt, so handelt es sich in der Regel um eine sehr große Anzahl von Aerosolpartikeln, die sich durch das Containment bewegen. 1 kg Csl besteht beispielsweise aus etwa  $5 \cdot 10^{13}$  Partikeln, wenn man von einer mittleren Dichte von  $2.25 \text{ g/cm}^3$  und einem mittleren Partikeldurchmesser von  $2.60 \mu\text{m}$  ausgeht (Daten aus dem KAEVER-Experiment, siehe oben). Auch mit einer zukünftig fortschreitenden Verbesserung der Leistungsfähigkeit von Rechnern können – bei so großen Anzahlen von Partikeln – nicht alle einzeln auf ihrem Weg durch das Containment nachverfolgt werden. Daraus ergeben sich die folgenden Fragen:

1. Kann die Gesamtzahl der Aerosolpartikel bei ihrem Weg durch das Containment durch eine geeignete kleinere Anzahl von Partikeln vertreten werden?
2. Wie groß muss eine solche *repräsentative Stichprobe* sein?

Um diese Fragen zu beantworten, wurden Testrechnungen mit der PANDA-Geometrie durchgeführt. Hierbei wurde angenommen, dass jeweils Csl mit einem Massenstrom von 0.5 g/s und einem Partikeldurchmesser von 2.60  $\mu\text{m}$  zusammen mit einem Luftmassenstrom (als Trägergas) in den PANDA-Behälter eingespeist wird und die Verteilung der Partikel 100 s lang beobachtet. Abb. 6.39 zeigt beispielhaft die Verteilung von 20 000 Csl-Aerosol-Partikeln im PANDA-Behälter. Die Csl-Partikel geben bei dieser Testrechnung 100 kW Zerfallswärme pro kg Csl ab.



**Abb. 6.39** Verteilung der Csl-Partikel im PANDA-Behälter (Die Partikel sind zur besseren Sichtbarkeit vergrößert.)

In Tab. 6.8 sind die numerischen Parameter für die Testrechnungen angegeben. Als Aerosolmodell für diese statistische Analyse wird das Lagrange Particle Tracking Modell verwendet. Tab. 6.9 zeigt die Zahlen für die eigentliche statistische Analyse. Die Gesamtzahl aller Csl-Aerosolpartikel ( $5\text{E}+13$  Partikel / kg) wird bei jeder Rechnung durch eine Stichprobe ersetzt. Hierbei werden Stichprobengrößen von  $1.0\text{E}+5$  Partikeln pro kg Csl bis hin zu  $2.5\text{e}7$  Partikel pro kg verwendet. Hierbei wird dann z. B. 1 kg Csl durch  $1.0\text{e}5$  Partikel *repräsentiert*. Das bedeutet nicht, dass 1 kg Csl aus  $1.0\text{E}+5$  Partikeln besteht. Ein Kilo Csl enthält auch weiter  $5\text{E}+13$  Partikel, aber nur  $1.0\text{E}+5$  dieser Partikel werden in der CFX-Simulation betrachtet und ihr Weg durch die

Geometrie nachverfolgt. Die These ist, dass die Abweichung zwischen den einzelnen Simulationsergebnissen mit größer werdender Partikelzahl immer kleiner wird (nach Bernoulli: Gesetz der großen Zahlen /WIK 15a/). Diese These wird im Folgenden geprüft.

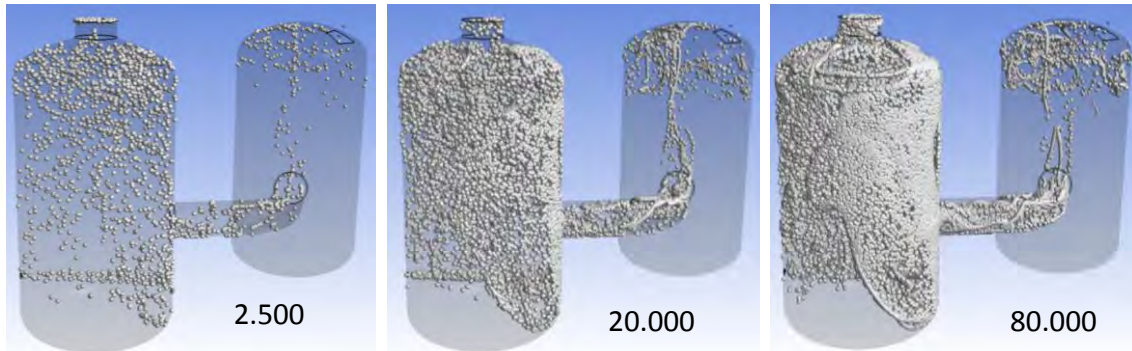
**Tab. 6.8** Infobox für die PANDA-Rechnungen

Experiment	PANDA / Testbeispiel zur statistischen Analyse
Phänomene	Ausbreitung von Aerosolpartikeln in einer Luftströmung, Abgabe von Zerfallswärme
Elementzahl	294 280
Materialien	Air Ideal Gas, Csl (Partikel)
Turbulenzmodell	SST
Aerosolmodell	Lagrange Particle Tracking Modell
Konvergenz	RMS < 0.0001
CFX-Version	15.0

**Tab. 6.9** Partikelzahlen (Stichprobengröße) in den einzelnen Testrechnungen

Rechnungs- Nummer	(Repräsentative) Partikel- zahl pro Kilogramm Csl	Freigesetzte Partikel insge- samt nach 100 s (in Tausend)
1	1.0E+5	5
2	5.0E+5	25
3	1.0E+6	50
4	1.5E+6	75
5	2.0E+6	100
6	2.5E+6	125
7	3.0E+6	150
8	6.0E+6	300
9	1.0E+7	500
10	1.5E+7	750
11	2.0E+7	1 000
12	2.5E+7	1 250

In Abb. 6.40 sind die Rechenergebnisse für unterschiedliche Partikelzahlen dargestellt. Es kann grob gesagt werden, dass die räumliche Verteilung der Partikel in den zwei PANDA-Behältern ähnlich ist, während die Partikeldichte natürlich mit der Anzahl steigt.



**Abb. 6.40** Partikelverteilung bei unterschiedlicher Stichprobengröße

In Abb. 6.41 ist die Temperaturverteilung im 1. PANDA-Behälter dargestellt. Die Temperaturerhöhung ergibt sich ausschließlich aus der frei werdenden Zerfallswärme der CsI-Partikel und aus ihrer räumlichen Position im zeitlichen Verlauf. Die Schnittbilder sehen alle relativ ähnlich aus, so dass es schwierig ist, aus dem optischen Eindruck eine quantitative Beurteilung zu treffen. Es fällt aber bei der Temperaturverteilung mit nur 5000 Partikeln auf, dass diese sich noch deutlicher von der Rechnung mit 1 250 000 unterscheidet. Die Rechnungen mit 500 000 und 1 250 000 hingegen lassen sich optisch nur schwer unterscheiden.

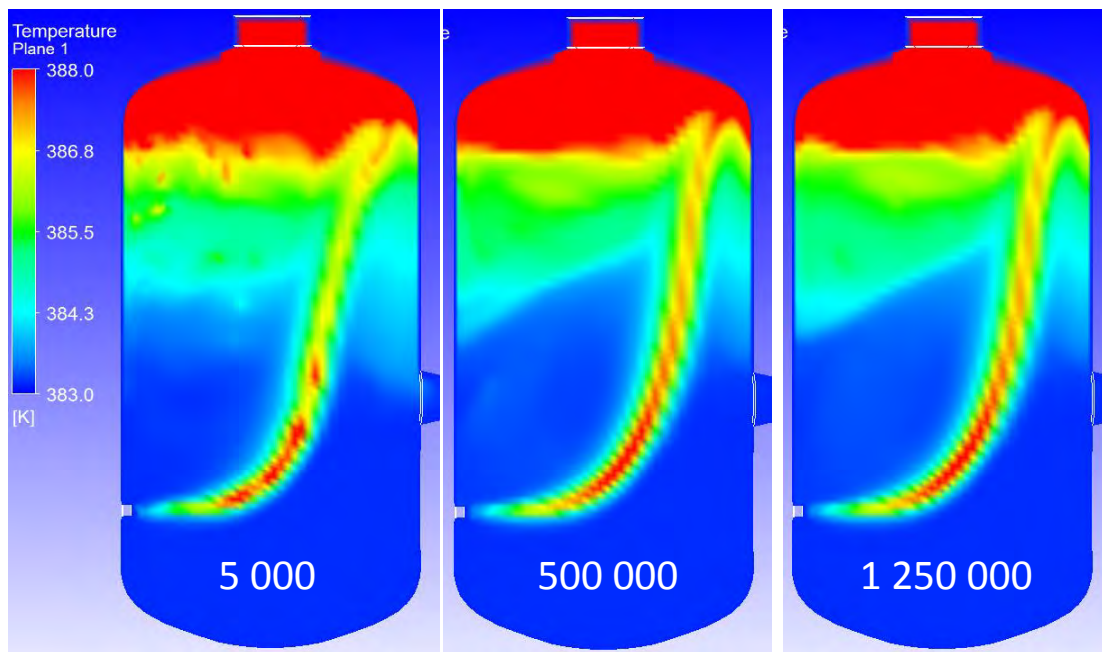
Einen quantitativen Vergleich kann man bekommen, wenn man für jeden Punkt des Volumens die Temperaturdifferenz berechnet. Abb. 6.42 zeigt diese Temperaturdifferenz zwischen der Rechnung mit den wenigsten Partikeltracks (5 000) und der Rechnung mit den meisten Partikeltracks (1 250 000). Berechnet man den Mittelwert dieser Temperaturdifferenzen und teilt ihn durch den absoluten Temperaturanstieg, so bekommt man ein Maß für die relative Temperaturabweichung bzw. einen relativen Fehler:

$$\text{Relativer Fehler} = \frac{\text{Mittelwert}(\text{Abs}(T_{320000} - T_{2500}))}{\text{Mittelwert}(\text{Temperaturanstieg})} \quad (6.8)$$

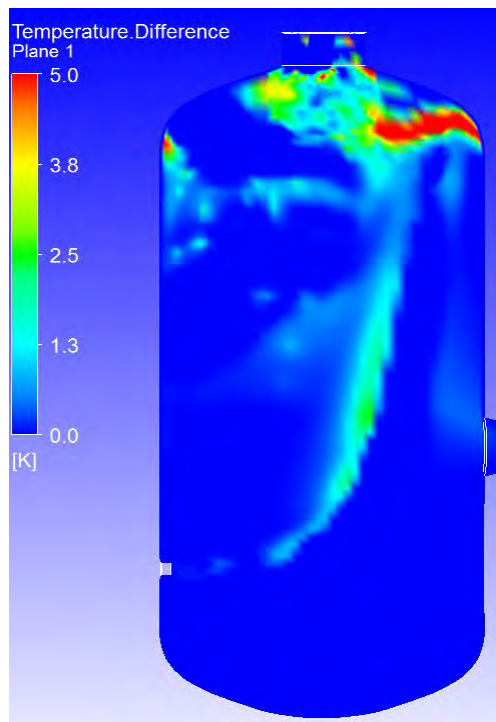
Die Bezeichnung als relativer „Fehler“ stammt aus der (noch ungeprüften) Annahme, dass die Berechnung mit den meisten Partikel-Tracks am nächsten an der richtigen Lösung liegt und dass es bei großen Zahlen zu einer Konvergenz gegen einen festen



Wert kommt. Um das zu prüfen, wurde für alle Berechnungen die Abweichung zur Rechnung mit 1 250 000 Partikeln bestimmt. Das Ergebnis ist in Abb. 6.43 dargestellt.

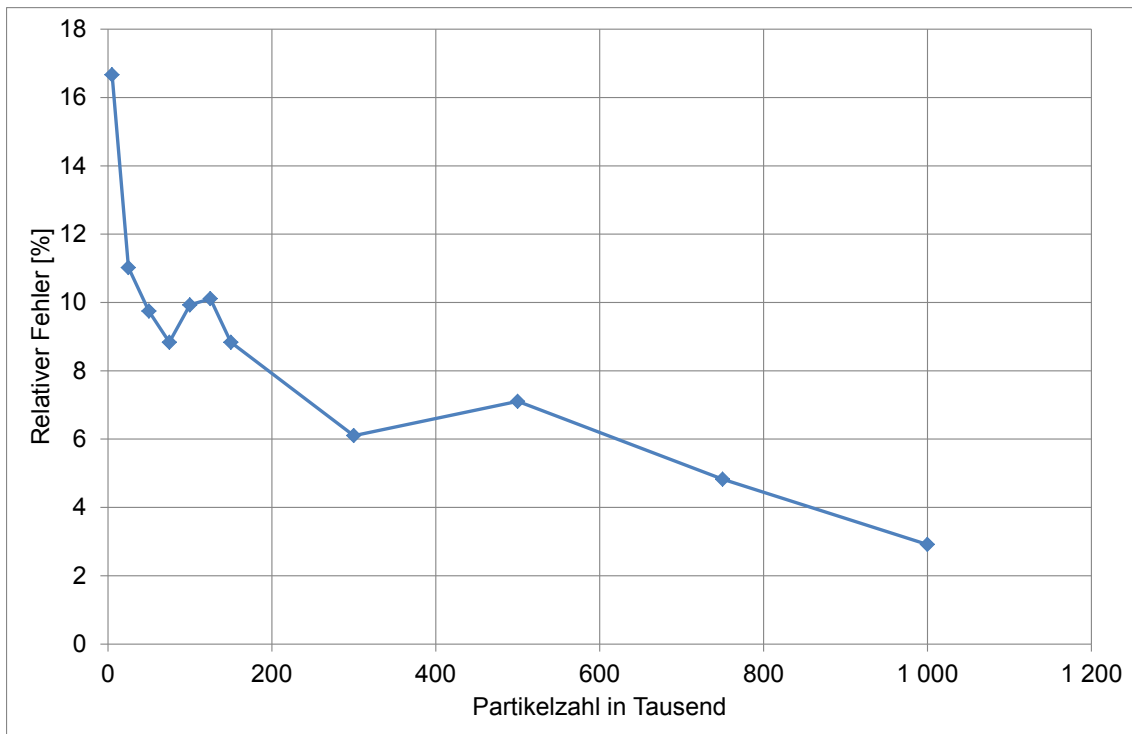


**Abb. 6.41** Temperaturverteilung im 1. PANDA-Behälter bei  $t = 100$  s für unterschiedliche Partikelzahlen



**Abb. 6.42** Temperaturdifferenz zwischen den zwei Rechnungen mit 5 000 und mit 1 250 000 Partikeln

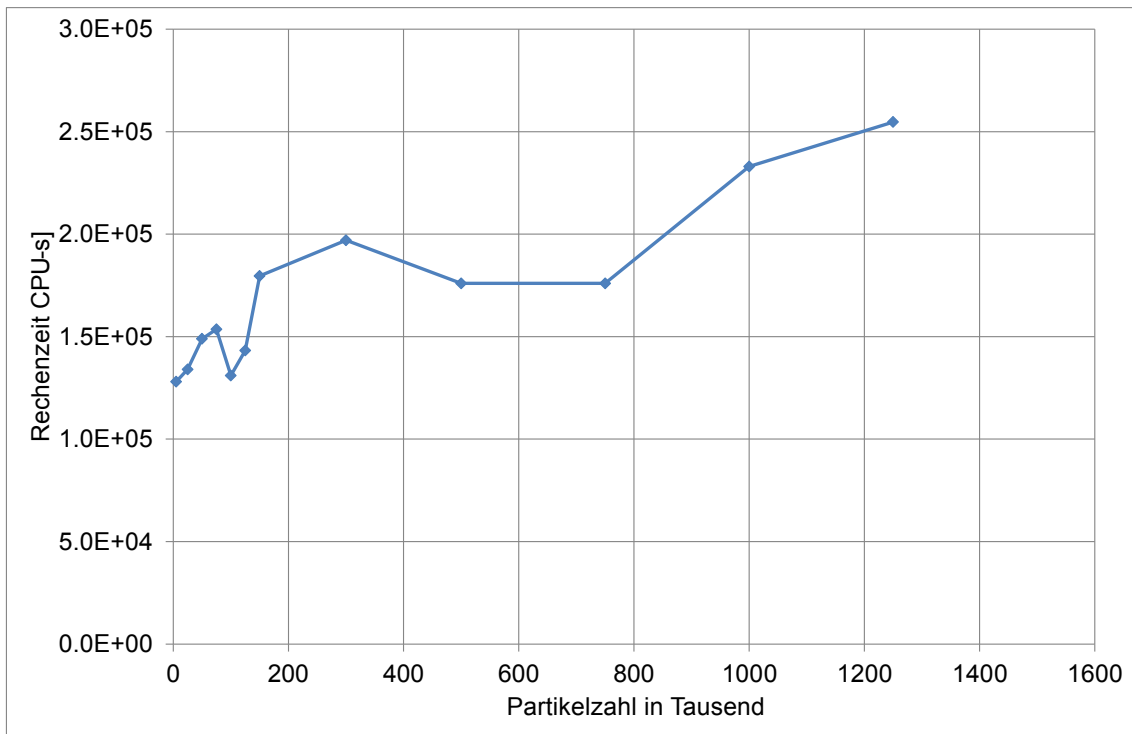




**Abb. 6.43** Abhängigkeit des relativen Fehlers von der Partikel- bzw. Trackzahl

Es zeigt sich in Abb. 6.43, dass – wie erwartet – der relative Fehler mit steigender Partikelzahl abnimmt. Während er bei 5 000 Partikeln noch bei etwa 17 % liegt ist er bei 1 000 000 Partikeln auf etwa 3 % gesunken. Auch im Bereich von 1 000 000 Partikeln zeigen sich damit noch kleine lokale Fluktuationen im Temperaturfeld. Und je nach gewünschter Genauigkeit müssen also mehr oder weniger Partikel-Tracks berechnet werden. Damit konnte das Gesetz der großen Zahlen zumindest bis zu einer gewissen (Genauigkeits-)Grenze nachgewiesen werden.

Abb. 6.44 zeigt, dass es nicht unbedingt einen linearen Zusammenhang zwischen Partikelzahl und Rechenzeit (in CPU-s) gibt. Woher die Schwankungen kommen, ist unklar. Es kommt jedoch bei erhöhter Partikelzahl nicht zu einer deutlichen Steigerung der Rechenzeit. Allerdings ist ein erhöhter Bedarf an Speicherplatz notwendig (Arbeitsspeicher muss allokiert werden).



**Abb. 6.44** Abhängigkeit der Rechenzeit von der Partikel-Anzahl

## 6.7 Zusammenfassung

Ziel der in diesem Arbeitspunkt durchgeführten Arbeiten war es zu untersuchen, inwieweit sich das Aerosol- und Spaltproduktverhalten im Sicherheitseinschluss mit CFD-Simulationen sinnvoll und hinreichend abbilden lässt. Hierzu wurden unterschiedliche Phänomene (Ausbreitung, Sedimentation, Agglomeration, Edelgase, Zerfallswärme) einzeln als auch in Kombination untersucht.

Zu den Phänomenen Sedimentation und Ablagerung von Aerosolpartikeln wurden Berechnungen mit einer vereinfachten Testgeometrie sowie die Nachrechnung eines KAEVER-Versuches durchgeführt. Es zeigt sich, dass die Ablagerung dem Stokes-Gesetz folgt. Im KAEVER-Versuch wird das Absinken der (luftgetragenen) Csl-Konzentration qualitativ richtig vorhergesagt. In CFX sinkt die Csl-Konzentration zwar etwas schneller als im Experiment, da es aber noch eine Reihe von (experimentellen) Unsicherheiten gibt, ist das Ergebnis auf jeden Fall zufriedenstellend.

Zum Aspekt der Ausbreitung von Aerosolen mit der Gasströmung wurde das Verhalten in einem Aerosolspektrometer simuliert, die Nachrechnung eines Versuches aus der STORM-Versuchsreihe durchgeführt sowie das Verhalten von Partikeln in einer Impak-

torstufe berechnet. Bei der Simulation des Aerosolspektrometers zeigte die CFX-Rechnung das Partikelverhalten bzw. die Reichweite, wie sie auch theoretisch vorhergesagt wird. Diese Aussage stimmt sowohl für das Algebraic Slip Modell als auch für das Lagrange Particle Tracking Modell, die beide für die Simulation des Aerosolspektrometers verwendet wurden. Bei der Simulation des STORM-Versuches musste noch ein zusätzliches Modell zur Beschreibung der Thermophorese implementiert werden. Mit dieser Ergänzung konnte dann das Ausbreitungs- und Ablagerungsverhalten der Aerosole in guter Übereinstimmung mit dem Versuch berechnet werden. Beim Impaktor spielt zusätzlich zur Ausbreitung auch noch die Trägheit der Partikel eine Rolle. In diesem Fall zeigte sich eine bessere Übereinstimmung mit dem theoretischen Verhalten bei einer Verwendung des Lagrange Particle Tracking.

Die Agglomeration von Aerosolpartikeln wurde anhand eines Testbeispiels mit einem zweifach umgelenkten Gasstrom untersucht. Anhand dieses Beispiels konnte gezeigt werden, dass sich eine partikelzahlabhängige Agglomerationsrate berechnen lässt. Mit Hilfe dieses Wertes kann man dann in CFX den Übergang von einer Partikel(-größen-)klasse in eine andere Größenklasse beschreiben. Die einzelnen Größenklassen werden dabei von unterschiedlichen CFX-Komponenten repräsentiert, was auch den Rechenaufwand erhöht. Zur Beschreibung des Überganges zwischen den Größenklassen werden in CFX Quell-Terme und Senken verwendet. Die Berechnung des Testbeispiels zeigte plausible Ergebnisse.

Die Ausbreitung von Edelgasen mit der Gasströmung wurde durch die Einspeisung von Xenon in ein Testvolumen analysiert. An diesem Beispiel wurde auch der Einfluss der vom Xenon abgegebenen Zerfallswärme an die Behälteratmosphäre untersucht. Grundsätzlich lässt sich die Ausbreitung von Edelgasen wie Xenon oder Krypton sehr gut mit CFX berechnen, da sie im Verhalten sehr ähnlich zu anderen schon in CFX untersuchte Edelgase (He, H) sind. Einziger Unterschied ist die frei werdende Zerfallswärme. Wird diese Wärme in Form von  $\alpha$ - oder  $\beta$ -Strahlung frei, so kann diese Wärmeabgabe in CFX als volumetrische Wärmequelle am Freisetzungsort modelliert werden. Dies wurde im Testbeispiel durchgeführt. Handelt es sich um  $\gamma$ -Strahlung, so kann diese ähnlich wie Wärmestrahlung mit Hilfe des in CFX bereits vorhandenen „Radiation Heat Transfer“ Modells beschrieben werden. Es zeigte sich in dem Testbeispiel, dass die Abgabe von Zerfallswärme einen deutlichen Einfluss auf alle thermodynamischen Größen (Temperaturen, Druck, Gaskonzentrationen) hat. Dies ist ein wichtiges Argument für eine Berücksichtigung der Spaltprodukte und ihrer Zerfallswärme bei einer Containment-Simulation mit CFX.

In einer weiteren Testrechnung wurde die kombinierte Freisetzung sowohl von Aerosolen (CsI), als auch von radioaktiven Edelgasen in den THAI-Behälter und die damit verbundene Spaltproduktverteilung und auch deren Wärmeabgabe simuliert. Hierbei zeigte sich, dass sich diese Prozesse auch ohne eine Erhöhung der Laufzeiten für die Berechnung integrieren lassen. Ob diese Aussage zu den Laufzeiten nur für das vorliegende Beispiel gilt oder allgemein, kann aber noch nicht gesagt werden.

Grundsätzlich zeigt sich, dass sich einige wesentliche Aspekte des Spaltproduktverhaltens im Containment sinnvoll mit CFX abbilden lassen. Hierzu stehen insbesondere zwei Modelle (Algebraic Slip und Lagrange Particle Tracking) zur Verfügung, die unterschiedliche Stärken und Schwächen aufweisen.



## **7           Arbeitspunkt 1.6 – Leichtgasschichtung**

Die Simulation der Auflösung von stabilen Leichtgasschichten war ein wichtiger Arbeitspunkt im Forschungsvorhaben RS1500 /SCH 14/ und wird generell als noch nicht abschließend geklärte Fragestellung angesehen. Im Forschungsvorhaben RS1500 konnte ein Fortschritt bei der Simulation solcher Phänomene erzielt werden, der sich gegenüber den Ergebnissen von ISP-47 in einer deutlich besseren Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation bei Versuchsnachrechnungen vom SETH ST2.1, SETH ST1.4 und bei den Ergebnissen des MiniPanda-Benchmarks zeigt. Mit den bisher gewonnenen Erfahrungen möchte sich die GRS am OECD/NEA PSI Benchmark zur Auflösung einer stabilen Leichtgasschichtung beteiligen.

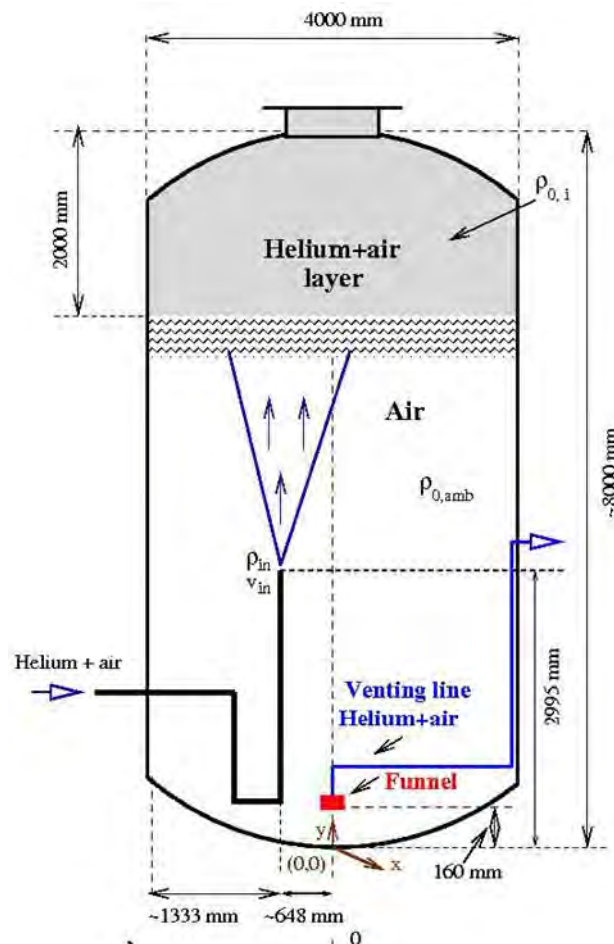
Im Rahmen des OECD/NEA-Projekts HYMERES werden in der Serie 1a und 1b in der Panda-Anlage mehrere Versuche zu diesem Themengebiet durchgeführt. In ihnen wechselwirkt ein horizontaler/vertikaler Jet/Plume mit einem Strömungshindernis und erodiert danach eine stabile Heliumschicht. Helium wird dabei als Simulant für H<sub>2</sub> eingesetzt. Die Wechselwirkung eines Jets mit einem Strömungshindernis ist bisher noch nicht Teil der Validierungsmatrix von CFX. Da dieses Phänomen auch für Containment-Anwendungen von Bedeutung sein kann, ist die Nachrechnung von jeweils einem Versuch mit horizontaler/vertikaler Einspeisung vorgesehen.

### **7.1           Teilnahme am OECD/NEA-PSI Benchmark zur Auflösung einer stabilen Leichtgasschichtung**

#### **7.1.1       Kurze Versuchsbeschreibung**

Der Versuch wurde am PANDA-Versuchsstand des Paul-Scherer Instituts durchgeführt. (Abb. 7.1). Ein Behälter der PANDA-Anlage, in dem das Experiment durchgeführt wurde, wurde isoliert. Der übrige Teil des PANDA-Versuchsstands (Verbindungsrohr und 2. Behälter) nahm am Experiment nicht teil. Im oberen Bereich (ca. 5.3 m Höhe) wurde eine stabile Heliumschichtung mit einer maximalen Heliumkonzentration von 37 Vol.-% erzeugt. Diese stabile Leichtgasschicht wurde durch einen Luftstrahl erodiert. Die Luft trat durch ein vertikales Rohr (Höhe der Öffnung 2.995 m) aus. Das Rohr war um 0.648 m von der Zylinderachse versetzt. Der Massenstrom der Lufteinspeisung betrug 21.53 g/s und die Temperatur 23 °C – 29 °C. Durch eine Venting-Leitung wurde

der Druck konstant auf 0.994 bar gehalten. Die Öffnung der Venting-Leitung befand sich im unteren Bereich des PANDA-Behälters (Höhe 0.16 m).



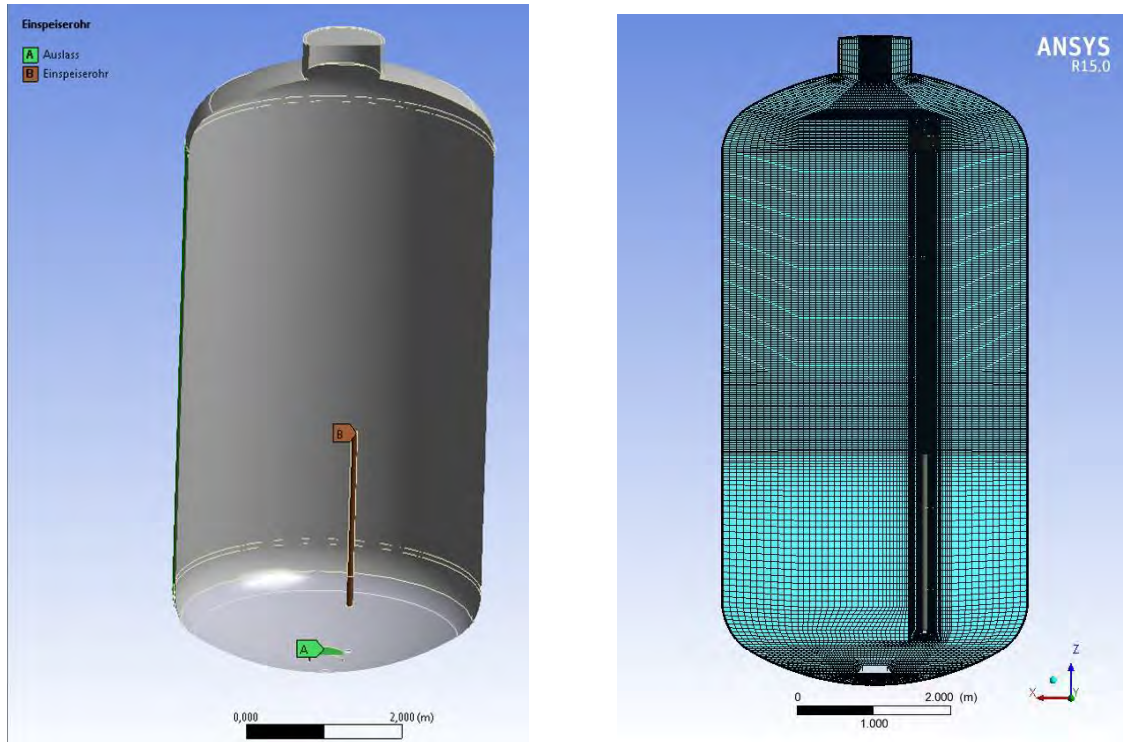
**Abb. 7.1** Schematische Darstellung des Experiments /AND 13/

### 7.1.2 CFD-Gitter

Das PSI hat den Teilnehmern CAD-Daten für die PANDA-Anlage zur Verfügung gestellt. Diese Daten wurden vereinfacht und modifiziert, so dass sie nur noch die Details der Anlage enthalten, die in den CFX-Simulationen berücksichtigt werden sollten. Insbesondere wurden kleine Flansche aus den CAD-Daten entfernt und das Rohr zur Luft-einspeisung geometrisch vereinfacht. Die Venting-Vorrichtung wurde zusätzlich in die CAD-Daten integriert.

Die so generierte CAD-Datei (Abb. 7.2, links) diente als Ausgangspunkt für die Gitter-erzeugung. Das für die Benchmarkteilnahme verwendete CFD-Gitter (Abb. 7.2, rechts) bestand aus ca. 1.61 Millionen Elementen, davon waren 1.38 Millionen strukturierte

Zellen (Hexagons). Unterhalb des Auslasses wurde ein unstrukturiertes Gitter (Prismen, Tetraeder) verwendet, um die Gittererzeugung zu erleichtern. Das Gitter wurde im Bereich des Strahls und der Heliumschichtung verfeinert. Die Behälterwände wurden ebenfalls vernetzt.

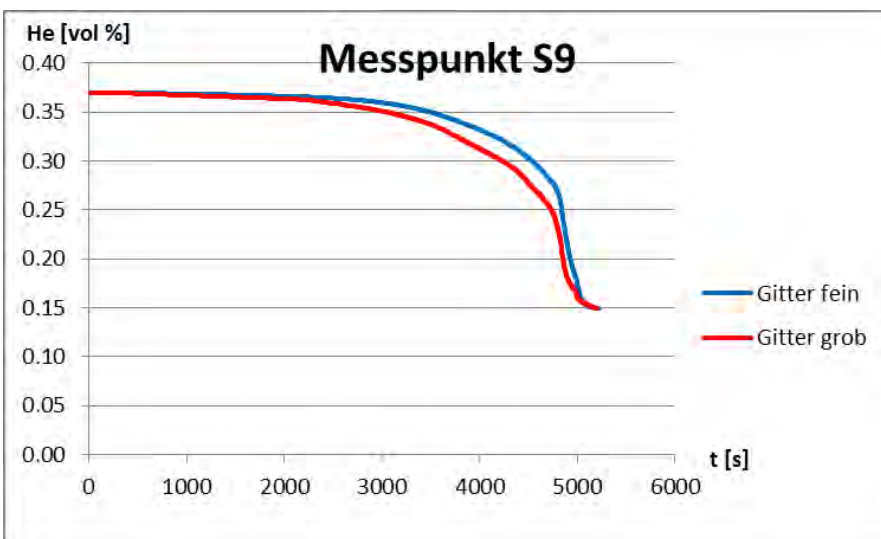
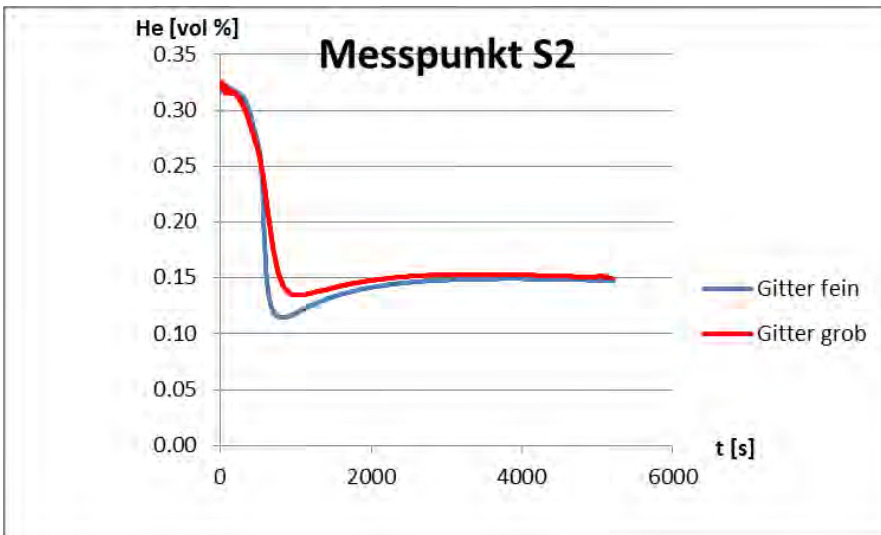
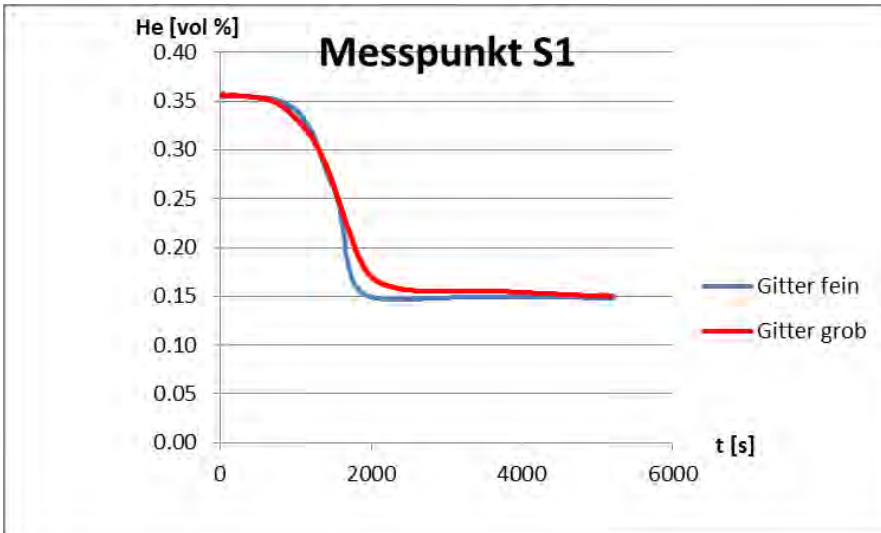


**Abb. 7.2** Links: CAD-Daten, die zur Erzeugung des CFD-Gitters genutzt werden, rechts: Schnitt durch CFD-Gitter

Um den Einfluss der Gitterfeinheit auf das Simulationsergebnis abschätzen zu können, wurde eine Simulation mit einem größeren Gitter durchgeführt. Das größere Gitter besteht aus 491 000 Zellen, von denen 400 000 strukturiert sind.

Die Simulationsergebnisse mit feinem und größerem Gitter unterscheiden sich nur geringfügig (Abb. 7.3). Der Zeitpunkt, an dem die Heliumschichtung abgebaut wurde, ist nahezu identisch (Abb. 7.3, S9), allerdings ist der Abfall der Helium-Konzentration beim größeren Gitter etwas weniger steil. Eine Gitterunabhängigkeit der Simulation konnte nur näherungsweise gezeigt werden. Eine weitere Gitterverfeinerung über die 1.61 Millionen Zellen hinaus wäre daher wünschenswert, um den numerischen Fehler noch weiter zu minimieren, allerdings ist dies gegenwärtig nicht mit einem vertretbaren Aufwand möglich.



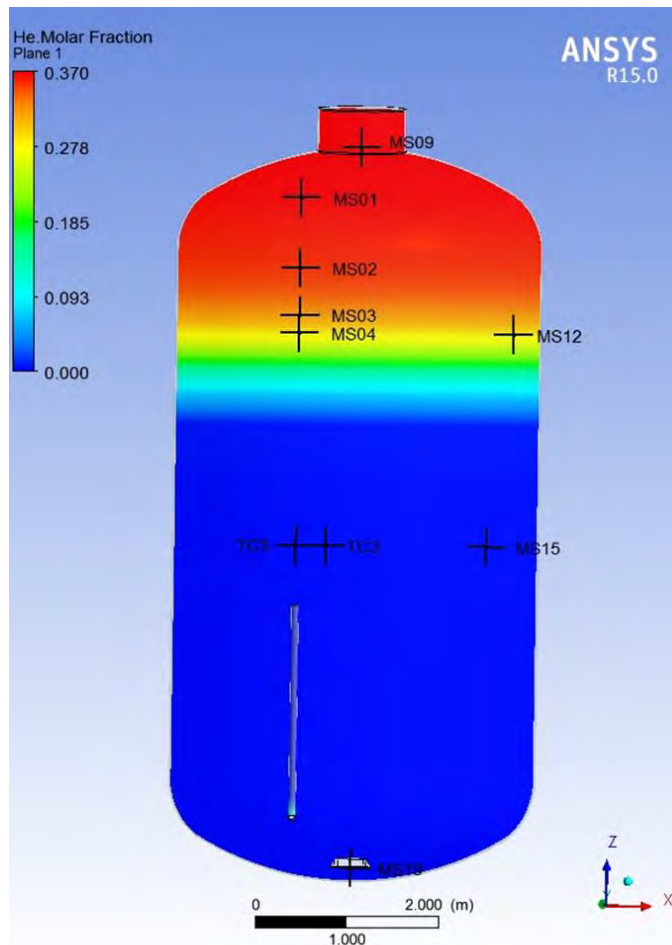


**Abb. 7.3** Heliumkonzentration an den Messstellen S1, S2 und S9 bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter

### 7.1.3 CFD-Modelle

Für die Beteiligung am Benchmark wurden die in RS1500 als optimal identifizierten Modelle verwendet. Luft, Helium und Wasserdampf wurden als ideale Gase simuliert. Die Diffusionskonstanten von Helium und Wasserdampf wurden mit der Fuller-Korrelation berechnet. Für Helium ergab sich bei den hier vorliegenden Temperaturen und Drücken ein Diffusionskoeffizient von ca.  $3.4e-5 \text{ m}^2/\text{s}$ . Die Turbulenz wurde mit dem SST-Modell simuliert. Beide Terme (Production und Dissipation) zur Modellierung von Auftriebseffekten bei der Turbulenz wurden aktiviert. Die Wärmeleitung in den Behälterwänden aus Stahl wurde in CFX simuliert, die Außenwand des PANDA-Behälters wurde als adiabat angenommen. Die Wärmestrahlung wurde mit dem Discrete-Transfer-Modell und der in RS1500 beschriebenen Korrelation für die Absorption von Dampf modelliert. Die Berücksichtigung von Dampf und Wärmestrahlung in der Simulation erfolgte, um eine möglichst einheitliche Modellierung in allen Validierungsrechnungen sicherzustellen. Aufgrund der geringen Dampfkonzentration ( $< 1.2 \text{ Vol.-%}$ ), der geringen Temperatur ( $< 30^\circ$ ) und den insgesamt geringen Temperaturdifferenzen ( $\Delta T \sim 7 \text{ K}$ ) wird aber davon ausgegangen, dass die Berücksichtigung von Wärmestrahlung und auch des Dampfes keinen signifikanten Einfluss auf die Simulation hatte.

Aufgrund der Erfahrungen mit ähnlichen Problemstellungen (z. B. TH-26) wurde als Konvergenzkriterium Max-Residuum  $< 5.0e-4$  gewählt. Bei TH-26 hat sich das Standardkriterium RMS  $< 1.0e-4$  als zu ungenau herausgestellt und zu deutlichen Abweichungen beim Schichtungsabbau geführt.



**Abb. 7.4** Messstellen und Heliumkonzentration zu Beginn des Experiments

## 7.1.4 Simulationsergebnis

### 7.1.4.1 CFX-Simulation

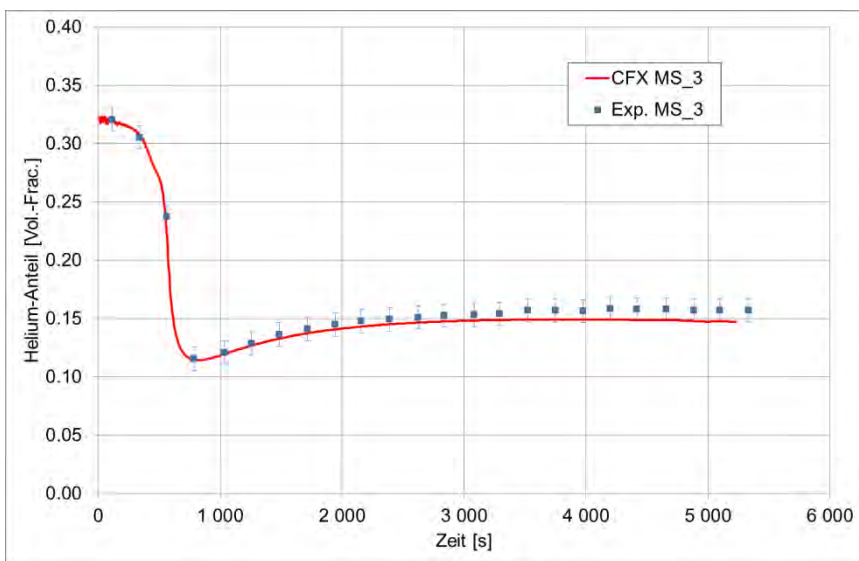
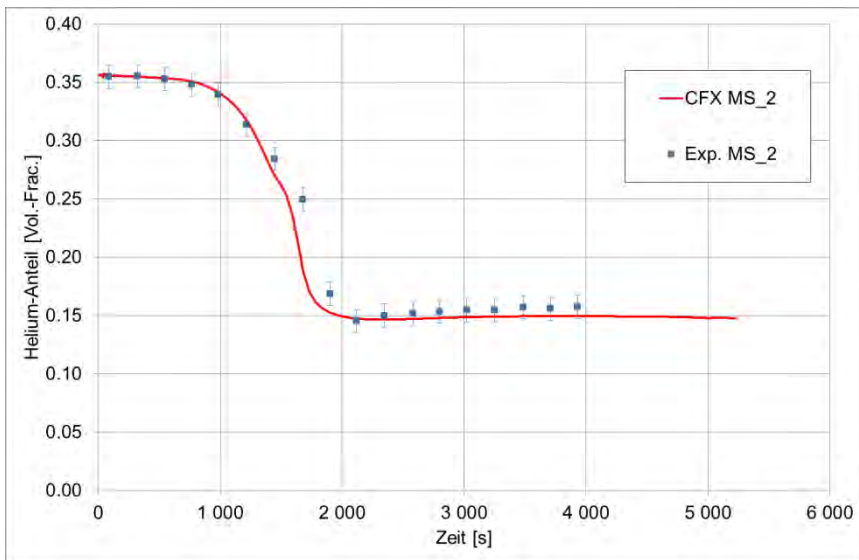
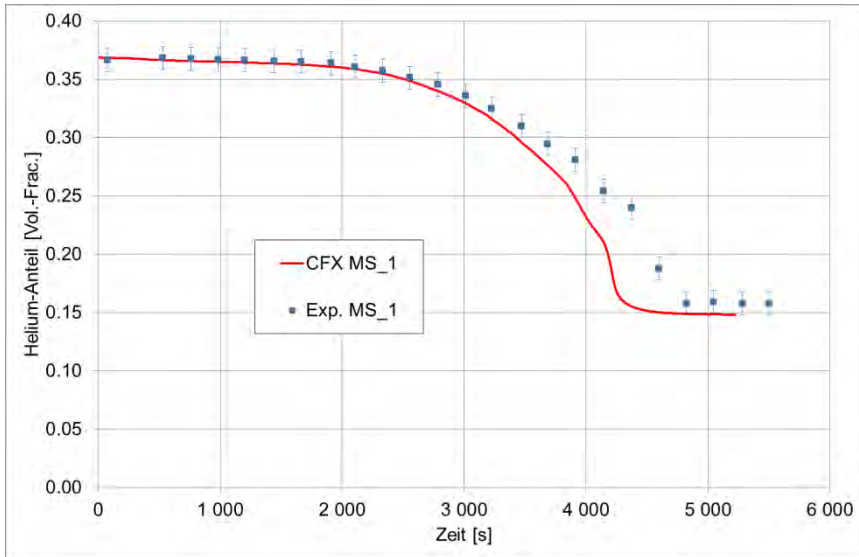
Die GRS hat sich am Benchmark mit einer „blinden“ CFX-15 Simulation beteiligt. Zum Zeitpunkt des Abgabetermins (30.5.2014) lagen Simulationsergebnisse bis ca. 4500 s vor. Die noch ausstehenden 700 s Problemzeit wurden nach dem Abgabetermin berechnet, ohne dass Änderungen an der Modellierung vorgenommen wurden. Die Simulation wurde auf 4 – 16 CPUs durchgeführt. (Aus technischen Gründen wurden mehrere Restarts der Simulation durchgeführt). Die Simulationszeit betrug insgesamt ca. 2 Monate. Der Grund für die lange Rechenzeit war neben dem feinen CFD-Gitter (ca. 1,6 Millionen Zellen) das scharfe Konvergenzkriterium. Die experimentellen Daten wurden dem Benchmark-Report /AND 14/ entnommen. Dort sind auch eine ausführliche

Auswertung des Benchmarks und ein Vergleich der unterschiedlichen Simulationen untereinander zu finden.

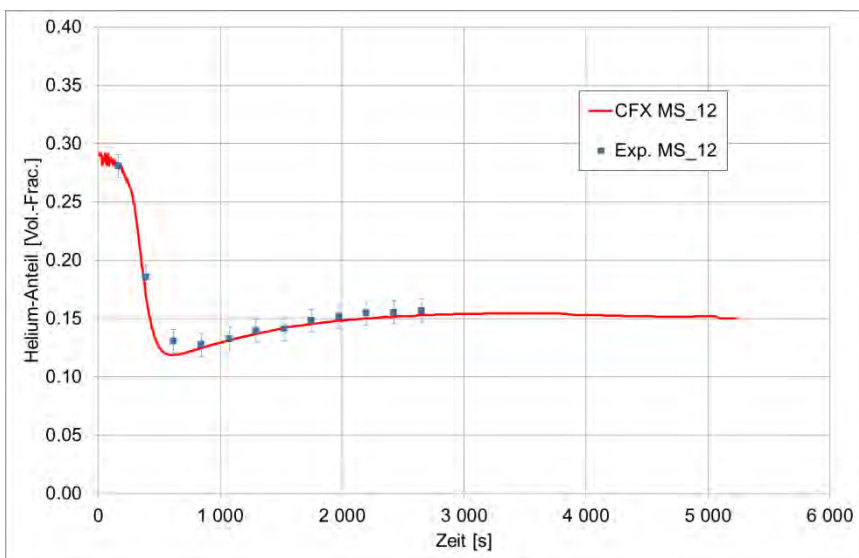
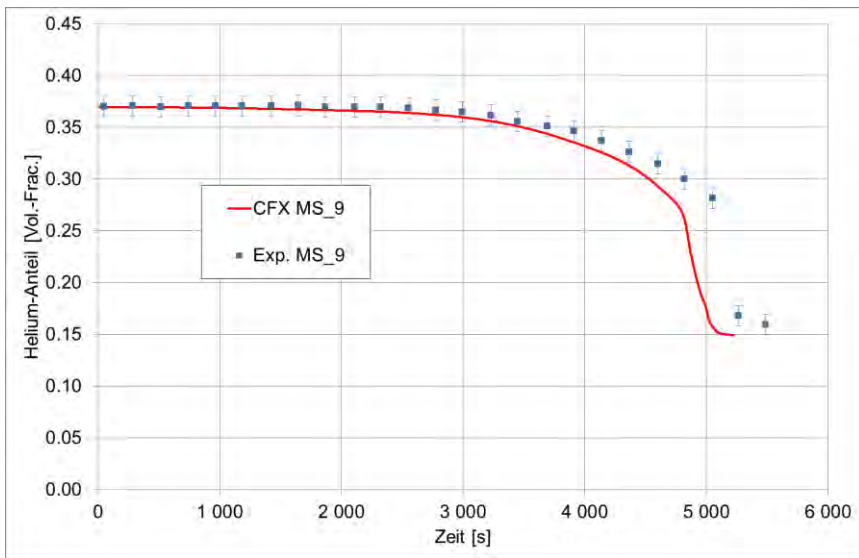
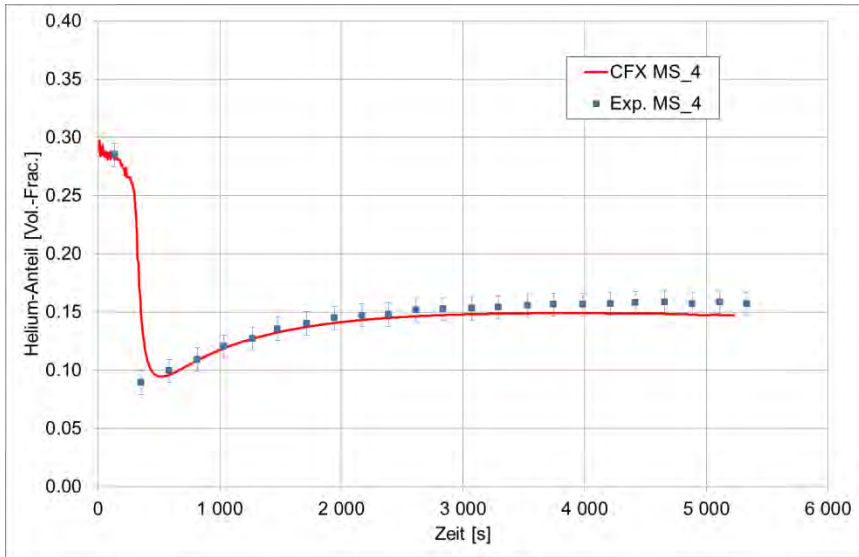
#### **7.1.4.2 Heliumkonzentration**

Im Folgenden werden der gemessene und der berechnete Heliumschichtungsabbau verglichen. Die Heliumkonzentration wurde an verschiedenen Messstellen (Abb. 7.5 – Abb. 7.7) gemessen. Als Messfehler wird eine Unsicherheit von +/- 5 mm hinsichtlich der Position angegeben. Die Genauigkeit der Messung beträgt +/- 0.5 Vol.-%.

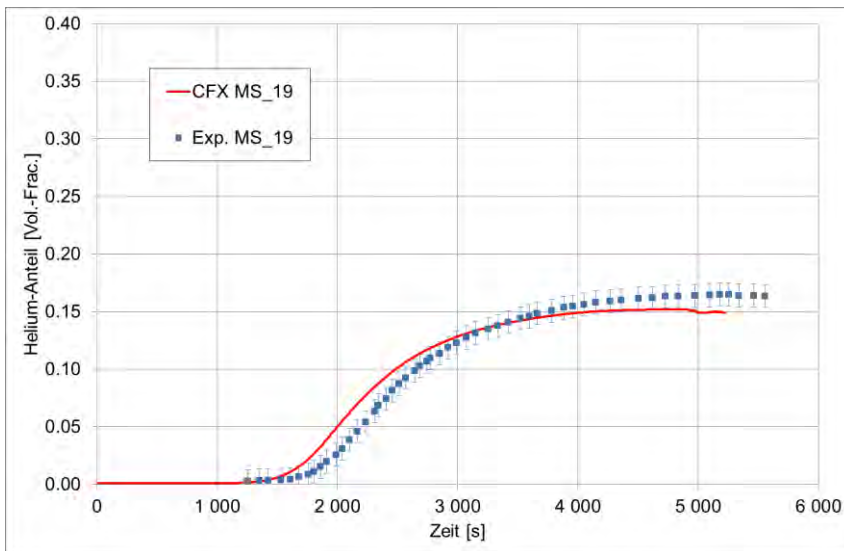
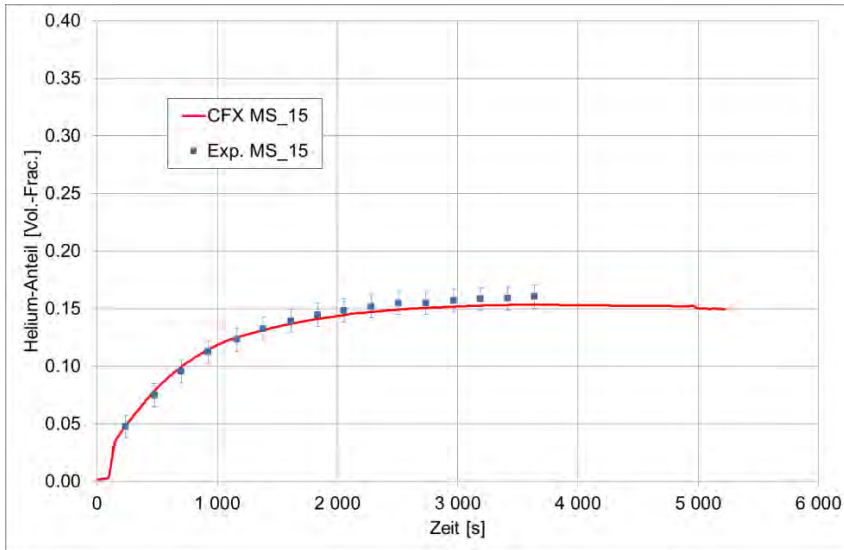
Bei allen Messstellen stimmen die CFX-Simulation und das Experiment sehr gut überein (Abb. 7.5 – Abb. 7.7). Es konnte mit der blinden Simulation die Schichtungsauflösung richtig vorhergesagt werden. In der Simulation erfolgt die Schichtungsauflösung geringfügig schneller als im Experiment. In der Simulation fällt die Heliumkonzentration in der Höhe von 7.479 m nach 4178 s unter 20 Vol.-%, während im Experiment hierfür ca. 4619 s benötigt werden. Die Abweichungen könnten sogar noch etwas geringer ausfallen, da beim Experiment aufgrund der zeitlich geringen Auflösung der Konzentrationsmessungen (Messintervall beträgt bei MS\_1 bis MS\_18  $\Delta t = 226$  s) auch eine geringfügig schnellere Schichtungsauflösung denkbar ist.



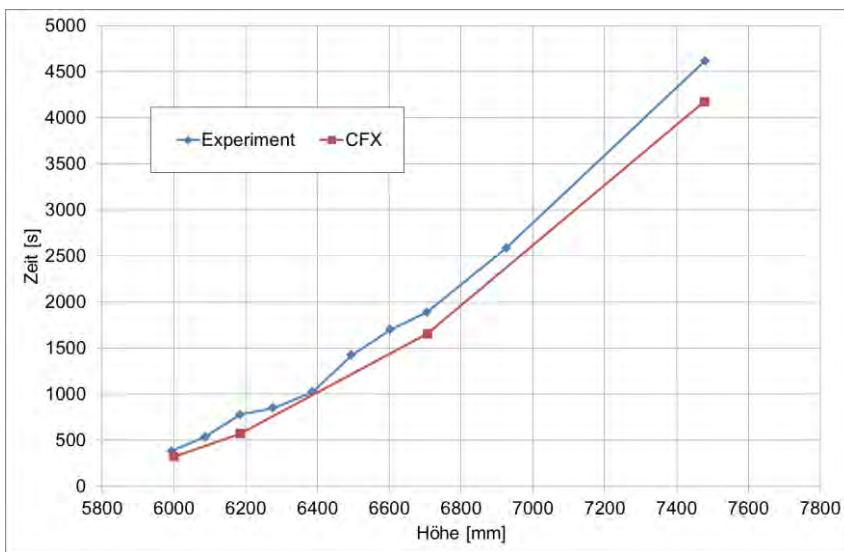
**Abb. 7.5** Heliumkonzentration an unterschiedlichen Messstellen



**Abb. 7.6** Heliumkonzentration an unterschiedlichen Messstellen



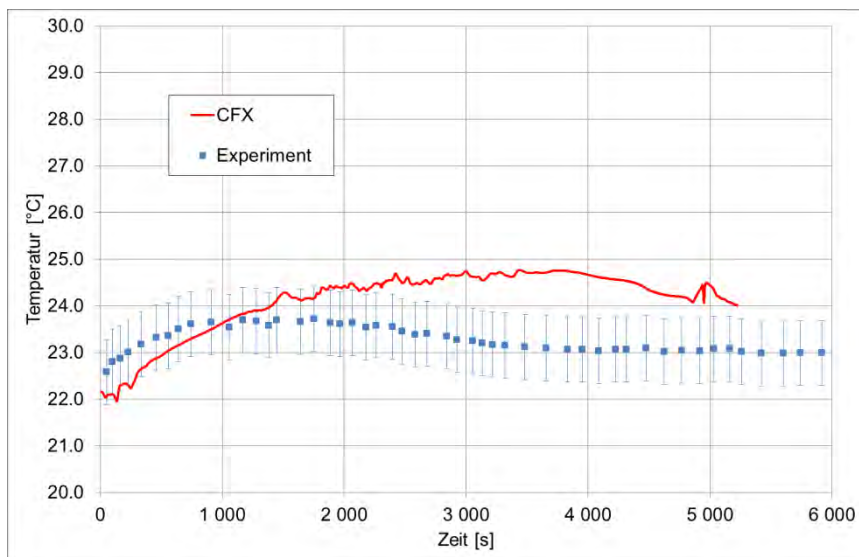
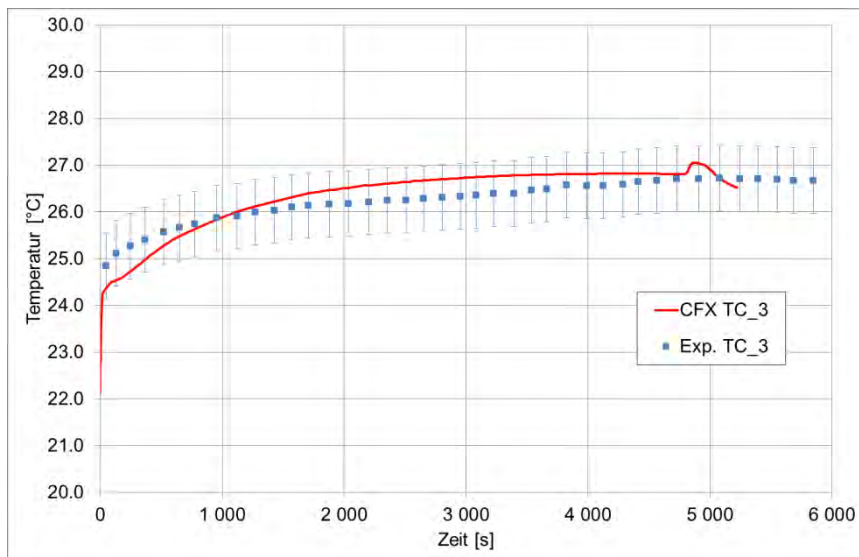
**Abb. 7.7** Heliumkonzentration an unterschiedlichen Messstellen



**Abb. 7.8** Zeitpunkt, an dem die Heliumkonzentration unter 20 Vol.-% gesunken ist

### 7.1.4.3 Temperatur

Die Temperatur in der Simulation stimmt ebenfalls gut mit dem Experiment überein (Abb. 7.9). Da im Experiment räumlich und zeitlich nur geringe Temperaturschwankungen auftraten, ist dieser Versuch nur bedingt geeignet, die Modelle für den konvektiven Wärmetransport und für die Wärmestrahlung zu validieren.



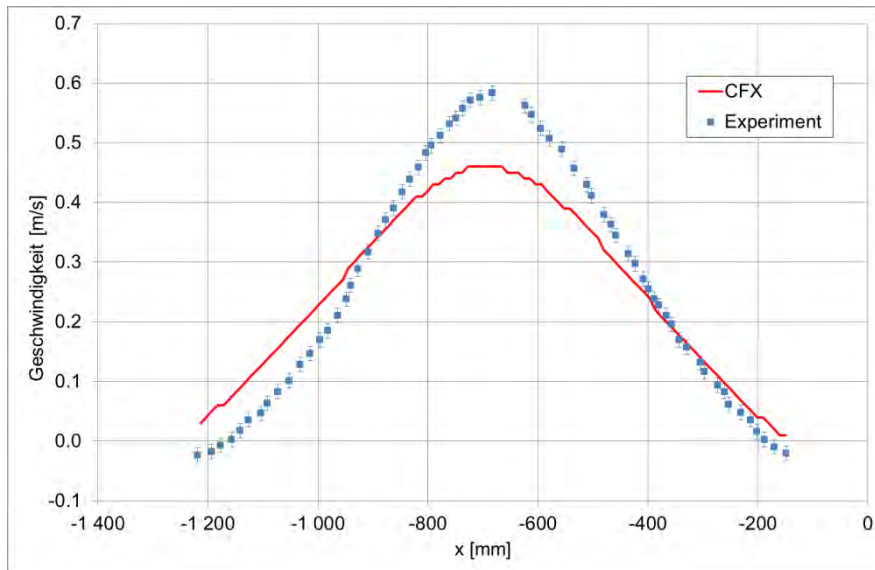
**Abb. 7.9** Temperaturverlauf an den Messstellen TC\_3 und TC\_5

### 7.1.4.4 Vertikalgeschwindigkeiten

Durch PIV-Messung wurden lokale Strömungsgeschwindigkeiten im Experiment gemessen. Im Folgenden werden die Vertikalgeschwindigkeiten in Experiment und Simu-



lation verglichen. Im Benchmark wurde die Geschwindigkeit entlang einer horizontalen Linie (Höhe: 5.904 m ; X-Position: -2.1135 m bis -0.1498 m) zum Zeitpunkt  $t = 1213$  s gemessen. Im Zentrum des Jets wird die vertikale Strömungsgeschwindigkeit von der Simulation unterschätzt, an den Rändern des Jets wird die Geschwindigkeit dagegen leicht überschätzt. Auch andere URANS Simulationen, die mit 2 Gleichungsturbulenzmodellen das Experiment erfolgreich simuliert haben, zeigten ein ähnliches Verhalten /AND 14/.



**Abb. 7.10** Gemessene und berechnete Vertikalgeschwindigkeit im Jet

### 7.1.5 Zusammenfassung

Die GRS hat sich am OECD-PSI Benchmark zur Schichtungsauflösung mit blinden Rechnungen beteiligt. Bei der Simulation wurden die in RS1500 als geeignet identifizierten Modelle und Parameter (SST-Turbulenzmodell, Diffusionskonstante nach Fuller, Verwendung des MAX-Residuums, ...) verwendet. Die wichtigste Zielgröße ist bei diesem Experiment die Berechnung der Auflösung der stabilen Helium-Schicht. Die Simulation war in der Lage, die Schichtungsauflösung in guter Übereinstimmung mit dem Experiment zu berechnen. An allen Messstellen wird die Heliumkonzentration in guter Übereinstimmung mit dem Experiment simuliert. Einzig beim Vergleich der Strömungsgeschwindigkeit im Jet gab es größere Abweichungen zwischen Experiment und Simulation. Die Strömungsgeschwindigkeit im Zentrum des Jets wurde von der Simulation etwas unterschätzt.

## **7.2 Nachrechnung des HYMERES-Versuches HP1\_2 (horizontale Einströmung)**

Bei den bisherigen Versuchsnachrechnungen wurde eine Leichtgasschicht durch einen horizontal oder vertikal einströmenden Gasstrahl aufgelöst. Bei dem nun vorliegenden HYMERES-Versuch PANDA HP1\_2 wechselwirkt ein horizontaler Jet mit einem Strömungshindernis und erodiert danach eine stabile Heliumschicht.

### **7.2.1 Geometrie, Start- und Randbedingungen**

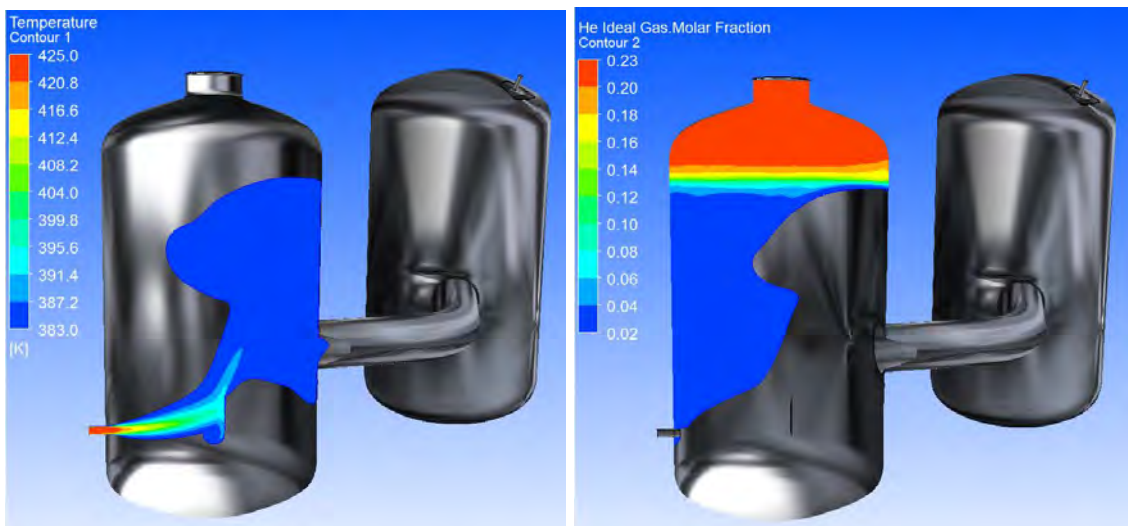
Die beiden PANDA-Behälter haben zu Beginn des Experimentes eine Temperatur von 108 °C und über ein Venting-Ventil wird ein Druck von etwa 1.3 bar gehalten. In Vessel 1 ist eine Heliumschicht mit maximal 25 Vol.-% Helium aufgebaut worden. Durch ein horizontales Rohr wird Dampf in Vessel 1 eingespeist (40 g/s, 150 °C), der zunächst gegen eine vertikale Platte prallt, dann aufsteigt und die oben liegende Heliumschicht auflöst (siehe Abb. 7.11). Weitere Details zum Experiment finden sich in /PAR 14/.

In Tab. 7.1 sind die wichtigsten numerischen Parameter für die CFX-Rechnung dargestellt. Als Turbulenzmodell wurde wieder das SST-Modell verwendet. Weiterhin wurde der Diffusionskoeffizient nach Fuller berechnet und das Discrete-Transfer-Strahlungsmodell verwendet. Da der experimentelle Druck nicht ganz exakt dem spezifizierten Wert von 1.3 bar entsprach, wurde die Druckrandbedingung am Auslass dem experimentellen Verlauf angepasst. Deshalb stimmt der simulierte Druck relativ gut mit den experimentellen Werten überein (siehe Abb. 7.12).

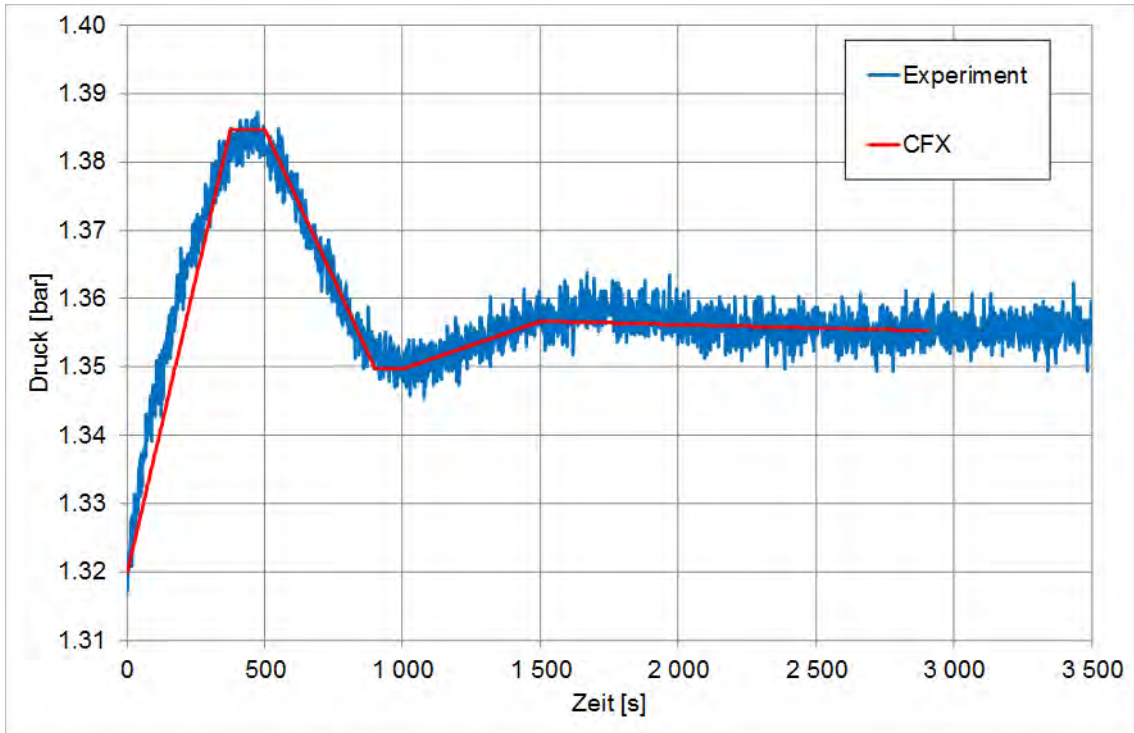
Abb. 7.13 zeigt unterschiedliche Gitter, die für die Berechnungen erstellt wurden. Hierbei wurden neben der Gitterfeinheit auch unterschiedliche Längen des Einlaufrohres modelliert. Bei den Verfeinerungen wurde das Gitter insbesondere im ersten PANDA-Behälter (der mit Einspeisestelle, Ablenk-Platte und Heliumschicht) verfeinert. Weiter unten wird der Einfluss dieser unterschiedlichen Gitter auf die Berechnungsergebnisse diskutiert.

**Tab. 7.1** Infobox PANDA HP1\_2.

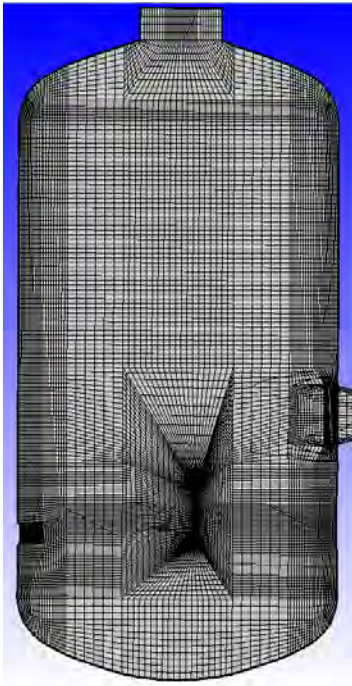
Experiment	PANDA HP1_2
Phänomene	Wechselwirkung eines Gas-Jets mit einem Strömungshindernis, Auflösung einer Leichtgasschicht
Elementzahl	1.1 bis 4.5 Mio. Elemente (siehe Gitterstudie)
Materialien	Air Ideal Gas, H <sub>2</sub> O, He Ideal Gas
Turbulenzmodell	SST
Diffusionskoeffizient	Nach Fuller
Wärmestrahlung	Discrete Transfer, Gray, 24 Strahlen
Wandkondensation	Ohne
Volumenkondensation	Ohne
Konvergenz	RMS < 0.0001
CFX-Version	15.0



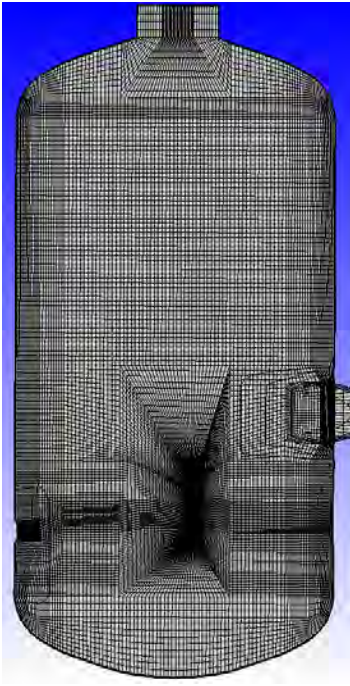
**Abb. 7.11** Heißer Dampf wird in den PANDA-Behälter eingespeist (links); dadurch löst sich die Heliumschicht langsam auf (rechts,  $t = 640$  s)



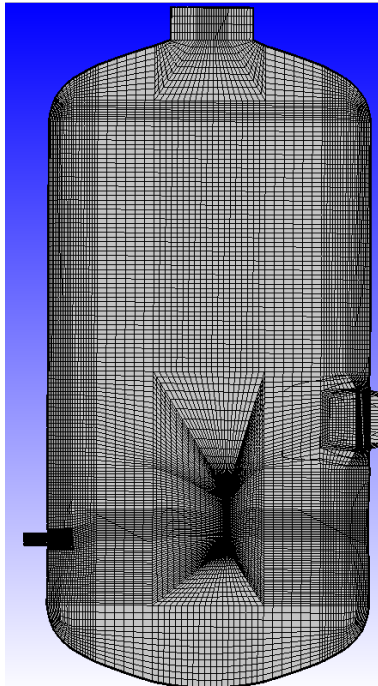
**Abb. 7.12** Druckverlauf im PANDA-Behälter



Nr. 12: Einlass kurz,  
1.099.437 Elemente

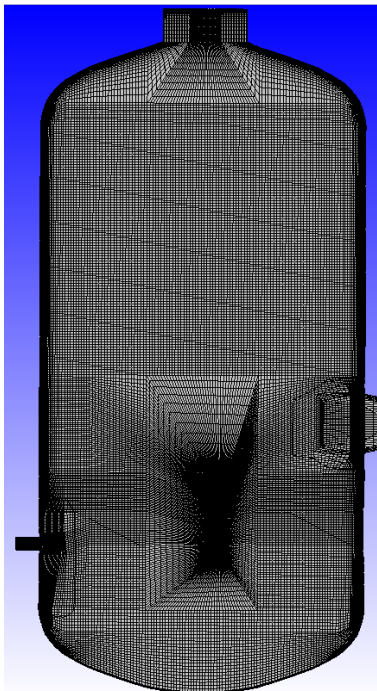


Nr. 14: Einlass kurz,  
2.113.370 Elemente

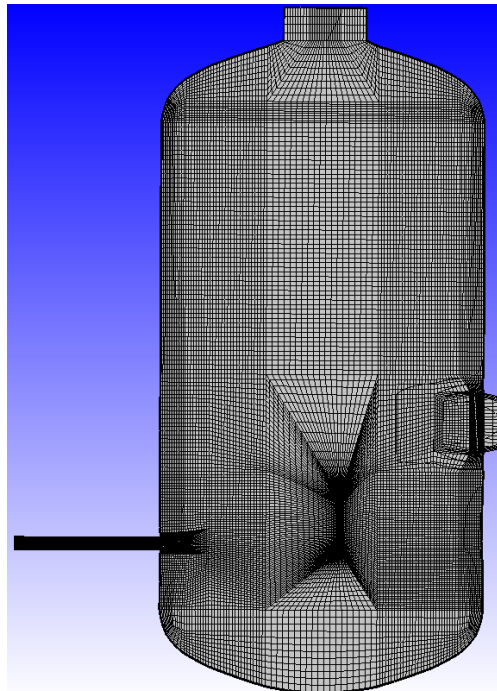


Nr. 17: Einlass mittel,  
1.113.074 Elemente

Nr. 33: Einlass m  
4.308.598 Elemente



Nr. 33: Einlass mittel,  
4.308.598 Elemente



Nr. 39: Einlass lang,  
1.458.144 Elemente

Einlass mittel,  
74 Elemente

**Abb. 7.13** Unterschiedliche CFD-Gitter für den HP1\_2-Versuch

## 7.2.2 Durchführung einer Gitterstudie

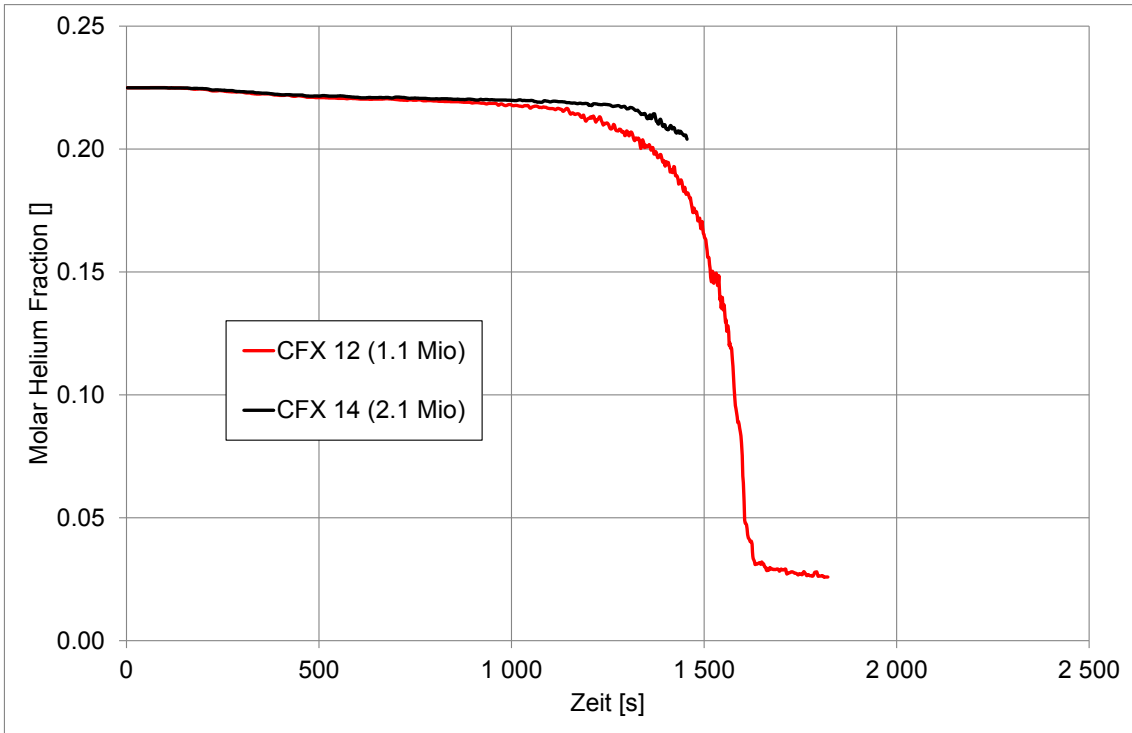
Um den Einfluss des Gitters bzw. auch der Geometrie auf die Berechnungsergebnisse zu untersuchen, wurden mehrere Rechnungen mit unterschiedlicher Elementzahl und unterschiedlich langem Einlassrohr durchgeführt (siehe Abb. 7.13 und Tab. 7.2). Zunächst wird der Einfluss der Gitterfeinheit diskutiert, anschließend die Modellierung des Einlassrohres.

**Tab. 7.2** Unterschiedliche Gitter für den HP1\_2 Versuch

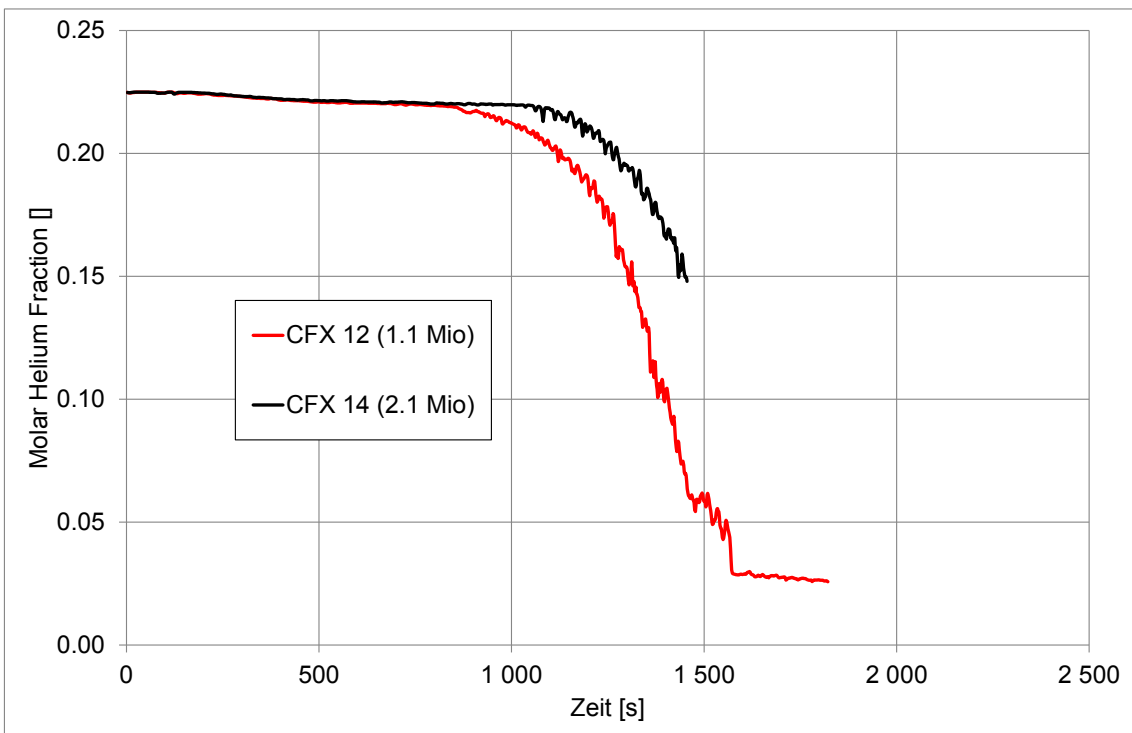
Gitter / Rechnungs-Nr.	Einlassrohr	Elementzahl
12	Kurz	1.1 Mio.
14	Kurz	2.1 Mio.
17	Mittel	1.1 Mio.
33	Mittel	4.3 Mio.
39	Lang	1.5 Mio.

### 7.2.2.1 Einfluss der Gitterfeinheit

Um den Einfluss der Gitterfeinheit zu untersuchen, werden zunächst die Berechnungen Nr. 12 und 14 mit 1.1 Mio. bzw. 2.1 Mio. Elementen betrachtet. In Abb. 7.14 bis Abb. 7.16 ist der Verlauf der Heliumkonzentration in unterschiedlichen Höhen dargestellt. Es zeigt sich, dass eine Verfeinerung des Gitters zu einem langsameren Abbau der Heliumschicht führt. Je höher der Punkt liegt, desto stärker macht sich der Gittereinfluss bemerkbar. Grundsätzlich scheint aber mit gut 1.1 Mio. Elementen noch nicht der Bereich der Gitterunabhängigkeit erreicht worden zu sein.

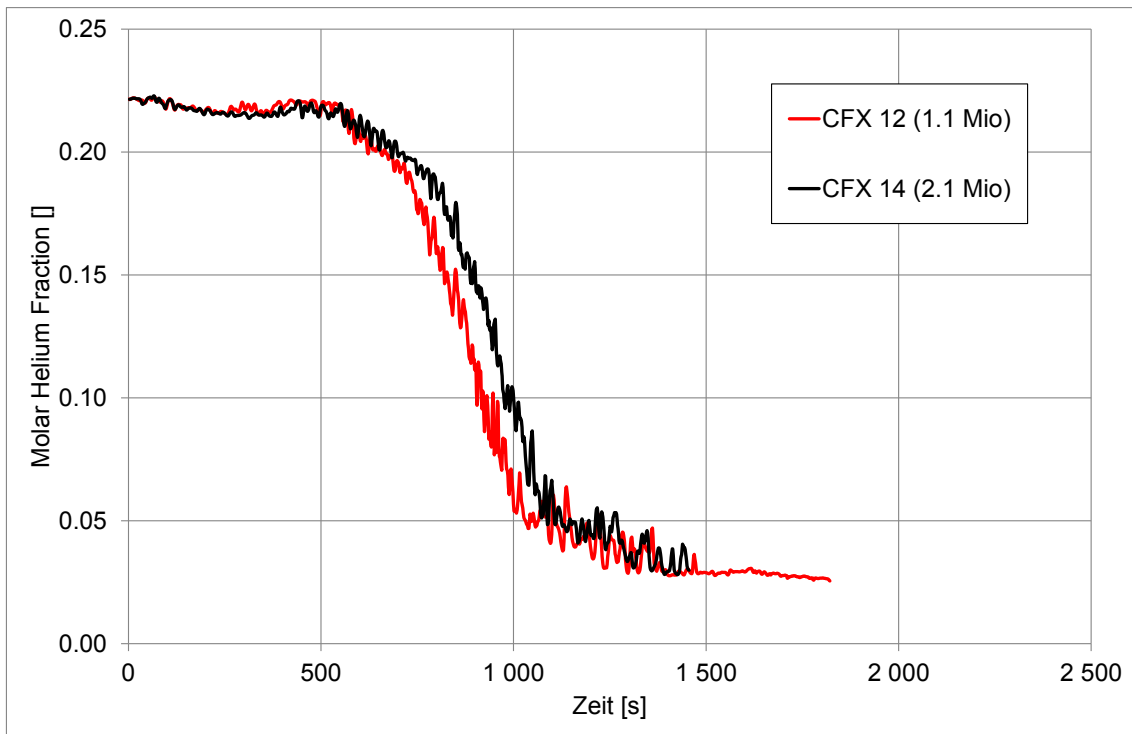


**Abb. 7.14** Heliumanteil am Messpunkt MCG\_D1A20 in 8.03 m Höhe



**Abb. 7.15** Heliumanteil am Messpunkt MCG\_D1B20 in 7.478 m Höhe





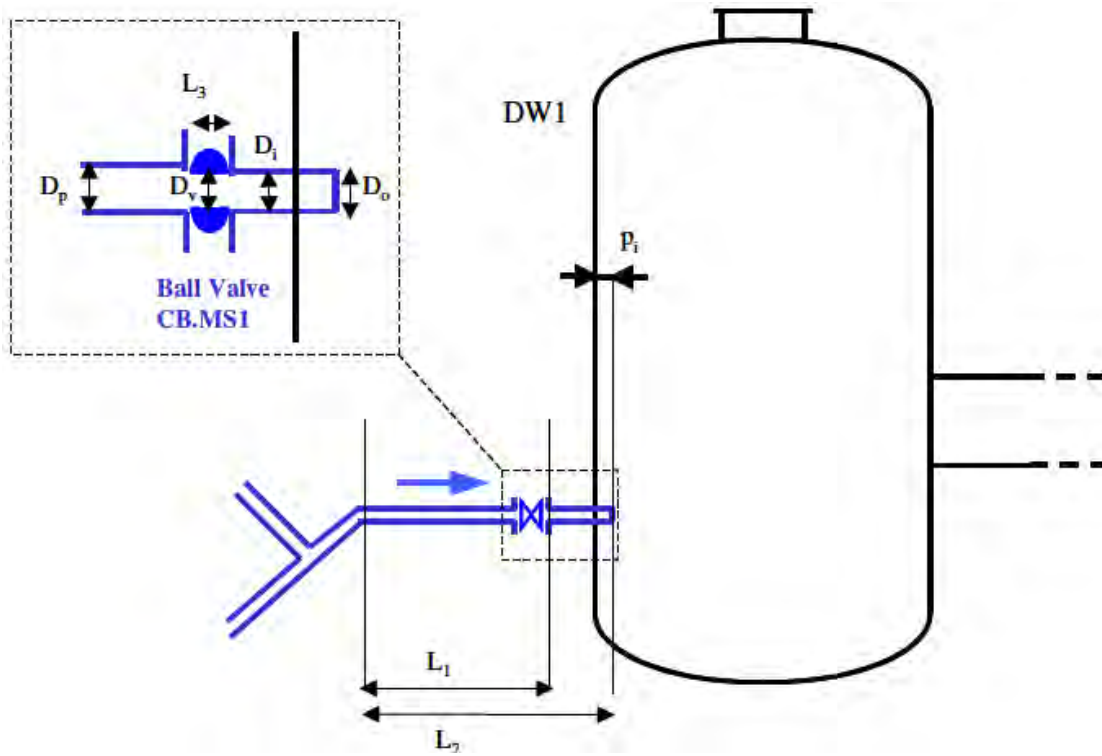
**Abb. 7.16** Heliumanteil am Messpunkt MCG\_D1C20 in 6.926 m Höhe

### 7.2.2.2 Modellierung des Einlassrohres

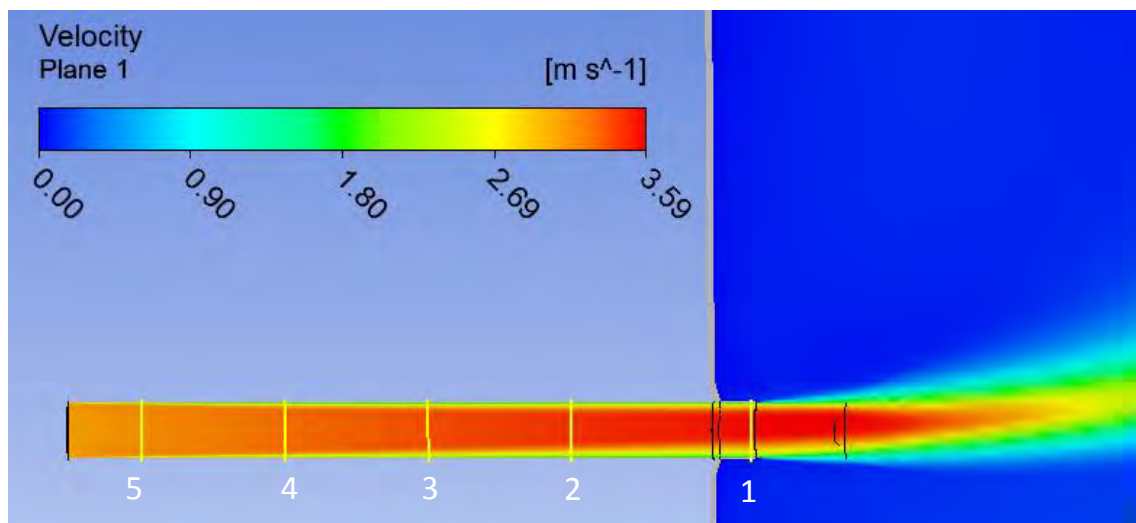
Bei den ersten Rechnungen zur Gitterfeinheit wurde nur ein kurzer Teil des Einlassrohres simuliert, insgesamt ist der geradlinige Teil des Einlassrohres jedoch 1.92 m lang (siehe Abb. 7.17). In einer weiteren Rechnung wurde ein längerer Teil dieses Rohres berücksichtigt. Dieses ist in Abb. 7.18 dargestellt. Entlang der mit weißen Zahlen gekennzeichneten gelben Linien wurde jeweils das Geschwindigkeitsprofil bestimmt. Die zugehörigen Geschwindigkeiten sind in Abb. 7.19 dargestellt. Es zeigt sich, dass sich entlang des Einlassrohres das Geschwindigkeitsprofil von einem relativ flachen Profil zu einem immer stärker ausgeprägten runden Profil herausbildet. Dies entspricht auch der allgemeinen Theorie von Rohrströmungen.

In Abb. 7.20 werden dann die Geschwindigkeitsprofile am Ende des Einlassrohres für die beiden Rechnungen (kurzes Rohr und langes Rohr) miteinander verglichen. Hier zeigt sich noch einmal sehr deutlich, dass der Dampfstrahl bei der Rechnung mit langem Rohr mit einem anderen Geschwindigkeitsprofil in den PANDA-Behälter eintritt als bei der Rechnung mit dem kurzen Rohr. Die Rechnungen mit dem langen Rohr entsprechen dabei mehr der wahren Geometrie im Experiment.

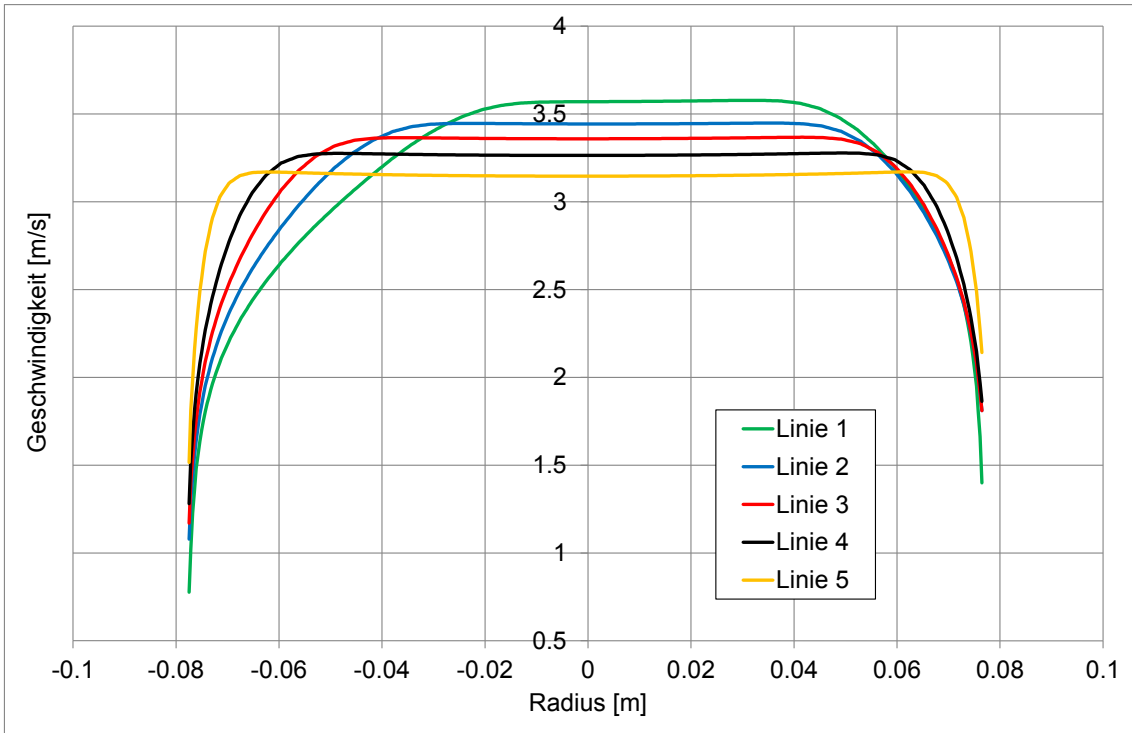




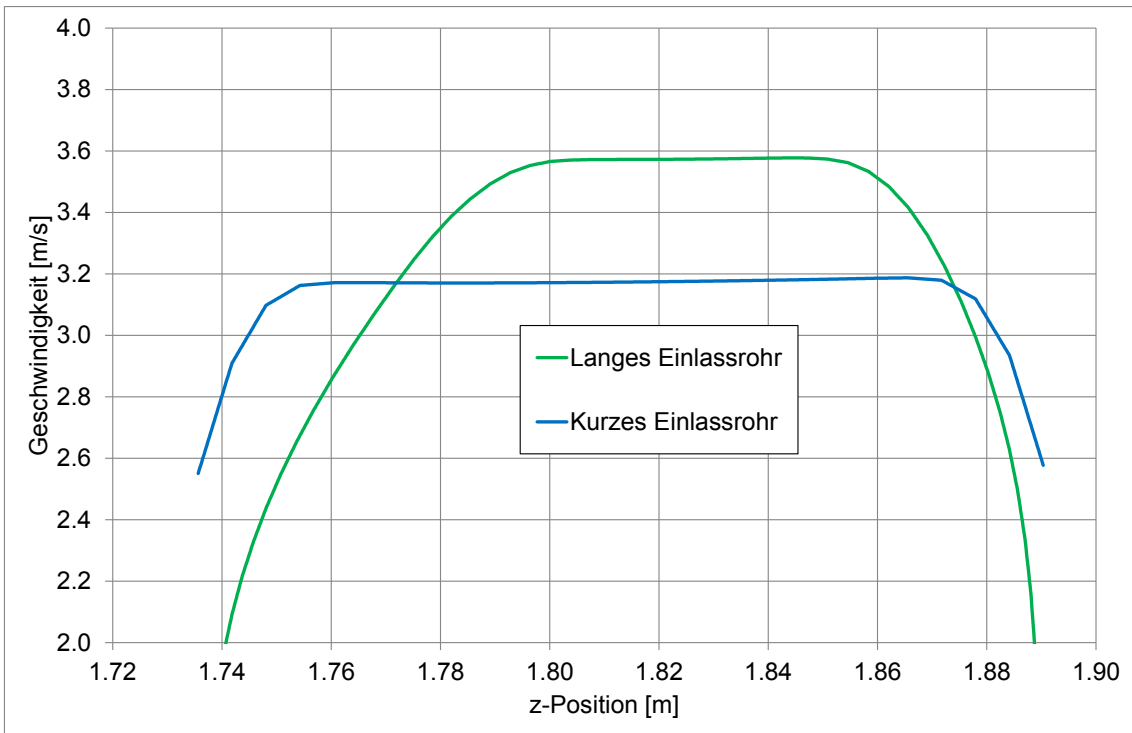
**Abb. 7.17** Schematische Darstellung des Einlassrohres ( $L_2 = 1.92 \text{ m}$ ) /AUB 05/



**Abb. 7.18** Geschwindigkeiten im verlängerten Einlassrohr

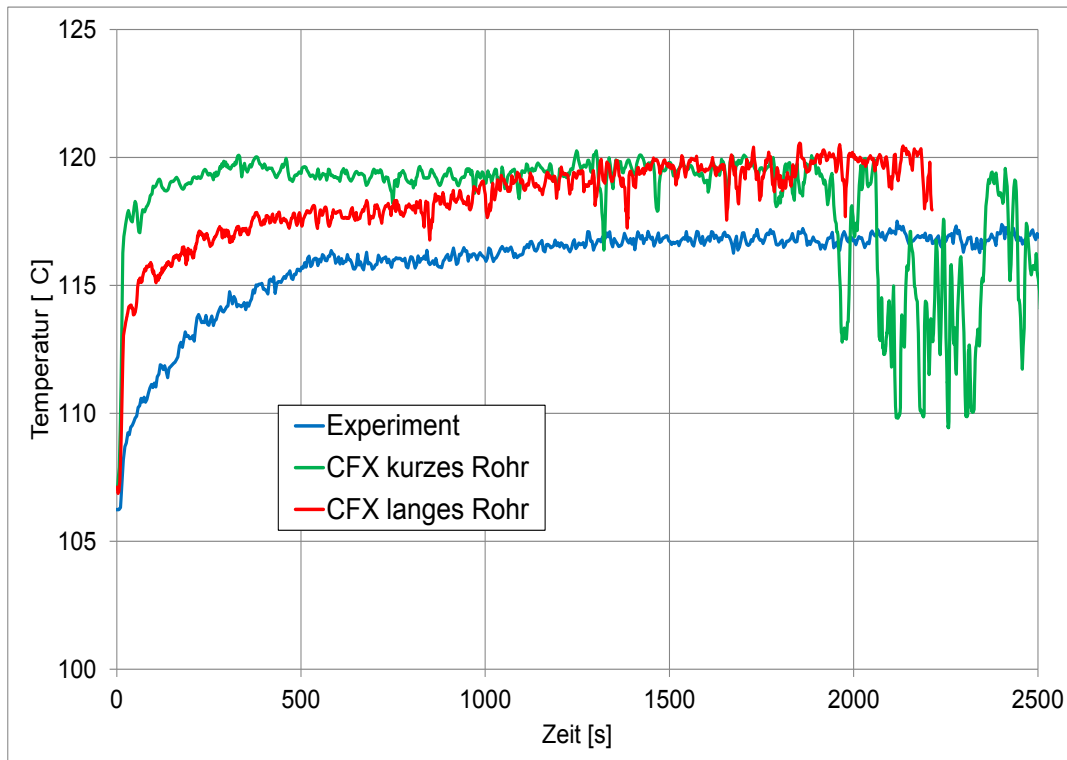


**Abb. 7.19** Geschwindigkeitsprofile im (verlängerten) Einlassrohr. Die Position der einzelnen Linien ist in Abb. 7.18 dargestellt.



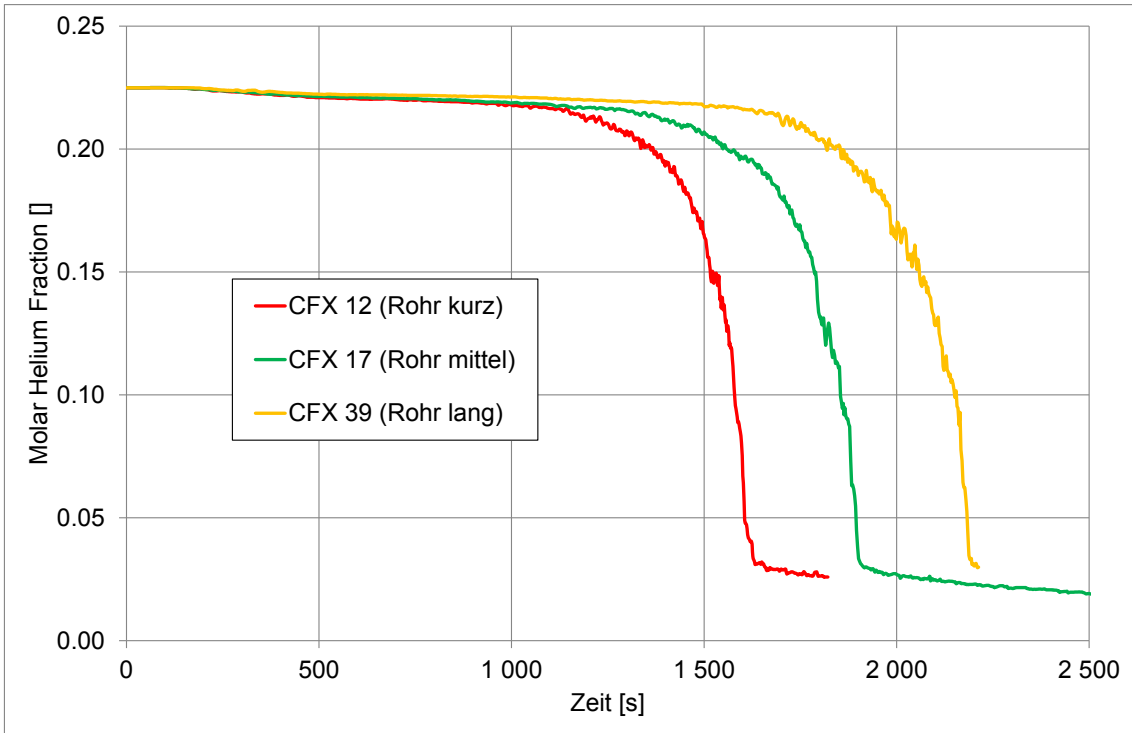
**Abb. 7.20** Vergleich der Geschwindigkeitsprofile für unterschiedliche Rohrlängen

In Abb. 7.21 werden die Temperaturen am oberen Rand der Prallplatte dargestellt. Hier ergibt sich ein deutlicher Unterschied zwischen beiden Rechnungen, was darauf hindeutet, dass der Auftreffwinkel des Dampfstrahls bei beiden Rechnungen ein etwas anderer ist (in Folge des unterschiedlichen Einlassprofils). Die Temperaturen bei der Rechnung mit langem Rohr passen besser zum Experiment als die der Berechnung mit kurzem Rohr, auch wenn sie noch nicht vollständig das Experiment treffen.

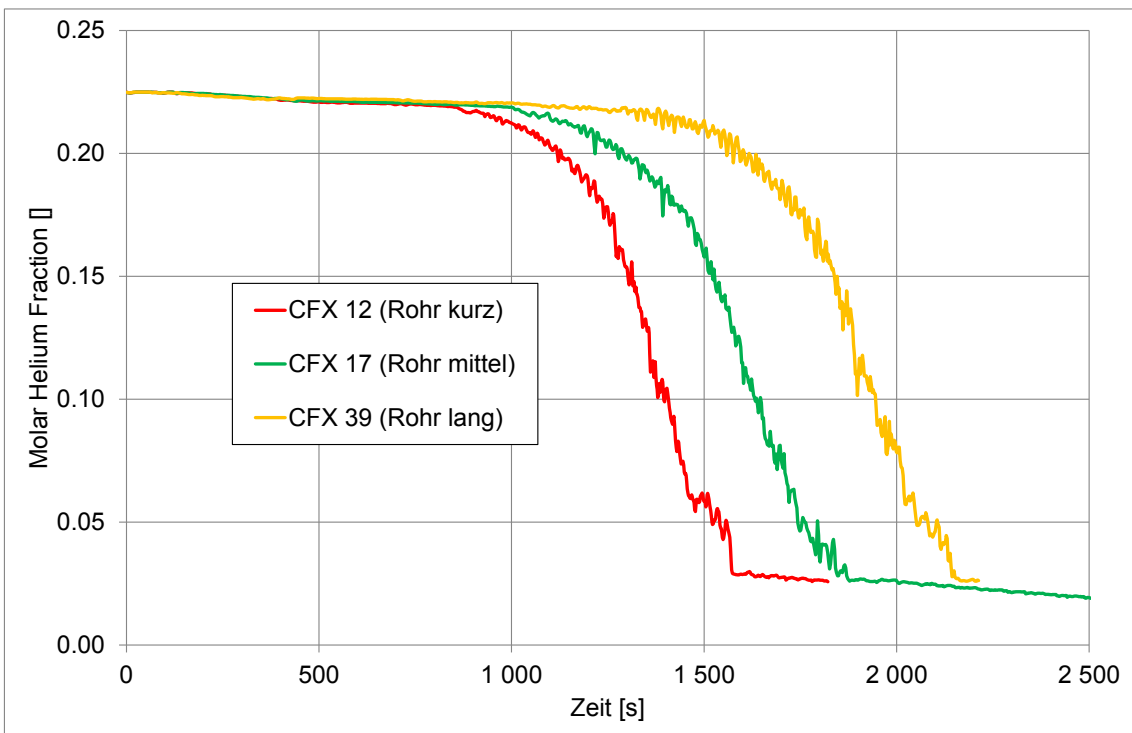


**Abb. 7.21** Temperaturen am oberen Rand der Prallplatte

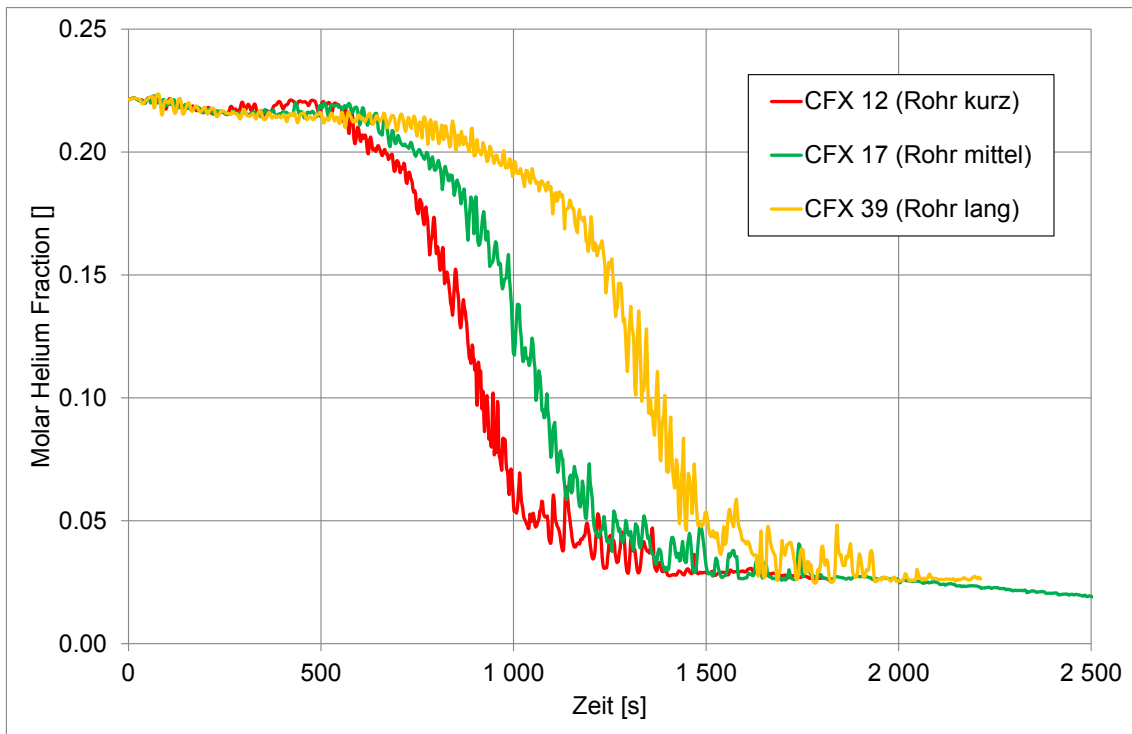
Vergleicht man auch die Heliumkonzentrationen aus den Rechnungen mit unterschiedlich langem Einlassrohr, so zeigt sich bei einem längeren Rohr ein langsamerer Abbau der Heliumschicht. Dies ist in Abb. 7.22 bis Abb. 7.24 dargestellt. Der Einfluss ist ziemlich deutlich, deshalb sollte zu einer korrekten Simulation des Experimentes auf jeden Fall die richtige Rohrlänge verwendet werden. Für den im nächsten Abschnitt folgenden Vergleich mit den experimentellen Daten wird deshalb CFX-Rechnung Nr. 39 ausgewählt. Dabei muss jedoch beachtet werden, dass diese Rechnung mit einem Netz mit nur 1.5 Millionen Elementen durchgeführt wurde und hiermit wahrscheinlich noch keine Gitterunabhängigkeit erreicht wird.



**Abb. 7.22** Heliumanteil am Messpunkt MCG\_D1A20 in 8.03 m Höhe



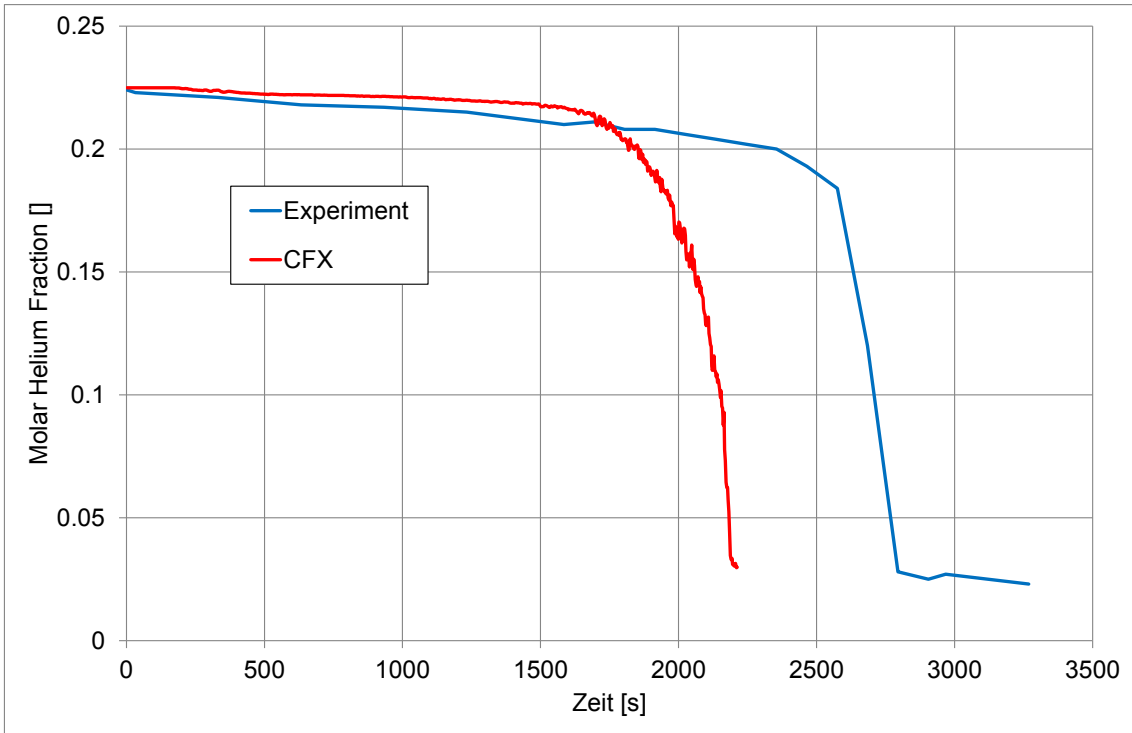
**Abb. 7.23** Heliumanteil am Messpunkt MCG\_D1B20 in 7.48 m Höhe



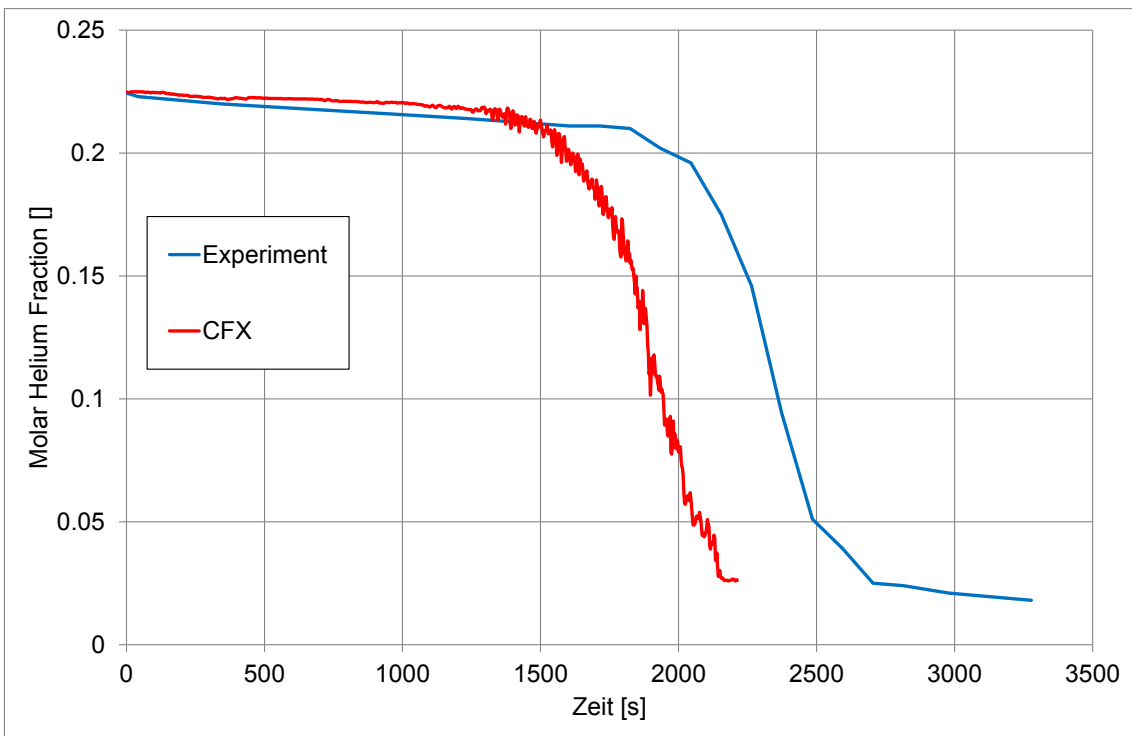
**Abb. 7.24** Heliumanteil am Messpunkt MCG\_D1C20 in 6.93 m Höhe

### 7.2.3 Vergleich von CFX-Ergebnissen mit experimentellen Daten

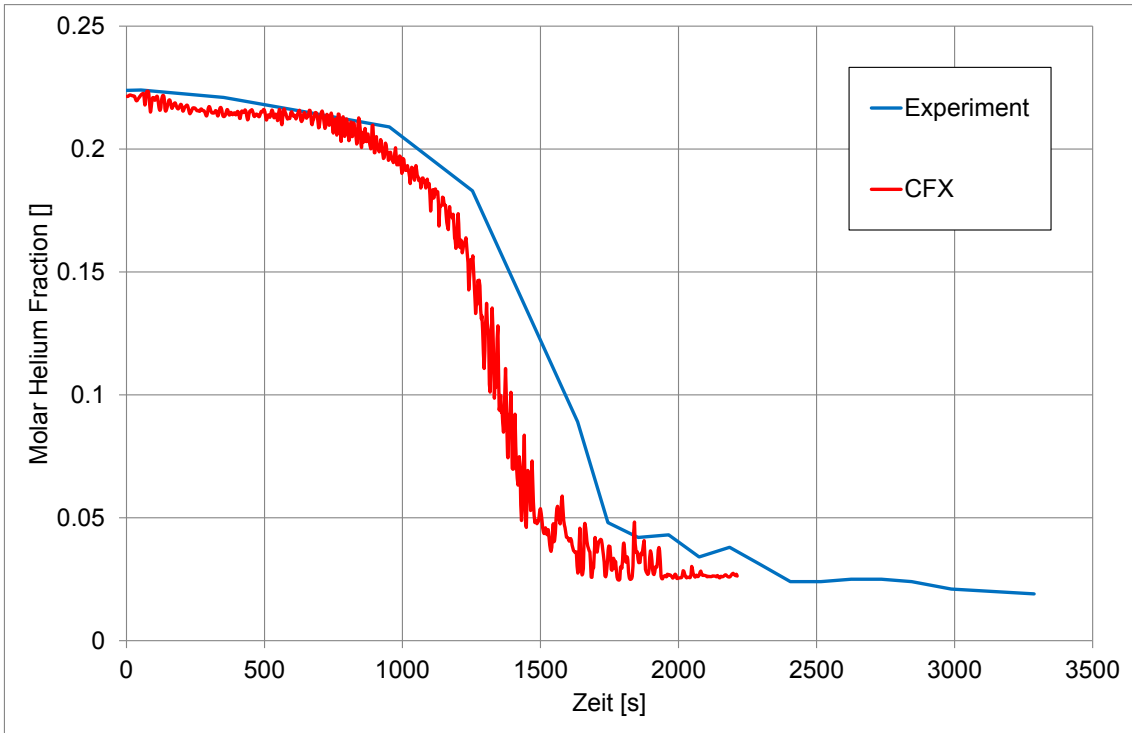
Betrachtet man den Verlauf der Heliumkonzentration an verschiedenen Messstellen im Behälter 1, so fällt auf, dass CFX den Abbau der Heliumschicht insgesamt zu schnell berechnet (siehe Abb. 7.25 bis Abb. 7.28). Während die Schicht im Experiment erst nach etwa 2800 s abgebaut ist, wird in der CFX-Rechnung die Auflösung schon nach etwa 2200 s erreicht (siehe Abb. 7.25). Bei den weiter unten liegenden Messpunkten ist die Abweichung noch nicht so stark, wie man in Abb. 7.27 und Abb. 7.28 sehen kann.



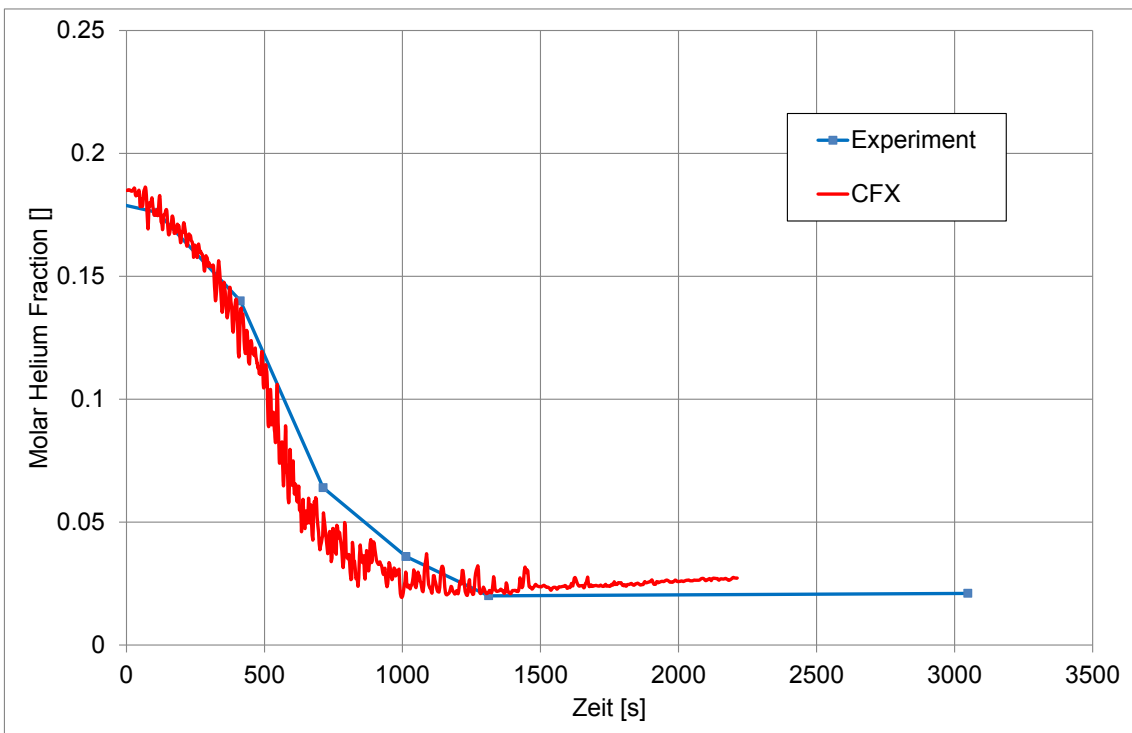
**Abb. 7.25** Heliumkonzentration in 8.03 m Höhe (Messpunkt MCG\_D1A\_20)



**Abb. 7.26** Heliumkonzentration in 7.48 m Höhe (Messpunkt MCG\_D1B\_20)



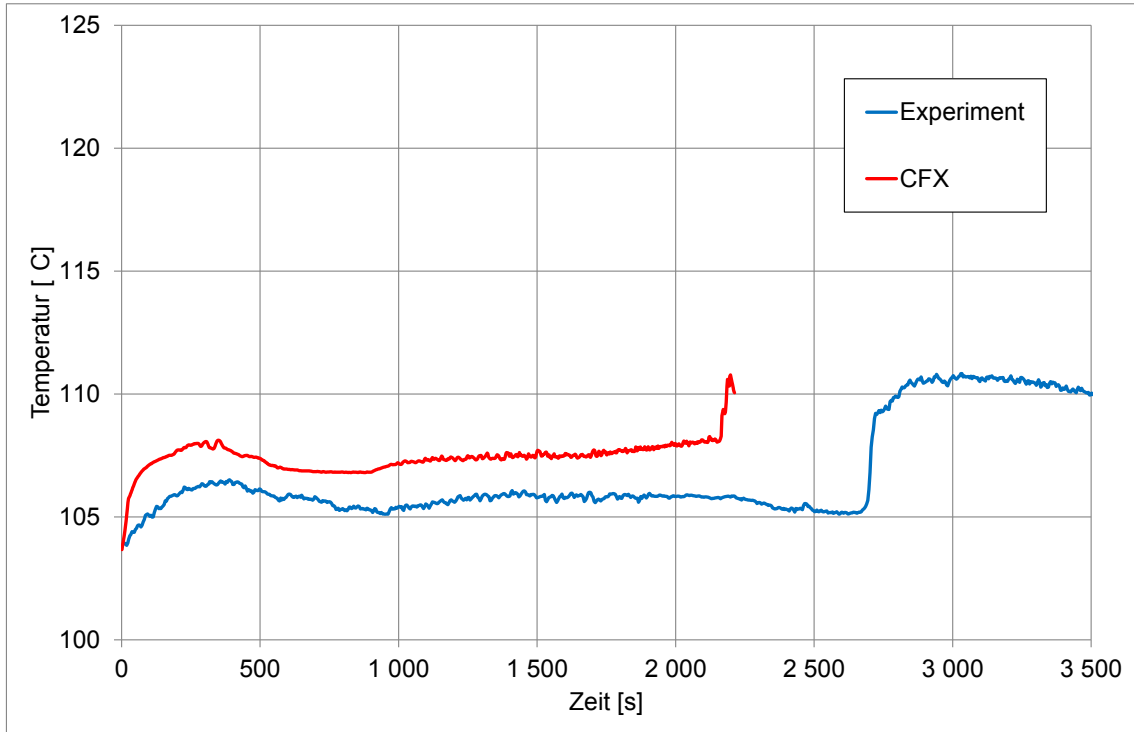
**Abb. 7.27** Heliumkonzentration in 6.93 m Höhe (Messpunkt MCG\_D1C\_20)



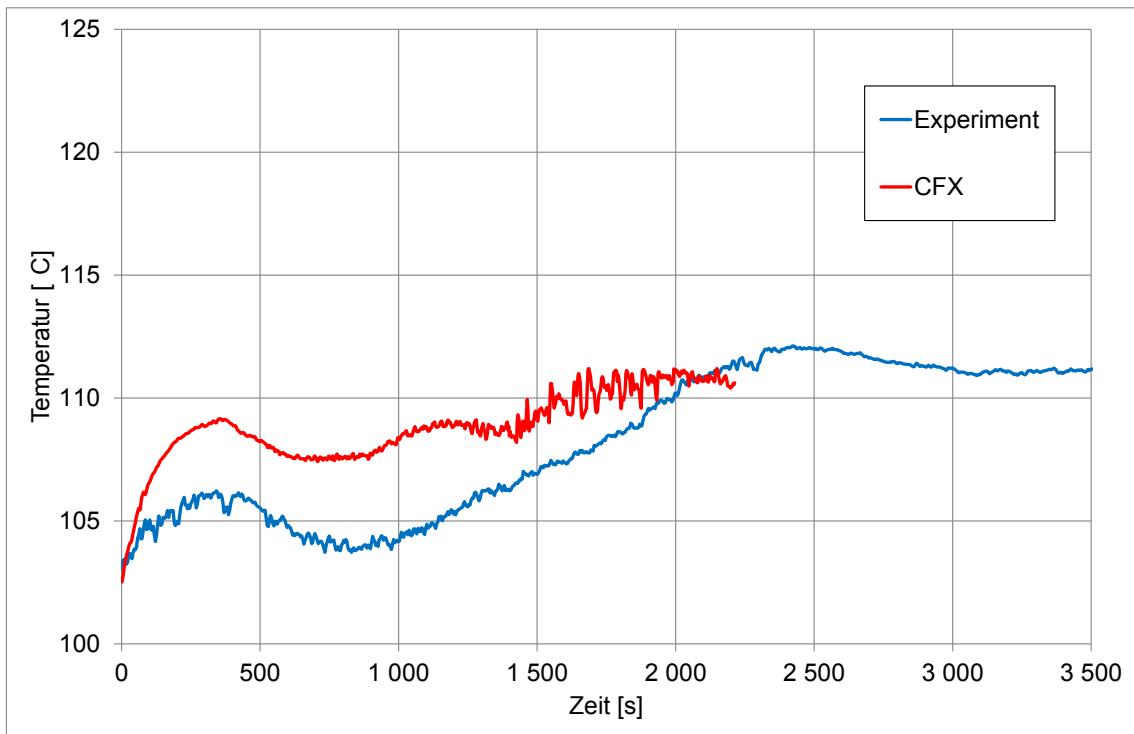
**Abb. 7.28** Heliumkonzentration in 6.28 m Höhe (Messpunkt MCG\_D1D\_20)

Betrachtet man die Temperaturverläufe in Behälter 1, so sieht man bei den CFX-Rechnungen in den ersten 100 bis 200 s einen etwas stärkeren Anstieg der Tempera-

turen als bei den experimentellen Werten (siehe Abb. 7.29 bis Abb. 7.31). Weiterhin macht sich auch der schnellere Abbau der Heliumschicht im Temperaturverlauf der CFX-Rechnungen bemerkbar (zu früher Temperatursprung in Abb. 7.29).

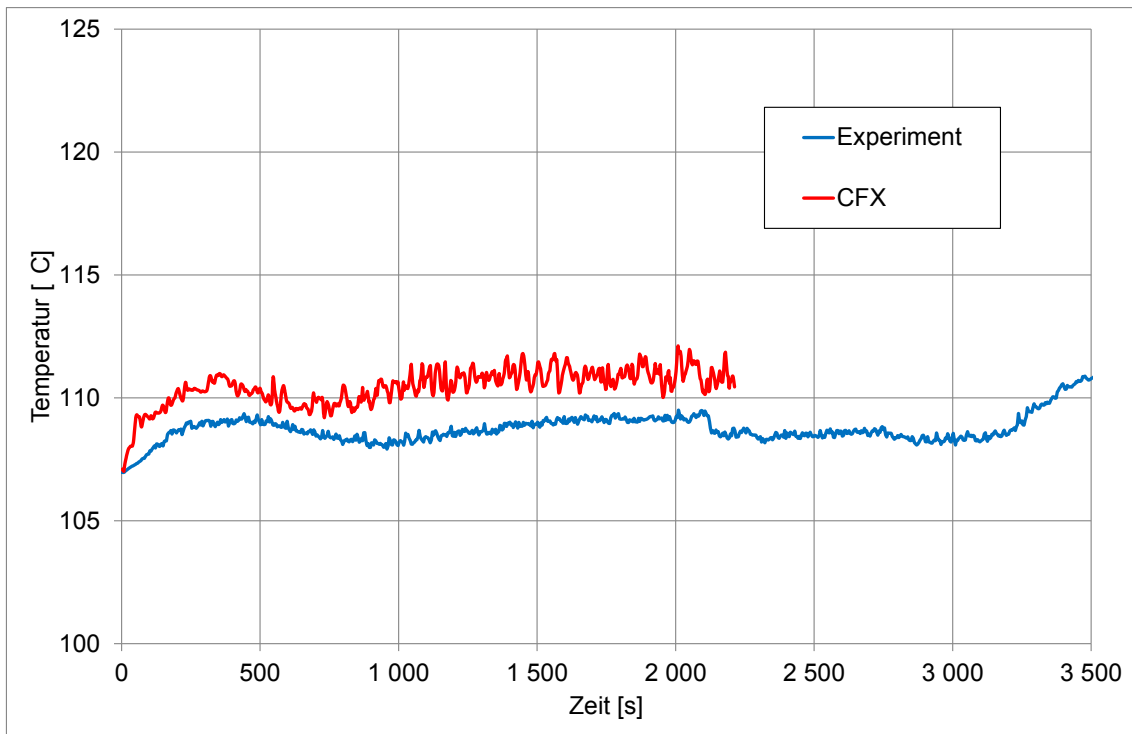


**Abb. 7.29** Temperaturverlauf in 8.03 m Höhe (Messpunkt MTG\_D1A\_20)



**Abb. 7.30** Temperaturverlauf in 6.93 m Höhe (Messpunkt MTG\_D1C\_20)





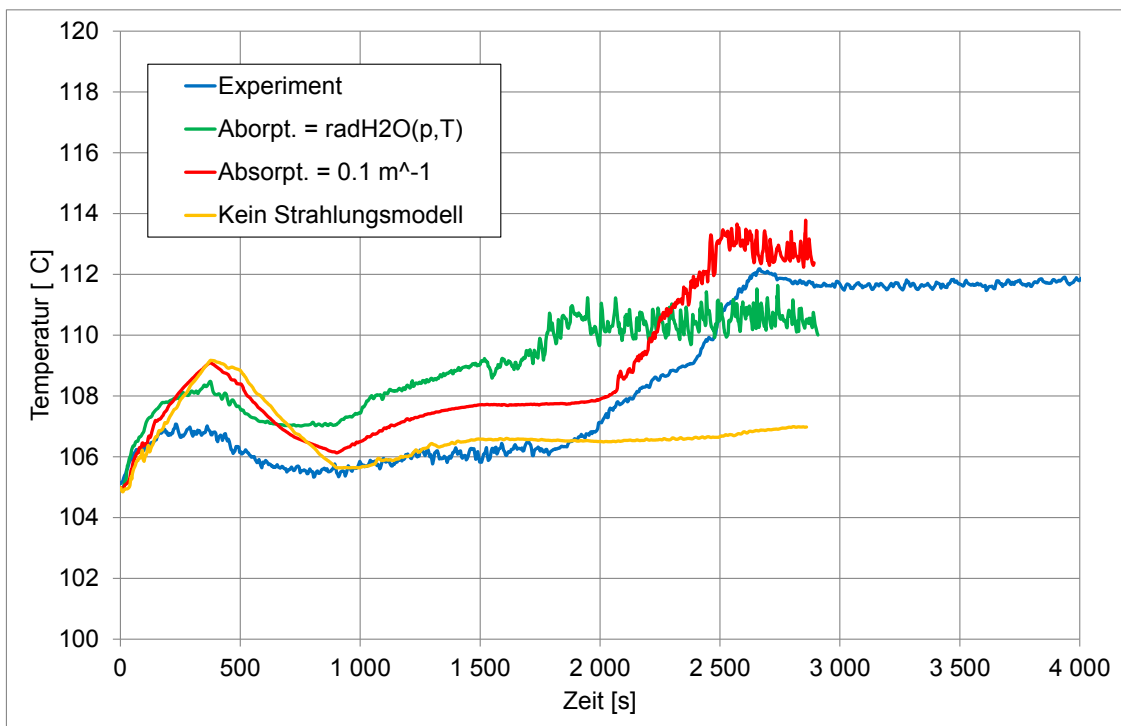
**Abb. 7.31** Temperaturverlauf in 3.03 m Höhe (Messpunkt MTG\_D1M\_20)

#### 7.2.4 Einfluss der Strahlung bzw. Strahlungsabsorption

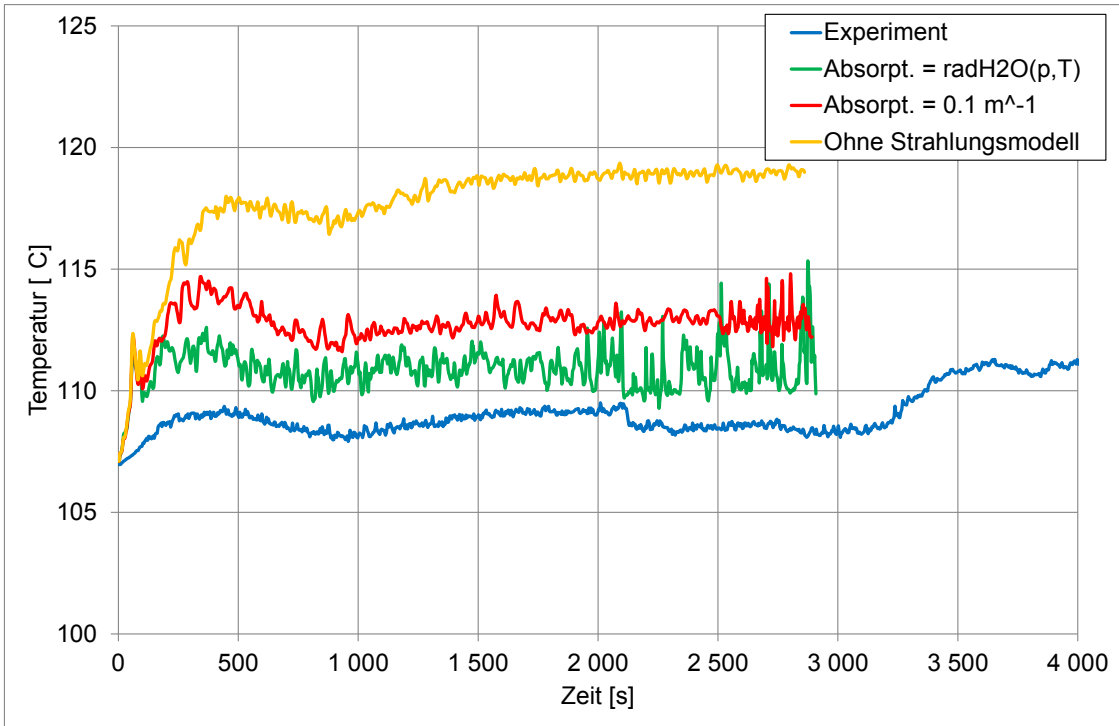
Es hat sich schon bei früheren Rechnungen (SETH-Versuche) gezeigt, dass die Modellierung der Wärmestrahlung insbesondere beim Dampf einen wesentlichen Einfluss auf Schichtungs- und Auflösungsphänomene haben kann. Um diesen Einfluss abschätzen zu können, wurde auch bei dieser Simulation von PANDA HP1\_2 im Rahmen einer Parameterstudie das Strahlungsmodell verändert. Insgesamt gab es drei Rechnungen: Eine Rechnung ganz ohne Strahlungsmodell und zwei mit dem Discrete-Transfer-Strahlungsmodell. Bei den letzten beiden Rechnungen wurde einmal ein konstanter Strahlungsabsorptionskoeffizient von  $0.1 \text{ m}^{-1}$  für Dampf angenommen und eine weitere Berechnung mit einem von Druck und Temperatur abhängigen Absorptionskoeffizienten ( $\text{radH}_2\text{O}$ ). Die Werte für diesen Koeffizienten liegen etwa bei 1. Alle Berechnungen wurden mit Gitter Nr. 17 (Einlassrohr mittellang, 1.1 Mio. Elemente, siehe Abb. 7.13) durchgeführt, da zu diesem Zeitpunkt der starke Einfluss des Einlassrohres auf die Berechnungsergebnisse noch nicht bekannt war. Prinzipiell würde ein längeres Einlassrohr noch zu einem langsameren Abbau der Heliumschicht führen, wie sich in der Gitterstudie gezeigt hat.

Abb. 7.32 und Abb. 7.33 zeigen den Einfluss der Strahlungsmodellierung auf die Temperaturen im PANDA-Behälter. Der Messpunkt MTG\_D1B\_20 liegt innerhalb der anfänglichen Heliumschicht. Hier sind die Temperaturen in der Berechnung ohne Strahlungsmodell am niedrigsten (im Zeitbereich ab 1000 s), während die Berechnung mit radH<sub>2</sub>O(p,T) die höchsten Werte anzeigt (im Zeitbereich ab 1000 s bis 2000 s). Beim Messpunkt MTG\_D1M\_20 unterhalb der Heliumschicht ist es genau umgekehrt. Es zeigt sich, dass durch die Wärmestrahlung ein zusätzlicher Energieaustausch vom unteren heißen Bereich in den oberen kalten Bereich stattfindet.

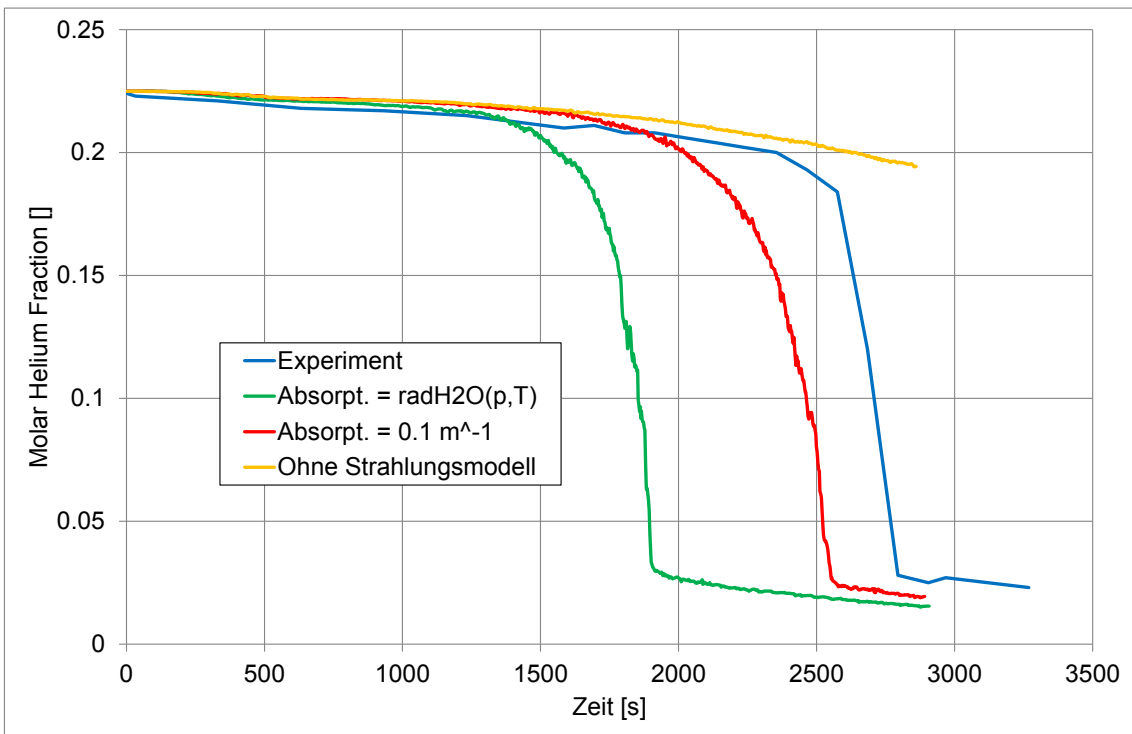
Dieser Energieaustausch wirkt auch indirekt auf den Abbau der Heliumschicht ein. Es zeigt sich in Abb. 7.34 bis Abb. 7.36, dass mit zunehmendem Strahlungsaustausch die Heliumschicht schneller abbaut, bzw. dass ganz ohne ein Strahlungsmodell die Schichtung viel zu langsam abgebaut wird. Von diesen drei Rechnungen scheint diejenige mit Strahlungsmodell und einem Koeffizienten von 0.1 m<sup>-1</sup> den experimentellen Verlauf am besten zu treffen. Allerdings muss beachtet werden, dass die Rechnungen noch nicht mit dem langen Einlassrohr und mit einem relativ groben Gitter durchgeführt wurden. Deshalb kann hieraus nicht unbedingt geschlossen werden, dass der Koeffizient von 0.1 m<sup>-1</sup> generell am besten geeignet ist. Grundsätzlich zeigt sich aber wieder, dass eine Berechnung ohne Strahlungsmodell nicht geeignet ist, das Experiment gut wiederzugeben.



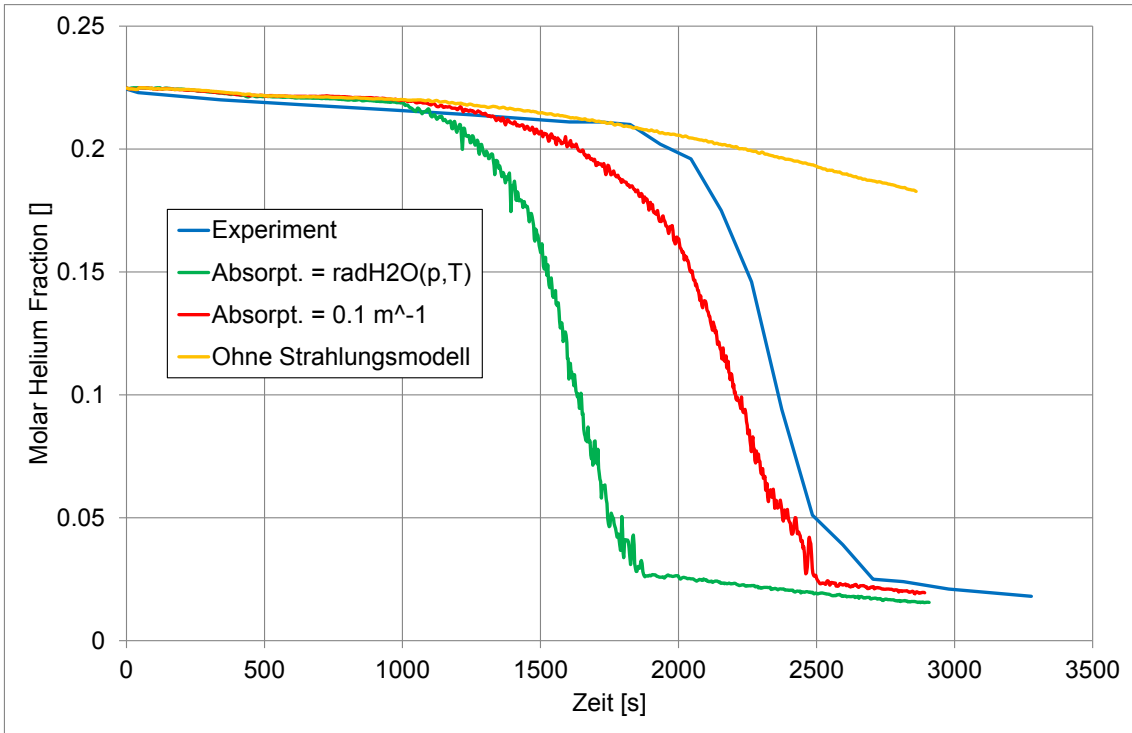
**Abb. 7.32** Temperaturverlauf am Messpunkt MTG\_D1B\_20



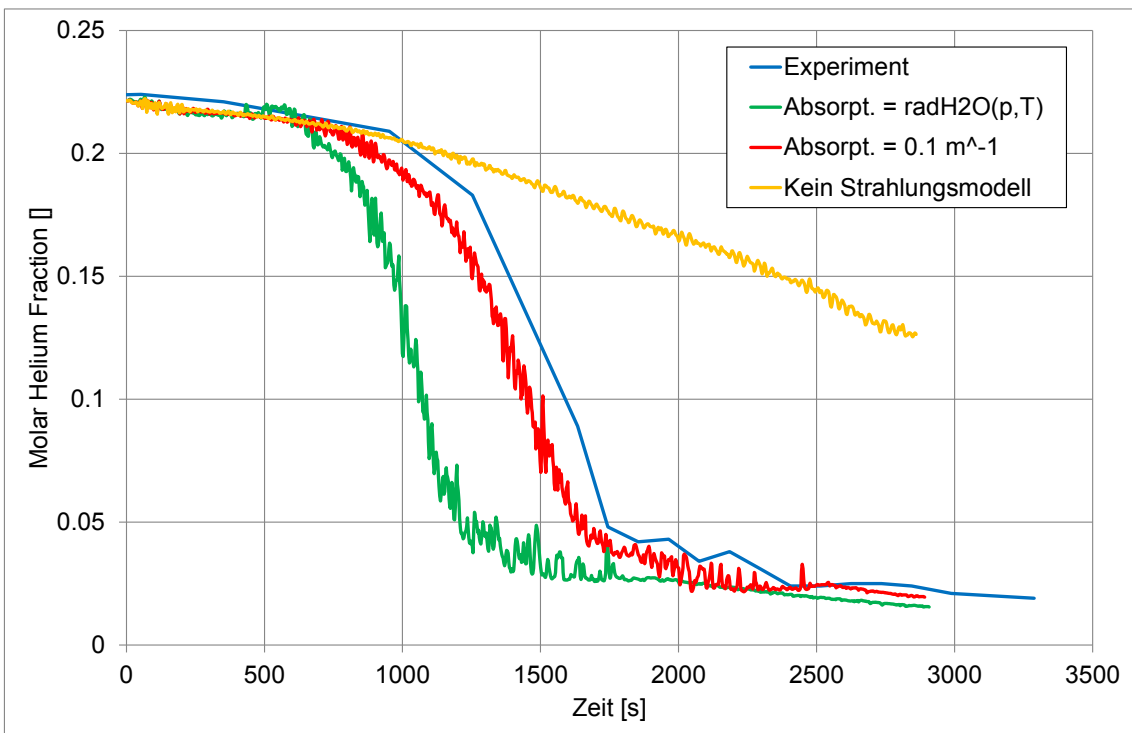
**Abb. 7.33** Temperaturverlauf am Messpunkt MTG\_D1M\_20



**Abb. 7.34** Heliumkonzentration am Messpunkt MCG\_D1A\_20



**Abb. 7.35** Heliumkonzentration am Messpunkt MCG\_D1B\_20



**Abb. 7.36** Heliumkonzentration am Messpunkt MCG\_D1C\_20

### **7.2.5 Zusammenfassung**

In den vorliegenden Arbeiten wurde das PANDA-Experiment HYMERES HP1\_2 zur fortgesetzten Validierung von CFX genutzt. Bei diesem Experiment wird ein horizontaler Dampfstrahl zunächst auf eine vertikale Platte gelenkt. Danach steigt der Dampf nach oben, um dort eine Heliumschichtung abzubauen.

Zunächst wurden Berechnungen mit unterschiedlichen Gittern durchgeführt. Es zeigt sich, dass bei einer Elementzahl von ca. 1.1 Mio. Elementen noch keine Gitterunabhängigkeit erreicht wurde. Weiterhin war es bei diesem Experiment sehr wichtig, die genaue Länge des Einlassrohres zu modellieren. Dies sorgt für ein anderes Strömungsprofil am Ende des Einlassrohres, was wiederum einen deutlichen Einfluss auf den Abbau der Heliumschicht hat.

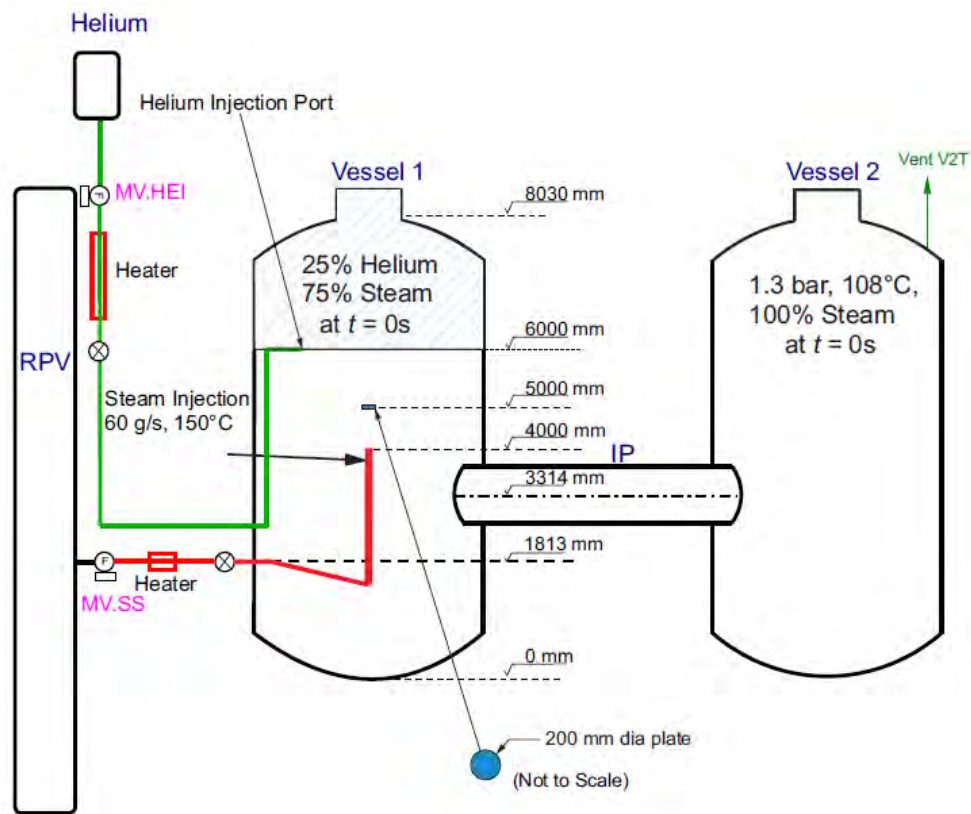
Aus diesem Grund wurde das Gitter mit dem langen Einlassrohr für den Vergleich mit dem Experiment ausgewählt. Hierbei zeigt sich noch ein etwas zu schneller Abbau der Heliumschicht. Weiterhin steigen die Temperaturen gerade zu Beginn der Dampfeinspeisung etwas zu schnell an. Prinzipiell wird der qualitative Verlauf des Experimentes aber schon gut getroffen. Eine Parameterstudie in Bezug auf das Strahlungsmodell zeigte wieder einen deutlichen Einfluss dieses Modells auf die Berechnungsergebnisse. Grundsätzlich kann gesagt werden, dass das Experiment bei den Berechnungen mit einem Strahlungsmodell deutlich besser wiedergegeben wird.

## **7.3 Fortführung der Arbeiten zur Simulation der Gasverteilung – Nachrechnung HP1\_6**

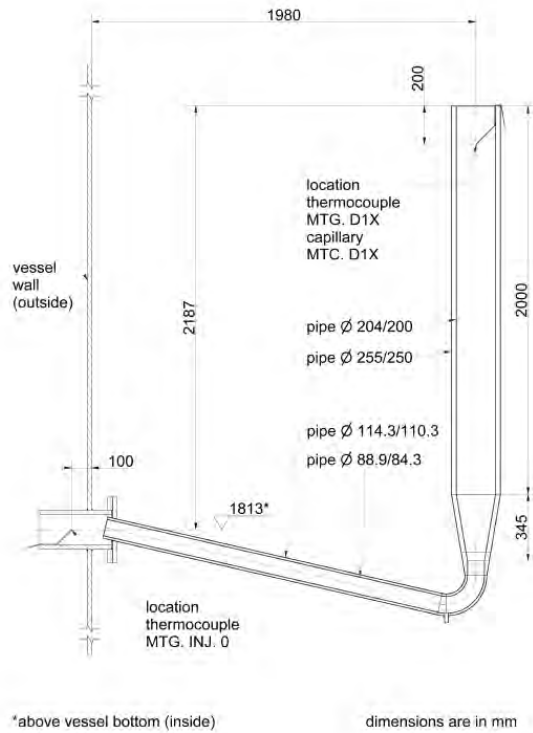
### **7.3.1 Experimenteller Versuchsaufbau**

Das im Folgenden beschriebene Experiment HP1\_6\_2 stellt eine Fortführung der HYMERES-Experimente dar, die an der PANDA-Anlage durchgeführt wurden. Abb. 7.37 zeigt den schematischen Aufbau des Experimentes. Im ersten PANDA-Behälter (Vessel 1) wurde im oberen Bereich eine Helium-Schicht mit ca. 22 % Helium erzeugt (die 25 % im Bild entsprechen nur die Spezifikation, die tatsächliche Konzentration im Experiment war niedriger). Das verbleibende Volumen der beiden PANDA-Behälter ist mit Dampf gefüllt. Die Starttemperatur nach der Aufheizphase beträgt etwa 107 °C. Über ein vertikales Einlassrohr (Abb. 7.38) wird dann Dampf injiziert (60 g/s,

150 °C), der zunächst gegen eine auf der Höhe von 5 m angebrachte horizontale Metallplatte (blaue Scheibe in Abb. 7.37) prallt, die einen Durchmesser von 20 cm und eine Dicke von 5 mm aufweist. Der umgelenkte Dampfstrahl steigt weiter auf und baut die Heliumschicht in etwa 600 s ab. Im zweiten Behälter (Vessel 2) gibt es ein Ventingventil, das für einen ungefähr konstanten Druck von 1.36 bar sorgt. Beide Behälter sind durch ein horizontales Rohr miteinander verbunden.

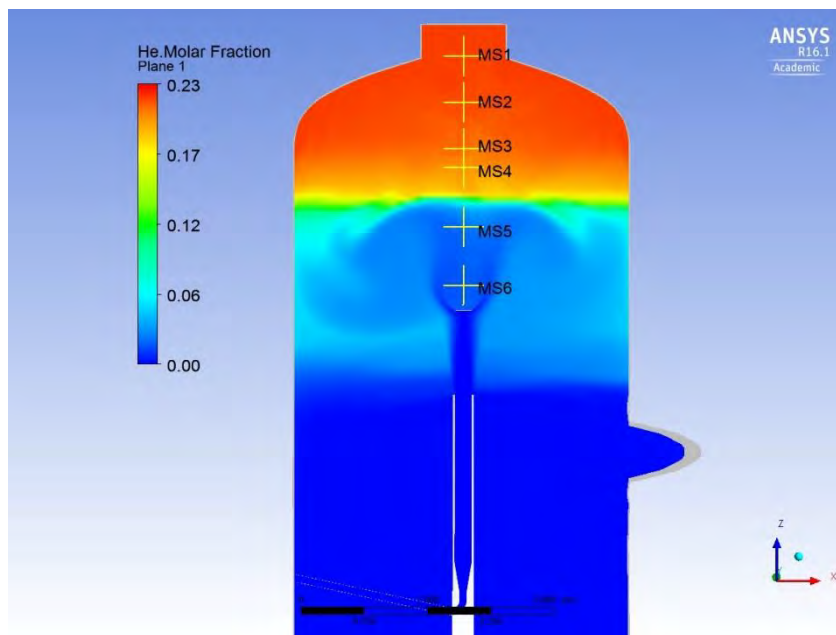


**Abb. 7.37** Schematische Darstellung des Versuchsaufbaus (Bild aus /PAR 15/)

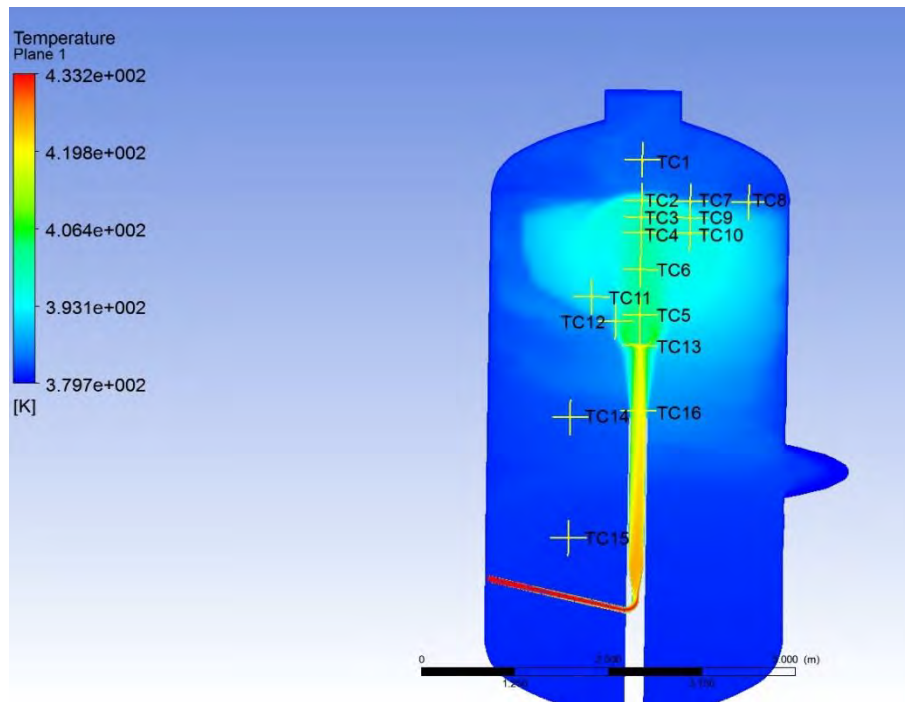


**Abb. 7.38** Geometrie des Einspeiserohrs /PAR 15/

In Abb. 7.39 und Abb. 7.40 ist die Position der Helium- und Temperaturmessstellen zu sehen. Für die Konzentrationsmessungen liegen nur 14 – 15 Messwerte für den gesamten Versuchsablauf vor, die Temperaturmessung dagegen erfolgte in Intervallen von 2 s.



**Abb. 7.39** Position der Helium-Messstellen



**Abb. 7.40** Position der Temperaturmessstellen

### 7.3.2 Überblick über die durchgeführten Arbeiten

Die Simulationen zum HP1\_6\_2-Experiment wurden im Rahmen eines Benchmarks mit „blinden“ und „offenen“ Nachrechnungen durchgeführt. Vor Veröffentlichung der Versuchsergebnisse wurden Simulationen durchgeführt, bei denen nur der gerade Teil des Einspeiserohrs modelliert wurde, und eine Simulation, bei der auch der gekrümmte Teil des Rohres berücksichtigt wurde. In der blinden Phase des Benchmarks wurden die Parameterstudien zum Einfluss des Turbulenzmodells und der Wärmestrahlung durchgeführt. Nach Offenlegung der Versuchsdaten und Diskussion der Ergebnisse des blinden Benchmarks wurde das CFD-Gitter des PANDA-Behälters überarbeitet. Wesentliche Änderungen waren die Modifikation der Topologie im Bereich der Prallplatte und eine Verbesserung der Gitterqualität. Zusätzlich wurden Simulationen durchgeführt, bei denen der gesamte im PANDA-Behälter liegende Teil des Einlassrohres in der Simulation berücksichtigt wurde. In Stand-Alone-Simulationen des Einlassrohres wurde eine Gitterstudie durchgeführt und die Rohrströmung und das resultierende Geschwindigkeitsprofil am Rohrauslass wurden detaillierter untersucht.

Im Folgenden wird darauf verzichtet, die durchgeführten Arbeiten chronologisch und vollständig darzustellen; stattdessen sollen nur die wesentlichen Ergebnisse dargestellt werden.



### 7.3.3 CFD-Geometrie und numerische Parameter

Folgende Simulationsparameter (Tab. 7.3) wurden für die Simulationen mit CFX verwendet:

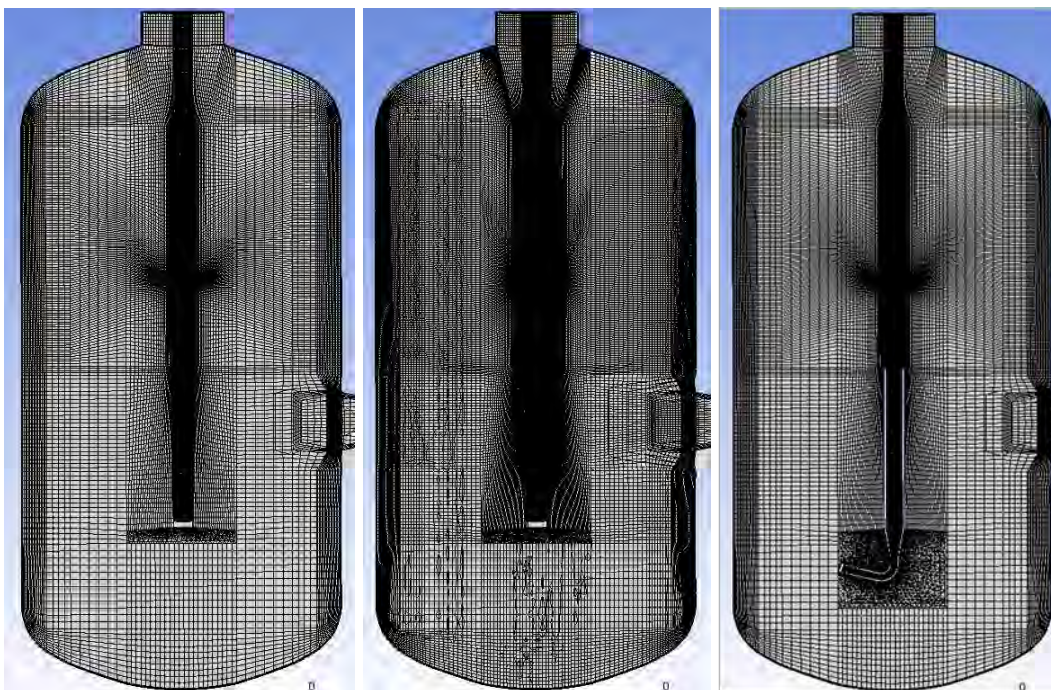
- Helium und Dampf werden als ideale Gase mit temperaturabhängigen Stoffwerten modelliert.
- Die Diffusionskonstante wird mit der Fuller-Korrelation berechnet.
- Standardmäßig wird das SST-Turbulenzmodell einschließlich der Terme für Bouyancy Turbulenz (Production und Dissipation) verwendet. Die Behälterwände, die Platte und die Wände des Einströmrohres werden als Solid Blocks in das CFD-Gitter integriert, der Wärmeübergang Gas/Festkörper wird mittels „Conjugated Heat Transfer“ berechnet.
- Die Wärmestrahlung wird mit dem Discrete-Transfer-Modell berechnet. Die Zahl der Strahlen wurde auf 64 erhöht. Der Absorptionskoeffizient von Dampf wird mittels einer Korrelation berechnet (RS1500), beträgt bei diesem Experiment in etwa  $1 \text{ m}^{-1}$  ( $0.97 \text{ m}^{-1}$ - $1.05 \text{ m}^{-1}$ ).
- Da Kondensation bei diesem Experiment keine Rolle spielte, wurden sowohl das Wand- als auch das Volumenkondensationsmodell ausgeschaltet.
- Der Massenstrom des einströmenden Dampfes wird als Massflow-Randbedingung entsprechend den experimentellen Daten berechnet. Die Temperatur des einströmenden Dampfes wurde so definiert, dass die berechneten und die gemessenen Temperaturen am Rohrauslass (Messpunkt MTG D1X, Abb. 7.38) übereinstimmen. Da der Messpunkt MTG.INJ.0 außerhalb des Rechengebiets liegt und da nicht alle Einzelheiten der Wärmeleitung im Einlassrohr berücksichtigt wurden (Wärmeleitung im Inneren des doppelwandigen Rohres nicht simuliert), war eine Anpassung der Einlasstemperatur notwendig.
- Als Konvergenzkriterium wurde  $\text{RMS} < 1.0\text{e-}4$  gewählt, die Zeitschrittweite wurde adaptiv in Abhängigkeit von der Konvergenz gewählt. Die Zeitschrittweite lag typischerweise im Bereich  $0.01 \text{ s} - 0.1 \text{ s}$ .

**Tab. 7.3** Infobox PANDA HP1\_6

Experiment	PANDA HP1_6
Phänomene	Wechselwirkung eines Gas-Jets mit einem Strömungshindernis, Auflösung einer Leichtgasschicht
Elementzahl	1.6 Mio. – 11.5 Mio. Zellen
Materialien	H <sub>2</sub> O, He Ideal Gas
Turbulenzmodell	SST, Parameterstudie: k-epsilon, RNG-k-epsilon
Diffusionskoeffizient	Nach Fuller
Wärmestrahlung	– Rechnung mit Strahlung: Discrete Transfer, Gray, 64 Strahlen – Parameterstudie: ohne Strahlung
Wandkondensation	Ohne
Volumenkondensation	Ohne
Konvergenz	RMS < 0.0001 (Parameterstudie: Max. Res. < 0.0005)

### 7.3.4 Durchführung einer Gitterstudie

In Abb. 7.41 – Abb. 7.43 und Tab. 7.4 sind unterschiedliche CFD-Gitter für die Versuchsnachrechnung des HP1\_6-Experimentes dargestellt.

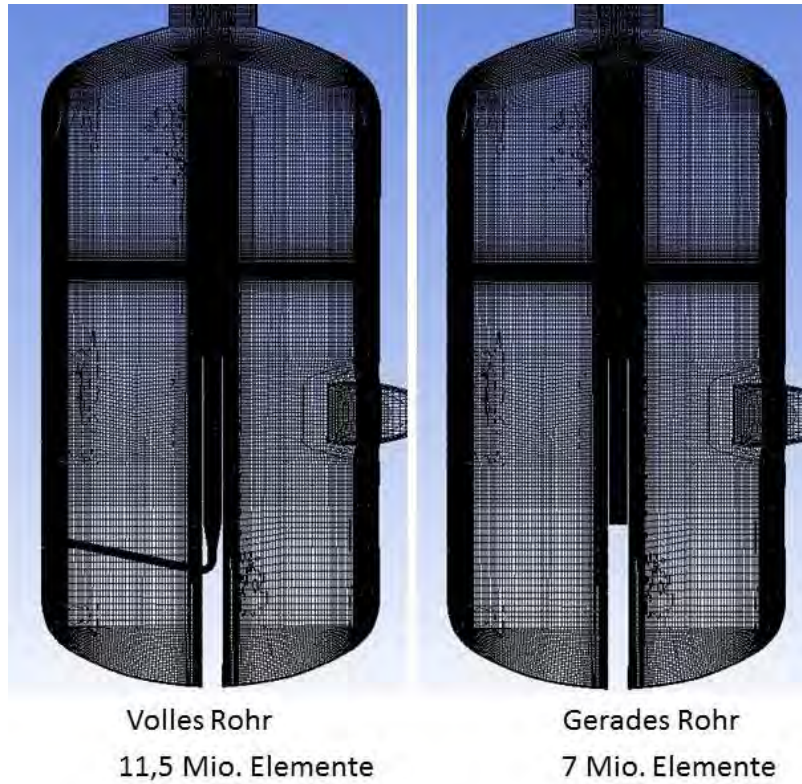


Geknicktes Rohr  
1.9 Mio. Elemente

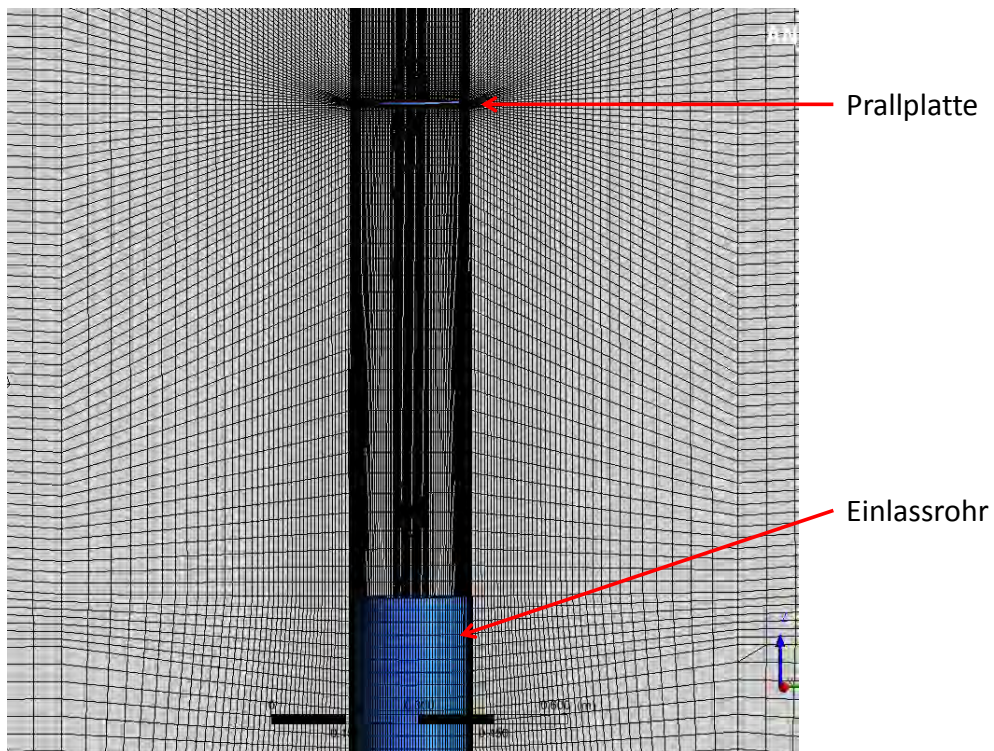
Gerades Rohr  
1.5 Mio. Elemente

Gerades Rohr  
4.9 Mio. Elemente

Geknicktes Rohr  
1.9 Mio. Elemente

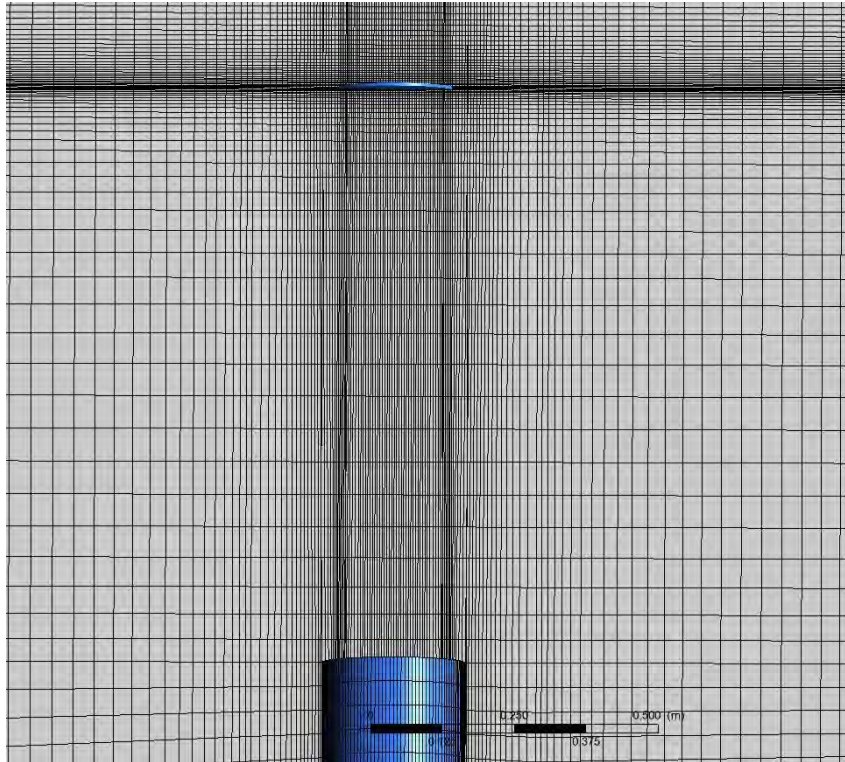


**Abb. 7.41** CFD-Gitter Nr. 1 (links oben) – Nr. 5 (rechts unten), die in der Gitterstudie verglichen wurden



**Abb. 7.42** Detailansicht des Gitters mit 4.9 Millionen Elementen





**Abb. 7.43** Detailansicht der Gitter mit vollem Rohr und Gitter mit geradem Rohr (7 Millionen Zellen)

**Tab. 7.4** Übersicht über verwendete CFX-Gitter

Nummer	Modellierung des Einlassrohrs	Elementanzahl
1	Gerader Teil	1.5 Mio. Zellen
2	Gerader Teil	4.5 Mio. Zellen
3	Einschl. Rohrkrümmung	1.9 Mio. Zellen
4	Volles Rohr	11.5 Mio. Zellen
5	Gerader Teil	7 Mio. Zellen

Es gibt 3 Gitter (Nr. 1, 2 und 5), bei denen nur der gerade Teil des Einlassrohres berücksichtigt wird. Zudem gibt es 2 Gitter, bei denen auch die Rohrkrümmung berücksichtigt wird; bei einem ist das Einlassrohr nur um die Rohrkrümmung (Nr. 3) erweitert worden, bei dem anderen ist der gesamte im PANDA-Behälter gelegene Teil des Einlassrohres ins CFD-Gitter integriert worden (Nr. 4). Bei den Gittern Nr. 1 – 3 handelt es sich um hybride Gitter-Mischungen aus strukturierten und unstrukturierten Elementen, wobei hauptsächlich strukturierte Zellen verwendet werden, insbesondere im oberen Teil des 1. Behälters, in dem die Prallplatte und Heliumschicht liegen. Die Gitter Nr. 4 und 5 enthalten ausschließlich strukturierte Zellen.

Das CFD-Gitter Nr. 2 (gerades Rohr, 4.5 Mio. Elemente) ergibt sich aus einer Gitterverfeinerung des Gitters Nr. 1, wobei sich die Verfeinerung im Wesentlichen auf den 1. PANDA-Behälter beschränkt, da die zu untersuchenden Phänomene (Ablenkung eines Strahls durch eine Prallplatte und Auflösung einer stabilen Leichtgasschichtung) in diesem Bereich liegen. Gitter Nr. 3 basiert auf dem Gitter Nr. 1, wobei nur das Einlassrohr modifiziert wurde. Dieses dritte Gitter wurde in der blinden Phase des Benchmarks erstellt und verwendet.

### **7.3.5 Ergebnisse der Gitterstudie**

Bei allen CFX-Simulationen zeigt sich ein ähnliches Verhalten des Dampfstrahls nach Ablenkung durch die Prallplatte. Zu Beginn der Simulation teilt sich der Strahl nach dem Hindernis ringförmig auf (Abb. 7.46, links). Nachdem die Heliumschichtung teilweise erodiert wurde und die Schichtungsgrenze sich nach oben verschoben hat, ändert sich die Form der Strömung, der Dampfstrahl vereinigt sich nach Umlenkung durch das Hindernis wieder (Abb. 7.46, rechts). Der Zeitpunkt und die Höhe der Heliumschichtung, bei denen dieser Wechsel der Strömungsform passiert, variieren allerdings je nach CFX-Gitter, insbesondere das Strömungsprofil beim Einströmen in den PANDA-Behälter scheint einen Einfluss zu haben.

Dieses Phänomen wurde auf dem HYMERES-Benchmark-Treffen ausführlich diskutiert. Da keine Geschwindigkeitsmessungen im relevanten Bereich und Zeitraum vorliegen, konnte dies nicht abschließend geklärt werden. Eine mögliche Erklärung für das Strömungsprofil zu Beginn des Experiments war, dass die Form der Topologie des CFD-Gitters (Abb. 7.42, keine horizontalen Zellgrenzen sondern schräg nach oben verlaufende) die Aufspaltung des Dampfstrahls nach dem Hindernis begünstigt. Um dies zu untersuchen, wurden zwei weitere CFD-Gitter (Nr. 4, Nr. 5) erstellt, die sich nur durch die Modellierung des Einlassrohres unterscheiden (gerades Rohr/volles Rohr). Bei ihnen wurde die Gittertopologie im Bereich der Prallplatte geändert, so dass sich in diesem Bereich Zellen mit möglichst orthogonalen Seiten befinden (Abb. 7.43). Zusätzlich wurde die Gitterqualität (insbesondere der Mesh-Expansion-Faktor) insgesamt verbessert und die Gitterfeinheit in kritischen Bereichen erhöht. Die Vernetzung und die Strömung im Einlassrohr wurden in Stand-Alone-Simulationen untersucht. Das Einlassrohrgitter Nr. 5 (Tab. 7.5) mit ca. 7.5 Millionen Zellen wurde zur Berechnung der Rohrströmung verwendet. Dazu wurden die oberen 10 cm des Einlassrohres entfernt,

und das Netz für das Einlassrohr wurde in der Höhe von 3.9 m über ein GGI-Interface und das CFD-Gitter des PANDA-Behälters gekoppelt.

Ein Vergleich des zeitlichen Verlaufs der Heliumkonzentration und der Temperatur (Abb. 7.44, Abb. 7.45) zeigt zwar einen ähnlichen Verlauf bei allen Simulationen, der Zeitpunkt der Schichtungsauflösung variiert allerdings im Bereich 480 s – 550 s. Der Vergleich der Simulationen mit geradem Einlassrohr zeigt, dass mit zunehmender Gitterfeinheit die Geschwindigkeit des Schichtungsabbaus abnimmt. Bei dem obersten Messpunkt MS\_1 ( $h = 8,03$  m) unterscheidet sich die Heliumkonzentration bei den Simulationen mit den beiden feinsten Gittern (Nr. 2, Nr. 5) nur schwach, während das größte Gitter einen etwas späteren Abfall der Heliumkonzentration zeigt.

Bei dem weiter unterliegenden Messpunkt MS-3 zeigt sich ein etwas anderes Bild. Die Heliumschicht wird an diesem Ort bei Verwendung des feinsten Gitters (Nr. 5) früher abgebaut als bei den Gittern (Nr. 1 und Nr. 2), die einen ähnlichen Verlauf der Heliumkonzentration berechnen. Es ist zu beachten, dass sich das Gitter (Nr. 5) auch durch die Vernetzungsstrategie von den anderen beiden Gittern unterscheidet. Die Temperaturmessstellen (TC\_2, TC\_7 und TC\_8) befinden sich auf der gleichen Höhe und zeigen für die Temperatur ein sehr ähnliches Verhalten. In den ersten 100 s – 200 s spaltet sich der Dampfstrahl nach dem Hindernis ringförmig auf, im späteren Verlauf ändert sich das Strömungsprofil (Abb. 7.46). Der Übergang erfolgt bei der Simulation mit dem feinsten Gitter (Nr. 5) deutlich früher ( $t \sim 130$  s) als bei der Simulation mit dem größeren Gitter (Nr. 1) ( $t \sim 226$  s), dies entspricht auch einer anderen Höhe der Heliumschicht (Nr. 5:  $h \sim 6.38$  m; Nr. 1:  $h \sim 6.57$  m). Die andere Gitterfeinheit und Gittertopologie hat einen deutlichen Einfluss auf die Strömung um die / hinter der Prallplatte.

Abgesehen von der Geometrie des Einlassrohres sind die Gitter Nr. 1 und Nr. 3 sowie die Gitter Nr. 4 und Nr. 5 gleich. Ein Vergleich dieser Simulationen lässt einen Rückschluss zu, ob das Strömungsprofil am Ende des Einlassrohres einen Einfluss auf die Schichtungsauflösung hat oder ob nach Auftreffen auf die Prallplatte das ursprüngliche Strömungsprofil an Bedeutung verliert. Es zeigt sich, dass bei Berücksichtigung der Rohrkrümmung der Schichtungsablauf schneller erfolgt, die Asymmetrie im Geschwindigkeitsfeld ist sowohl vor als auch noch nach der Platte erkennbar. Der Übergang des Strömungsmusters hinter der Platte erfolgt bei Simulation des vollen Rohres (Nr. 4) früher ( $t \sim 110$  s) als bei der Simulation mit geradem Einlassrohr (Nr. 5,  $t \sim 130$  s).

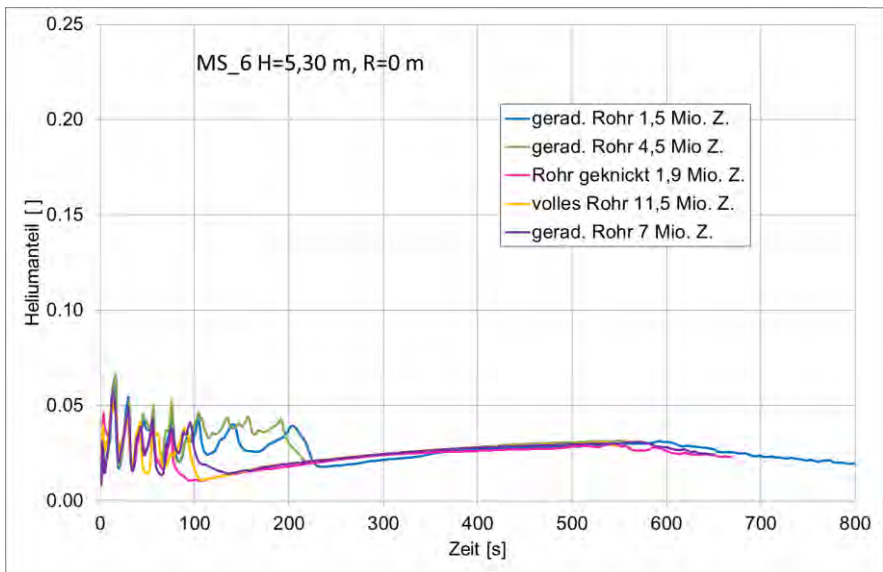
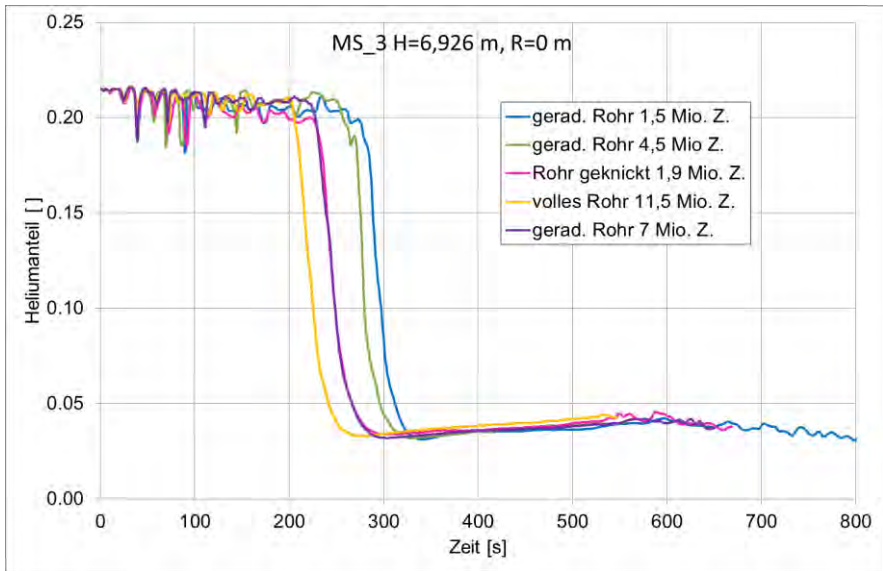
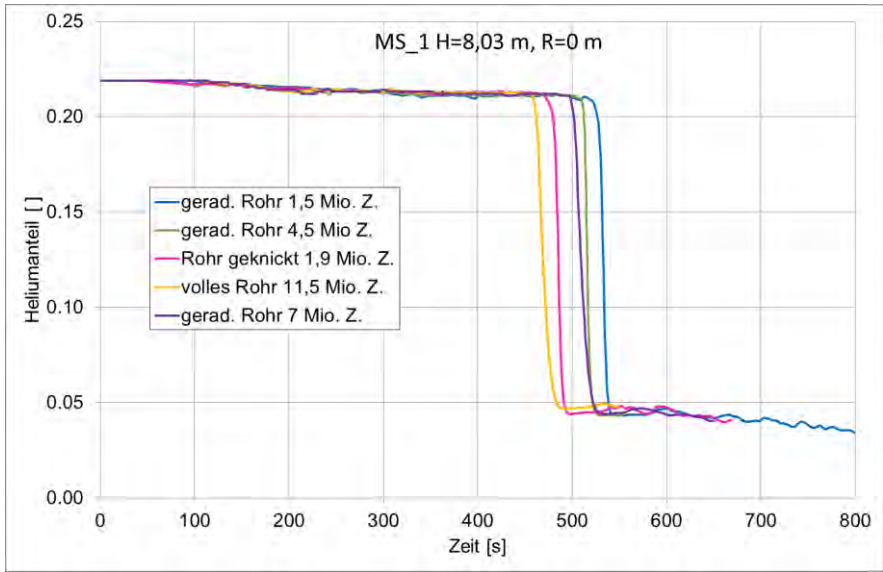


Abb. 7.44 Abbau der Heliumschichtung in Abhängigkeit vom CFD-Gitter

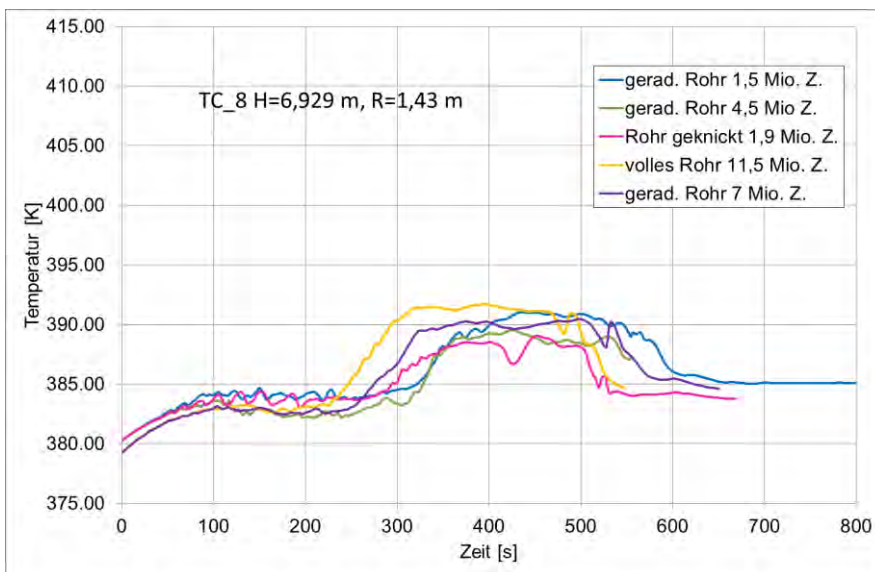
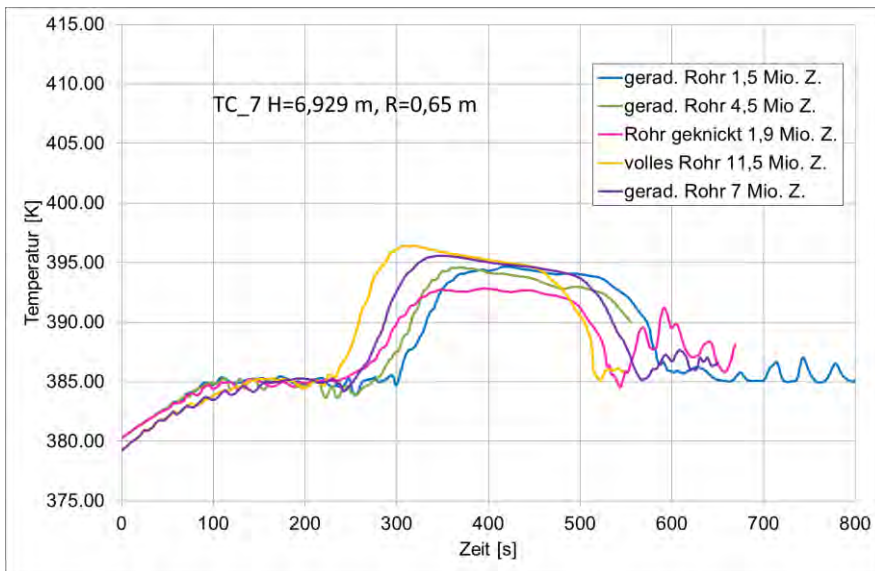
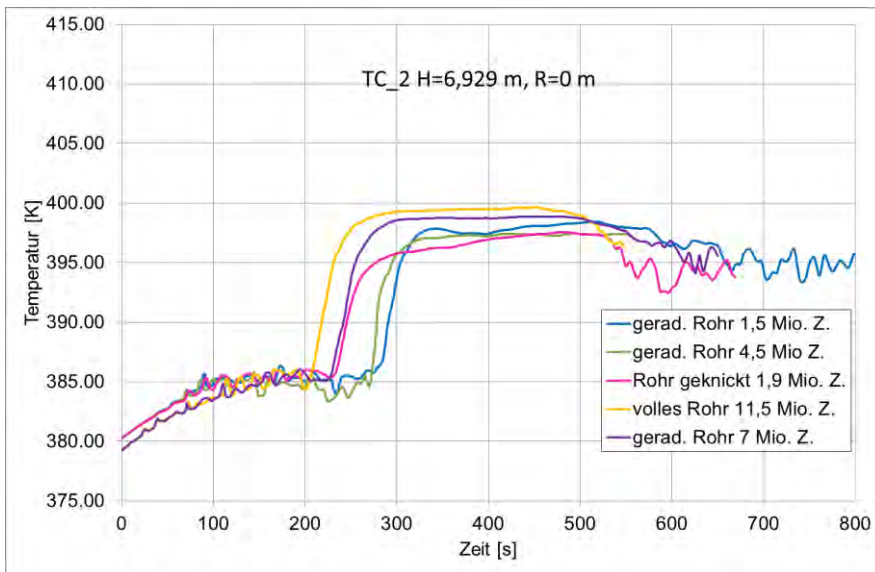
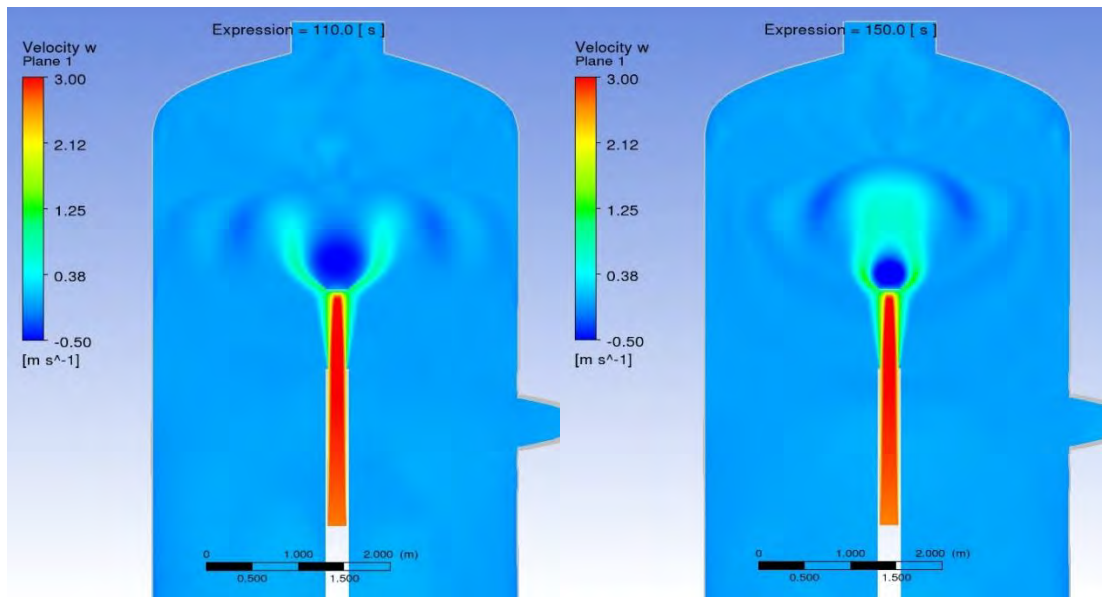
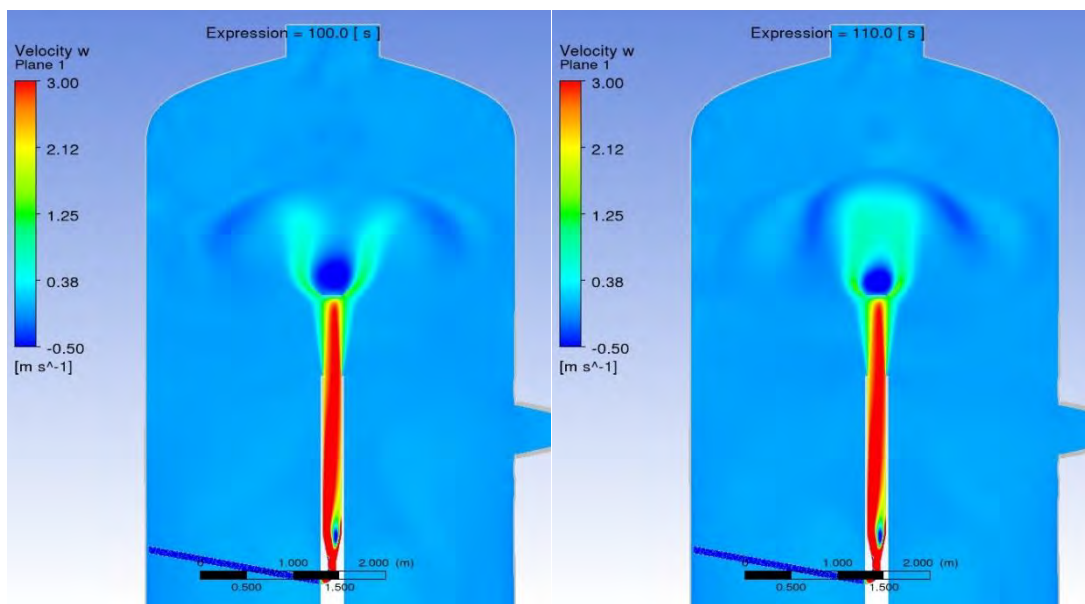


Abb. 7.45 Temperaturverlauf in Abhängigkeit vom CFD-Gitter





**Abb. 7.46** Vertikalgeschwindigkeit bei der Simulation mit geradem Rohr (Gitter Nr. 5) nach 110 s (links) und 150 s (rechts)



**Abb. 7.47** Vertikalgeschwindigkeit bei der Simulation mit vollem Rohr (Gitter Nr. 4) nach 100 s (links) und 110 s (rechts)

### 7.3.6 Parametermeterstudie zum Gittereinfluss im Einlassrohr

CFX-Simulationen mit unterschiedlicher Modellierung des Einlassrohres (unterschiedliche geometrische Vereinfachungen, Gitterfeinheit) zeigen eine Abhängigkeit der Schichtungsauflösung von der Modellierung des Einlassrohres (Abb. 7.44). Um den

Rechenaufwand zu verringern und um eine optimale Vernetzung des Einlassrohres zu ermöglichen, soll in einer Gitterstudie die Strömung im allein stehenden Einlassrohr simuliert werden. Dabei soll untersucht werden, welche Gitterfeinheit notwendig ist, um eine gitterunabhängige Lösung zu erhalten und um zu testen, welchen Einfluss geometrische Vereinfachungen auf das Strömungsergebnis haben.

Beim Experiment HP1-6 wird mit nahezu konstantem Massenstrom von ca. 60 g/s Dampf in den PANDA-Behälter DW1 eingespeist. Die Temperatur des Dampfes variiert allerdings während des Experiments. Am Beginn des Einlassrohres (MTG.ING.0, Abb. 7.38) steigt die Temperatur schnell auf 158 °C an und wird nach ca. 300 s auf ca. 154 °C abgesenkt. Am Messpunkt nahe des Rohrauslasses (MTC.D1X) ergibt sich durch Wärmeverluste an die Wand bis ca. 350 s ein kontinuierlicher Temperaturanstieg auf 150 °C, danach bleibt die Temperatur in etwa konstant. Aufgrund der variablen Temperatur kann erst nach ca. 400 s mit einem quasistationären Strömungsverlauf im Rohr gerechnet werden.

Um die Rechenzeit für die Simulation zu begrenzen und den Vergleich der Simulationsergebnisse zu vereinfachen, wird eine Parameterstudie mit adiabaten Wänden und einer konstanten Einspeisetemperatur durchgeführt. In diesem Fall hat sich nach ca. 5 s ein konstantes Geschwindigkeitsfeld im Rohr eingestellt. Die Geschwindigkeitsprofile im stationären Zustand werden in verschiedenen Höhen ( $z = 2 \text{ m}$ ,  $3 \text{ m}$  und  $3.9 \text{ m}$ ) sowohl in x-Richtung (Richtung der Rohrkrümmung) als auch in y-Richtung miteinander verglichen.

Am Rohreinlass wird eine „Massflow“-Einlassbedingung gesetzt. Dies bedeutet, dass der vorgegebene Massenstrom ins Rohr eingespeist wird, die Einströmgeschwindigkeit ist senkrecht zur Öffnung und räumlich nahezu konstant (Blockprofil, hier 15.76 m/s).

In Abb. 7.38 ist die Geometrie des Einlassrohres im Experiment HP1-6 zu sehen. In der Parameterstudie wird der gesamte im PANDA-Behälter befindliche Teil des Einlassrohres simuliert (Abb. 7.49). Die Verbindung des Rohres mit dem PANDA-Behälterflansch und der außerhalb des PANDA-Behälters liegende Teil des Einspeiserohres werden nicht berücksichtigt. Es muss aber davon ausgegangen werden, dass ein räumlich konstantes Geschwindigkeitsprofil am Rohreinlass nicht die tatsächlichen Gegebenheiten widerspiegelt. Der Rohreinlass liegt in der Parameterstudie in der Ebene parallel zur z-Achse, da dies der Richtung des Behälterflansches entspricht und davon ausgegangen wird, dass dies auch näherungsweise die Einströmrichtung ins Rohr

ist. Eine belastbare Aussage ist hierzu aber ohne Simulation des Behälterflansches und eines beträchtlichen Stücks des Zulaufs außerhalb des Behälters nicht möglich.

Die Turbulenz wird mit dem SST-Modell simuliert. Um eine hohe Genauigkeit zu gewährleisten, wird als Konvergenzkriterium das MAX-Residuum  $< 5.0e-4$  gewählt. Der Zeitschritt für die transiente Simulation wird je nach Konvergenz  $1.0e-3$  s bis  $0.1$  s gewählt.

Die Gitterstudie wurde mit 6 unterschiedlich feinen Gittern durchgeführt. Die Vernetzungsstrategie ist bei allen Gittern identisch, nur die Größe der Zellen wurde immer weiter erhöht. (Abb. 7.50 – Abb. 7.52).

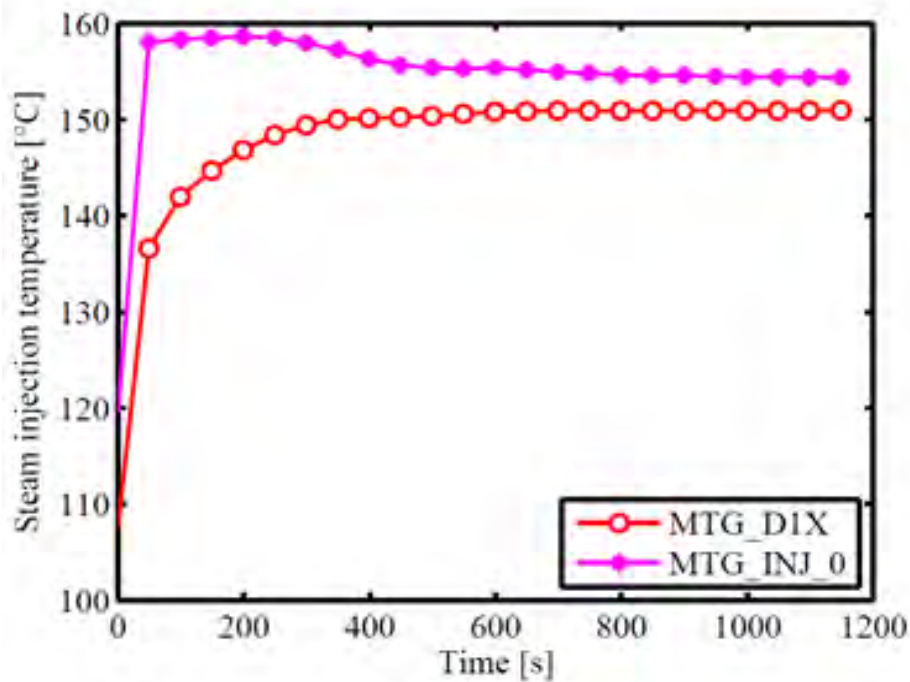
Die Simulationen zeigen, dass die Rohrkrümmung einen starken Einfluss auf die Strömung hat. Im Bereich der Krümmung liegt ein komplexes Strömungsfeld vor, in diesem Bereich und auch noch nach der Rohrverbreiterung kommt es zu Verwirbelungen (Abb. 7.53). Zusätzlich erhält die Strömung einen Drall (Abb. 7.55, Abb. 7.56). In der Ansicht von oben ist die Form mit den zwei Verwirbelungen gut zu erkennen. Auch im oberen Bereich des Rohres hat sich noch kein für eine vollausgebildete Rohrströmung typisches Geschwindigkeitsprofil eingestellt (Abb. 7.57, Abb. 7.58). In x-Richtung (Richtung der Krümmung) ist das Maximum der Strömungsgeschwindigkeit leicht verschoben. Die Geschwindigkeitsprofile in y-Richtung bei den Simulationen mit den Gittern 1, 2 und 5 erfüllen die Symmetrie näherungsweise. Die Simulationen mit den Gittern 3 und 4 zeigen dagegen entlang der y-Achse eine deutliche Asymmetrie (Abb. 7.58). Die Ursache hierfür wird bei Betrachtung der Stromlinien von oben deutlich (Abb. 7.55). Bei der Simulation mit dem Gitter 4 liegen die beiden Wirbel nicht symmetrisch zur y-Achse, sondern die Symmetrieebene ist leicht gedreht.

Bei der quantitativen Auswertung der Geschwindigkeiten in verschiedenen Höhen zeigt sich, dass trotz der sehr feinen Vernetzung mit 1.87 Millionen und 7.47 Millionen Zellen bei den zwei feinsten Gittern noch keine Gitterunabhängigkeit vorliegt. Insbesondere im unteren Bereich unterscheiden sich die Strömungsgeschwindigkeiten deutlich (Höhe 2 m). Im Bereich der Krümmung sind beim feinsten Gitter zwei kleine Zonen mit einer Rückströmung zu erkennen, die bei gröberer Vernetzung nicht simuliert werden. Die Unterschiede zwischen den Simulationen nehmen allerdings mit zunehmendem Abstand von der Rohrkrümmung ab. Aber auch in 3.9 m Höhe ist die exakte Form des Geschwindigkeitsprofils sowohl in x- als auch in y-Richtung noch von der Diskretisierung abhängig. Eine weitere Gitterverfeinerung war aufgrund des hohen Rechenzeit-

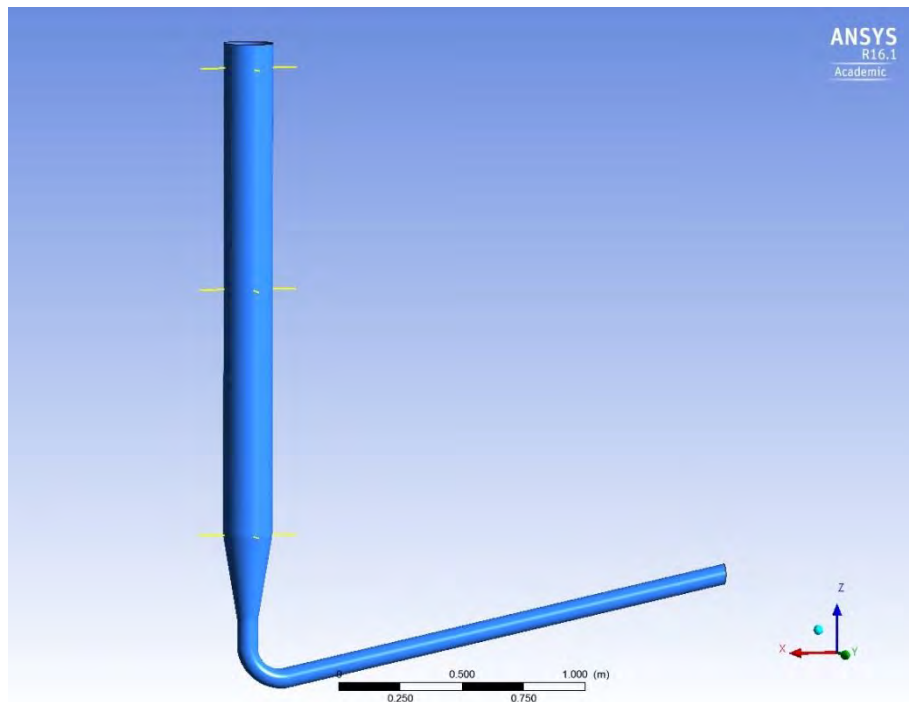
aufwands mit den verfügbaren Ressourcen nicht möglich. Insbesondere im Bereich der Rohrkrümmung und kurz dahinter stellt sich die Frage, wie genau eine Simulation mit dem SST-Turbulenzmodell ist (2-Gleichungsmodell RANS-Modell). Eine detaillierte Untersuchung dieser Fragestellung geht über die im Projekt vorgesehenen Arbeiten hinaus.

**Tab. 7.5** Anzahl der Zellen bei den CFD-Gittern

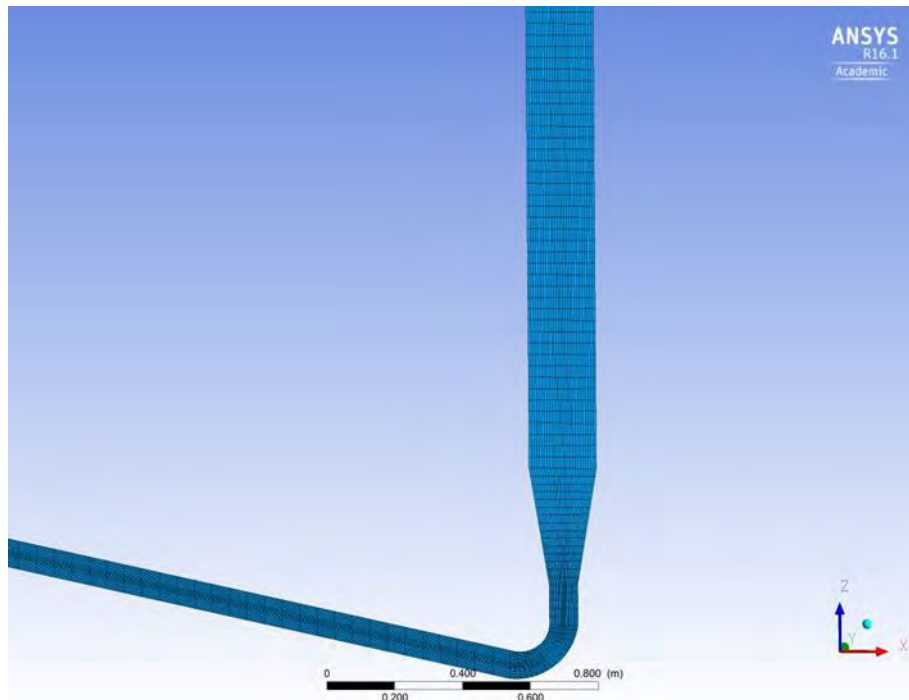
Nr.	Anzahl der Zellen
1	5 280
2	53 055
3	375 440
4	1.87 Millionen
5	7.47 Millionen



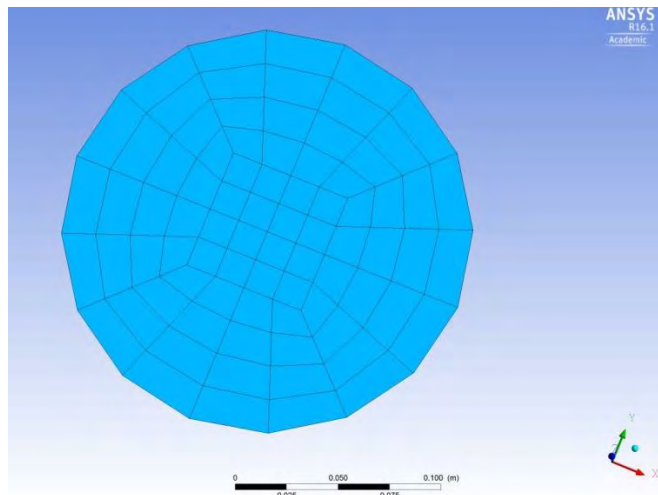
**Abb. 7.48** Dampfeinspeisemassenstrom und Temperatur



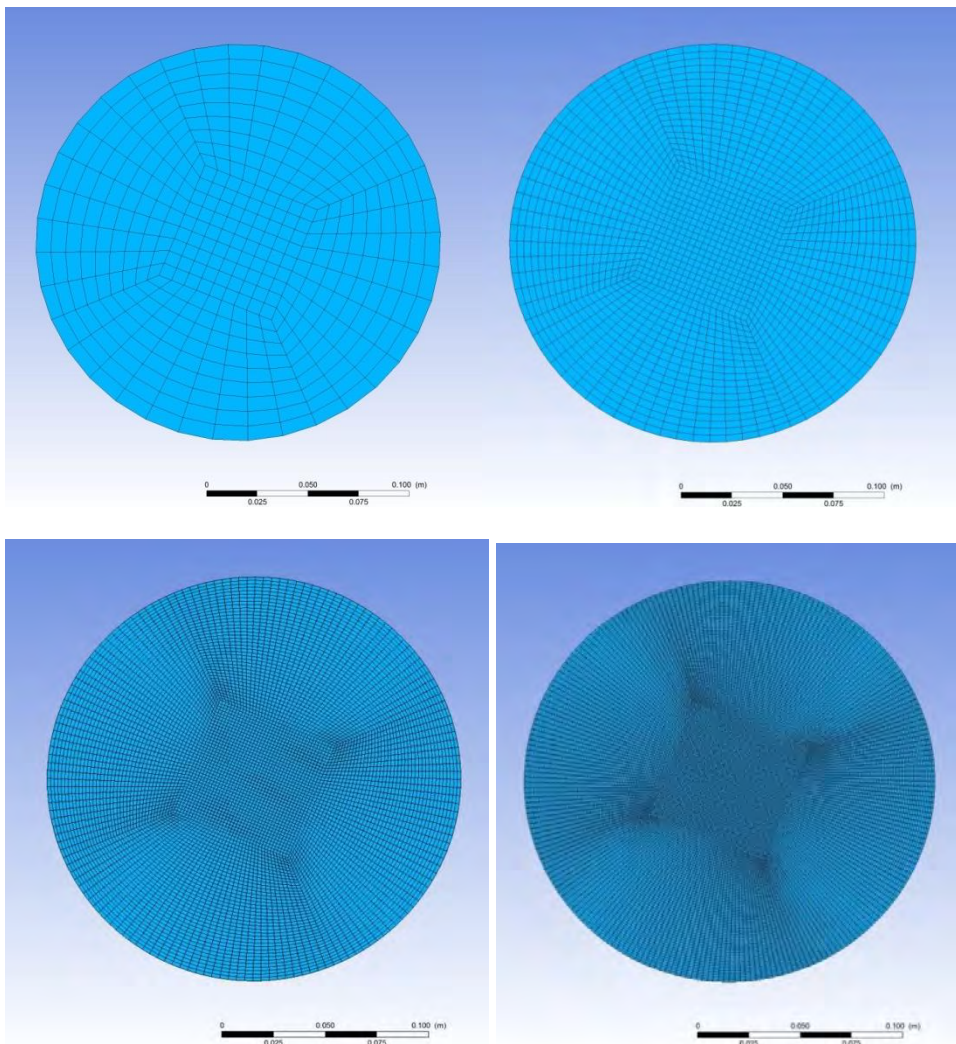
**Abb. 7.49** Rohrgeometrie bei der Gitterstudie, die gelben Linien markieren die Position der ausgewerteten Geschwindigkeitsprofile



**Abb. 7.50** CFD-Gitter beim Gitter 2

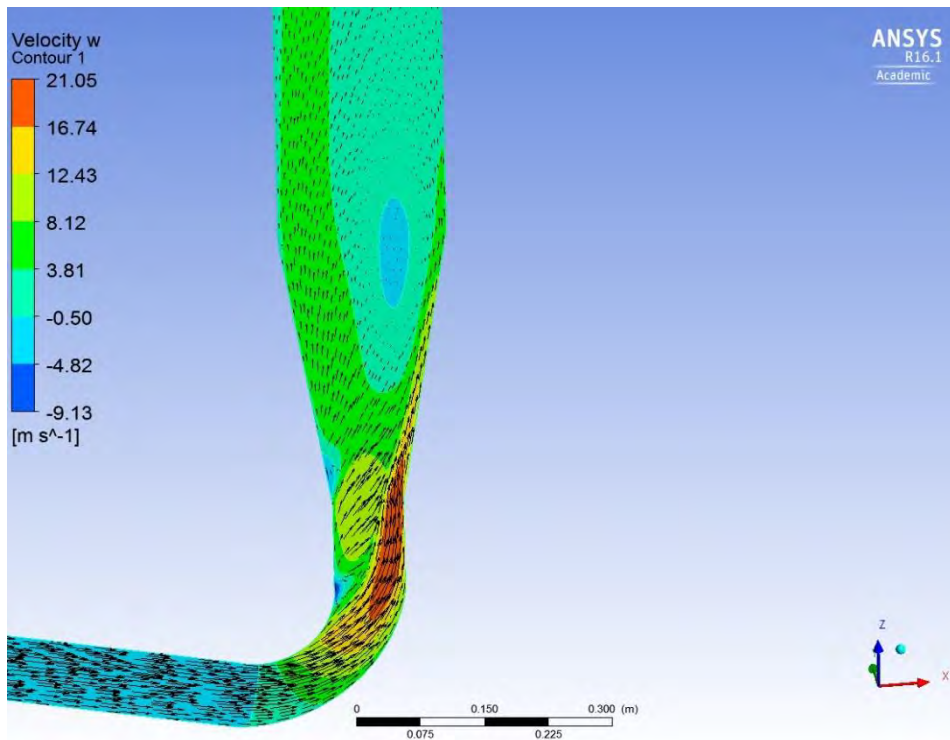


**Abb. 7.51** CFD-Gitter im Bereich des Rohrauslasses Gitter 1

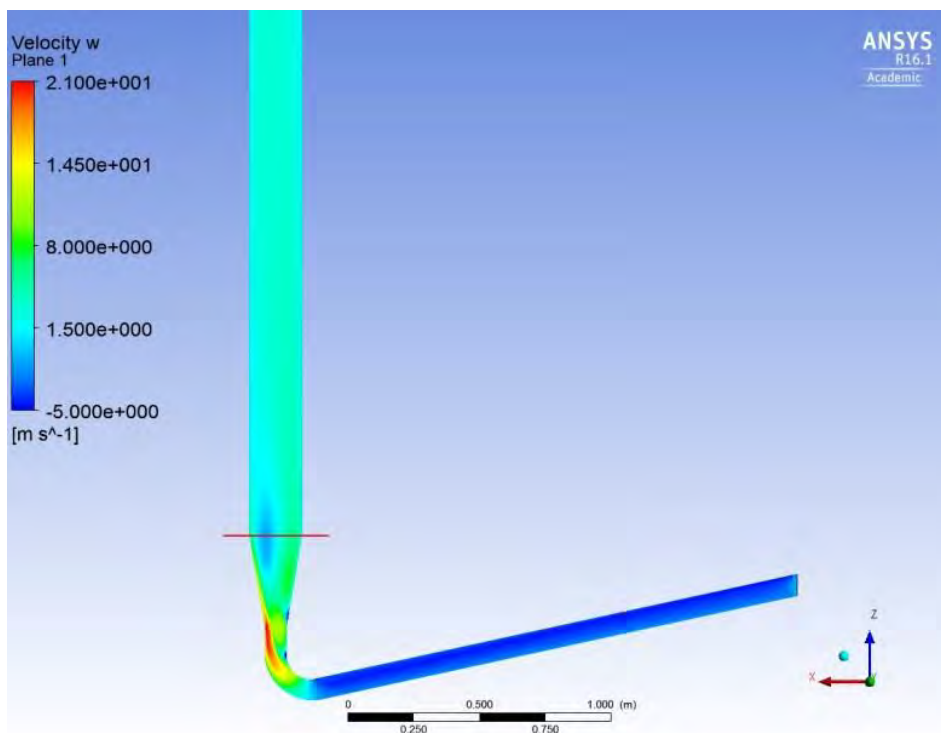


**Abb. 7.52** CFD-Gitter im Bereich des Rohrauslasses. Oben links Gitter 2, oben rechts Gitter 3, unten links Gitter 4, unten rechts Gitter 5

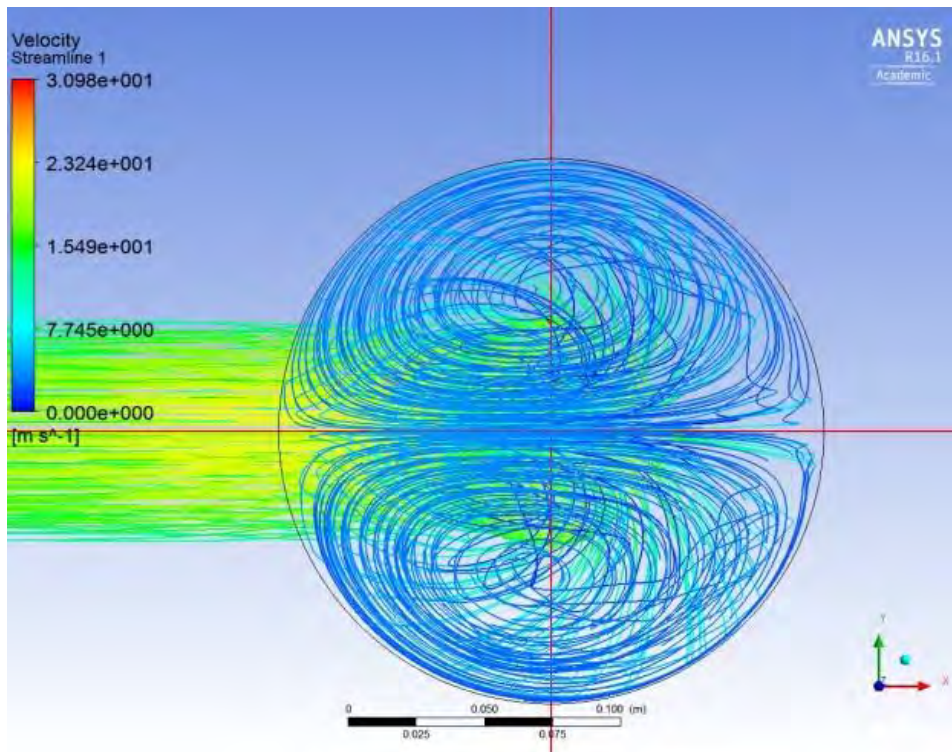




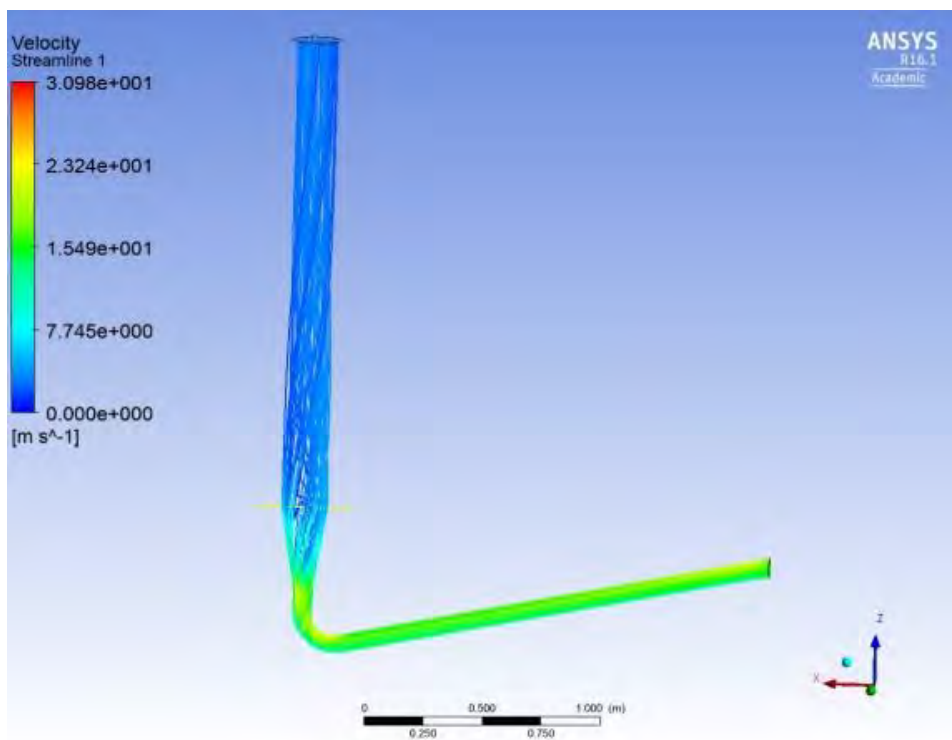
**Abb. 7.53** Geschwindigkeit in z-Richtung (Farbe) bei der Simulation mit dem Gitter 5



**Abb. 7.54** Geschwindigkeit in z-Richtung bei den Simulationen mit dem Gitter Nr. 5

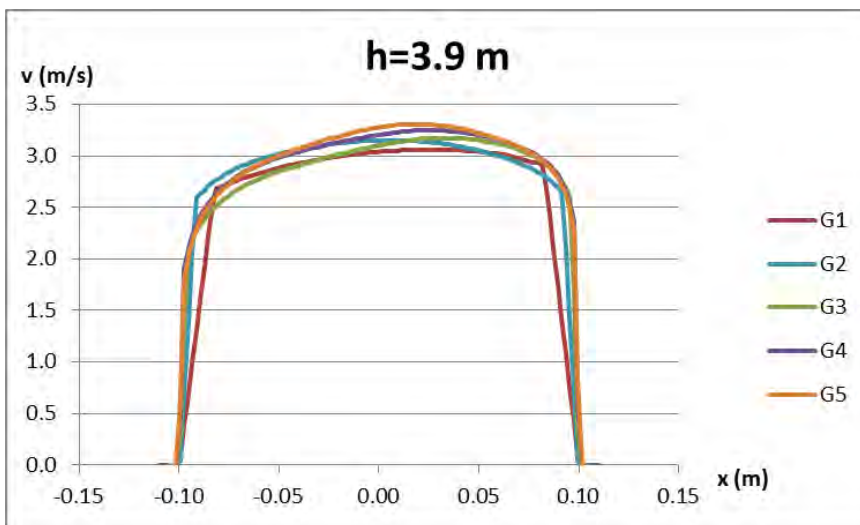
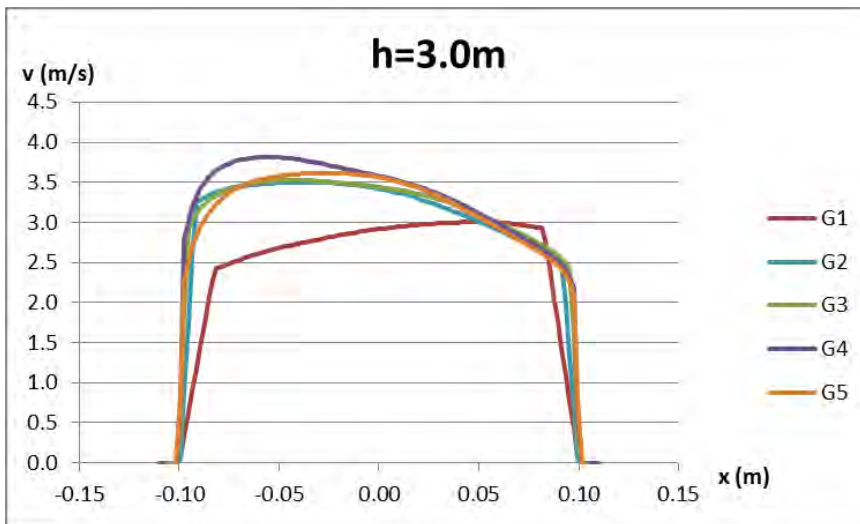
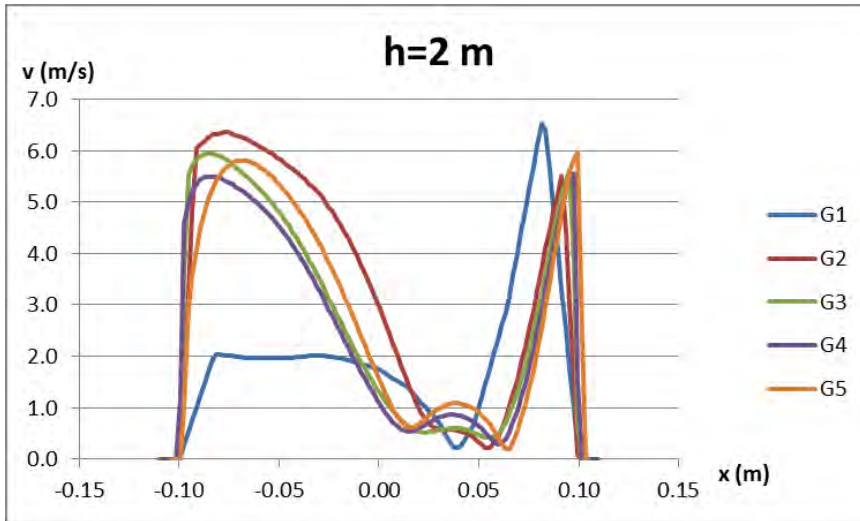


**Abb. 7.55** Stromlinien bei der Simulation mit dem Gitter. Ansicht von oben (z-Achse)

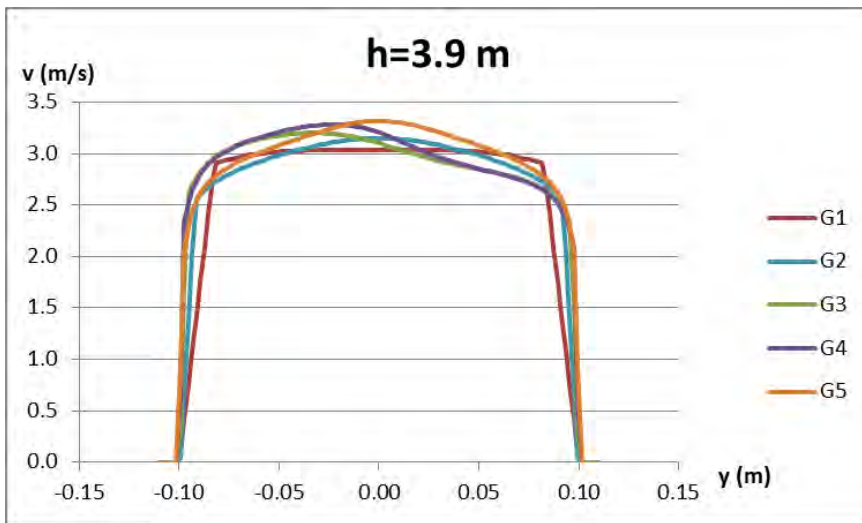
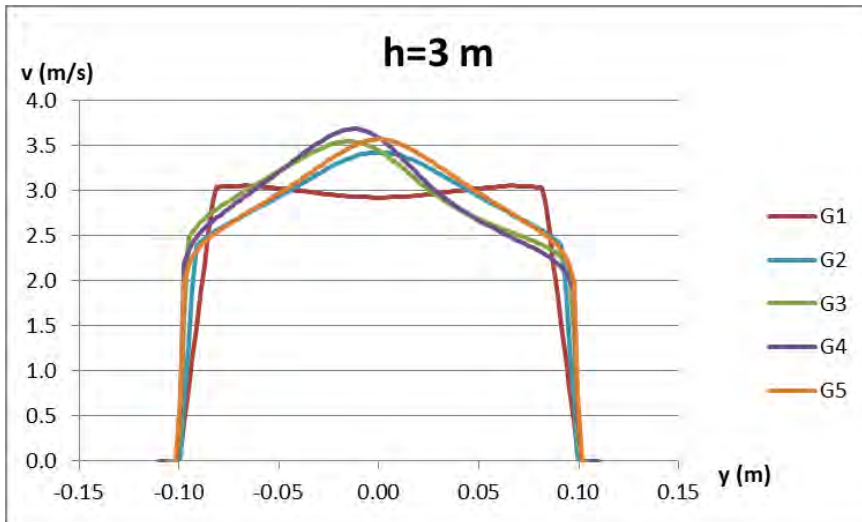
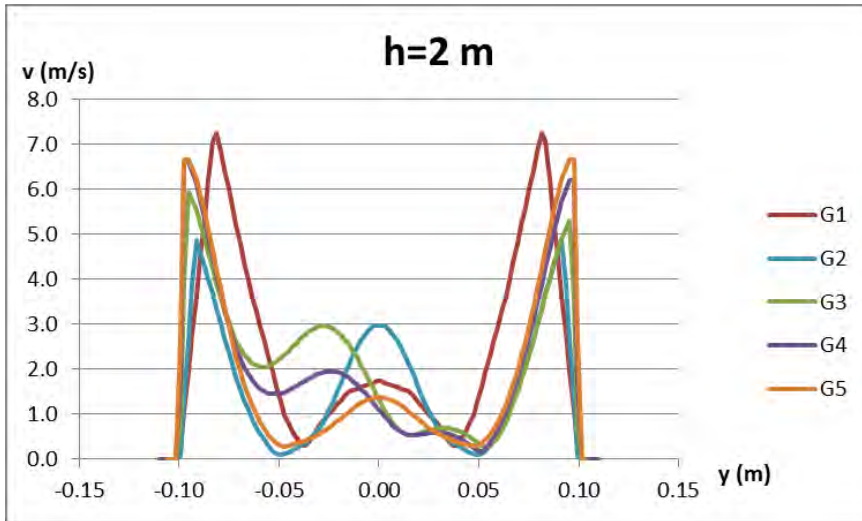


**Abb. 7.56** Stromlinien bei der Simulation mit dem Gitter Nr. 3 (links) und dem Gitter Nr. 5 (rechts). Seitenansicht





**Abb. 7.57** Geschwindigkeitsprofile in unterschiedlichen Höhen ( $h$ ) entlang der  $x$ -Achse



**Abb. 7.58** Geschwindigkeitsprofile in unterschiedlichen Höhen ( $h$ ) entlang der  $y$ -Achse

### 7.3.7 Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten

In diesem Abschnitt erfolgt ein Vergleich der Ergebnisse der Simulationen mit den feinsten Gittern (Nr. 4 „volles Rohr“ und Nr. 5 „gerades Rohr“) mit experimentellen Daten. Die Simulation mit dem vollen Einlassrohr bildet die Geometrie des Versuchsaufbaus genauer ab. Allerdings gibt es hinsichtlich der Simulation des Einlassrohres noch Unsicherheiten (siehe Abschnitt 7.3.6) und da in HP1-6\_2 keine Geschwindigkeitsmessung des einströmenden Dampfes vorgenommen wurde, ist unklar, welches Strömungsprofil am Ende des Einlassrohres vorlag. Bei ähnlichen PANDA-Nachrechnungen wurde von der GRS und auch von anderen Instituten üblicherweise nur der gerade Teil des Einlassrohres berücksichtigt. Deshalb wird beim Vergleich mit experimentellen Daten auch diese Rechnung („gerades Rohr“) berücksichtigt. Die Simulationsergebnisse der Simulation mit größeren Gittern werden nicht mehr berücksichtigt, da davon ausgegangen wird, dass bei ihnen die numerischen Fehler größer sind.

Bei den beiden unteren Heliummessstellen MS\_5 und MS\_6 sind die Simulationsergebnisse für beide Simulationen sehr ähnlich (Abb. 7.59, Abb. 7.62). Ab 100 s ist eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten vorhanden, aufgrund des großen zeitlichen Abstands zwischen den Konzentrationsmessungen ist eine verlässliche Aussage für die Anfangsphase mit den starken Fluktuationen in der Simulation nicht möglich. Für die weiter oben gelegenen Messpunkte findet bei Simulation des vollen Einlassrohres immer eine etwas frühere Erosion der Schichtung statt. Bei den Messstellen MS\_4 und MS\_3 (Abb. 7.59, Abb. 7.61) zeigt die Simulation mit geradem Einlassrohr eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Versuch. Bei der Simulation mit vollem Rohr wird die Schichtung um 20 s – 40 s zu schnell abgebaut. Bei den obersten Messstellen ist bei beiden Simulationen die Schichtungsauflösung zu schnell, allerdings ist die Abweichung bei vollem Rohr mit ca. 80 s bei MS\_1 (Abb. 7.60) größer als bei Simulation mit geradem Einlassrohr (ca. 40 s). Bei MS\_1 scheint im Experiment schon vor der schnellen Erosion durch den Dampfstrahl durch turbulente und diffusive Prozesse ein leichter Abfall der Konzentration stattgefunden zu haben. Dies wird von allen Simulationen nur in geringerem Maße vorhergesagt.

Der Vergleich der Temperaturmessstellen mit den beiden Simulationen (Abb. 7.63 – Abb. 7.67) zeigt eine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment, die Abweichungen liegen in der Regel bei max. 5 K – 6 K, während bei der Simulation ohne Strahlungsmodell Abweichungen von über 15 K auftreten (siehe Abschnitt 7.3.8).

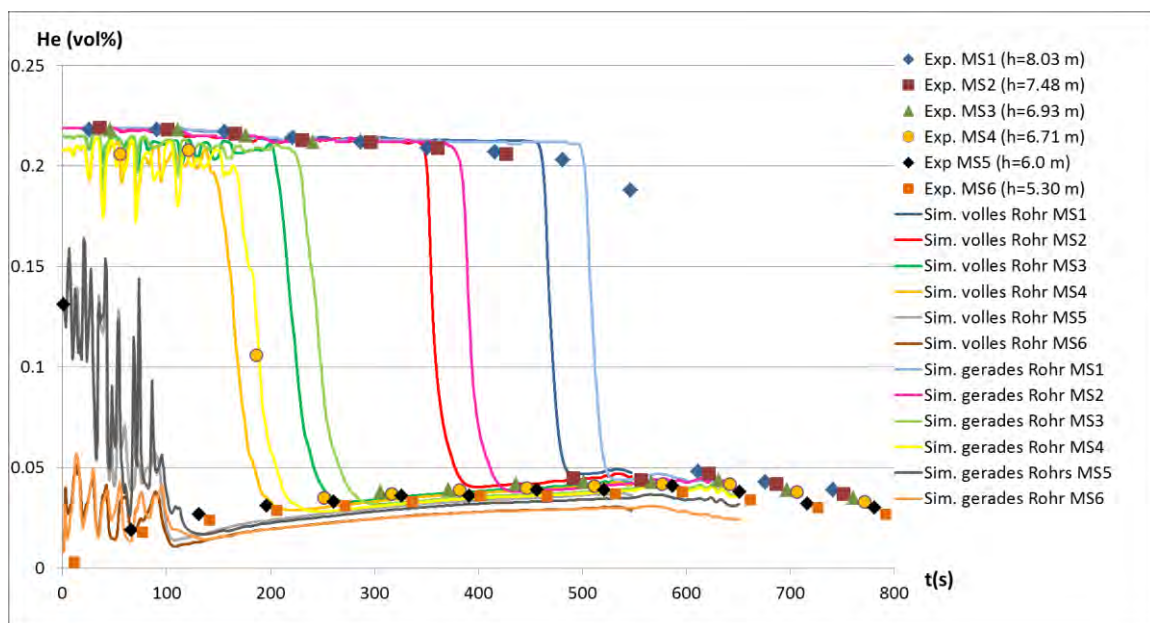
Bei Messpunkten, die bei  $t = 0$  s im Bereich der Heliumschichtung liegen, geht die Auflösung der Heliumschicht mit einem Temperaturanstieg einher (siehe TC\_2 und TC\_7 in Abb. 7.63 und Abb. 7.64). Die etwas zu schnelle Schichtungsauflösung in den Simulationen spiegelt sich in einem zu frühen Temperaturanstieg wider. Das Temperaturniveau vor und nach der Erosion der Heliumkonzentration wird in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Nach kompletter Schichtungsauflösung kommt es an den Messstellen im oberen Bereich seitlich von der Mittelachse (z. B. TC\_7) sowohl im Experiment als auch in den Simulationen zu einem Temperaturabfall. In den Simulationen ist der Temperaturabfall steiler und die Temperatur ist im Experiment um etwa 3 K höher. Am Ende des Experiments steigt der Dampfstrahl bis zur Behälterdecke und dem dort befindlichen Mannloch auf und wird dann umgelenkt. Mögliche Erklärungen für die Abweichungen bei den seitlichen Temperaturmessstellen sind, dass das Turbulenzmodell die Form der abwärts gerichteten Strömung nicht exakt berechnet und Vermischungsvorgänge nicht richtig simuliert werden. Eine weitere mögliche Ursache ist auch, dass keine Details des Mannlochs im CFD-Gitter berücksichtigt sind. So hat in der Simulation des THAI-Experiments TH-18 eine Kondensatrinne die Strömungsrichtung deutlich verändert. Auch hier ist ein ähnlicher Effekt denkbar. Die Messstellen TC-5 und TC-12 (Abb. 7.65 und Abb. 7.66) liegen 30 cm hinter dem Hindernis. Beide Simulationen zeigen moderate Abweichungen zu den experimentellen Werten. Die Übereinstimmung der Simulation mit dem „geraden Rohr“ ist aber größer. Bei TC-12 (seitlich gelegener Messpunkt) treten nach Auflösung der Schichtung Abweichungen zum Experiment auf. In den Simulationen sinkt die Temperatur ab, was im Experiment so nicht beobachtet wird. Unterhalb der Schichtung (Höhe 4 m, Radius 0.91 m) wird die Temperatur in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet, die berechnete Temperatur ist in beiden Simulationen um etwa 2 K – 3 K höher.

Die Unterschiede zwischen den Ergebnissen bei der Simulation mit „geradem Einlassrohr“ und bei Berücksichtigung der vollen Geometrie lassen sich besser verstehen, wenn man die Geschwindigkeitsprofile vergleicht (siehe auch Abb. 7.46 und Abb. 7.47). Leider liegen hierzu im relevanten Bereich keine experimentellen Daten vor. PIV-Messungen anderer Versuche mit dem gleichen Einlassrohr lassen aber laut Experimentatoren (Andreani, Kapulla, (PSI)) den Schluss zu, dass auch beim HP1-6 Experiment keine ausgeprägte Asymmetrie am Rohreinlass vorliegt.

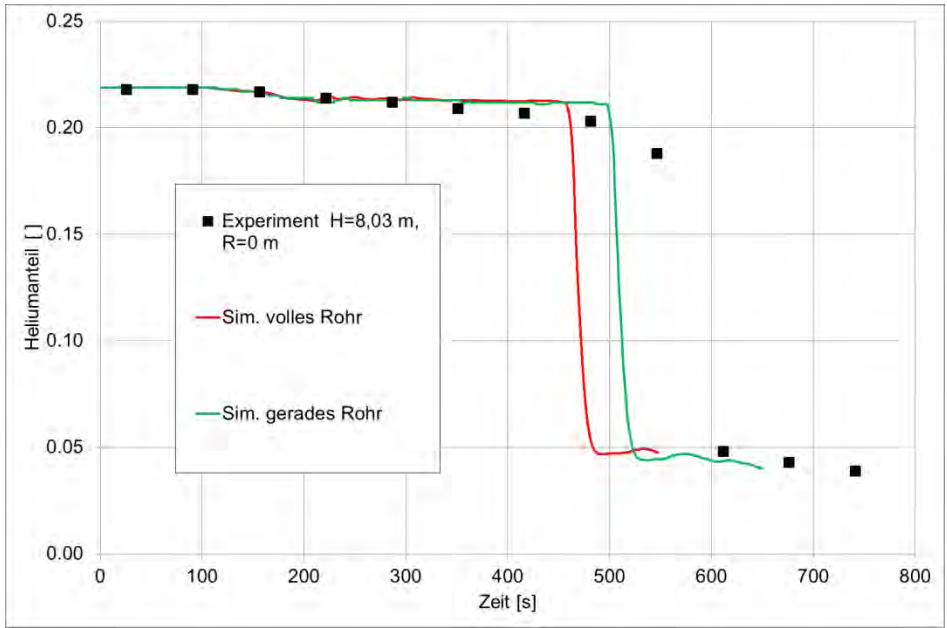
Unmittelbar oberhalb des Einlassrohres ( $h = 4.1$  m) zeigt sich eine deutliche Asymmetrie des Vertikalgeschwindigkeitsfeldes in Richtung der x-Koordinate bei der Simulation mit „vollem“ Rohr (Abb. 7.68). Die beiden Simulationen zeigen in y-Richtung

(Abb. 7.69) nur schwache Abweichungen. Die Simulationsergebnisse sind für 100 s und 200 s nahezu gleich, da die Einspeisebedingungen nahezu konstant sind.

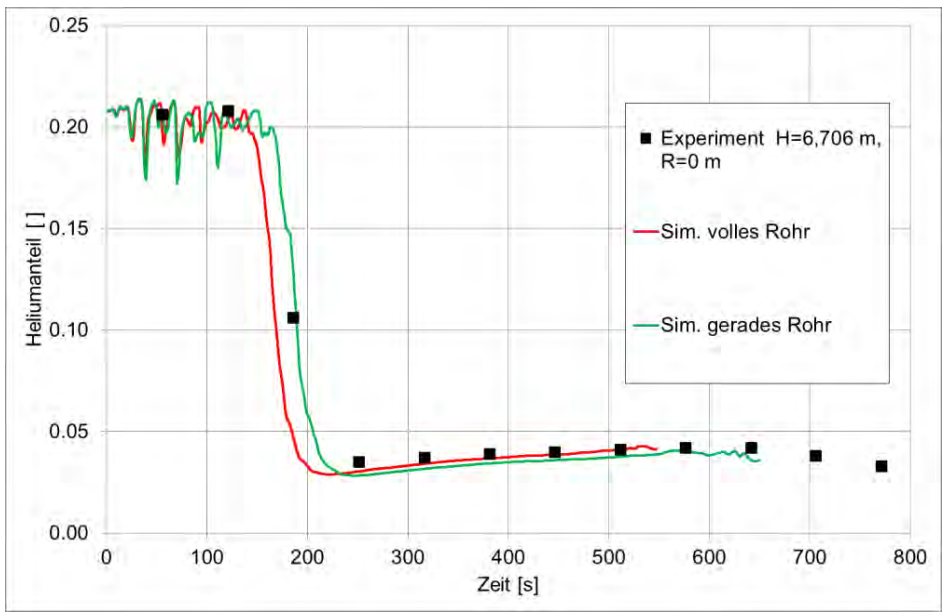
In der Höhe von 5.9 m weicht das Ergebnis hiervon ab. Nach 100 s hat sich bei beiden Simulationen noch das ringförmige Strömungsprofil des Dampfstrahls hinter dem Strömungshindernis eingestellt. Die Simulation mit „vollem Rohr“ zeigt eine starke Asymmetrie in x-Richtung (Abb. 7.70). In y-Richtung unterschieden sich die beiden Simulationen ebenfalls deutlich (Abb. 7.71). Bei der Simulation mit „vollem Rohr“ ist die maximale Strömungsgeschwindigkeit weiter außen und die Höhe des Maximums ist niedriger; bei  $y = 0$  m liegt eine nach unten gerichtete Strömung vor, was bei der Simulation mit „geradem Rohr“ in dieser Höhe nicht mehr der Fall ist. Nach 200 s hat sich in beiden Simulationen das Strömungsfeld geändert, nach Umströmung der Prallplatte bildet sich ein einzelner Dampfstrahl aus. Bei diesem Strömungsfeld ist die Asymmetrie bei der Simulation mit „vollem Rohr“ schwächer. Auch in y-Richtung verbleiben aber noch Unterschiede zwischen den Simulationen, die Maximalgeschwindigkeit bei der Simulation mit „geradem Rohr“ ist niedriger und der Strahl ist etwas breiter. Insbesondere beim Vergleich zum Zeitpunkt 200 s ist aber zu berücksichtigen, dass sich die Heliumschichtung bei der Rechnung mit dem „vollen Rohr“ bereits an einer höheren Position befindet und oberhalb der Prallplatte die Geschwindigkeitsprofile stark beeinflusst.



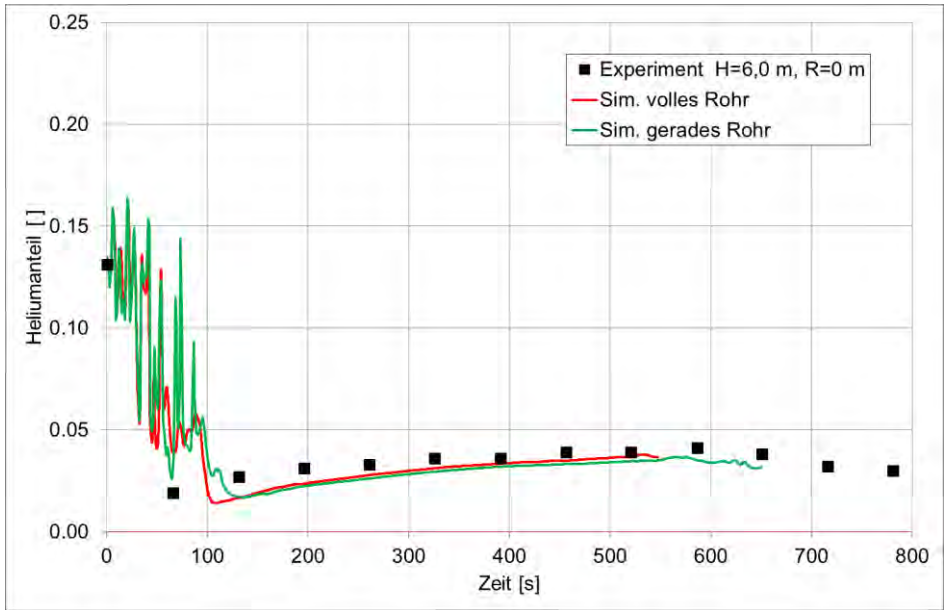
**Abb. 7.59** Heliumkonzentration im Experiment und bei Simulation mit vollem Einlassrohr (Gitter Nr. 4) und mit geradem Einlassrohr (Gitter Nr. 5)



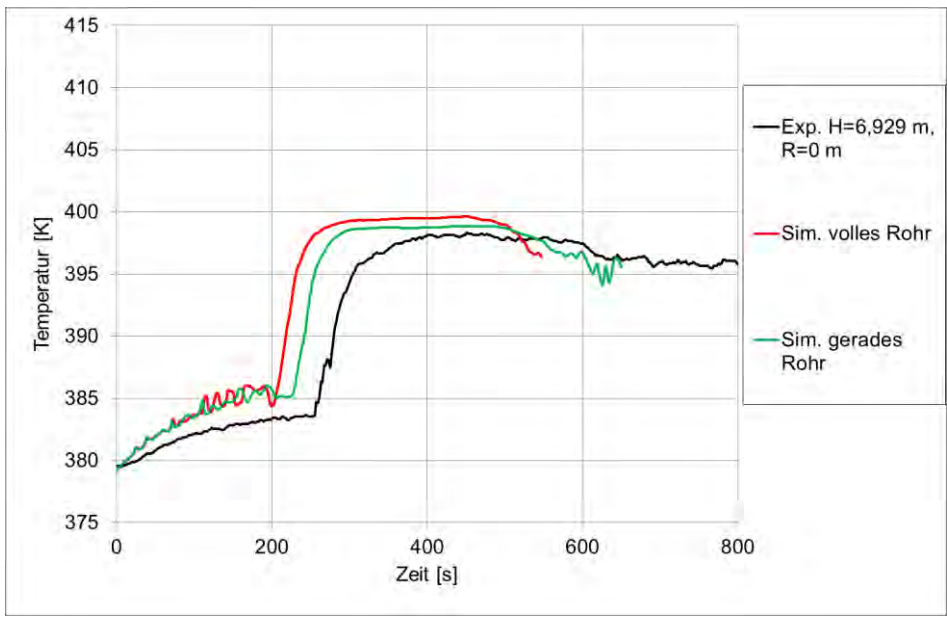
**Abb. 7.60** Heliumkonzentration an der Messstelle MS\_1



**Abb. 7.61** Heliumkonzentration an der Messstelle MS\_4

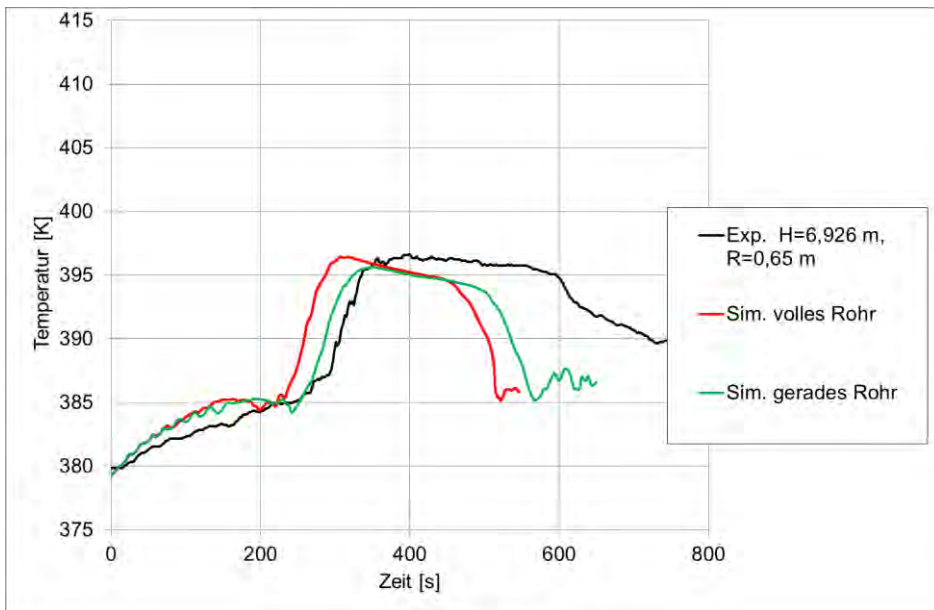


**Abb. 7.62** Heliumkonzentration an der Messstelle MS\_5

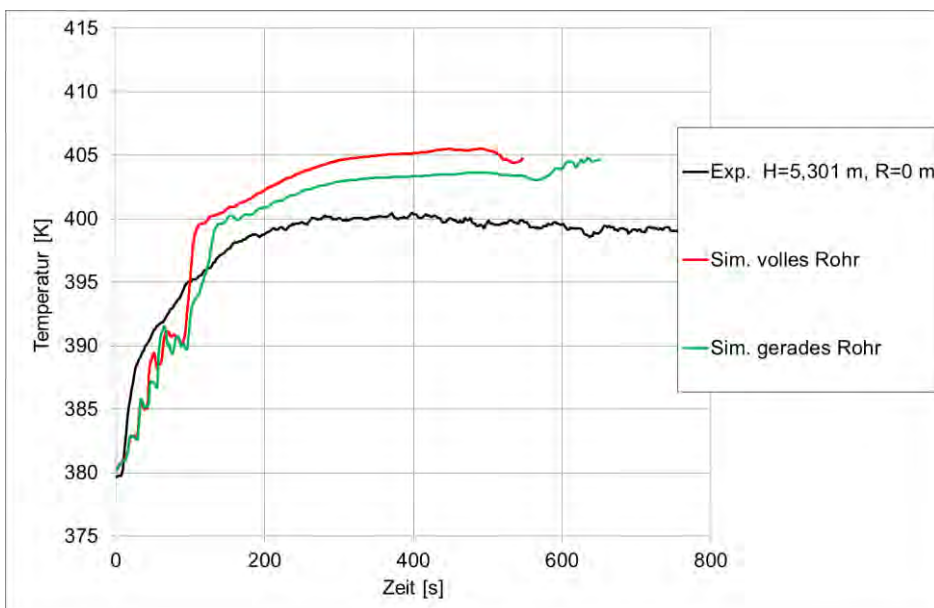


**Abb. 7.63** Temperaturverlauf an der Messstelle TC\_2



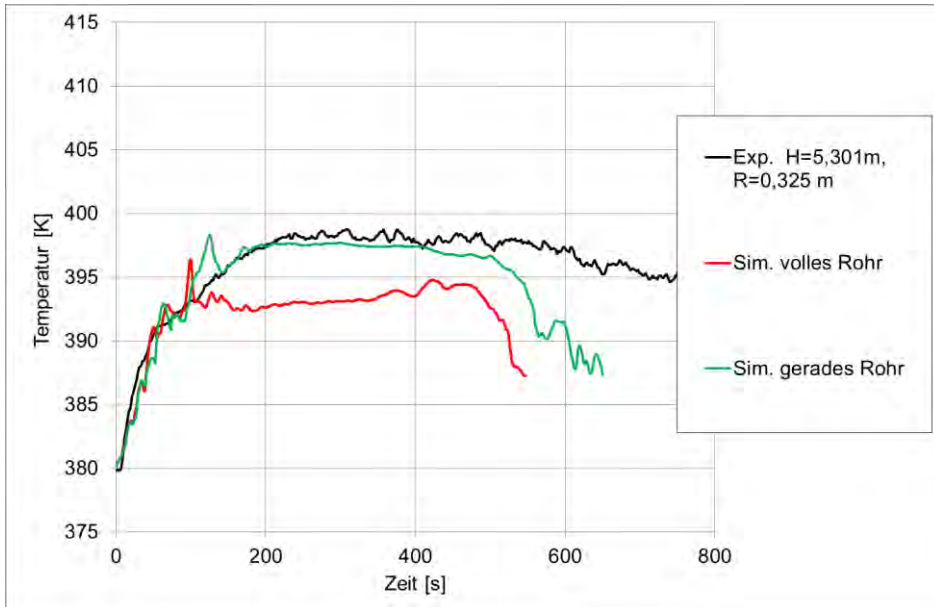


**Abb. 7.64** Temperaturverlauf an der Messstelle TC\_7

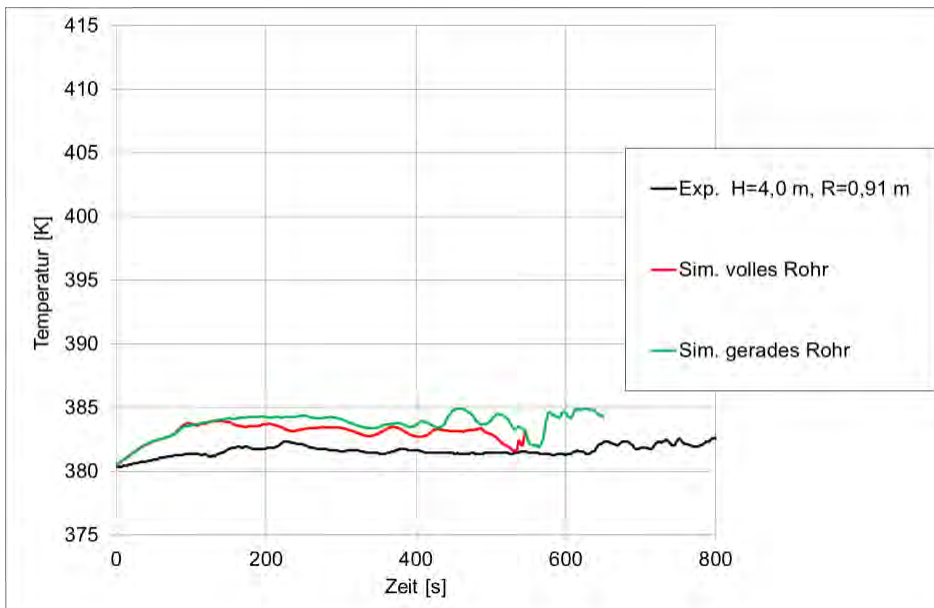


**Abb. 7.65** Temperaturverlauf an der Messstelle TC\_5

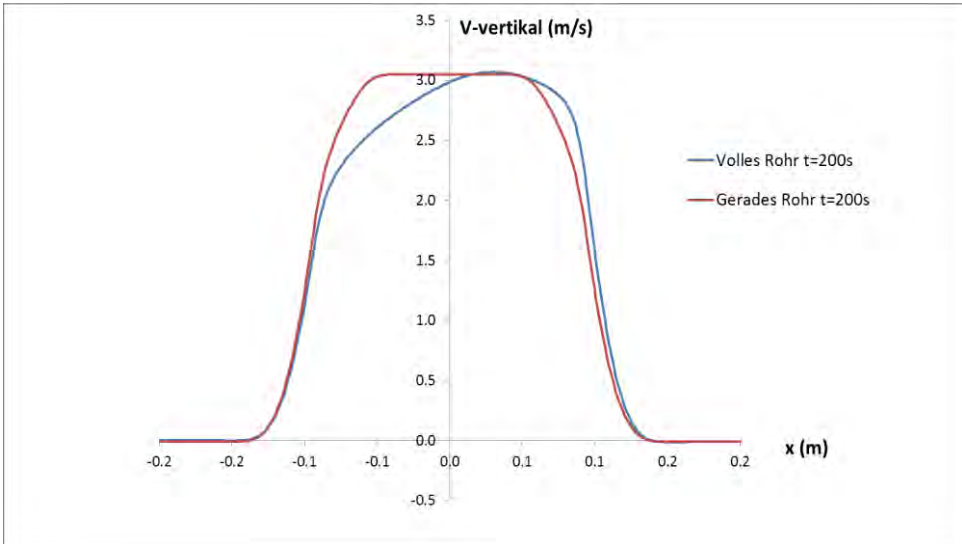
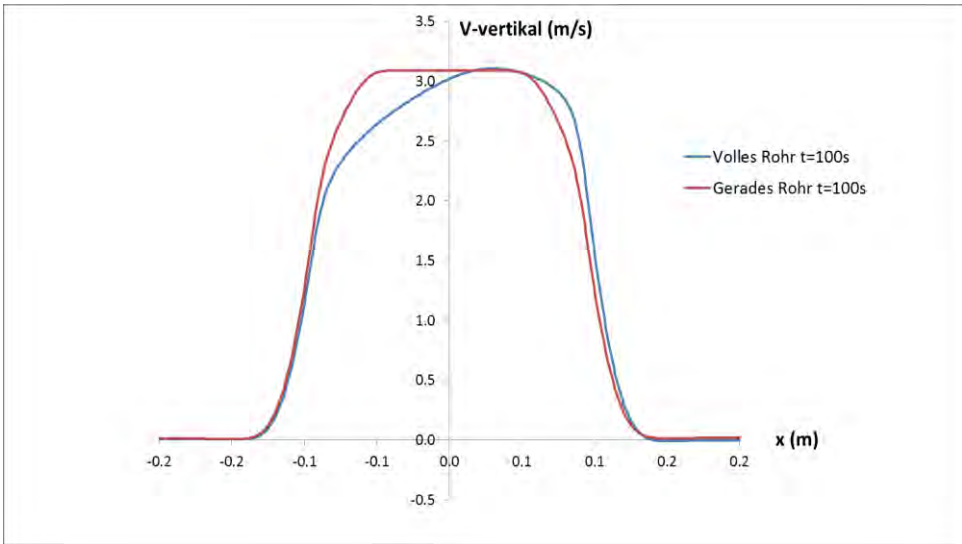




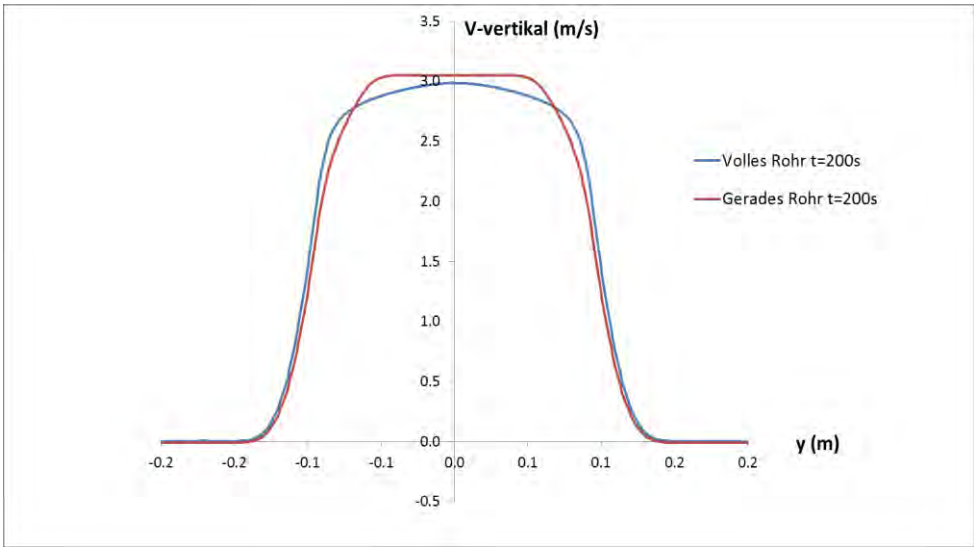
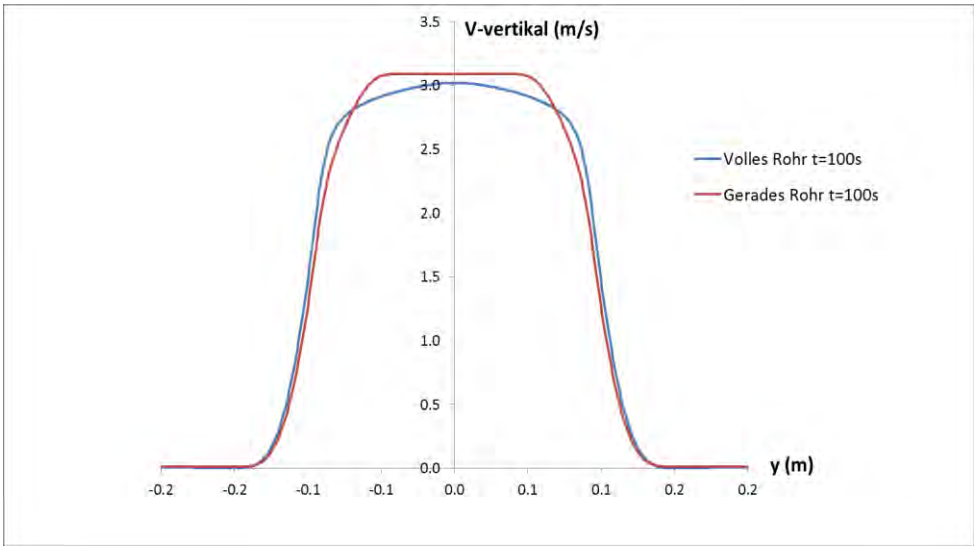
**Abb. 7.66** Temperaturverlauf an der Messstelle TC\_12



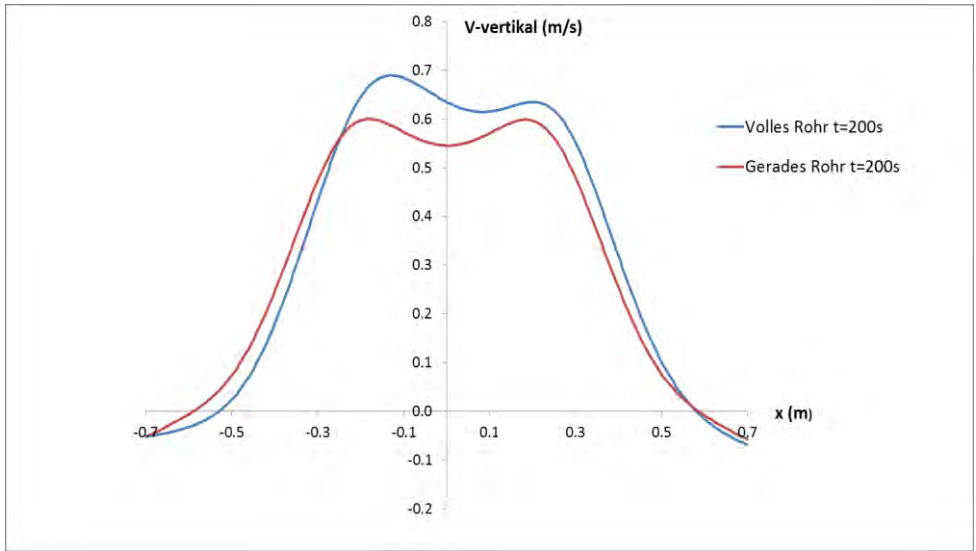
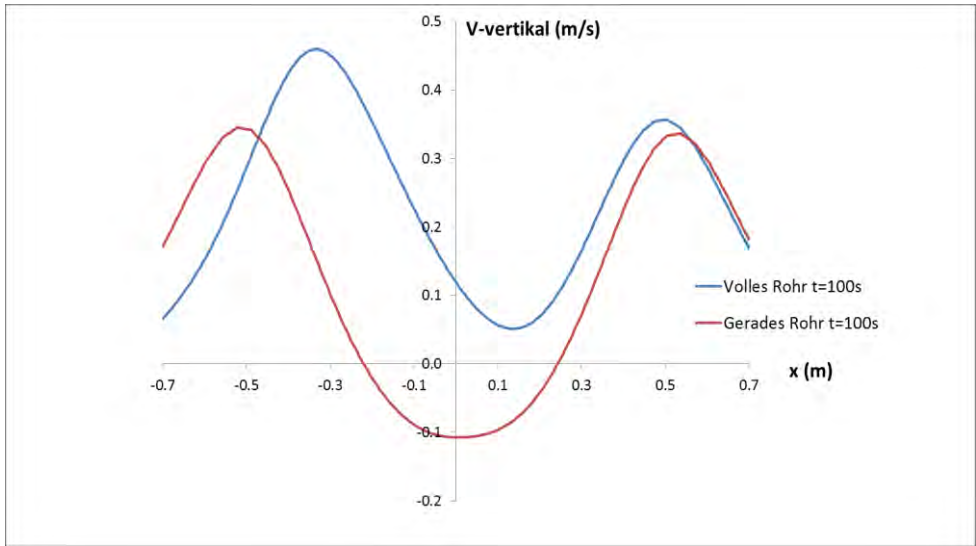
**Abb. 7.67** Temperaturverlauf an der Messstelle TC\_14



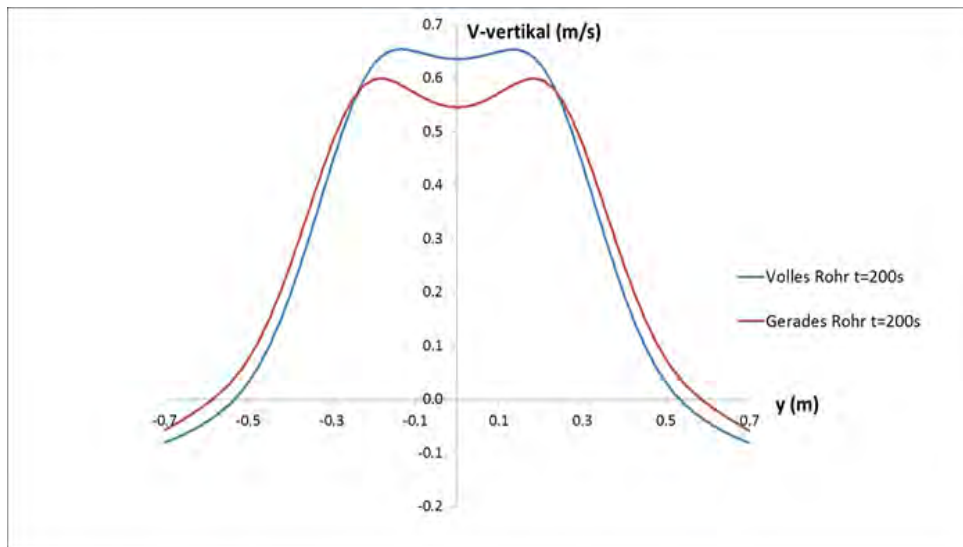
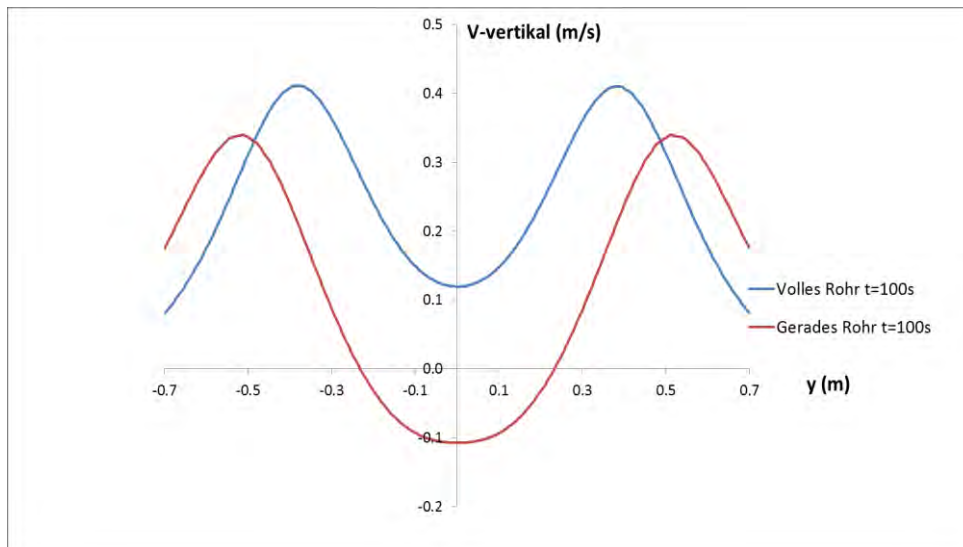
**Abb. 7.68** Vertikalgeschwindigkeit in der Höhe 4.1 m entlang der x-Koordinate, oben  $t = 100$  s, unten  $t = 200$  s



**Abb. 7.69** Vertikalgeschwindigkeit in der Höhe 4.1 m entlang der  $y$ -Koordinate, oben  $t = 100$  s, unten  $t = 200$  s



**Abb. 7.70** Vertikalgeschwindigkeit in der Höhe 5.9 m entlang der x-Koordinate, oben  $t = 100$  s, unten  $t = 200$  s



**Abb. 7.71** Vertikalgeschwindigkeit in der Höhe 5.9 m entlang der y-Koordinate, oben  $t = 100$  s, unten  $t = 200$  s

### 7.3.8 Einfluss (der Vernachlässigung) des Wärmestrahlungsmodells

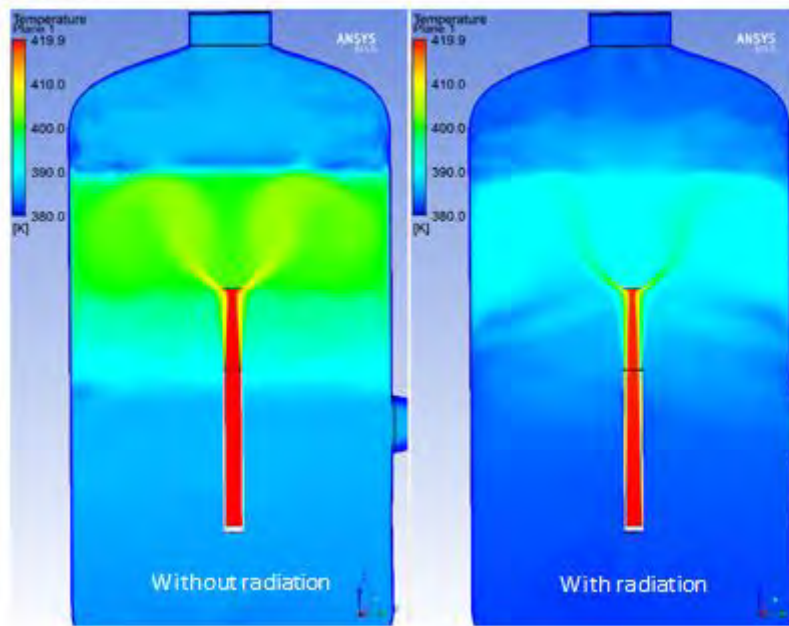
Im Folgenden wird der Einfluss einer Vernachlässigung des Strahlungsmodells auf die Simulationsergebnisse untersucht (Rechnungen jeweils mit geradem Rohr und SST-Turbulenzmodell). Da die Parameterstudie im Rahmen der blinden Phase des HP1-6-Benchmarks durchgeführt wurde (Common-Case-Simulation ohne Wärmestrahlungsmodell), wurden folgende Simulationen mit dem Gitter Nr. 1 durchgeführt.

Die Wärmestrahlung hat einen signifikanten Einfluss auf den Temperaturverlauf (Abb. 7.72, Abb. 7.75). Bei der Simulation ohne Wärmestrahlung ist die Gastemperatur

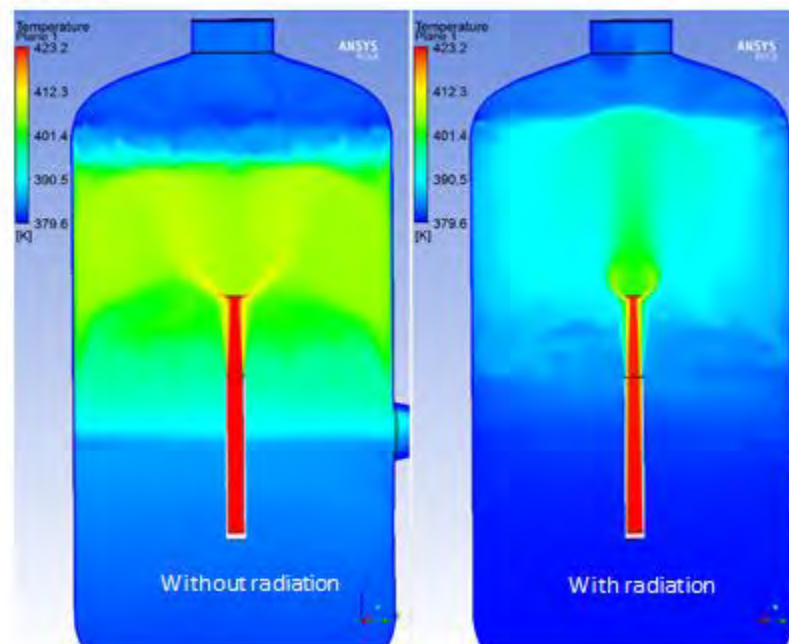
unterhalb der Heliumschichtung deutlich höher. Abb. 7.74 und Abb. 7.75 zeigen den Temperaturverlauf in 4.0 m Höhe und in 7.48 m Höhe. Es zeigt sich ein sehr deutlicher Einfluss des Strahlungsmodells auf den Temperaturverlauf. Durch die Verwendung des Strahlungsmodells findet ein zusätzlicher Energieaustausch zwischen dem heißen Gas und den Behälterwänden statt. Die berechneten Temperaturen mit Strahlungsmodell passen jeweils deutlich besser zu den experimentellen Daten als bei den Berechnungen ohne Strahlungsmodell.

In Abb. 7.76 ist der Verlauf der Heliumkonzentration (in 8.03 m Höhe) dargestellt. Auch hier zeigt sich ein deutlicher Einfluss des Strahlungsmodells. Durch die Verwendung des Strahlungsmodells findet ein wesentlich schnellerer Abbau der Heliumschicht statt. Auch hier passt die Rechnung mit Strahlungsmodell deutlich besser zum Experiment. Ursache hierfür ist, dass Auftriebseffekte eine signifikante Rolle spielen. Der Effekt des Energieaustausches durch Wärmestrahlung ist also sehr deutlich, wie es sich auch schon in mehreren früheren Experiment-Nachrechnungen (PANDA, THAI usw.) gezeigt hat.

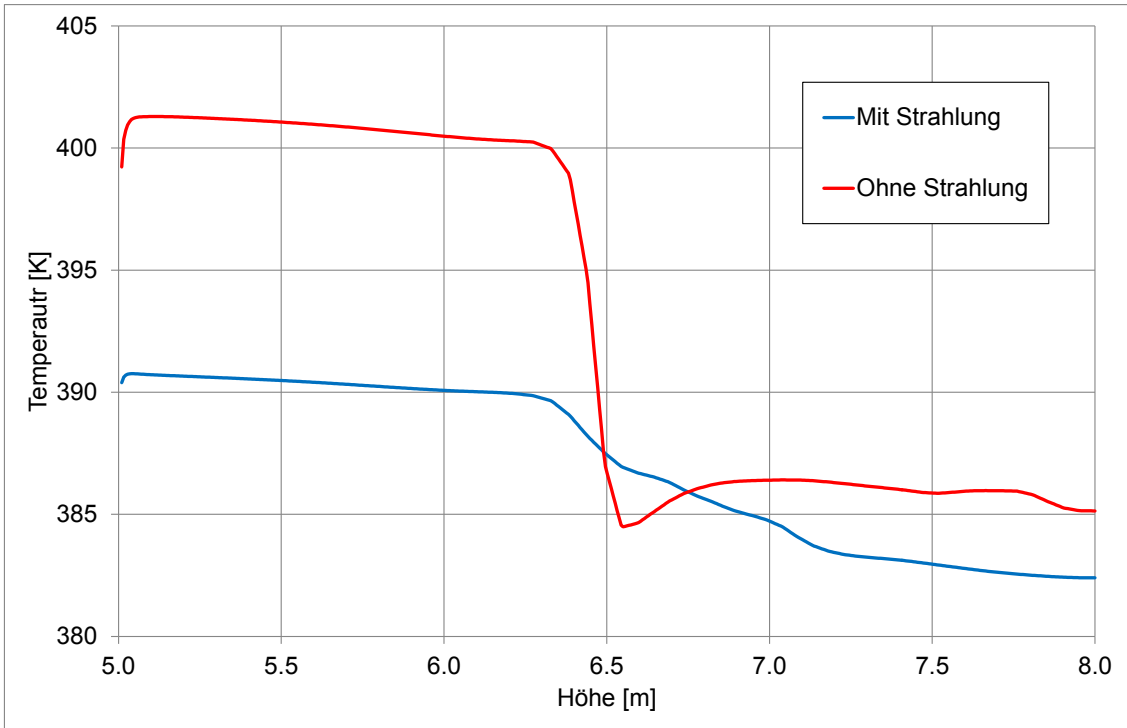
t = 200 s



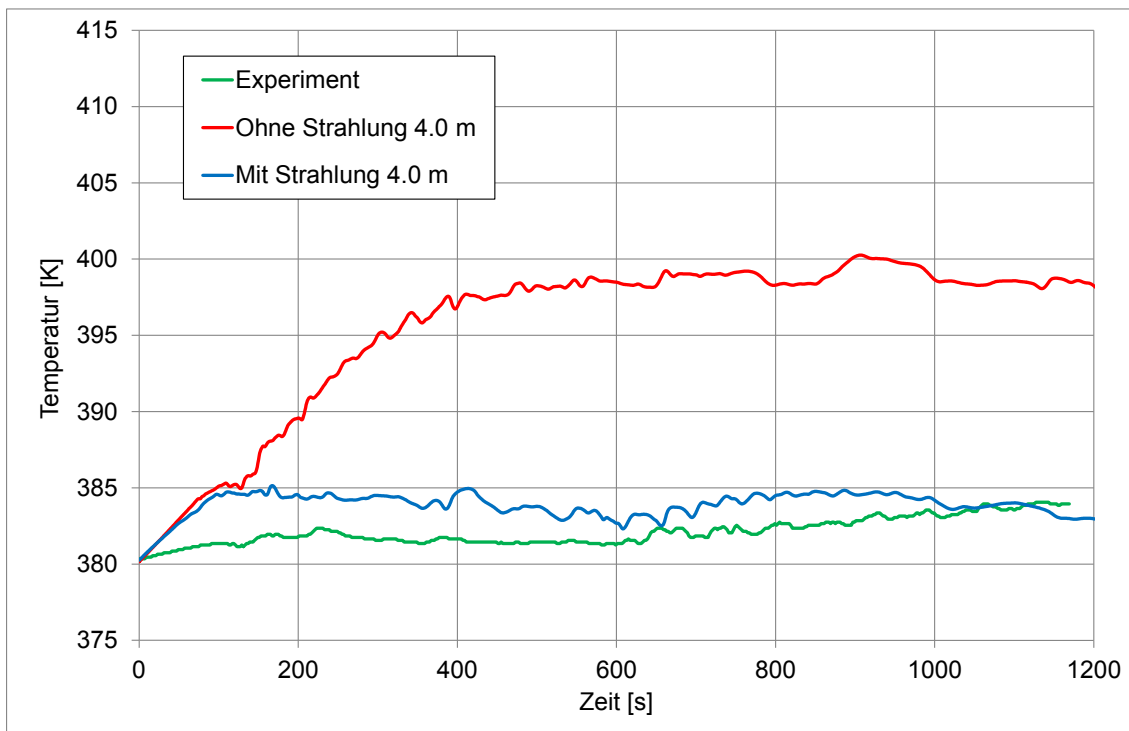
t = 400 s



**Abb. 7.72** Temperaturverteilung ohne Strahlung (links) und bei Berücksichtigung der Wärmestrahlung

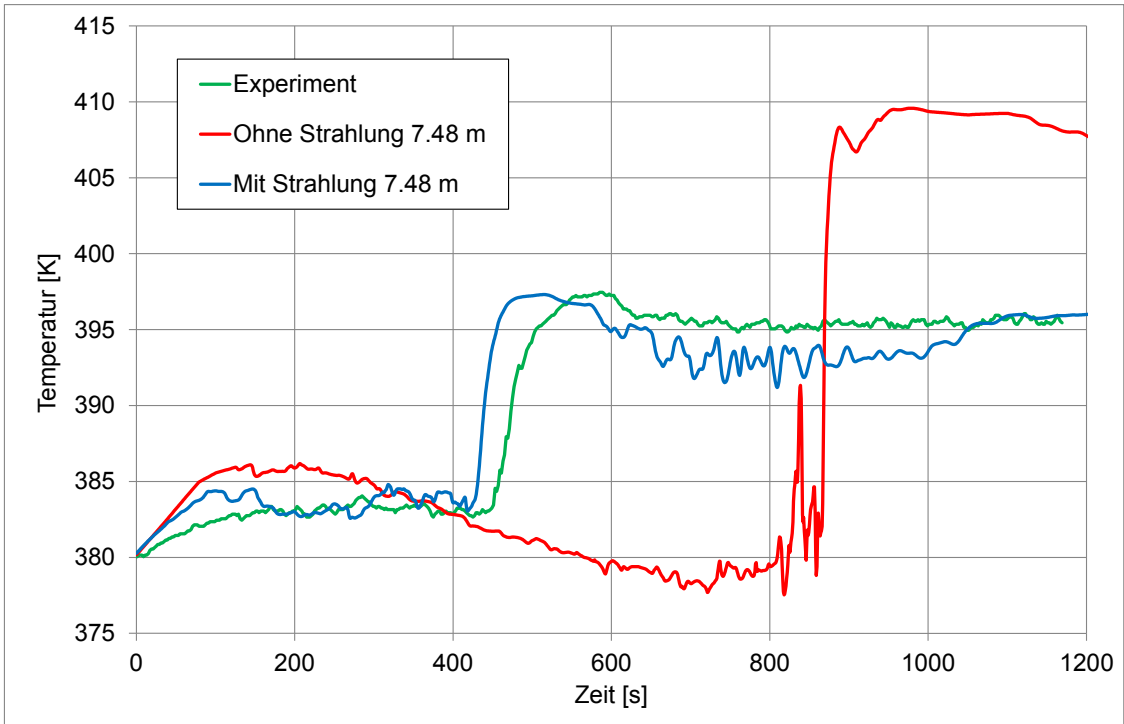


**Abb. 7.73** Vertikales Temperaturprofil oberhalb der Platte bei  $t = 200$  s

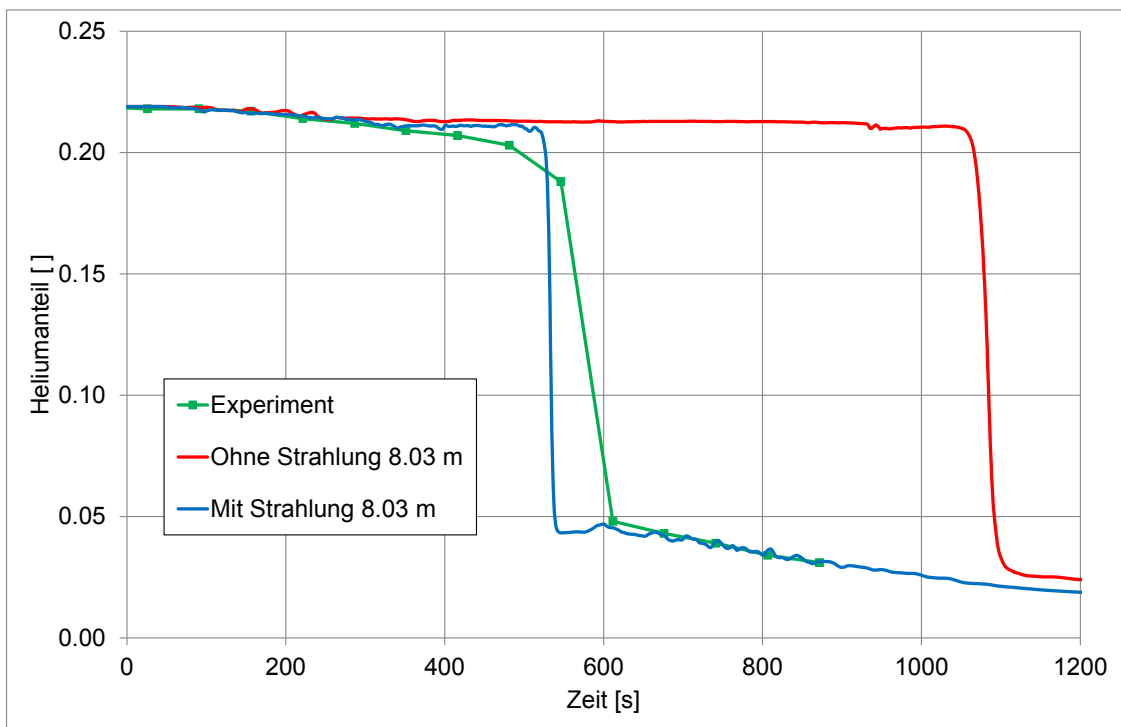


**Abb. 7.74** Temperaturverlauf in 4.0 m Höhe





**Abb. 7.75** Temperaturverlauf in 7.48 m Höhe



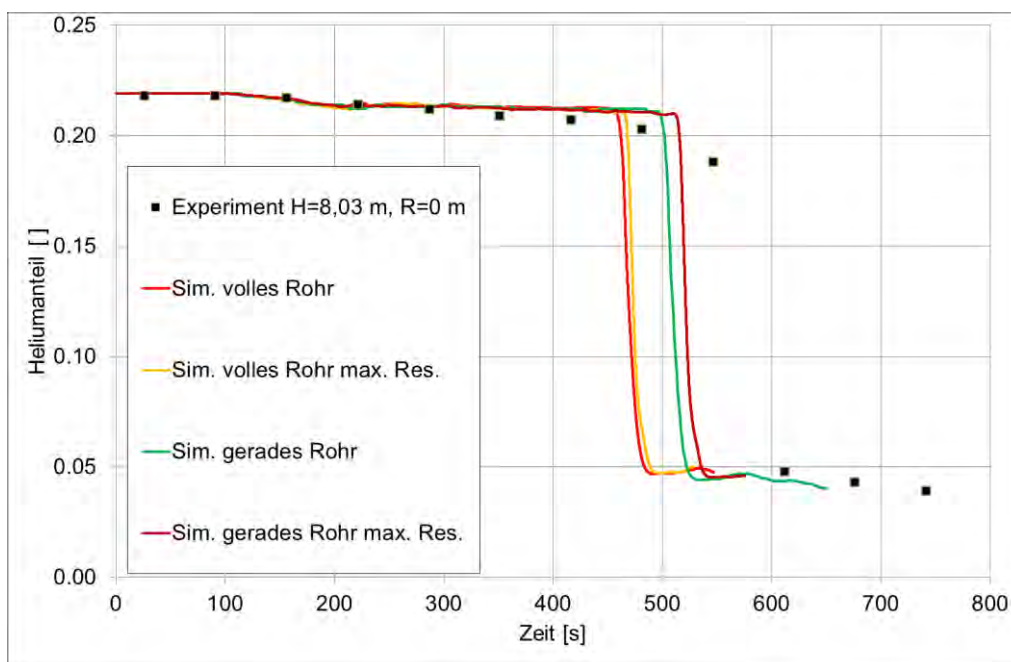
**Abb. 7.76** Verlauf der Heliumkonzentration mittig in 8.03 m Höhe

### 7.3.9 Einfluss des Konvergenzkriteriums

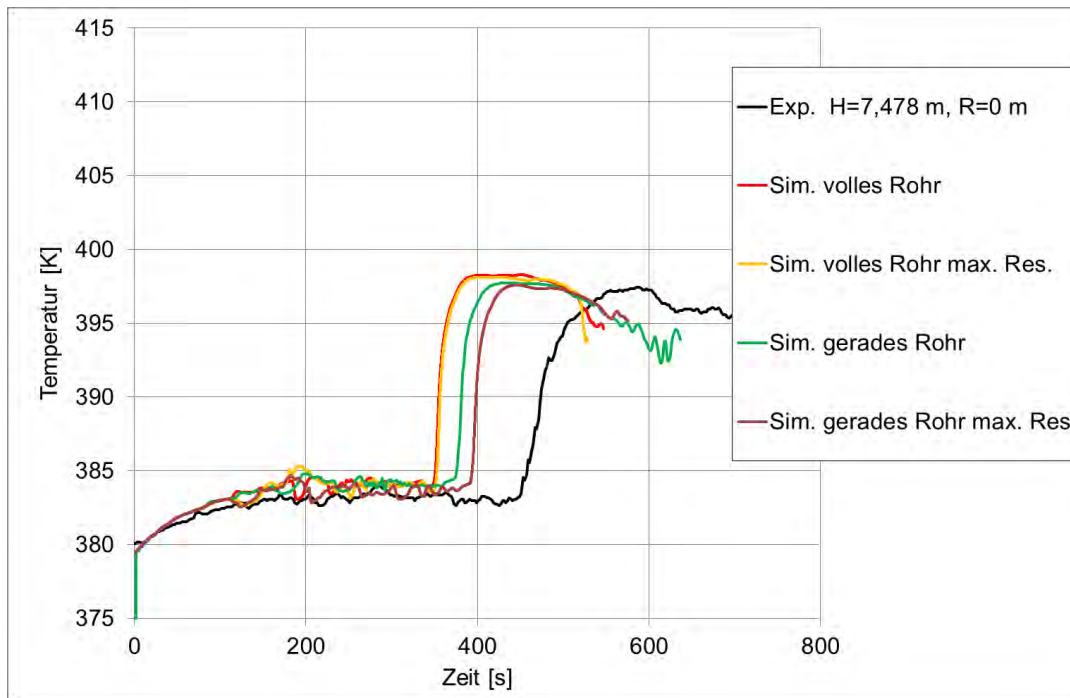
Üblicherweise wurde das Konvergenzkriterium  $\text{RMS-Res} < 1.0\text{e-}4$  verwendet. Um die numerischen Fehler zu minimieren, wurden auch Simulationen mit dem strengeren Kriterium  $\text{MAX-Res} < 5.0\text{e-}4$  durchgeführt. Das strengere Konvergenzkriterium bewirkt bei der adaptiven Zeitschrittsteuerung eine Reduktion der Zeitschrittweite. Für den betrachteten Zeitraum 0 s – 525 s ergibt sich in etwa eine Halbierung des Zeitschritts (Tab. 7.6). Der Rechenaufwand steigt dabei um 50 bzw. 65 % an. Bei den Simulationen mit Modellierung des gesamten Einlassrohres ist die Abhängigkeit der Heliumkonzentration und der Temperatur vom Konvergenzkriterium/Zeitschritt sehr gering (Abb. 7.77, Abb. 7.78). Bei den Simulationen mit geradem Einlassrohr, kann durch Verschärfung des Konvergenzkriteriums eine geringfügige Verbesserung der Vorhersage des Schichtungsabbaus erzielt werden.

**Tab. 7.6** Zeitschritt und Rechenleistung in Abhängigkeit vom Konvergenzkriterium

Simulation	Mittlerer Zeitschritt	Rechenleistung in CPU-s
Volles Rohr RMS	0.050 s	1.267e+8
Volles Rohr Max	0.023 s	1.91e+8
Gerades Rohr RMS	0.054 s	7.438e+7
Gerades Rohr MAX	0.024 s	1.226e+8



**Abb. 7.77** Heliumkonzentration in Abhängigkeit vom Konvergenzkriterium



**Abb. 7.78** Temperatur in Abhängigkeit vom Konvergenzkriterium

### 7.3.10 Einfluss des Turbulenzmodells

Um den Einfluss des Turbulenzmodells auf die Simulationsergebnisse zu untersuchen, wurden Berechnungen mit dem k-epsilon-Modell (Common-Case-Model) und dem SST-Modell (Best-Practice-Model) durchgeführt. Bei diesen Simulationen wurde das volle Einlassrohr simuliert und die Wärmestrahlung wurde berücksichtigt.

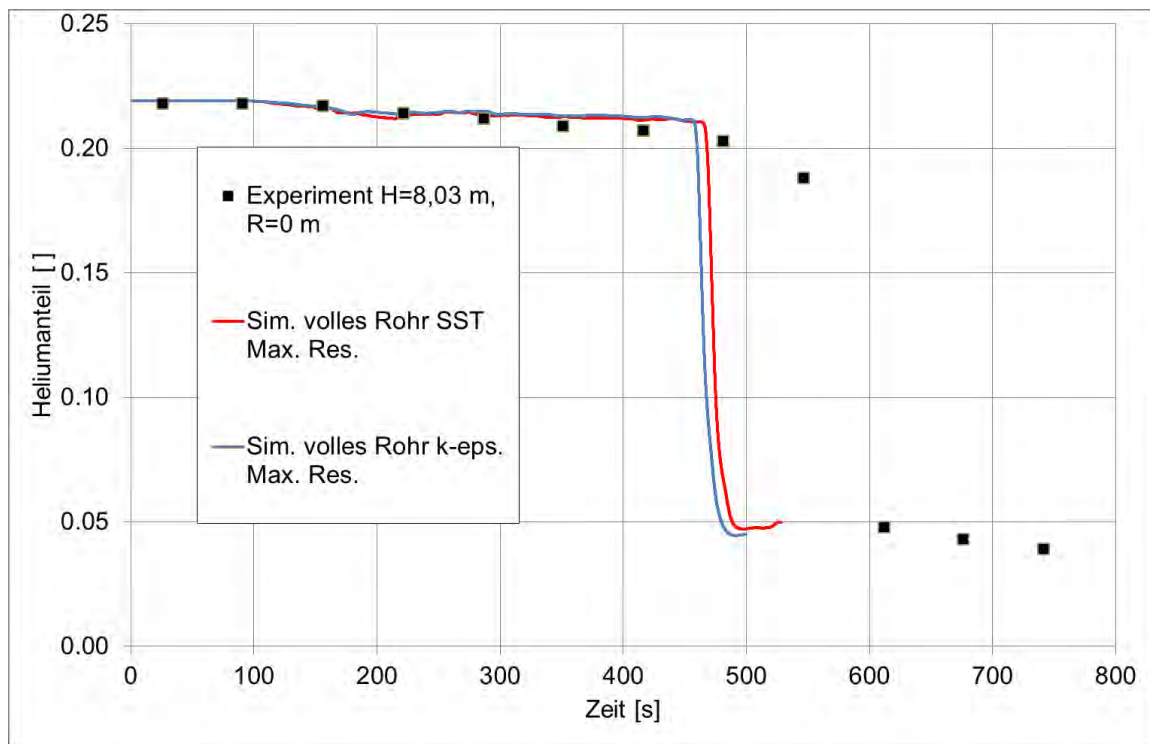
In Abb. 7.79, Abb. 7.80 und Abb. 7.85 ist der Einfluss der Turbulenzmodelle auf den Abbau der Heliumschicht dargestellt. Die Simulationsergebnisse unterscheiden sich hinsichtlich der Erosion der Heliumschicht nur geringfügig. Der Schichtungsabbau erfolgt mit dem SST-Modell geringfügig langsamer ( $\sim 10$  s bei MS\_1) und passt somit etwas besser zu den Messwerten.

Der Temperaturverlauf ist ebenfalls nur geringfügig vom Turbulenzmodell abhängig. Es zeigt sich, dass beim k-epsilon-Modell die Temperatur an den mittigen Messstellen etwas höher liegt als beim SST-Modell ( $\sim \Delta T 1$  K) und damit etwas schlechter als das SST-Modell mit dem Experiment übereinstimmt. ( Abb. 7.81 und Abb. 7.82). An den seitlich gelegenen Messstellen ergibt sich für die kleinen Unterschiede ein uneinheitliches Bild (Abb. 7.83 und Abb. 7.84). Ein Vergleich des Temperaturfeldes bei 400 s zeigt, dass beim SST-Modell an einer Seite der Behälterwand die Temperatur niedriger

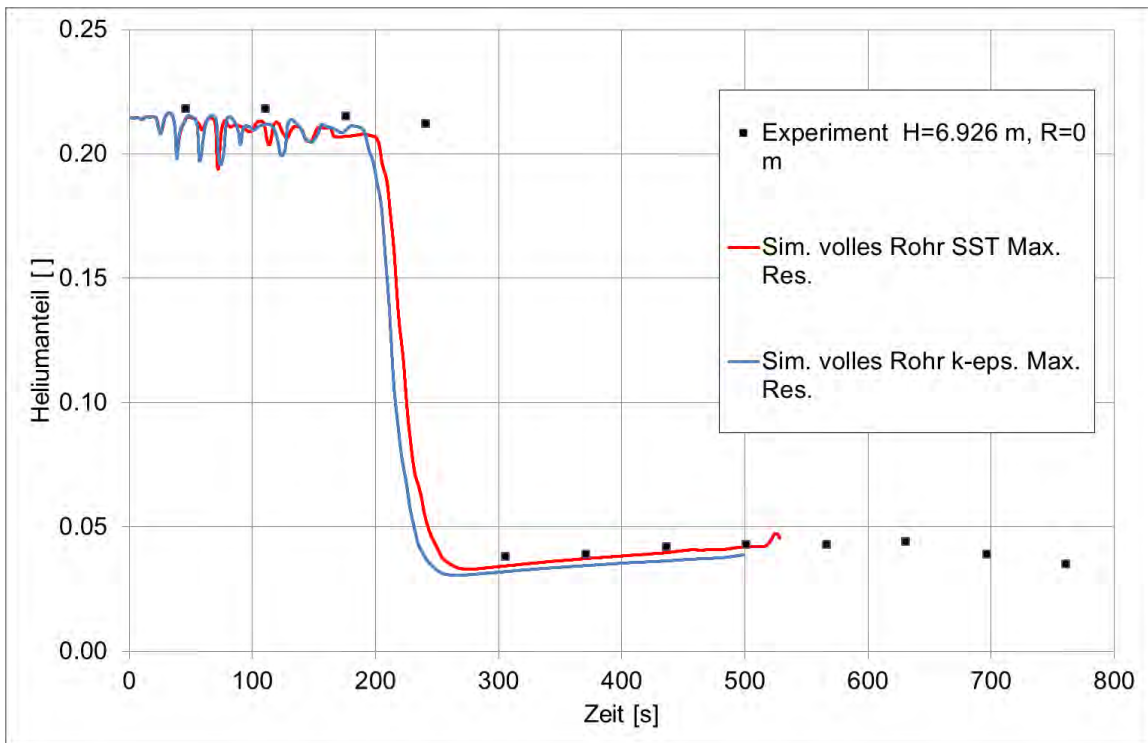
ist als beim k-epsilon-Modell (Abb. 7.86). Auch im Bereich des Strahles gibt es kleine Unterschiede.

Beim Vergleich der Strömungsfelder zeigt sich, dass beim SST-Modell der Übergang vom ursprünglichen Strömungsmuster ringförmiger Strahl zum kompakten mittig gelegenen Strahl etwas später erfolgt, was mit einer etwas höher gelegenen Heliumschicht korreliert. Beim k-epsilon-Modell erfolgt der Übergang nach ca. 65 s, beim SST-Modell erst nach etwa 100 s. Beim quantitativen Vergleich der vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten auf verschiedenen Höhen zeigt sich, dass sowohl vor dem Hindernis ( $h = 4.8$  m) als auch dahinter das unterschiedliche Turbulenzmodell zu geringen Abweichungen zwischen den beiden Simulationen bei der Geschwindigkeit führt.

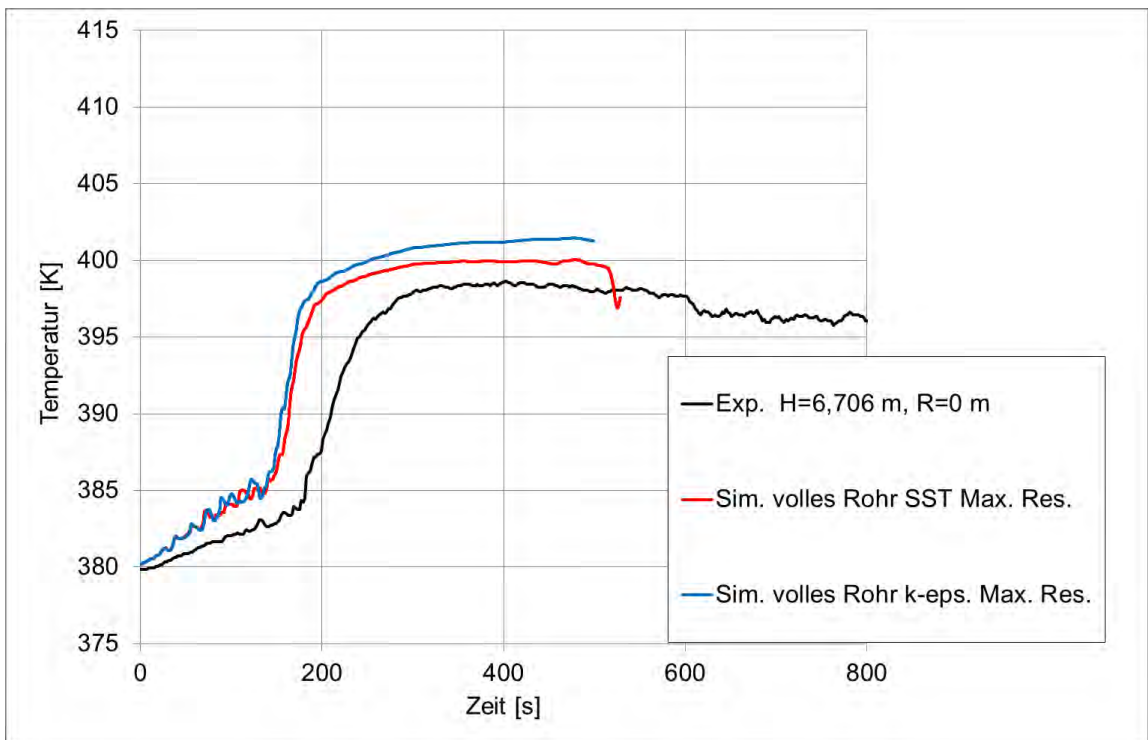
Die Verteilung der turbulenten kinetischen Energie ist bei beiden Simulationen ähnlich, allerdings sind im Bereich des Einlassrohres und unterhalb/neben dem Hindernis auch Unterschiede feststellbar (Abb. 7.92).



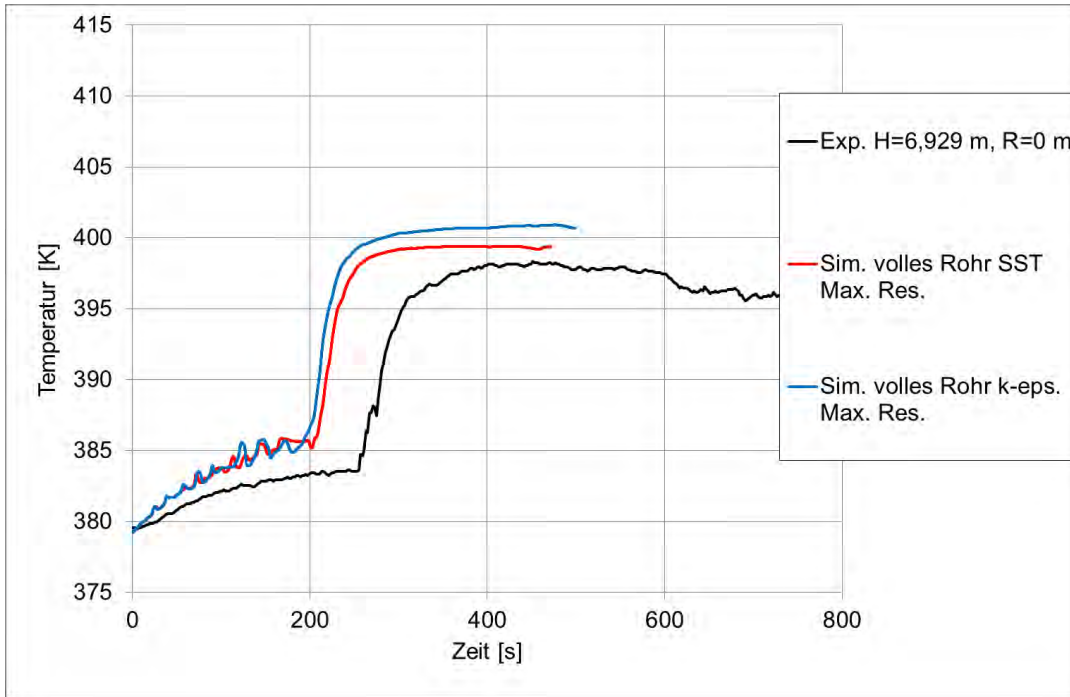
**Abb. 7.79** Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschicht (MS\_1, mittig in 8.03 m Höhe)



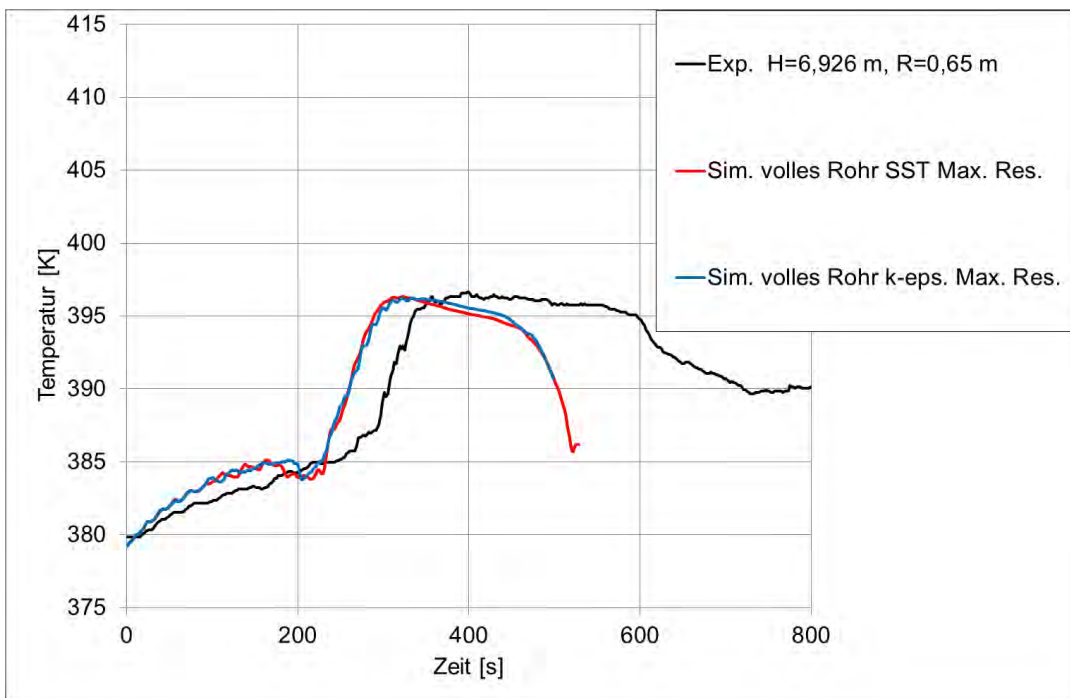
**Abb. 7.80** Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschicht (MS\_3, mittig in 6.93 m Höhe)



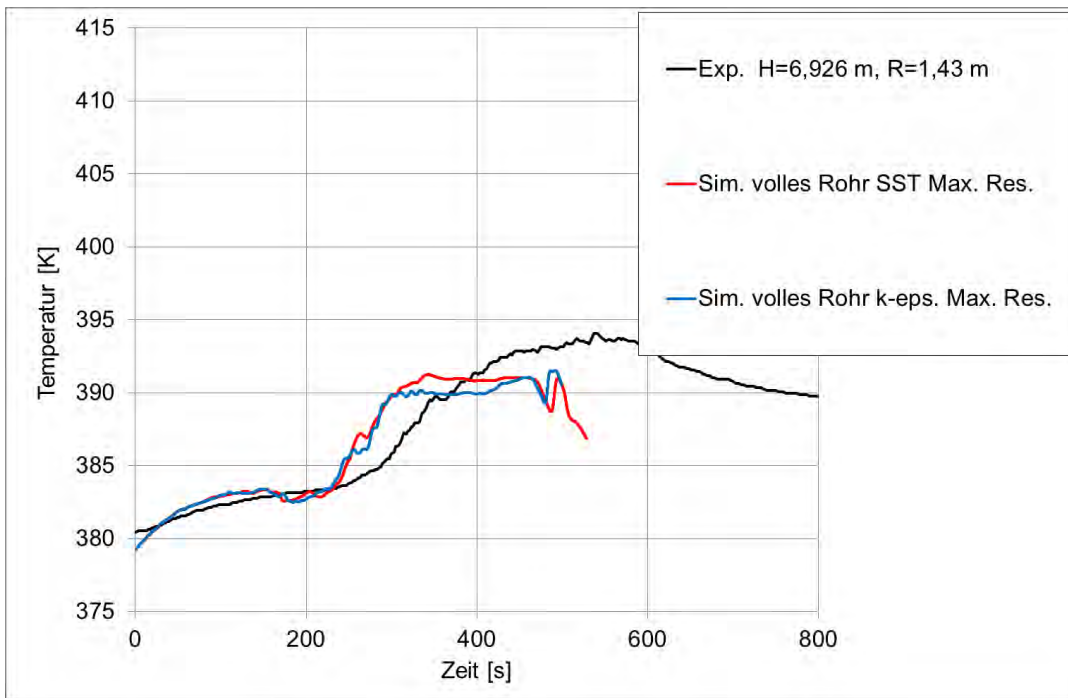
**Abb. 7.81** Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (TC\_3, mittig in 6,71 m Höhe)



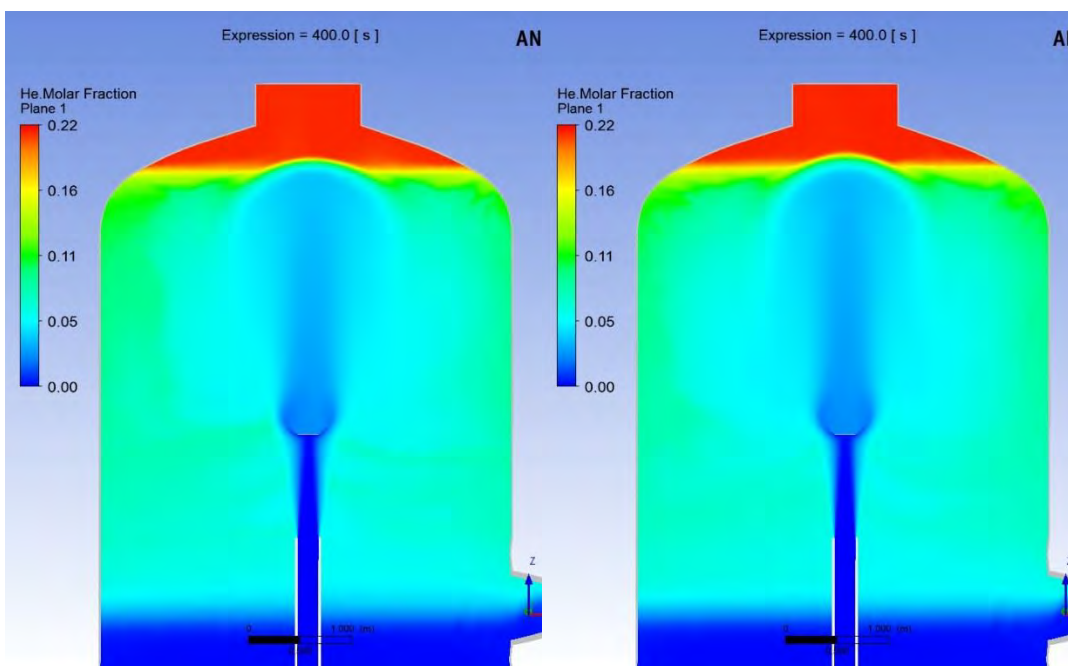
**Abb. 7.82** Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (TC\_2, mittig in 6,93 m Höhe)



**Abb. 7.83** Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (TC\_7, seitlich R = 0.65 m, in 6.93 m Höhe)

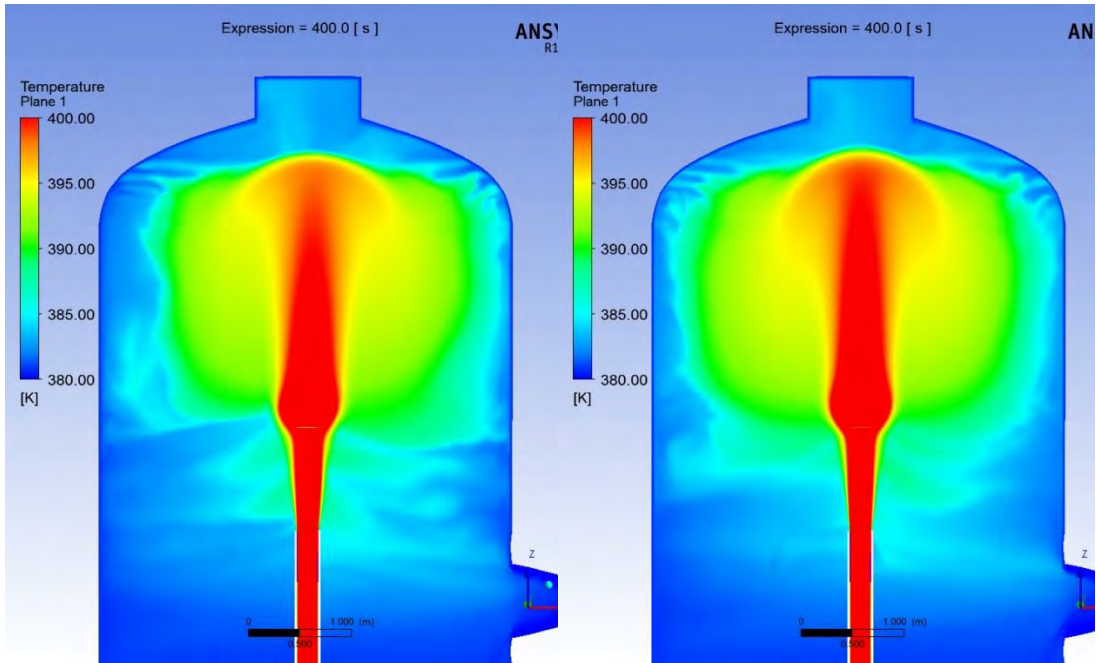


**Abb. 7.84** Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (TC\_8, seitlich R = 1.43 m, in 6.93 m Höhe)

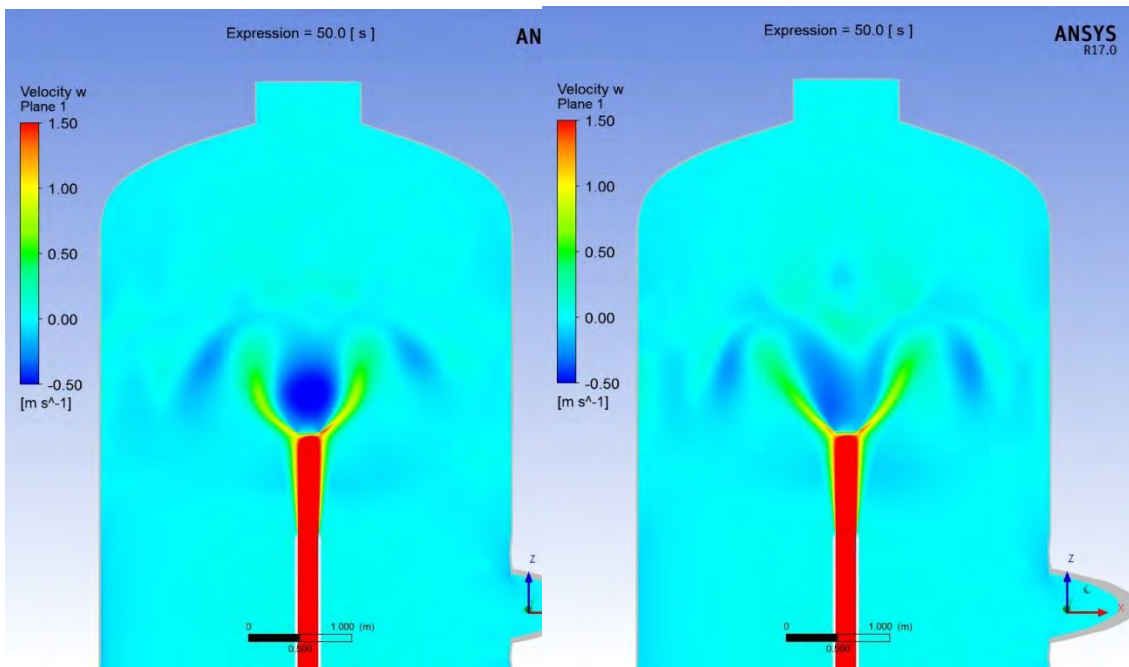


**Abb. 7.85** Heliumkonzentration nach 400 s. Links: SST, rechts: k-epsilon



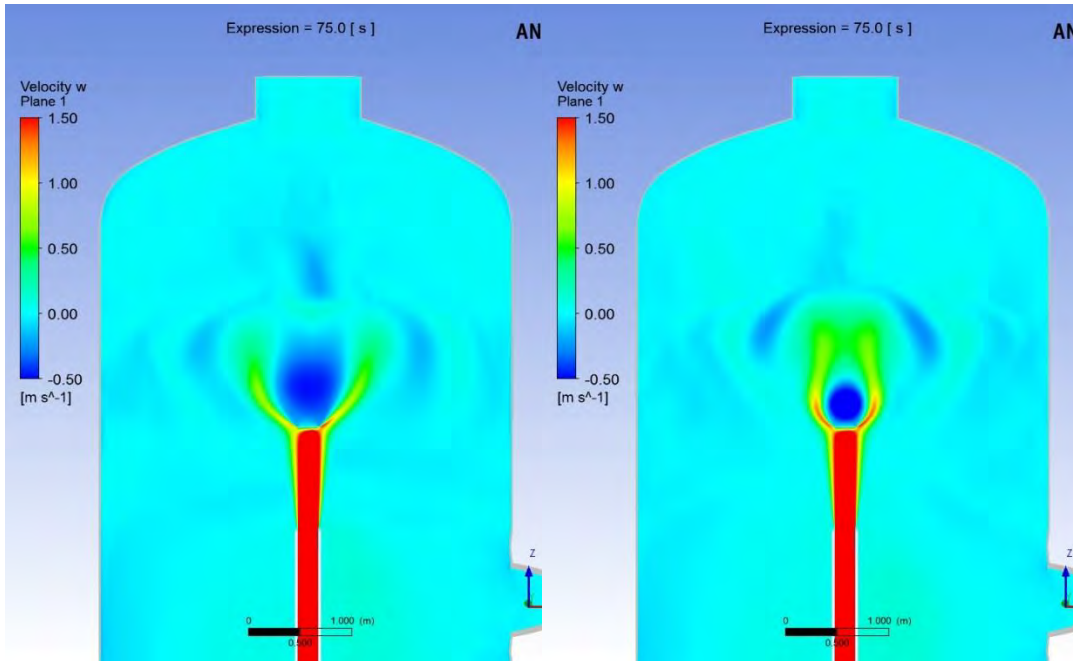


**Abb. 7.86** Temperatur nach 400 s. Links: SST, rechts: k-epsilon

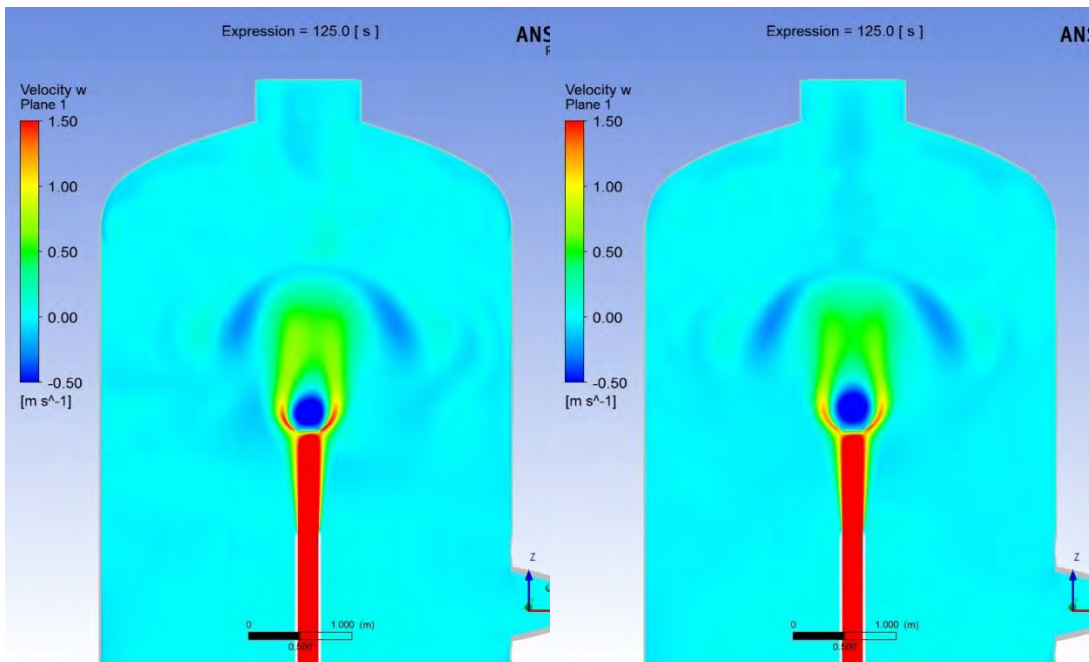


**Abb. 7.87** Vertikal-Geschwindigkeit nach 50 s. Links: SST, rechts: k-epsilon

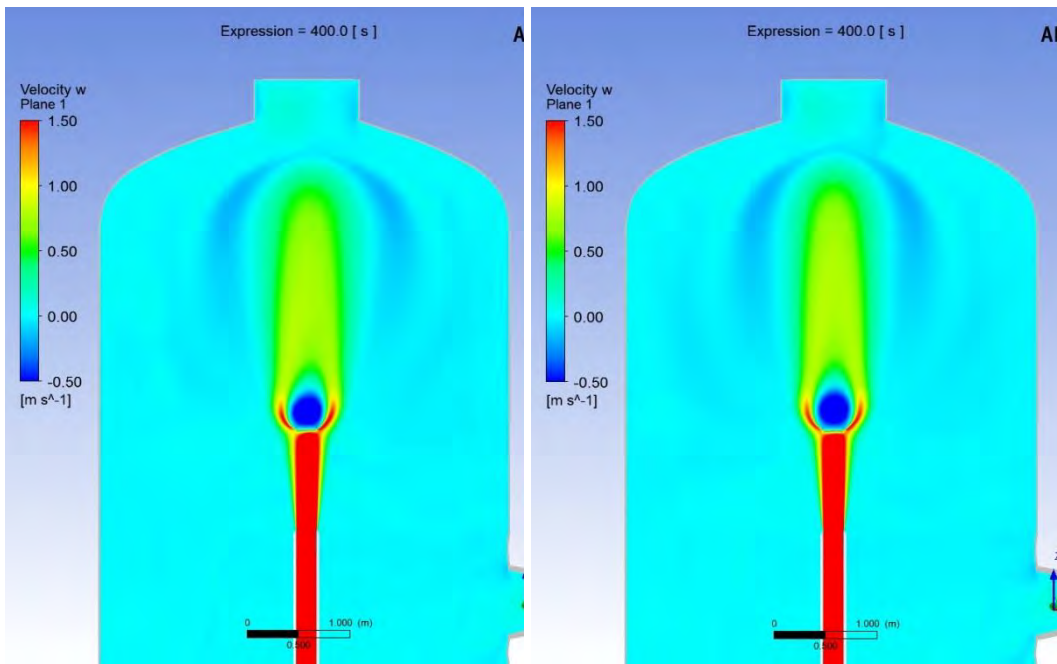




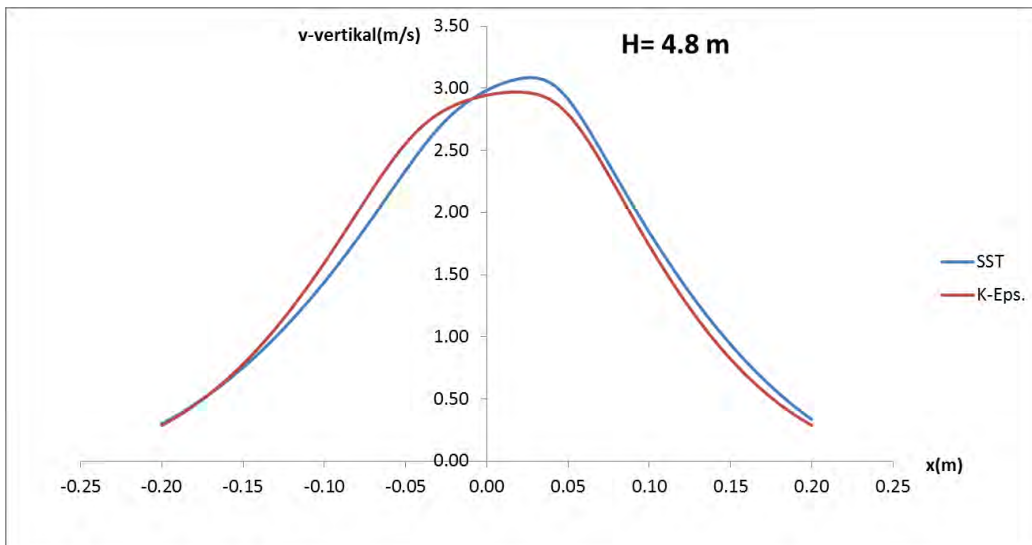
**Abb. 7.88** Vertikal-Geschwindigkeit nach 75 s. Links: SST, rechts: k-epsilon

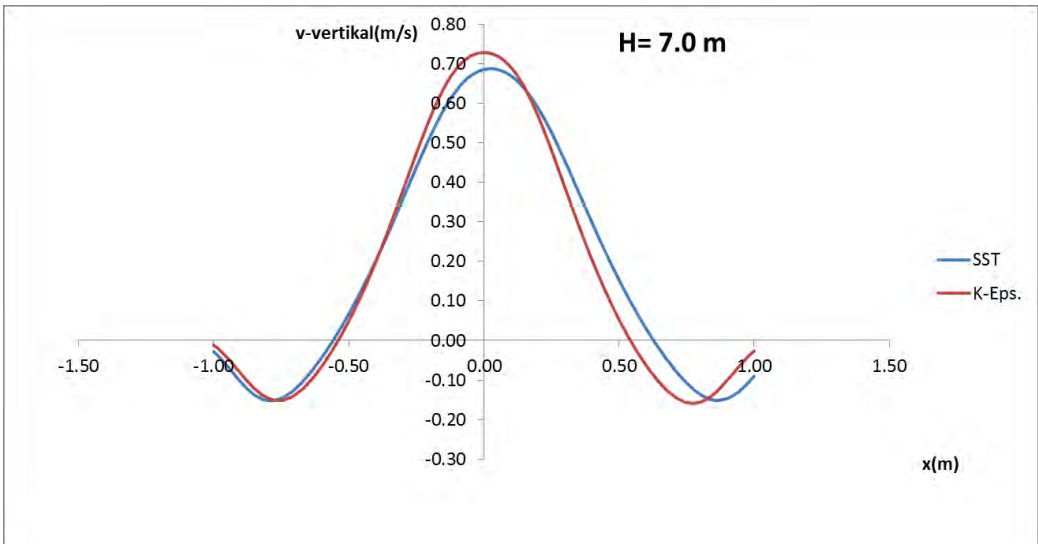
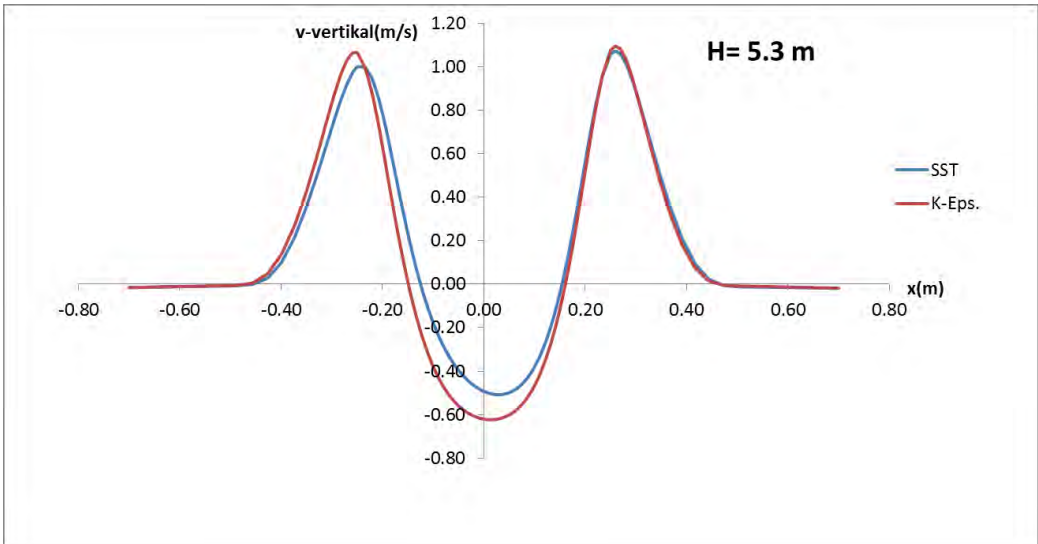


**Abb. 7.89** Vertikal-Geschwindigkeit nach 125 s. Links: SST, rechts: k-epsilon

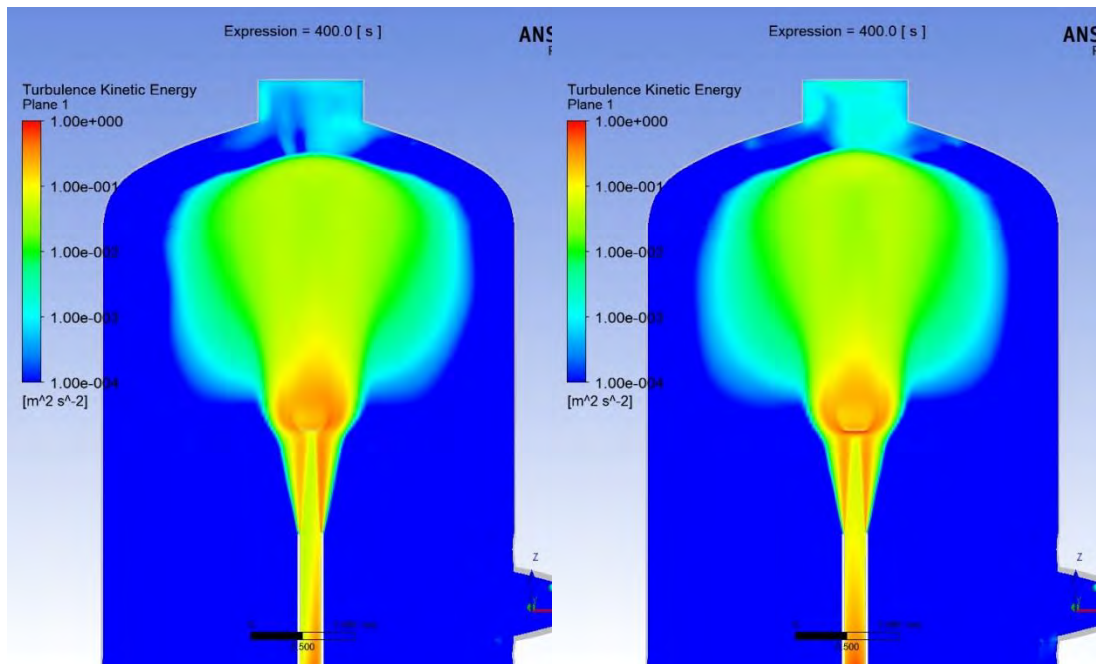


**Abb. 7.90** Vertikal-Geschwindigkeit nach 400 s. Links: SST, rechts: k-epsilon





**Abb. 7.91** Vertikal-Geschwindigkeit zum Zeitpunkt  $t = 400$  s bei Simulation mit dem SST und dem k-epsilonModell auf den Höhen 4.8 m, 5.3 m und 7.0 m



**Abb. 7.92** Turbulente Energie nach 400 s. Links: SST, rechts: k-epsilon

### 7.3.11 Zusammenfassung HP1-6

Die GRS hat sich mit blinden und offenen Rechnungen an einem HYMERES-Benchmark beteiligt. Der Einfluss des Rechengitters auf das Simulationsergebnis wurde untersucht. Es wurden Simulationen mit Gittern von 1.5 Millionen Zellen bis 11.5 Millionen Zellen durchgeführt. Dabei wurde neben einer Verfeinerung des Netzes auch die Topologie des Gitters im Bereich der Prallplatte modifiziert. Es zeigte sich, dass das Gitter um und hinter der Prallplatte einen Einfluss auf die Form des Dampfstrahls hatte. Zusätzlich wurde bei den Simulationen die Geometrie des Einlassrohres variiert. Bei einigen Simulationen wurde nur der gerade Teil des Einlassrohres berücksichtigt, bei anderen das gesamte Einlassrohr im PANDA-Behälter. Es zeigt sich, dass die Form des Einlassrohres einen signifikanten Einfluss auf die Strömung auch nach der Prallplatte hat.

Die Strömung und das benötigte CFD-Gitter im Einlassrohr wurden in Stand-Alone-Rechnungen detailliert untersucht. Selbst mit einem Gitter von über 7 Millionen Zellen konnte keine gitterunabhängige Lösung gefunden werden. Bei Modellierung des gesamten Einlassrohres ist das Strömungsprofil am Rohrauslass asymmetrisch und es enthält Drall. Die Simulation mit dem vollen Einlassrohr bildet die Geometrie des Versuchsaufbaus genauer ab. Allerdings gibt es hinsichtlich der Simulation des Einlassrohres noch Unsicherheiten. Neben der fehlenden Gitterunabhängigkeit ist unklar, ob

das SST-Modell die Turbulenz im gekrümmten Rohr hinreichend genau beschreibt, und wie sich die Einlassbedingungen (Lage/Richtung des Einlasses, Blockströmung etc.) auswirken. Da in HP1-6\_2 keine Geschwindigkeitsmessung des einströmenden Dampfes vorgenommen wurde, ist unklar, welches Strömungsprofil am Ende des Einlassrohres vorlag. PIV-Messungen anderer Versuche mit dem gleichen Einlassrohr lassen aber laut Experimentatoren (Andreani, Kapulla, (PSI)) den Schluss zu, dass auch beim HP1-6 Experiment keine ausgeprägte Asymmetrie am Rohreinlass vorliegt, d. h. dass die Asymmetrie von den Simulationen überschätzt wird.

Deshalb wird beim Vergleich mit experimentellen Daten auch eine Rechnung mit „geradem Einlassrohr“ berücksichtigt, bei der nur der gerade Teil des Einlassrohres modelliert wird. Dies entspricht der Vorgehensweise bei der Simulation ähnlicher PANDA-Versuche.

Die Simulationen waren in der Lage, die Schichtungsauflösung zu simulieren. Bei den beiden unteren Heliummessstellen sind die Simulationsergebnisse für beide Simulationen sehr ähnlich; sie zeigen eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten. Für die weiter oben gelegenen Messpunkte findet bei Simulation des vollen Einlassrohres immer eine etwas frühere Erosion der Schichtung statt als bei Simulation mit dem „geraden Rohr“. Bei den Messstellen MS 4 und MS 3 zeigt die Simulation mit geradem Einlassrohr eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Versuch. Bei der Simulation mit vollem Rohr wird die Schichtung um 20 s – 40 s zu schnell abgebaut. Bei den obersten Messstellen ist bei beiden Simulationen die Schichtungsauflösung zu schnell, allerdings ist die Abweichung bei vollem Rohr mit ca. 80 s größer als bei Simulationen mit „geradem“ Einlassrohr (ca. 40 s).

Die Temperaturen wurden von den Simulationen in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Dabei ist zu berücksichtigen, dass der etwas zu schnelle Schichtungsabbau an den oberen Messstellen auch zu einem entsprechend früheren Anstieg der Temperatur führt. An den seitlich gelegenen Messstellen im oberen Behälterbereich werden nach Auflösung der Schichtung moderate Abweichungen zum Experiment beobachtet. Die Abweichungen sind aber meist geringer als 5 K. Insgesamt zeigt die Simulation mit „geradem“ Einlassrohr eine etwas bessere Übereinstimmung mit dem Experiment. Bei der Beurteilung sollte aber berücksichtigt werden, dass es auch noch andere Unsicherheitsfaktoren gibt (Turbulenzmodell, Strahlungsmodell, CFD-Gitter u. a.).

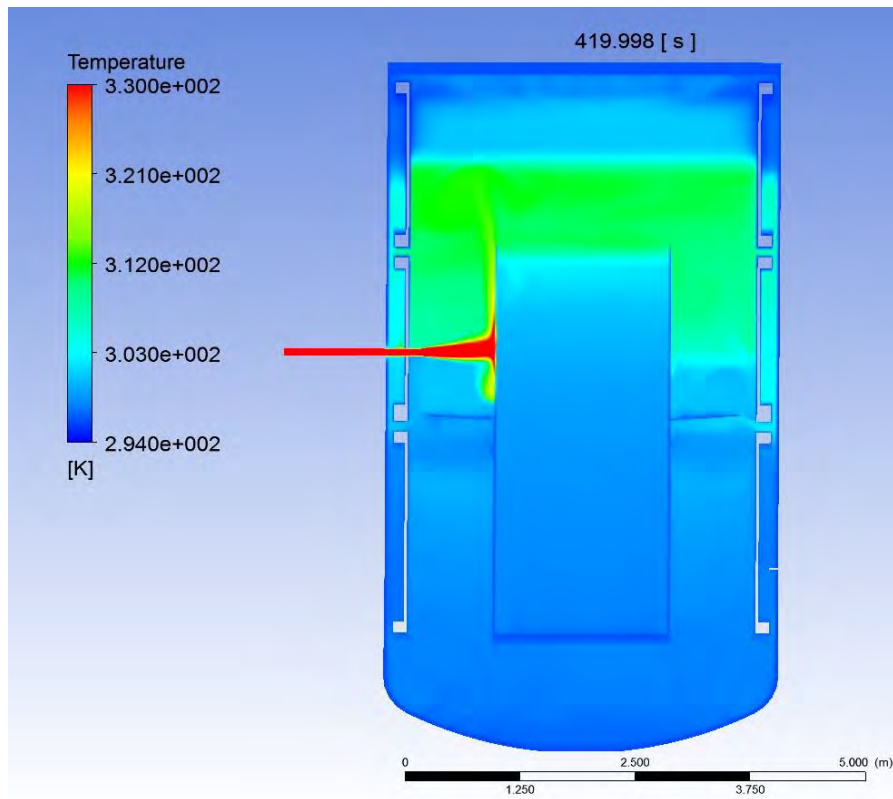
Eine Parameterstudie zum Einfluss der Vernachlässigung der Wärmestrahlungsmodellierung wurde durchgeführt. Bei Vernachlässigung der Wärmestrahlung wird die Gastemperatur unterhalb der Schichtung signifikant (mehr als 15 K) überschätzt. Aufgrund der fehlerhaften Gastemperaturen wird auch die Dichte der Gase falsch simuliert. Dies resultiert in einer signifikanten Überschätzung der Auflösungszeit für die Schichtung.

Um den Einfluss des Turbulenzmodells auf die Simulationsergebnisse zu untersuchen, wurden zwei Berechnungen mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen (k-epsilon, SST) durchgeführt. Die Ergebnisse der Simulationen sind ähnlich, die Simulation mit dem SST-Modell sagt eine etwas langsamere Schichtungsauflösung voraus.

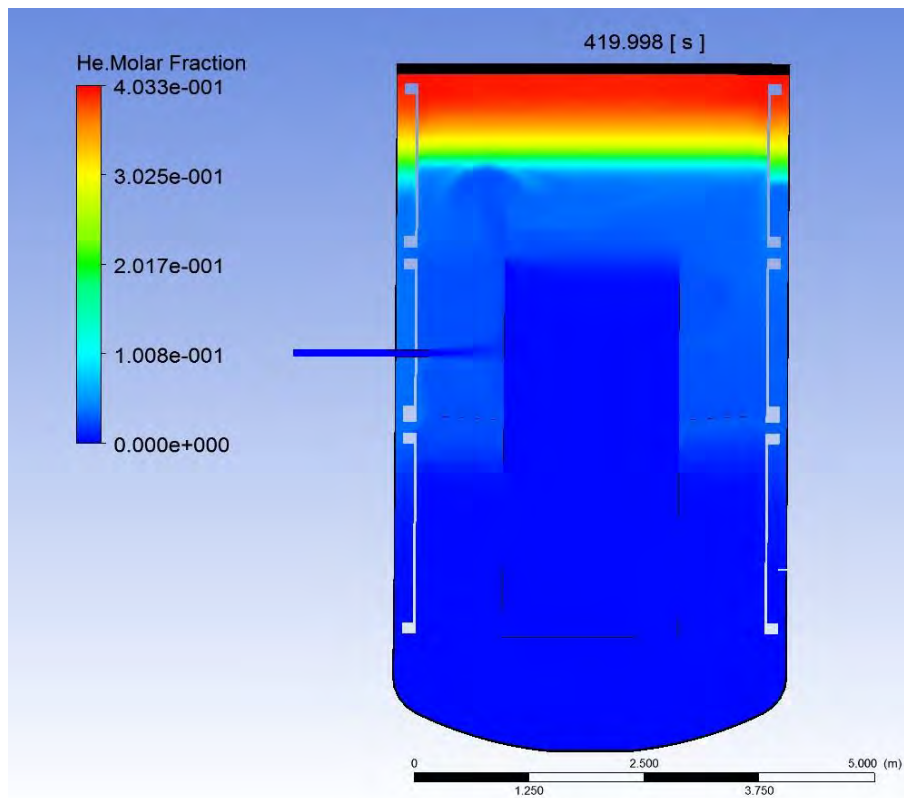
## **7.4 AP 1.7 MISTRA HM1-1 Benchmark**

### **7.4.1 Einleitung**

Die GRS hat sich mit CFX-Simulationen am HM1-1-Benchmark, der im Rahmen des HYMERES-Projektes durchgeführt wurde, beteiligt. Der HM1-1-Versuch wurde an der MISTRA-Anlage durchgeführt /ABD 13/. Zu Beginn ist der MISTRA-Behälter mit Luft gefüllt. Die Gastemperatur zu Versuchsbeginn ist ungefähr 23 °C, der Anfangsdruck 1 bar /ALE 15/. Danach wird eine stabile Heliumschichtung (maximale Heliumkonzentration etwa 43 Vol.-%) im oberen Bereich des Behälters erzeugt. Es wird heiße Luft (~150 °C, Massenstrom ~ 25 g/s) über ein horizontales Rohr in den MISTRA-Behälter eingespeist (Abb. 7.94). Der Luftstrahl prallt auf den Innenzylinder und die heiße Luft steigt auf. Der aufsteigende Plume erodiert langsam die Heliumschicht, und unterhalb der Heliumschicht sammelt sich dabei eine Schicht heißerer Luft (Abb. 7.93). Durch ein Ventingventil im unteren Behälterbereich wird der Druck konstant gehalten. An unterschiedlichen Positionen wurde die Heliumkonzentration und die Temperatur gemessen (Abb. 7.95).

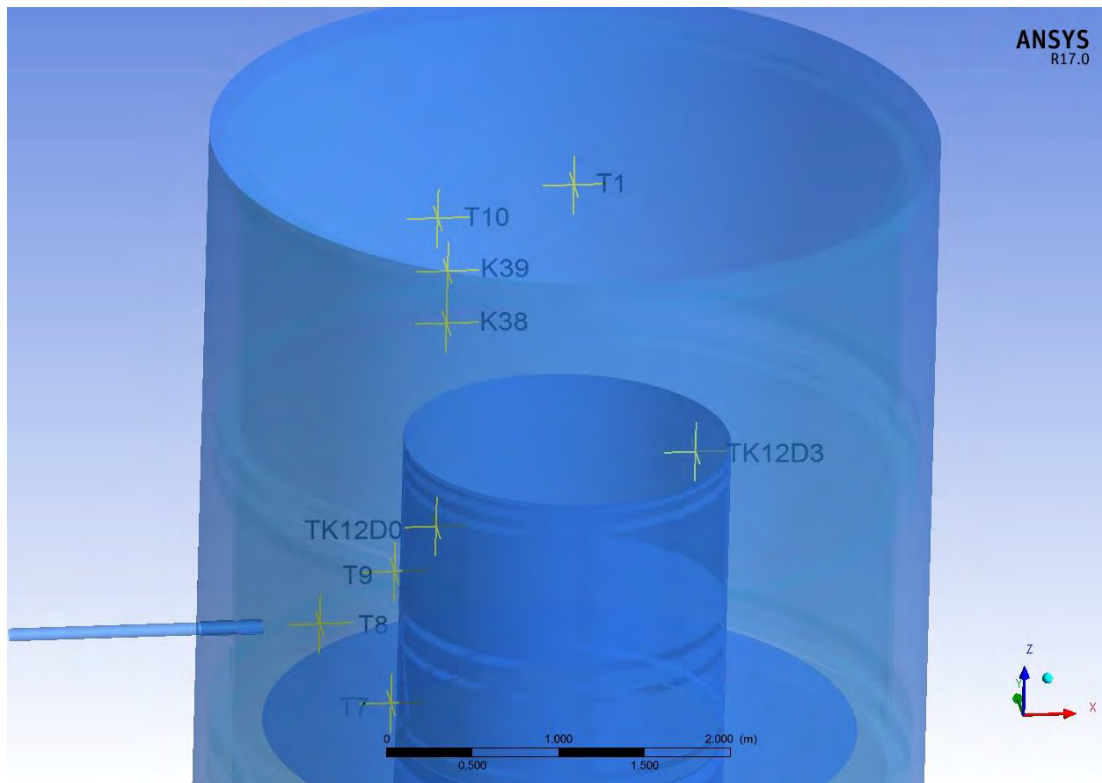


**Abb. 7.93** Temperaturverteilung nach 420 s



**Abb. 7.94** Heliumkonzentration nach 420 s





**Abb. 7.95** Messstellen im MISTRA-Behälter. (K: Konzentrationsmessung, T: Temperaturmessung)

#### 7.4.2 Verwendete Modelle

Bei den Simulationen wurden die schon in anderen Versuchen eingesetzten Standardmodelle verwendet. Die Turbulenz wird mit dem SST-Modell (einschließlich der Terme für die Produktion und Dissipation von auftriebsbedingter Turbulenz) modelliert. Die molekulare Diffusion wird mit der Fuller-Korrelation simuliert. Da in diesem Versuch nur Luft und Helium vorliegen, wird die Wärmestrahlung vernachlässigt. Hierzu wurde auch noch eine Parameterstudie durchgeführt (siehe Abschnitt 7.4.5). Die Behälterwände und der Innenzylinder wurden als Solid Blocks modelliert. Die Decke des MISTRA-Behälters wurde geometrisch vereinfacht, wobei die Wärmekapazität der Decke unverändert blieb. Auf Anraten der Experimentatoren wurde für die Kondensier-/ABD 13/ eine feste Wandtemperatur vorgegeben (22.1 °C, 23 °C, 23.7 °C).

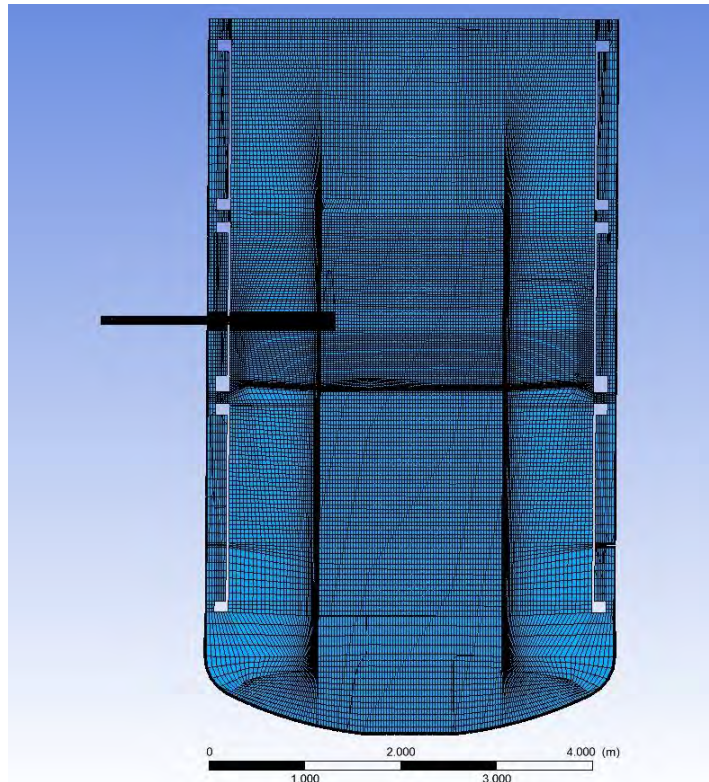
Der gerade Teil des Einlassrohres wurde simuliert (bis zu einer Länge von 1.058 m außerhalb des Behälters), einige Details des Einlassrohres wurden vernachlässigt. Am Beginn des Einlassrohres wird eine Massenstrom-Randbedingung gesetzt. Die Ventileitung wird durch eine Druckrandbedingung modelliert. Als Konvergenzkriterium



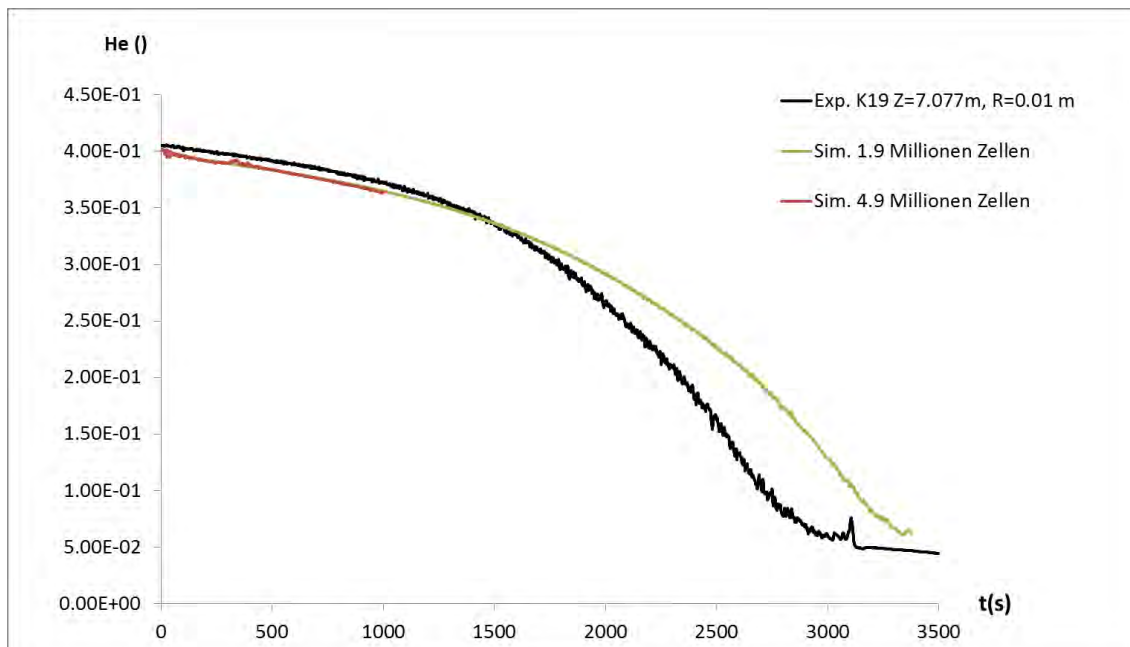
wird  $RMS = 1.0e-4$  verwendet (Standardkriterium). Der adaptive Zeitschritt wird von der Konvergenz gesteuert. Die Zeitschritte lagen im Bereich  $0.001\text{ s} - 0.1\text{ s}$ , für die Simulation mit dem groben Gitter hat sich ein mittlerer Zeitschritt von  $0.06\text{ s}$  eingestellt.

### **7.4.3 Gitterstudie**

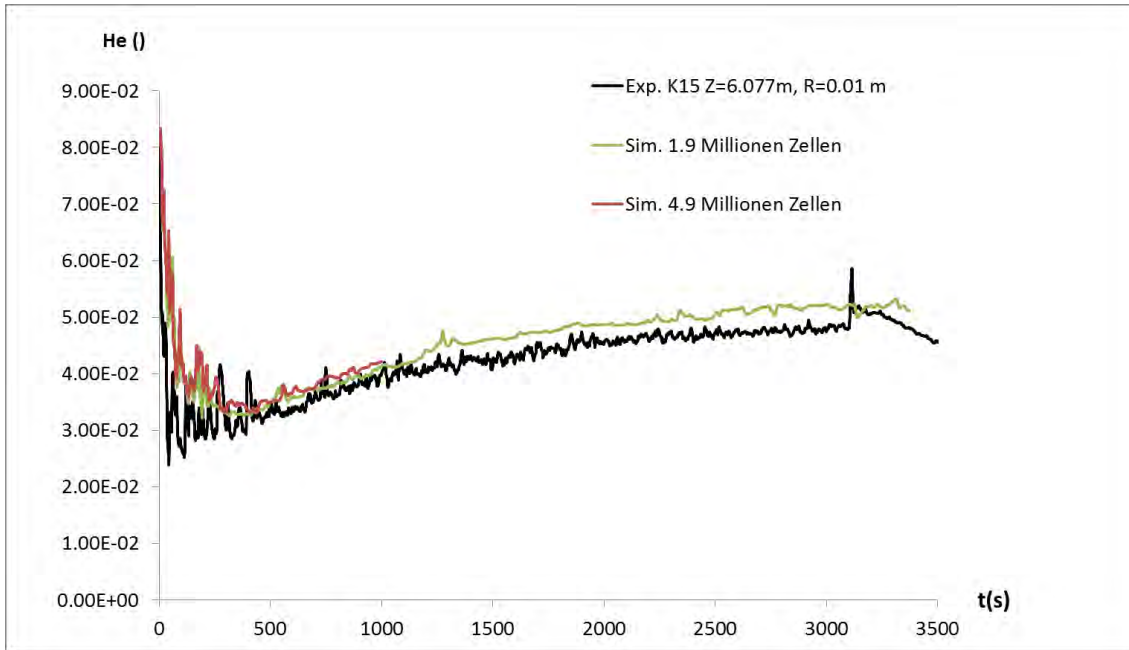
Ausgehend von einer CAD-Datei, die CEA den Benchmark-Teilnehmern zur Verfügung gestellt hat, wurde ein strukturiertes CFD-Gitter des MISTRA-Behälters mit 1.9 Millionen Zellen erstellt. Insbesondere im Bereich des Einlasses und um den Innenzylinder wurde das Gitter lokal verfeinert (Abb. 7.96). Um den Einfluss der räumlichen Diskretisierung zu untersuchen, wurde das Gitter verfeinert. Das feinere Gitter enthält ca. 4.9 Millionen Zellen. Die Verfeinerung fand schwerpunktmäßig in der oberen Hälfte des MISTRA-Behälters (oberhalb der horizontalen Platte des Innenzylinders) statt, weil dort die wichtigen physikalischen Prozesse (Wechselwirkung Luftstrahl mit Innenzylinder, Schichtungsauflösung) ablaufen. Die Simulation mit dem feinen Gitter lief nur bis zu einer Simulationszeit von  $1000\text{ s}$ , da der Rechenaufwand sehr hoch war (über 1.5 Monate auf 30 CPUs). Die Simulation mit dem feinen Gitter war damit ca. 4.5-mal langsamer als die Simulation mit dem Standardgitter. An fast allen Messstellen für die Heliumkonzentration (siehe Abb. 7.98) und die Temperatur (siehe Abb. 7.100 bis Abb. 7.103) bestehen kaum Unterschiede zwischen den beiden Simulationen. Die größten Abweichungen gibt es beim Messpunkt T8 (Abb. 7.101). Dieser Messpunkt liegt im Einspeisestrahle. Hier gibt es einen starken Gradienten im Temperaturfeld. Daher kann schon eine kleine Änderung der Strahlposition der auch eine Änderung der Stützstellen bei der Interpolation zu einer merklichen Temperaturänderung führen. Diese Untersuchung zeigt, dass das Gitter mit 1.9 Millionen Zellen ausreichend fein ist, um die numerischen Fehler hinreichend klein zu halten.



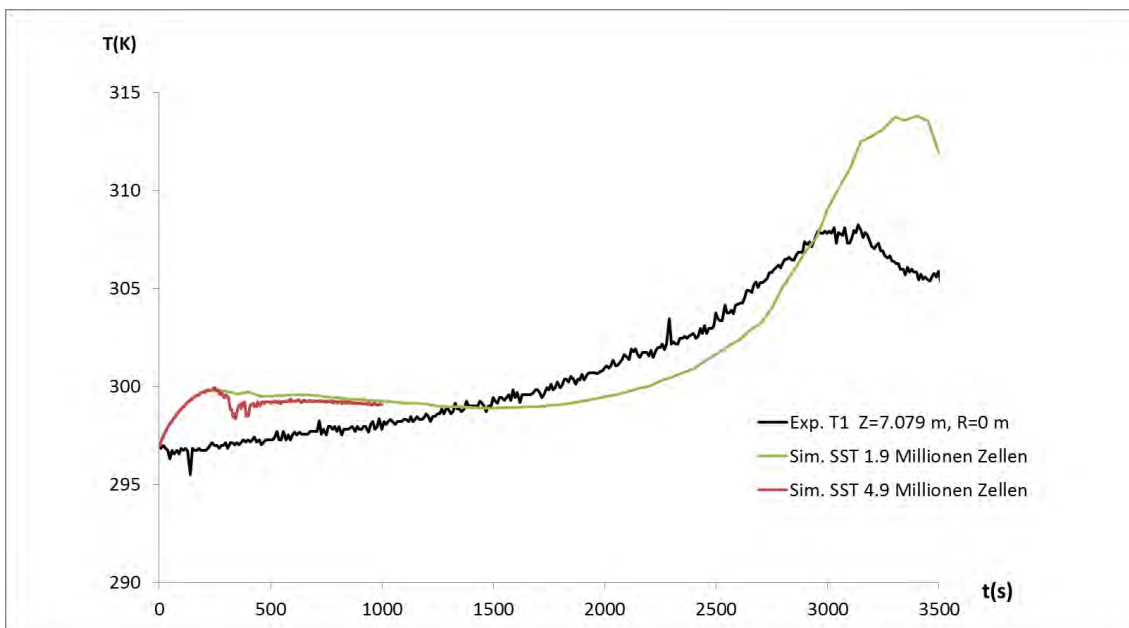
**Abb. 7.96** Standardmäßig verwendetes CFD-Gitter



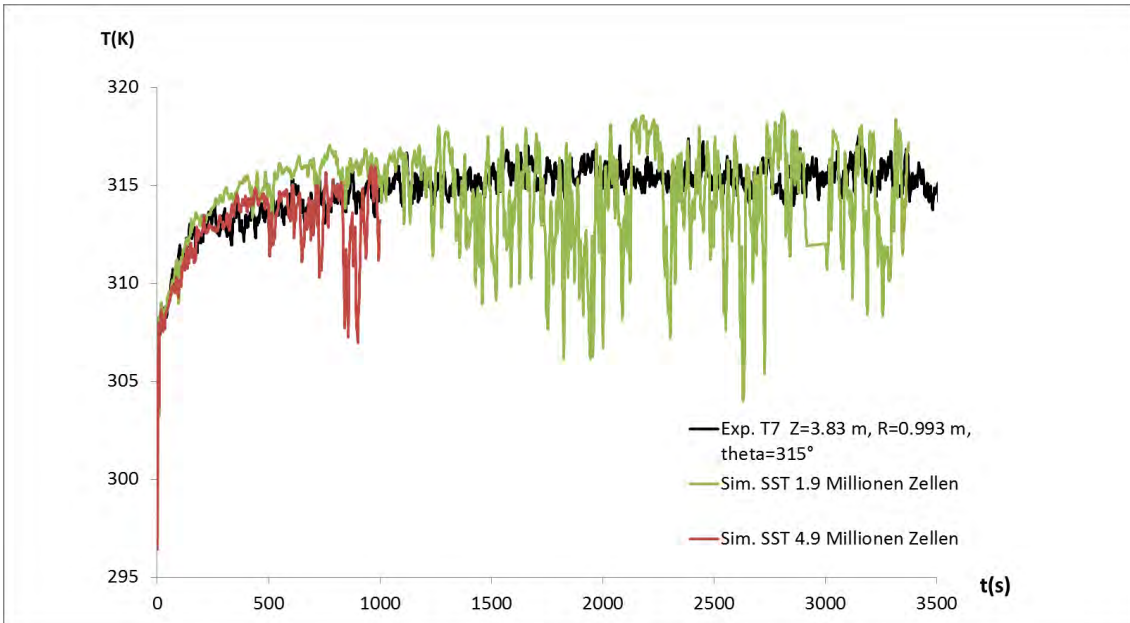
**Abb. 7.97** Heliumkonzentration in 7.08 m Höhe bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter



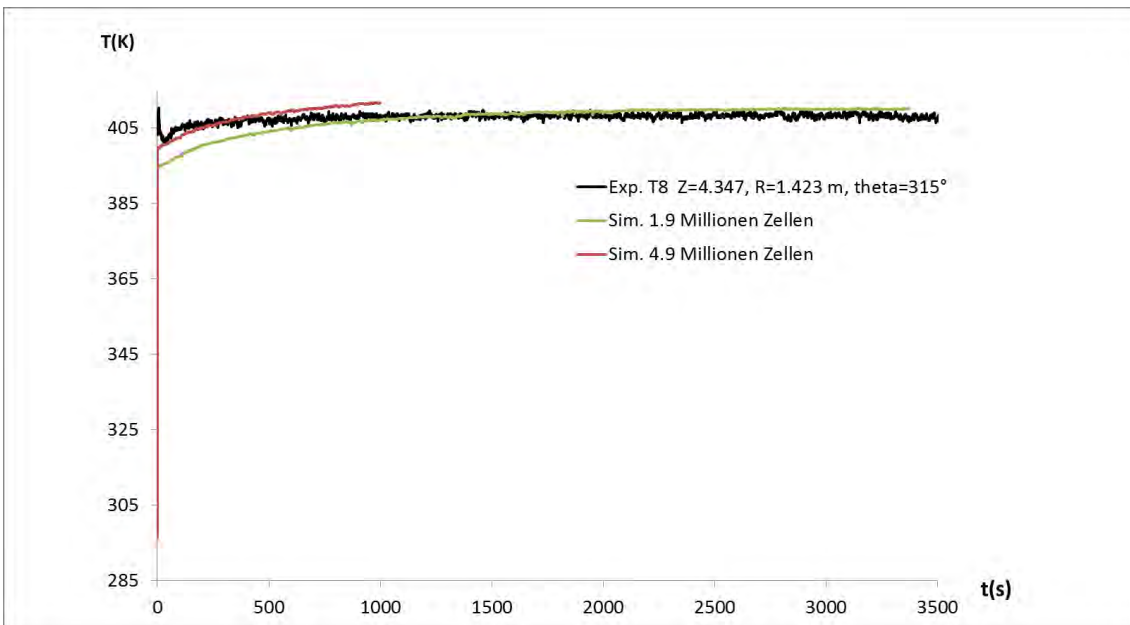
**Abb. 7.98** Heliumkonzentration in 6.08 m Höhe bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter



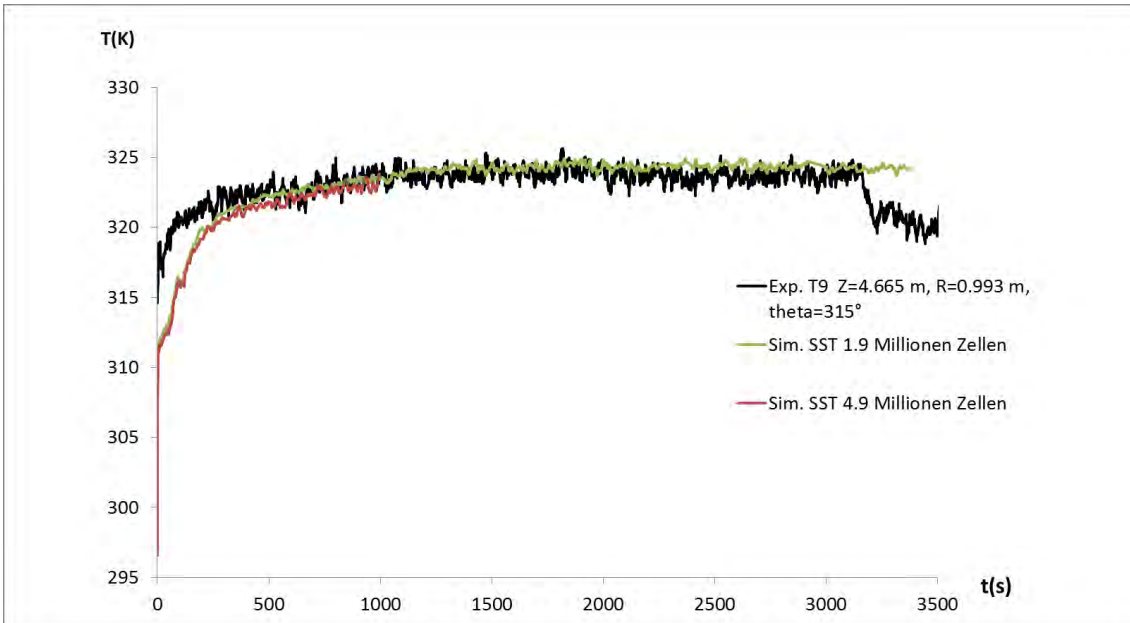
**Abb. 7.99** Temperatur an der Messstelle T1 bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter



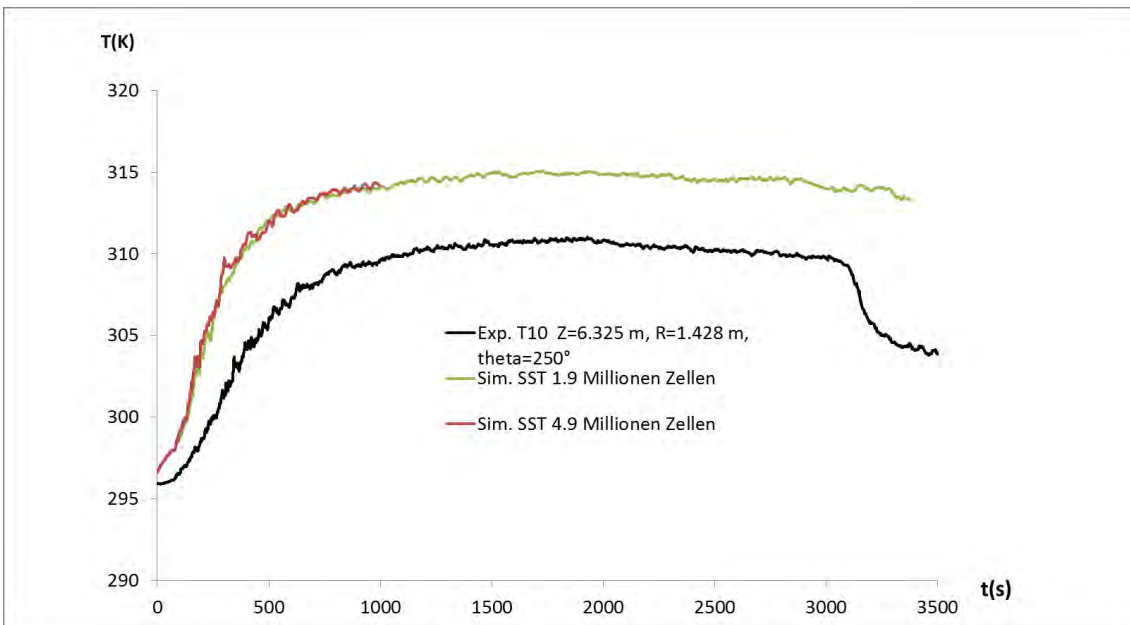
**Abb. 7.100** Temperatur an der Messstelle T7 bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter



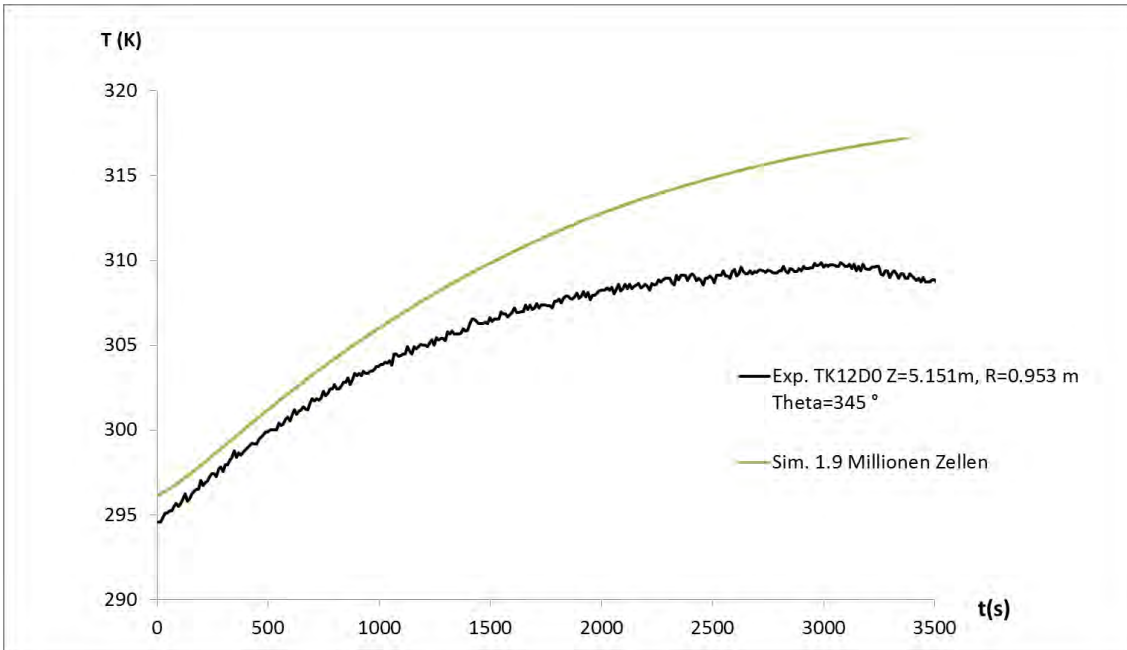
**Abb. 7.101** Temperatur an der Messstelle T8 bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter



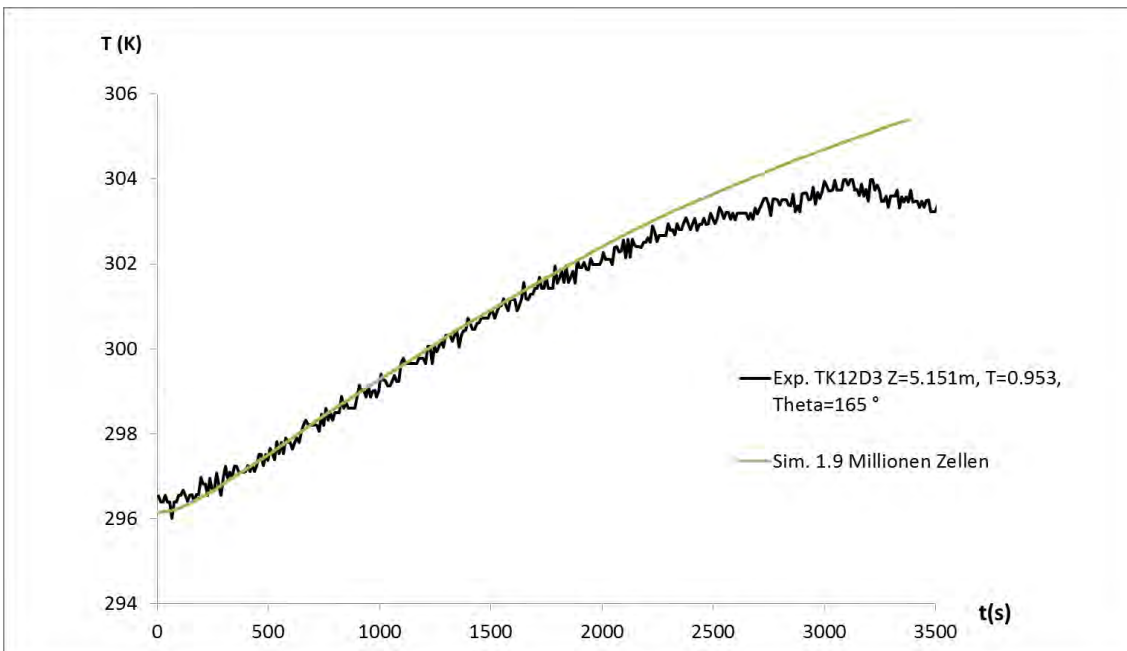
**Abb. 7.102** Temperatur an der Messstelle T9 bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter



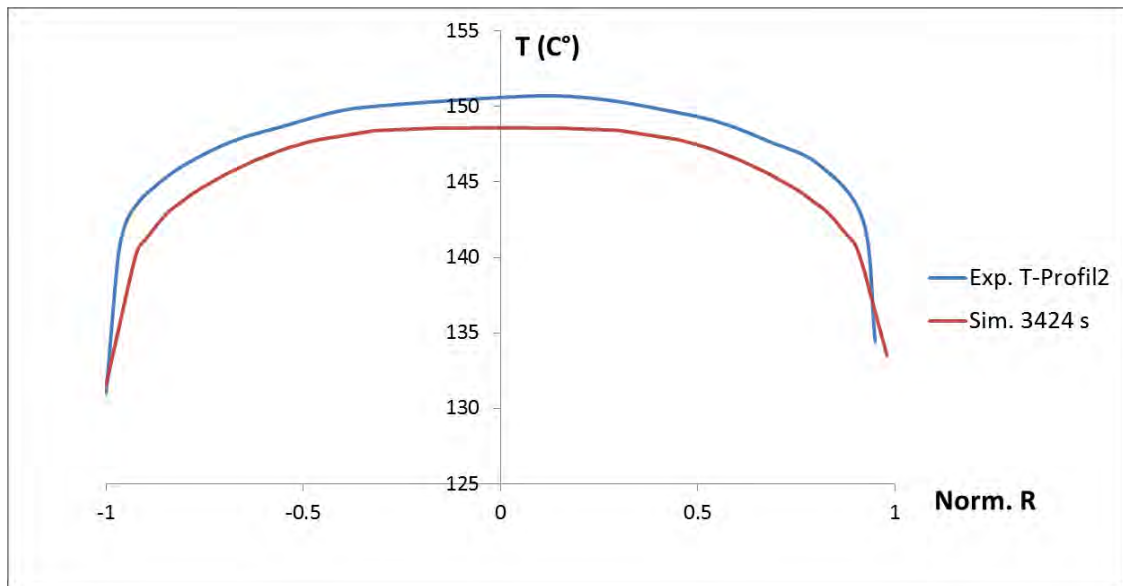
**Abb. 7.103** Temperatur an der Messstelle T10 bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter



**Abb. 7.104** Temperatur des Innenzylinders an der Messstelle TK12D0



**Abb. 7.105** Temperatur des Innenzylinders an der Messstelle TK12D3



**Abb. 7.106** Temperaturverlauf am Einlassrohr. Blau: in einem Vorversuch gemessene Temperatur; rot: Temperatur in der Simulation

#### 7.4.4 Vergleich mit experimentellen Daten

Die Schichtungsauflösung konnte in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden (Abb. 7.98). In der Simulation dauert die Schichtungsauflösung etwa 350 s länger als im Experiment, was einem relativen Fehler von etwa 11 % entspricht.

Die Temperatur im heißen Luftstrahl (Abb. 7.101, T8) wird in den ersten 500 s unterschätzt, danach entspricht der Simulationswert dem gemessenen Wert. Möglicherweise ist die Ursache für die Abweichung die Anfangstemperatur im Einspeiserohr, die in der Simulation zu niedrig angenommen wurde. Am Messpunkt T9 (in der Nähe des Innenzylinders, oberhalb des Einspeiserohres) wird die Temperatur in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet (Abb. 7.102). Die Unterschätzung der Temperatur in den ersten 500 s ist auf die etwas niedrigere Temperatur des Luftstrahls (siehe T8) zurückzuführen. Der Messpunkt T7 liegt unterhalb des Einlassrohres in der Nähe des Innenzylinders. An diesem Messpunkt wird ebenfalls eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt (Abb. 7.100). Nach 1000 s treten in der Simulation stärkere Temperaturschwankungen auf. Die Temperatur der heißen Gasschicht unterhalb der Heliumschicht wird in der Simulation allerdings überschätzt. Am Messpunkt T10 beträgt die Abweichung etwa 5 K (Abb. 7.103). Der Absolutwert der Temperatur in der Heliumschicht wird von der Simulation zufriedenstellend berechnet (Abb. 7.99, T1). Allerdings unterscheidet sich der Verlauf im Experiment und in der Simulation. Im Ex-

periment erfolgt ein kontinuierlicher Temperaturanstieg, bis die Heliumschicht aufgelöst wurde. In der Simulation erfolgt in den ersten 200 s ein deutlicher Temperaturanstieg, auf den eine etwa 2000 s lange Phase mit stagnierender Temperatur folgt. Danach erfolgt ein schnellerer Temperaturanstieg als im Experiment. An zwei Messstellen wurde die Temperatur der Innenzylinderwand gemessen. Die Messstelle TKD0 liegt dabei auf der Seite der heißen Luftspeisung, während TKD12 auf der gegenüberliegenden Seite liegt. (Abb. 7.95). Der Temperaturanstieg in den ersten 1000 s / 1500 s wird von der Simulation richtig berechnet (Abb. 7.104, Abb. 7.105). Im späteren Verlauf flacht der Temperaturanstieg im Experiment ab. Dies wird von den Simulationen nur in deutlich schwächerer Form berechnet. Die um etwa 1 K höhere Anfangstemperatur bei TKD0 rührt daher, dass bei der Initialisierung eine Temperaturabhängigkeit nur von der Höhe berücksichtigt wird.

In einem Vorversuch wurde die Temperatur am Einlassrohr gemessen. Die Temperaturmessung erfolgte, nachdem sich eine stationäre Temperatur eingestellt hat. Im Vorversuch lag die mittlere Temperatur um etwa 3 K höher als in HM1-1. Ein Vergleich mit der Temperatur in der Simulation nach 3424 s zeigt, dass das Temperaturprofil in der Simulation gut mit dem gemessenen übereinstimmt (Abb. 7.106).

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass die Schichtungsauflösung in relativ guter Übereinstimmung mit dem Experiment gerechnet werden konnte, bei der Temperatur gibt es aber noch moderate Abweichungen, wobei insbesondere die Überschätzung der Temperatur in der heißen Luftschicht unterhalb der Heliumschicht zu nennen ist. Beim Vergleich des Validierungsergebnisses mit dem PANDA-Experiment HP1-2 (siehe Abschnitt 7.2) sind zwei Punkte hervorzuheben. Im Gegensatz zu HP1-2 kann bei diesem Experiment auch ohne Berücksichtigung von Wärmestrahlung die Schichtungsauflösung zufriedenstellend simuliert werden. Dies ist auch zu erwarten, da hier kein (stark) Wärmestrahlung absorbierendes Gas im Versuch vorhanden war. Dieser Befund ist ein Indiz, dass der starke Einfluss der Wärmestrahlungsmodellierung auf die Schichtungsauflösung in HP1-2 einen physikalischen Hintergrund hat. Weiterhin war bei HM1-1 die Übereinstimmung mit dem Experiment größer und der Einfluss der Einlassmodellierung gering. Der Grund hierfür ist vermutlich, dass bei HP1-2 der Strahl auf ein kleines Hindernis getroffen ist, dessen Durchmesser ähnlich dem des einströmenden Gasstrahls ist. In diesem Fall führen kleine Unterschiede beim Auftreffwinkel, Strahldurchmesser etc. zu einer signifikant anderen Ablenkung des Gasstrahls, was zu einer deutlich unterschiedlichen Erosionszeit führt.



#### 7.4.5 Parameterstudie zum Einfluss von Luftfeuchtigkeit

In den bisher vorgestellten Simulationen wurde die Wärmestrahlung vernachlässigt. Es ist aber davon auszugehen, dass die Luftfeuchtigkeit nicht 0 war, sondern dass ein geringer Wasserdampfgehalt vorlag. Bei 22 °C liegt der Sättigungsdruck bei 0.026 bar. Ein Volumenanteil von Wasserdampf von 1 Vol.-% – 2 Vol.-% erscheint deshalb als realistisch. Die Luftfeuchtigkeit wurde allerdings nicht gemessen. Nach Abschluss der Arbeiten wurde zwar das Experiment wiederholt und dabei auch die Luftfeuchtigkeit gemessen; da bei diesem Wiederholungsexperiment der Heliumgradient jedoch leicht unterschiedlich war, können diese neuen Messwerte nicht zum Vergleich mit den vorliegenden Simulationen genutzt werden.

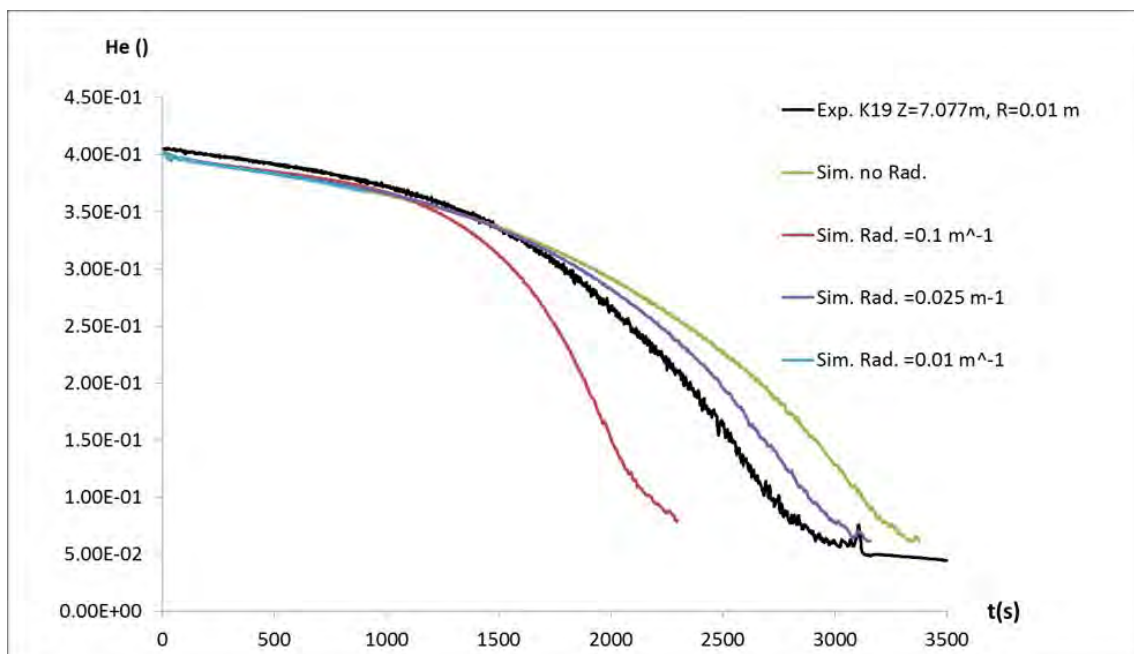
Im Folgenden wird untersucht, wie sich ein geringer Dampfgehalt auf das Simulationsergebnis auswirkt. Wie schon bei anderen Experimenten wurde das Discrete-Transfer-Modell zur Strahlungsmodellierung genutzt. Bei der Untersuchung wurde davon ausgegangen, dass der Dampfgehalt in der Luft konstant ist. Deshalb braucht keine weitere Komponente ( $\text{H}_2\text{O}$ ) berücksichtigt zu werden, sondern es wurde der Luft eine Absorptionskonstante  $> 0 \text{ m}^{-1}$  zugeordnet. Es wurden drei Simulationen mit den Absorptionskonstanten  $0.1 \text{ m}^{-1}$ ,  $0.025 \text{ m}^{-1}$  und  $0.01 \text{ m}^{-1}$  durchgeführt. Der Wert  $0.1 \text{ m}^{-1}$  stellt eine obere Grenze dar, die den tatsächlichen Absorptionskoeffizienten überschätzen wird. Ein Absorptionskoeffizient von  $0.025 \text{ m}^{-1}$  entspricht in etwa einem Dampfgehalt von ca. 3 Vol.-%,  $0.01 \text{ m}^{-1}$  einer Konzentration von etwa 1.5 Vol.-%, wenn ein Absorptionskoeffizient von  $1 \text{ m}^{-1}$  von Wasserdampf angenommen wird.

Die Parameterstudie zeigt, dass bei Berücksichtigung der Wärmestrahlung die Schichtungsauflösung beschleunigt wird, wie dies auch bei HP1-2 und HP1-6 der Fall war. Die Simulation mit dem unphysikalisch hohen Absorptionskoeffizienten von  $0.1 \text{ m}^{-1}$  berechnet eine deutlich zu schnelle Schichtungsauflösung. Mit den niedrigeren Absorptionskoeffizienten von  $0.025 \text{ m}^{-1}$  erfolgt die Schichtungsauflösung etwas schneller als bei Vernachlässigung der Wärmestrahlung, aber immer noch etwas langsamer als im Experiment.

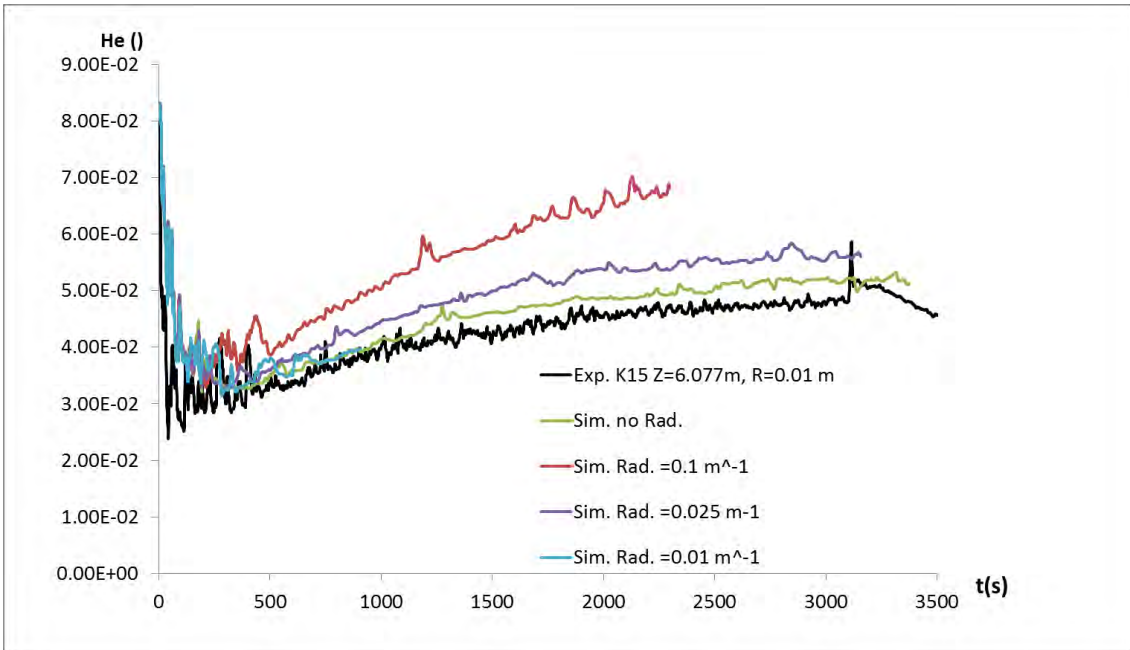
Die Temperatur im heißen Luftstrahl (T8, Abb. 7.111) und am Messpunkt T9 (in der Nähe des Innenzylinders, oberhalb des Einspeiserohres, Abb. 7.112) wird durch die Wärmestrahlung kaum beeinflusst.

Am Messpunkt T9 führt die Wärmestrahlung mit zunehmendem Absorptionskoeffizienten zu einer Temperaturabsenkung, wobei bis zu einem Absorptionkoeffizienten von  $0.025 \text{ m}^{-1}$  eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt werden kann. Mit zunehmendem Absorptionskoeffizienten nimmt die Temperatur der heißen Gasschicht unterhalb des Heliums ab (T10, Abb. 7.113). Beim unrealistisch hohen Absorptionskoeffizienten  $0.1 \text{ m}^{-1}$  wird die Temperatur sogar teilweise unterschätzt. Die Temperatur der Heliumschicht (T1, Abb. 7.109) nimmt mit zunehmenden Absorptionskoeffizienten geringfügig ab. Bei Berücksichtigung der unterschiedlichen Erosionsgeschwindigkeit ist der Verlauf der Temperatur bei allen Simulationen ähnlich. Hier konnte die Wärmestrahlungsmodellierung keine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment erzielen.

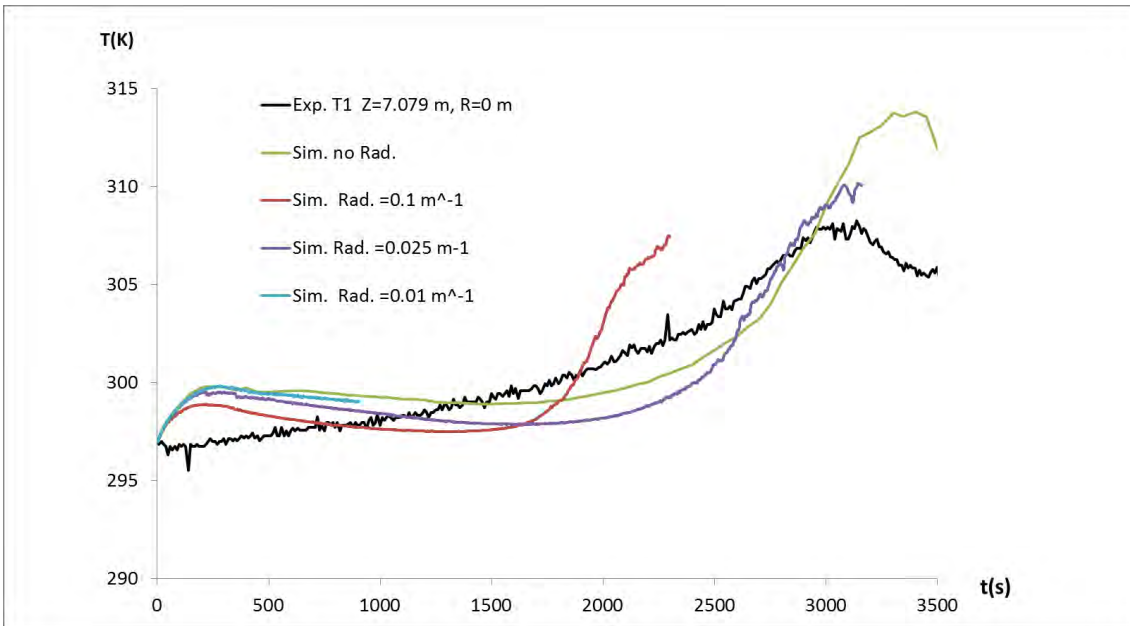
Die Temperatur der Innenzylinderwand (TK12D0, TK12D3, Abb. 7.115) wird durch die Wärmestrahlungsmodellierung deutlich beeinflusst. Bei Berücksichtigung der Wärmestrahlung flacht sich der Temperaturanstieg in der Innenzylinderwand im Verlauf des Experiments deutlich ab. Dieser Effekt wird auch im Versuch beobachtet, allerdings überschätzen die Simulationen mit Wärmestrahlung diesen Effekt unabhängig von der Wahl der Absorptionskonstante von Luft. Die um etwa 1 K höhere Anfangstemperatur bei TKD0 rührt daher, dass bei der Initialisierung eine Temperaturabhängigkeit nur von der Höhe berücksichtigt wird.



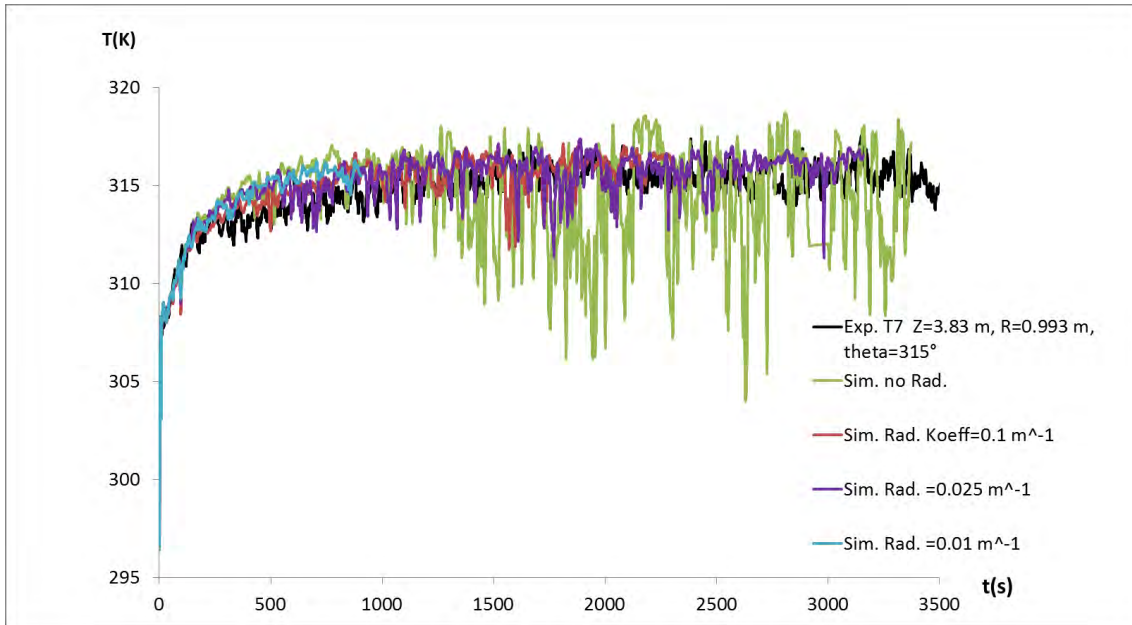
**Abb. 7.107** Heliumkonzentration an der Messstellen K19 in Abhängigkeit vom Absorptionskoeffizienten



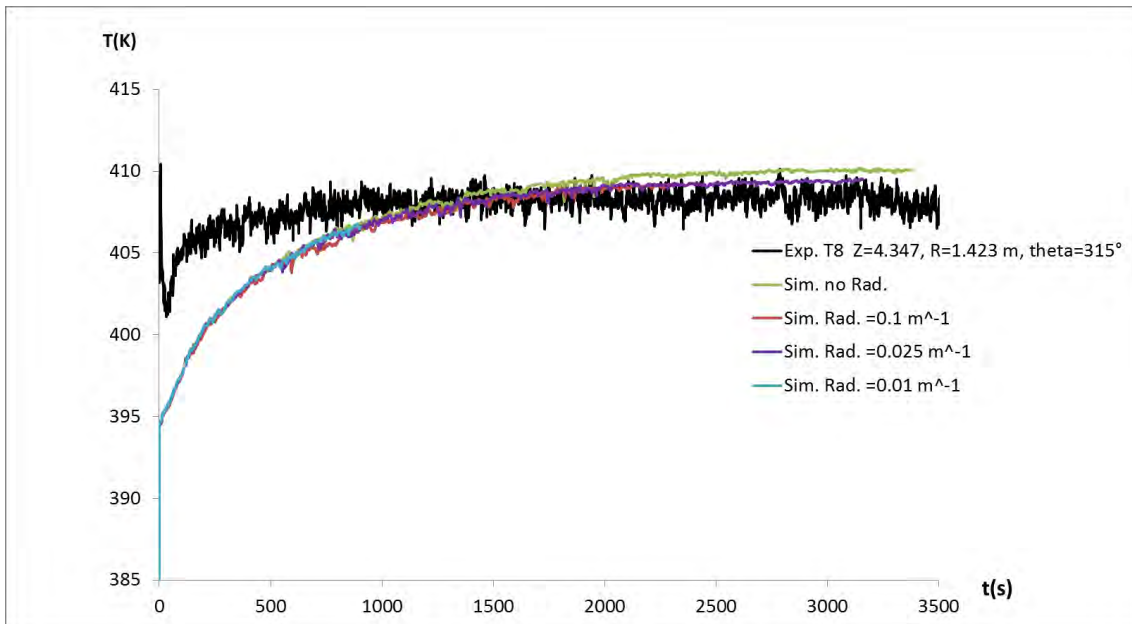
**Abb. 7.108** Heliumkonzentration an den Messstellen K19 und K15 in Abhängigkeit vom Absorptionskoeffizienten



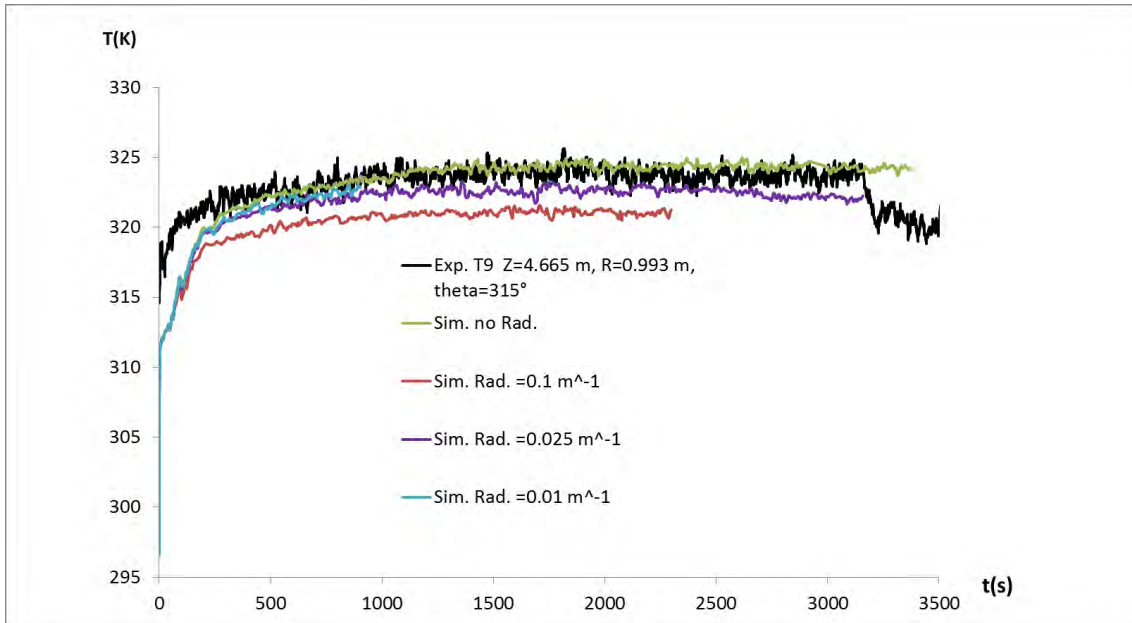
**Abb. 7.109** Temperatur an der Messstelle T1 in Abhängigkeit vom Absorptionskoeffizienten



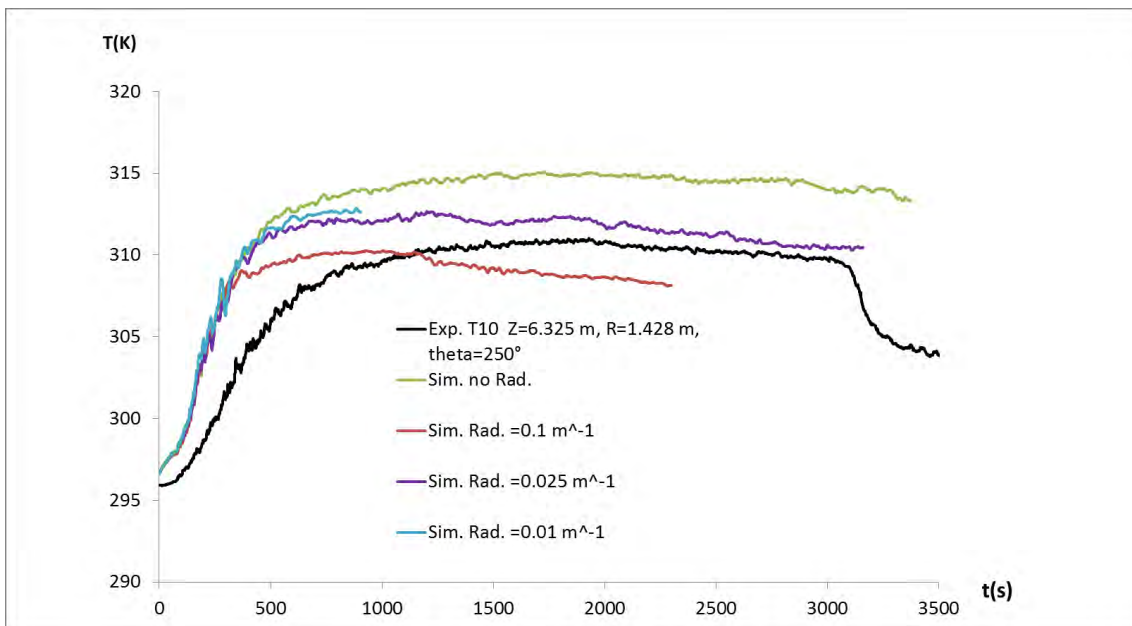
**Abb. 7.110** Temperatur an der Messstellen T7 in Abhängigkeit vom Absorptionskoeffizienten



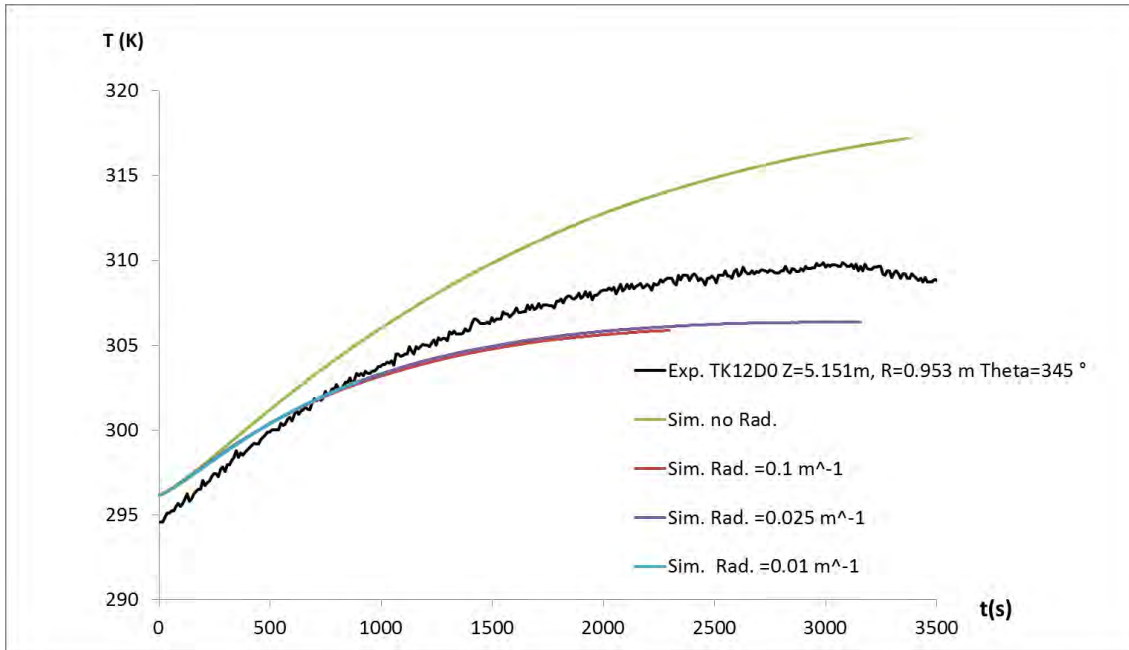
**Abb. 7.111** Temperatur an der Messstellen T8 in Abhängigkeit vom Absorptionskoeffizienten



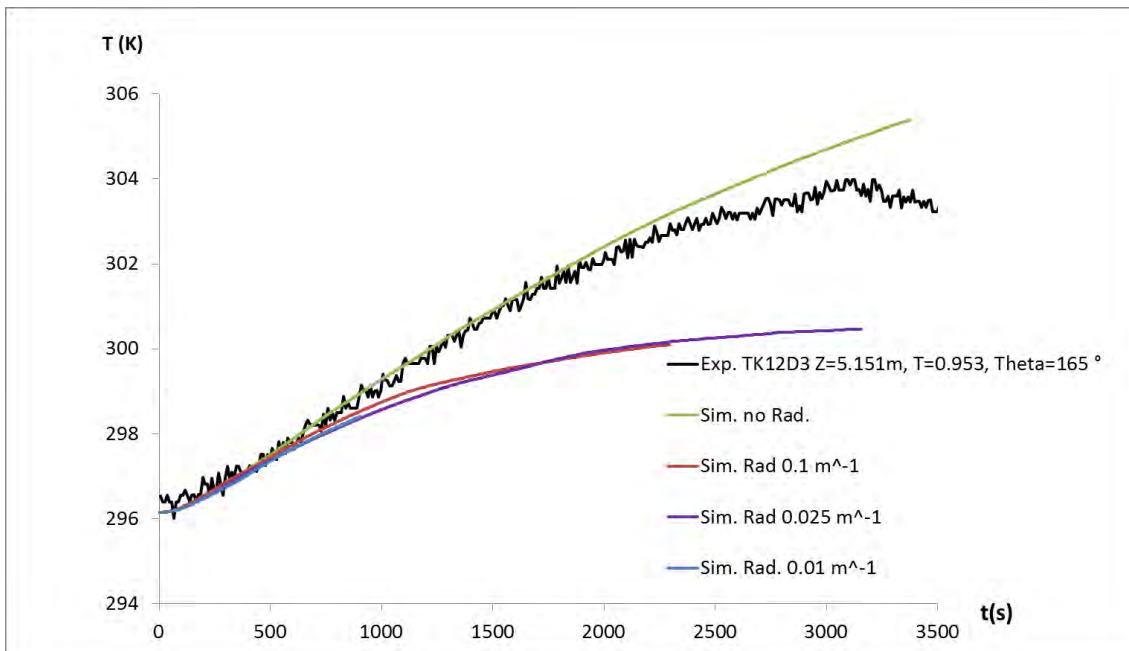
**Abb. 7.112** Temperatur an den Messstelle T9 in Abhängigkeit vom Absorptionskoeffizienten



**Abb. 7.113** Temperatur an der Messstellen T10 in Abhängigkeit vom Absorptionskoeffizienten



**Abb. 7.114** Temperatur der Innenzylinderwand an der Messstelle TK12D0



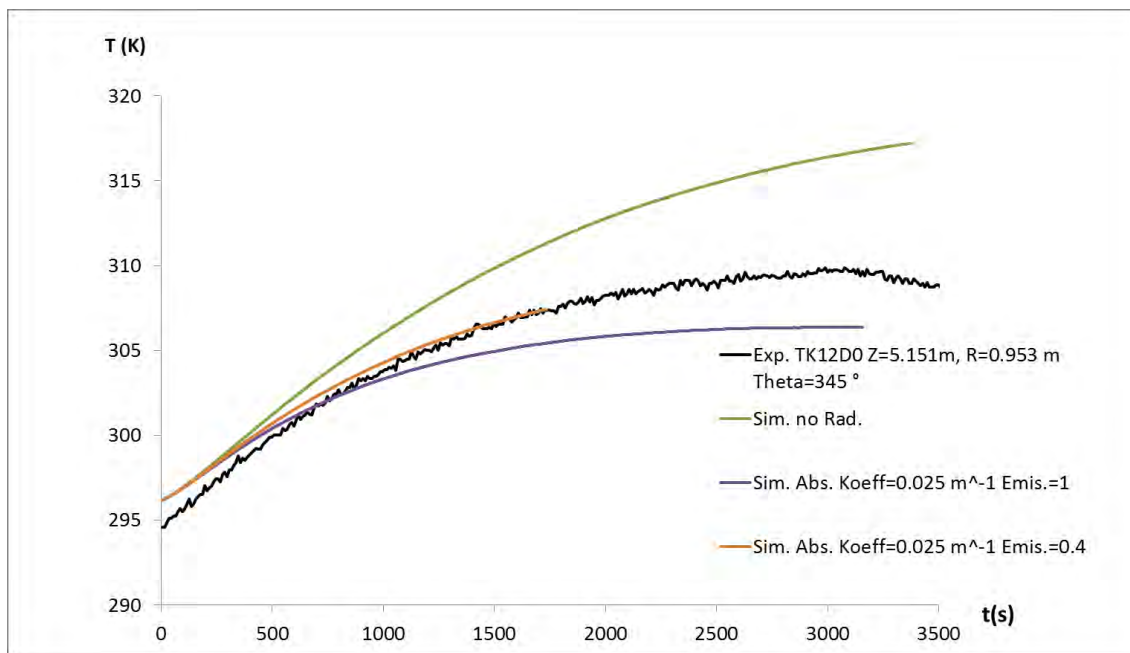
**Abb. 7.115** Temperatur der Innenzylinderwand an der Messstellen TK12D3

#### 7.4.6 Einfluss der Wandemissivität auf das Simulationsergebnis

Bei der Wärmestrahlungsmodellierung muss neben dem Absorptionsverhalten der Gase auch die Emissivität der Wände gesetzt werden. Hierzu liegen keine experimentellen Daten vor. Bei den in Abschnitt 7.4.5 durchgeführten Simulationen wurde eine

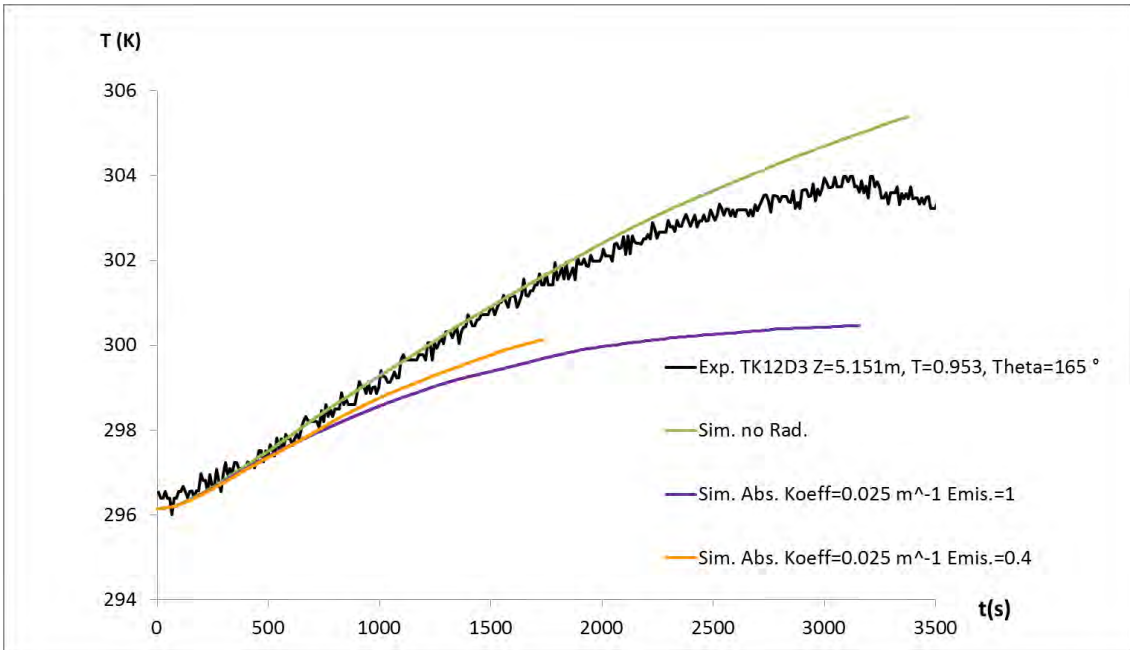
Emissivität von eins gesetzt, was einem schwarzen Strahler entspricht. Im Folgenden wird der Einfluss dieser Größe untersucht. Dazu wurde eine Simulation mit einer deutlich geringeren Emissivität von 0.4 und einer Absorptionskonstante für die Luft von  $0.025 \text{ m}^{-1}$  durchgeführt. Da die Rechnung sehr rechenzeitintensiv war (über 1 Monat auf 24 CPUs) und es nur um eine Abschätzung der Sensitivität auf die Wandemissivität geht, wurde die Simulation nach 1743 s Problemzeit beendet.

Es zeigt sich, dass die Temperatur des Innenzylinders von der Wandemissivität beeinflusst wird (Abb. 7.117, Abb. 7.117). Bei einer geringeren Emissivität wird die Wandtemperatur des Innenzylinders besser vorhergesagt. Die Emissivität hat auch einen moderaten Einfluss auf die Geschwindigkeit des Schichtungsabbaus. Bei einer kleineren Emissivität erfolgte der Schichtungsaufbau etwas langsamer. An den Temperaturmessstellen zeigte sich allerdings kein signifikanter Einfluss auf die Gastemperaturen (Abb. 7.119). Es ist aber gut möglich, dass insbesondere die Gastemperaturen in Wandnähe beeinflusst werden, dieser Effekt aber durch die Position der Messstellen nicht abgebildet wird.

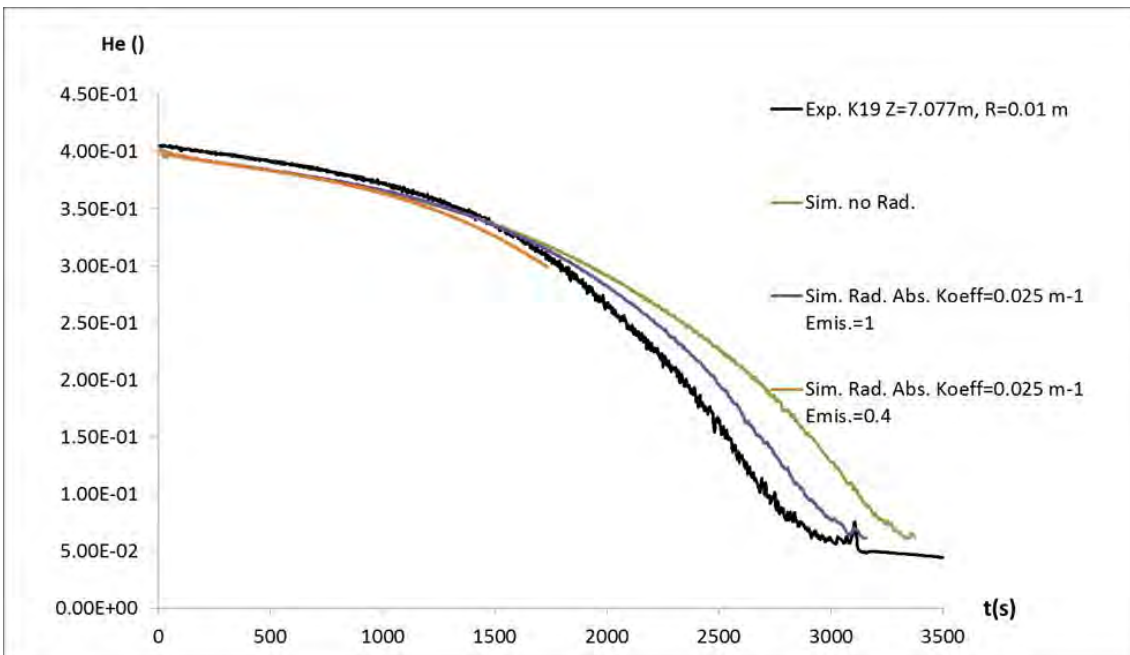


**Abb. 7.116** Temperatur der Innenzylinderwand an der Messstellen TK12D0



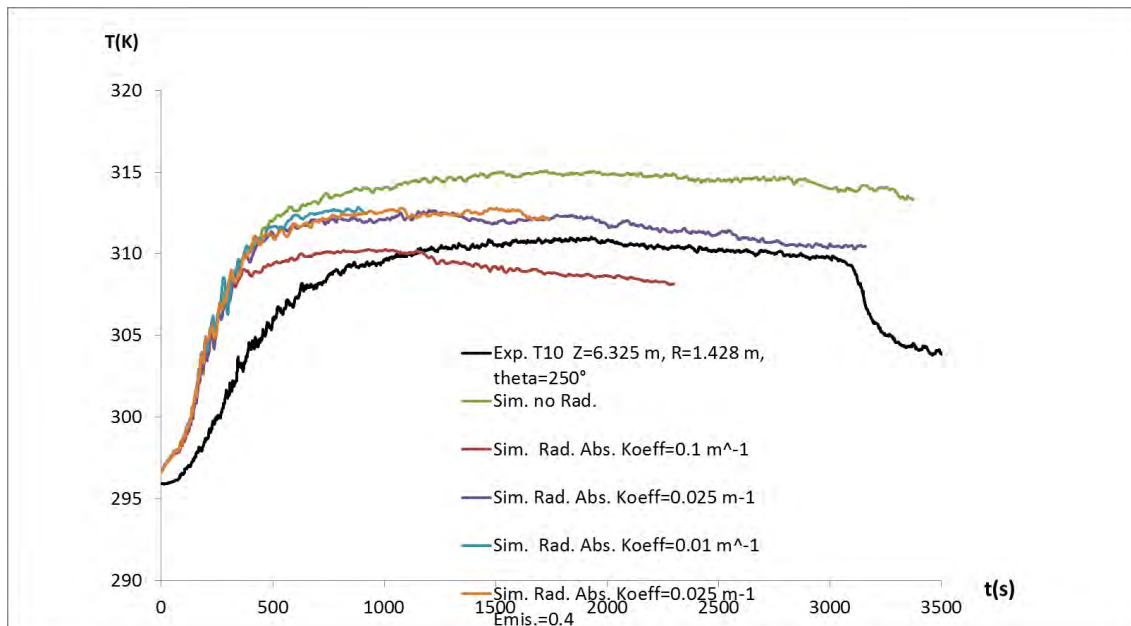


**Abb. 7.117** Temperatur der Innenzylinderwand an der Messstellen TK12D3



**Abb. 7.118** Heliumkonzentration an der Messstelle K19





**Abb. 7.119** Temperatur an der Messstelle T10

#### 7.4.7 Zusammenfassung

Der an der MISTRA-Anlage durchgeführte Versuch HM1-1 wurde erfolgreich mit CFX simuliert. Bei diesem Versuch wurde eine stabile Heliumschichtung erzeugt. Es wurde horizontal heiße Luft eingespeist und der Luftstrahl traf auf den Innenzylinder. Danach erodierte die aufsteigende heiße Luft die Heliumschicht. Da bei diesem Versuch kein Wasserdampf eingespeist wurde, kann in einer ersten Näherung die Wärmestrahlung vernachlässigt werden. Mit dieser Vereinfachung konnte der Abbau der stabilen Heliumschichtung mit einer geringfügigen Überschätzung der Abbauezeit (relativer Fehler ca. 10 %) berechnet werden. Die Temperaturverteilung wurde mit moderaten Abweichungen richtig simuliert. Beim Versuch wurde die Luftfeuchtigkeit nicht gemessen. Ein Dampfgehalt von 1 Vol.-% bis 2 Vol.-% erscheint aber als realistisch. In einer Parameterstudie wurde untersucht, ob auch so kleine Dampfmen gen die Temperaturen und den Schichtungsabbau beeinflussen können. Es zeigte sich, dass auch kleine Dampfmen gen Temperaturen und Schichtungsabbau moderat beeinflussen können. Wie schon bei HP1-2 und HP1-6 führt eine Berücksichtigung der Wärmestrahlung zu einem schnelleren Schichtungsabbau. Bei Annahme einer realistischen Dampfkonzentration konnte eine etwas bessere Übereinstimmung mit dem Experiment (sowohl bei Temperaturen als auch bei der Abbaugeschwindigkeit) erzielt werden. In einer weiteren Parameterstudie wurde der Einfluss der Wandemissivität untersucht. Diese Größe beeinflusst die Wandtemperaturen und kann auch die Gasverteilung beeinflussen, wobei der

Einfluss aber deutlich geringer als der der Absorptionskonstante des Gases ist. In zukünftigen Arbeiten soll der Einfluss dieser Größe aber weiter untersucht werden.

## **7.5 Zusammenfassung zu AP1.6 Schichtungsauflösung**

Die GRS hat durch Simulation von vier Experimenten die Berechnung von Schichtungsauflösungen mit CFX fortgesetzt validiert. Die Experimente unterscheiden sich hinsichtlich der Geometrie, insbesondere hinsichtlich des erodierenden Gasstrahls. Beim OECD-PSI-Benchmark zur Schichtungsauflösung wird die Heliumschichtung durch einen vertikalen Luftstrahl erodiert. Bei dem Versuch HP1\_2 wird die Heliumschichtung durch einen horizontal eingespeisten Dampfstrahl aufgelöst, beim HP1\_6 und HM1-1 erfolgt die Dampfeinspeisung wieder vertikal. Bei den beiden im HYMERES-Projekt durchgeführten Versuchen (HP1\_2 und HP1\_6) trifft der Dampf zuerst auf eine Prallplatte, bevor er die Schichtung erodiert. Bei dem an der MISTRA-Anlage durchgeführten Versuch HM1-1- trifft der horizontale Luftstrahl zuerst auf den Innenzylinder.

Bei den Simulationen wurden die in RS1500 als geeignet identifizierten Modelle und Parameter (SST-Turbulenzmodell, Diffusionskoeffizient nach Fuller, Berücksichtigung der Wärmestrahlung, ...) verwendet und Parametervariationen durchgeführt.

Bei allen Versuchen konnte die Schichtungsauflösung erfolgreich nachgerechnet werden. Beim OECD-PSI-Benchmark konnte die Schichtungsauflösung in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden, bei den Experimenten HP1\_2 und HP1\_6 erfolgt die Schichtungsauflösung etwas schneller als im Experiment. Bei dem Versuch HM1-1 dauert die Schichtungsauflösung in der Simulation etwas länger als im Experiment, wenn die Wärmestrahlung vernachlässigt wird.

Bei den Experimenten mit Dampfeinspeisung wurde die Modellierung der Wärmestrahlung als sensitiver Parameter identifiziert. Nur bei Berücksichtigung der Wärmestrahlung konnte die Temperatur in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden. Bei Vernachlässigung der Wärmestrahlung erfolgte auch die simulierte Schichtungsauflösung signifikant langsamer als im Experiment gemessen. Bei HM1-1 wird zwar kein Wasserdampf eingespeist, es ist aber davon auszugehen, dass aufgrund von Luftfeuchtigkeit eine geringe Dampfkonzentration von 1 Vol.-% – 2 Vol.-% vorliegt. Eine Parameterstudie zeigt, dass auch geringe Dampfkonzentrationen einen moderaten Einfluss auf die Schichtungsauflösung und die Temperaturverteilung haben

können. Auch die Emissivität der Wände kann einen Einfluss haben und sollte in zukünftigen Arbeiten weiter untersucht werden.

Bei den Experimenten HP1\_2 und HP1\_6 wurde die Modellierung des Einlassrohres variiert. Es zeigt sich, dass je nach Vereinfachung bei der Rohrgeometrie (Berücksichtigung der Rohrkrümmung ja/nein, Veränderung der Rohrlänge) ein anderes Geschwindigkeitsfeld am Rohrauslass vorliegt und dass dies auch die Schichtungsauflösung deutlich beeinflusst.

## **8 AP 1.7 – Fortsetzung der Validierung und Weiterentwicklung des H<sub>2</sub>-Verbrennungsmodells**

### **8.1 Einleitung**

Im Rahmen der Arbeiten im Vorhaben RS1500 konnten bereits deutliche Fortschritte bei der Simulation der H<sub>2</sub>-Verbrennung erzielt werden. Es gibt aber auch noch verbleibende Modellschwächen/-unsicherheiten, die einer weiteren Bearbeitung bedürfen. Durch Nachrechnung weiterer Versuche soll die Validierung fortgesetzt werden und es sollen weitere Verbrennungsmodelle getestet werden, bei denen Phänomene, wie der Einfluss von thermo-diffusiven Instabilitäten und turbulentes Quenching, berücksichtigt werden. Um die unterschiedlichen Verbrennungsregimes abzudecken, sollen bei der Validierung sowohl langsame H<sub>2</sub>-Verbrennungen mit einer Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von wenigen m/s (z. B. HD-THAI) als auch schnelle turbulent beschleunigte Verbrennungen mit einer Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von mehreren 100 m/s (z. B. ENACCEF) simuliert werden. DDT und Detonationen benötigen andere Verbrennungsmodelle, da hier der physikalische Prozess der Flammenausbreitung von der Druckausbreitung abhängt. Sie werden in den hier vorgestellten Arbeiten nicht behandelt.

### **8.2 Verwendete Modelle bei der Simulation von H<sub>2</sub>-Verbrennungen**

Bei den hier vorgestellten Simulationen wird die Turbulenz mit dem SST-Modell (einschließlich Production and Dissipation Term, für Buoyancy-Turbulence) simuliert. Die Modellierung der Wärmestrahlung erfolgt mit dem Discrete-Transfer-Modell.

Die Verbrennungsmodellierung in CFX erfolgt mit dem Burning-Velocity-Modell. Bei diesem Modell wird die Zusammensetzung des Gasgemischs durch einen Mischungsbruch beschrieben. Damit kann die Zusammensetzung bei H<sub>2</sub>/Luft-Gemischen eindeutig beschrieben werden. Für den Mischungsbruch und seine Varianz wird jeweils eine Erhaltungsgleichung gelöst. Falls zu Beginn der Verbrennung auch Dampf vorliegt, besteht die Möglichkeit, ein Inertgas-Modell zu nutzen (siehe Abschlussbericht RS1500 /SCH 10/). Der Reaktionsfortschritt wird durch eine Reaktionsfortschrittsvariable  $c$  beschrieben, für die eine Erhaltungsgleichung gelöst wird.

Bei dem Burning-Velocity-Modell wird davon ausgegangen, dass das Gasgemisch entweder komplett unverbrannt oder komplett verbrannt ist. Die Zusammensetzung des unverbrannten Gases wird aus dem Mischungsbruch berechnet, die Zusammensetzung des verbrannten Gases ist in einer Flamelet-Bibliothek gespeichert. In ihr werden auch Radikale wie O, OH, etc. berücksichtigt.

In der Erhaltungsgleichung für c gibt es einen Quellterm  $S_c$ , der die chemische Reaktion berücksichtigt

$$\bar{S}_c = \bar{\rho}_u S_T |\nabla \tilde{c}|$$

$\bar{\rho}_u$  ist die gemittelte Dichte des unverbrannten Gases,  $S_T$  die turbulente Flammgeschwindigkeit.  $S_T$  muss modelliert werden. In der Literatur existieren zahlreiche Modelle für  $S_T$ , in CFX sind die Zimont-, die Peters- und die Müller-Korrelation implementiert. Der Nutzer kann auch eigene Korrelationen als CEL-Expressions implementieren. Ein zentraler Aspekt der Arbeiten ist das Testen und Validieren unterschiedlicher Korrelationen für  $S_T$ . Über die Modellierung von  $S_T$  können Effekte wie der Einfluss von thermodynamischen Flammeninstabilitäten oder turbulentes Quenching berücksichtigt werden.

Im Folgenden werden die in diesem Projekt verwendeten Korrelationen aufgeführt:

- Zimont-Korrelation: /ZIM 98/, /ZIM 99/, /ZIM 01/

$$s_T^{Zim.} = A u'^{\frac{1}{3}} v_{lam}^{\frac{1}{2}} \lambda_u^{-1/4} l_t^{1/4} G$$

$A = 0.6$  Modellkonstante für  $H_2$ -Verbrennung,

$G$ : Term modelliert Reduktion von  $s_T$  aufgrund turbulenter Verlöschung. Sofern nicht anders angegeben ist  $G = 1$  gesetzt.

$u'$ : turbulente Fluktuationen mit

$$u' = \sqrt{\frac{2}{3}k}$$

$k$ : turbulente kinetische Energie

$\lambda_u$ : thermische Diffusivität des unverbrannten Gases

$l_t$ : integrale turbulente Längenskala

$$l_t = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}$$

- Peters-Korrelation /PET 00/

$$s_T^{Peters} = v_{lam}(1 + \sigma_t)$$

$$\sigma_t = -A \frac{l}{l_F} + \sqrt{\left(A \frac{l}{l_F}\right)^2 + B \frac{u'l}{v_{lam}l_F}}$$

$$A = \frac{a_4 b_3^2}{2b_a} \quad B = a_4 b_3^2$$

$$l = a_1 \frac{u'^3}{\varepsilon} \quad l_F = \frac{\left(\frac{\lambda_u}{c_{p,u}}\right)}{\rho_u v_{lam}}$$

$c_{p,u}$ : Wärmekapazität des unverbrannten Gases

$\rho_u$ : Dichte des unverbrannten Gases

Die Konstanten sind dabei standardmäßig wie folgt gesetzt:

$$a_1 = 0.37 \quad a_4 = 0.78 \quad b_1 = 2 \quad b_3 = 1$$

- Dinkelacker-Korrelation /DIN 11/

$$S_T^{Din} = v_{lam} \left( 1 + \frac{0.46}{Le} Re_t^{0.25} \left( \frac{u'}{v_{lam}} \right)^{0.3} \left( \frac{P}{P_0} \right)^{0.2} \right)$$

$$Le: \text{ Lewiszahl } Le = \frac{\left(\frac{\lambda_u}{\rho_u c_{p,u}}\right)}{D_{H_2}}$$

$D_{H_2}$ : Diffusionskonstante  $H_2$

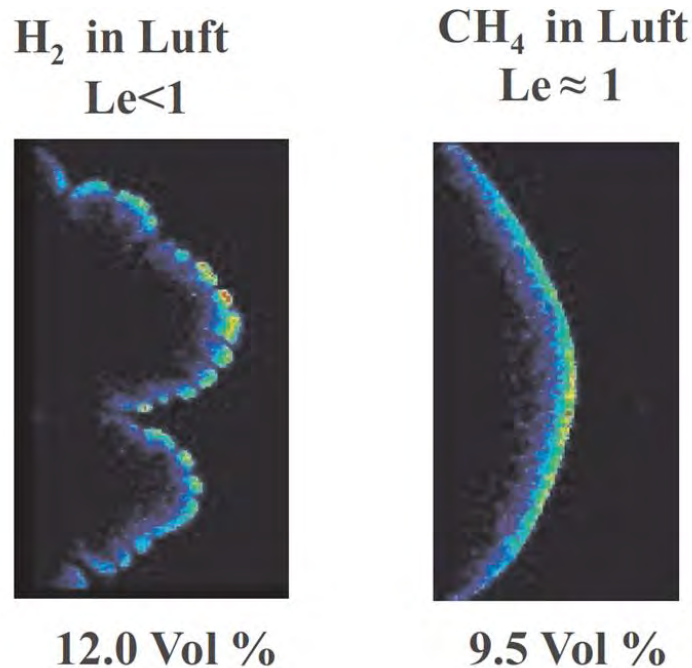
$$Re_t: \text{ turbulente Reynolds Zahl } Re_t = \frac{u'l_t}{\gamma}$$

$\gamma$ : kinematische Viskosität

$$l_t: \text{ integrales turbulentes Längenmaß } l_t = \frac{k^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon}$$

Diese drei Korrelationen stammen aus Veröffentlichungen, die Peters- und die Zimont-Korrelation sind in CFX implementiert und wurden bereits in früheren Untersuchungen /SCH 10/, /SCH 14/ verwendet. Die Dinkelacker-Korrelation wurde als CEL-Expression implementiert. Im Gegensatz zu den beiden anderen Korrelationen wird der Einfluss der Lewiszahl (thermo-diffusive Flammeninstabilität) auf den Verbrennungsverlauf durch den Term  $1/Le$  berücksichtigt.

Aufgrund der hohen Diffusivität von Wasserstoff wird die Lewiszahl für mageres  $H_2$ /Luftgemische kleiner als eins. Das bedeutet, dass der diffusive Stofftransport den Wärmetransport übersteigt, was an konvexen Ausbuchtungen der Flammenfront zu einer lokalen Erhöhung der Wasserstoffkonzentration führt, was wiederum die Brenngeschwindigkeit in mageren Gemischen erhöht. Dieses Phänomen hat zur Folge, dass magere laminare Wasserstoffflammen eine zelluläre Struktur haben, verglichen mit Methan/Luft-Flammen ( $Le \sim 1$ ), die eine glatte, homogene Flammenstruktur besitzen (Abb. 8.1). Dies führt zu einer Vergrößerung der Fläche, auf der die chemische Reaktion stattfindet, was eine Beschleunigung der Verbrennung zur Folge hat. Die meisten Korrelationen wurden für die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen mit  $Le \sim 1$  (z. B. Methan) hergeleitet. Meist wird der Einfluss der Lewiszahl nicht berücksichtigt oder nur grob angenähert (z. B. Empfehlung, bei  $H_2$ /Luft-Verbrennung in Zimont-Korrelation die Konstante von 0.5 auf 0.6 zu erhöhen).



**Abb. 8.1** Laminare Flammenfronten für Gemische mit unterschiedlicher Lewis-Zahl, /JOR 99/

Die Grundidee bei den nun folgenden Korrelationen besteht darin, eine Korrelation zu verwenden, die bereits für  $Le \sim 1$  (z. B. Methan/Luft-Verbrennung) von zahlreichen Nutzern erfolgreich eingesetzt wurde. Durch einen zusätzlichen Term wird der Einfluss von  $Le < 1$  bei  $H_2$ /Luft/(Dampf)-Verbrennung berücksichtigt. Dieses Vorgehen entspricht dem Vorgehen von /SAT 12/. Die Peters-Korrelation wurde dabei als geeignete Korrelation identifiziert. Der Vorteil der Peters-Korrelation gegenüber der Zimont-Korrelation ist, dass bei der Peters-Korrelation im Fall einer laminaren Strömung  $S_T = v_{lam}$  ist, wie dies auch die Theorie besagt; bei der Zimont-Korrelation ist dies bei Implementation der obigen Gleichung nicht gewährleistet.

Es wird davon ausgegangen, dass für  $Le = 1$  die Peters-Korrelation eine gute Beschreibung von  $S_T$  liefert. Deshalb sollen für  $Le = 1$  die Korrelationen in die Peters-Korrelation übergehen. Durch den zusätzlichen Term soll der Einfluss der Lewis-Zahl beschrieben werden. In der Literatur gibt es unterschiedliche Ansätze. Bei Bradly /BRA 92/ geht die Lewis-Zahl mit  $S_T \sim Le^{-0.3}$  ein. In der Veröffentlichung von Driscoll /DRI 08/ wird der Ansatz

$$S_T = v_{lam} \left( 1 + 0.95 Le^{-1} \left( \frac{u' l_t}{v_{lam} l_F} \right)^{0.5} \right)$$

verwendet.

In den Simulationen werden folgende Ansätze getestet:

Peters Le03:  $s_T^{Le03} = v_{lam} (1 + \sigma_t) Le^{-0.3}$

Peters Le03T:  $s_T^{Le03T} = v_{lam} (1 + \sigma_t Le^{-0.3})$

Peters Le03L:  $s_T^{Le03L} = v_{lam} (Le^{-0.3} + \sigma_t)$

Peters Le1:  $s_T^{Le1} = v_{lam} (1 + \sigma_t) Le^{-1}$

Peters Le1T:  $s_T^{Le1T} = v_{lam} (1 + \sigma_t Le^{-1})$

Peters Le1L:  $s_T^{Le1L} = v_{lam} (Le^{-1} + \sigma_t)$



Peters Le03 entspricht dabei dem Ansatz von Bradly; Peters Le1T dem Ansatz von Discroll. Bei Peters Le1 wird eine stärkere Lewiszahlabhängigkeit als bei Bradly untersucht; bei Peters Le03T eine schwächere Lewiszahlabhängigkeit als Discroll.

In Peters Le03L und Peters Le1L wird der Effekt untersucht, wenn unabhängig von der Turbulenz eine Erhöhung der turbulenten Brenngeschwindigkeit durch thermodynamische Flammeninstabilitäten unterstellt wird.

Die laminare Flammengeschwindigkeit  $v_{lam}$  geht als Größe in alle hier getesteten Korrelationen für  $S_T$  ein. Standardmäßig wird  $v_{lam}$  nach der um den Dampfeinfluss erweiterten Korrelation von Ettner  $v_{lam}^{E,H_2O}$  (siehe Abschnitt 8.3) berechnet. Die Zündung wird mit dem Zündmodell von CFX (Spark-Ignition-Modell) berechnet. Standardmäßig wird als Konvergenzkriterium RMS-Residuum  $< 1.0e-4$  verwendet (Standardwert in CFX). Es werden adaptive Zeitschrittweiten verwendet. Die Größe des Zeitschritts ist von der Konvergenz abhängig.

### 8.3 Laminare Flammengeschwindigkeit

Die laminare Flammengeschwindigkeit  $v_{lam}$  ist eine zentrale Größe bei der Berechnung der Verbrennung mit dem Burning-Velocity-Model. Sie geht in die Berechnung der turbulenten Flammengeschwindigkeit ein, der genaue Zusammenhang ist dabei von der verwendeten Korrelation abhängig. Bei der Peters-Korrelation geht  $v_{lam}$  als linearer Faktor in die Berechnung von  $v_{turb}$  ein. Zusätzlich geht  $v_{lam}$  in die Berechnung anderer Größen, wie die der laminaren Flammendicke ein, so dass sich insgesamt eine etwas kompliziertere Abhängigkeit als eine Proportionalität ergibt.

In der Literatur sind viele unterschiedliche Korrelationen für die laminare Flammengeschwindigkeit zu finden. Insbesondere bei mageren  $H_2$ -Gemischen unterschieden sich dabei die Werte für  $v_{lam}$  teilweise deutlich. Ein Grund hierfür ist sicherlich, dass für niedrige  $H_2$ -Konzentrationen nur wenige Messwerte vorliegen; zudem streuen die Messwerte teilweise deutlich, da die Bestimmung der laminaren Flammengeschwindigkeit nicht trivial ist und Effekte wie die Flammenstreckung bei der Auswertung der Daten zu berücksichtigen sind, was bei älteren Versuchsdaten oft nicht oder nur unzureichend erfolgt ist.

Die GRS hat bereits unterschiedliche Korrelationen für  $v_{lam}$  getestet. Bei einer Reihe von Versuchen wurde die Korrelation von Liu MacFarlane verwendet, beim Sarnet-2

Benchmark zur Abhängigkeit der Verbrennung von der Inert-Gas-Konzentration (ENACCEF-Versuche) wurde eine von IRSN bereitgestellte Korrelation für  $v_{lam}$  verwendet /CHA 12/.

Für die Verbrennungssimulation bei containment-typischen Bedingungen muss die Korrelation in der Lage sein, ein großes Spektrum von Bedingungen zu umfassen. Sowohl Temperaturabhängigkeit, als auch die Druckabhängigkeit und der Einfluss von Dampf  $v_{lam}$  müssen berücksichtigt werden. Viele Korrelationen aus der Literatur besitzen einen nur eingeschränkten Gültigkeitsbereich. Insbesondere der Einfluss von Dampf wird häufig nicht berücksichtigt, da in vielen (nicht-nuklearen) Anwendungen und für einen Großteil der Versuche die Verbrennung in Luft stattfindet.

Im Folgenden sollen unterschiedliche Korrelationen miteinander verglichen werden und eine Korrelation für die weiteren Arbeiten ausgewählt werden.

Es werden drei Korrelationen näher untersucht: Eine Approximation von  $v_{lam}$  durch ein Polynom 4. Grades (siehe Dissertation Ettner, TUM /ETT 13/), die im Rahmen des SARNET2 Benchmarks von IRSN erhaltene Korrelation /CHA 12/ und die weit verbreitete Korrelation von Liu-MacFarlane /LIU 83/.

Die Approximation nach Ettner lautet:

$$v_{lam,0}^E = \begin{cases} (-488.9x_{H_2}^4 + 285.0x_{H_2}^3 - 21.92x_{H_2}^2 + 1.351x_{H_2} - 0.040) \frac{m}{s}, & x_{H_2} \leq 0.35 \\ (-160.2x_{H_2}^4 + 377.7x_{H_2}^3 - 348.7x_{H_2}^2 + 140.0x_{H_2} - 17.45) \frac{m}{s}, & x_{H_2} > 0.35 \end{cases}$$

$$v_{lam}^E = v_{lam,0} \left( \frac{T}{T_0} \right)^{\alpha^E} \left( \frac{p}{p_0} \right)^{\beta^E}$$

$$\alpha^E = 1.75$$

$$\beta^E = -0.2$$

$T_0$ ,  $p_0$  sind dabei die Temperatur und der Druck des unverbrannten Gases bei Standardbedingungen ( $T_0 = 298$  K,  $p_0 = 1.013$  bar);  $v_{lam,0}$  die laminare Flammgeschwindigkeit bei Standardbedingungen.  $T$ ,  $p$  und  $v_{lam}$  sind die entsprechenden Größen bei den vorliegenden Werten;  $x_{H_2}$  der Molenbruch von  $H_2$ .

Die von IRSN bereitgestellte Korrelation lautet /CHA 12/:

$$v_{lam}^I = (1,44 \cdot \theta^2 + 1,07 \cdot \theta - 0,29)(1 - x_{inert})^4 \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\alpha^I} \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\beta^I}$$

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

$$\alpha^I = 2,2$$

$$\beta^I = -0,5$$

Die Korrelation für die laminare Flammgeschwindigkeit nach Liu-McFarlane lautet:

$$v_{lam}^L = BT^{\alpha^L} \exp(A_6 x_{H_2O}) \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\beta^L}$$

$$\alpha^L = A_4 + A_5(0,42 - x_{H_2})$$

$$\beta^L = -0,2$$

$$C = A_4 + A_5(0,42 - x_2)$$

Konstanten	$x_{H_2} < 0,42$	$x_{H_2} > 0,42$
<b>A<sub>1</sub></b>	$4,644 \times 10^{-4}$	$4,644 \times 10^{-4}$
<b>A<sub>2</sub></b>	$-2,119 \times 10^{-3}$	$9,898 \times 10^{-4}$
<b>A<sub>3</sub></b>	$2,344 \times 10^{-3}$	$-1,264 \times 10^{-3}$
<b>A<sub>4</sub></b>	1,571	1,571
<b>A<sub>5</sub></b>	$3,839 \times 10^{-1}$	$-2,476 \times 10^{-1}$
<b>A<sub>6</sub></b>	-2,21	-2,24

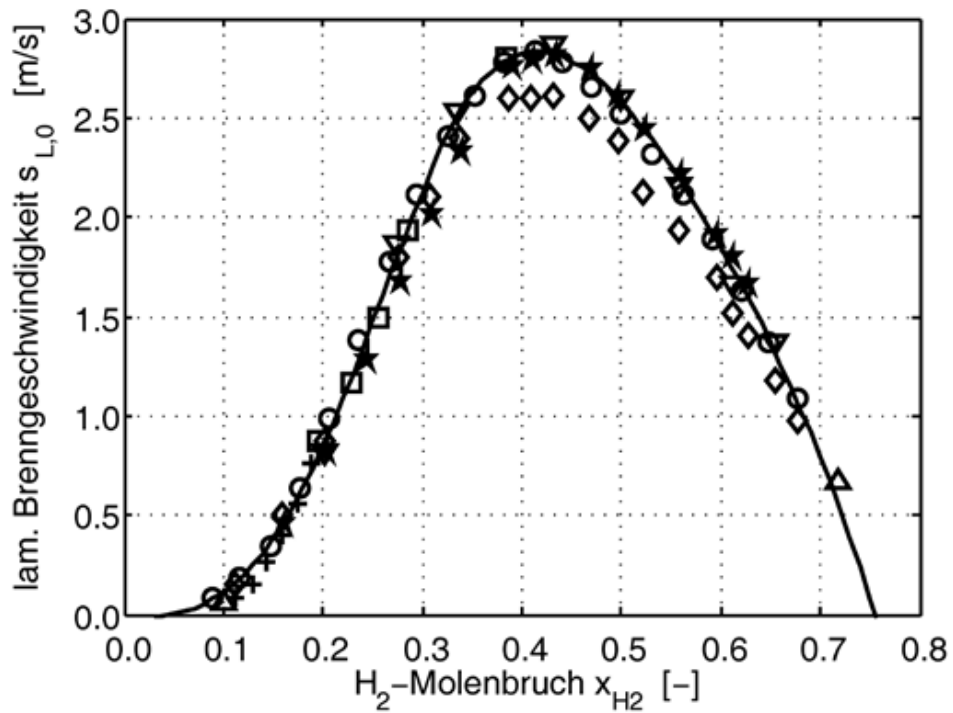
### 8.3.1 Laminare Flammgeschwindigkeit bei H<sub>2</sub>/Luft Gemischen bei Standardbedingungen

Die Approximation der laminaren Flammgeschwindigkeit durch ein Polynom 4. Grades nach Ettner stimmt für alle H<sub>2</sub>-Luftgemische gut mit experimentellen Daten überein (Abb. 8.2). Die Zusammenstellung der experimentellen Daten erfolgt nach Konnov

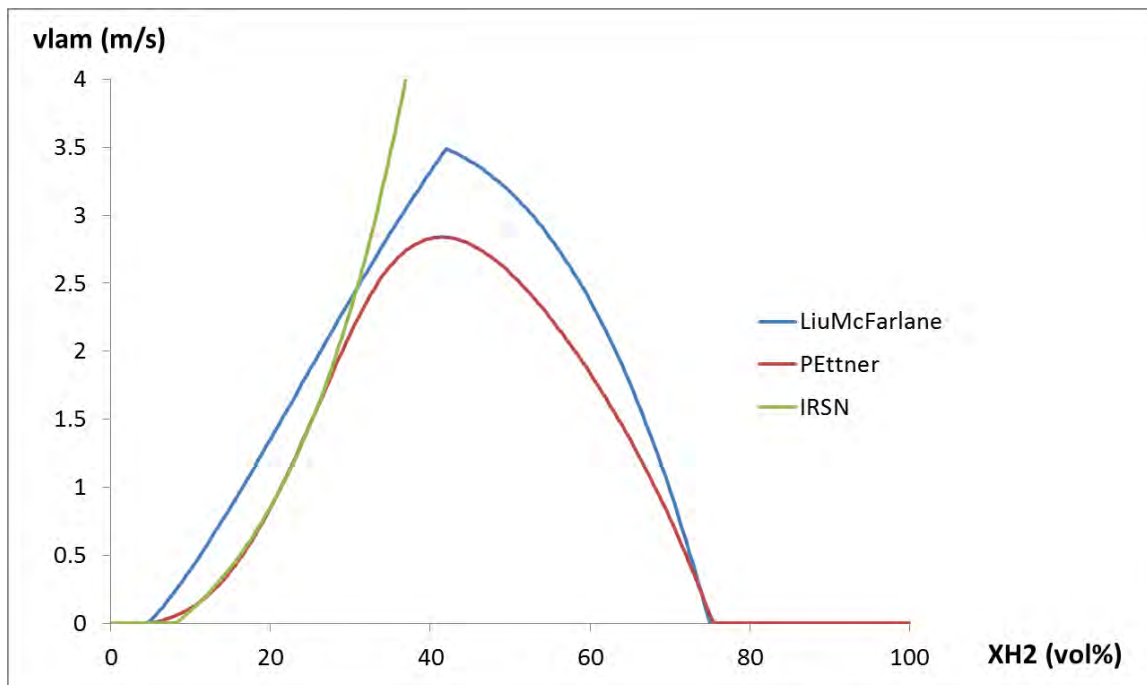
/KON 08/. Bei den experimentellen Daten ist zu berücksichtigen, dass ältere Experimente meist nicht um den Effekt der Flammenstreckung bereinigt wurden. Dadurch ergeben sich teils deutliche Abweichungen. Bei allen hier aufgetragenen Experimenten wurde dieser Effekt berücksichtigt. Für den Bereich  $10 \text{ Vol.-%} < x_{\text{H}_2} < 28 \text{ Vol.-%}$  stimmt die mit der IRSN-Korrelation berechnete laminare Flammengeschwindigkeit sehr gut mit der nach Ettner berechneten überein (Abb. 8.3, Abb. 8.4). Für  $\text{H}_2$ -Konzentrationen unterhalb von  $10 \text{ Vol.-%}$  liefert die IRSN-Korrelation deutlich niedrigere laminare Flammengeschwindigkeiten. Die nach Ettner berechnete laminare Flammengeschwindigkeit liefert ab ca.  $5 \text{ Vol.-%}$  Werte größer als 0, bei der IRSN-Korrelation ist dies erst ab ca.  $8 \text{ Vol.-%}$  der Fall. Unterhalb von  $9 \text{ Vol.-%}$  liegen keine experimentellen Messwerte vor, so dass kein quantitativer Vergleich möglich ist. Allerdings ist aus zahlreichen Versuchen (z. B. THAI HD-1R  $x_{\text{H}_2\text{ini}} = 6 \text{ Vol.-%}$ ) bekannt, dass auch unterhalb von  $8 \text{ Vol.-%}$  noch eine Verbrennung stattfindet (allerdings richtungsabhängig und meist nicht mehr vollständig). Die IRSN-Korrelation sagt für  $\text{H}_2$ -Konzentrationen unter  $8 \text{ Vol.-%}$  eine laminare Flammengeschwindigkeit von  $0 \text{ m/s}$  voraus (Abb. 8.4), was dazu führt, dass auch die turbulente Flammengeschwindigkeit im Quellterm der Erhaltungsgleichung 0 wird. Eine weitere chemische Reaktion wird damit unterbunden, was im Widerspruch zu den Experimenten (z. B. Thai HD-1R) steht.

Für  $x_{\text{H}_2} > 28 \text{ Vol.-%}$  nimmt die laminare Flammengeschwindigkeit bei der IRSN-Korrelation unphysikalisch stark zu, bei  $x_{\text{H}_2} = 100 \text{ Vol.-%}$  ist  $v_{\text{lam}} = \infty$ , da  $x_{\text{O}_2} = 0$  ist (was natürlich unphysikalisch ist, da bei Sauerstoffarmut  $x_{\text{H}_2} > 75 \text{ Vol.-%} - 80 \text{ Vol.-%}$  auch keine Verbrennung mehr stattfinden kann). Die IRSN-Korrelation wurde von IRSN im Rahmen eines SARNET2 Benchmarks zur Verfügung gestellt. Für die Benchmarkbedingungen  $x_{\text{H}_2} = 13 \text{ Vol.-%}$   $0 \text{ Vol.-%} \leq x_{\text{H}_2\text{O}} \leq 30 \text{ Vol.-%}$  ist die Korrelation validiert und liefert sinnvolle Werte. Eine genaue Definition des Gültigkeitsbereichs für die Korrelation liegt der GRS allerdings nicht vor, ein Vergleich mit Messdaten und anderen Korrelationen legt einen Gültigkeitsbereich bis ca.  $28 \text{ Vol.-% H}_2$  nahe.

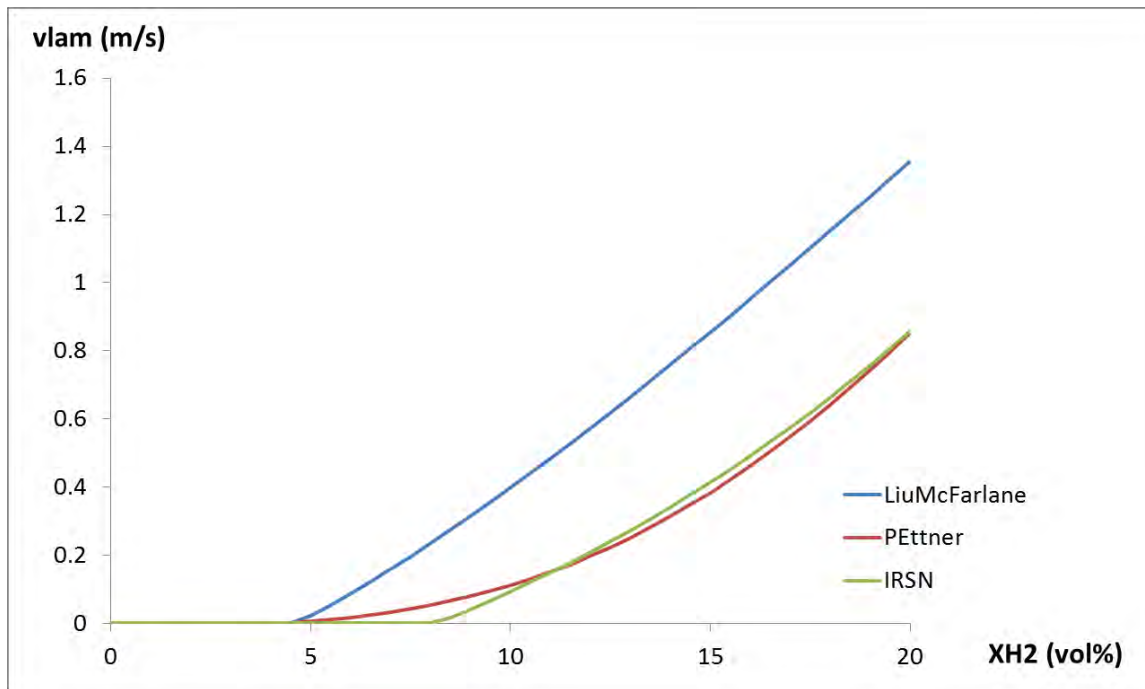
Die Liu-McFarlane-Korrelation liefert für alle  $\text{H}_2$ -Konzentrationen physikalische Werte, allerdings sind die von dieser Korrelation bereitgestellten Werte deutlich höher als die Messwerte. Insbesondere bei niedrigen  $\text{H}_2$ -Konzentrationen ist die relative Abweichung hoch. Die Ettner-Korrelation zeigt dagegen eine deutlich bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Werten (Abb. 8.2; Abb. 8.4).



**Abb. 8.2** Durchgezogene Linie: Approximation von  $v_{lam}$  durch Polynom nach Ettner;  
 Symbole: experimentelle Daten (Zusammenstellung nach Konnov  
 /KON 08/, /ETT 13/)



**Abb. 8.3** Laminare Flammgeschwindigkeit bei Verbrennung von  $H_2$ -Luft unter  
 Standardbedingungen bei unterschiedlichen Korrelationen



**Abb. 8.4** Laminare Flammengeschwindigkeit bei Verbrennung von H<sub>2</sub>-Luft unter Standardbedingungen bei unterschiedlichen Korrelationen, Bereich: 0 Vol.-% < x<sub>H2</sub> < 20 Vol.-%

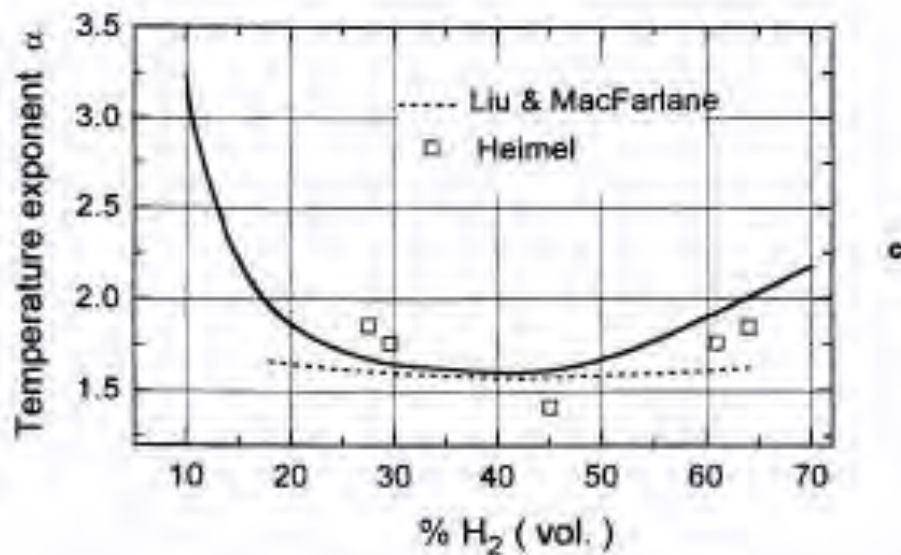
### 8.3.2 Temperatur und Druckabhängigkeit der laminaren Flammgeschwindigkeit

Die Temperaturabhängigkeit wird üblicherweise durch einen Faktor  $T^\alpha$  beschrieben. Bei der Ettner-Korrelation wird die Abhängigkeit mit  $\alpha^E = 1.75$  beschrieben. Die IRSN-Korrelation geht von  $\alpha^I = 2.2$  aus. Bei Liu-McFarlane ist  $\alpha$  eine Funktion der H<sub>2</sub>-Konzentration. Mit  $1.57 < \alpha^L < 1.74$ . In der Literatur sind auch noch andere Korrelationen verfügbar z. B. /IJ 86/, /VER 10/. Bei ihnen liegt allerdings der Validierungsbereich nicht bei niedrigen H<sub>2</sub>-Konzentrationen oder der Temperaturbereich von  $T_u$  deckt nicht den gesamten benötigten Bereich ab. Sie werden deshalb hier nicht weiter diskutiert.

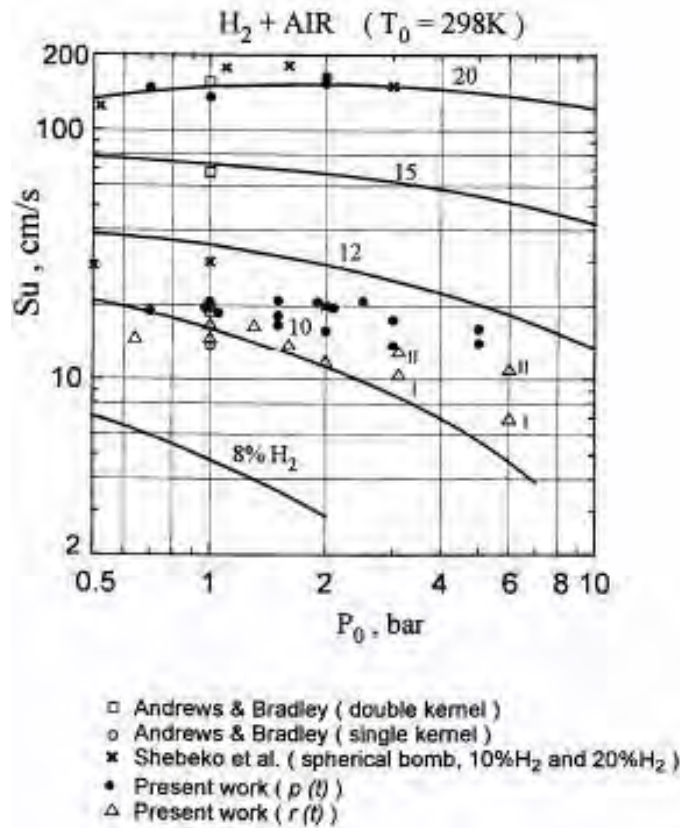
Abb. 8.5 zeigt, dass für H<sub>2</sub>-Konzentrationen von 30 Vol.-% bis 50 Vol.-% mit einem  $\alpha$  von 1.4 bis 1.55 zu rechnen ist. Hier liefert Liu-McFarlane eine relativ gute Übereinstimmung mit den Messdaten. Für niedrige H<sub>2</sub>-Konzentrationen sind zwar kaum Messdaten verfügbar, aber es ist bei mageren H<sub>2</sub>/Luft-Gemischen mit einem deutlichen Anstieg von  $\alpha$  zu rechnen. Dieser Effekt wird von Liu-McFarlane unterschätzt. Für diesen Bereich liefern die Konstanten von Ettner und IRSN bessere Ergebnisse.

Bei dem Druckexponenten  $\beta$  ist der Zusammenhang noch komplexer (Abb. 8.6 und Abb. 8.7). Keiner der beiden verwendeten Werte (-0.2 bzw. -0.5) kann den Zusammenhang zwischen  $v_{lam}$  und  $p_u$  korrekt beschreiben. Für trockene Bedingungen wird  $\beta = -0.2$  eine etwas bessere Übereinstimmung erzielen, für hohe Dampfgehalte  $\beta = -0.5$ .

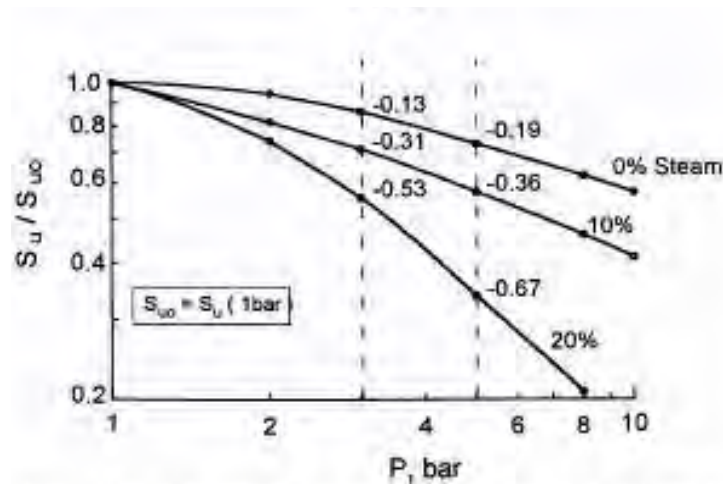
Für die weiteren Arbeiten wird standardmäßig  $\alpha = 1.75$  und  $\beta = -0.2$  verwendet. Im Gegensatz zu  $v_{lam}$  bei Standardbedingungen ist aber bei erhöhtem  $T_u$  bzw.  $p_u$  mit deutlichen Abweichungen gegenüber dem Experiment bei der Berechnung der laminaren Flammgeschwindigkeit zu rechnen.



**Abb. 8.5** Temperaturexponent- $\alpha$ -Vergleich zwischen theoretischen und experimentellen Daten /BRE 99/



**Abb. 8.6** Abhängigkeit der laminaren Flammgeschwindigkeit vom initialen Druck /BRE 99/



**Abb. 8.7** Abhängigkeit der laminaren Flammgeschwindigkeit vom initialen Druck bei einem Äquivalenzverhältnis von 0.39 und  $T_u = 393 K$  /BRE 99/



### 8.3.3 Anhängigkeit der laminaren Flammgeschwindigkeit vom Dampfgehalt

Die Ettner-Korrelation wurde für die H<sub>2</sub>/Luftverbrennung entwickelt, deshalb wird bei dieser Korrelation der Einfluss von Dampf nicht berücksichtigt. Nach Liu-MacFarlane wird der Dampfeinfluss durch den Faktor  $\exp(A_6 \cdot x_{H_2O})$  berücksichtigt. Diese Abhängigkeit kann mit der Ettner-Korrelation gekoppelt werden:

$$v_{lam}^{E,Liu} = v_{lam,0} \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\alpha^E} \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\beta^E} \exp(A_6 x_{H_2O})$$

In Abb. 8.8 – Abb. 8.11 ist die resultierende Flammgeschwindigkeit für 10 Vol.-% Dampfanteil und 50 Vol.-% Dampfanteil aufgezeichnet (rote Linie). Um physikalische Werte zu betrachten, wird  $T_u = 398$  K und  $p_u = 1$  bar gewählt.

Für  $x_{H_2} < 25$  Vol.-% stimmt der Verlauf gut mit den Werten überein, die die IRSN-Korrelation liefert. Dass die Werte für  $v_{lam}^{E,L}$  geringfügig unter denen von  $v_{lam}^{IRSN}$  liegen, liegt im Wesentlichen an den unterschiedlichen Temperaturexponenten ( $\alpha^I = 2.2$  und  $\alpha^E = 1.75$ ). Die Schwäche dieses Ansatzes zeigt sich bei gleichzeitig hohen Dampfkonzentrationen und Wasserstoffkonzentrationen. Bei Vorhandensein von initialem Dampf verschiebt sich die H<sub>2</sub>-Konzentration, bei der Stöchiometrie vorliegt, zu niedrigeren Werten, ebenso der Punkt an dem kein Sauerstoff in der Mischung vorhanden ist. Dies wird von dem Faktor in der Liu-MacFarlane-Korrelation nicht berücksichtigt. Deshalb wird bei  $x_{H_2O} = 50$  Vol.-% und  $x_{H_2} = 50$  Vol.-% sowohl von der Liu-MacFarlane-Korrelation als auch von der mit diesem Faktor erweiterten Ettner-Korrelation  $v_{lam} > 1$  m/s vorhergesagt, obwohl kein Sauerstoff in der Mischung vorliegt. Der mutmaßliche Grund für diese Modellschwäche ist, dass Liu-MacFarlane nur Dampfkonzentrationen bis 12.5 Vol.-% untersucht hat /LIU 83/ (bei so niedrigen Dampfkonzentrationen fällt dieser Effekt nicht stark ins Gewicht (siehe Abb. 8.8  $x_{H_2O} = 10$  Vol.-%)).

Bei der IRSN-Korrelation ist der Einfluss komplexer, da  $x_{H_2O} > 0$  auch in die Berechnung des Äquivalenzverhältnisses  $\theta$  eingeht. Es ist deshalb schwierig, diesen Zusammenhang mit der Ettner-Korrelation zu koppeln. Deshalb wird dies nicht weiter verfolgt.

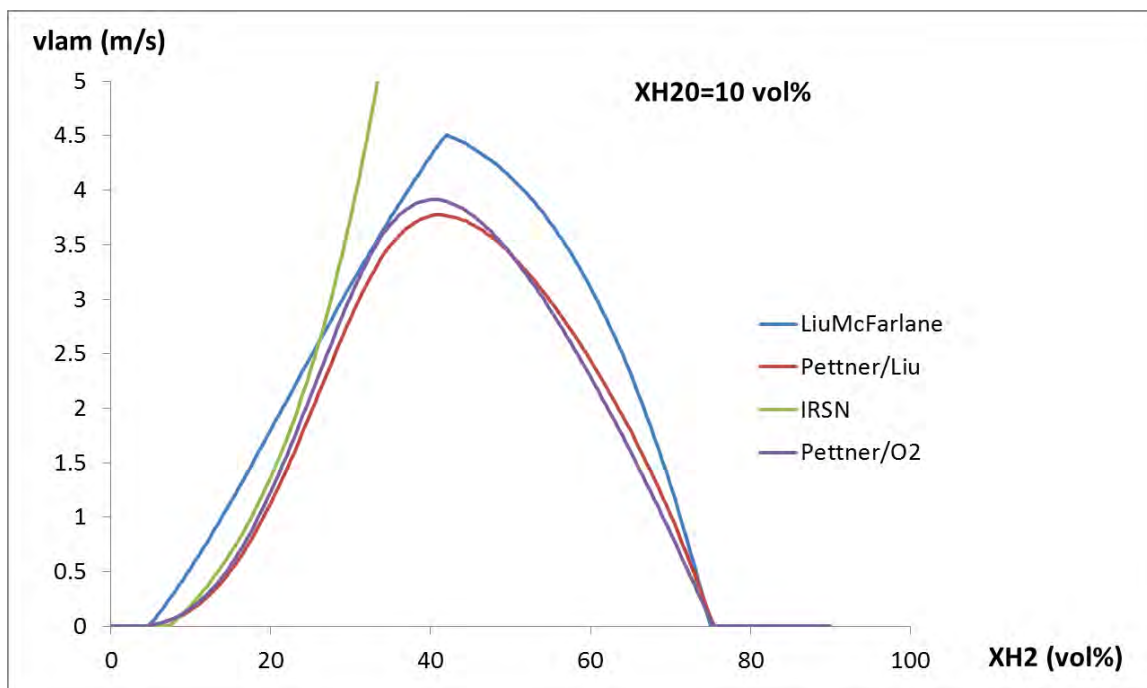
Um diese Schwäche des Ansatzes von Liu-MacFarlane zu vermeiden, wurde ein anderer Faktor getestet, der den Dampfeinfluss berücksichtigen soll:

$$f_{H_2O} = \frac{x_{Luft}}{x_{Luft}^{trocken}} = \frac{1 - x_{H_2} - x_{H_2O}}{1 - x_{H_2}}$$

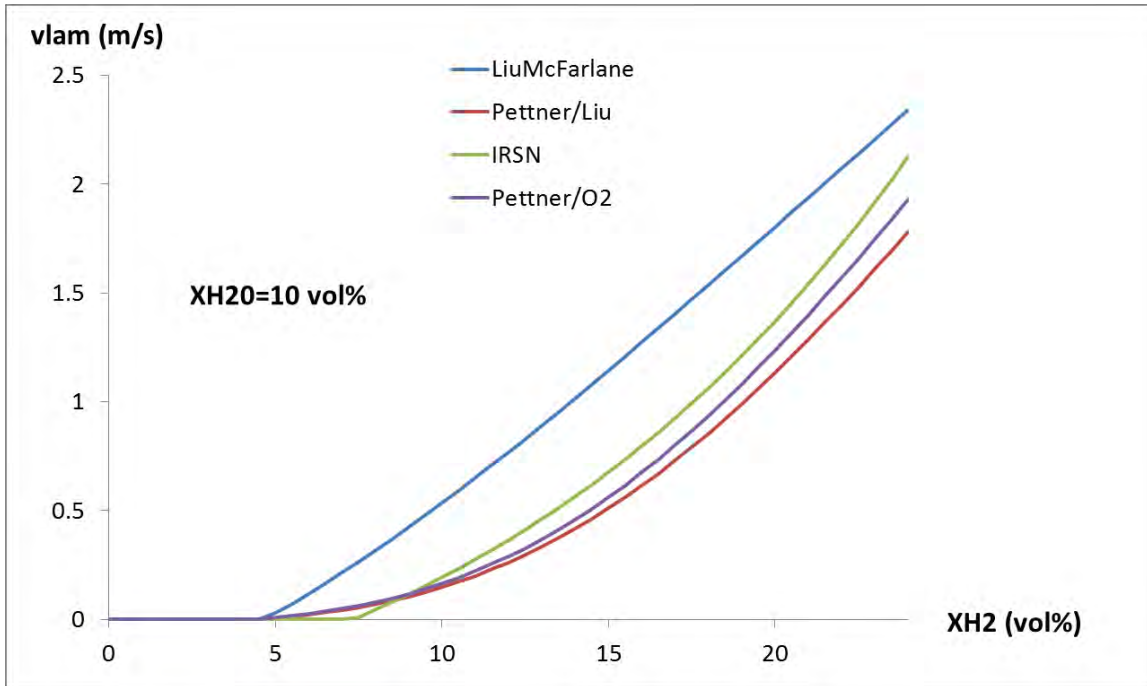
$$v_{lam}^{E,H_2O} = v_{lam,0}^E \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\alpha^E} \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\beta^E} f_{H_2O}$$

Dieser Ansatz ist in Abb. 8.8 – Abb. 8.11 als lila Linie eingezeichnet. Es zeigt sich, dass für niedrige H<sub>2</sub>-Konzentrationen eine gute Übereinstimmung mit der IRSN-Korrelation und auch  $v_{lam}^{E,Liu}$  erzielt wird. Bei Vorhandensein von initialem Dampf verschiebt sich das Maximum zu niedrigeren H<sub>2</sub>-Konzentrationen und es wird korrekt vorhergesagt, dass bei  $x_{H_2O} = x_{H_2} = 50$  Vol.-%  $v_{lam} = 0$  m/s ist. Auch wenn es sich bei  $f_{H_2O}$  nicht unbedingt um die bestmögliche Beschreibung des Dampfeinflusses handelt, so liefert dieser Term eine hinreichend genaue Beschreibung des Zusammenhangs bei Berücksichtigung der großen Unsicherheiten aufgrund der experimentellen Datenlage.

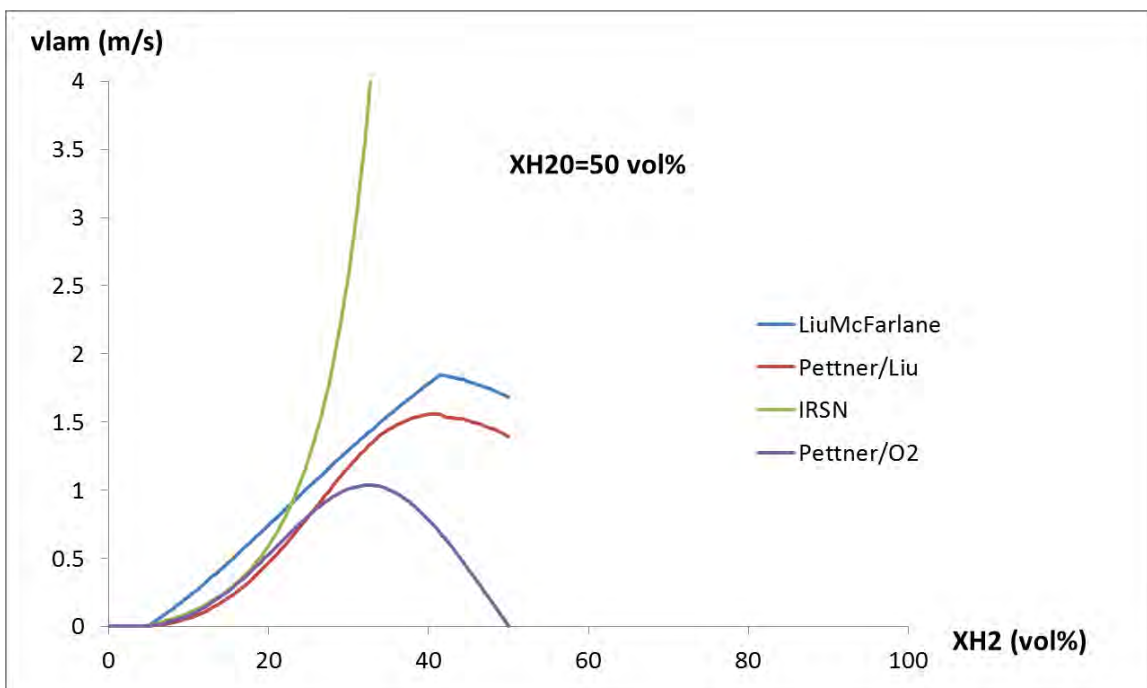
Für die weiteren Arbeiten wird standardmäßig für H<sub>2</sub>/Dampf/Luft-Gemische die laminare Flammgeschwindigkeit nach  $v_{lam}^{E,H_2O}$  berechnet.



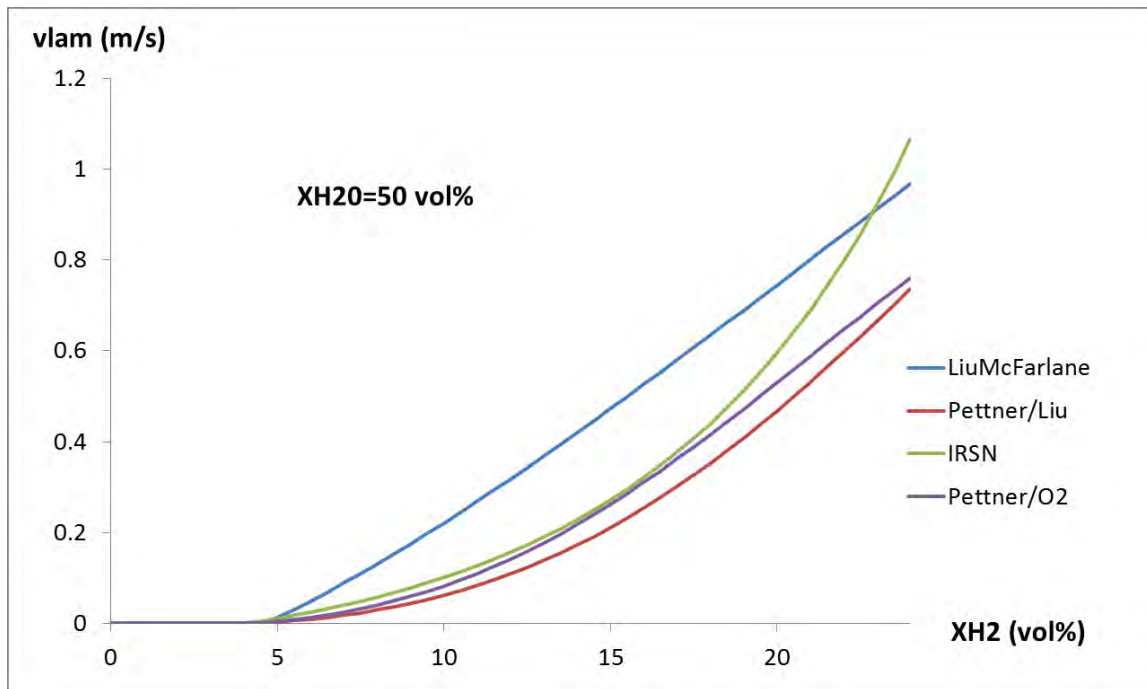
**Abb. 8.8** Laminare Flammgeschwindigkeit bei Verbrennung von H<sub>2</sub>-Dampf-Luft bei  $T_u = 398$  K  $p_u = 1$  bar und  $x_{H_2O} = 0.1$  bei unterschiedlichen Korrelationen



**Abb. 8.9** Laminare Flammgeschwindigkeit bei Verbrennung von H<sub>2</sub>-Dampf-Luft bei  $T_u = 398 \text{ K}$   $p_u = 1 \text{ bar}$  und  $x_{\text{H}_2\text{O}} = 0.1$  bei unterschiedlichen Korrelationen, Bereich:  $0 \text{ Vol.-%} < x_{\text{H}_2} < 30 \text{ Vol.-%}$



**Abb. 8.10** Laminare Flammgeschwindigkeit bei Verbrennung von H<sub>2</sub>-Dampf-Luft bei  $T_u = 398 \text{ K}$   $p_u = 1 \text{ bar}$  und  $x_{\text{H}_2\text{O}} = 0.5$  bei unterschiedlichen Korrelationen



**Abb. 8.11** Laminare Flammgeschwindigkeit bei Verbrennung von H<sub>2</sub>-Dampf-Luft bei  $T_u = 398 \text{ K}$   $p_u = 1 \text{ bar}$  und  $x_{\text{H}_2\text{O}} = 0.5$  bei unterschiedlichen Korrelationen, Bereich:  $0 \text{ Vol.-%} < x_{\text{H}_2} < 30 \text{ Vol.-%}$

## 8.4 THAI HD-2R/HD-12 Experimente

### 8.4.1 Beschreibung des Experiments

Die Versuche HD-2R und HD-12 haben nahezu identische Start- und Randbedingungen. Ein Vergleich der Versuchsergebnisse zeigt, inwieweit eine Reproduzierbarkeit der Daten vorliegt. Wie bei den anderen Verbrennungsversuchen der HD-Serie, wurden aus dem THAI-Behälter die Einbauten (Innenzylinder, Kondensatplatten) entfernt (Abb. 8.12). Es liegen also keine größeren Hindernisse vor, die Turbulenz erzeugen könnten. Bei beiden Versuchen HD-2R und HD-12 erfolgt die Verbrennung des Wasserstoffs in Luft. Bei HD-2R ist die initiale H<sub>2</sub>-Konzentration homogen 7.98 Vol.-%, bei HD-12 8.09 Vol.-%. Der Anfangsdruck beträgt 1.484 bar bzw. 1.492 bar. Die Temperatur im Behälter ist in beiden Versuchen 18 °C. Die Zündung erfolgt im unteren Bereich des Behälters (0.5 m mittig). Die Einzelheiten zum Zündvorgang sind nicht bekannt (exakter Zeitpunkt der Zündung, zugefügte Energiemenge). Es wird davon ausgegangen, dass die zugefügte Energiemenge klein ist und dass der Verbrennungsvorgang nur in der Anfangsphase signifikant von Einzelheiten der Zündung abhängt.

Eine Abweichung Simulation/Experiment bei den absoluten Zeitpunkten der Flammenankunft an den einzelnen Messstellen ist deshalb zu erwarten. Eine Verschiebung der Kurven Experiment/Simulationen um eine Zeit  $dt_0$  ist deshalb zum besseren Vergleich der Daten meist sinnvoll. Dies gilt auch für die meisten anderen Verbrennungsversuche.

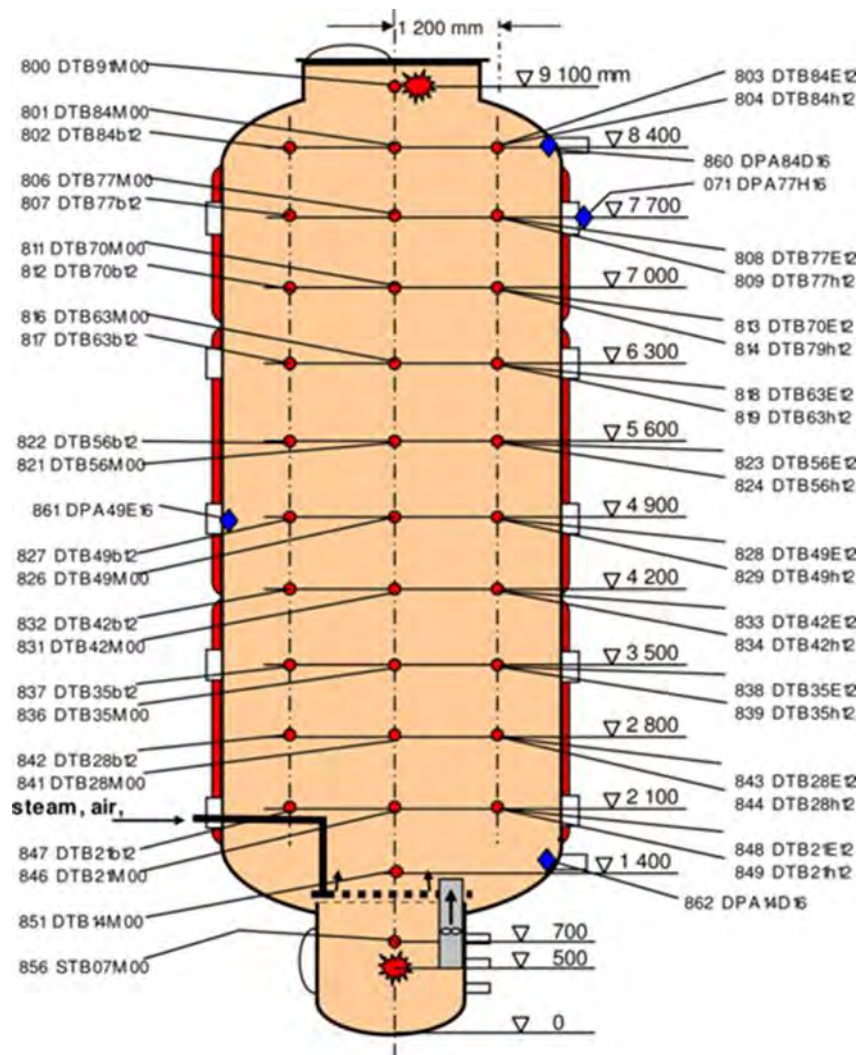
Bei beiden Versuchen unterscheidet sich der Druck an den einzelnen Messstellen nur geringfügig voneinander (Abb. 8.13). Der Druckverlauf bei HD-2R und HD-12 ist sehr ähnlich, allerdings ist das Druckmaximum bei HD-2R geringfügig höher. Dieser Unterschied ergibt sich aus dem etwas geringeren Anfangsdrucks und der etwas niedrigeren  $H_2$ -Anfangskonzentration bei HD2R. In beiden Experimenten lag das Druckmaximum etwa 0.5 bar unterhalb des AICC-Drucks. Da laut Experimentatoren eine vollständige Verbrennung von  $H_2$  stattgefunden hat, ist der niedrigere Maximaldruck auf Wärmeverluste zurückzuführen. Es ist allerdings unklar, wie genau der Druck gemessen wurde. Bei neueren Untersuchungen an der ENACCEF-Versuchsanlage hat sich gezeigt, dass selbst bei Abschirmung der Drucksensoren der Temperaturanstieg und -abfall, der mit der Verbrennung einhergeht, zu einer deutlichen Verfälschung des Druckverlaufs und des gemessenen Maximaldrucks führen kann [GRO 17]. Inwieweit dies auch für die hier verwendeten Drucksensoren und Abschirmungen gilt, ist nicht untersucht worden.

Zusätzlich zum Druck wurde auf unterschiedlichen Höhen in der Behältermitte und auf drei seitlichen Positionen die Temperatur gemessen (Abb. 8.12). Die Messdaten zeigen einen relativ langsamen Temperaturanstieg über mehrere Sekunden. Grund hierfür ist die thermische Trägheit des Messensors. Deshalb ist ein direkter Vergleich der gemessenen mit den simulierten Temperaturen nicht möglich. Der Beginn des Temperaturanstiegs korrespondiert mit der Ankunft der Flammenfront. Diese Flammenankunftszeiten können für einen Vergleich mit der Simulation herangezogen werden. Um Unterschiede beim Ablauf der Verbrennung besser erkennen zu können, wird aus den Flammenankunftszeiten entlang der Mittelachse eine Flammenausbreitungsgeschwindigkeit berechnet. Diese Größe wird in den folgenden Arbeiten zum Vergleich genutzt.

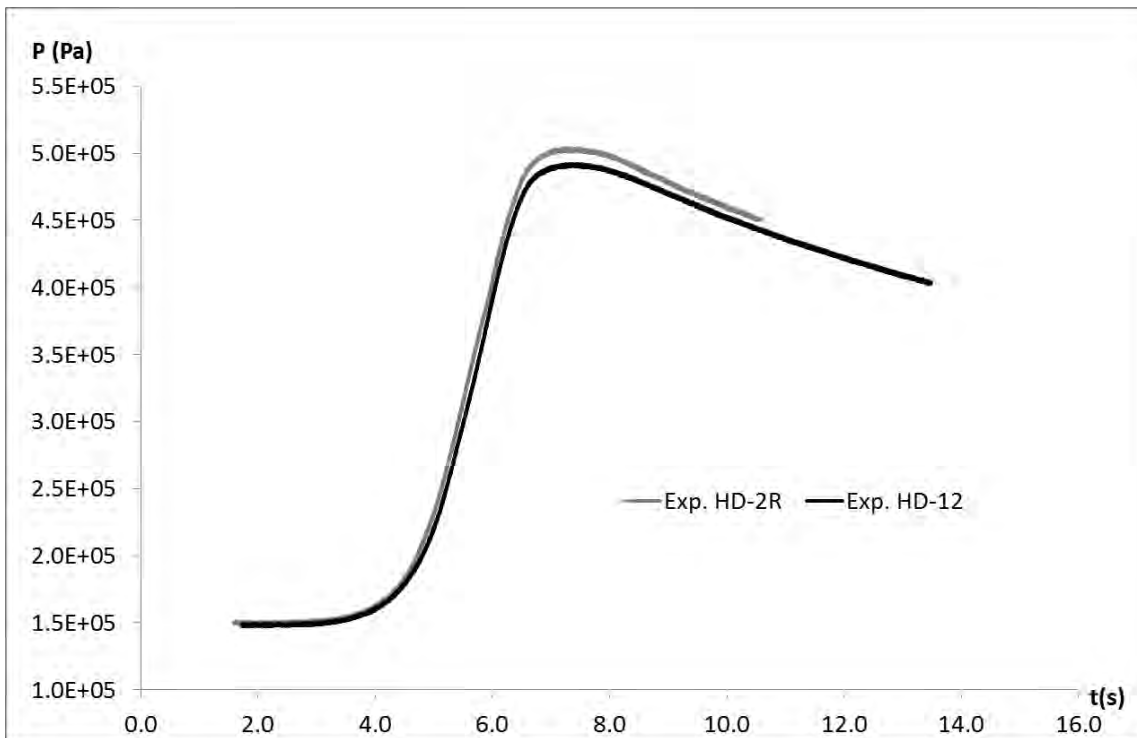
Der Temperaturverlauf an den mittleren Messstellen ist bei den beiden Versuchen sehr ähnlich (Abb. 8.16, rote Linien). Aus den daraus berechneten Flammenankunftszeiten ergibt sich für die Flammengeschwindigkeit entlang der Behälterachse der in Abb. 8.14 dargestellte Verlauf. Bei beiden Experimenten ergibt sich ein ähnliches Ergebnis. Allerdings schwanken die Werte für die einzelnen Messpunkte. Es kann also auch bei ei-

nem Vergleich mit der Simulation nicht erwartet werden, dass der Verlauf mit den einzelnen Schwankungen exakt wiedergegeben wird, sondern es ist für eine gute Übereinstimmung ausreichend, wenn der Trend und die mittlere Ausbreitungsgeschwindigkeit übereinstimmen.

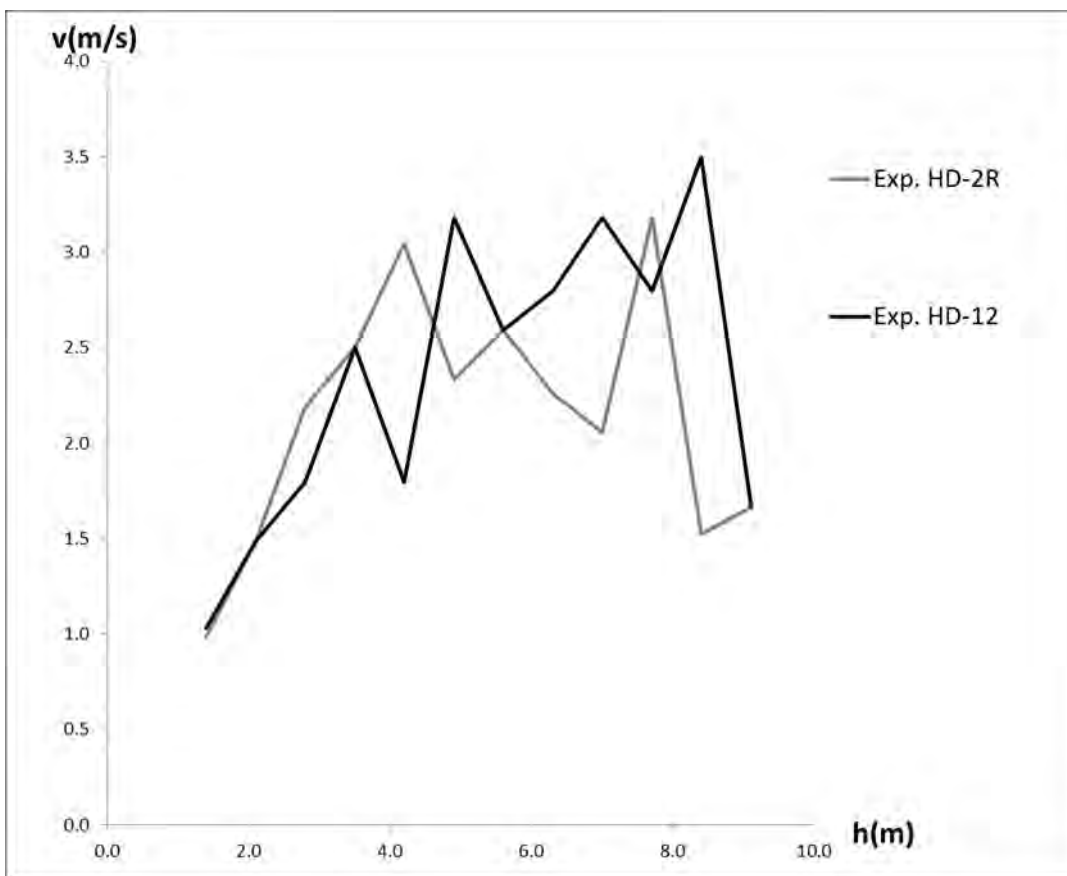
Obwohl laut Versuchsspezifikation achsensymmetrische Bedingungen vorliegen, zeigt sich bei beiden Versuchen eine deutliche Asymmetrie bei den Flammenfronten (siehe Abb. 8.17). Der Temperaturverlauf an den seitlichen Messstellen (selbe Höhe und selber Radius) ist stark unterschiedlich (grüne, blaue, gelbe Linien Abb. 8.16) und der Verlauf ist bei HR-12 und HD2-R qualitativ anders. Daraus kann geschlossen werden, dass die Asymmetrie nicht auf kleine Einbauten/Messinstrumentierung zurückzuführen ist, da sonst in beiden Experimenten ähnliche Verläufe zu erwarten wären. Es handelt sich bei den Abweichungen um ein quasi stochastisches Verhalten. Deshalb ist ein Vergleich der Flammenankunftszeiten an den seitlichen Messstellen quantitativ wenig erfolgversprechend.



**Abb. 8.12** Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus bei den THAI-HD-Versuchen. Die roten Punkte zeigen die Positionen der Temperaturmessstellen, die blauen Rauten die Position der Druckmessungen /KAN 08/

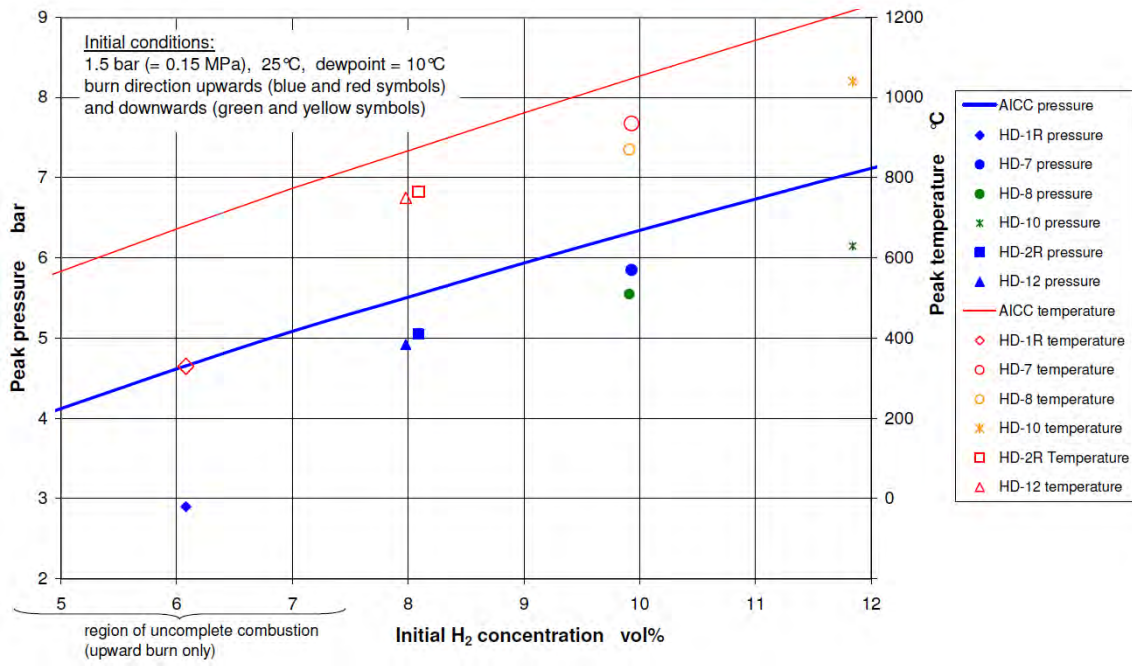


**Abb. 8.13** Über die Messstellen gemittelter Druck bei HD-2R und HD-12

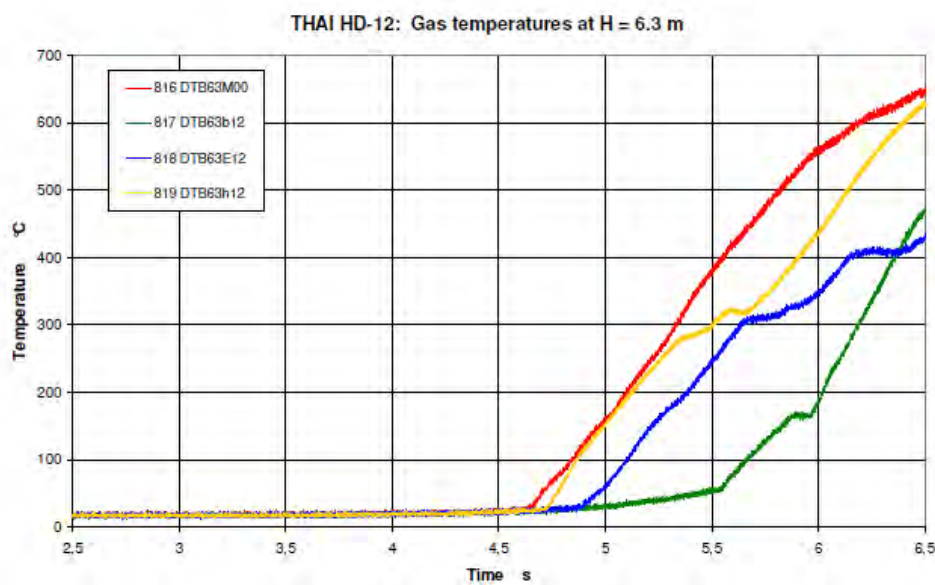
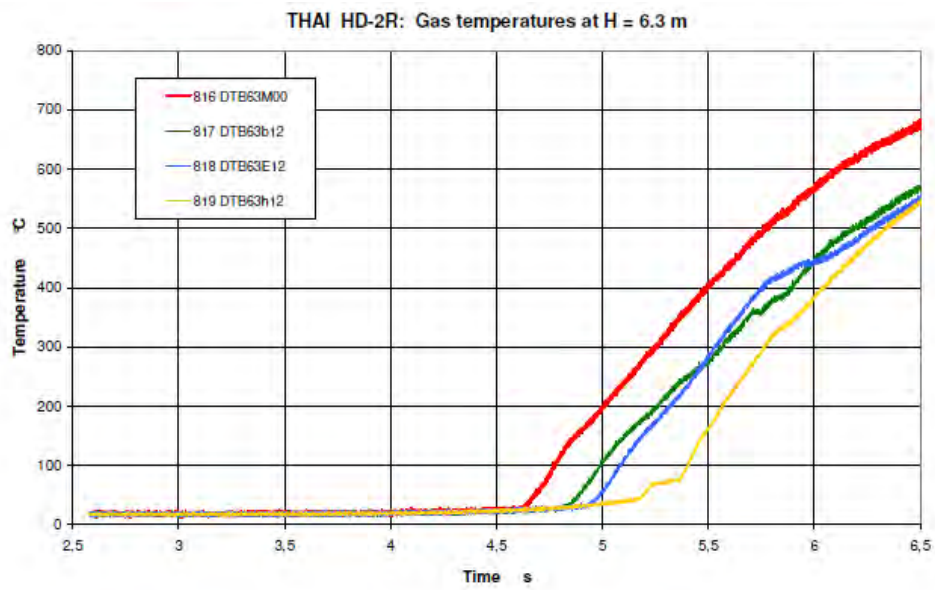


**Abb. 8.14** Flammengeschwindigkeit entlang der Behälterachse bei HD-2R und HD-12

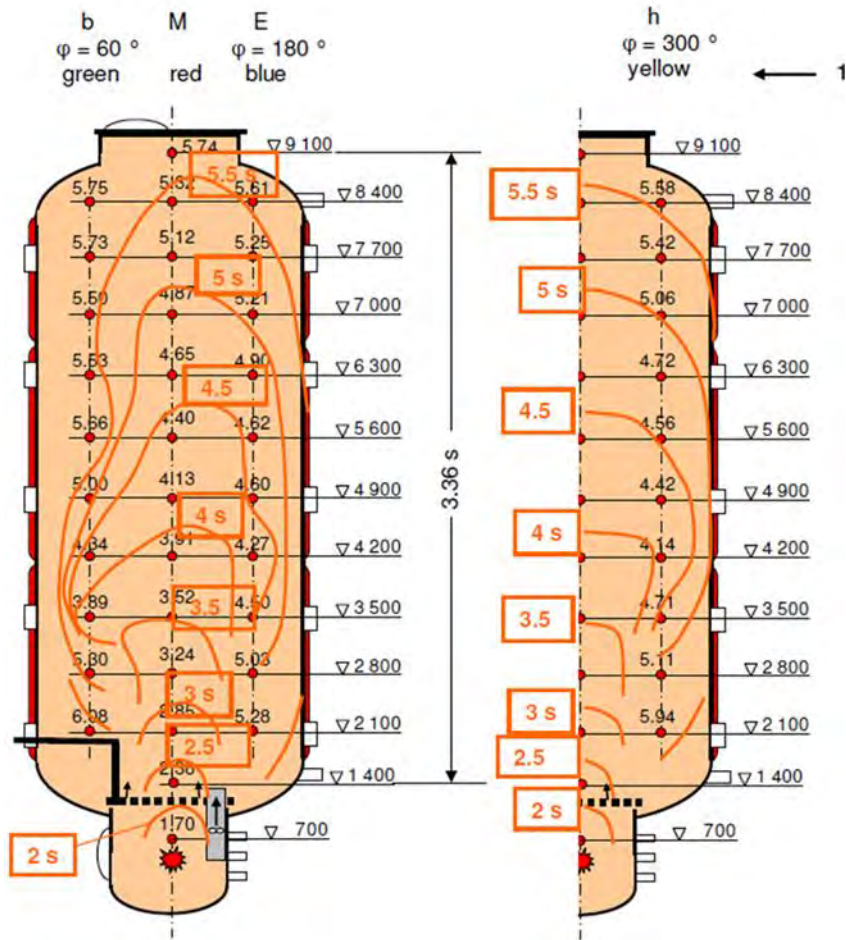




**Abb. 8.15** Maximaldruck und Maximaltemperatur verglichen mit dem AICC-Druck und der AICC-Temperatur /KAN 08b/



**Abb. 8.16** Temperaturverlauf an den vier Messstellen auf der Höhe von 6.3 m. Oben: HD-2R, unten: HD-12 /KAN 08/



1) The colour denominations refer to the temperature curves in Figs. 6-2 to 6-11.

**Abb. 8.17** Aus den Flammenankunftszeiten berechneter Verlauf der Flamme bei HD-12 /KAN 08/

#### 8.4.2 Gitterstudie

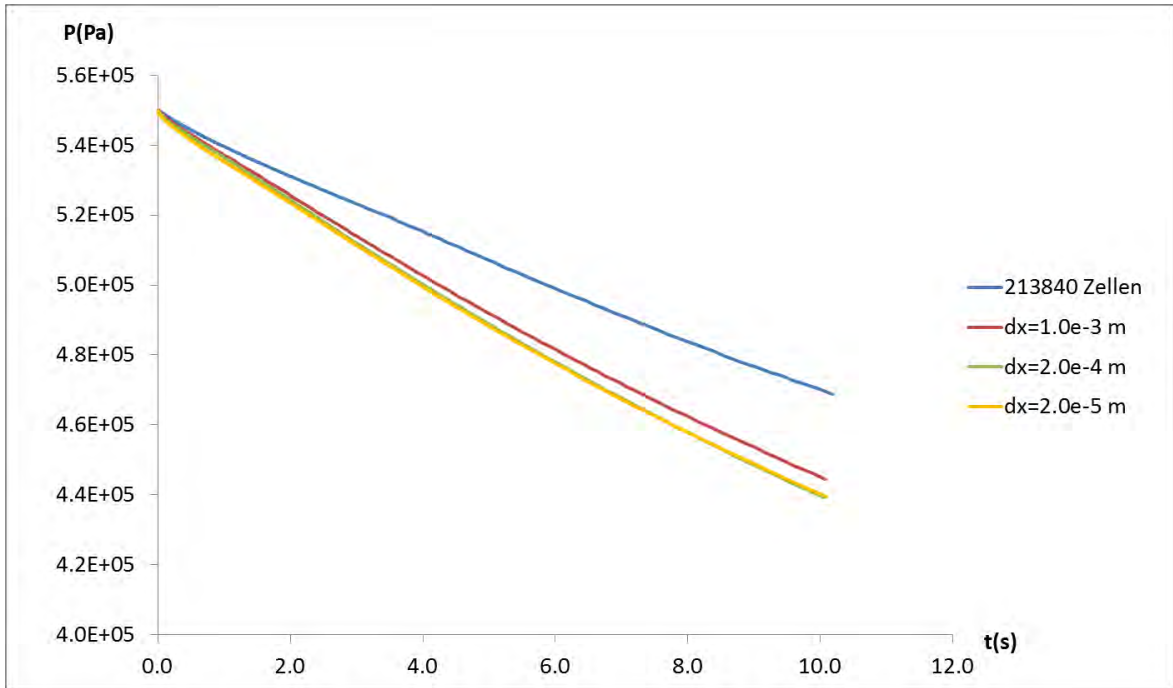
Es wurde untersucht, welchen Einfluss das CFD-Gitter auf das Simulationsergebnis hat. Die Gitterstudie wurde zu einem frühen Zeitpunkt der Arbeiten durchgeführt, deshalb gibt es noch Abweichungen zu der endgültigen Modellierung (z. B. Korrelation für die laminare Flammengeschwindigkeit). Da der prinzipielle Verlauf und die Größenordnung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit gleich sind, kann davon ausgegangen werden, dass die Schlussfolgerungen auch für die endgültige Modellierung und für ähnliche Verbrennungsversuche (z. B. HR-7) qualitativ gültig sind.

Erste Testrechnungen haben gezeigt, dass der Druckabfall nach Ende der Verbrennung von den Simulationen unterschätzt wird und dass die Gitterfeinheit auf die Wärmeverluste an den Behälterwänden und damit auch auf den Druckabfall einen großen

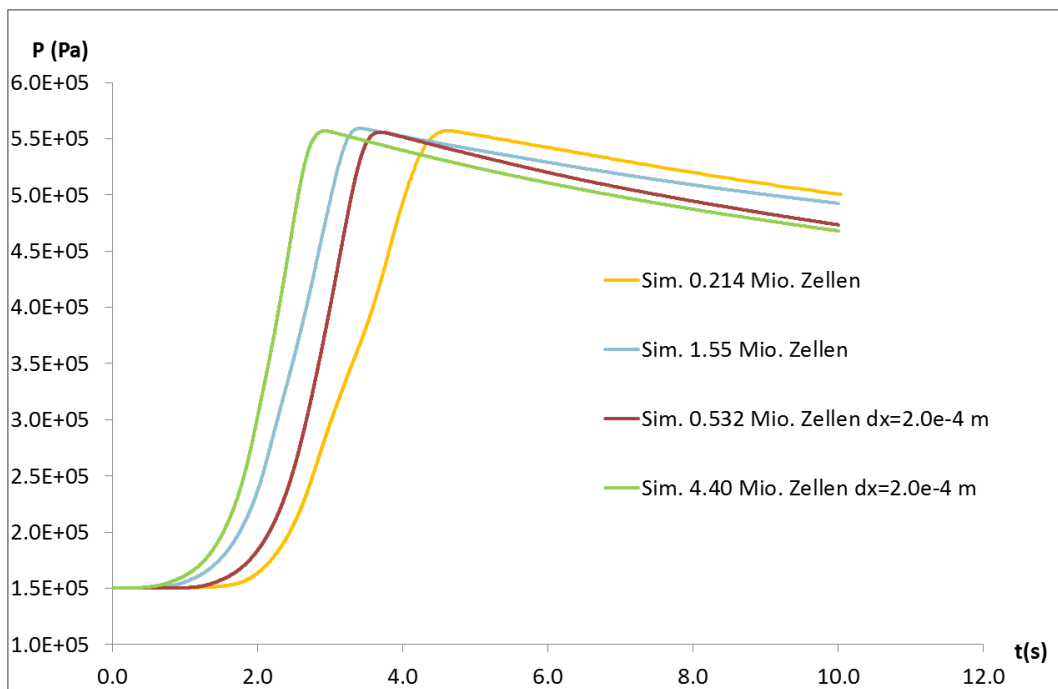
Einfluss hat. Um diesen Effekt und die benötigte Gitterfeinheit genauer zu untersuchen, wurde ein Testbeispiel untersucht. Zu Beginn der Simulation lagen die Temperatur und der Druck bei Werten, die in etwa dem des verbrannten Gases entsprechen, ( $T = 1200 \text{ K}$ ,  $p = 4 \text{ bar}$ ). Neben einem in Näherung äquidistanten Gitter mit ca. 214 000 Zellen (entspricht  $\Delta x_{\text{mittel}} \sim 0.065 \text{ m}$ ) wurden Gitter getestet; bei denen in Wandnähe verfeinert wurde. Dabei wurde die Dicke der ersten Gaszelle an der Wand von  $dx = 1.0e-3 \text{ m}$  bis auf  $dx = 2.0e-5 \text{ m}$  verkleinert. Beim äquidistanten Gitter ist der Druckabfall deutlich langsamer als bei den Simulationen mit adaptiver Wandverfeinerung. Der Druckverlauf bei den Gittern mit  $dx = 2.0e-4 \text{ m}$  und  $dx = 2.0e-5 \text{ m}$  ist nahezu gleich, es liegt eine gitterunabhängige Lösung vor (Abb. 8.18).

Für die eigentliche Gitterstudie wurde der Versuch HD-12 mit 4 unterschiedlichen Gittern simuliert. Zwei unterschiedlich feine in etwa äquidistante Gitter mit 214 840 Zellen,  $\Delta x_{\text{mittel}} = 0.065 \text{ m}$  und 1 547 904 Zellen  $\Delta x_{\text{mittel}} = 0.034 \text{ m}$  und zwei Gitter, bei denen in Wandnähe verfeinert wurde (532 193 Zellen und 4 399 270 Zellen). Entsprechend dem Testbeispiel wurde bei diesen Gittern  $dx = 2.0e-4 \text{ m}$  gewählt. Um die Zündung mit einem realistischen Zündradius  $r_{\text{zünd}} = 2 \text{ mm}$  simulieren zu können, wurde bei allen Gittern der Bereich um den Zündungsort verfeinert.

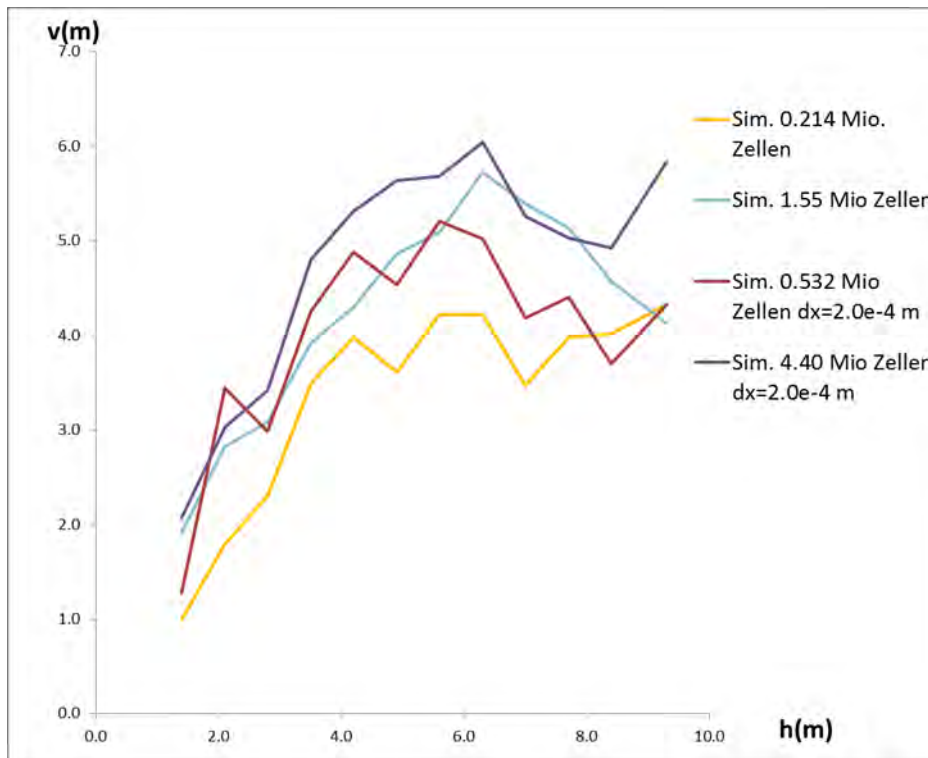
Sowohl der Druckverlauf als auch die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Behälterachse variieren in Abhängigkeit vom verwendeten Gitter. (Abb. 8.19, Abb. 8.20). Bei feineren Gittern erfolgt ein schnellerer Druckanstieg und wie schon beim Testbeispiel führt eine Verfeinerung in Wandnähe zu einem schnelleren Druckabfall nach Ende der Verbrennung. Das Druckmaximum dagegen ist bei allen Simulationen nahezu identisch. Bei allen Simulationen wird der Wasserstoff komplett verbrannt, die etwas unterschiedlichen Wärmeverluste haben nur einen geringen Einfluss auf den Maximaldruck. Dies kann dadurch erklärt werden, dass in der Anfangsphase der Verbrennung nur in wenigen Bereichen ein Kontakt des verbrannten Gases mit den Behälterwänden besteht und dass der Zeitraum, in dem große Teile der kalten Behälterwände mit dem heißen Gas in Kontakt sind und in dem die Verbrennung noch nicht abgeschlossen ist, so kurz ist, dass sich die unterschiedlichen Wärmeverluste nicht signifikant auf den Maximaldruck auswirken. In Übereinstimmung mit dem schnelleren Druckanstieg ist bei Verwendung eines feineren Gitters die Flammenausbreitung entlang der Mittelachse größer (Abb. 8.20). Die Gitterstudie zeigt, dass bis auf die Wärmeverluste an den Wänden (nach Abschluss der Verbrennung) keine gitterunabhängige Lösung gefunden werden konnte. Eine weitere Gitterverfeinerung (16 Millionen Zellen oder mehr) ist gegenwärtig mit den verfügbaren Ressourcen nicht möglich.



**Abb. 8.18** Druck beim Testbeispiel zur Gitterabhängigkeit der Wärmeverluste an den Wänden



**Abb. 8.19** Gitterabhängigkeit des Druckverlaufs



**Abb. 8.20** Gitterabhängigkeit der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Behälterachse

### 8.4.3 Simulationsergebnisse bei Verwendung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit

Das Verbrennungsexperiment wurde mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit nachgerechnet und die Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten verglichen.

In Abb. 8.21 ist der Druckverlauf in den Simulationen und in den Experimenten dargestellt. Der in den Simulationen erreichte Maximaldruck ist in allen Simulationen relativ ähnlich. Bei der Simulation mit der um  $Le^{-1}$  erweiterten Peters-Korrelation ist er mit  $P_{max} = 5.56$  bar am höchsten, bei der Zimont-Korrelation ( $P_{max} = 5.39$  bar) und der Peters-Korrelation ( $P_{max} = 5.44$  bar) ist er am niedrigsten. Die Höhe des Maximalwerts korreliert dabei mit der Geschwindigkeit, mit der er erreicht wird. Bei einer langsameren Verbrennung und einem damit einhergehenden langsameren Druckanstieg sind die Wärmeverluste an den Wänden größer. Alle berechneten  $P_{max}$ -Werte liegen deutlich oberhalb der experimentellen Werte ( $P_{max} = 5.04$  bar/ 4.92 bar). Es ist allerdings unklar, wie groß der Einfluss der Temperaturänderung auf die Druckmessung war (siehe Abschnitt 8.4.1).

Die Zimont-Korrelation ist am besten in der Lage, den langsamen Druckanstieg zu Beginn richtig zu simulieren. Ab ca.  $P = 2.5$  bar erfolgt der Druckanstieg schneller als im Experiment. Die Peters-Korrelation sagt in der Anfangsphase einen etwas schnelleren Druckanstieg als das Experiment und die Zimont-Korrelation voraus. Ab  $P = 2.5$  bar wird der Druckanstieg dagegen in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Die Dinkelacker-Korrelation berechnet einen deutlich schnelleren Druckanstieg.

Zu Beginn des Experiments liegt eine Lewis-Zahl von  $Le = 0.294$  vor. Die getesteten Modifikationen der Peters-Korrelation um einen Faktor  $Le^{-0.3}$  bzw.  $Le^{-1}$  bewirken eine Beschleunigung der Verbrennung. Entsprechend ist der Druckanstieg bei diesen Simulationen schneller und das Maximum wird früher erreicht.

Alle drei Korrelationen mit  $Le^{-0.3}$  Peters Le03, Peters Le03T Peters Le03L führen zu einem sehr ähnlichen Druckverlauf. Der Druckanstieg zu Beginn des Experiments wird in diesen Simulationen schneller vorhergesagt. Nachdem etwa 2 bar Druck erreicht wurden, wird der Druckanstieg nur noch leicht überschätzt. Die Simulationen mit  $Le^{-1}$  Peters Le1, Peters Le1T und Peters Le1L berechnen erwartungsgemäß einen noch schnelleren Druckanstieg, der merklich höher als im Experiment ist. Dabei ist bei Peters Le1 die Überschätzung am höchsten, bei Peters Le1T noch am geringsten.

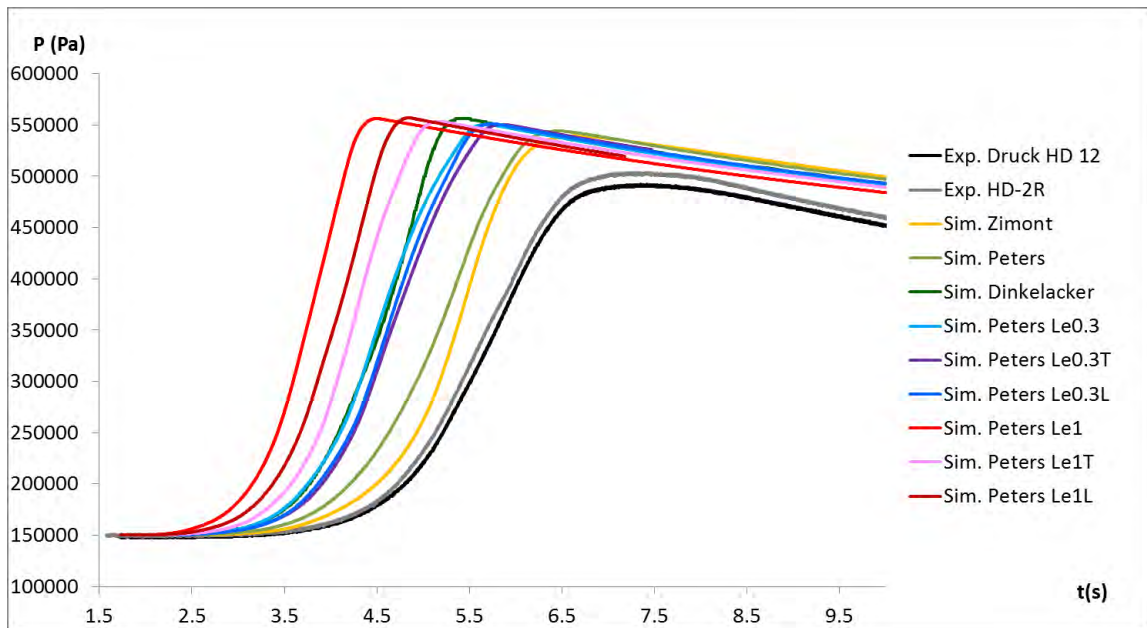
In Abb. 8.22 ist die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse dargestellt. Alle Simulationen berechnen eine langsame Flammenausbreitung von wenigen Metern pro Sekunde, quantitativ wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit allerdings überschätzt. Die Zimont- und die Peters-Korrelation berechnen eine ähnliche Ausbreitungsgeschwindigkeit. Bei  $h = 2$  m liegt die Geschwindigkeit bei etwa 1.5 m/s, während sie im Experiment nur bei etwa 1 m/s liegt. Im Experiment wird ab  $h = 4$  m eine Geschwindigkeit von 2 m/s – 3 m/s gemessen, die aber deutlich schwankt, während bei diesen beiden Simulationen bei  $h \sim 6.3$  m der Maximalwert von etwa 5 m/s erreicht wird. Die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei der Dinkelacker-Korrelation hat einen anderen Verlauf. Bei dieser Korrelation wird die maximale Ausbreitungsgeschwindigkeit (4.67 m/s) bei  $h = 4.9$  m erreicht. Sie fällt ab  $h = 6.3$  m wieder deutlich ab.

Wie schon beim Druck zeigen alle Simulationen mit  $Le^{-0.3}$  (Peters Le0.3, Peters Le0.3T und Peters Le0.3L) eine ähnliche Ausbreitungsgeschwindigkeit. Sie liegen etwas oberhalb der Werte der Simulation mit der Peters-Korrelation.

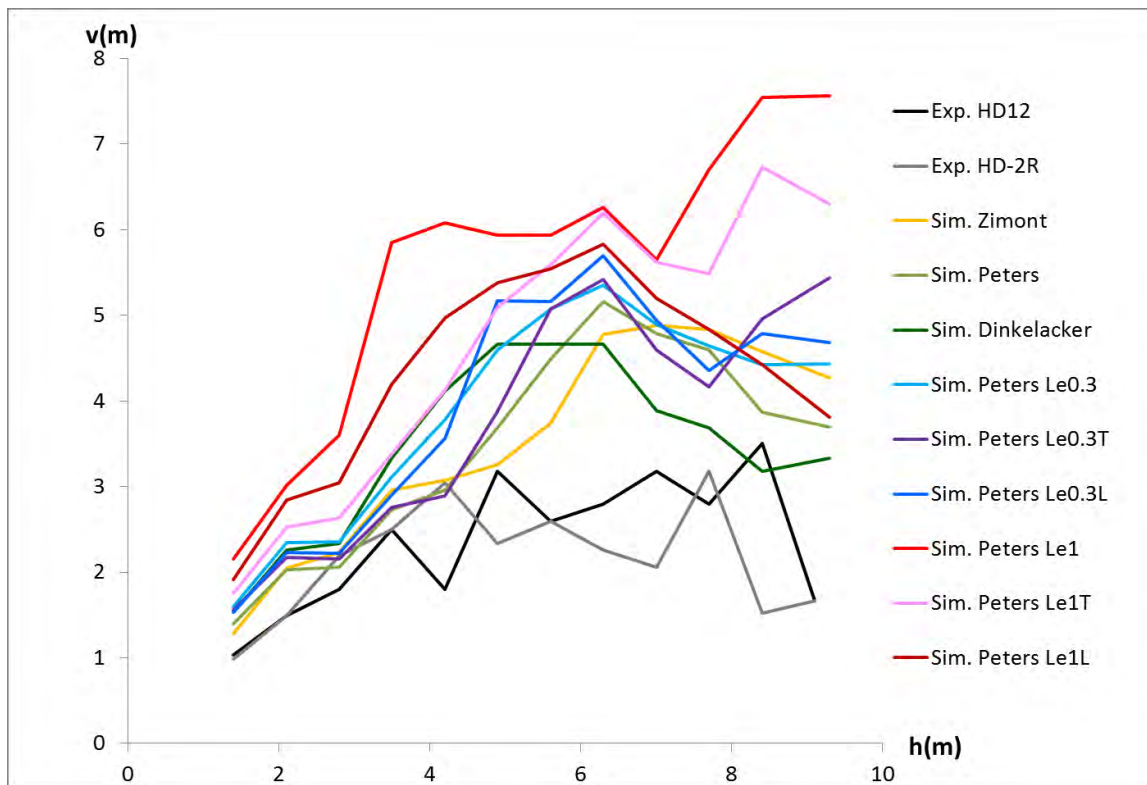
Die Simulation mit dem Faktor  $Le^{-1}$  ( $Le1$ ) berechnet die schnellste Flammenausbreitung. Sie überschätzt die experimentelle um einen Faktor 2 – 3. Die Simulationen mit der Korrelation Peters  $Le1T$  und mit der Korrelation Peters  $Le1L$  liegen zwischen der Peters Korrelation und der Korrelation Peters  $Le1$ . In der Anfangsphase berechnet  $Le1T$  eine langsamere Flammenausbreitung, während sie im späteren Verlauf oberhalb von Peters  $Le1L$  liegt. Dieses Verhalten ist verständlich, da bei Peters  $Le1L$  die Verbrennungsgeschwindigkeit nur im laminaren Fall um  $Le^{-1}$  erhöht wird, der Einfluss der Turbulenz wird nicht verändert. Bei Peters  $Le1T$  wird nur die Flammenbeschleunigung aufgrund von Turbulenz erhöht, im laminaren Fall entspricht die Flammengeschwindigkeit der laminaren Flammengeschwindigkeit, wie es auch bei der Peters-Korrelation der Fall ist.

Bei der Bewertung der Ergebnisse ist zu beachten, dass bei allen Korrelationen zur Modellierung der turbulenten Flammengeschwindigkeit die laminare Flammengeschwindigkeit eingeht. Für Wasserstoffkonzentrationen unter 9 Vol.-% liegen keine experimentellen Daten vor. Die einzelnen Korrelationen liefern für diesen Bereich unterschiedliche Ergebnisse. Die IRSN-Korrelation würde  $v_{lam} = 0$  m/s vorhersagen, die Etnner-Korrelation liefert  $v_{lam} = 0.053$  m/s. Würde ein anderer kleinerer Wert als 0.053 m/s für die laminare Flammengeschwindigkeit angenommen, so würde die Verbrennung langsamer stattfinden. Auch dieser kleinere Wert stände nicht im Widerspruch zu den experimentellen Daten von  $v_{lam}$ . Je nach Schätzwert wird die Übereinstimmung mit dem Experiment zunehmen, gegebenenfalls können dann andere Korrelationen eine bessere Übereinstimmung als Peters erzielen. Dieser Versuch kann deshalb nur eingeschränkt zur Auswahl der Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit genutzt werden.





**Abb. 8.21** Vergleich des Druckverlaufs bei Verwendung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit



**Abb. 8.22** Vergleich des Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse bei Verwendung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit

#### **8.4.4 Zusammenfassung Nachrechnung HD-12/HD2-R**

Der in den Simulationen erreichte Maximaldruck ist in allen Simulationen relativ ähnlich und liegt etwa 0.4 bar – 0.5 bar oberhalb des experimentellen Werts. Es ist allerdings unklar wie genau die Druckmessung ist. Neuere Untersuchungen an der ENACCEF-Anlage haben gezeigt, dass selbst bei thermischer Abschirmung der Messsonden die Druckmessung von den schnellen Temperaturänderungen beeinflusst werden kann [GRO 17].

Alle verwendeten Korrelationen waren in der Lage, eine langsame Verbrennung mit einer Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von wenigen Metern pro Sekunde vorherzusagen. Allerdings wird von allen Simulationen die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit überschätzt. Dies zeigt sich auch beim zu schnellen Druckanstieg. Die Peters- und die Zimont-Korrelation haben insgesamt die beste Übereinstimmung erzielen können.

Dieser Versuch kann nur eingeschränkt zur Auswahl der Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit genutzt werden. Bei 8 Vol.-% liegen keine experimentellen Daten zur laminaren Flammengeschwindigkeit vor. Entsprechend groß ist die Unsicherheit bei den Korrelationen für die laminare Flammengeschwindigkeit für so niedrige Wasserstoffkorrelationen.

### **8.5 THAI HD-7 Experiment**

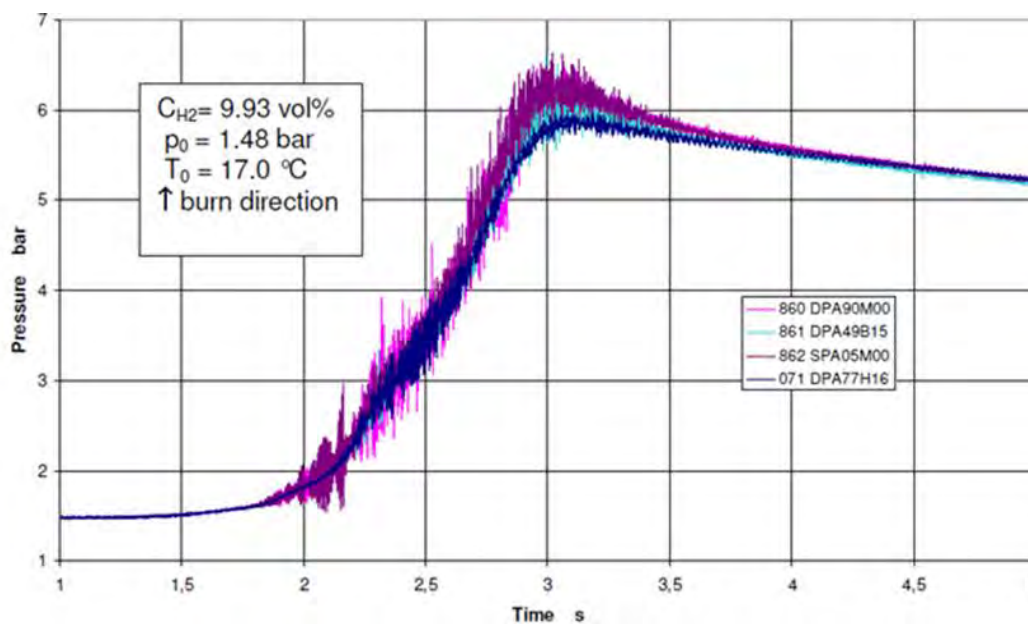
#### **8.5.1 Versuchsbeschreibung**

Das Experiment HD-7 unterscheidet sich von HD-12/HD2R nur durch seine höhere initiale Wasserstoffkonzentration von 9.93 Vol.-%. Die Geometrie und der Zündort sind identisch. Qualitativ unterscheiden sich die beim Versuch beobachteten Effekte aber nicht unerheblich. Beim Druckverlauf fällt auf, dass es zu deutlichen Druckoszillationen kommt (Abb. 8.23). Dies ist bemerkenswert, da die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flammenfront ( $v_{\text{flam}} \leq 10 \text{ m/s}$ ) um mehr als eine Größenordnung kleiner ist als die Ausbreitungsgeschwindigkeit von Schall. Als mögliche Ursache für die Druckschwankungen wurden akustische Wellen identifiziert. Hierzu liegen aber keine gesicherten experimentellen Daten vor, deshalb kann hierzu keine abschließende Aussage getroffen werden. Für den Vergleich mit Simulationsdaten wird ein über die Messpunkte gemittelter Druck verwendet. Für das Druckmaximum im Experiment ergibt sich eine expe-

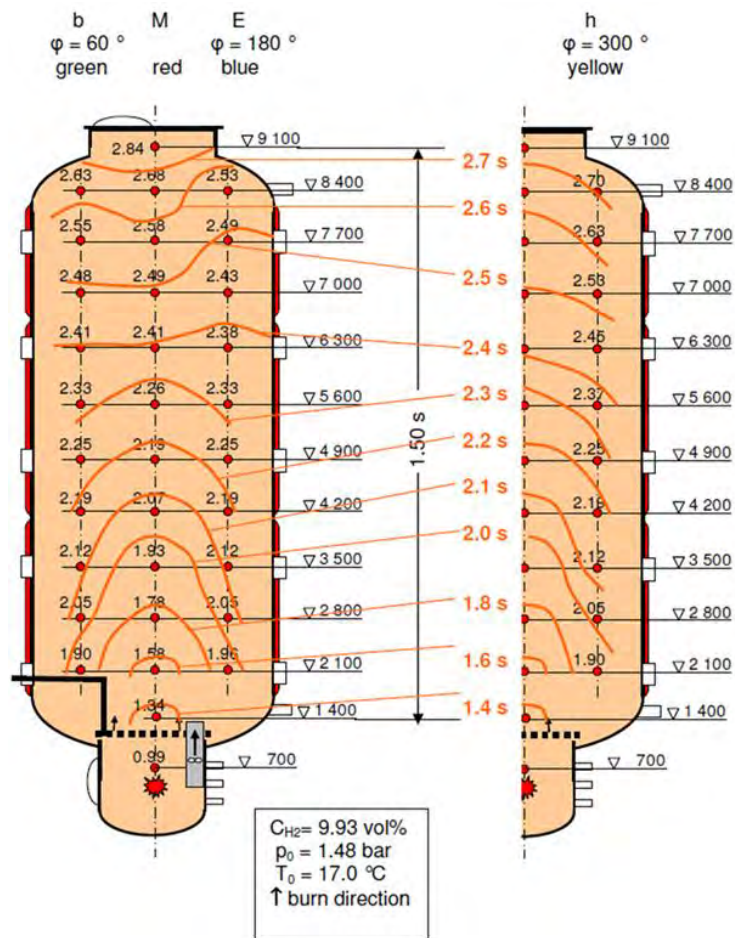
perimentelle Unsicherheit von etwa +/- 0.3 bar. Zusätzlich sind mögliche Messunsicherheiten aufgrund der starken und schnellen Temperaturänderungen zu berücksichtigen /GRO 17/ (siehe Abschnitt 8.4.1). Das Druckmaximum liegt wie bei anderen THAI-HD-Versuchen etwa 0.5 bar unterhalb des AICC-Drucks.

Aus den Flammenankunftszeiten haben die Experimentatoren den Verlauf der Flammenfront extrapoliert (Abb. 8.24), /KAN 08b/. Bis ca. 2.4 s bzw. 6 m Höhe erreicht die Flamme zuerst den Messpunkt auf der Mittelachse. Dies korrespondiert mit dem Zündort auf der Mittelachse. Bis zu diesem Zeitpunkt ist die Flammenfront näherungsweise auch achsensymmetrisch. Danach wird zuerst die Messstelle auf der Linie E erreicht. Hierfür gibt es keinen in der Versuchsgeometrie liegenden Grund. Eine mögliche Ursache wäre auch hier eine Kopplung der Flamme mit akustischen Wellen.

Streng genommen ist die Auswertung der Flammenausbreitung entlang der Behälterachse oberhalb von 6 m Höhe an wenig aussagekräftig, da dies nicht der Richtung der Flammenausbreitung entspricht. Für diesen Bereich ist beim Vergleich mit Simulationsergebnissen eine erhöhte Vorsicht geboten.



**Abb. 8.23** Experimenteller Druckverlauf an unterschiedlichen Messstellen



**Abb. 8.24** Aus den Flammenankunftszeiten berechneter Verlauf der Flamme bei HD-7

### 8.5.2 Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten

Im Folgenden werden die Simulationsergebnisse mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit vorgestellt. Alle Simulationen waren in der Lage, die langsame Verbrennung mit moderaten Abweichungen beim Druck (siehe Abb. 8.25) und der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit (siehe Abb. 8.26) zu simulieren. Alle Simulationen berechnen eine vollständige Verbrennung von  $H_2$ . Der Maximaldruck ist bei allen Simulationen ähnlich (Zimont 6.23 bar, Peters Le1: 6.37 bar) und liegt etwas oberhalb des experimentellen Werts (5.95 bar – 6.21 bar), bei dem aber Messunsicherheiten bestehen (siehe Abschnitt 8.4.1). Druckoszillationen wurden bei keiner Simulation beobachtet. Dies ist aufgrund der langsamen Flammenausbreitungsgeschwindigkeit, die 1 – 2 Größenordnungen geringer als die Schallgeschwindigkeit ist, und dem Fehlen von akustischen Schwingungen (keine entsprechenden Modelle verwendet) auch nicht anders zu erwarten.

Die größten Abweichungen zwischen den Simulationen ergeben sich in der Anfangsphase des Experiments. Nur die Simulation mit der modifizierten Peters-Korrelation Peters Le1L und mit etwas größeren Abweichungen Peters Le1 sind in der Lage, den Druckverlauf bis  $P = 2.5$  bar in guter Übereinstimmung mit dem Experiment zu simulieren. Die übrigen Simulationen unterschätzen den Druckanstieg teilweise deutlich.

Die Simulation mit der Zimont-Korrelation zeigt eine der größten Abweichungen. Der anfängliche Druckanstieg wird deutlich unterschätzt. Ab  $P \sim 2.5$  bar ist die Übereinstimmung besser, der Druckanstieg wird nur leicht unterschätzt. Mit der Peters-Korrelation wird der Druckanstieg zu Beginn ebenfalls deutlich unterschätzt, die Abweichung ist allerdings geringer als bei der Zimont-Korrelation. Im weiteren Verlauf ist der Druckanstieg aber schwächer als im Experiment. In dieser Phase ist die Übereinstimmung am schlechtesten von allen getesteten Korrelationen. Von den aus der Literatur übernommenen Korrelationen zeigt die Dinkelacker-Korrelation die beste Übereinstimmung. In der Anfangsphase wird der Druckanstieg unterschätzt, wobei die Abweichung allerdings geringer als bei der Zimont- und der Peters-Korrelation ist. Ab ca. 2.4 bar stimmt der Druckanstieg gut mit dem Experiment überein.

Die Simulationen mit einer um einen Faktor  $Le^{-0.3}$  modifizierten Peters-Korrelation zeigen eine bessere Übereinstimmung als die mit der unmodifizierten Peters-Korrelation. Es verbleibt aber eine deutliche Unterschätzung des Druckanstiegs in der Anfangsphase und auch danach wird der Druckanstieg etwas unterschätzt. Die Korrelation Peters Le0.3 zeigt dabei die beste Übereinstimmung. Die Korrelation Peters Le0.3L liefert in der Anfangsphase sehr ähnliche Ergebnisse wie Peters Le0.3, danach fällt der Druckanstieg aber etwas flacher aus, was die Abweichung zum Experiment vergrößert. Peters Le0.3T unterschätzt den Druckanstieg bis 2.5 bar stärker und liefert in der Anfangsphase einen ähnlichen Druckverlauf wie die unmodifizierte Peters-Korrelation. Insgesamt ist beim Druckverlauf die Übereinstimmung bei allen drei Korrelationen schlechter als bei der Dinkelacker-Korrelationen. Die Simulationen mit einem Faktor  $Le^{-1}$  zeigen beim Druck die beste Übereinstimmung. Die Simulation mit Peters Le1 überschätzt den Druckanstieg in der Anfangsphase etwas, nach Erreichen von 2.5 bar stimmt der Druckanstieg sehr gut mit dem Experiment überein. Die Simulation mit Peters Le1L zeigt in der Anfangsphase die beste Übereinstimmung, danach wird der Druckanstieg etwas unterschätzt. Die Korrelation mit Peters Le1T liefert sehr ähnliche Ergebnisse wie die Dinkelacker-Korrelation, wobei sie eine etwas schlechtere Übereinstimmung im späteren Verlauf der Verbrennung zeigt. Es sei angemerkt, dass in beiden Korrelationen der Einfluss der thermo-diffusiven Flammeninstabilitäten gleich mo-

delliert wird, nur der Einfluss der Turbulenz auf die Flammenbeschleunigung wird etwas anders berechnet.

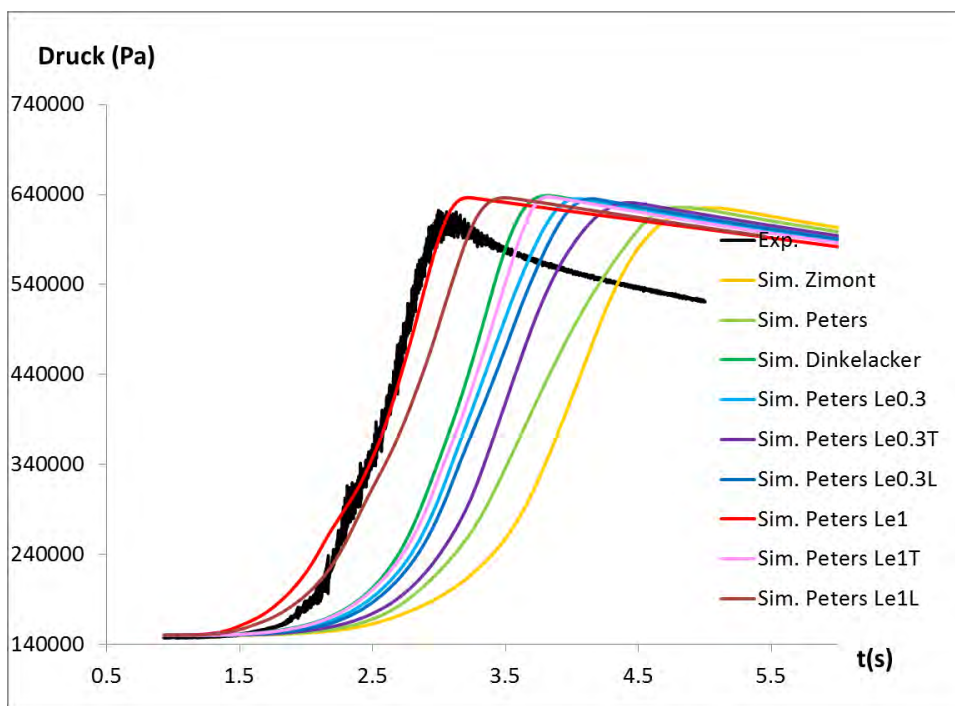
Die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse wird von allen Simulationen in relativ guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet (siehe Abb. 8.26). Bei allen Simulationen wird eine Ausbreitungsgeschwindigkeit von wenigen m/s berechnet. Es gibt aber auch qualitative Unterschiede. Der Effekt, dass ab etwa 6.3 m Höhe die Flamme nicht mehr als erstes den mittleren Messpunkt erreicht, wird in den Simulationen nicht beobachtet. Bei den eingesetzten Modellen (insbesondere RANS-Turbulenzmodell, keine akustische Wellen) ist auch kein Grund erkennbar, warum die Flamme zuerst eine seitliche Messstelle erreichen sollte. Die hiermit zusammenhängenden Schwankungen in der Ausbreitungsgeschwindigkeit zwischen der Höhe 5 m – 7 m werden ebenfalls von allen Simulationen nicht berechnet.

Die Zimont- und die Peters-Korrelation berechnen eine etwas langsamere Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bis zu einer Höhe 5 m, danach liegen sie im unteren Bereich der experimentellen Schwankung. Die Dinkelacker-Korrelation berechnet bis 5 m Höhe die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment, im späteren Verlauf liegt diese Simulation im unteren Bereich der Messwerte. Die Simulationen mit der modifizierten Peters-Korrelation Peters Le0.3 und Peters Le0.3L berechnen eine sehr ähnliche Flammenausbreitungsgeschwindigkeit. Sie stimmt sehr gut mit dem Experiment überein. Mit Peters Le0.3T wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit von 2 m – 5 m Höhe unterschätzt. Die Simulation mit Peters Le1 überschätzt den experimentellen Wert in der Anfangsphase, die Abweichung verschwindet dann bis zur Höhe 5 m kontinuierlich. Danach liegt die Ausbreitungsgeschwindigkeit im Bereich der experimentellen Schwankung, ab 7.5 m wird die Geschwindigkeit etwas überschätzt. Peters Le1L berechnet im unteren Bereich ebenfalls eine zu hohe Ausbreitungsgeschwindigkeit, die Abweichung wird im Verlauf aber deutlich kleiner. Im Bereich 5 m – 8 m liegt das Simulationsergebnis in der experimentellen Bandbreite. Die Simulation Peters Le1T berechnet sehr ähnliche Ausbreitungsgeschwindigkeiten wie Dinkelacker, Peters Le03 und Peters Le03L.

Zusammengefasst kann festgehalten werden, dass eine Reihe von Simulationen (Dinkelacker, Peters Le0.3, Peters Le0.3L, Peters Le1T) die Ausbreitungsgeschwindigkeit in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnen, wenn man von der Schwankung im Bereich 5 – 8 m absieht. Die Simulationen Peters Le1 und Peters Le1L überschätzen die Ausbreitungsgeschwindigkeit etwas. Die Rechnungen Peters,

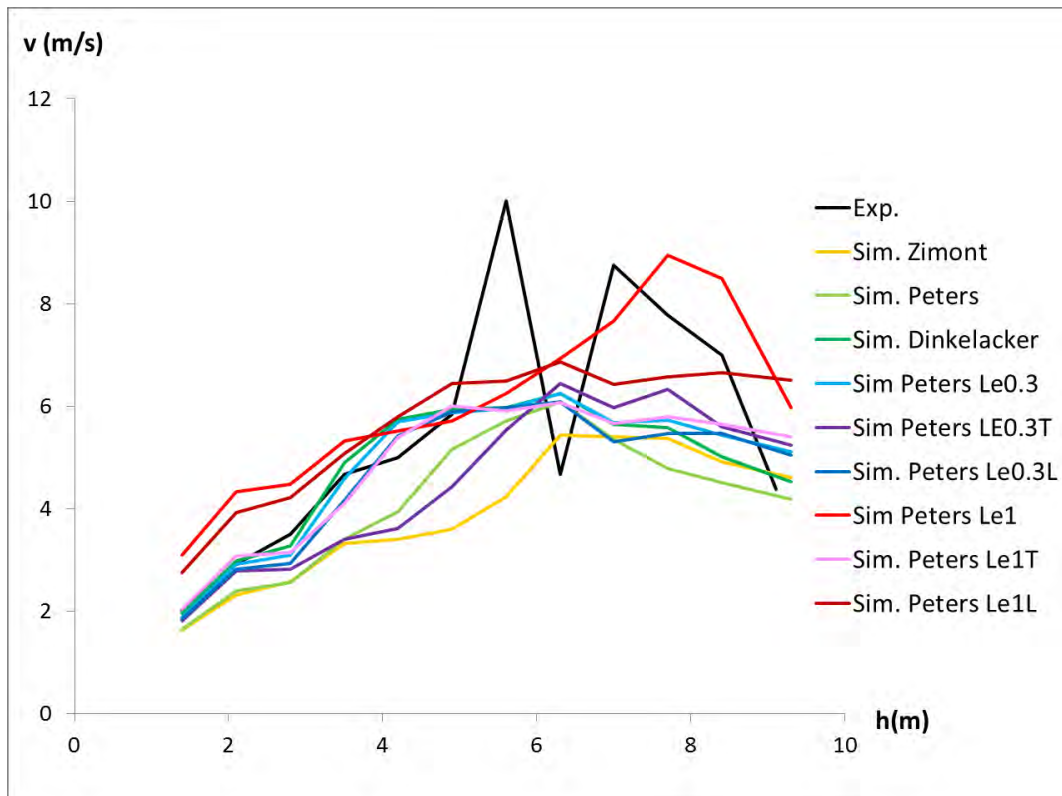
Zimont und Peters Le0.3T unterschätzten die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse etwas.

Der scheinbare Widerspruch, dass der Druckanstieg von einer Reihe von Simulationen unterschätzt wurde, die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit dagegen fast perfekt getroffen wurde, kann dadurch erklärt werden, dass zwar die vertikale Flammenausbreitungsgeschwindigkeit in guter Übereinstimmung getroffen wurde, die horizontale Flammenausbreitungsgeschwindigkeit dagegen unterschätzt wurde. Es sei darauf hingewiesen, dass neben der turbulenten Brenngeschwindigkeit noch andere physikalische Effekte eine Rolle für die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit spielen, z. B. der Auftrieb des heißen verbrannten Gases oder die durch die Gasexpansion/Auftrieb induzierte Gasströmung, die seitlich kaltes unverbranntes Gas nach unten transportiert, sofern die Flamme noch nicht die Behälterwand erreicht hat. Diese Effekte wechselwirken miteinander und mit der turbulenten Flammenausbreitungsgeschwindigkeit.



**Abb. 8.25** Druckverlauf im Experiment und in Simulationen mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit





**Abb. 8.26** Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme entlang der Mittelachse im Experiment und in Simulationen mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit

### 8.5.3 Zusammenfassung

Alle Simulationen waren in der Lage, die langsame Verbrennung mit moderaten Abweichungen beim Druck und der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit zu simulieren. Der Maximaldruck ist bei allen Simulationen ähnlich und liegt etwas oberhalb des experimentellen Werts, bei dem aber Messunsicherheiten bestehen (siehe Abschnitt 1.4.1). Druckoszillationen wurden im Gegensatz zum Experiment bei keiner Simulation beobachtet. Im Experiment wurden als mögliche Ursachen hierfür akustische Wellen identifiziert, die in den Simulationen nicht modelliert werden.

Die Zimont- und die Peters-Korrelation unterschätzen sowohl die Ausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse, als auch den Druckanstieg. Die Dinkelacker-Korrelation und Peters Le1T liefern ähnliche Ergebnisse. Sie können die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse sehr gut berechnen, den Druckanstieg unterschätzen sie aber etwas, wobei auch hier eine bessere Übereinstimmung als bei Peters und Zimont erzielt wurde. Die modifizierten Peters-Korrelationen Peters Le1



und Peters Le1L überschätzen die Flammenausbreitung entlang der Mittelachse moderat, zeigen aber die beste Übereinstimmung bei der Berechnung des Druckerhöhungs.

## **8.6 THAI HD-10 Experiment**

### **8.6.1 Versuchsbeschreibung**

Beim THAI-Experiment HD-10 werden 11.84 Vol.-% H<sub>2</sub> in Luft verbrannt. Der Anfangsdruck ist 1.5 bar, die initiale Temperatur 30 °C. Wie bei allen HD-Verbrennungsexperimenten sind alle Einbauten aus dem THAI-Behälter entfernt worden. Bei diesem Experiment findet im Gegensatz zu HD-7 und HD-12 eine Zündung im oberen Bereich des Behälters statt (Höhe 9.1 m, mittig), was zu einer abwärts gerichteten Verbrennung führt.

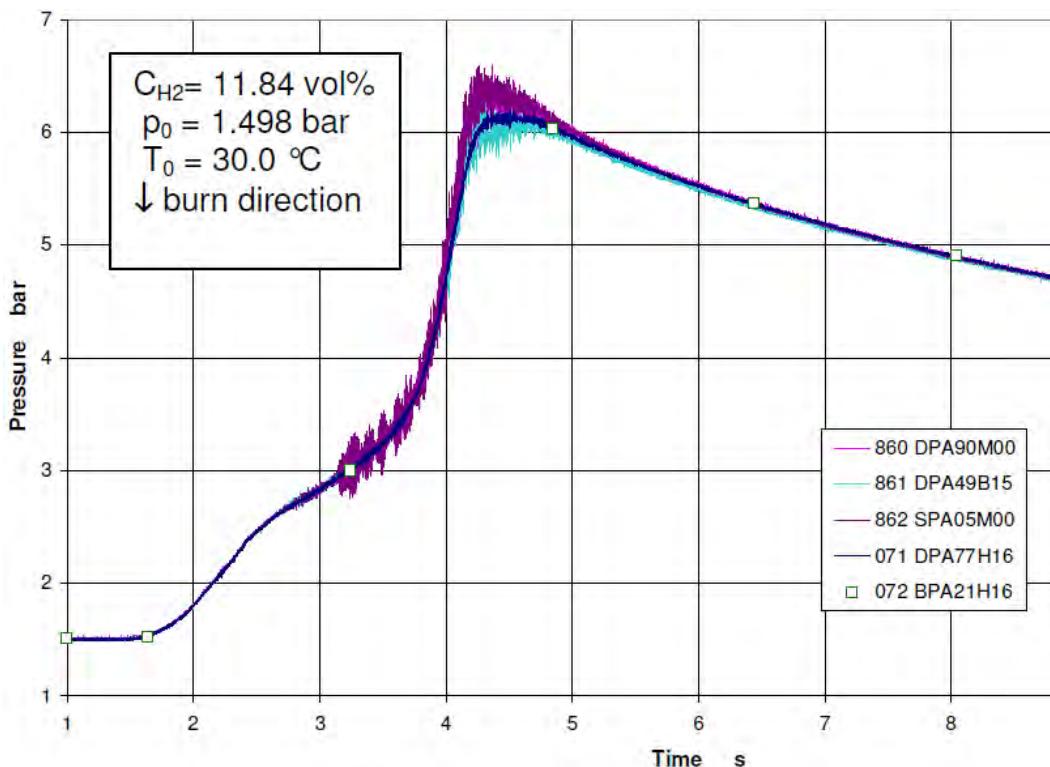
Wie schon bei HD-7 zeigt der Druckverlauf deutlichen Druckoszillationen (Abb. 8.27), obwohl auch hier die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flammenfront um 1 – 2 Größenordnungen langsamer als die Schallgeschwindigkeit ist. Auch bei HD-10 könnten akustische Wellen die Ursache für die Druckschwankungen gewesen sein, was aber nicht abschließend geklärt werden kann, da keine experimentellen Daten vorliegen.

Für den Vergleich mit Simulationsdaten wird ein über die Messpunkte gemittelter Druck verwendet. Das Druckmaximum liegt wie bei anderen THAI-HD-Versuchen unterhalb des AICC-Drucks (Abb. 8.15). Für das Druckmaximum im Experiment ergibt sich eine experimentelle Unsicherheit von etwa +/- 0.3 bar. Zusätzlich gibt es mögliche systematische Messunsicherheiten aufgrund der starken und schnellen Temperaturänderungen, die den gemessenen Druck verfälschen können /GRO 17/ (siehe auch Abschnitt 8.4.1).

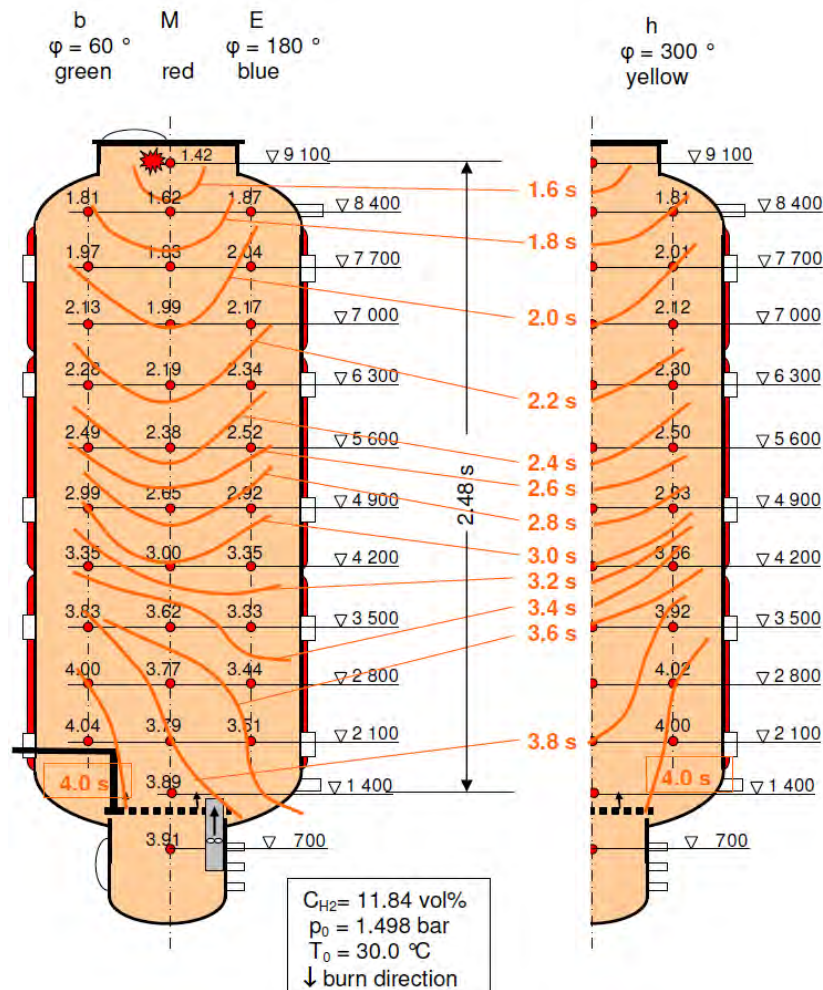
Die Auswertung der Flammenankunftszeiten (Abb. 8.28) zeigt folgende Flammenausbreitung. Bis zur Höhe von 4.9 m erreicht die Flamme als erstes den Messpunkt auf der Mittelachse. Die seitlichen Messpunkte werden etwas später erreicht. Wobei die Achsensymmetrie bis auf kleine Abweichungen gewahrt bleibt (Abb. 8.28). Danach ändert sich der Verlauf der Flammenfront. Der Messpunkt auf der Mittelachse wird nicht mehr als erstes erreicht, und die Achsensymmetrie geht vollständig verloren.

Die Flamme breitet sich zwischen 4.9 m und 3.5 m Höhe entlang der h-Linie deutlich langsamer aus, während entlang der E-Linie eine beschleunigte Verbrennung erfolgt. Auf dieser Linie wird der Messpunkt auf der Höhe 3.5 m ( $t = 3.33$  s) sogar vor dem auf der Höhe 4.2 m ( $t = 3.35$  s) erreicht, was ein Indiz ist, das der eingezeichnete Flammenfrontverlauf in Abb. 8.28 ( $t = 3.2$  s und  $t = 3.4$  s) die zu diesem Zeitpunkt ablaufenden Prozesse nur unzureichend beschreibt. Es ist nicht abschließend geklärt, was die Ursache für dieses Verhalten ist. Möglicherweise kam es zu einer Wechselwirkung der Flamme mit akustischen Wellen, hier kämen insbesondere Druckwellen mit Eigenfrequenzen des Behälters in Frage. Denkbar ist auch, dass turbulente Schwankungen großer Wellenlänge zusammen mit der Behälterform zu diesem Verhalten führen. Auch einige Simulationen berechnen eine schnellere seitliche Flammenausbreitung im unteren Teil des Behälters (z. B. Peters Le1 Abb. 8.33).

Da unterhalb von 4.9 m Höhe die Flammenausbreitung nicht mehr entlang der Behältermitte erfolgt, ist beim Vergleich der Ausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Behälterachse Vorsicht geboten.



**Abb. 8.27** Experimenteller Druckverlauf an unterschiedlichen Messstellen



**Abb. 8.28** Aus den Flammenankunftszeiten berechneter Verlauf der Flamme bei HD-10

### 8.6.2 Simulationsergebnisse HD-10

Erste Testrechnungen haben gezeigt, dass eine starke Veränderung der Zellgröße zu Ungenauigkeiten bei der Berechnung der Turbulenz führen kann, die dann über die Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit auch die Flammenausbreitung beeinflusst. Bei der langsamen abwärts gerichteten Verbrennung hatten diese numerischen Fehler einen deutlich größeren Einfluss als bei der aufwärts gerichteten Verbrennung in HD-7 und HD-12, bei der der Auftrieb der heißen Gase im Wesentlichen gleichgerichtet mit der turbulenten Flammengeschwindigkeit ist. Deshalb wurde bei den Simulationen des HD-10-Experiments ein anderes CFD-Gitter verwendet. Bei diesem Gitter wurde auf die Verfeinerung in Wandnähe verzichtet. Dadurch war es möglich, ein gleichmäßigeres Gitter zu erzeugen. Der Nachteil ist allerdings, dass die Wärmeverluste an den Wänden etwas weniger genau simuliert werden (siehe Abschnitt 8.4.2).

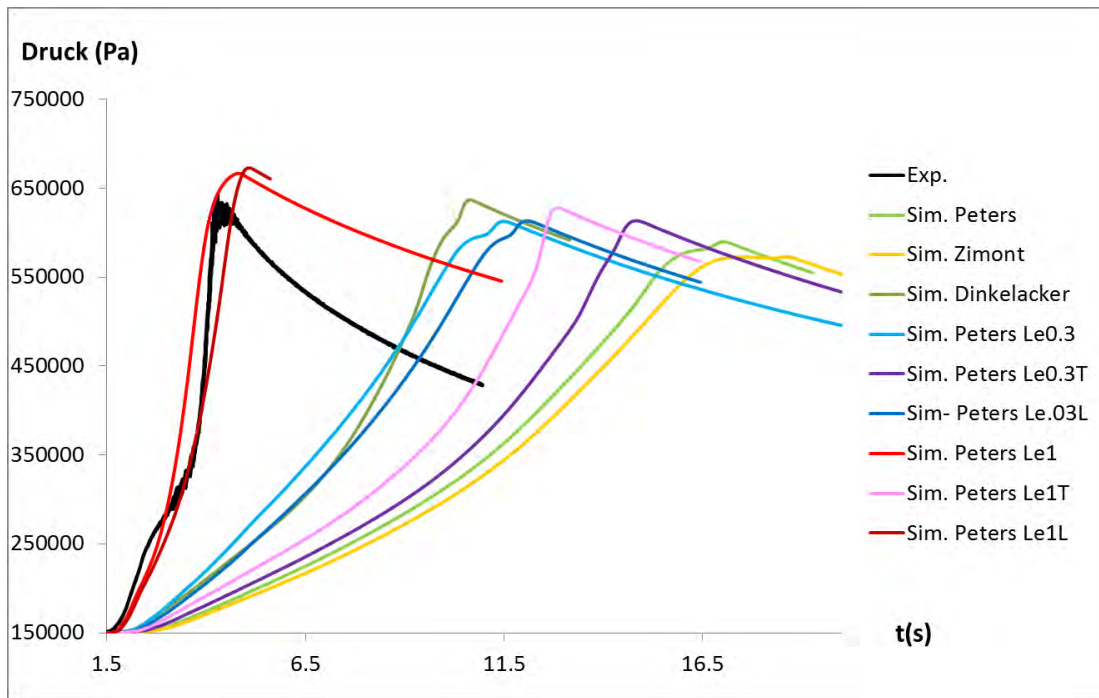
Der Vergleich des Druckverlaufs und auch der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit zeigen, dass die Simulationen mit der Peters- und der Zimont-Korrelation die Verbrennungsgeschwindigkeit stark unterschätzen (Abb. 8.30, Abb. 8.31). Der Fehler bei Verwendung der Dinkelacker-Korrelation ist deutlich kleiner, die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit wird aber immer noch um das 2- bis 3-fache unterschätzt genauso wie die Geschwindigkeit des Druckanstiegs. Die Korrelationen Peters Le03T und Peters Le1T führen nur zu einer geringfügigen Verbesserung gegenüber der Peters-Korrelation. Bei diesen beiden Korrelationen wird nur der turbulente Anteil durch die Multiplikation mit dem  $Le^{-0.3}$  bzw.  $Le^{-1}$  modifiziert. Da bei diesem Versuch verhältnismäßig wenig Turbulenz vorliegt, da keine Hindernisse vorhanden sind, hat diese Modifikation nur einen mäßigen Einfluss auf das Simulationsergebnis. Die Korrelationen Peters Le03 und Peters Le03L liefern eine bessere Übereinstimmung als die Peters-Korrelation, allerdings ist die Abweichung zum Experiment immer noch groß. Der Druckanstieg und die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit werden wie bei der Dinkelacker-Korrelation um einen Faktor 2 – 3 unterschätzt. Die Simulationen mit den Korrelationen Peters Le1 und Peters Le1L sind als einzige in der Lage, den Druckanstieg in guter Übereinstimmung mit dem Experiment zu simulieren. Es verbleiben aber auch bei diesen Simulationen noch gewisse Abweichungen. Im Experiment gibt es beim Druckanstieg zwischen 2.5 s und 3.5 s eine Phase, in der sich der Anstieg verlangsamt, danach steigt er wieder deutlich an. Dieser Effekt wird von keiner Simulation vorhergesagt. Bis etwa zur Behältermitte (Abstand vom Zündort 4 m – 5 m) wird von beiden Simulationen eine sehr ähnliche Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Behältermitte berechnet, sie liegt etwas unterhalb dem experimentellen Wert. Der Verlauf – erst leichter Anstieg danach kontinuierlicher Abfall – wird von beiden Simulationen richtig vorhergesagt. Im unteren Bereich des Behälters gibt es dagegen deutlichere Abweichungen. Bei der Simulation mit Peters Le1 erfolgt wie im Experiment die Flammenausbreitung nicht entlang der Mittelachse (Abb. 8.33). Deshalb ist auch hier eine Bestimmung der Ausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Behälterachse wie im Experiment nur bedingt sinnvoll. Wie im Experiment kommt es auch hier zu einer starken Erhöhung der Ausbreitungsgeschwindigkeit, da die Bewegung der Flammenfront nicht mit der Behälterachse übereinstimmt.

Bei der Simulation mit Peters Le1L dagegen breitet sich die Flamme entlang der Mittelachse aus (siehe Abb. 8.34). Entsprechend sind die berechneten Ausbreitungsgeschwindigkeiten deutlich kleiner als im Experiment.

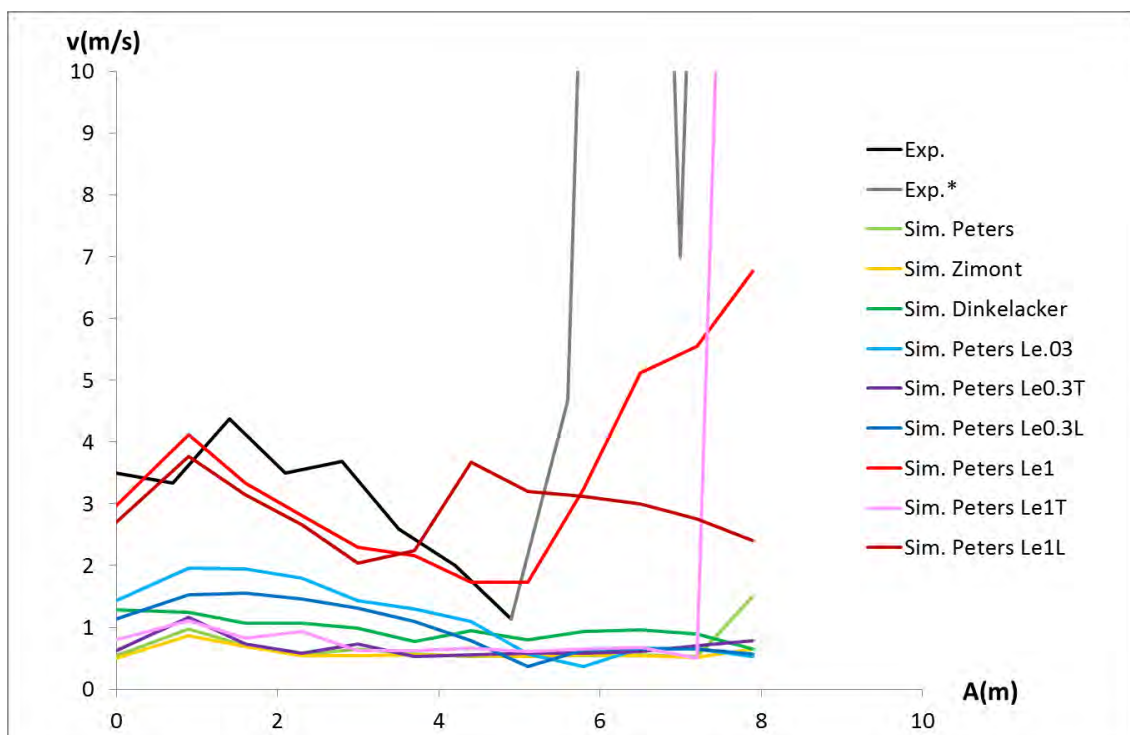
Die Bewertung der Simulationen mit Peters Le1 und Peters Le1L hängt auch davon ab, ob davon ausgegangen wird, dass die Ursache der seitlichen Flammenausbreitung im Experiment die Wechselwirkung der Flamme mit akustischen Wellen war oder ob dies eher auf turbulente Effekte zurückzuführen ist. Falls die Ursache turbulente Effekte waren, so zeigt die Simulation mit Peters Le1 eine deutlich bessere Übereinstimmung, insbesondere wenn berücksichtigt wird, dass die RANS-Simulation nur gemittelte Größen berechnet. Für einen quantitativen Vergleich wäre ein Mittel aus mehreren Wiederholungsexperimenten heranzuziehen, da es sich um stochastische Prozesse handelt. Falls aber akustische Wellen die Ursache für das Verhalten sind, so ist klar, dass dieser Prozess wegen dem Fehlen entsprechender Modell von keiner Simulation korrekt beschrieben werden kann. Die bessere Übereinstimmung mit Peters Le1 in der 2. Hälfte des Experiments ist dann nicht zwangsläufig auf die genauere physikalische Modellierung zurückzuführen.



**Abb. 8.29** CFD-Gitter bei Simulation von HD-10

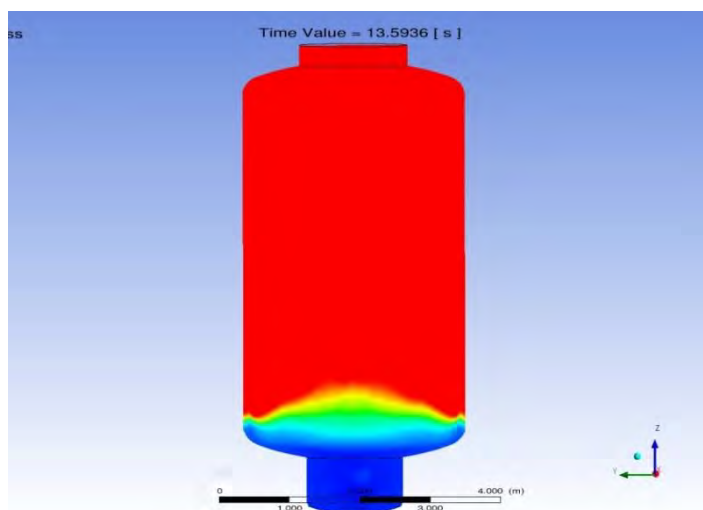
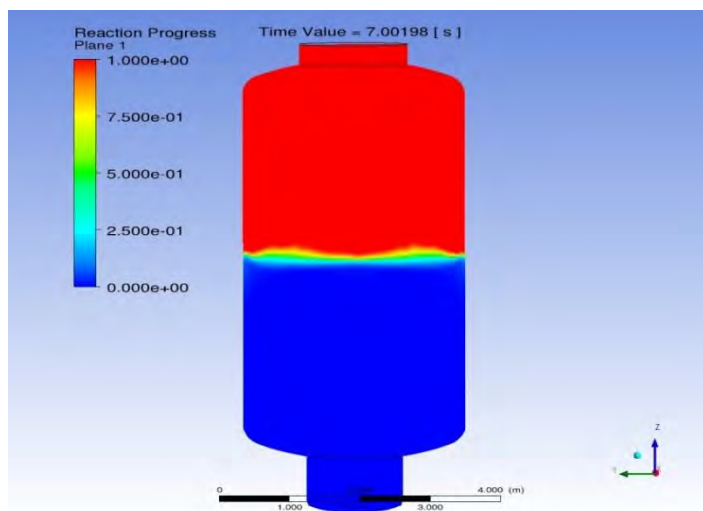
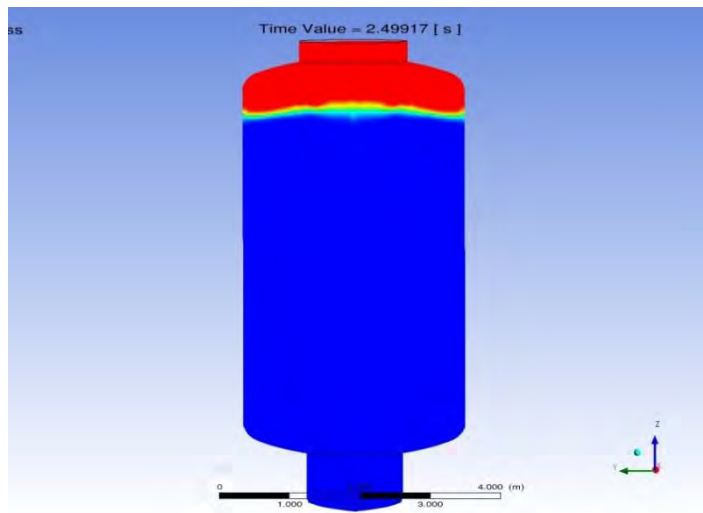


**Abb. 8.30** Druckverlauf im Experiment und in Simulationen mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit

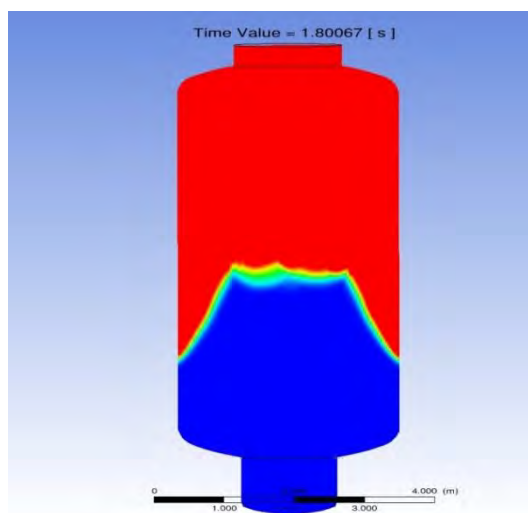
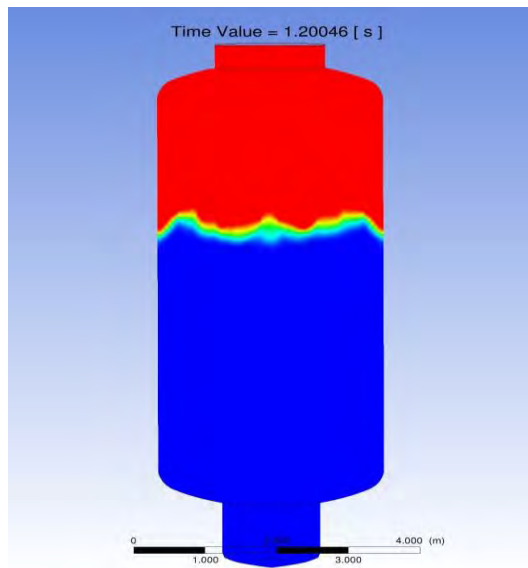
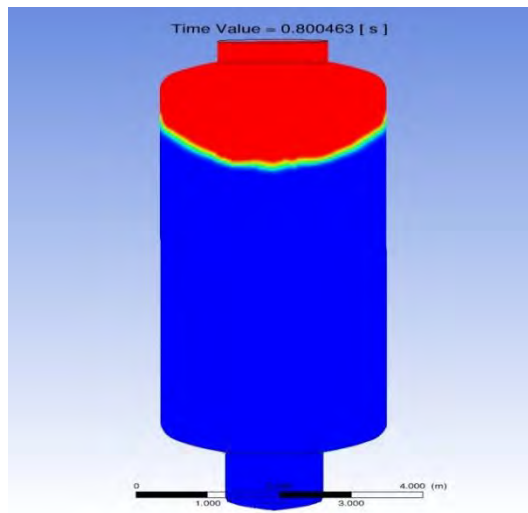


**Abb. 8.31** Flammenausbreitungsgeschwindigkeit über dem Abstand vom Zündort



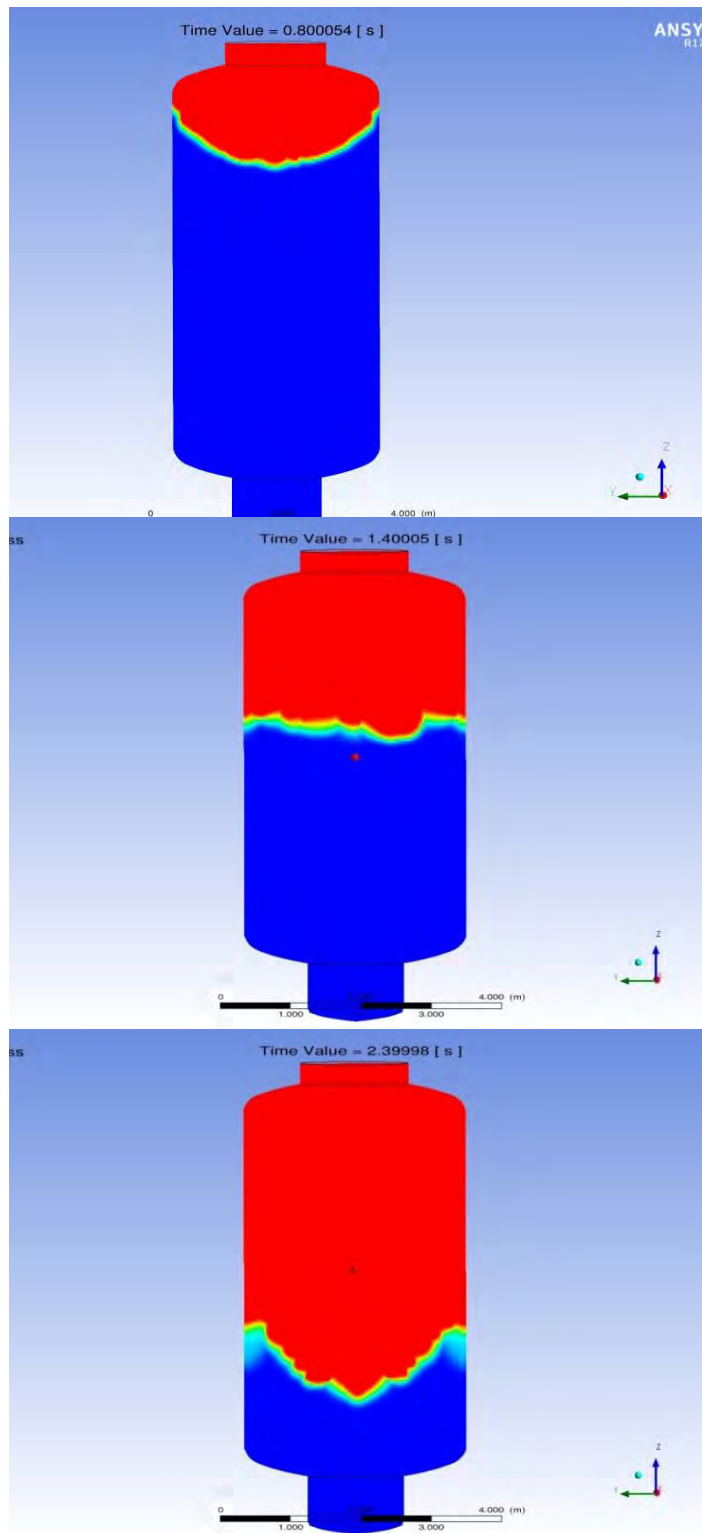


**Abb. 8.32** Reaktionsfortschritt nach  $t = 2.5$  s, 7 s und 13.5 s bei der Simulation des HD-10-Experiments mit der Peters-Korrelation



**Abb. 8.33** Reaktionsfortschritt nach  $t = 0.8$  s,  $1.2$  s und  $1.8$  s bei der Simulation des HD-10-Experiments mit der Peters Le1





**Abb. 8.34** Reaktionsfortschritt nach  $t = 0.8$  s, 1.4 s und 2.4 s bei der Simulation des HD-10-Experiments mit der Peters Le1L

### **8.6.3 Zusammenfassung HD-10**

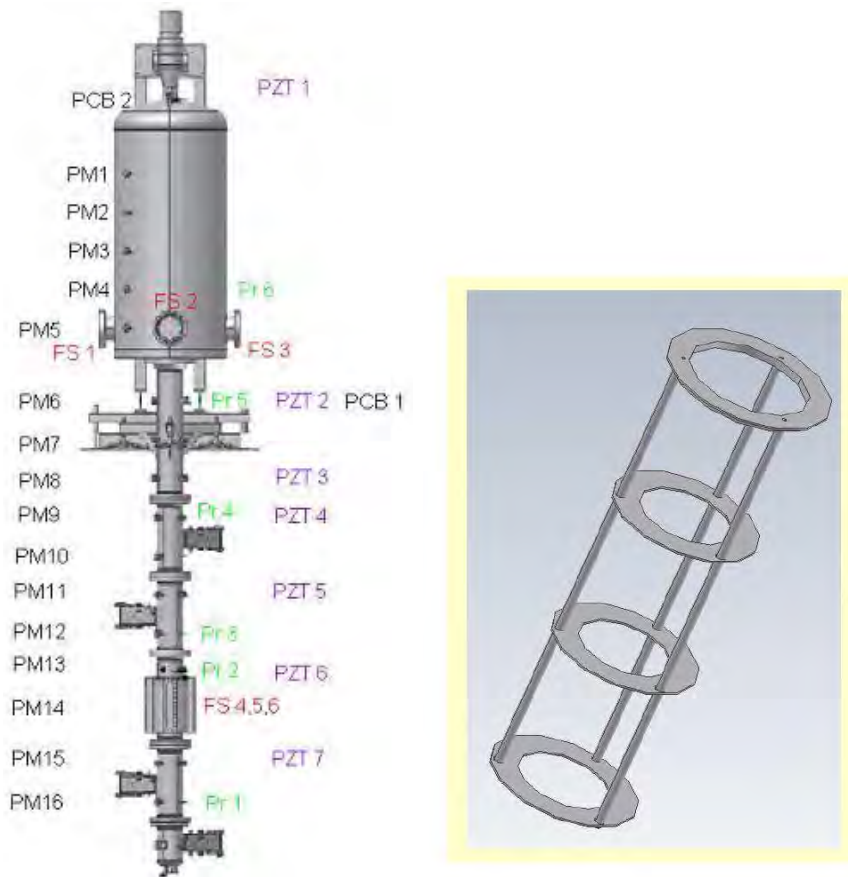
Bei der Simulation von HD-10 konnte mit den Korrelationen Peters Le1 und Peters Le1L das Experiment in guter Übereinstimmung nachgerechnet werden, wobei die Übereinstimmung bei Peters Le1 noch etwas besser ist. Auch wenn nicht alle Details exakt berechnet werden, so entspricht der Druckanstieg in etwa dem im Experiment. In der oberen Behälterhälfte entspricht die simulierte Flammenausbreitungsgeschwindigkeit mit einer tendenziellen Unterschätzung der im Experiment. In der unteren Behälterhälfte erfolgt die Flammenausbreitung im Versuch nicht mehr entlang der Mittelachse, sondern die Flamme erreicht eine gegebene Höhe zuerst auf einer Seite (E-Linie). Deshalb ist die Auswertung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittellinie im unteren Bereich nur bedingt sinnvoll. Der Grund für dieses Verhalten ist nicht abschließend geklärt. Bei Peters Le1 erfolgt im unteren Bereich ebenfalls zuerst eine seitliche Ausbreitung, wobei aber die Achsensymmetrie erhalten bleibt. Es bleibt offen, ob dies die gleichen physikalischen Gründe hat wie die asymmetrische seitliche Flammenausbreitung im Experiment.

Die Peters- und die Zimont-Korrelation berechnen eine deutlich zu langsame Verbrennung. Sowohl der Druckanstieg wie auch die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit werden um einen Faktor 4 – 5 unterschätzt. Die Dinkelacker-Korrelation erzielt eine etwas bessere Übereinstimmung, die Verbrennungsgeschwindigkeit wird aber auch bei dieser Korrelation um einen Faktor 2 – 3 unterschätzt.

## **8.7 ENACCEF**

### **8.7.1 Versuchsbeschreibung**

Beim hier simulierten ENACCEF-Experiment wird 13 Vol.-%  $H_2$  in Luft verbrannt. Zu Beginn liegen 1 bar Druck und Raumtemperatur vor. Der ENACCEF-Versuchsstand besteht aus einem 3.3 m langen Beschleunigungsrohr mit einem Innendurchmesser von 0.154 m und einem 1.7 m langen Dom mit einem Innendurchmesser von 0.74 m (siehe Abb. 8.35, links).

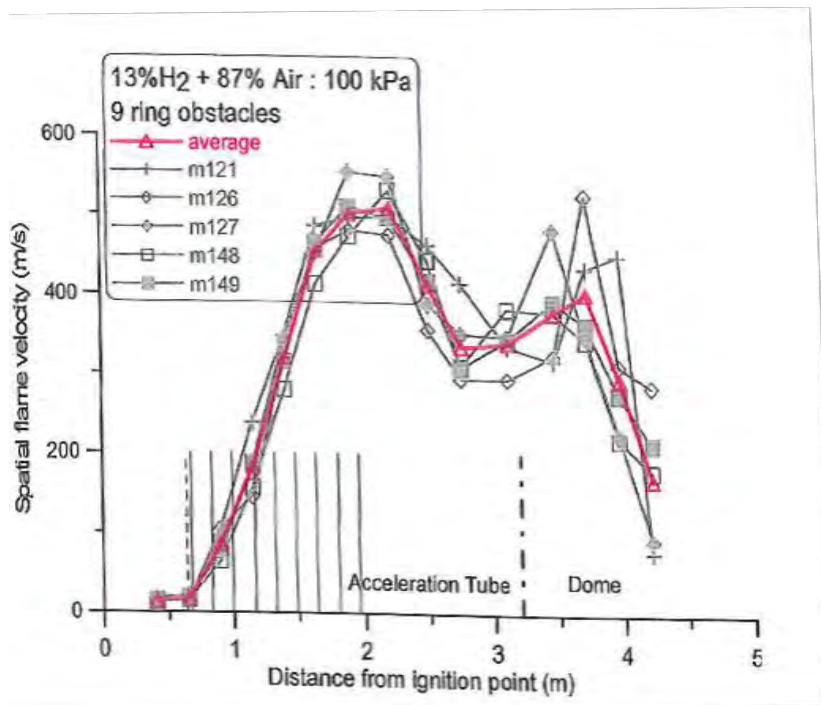


**Abb. 8.35** Links: Skizze des ENACCEF-Versuchsstands mit Position der Messstellen. Rechts: Geometrie der Hindernisse, die ins Beschleunigungsrohr eingebracht wurden /BEN 11/

In das Beschleunigungsrohr wurden neun Hindernisse (Abb. 8.35, rechts) eingebracht. Das erste Hindernis befand sich 0.638 m oberhalb des Zündortes, der Abstand zwischen den Hindernissen betrug 0.154 m und die Blockierrate (blockage ratio BR) 0.63. Die Blockierrate BR ist wie folgt definiert:

$$BR = 1 - \left(\frac{d}{D}\right)^2$$

Dabei ist d der Innendurchmesser des Hindernisses und D der Innendurchmesser des Beschleunigungsrohres. Die Zündung fand im Beschleunigungsrohr in 0.138 m Höhe statt.

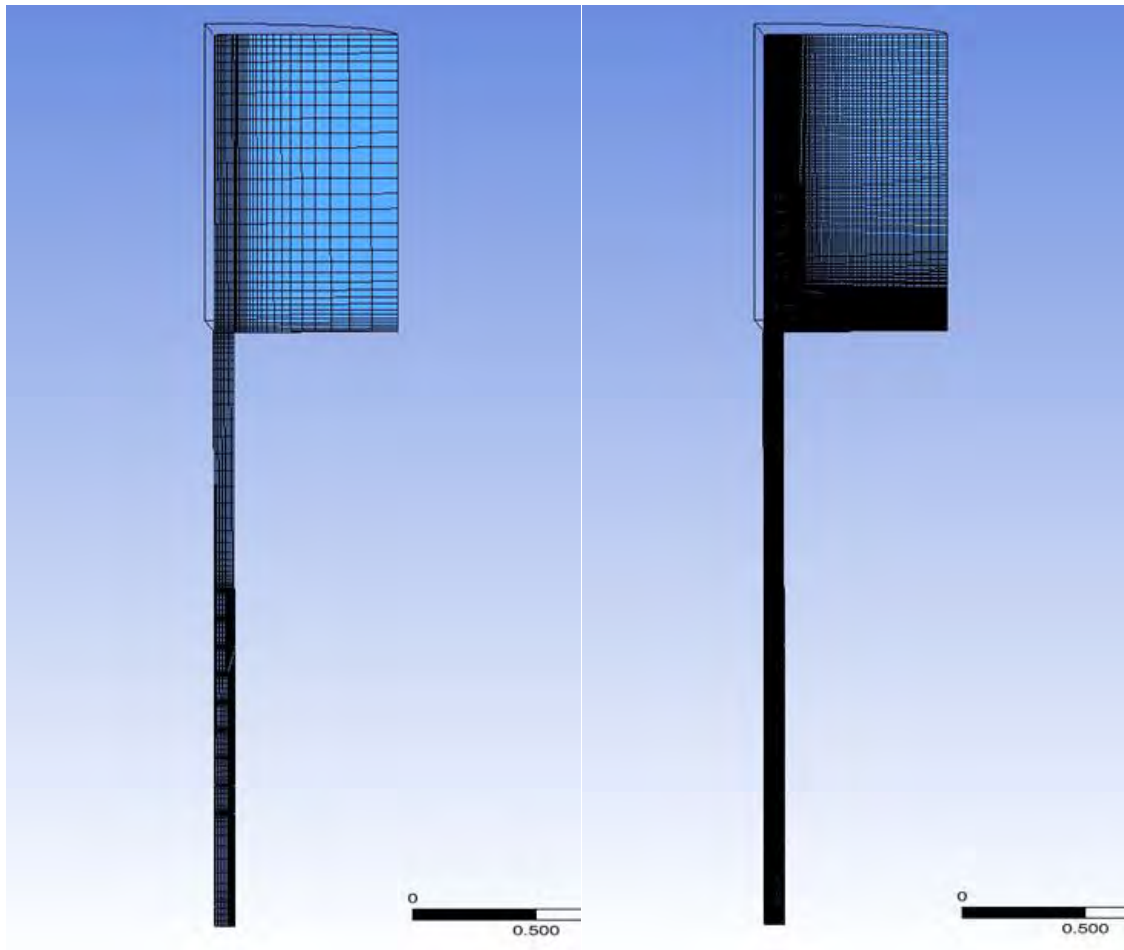


**Abb. 8.36** Experimentelle Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei Wiederholung des Versuchs /BEN 04/

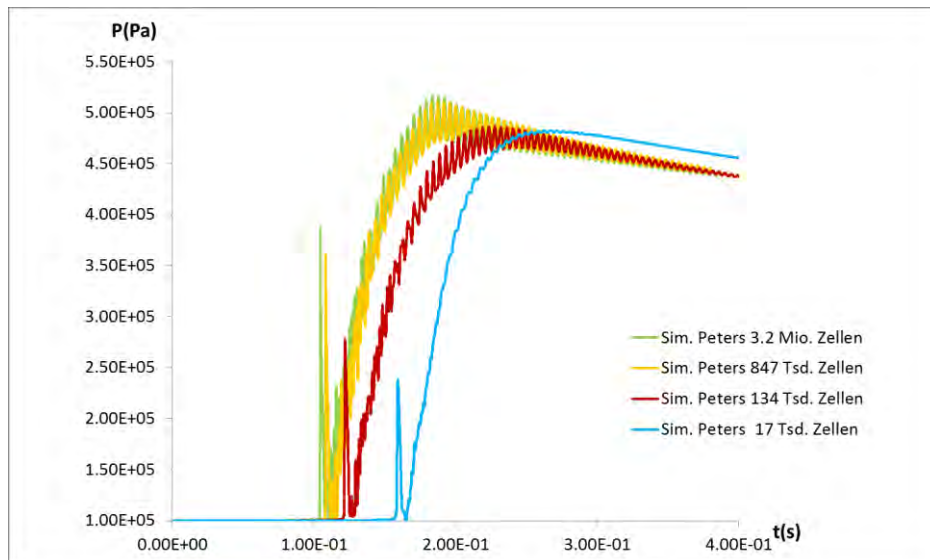
### 8.7.2 Gitterstudie

Bei der Simulation des ENACCEF-Experiments wird ein strukturiertes Gitter verwendet. Im Bereich des Beschleunigungsrohres – insbesondere an den Hindernissen – findet eine lokale Gitterverfeinerung statt. Bei der Simulation wird die Achsensymmetrie des Experiments ausgenutzt und es wird nur ein Viertel des ENACCEF-Behälters simuliert. Dies entspricht dem Ansatz, der im vorhergehenden CFD-Projekt verfolgt wurde /SCH 15/. Um den Einfluss der räumlichen Diskretisierung auf das Simulationsergebnis zu untersuchen, wurden Simulationen mit vier unterschiedlich feinen Gittern (17 000 Zellen bis 3.2 Millionen Zellen) durchgeführt (siehe Abb. 8.37). In Abb. 8.38 ist der Druckverlauf in Abhängigkeit vom verwendeten CFD-Gitter dargestellt. Mit zunehmender feinerer Diskretisierung erfolgt der Druckanstieg früher. Die Höhe des kurzzeitigen Druckpeaks nimmt bei einem feineren Gitter zu. Die Simulationen mit den beiden feinsten Gittern zeigen nur noch geringe Abweichungen voneinander. Die Auswertung der Flammenankunftszeit entlang der Mittelachse zeigt, dass bei einem groben Gitter die maximale Geschwindigkeit bei einer höheren Position erreicht wird, die Beschleunigung an den Hindernissen ist schwächer (Abb. 8.39). Die Maximalgeschwindigkeit erhöht sich dagegen nur moderat mit zunehmender Gitterfeinheit.

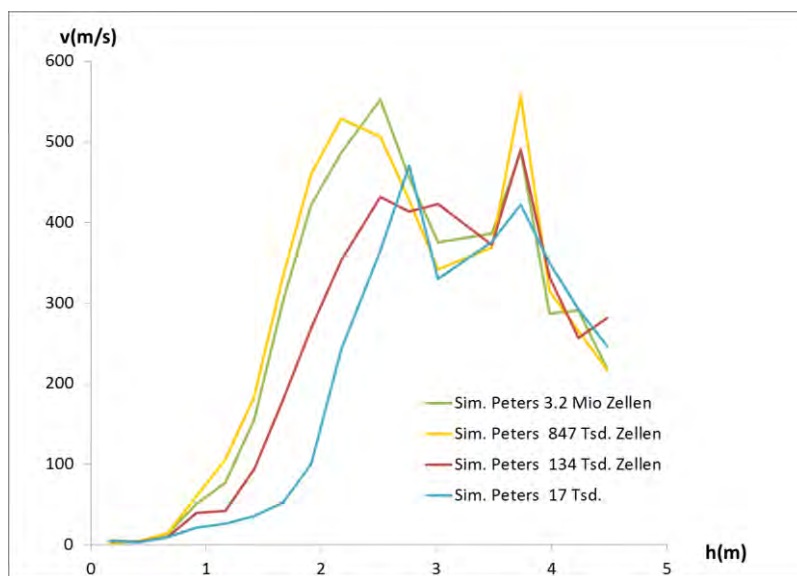
Die Gitterstudie zeigt, dass zwar keine komplett gitterunabhängige Lösung gefunden werden konnte, die Abweichungen bei Druck und Flammenausbreitungsgeschwindigkeit sind aber zwischen dem Gitter mit 3.2 Millionen Zellen und dem mit 847 Tausend Zellen gering. Um die Diskretisierungsfehler zu minimieren, wird für den Vergleich mit experimentellen Daten und die Parameterstudie zum Einfluss der Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit das feinste CFD-Gitter verwendet.



**Abb. 8.37** CFD-Gitter bei der Simulation des ENACCEF-Versuchs: links: Gitter mit 17 Tausend, rechts: Gitter mit 3.2 Millionen. Zellen



**Abb. 8.38** Druckverlauf bei unterschiedlich feiner räumlicher Diskretisierung



**Abb. 8.39** Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei unterschiedlich feiner räumlicher Diskretisierung

### 8.7.3 Simulationsergebnisse

Mit der Zimont-Korrelation konnte die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden, Abb. 8.40. Die Beschleunigung der Flamme im Bereich der Hindernisse wird in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Die maximale Geschwindigkeit am Ende der Beschleunigung wird um etwa 10 % überschätzt. Sie liegt damit fast noch im Bereich der experimentel-

len Schwankungen (Abb. 8.36). Die Verringerung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit nach den Hindernissen wird ebenfalls richtig berechnet. Es wird eine Beschleunigung der Flamme nach Eintritt in den Dome simuliert, die allerdings um etwa 20 % stärker ist als im Experiment. Beim Vergleich mit dem Experiment ist zu beachten, dass nicht nur die Höhe sondern auch die Position des Maximums in den einzelnen Experimenten variiert. Für den Domebereich streuen die experimentellen Werte erheblich, so dass der zum Vergleich hinzugezogene Mittelwert nur bedingt quantitativ aussagekräftig ist. Tendenziell kann aber von einer Überschätzung in der Simulation ausgegangen werden.

Die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit, die mit der Peters-Korrelation berechnet wird, passt ebenfalls gut zu den Messwerten. Im Bereich der Hindernisse erfolgt die Flammenbeschleunigung etwas später als im Experiment und mit der Zimont-Korrelation. Dadurch ist das Geschwindigkeitsmaximum leicht zu einer größeren Höhe im Beschleunigungsrohr verschoben. Der Maximalwert ist aber nahezu mit dem bei Verwendung der Zimont-Korrelation identisch und liegt damit etwas oberhalb des experimentellen Werts. Die Flammenverlangsamung nach den Hindernissen wird richtig simuliert, ebenso die Flammenbeschleunigung nach Eintritt in den Dome. In diesem Bereich liegt sie zwar auch noch oberhalb des experimentellen Mittelwertes, allerdings noch im Bereich der experimentellen Schwankungen.

Die Simulation mit der Dinkelacker-Korrelation konnte die Flammenbeschleunigung durch die Hindernisse nicht richtig simulieren. Die Beschleunigung der Flamme durch die Hindernisse war bei dieser Simulation deutlich zu schwach. Sie lag mit etwa 200 m/s nur bei etwa 40 % des experimentellen Wertes. Im Bereich des Domes wurde die Ausbreitungsgeschwindigkeit zwar in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet, da aber die vorherige Flammenbeschleunigung an den Hindernissen mit anschließender Flammenverlangsamung nicht richtig simuliert wurde, ist die Simulation mit der Dinkelacker-Korrelation als nicht erfolgreich zu werten.

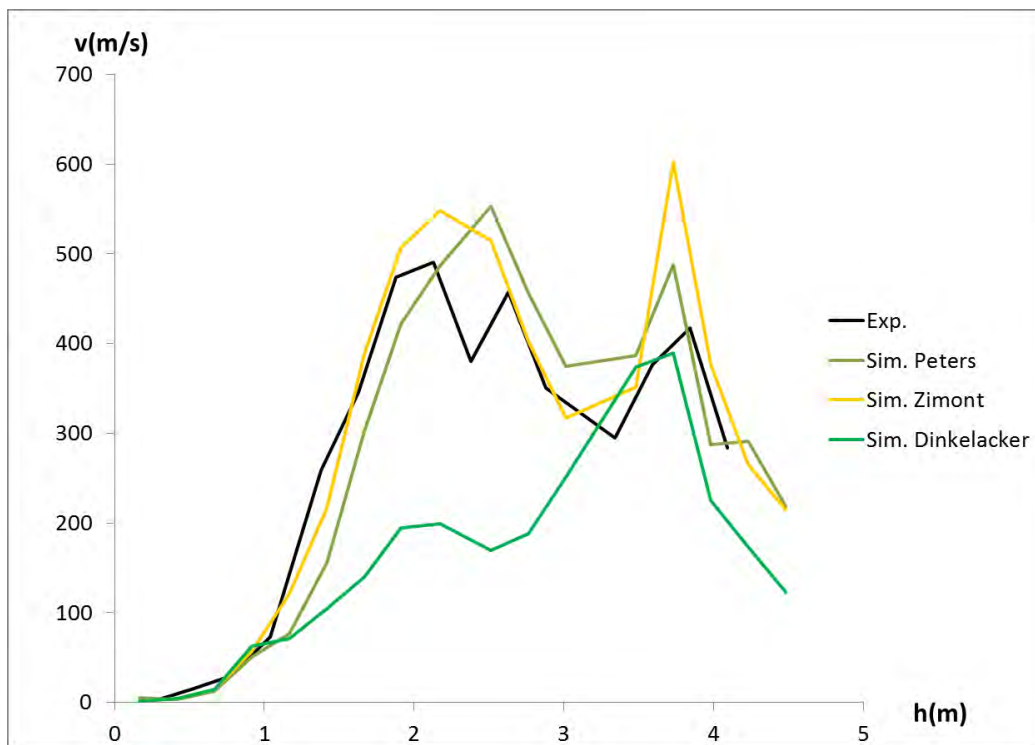
Die Simulationen mit den Korrelationen Peters Le03, Peters Le03L und Peters Le03T sind in der Lage, den Verlauf der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit richtig zu berechnen (Abb. 8.40). Die Beschleunigung im Bereich der Hindernisse wird bis zu einer Höhe von 1.5 m in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Für diesen Bereich ist die Übereinstimmung sogar etwas größer als bei der Peters-Korrelation, bei der die Flammenbeschleunigung zu spät einsetzt. Danach erfolgt in den Simulationen eine schnellere Flammenausbreitung, wobei die Korrelation Peters Le0.3L noch die

beste Übereinstimmung erzielt. Bei den drei modifizierten Peters-Korrelationen ist das Geschwindigkeitsmaximum an der richtigen Position. Der absolute Wert ist allerdings höher als im Experiment, die Überschätzung beträgt zwischen 35 % (Peters Le0.3L) und 50 % (Peters Le0.3). Die Flammenverlangsamung nach den Hindernissen und die Beschleunigung der Flamme nach Eintritt in den Dom wird von den Simulationen richtig beschrieben, wobei der Absolutwert der Geschwindigkeit überschätzt wird. Bei den Simulationen Peters Le1, Peters Le1T und Peters Le1L wird die Flammengeschwindigkeit deutlich überschätzt Abb. 8.41. Bei allen drei Simulationen erfolgt die Flammenbeschleunigung an den Hindernissen deutlich zu schnell. Bei den Simulationen Peters Le1 und Peters Le1T wird die maximale Flammenausbreitungsgeschwindigkeit stark überschätzt. Es findet auch keine Flammenverlangsamung nach den Hindernissen statt. Der Verlauf der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit stimmt bei beiden Simulationen nicht mit dem Experiment überein. Zumindest bei Peters Le1 wird mit einer Geschwindigkeit von über 1400 m/s ein Wert erreicht, der im Bereich einer Detonation liegt. Für DDT ist das hier verwendete Verbrennungsmodell aber nicht gültig. Bis auf die deutlich schnellere Beschleunigung der Flamme an den Hindernissen ist das Simulationsergebnis der Simulation Peters Le1L dem der Simulation Peters Le0.3L sehr ähnlich.

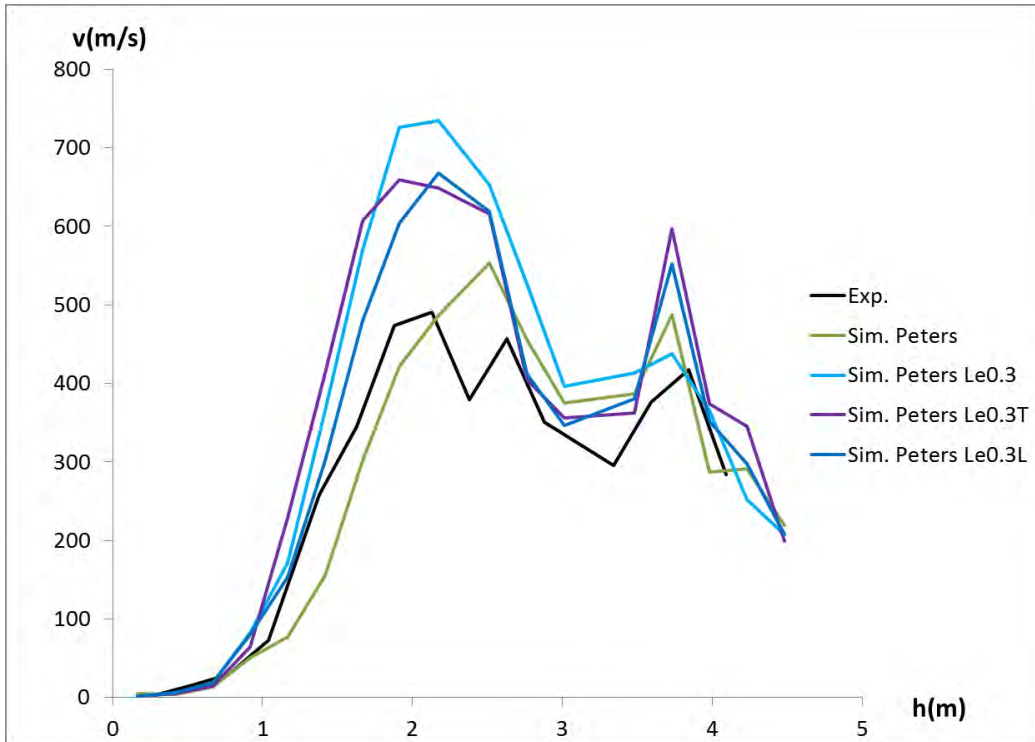
Generell ist der experimentell bestimmte Druckverlauf mit Vorsicht zu verwenden. Neue Untersuchungen an der ENACCEF-Anlage haben gezeigt, dass bei den Drucksensoren u. a. die Art der verwendeten Temperaturabschirmung einen signifikanten Einfluss auf die Höhe des gemessenen Drucks und den Druckabfall hat /GRO 17/. Da die hier verwendeten experimentellen Daten mehrere Jahre vor den Untersuchungen von Grosseuvres et al. stattgefunden haben, ist zu erwarten, dass die gemessenen Drücke systematische Messfehler aufweisen. Der maximale gemessene Druck liegt etwa 0.5 bar unterhalb des von CFX berechneten Maximaldrucks. Der von CFX berechnete Maximaldruck ist abgesehen von den schnellen Druckoszillationen bei allen Simulationen sehr ähnlich. Er liegt knapp unterhalb des AICC-Drucks von 5.135 bar /BEN 17/. Die Stärke der Druckoszillationen ist in den Simulationen von der Geschwindigkeit des Verbrennungsprozesses abhängig. Die Simulation mit der Dinkelacker-Korrelation, die eine deutlich zu langsame Verbrennung simuliert, berechnet nahezu keine Druckoszillationen, während die Simulationen mit sehr schnellen Verbrennungen (z. B. Peters Le1) auch starke Druckoszillationen berechnen. Die Simulationen mit der Zimont- und Peters-Korrelation, die die Flammenausbreitung in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnen, simulieren Druckoszillationen, die mit den gemessenen vergleichbar sind.



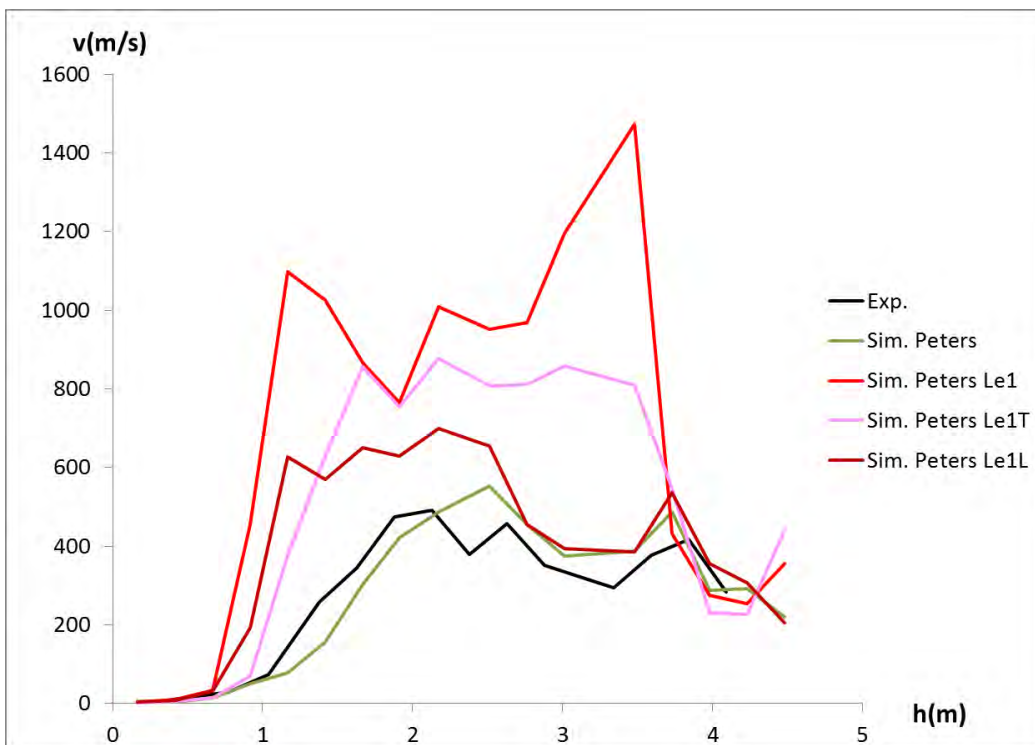
Die Simulationsergebnisse für den kurzzeitigen Druckpeak sind mit denen für die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit konsistent (Abb. 8.43 – Abb. 8.45). Die Höhe des kurzzeitigen Druckpeaks korreliert mit der Flammengeschwindigkeit an der Position der Messstelle ( $h = 3.015 \text{ m}$ ). Simulationen, die die Flammengeschwindigkeit in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnen (Zimont, Peters), simulieren einen Druckpeak, der gut mit der Messung übereinstimmt (Abb. 8.43). Bei der Dinkelacker-Korrelation – die eine zu langsame Verbrennung vorhersagt – ist nahezu kein Druckpeak vorhanden. Simulationen, die die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit etwas überschätzen (z. B. Peters Le0.3, Abb. 8.44), simulieren auch einen etwas höheren Druckpeak. Die Simulation Peters Le1, die teilweise Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten ( $1400 \text{ m/s}$ ) im Bereich einer Detonation berechnet, simuliert auch einen Druckpeak, der mit  $17.7 \text{ bar}$  den experimentellen Wert sehr deutlich übersteigt (Abb. 0 40).



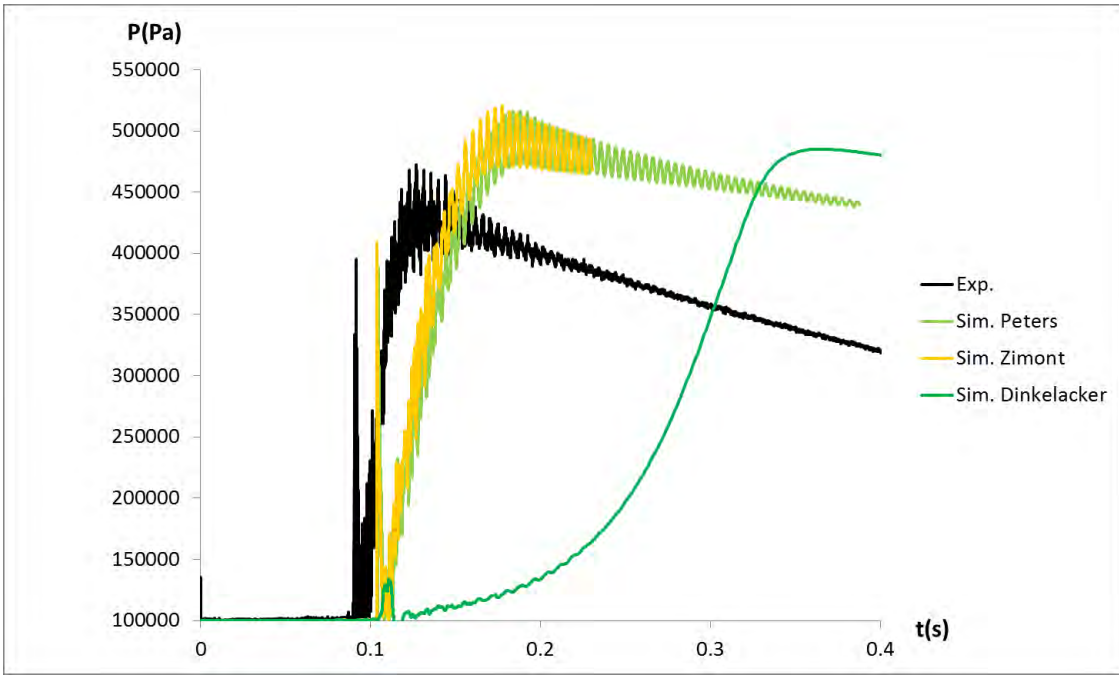
**Abb. 8.40** Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei der Peters-, Zimont- und Dinkelacker-Korrelation



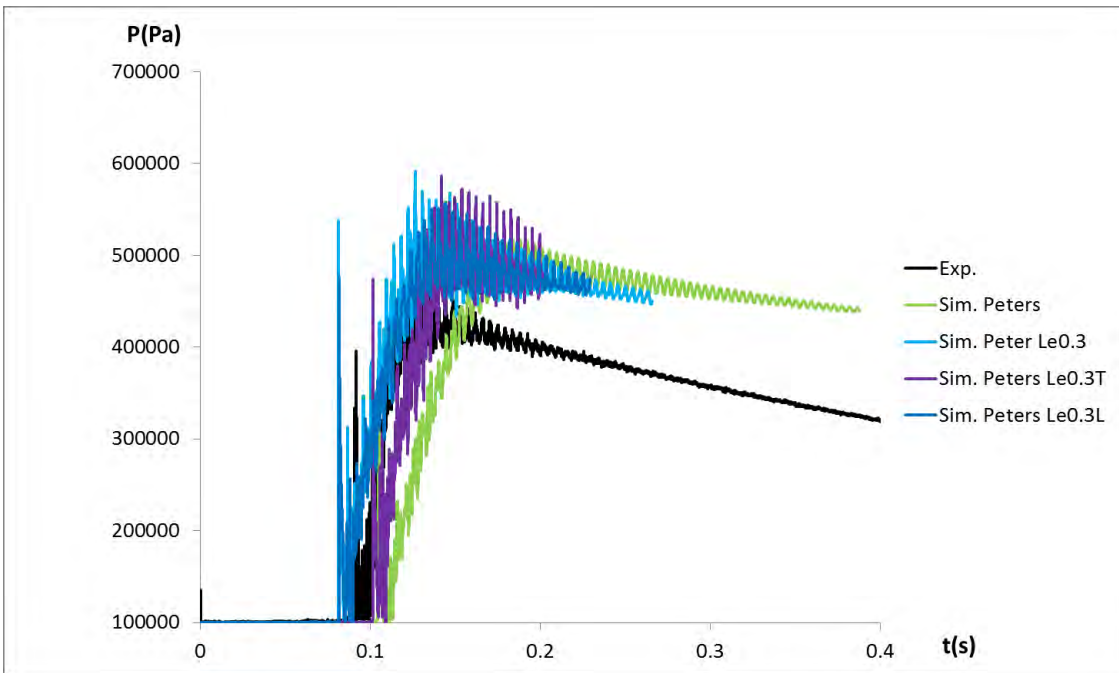
**Abb. 8.41** Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei den Korrelationen Peters, Peters Le0.3, Peters Le0.3T und Peters Le0.3L



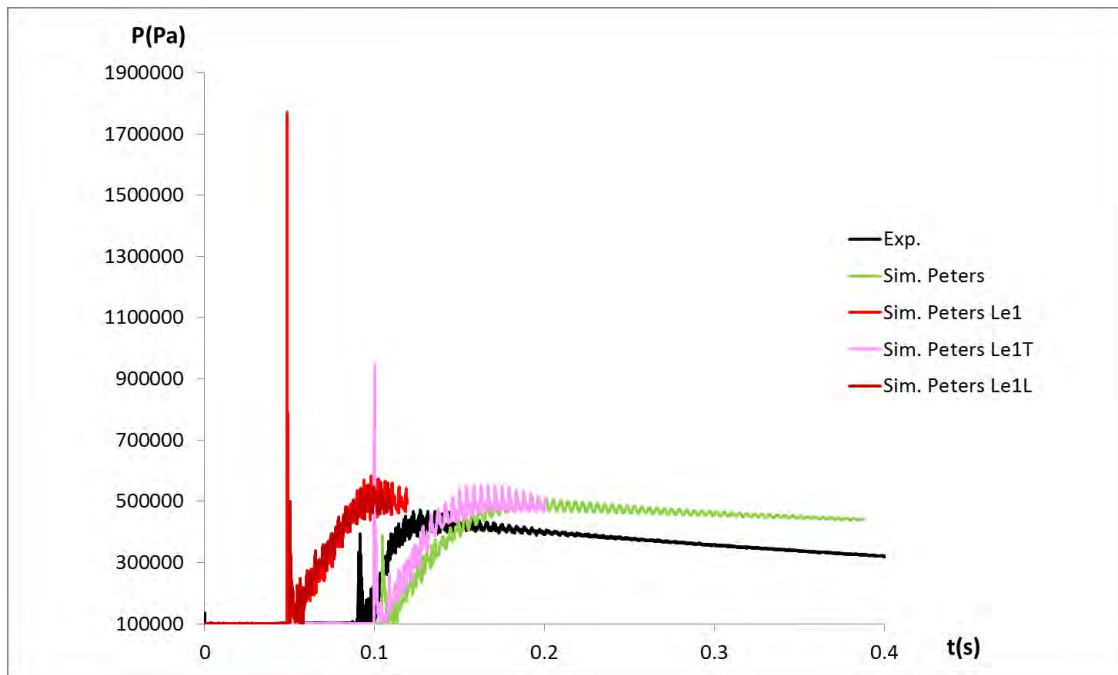
**Abb. 8.42** Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei den Korrelationen Peters, Peters Le1, Peters Le1T und Peters Le1L



**Abb. 8.43** Druck bei der Peters-, Zimont- und Dinkelacker-Korrelation



**Abb. 8.44** Druck bei den Korrelationen Peters, Peters Le0.3, Peters Le0.3T und Peters Le0.3L



**Abb. 8.45** Druck bei den Korrelationen Peters, Peters Le1, Peters Le1T und Peters Le1L

#### 8.7.4 Zusammenfassung

Eine Verbrennung von 13 Vol.-%  $H_2$  in Luft in der ENACCEF-Anlage wurde mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammgeschwindigkeit simuliert. Alle Simulationen berechnen nach Ende der Verbrennung einen Druck, der bis auf Druckoszillationen etwas unterhalb des AICC Drucks liegt. Der im Experiment gemessene Druck ist etwa 0.5 bar niedriger, neuere Untersuchungen an der ENACCEF-Anlage legen aber Zweifel an der Genauigkeit der Druckmessung nahe. Die Simulationen mit der Zimont-Korrelation und der Peters-Korrelation waren in der Lage, die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit und die Höhe des kurzzeitigen Druckpeaks in guter Übereinstimmung mit dem Experiment zu berechnen. Die maximale Geschwindigkeit nach der Beschleunigung an den Hindernissen ist etwas höher als der aus den Wiederholungsexperimenten gemittelte Wert (relativer Fehler etwa 10 %) und liegt nur knapp oberhalb der Streuung der experimentellen Werte. Bei der Peters-Korrelation setzt die Beschleunigung an den Hindernissen etwas später als im Experiment und bei der Zimont-Korrelation ein. Dafür konnte bei der Peters-Korrelation eine etwas bessere Übereinstimmung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit im Domebereich erzielt werden. Die Simulation mit der Dinkelacker-Korrelation war nicht in der Lage, die Flammenausbreitung an den Hindernissen richtig zu berechnen, die Beschleunigung

der Flamme wurde signifikant unterschätzt. Die Simulationen mit den Korrelationen Peters Le0.3, Peters Le0.3L, Peters Le0.3T und Peters Le1L berechnen eine zu starke Beschleunigung der Flamme an den Hindernissen, die Verlangsamung der Flamme nach den Hindernissen und die erneute Beschleunigung nach Eintritt in den Dome wird aber qualitativ richtig berechnet. Die Simulation mit Peters Le0.3L zeigt dabei die beste Übereinstimmung. Bei dieser Simulation ist verglichen mit der Peters-Korrelation sogar eine Verbesserung dahingehend festzustellen, dass die Beschleunigung der Flamme an den Hindernissen nicht mehr verzögert stattfindet und daher das Maximum an der richtigen Position liegt. Die Simulationen mit Peters Le1 und Peters Le1T berechnen eine deutlich zu schnelle Flammenausbreitung, Es findet auch kein Verlangsamen der Flamme nach den Hindernissen mehr statt. Insbesondere Peters Le1 berechnet teilweise Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten im detonativen Bereich (1400 m/s). Entsprechend wird der kurzzeitige Druckpeak mit 17.7 bar stark überschätzt.

## **8.8 ProScience V15**

### **8.8.1 Versuchsbeschreibung**

Der Versuch ProScience V15 wurde im Behälter A3 durchgeführt, in den ein vertikaler Kanal mit einer Querschnittsfläche von 40 cm x 40 cm und einer Höhe von 6 m eingebracht wurde (Abb. 8.46) /FRI 16/. Der Kanal war an einer Seite offen, so dass bei der Verbrennung ein seitliches Venting stattfindet.

In den vertikalen Kanal wurden 16 Hindernisse mit einem Abstand von 25 cm zueinander auf den ersten 4 m nach der Zündung eingebaut. Die unversperrte Reststrecke des Kanals diente als Auslaufstrecke für schnelle Flammen, um die Belastungen der Strukturen möglichst gering zu halten. Ein Hindernis bestand aus 12 waagerechten Balken mit einer Länge von 38 cm und einer Querschnittsfläche von 1.5 cm x 2.5 cm. Diese waren mit ihrer Schmalseite (1.5 cm) senkrecht zur Strömungsrichtung in Abständen von 1.5 cm zueinander angeordnet. Eine gleichmäßige und stabile Verteilung der Balken wurde durch je 4 Abstandshalter (1.5 cm x 1.5 cm x 2.5 cm) erreicht (Abb. 8.46). Die Hindernisse entsprachen einer Blockiertrate von 50 %.

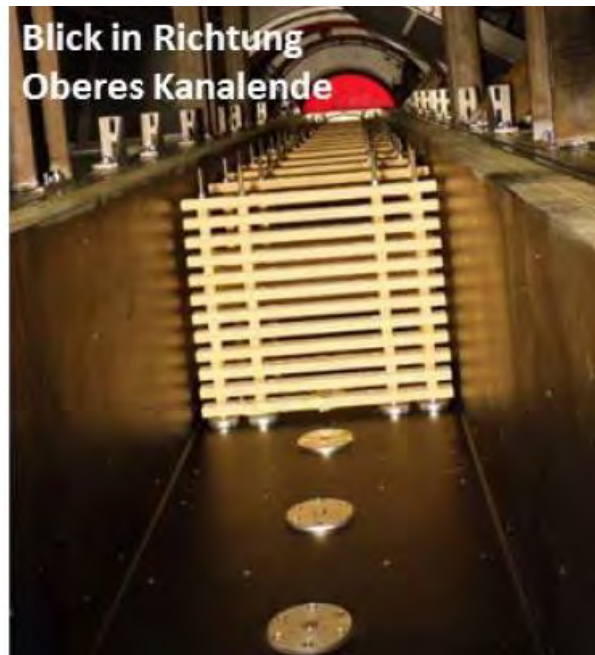
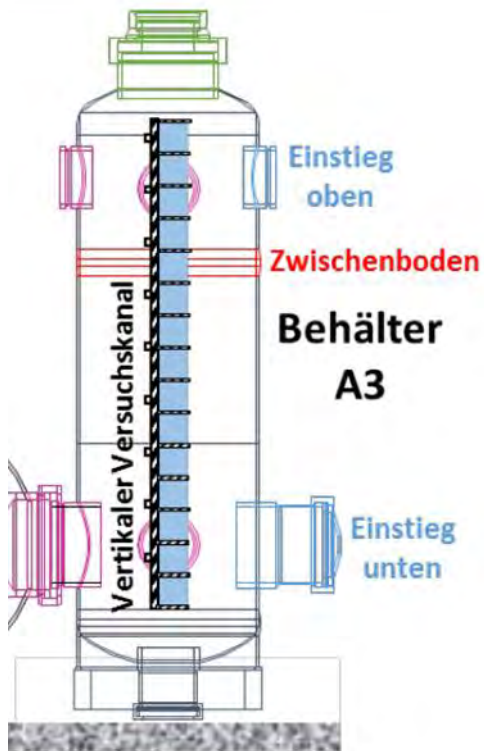
Der vertikale Versuchskanal war bei diesem Versuch mit 12 Vol.-% H<sub>2</sub> in Luft gefüllt. Zu Beginn des Versuchs war die offene Kanalseite durch eine dünne Folie abgetrennt, um ein Entweichen des H<sub>2</sub> zu verhindern. Außerhalb des Versuchskanals befand sich im

Behälter A3 nur Luft. Laut Experimentatoren hatte die Folie keinen signifikanten Einfluss auf den Verlauf der Verbrennung. Der Versuch fand bei Raumtemperatur und Atmosphärendruck statt.

Beim Versuch ProScienceV15 erfolgte die Zündung unten, so dass eine aufwärtsgerichtete Verbrennung stattfand. Als eigentliche Zündquelle diente ein Glühdraht, der mittig in einem perforierten Plastikrohr mit 28 cm Länge und 50 mm Innendurchmesser positioniert war. Die durch die Zündung in der Mitte des Rohres erzeugte Flamme breitete sich zunächst nach beiden Seiten im Rohr aus, entzündet aber durch die Perforierung auch die das Rohr umgebende Gasmischung. Auf diese Weise wurde in den Kanälen eine nahezu planare Flammenfront mit annähernd zweidimensionaler Geometrie erzeugt.

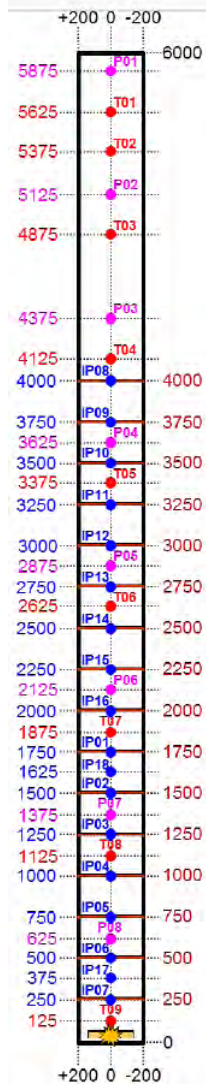
Die Flammenausbreitung wurde durch Ionisationssonden, durch Thermoelemente und durch Drucksensoren detektiert. Die Ionisationssonden befanden sich in 9 cm Abstand von der Seitenwand des Verbrennungskanals, der der offenen Kanalseite gegenüberliegt. Die Thermoelemente und die Drucksensoren befanden sich unmittelbar an dieser Seitenwand (Abb. 8.47). Die Monitorpunkte in der Simulation entsprechen den Positionen der Messsonden (h- und z-Koordinaten).

Ein Vergleich des Volumens des Behälters A3 ( $\sim 33 \text{ m}^3$ ) mit dem Volumen des Verbrennungskanals ( $\sim 0.96 \text{ m}^3$ ) lässt im Fall einer adiabaten, vollständigen Verbrennung nur eine Druckerhöhung um etwa 0.12 bar erwarten. Der an den Drucksensoren gemessene maximale Überdruck liegt zwischen (0.117 bar, P07 und 0.157 bar P03). Es kommt also zu keinen Druckpeaks aufgrund schneller Verbrennungsvorgänge. Beim Vergleich Experiment/Simulation wird im Gegensatz zu den anderen Experimenten kein Vergleich des Druckverlaufs durchgeführt, da es zu keiner signifikanten Druckerhöhung im Experiment kam. Es wird lediglich geprüft, ob auch bei der Simulation keine kurzzeitigen Druckpeaks auftreten. Der exakte Druckverlauf ist nur schwer nachzurechnen, da in A3 zahlreiche Einbauten (Zwischenboden, Verstrebungen (siehe Abb. 8.46, rechts) vorhanden waren, deren Details nicht bekannt sind. Diese verringerten nicht nur das Volumen von A3, sondern sie dienten auch als Wärmesenken.



**Abb. 8.46** Links: Schematische Darstellung des Versuchsaufbaus, rechts: Foto des vertikalen Versuchskanals mit Hindernissen /FRI 16/





Tab. C13: Sensorpositionen bei den Experimenten in Konfiguration 2

Name	Sensor	x [m]	h [m]	z [m]
IP01	Ionisationssonde	0	5.75	0.09
IP02	Ionisationssonde	0	5.5	0.09
IP03	Ionisationssonde	0	5.25	0.09
IP04	Ionisationssonde	0	5.0	0.09
IP05	Ionisationssonde	0	4.75	0.09
IP06	Ionisationssonde	0	4.5	0.09
IP07	Ionisationssonde	0	4.25	0.09
IP08	Ionisationssonde	0	4.0	0.09
IP09	Ionisationssonde	0	3.75	0.09
IP10	Ionisationssonde	0	3.5	0.09
IP11	Ionisationssonde	0	3.25	0.09
IP12	Ionisationssonde	0	3.0	0.09
IP13	Ionisationssonde	0	2.75	0.09
IP14	Ionisationssonde	0	2.5	0.09
IP15	Ionisationssonde	0	2.25	0.09
IP16	Ionisationssonde	0	2.0	0.09
IP17	Ionisationssonde	0	1.625	0.09
IP18	Ionisationssonde	0	0.375	0.09
P01	Drucksensor	0	5.875	0
P02	Drucksensor	0	5.125	0
P03	Drucksensor	0	4.375	0
P04	Drucksensor	0	3.625	0
P05	Drucksensor	0	2.875	0
P06	Drucksensor	0	2.125	0
P07	Drucksensor	0	1.375	0
P08	Drucksensor	0	0.625	0
PU	Drucksensor			
PO	Drucksensor			
T01	Thermoelement	0	5.625	0
T02	Thermoelement	0	5.375	0
T03	Thermoelement	0	4.875	0
T04	Thermoelement	0	4.125	0
T05	Thermoelement	0	3.375	0
T06	Thermoelement	0	2.625	0
T07	Thermoelement	0	1.875	0
T08	Thermoelement	0	1.125	0
T09	Thermoelement	0	0.125	0
TRIG	Triggersignal2			

Abb. 8.47 Messsonden beim Versuch ProScienceV15

### 8.8.2 CFD-Gitter und Gitterstudie

Laut Experimentatoren /FRI 16/ wird durch die Zündung im perforierten Rohr eine nahezu planare Flammenfront erzeugt, die Flammenfront kann deshalb näherungsweise als 2-dimensional angesehen werden. Die Simulationen in RS1500 /SCH 14/ haben gezeigt, dass die Verwendung eines groben Gitters zu einer Unterschätzung der Flammengeschwindigkeit führen kann. Verglichen mit anderen Experimenten (z. B. ENACCEF) ist die Geometrie der Hindernisse komplex. Eine feine Auflösung im Bereich der Hindernisse ist sehr aufwändig. Wie in RS1500 wird deshalb auch bei dieser Versuchsnachrechnung die Näherung einer 2-dimensionalen Geometrie verwendet. In CFX wird dies durch Symmetrieebenen an den Seiten realisiert. Die Geometrie des Behälters A3 ist stark vereinfacht. Dies ist gerechtfertigt, da die Verbrennung im Ver-



brennungskanal und in angrenzenden Bereichen von A3 abläuft, der übrige Behälter dient im Wesentlichen als Expansionsvolumen. Eine 2-dimensionale exakte Abbildung des zylinderförmigen Behälters ist nicht möglich. Da es beim Versuch zu keiner signifikanten Druckerhöhung kam, führt ein kleiner Fehler beim Volumen von A3 zu keinem signifikanten Fehler bei der Modellierung des Verbrennungsprozesses.

Zur Untersuchung des Einflusses des CFD-Gitters wurde eine Parameterstudie mit vier unterschiedlich feinen Gittern durchgeführt (202 008 Zellen, 697 918 Zellen, 2 258 872 Zellen (nur PetersLe06) und 4 870 350 Zellen). In einer ersten Parameterstudie wurde die Peters-Korrelation zur Modellierung der turbulenten Flammengeschwindigkeit verwendet. Im Detail unterschieden sich die Simulationsergebnisse, aber es wird unabhängig vom Gitter eine Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von 1.5 m/s bis 7 m/s berechnet, wobei die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit deutlich schwankt (Abb. 8.48). Sie ist damit um einen Faktor 10 – 20 niedriger als im Experiment (Abb. 8.53). Die Ausbreitungsgeschwindigkeit ist vergleichbar mit der in THAI-HD-Versuchen mit aufwärtsgerichteter Brennrichtung, in denen keine Hindernisse vorliegen. Die Abweichungen bei den Simulationen legen nahe, dass keine gitterunabhängige Lösung gefunden wurde, aber die Gitterstudie liefert keine Hinweise darauf, dass bei einer feineren räumlichen Diskretisierung das Experiment besser getroffen werden kann.

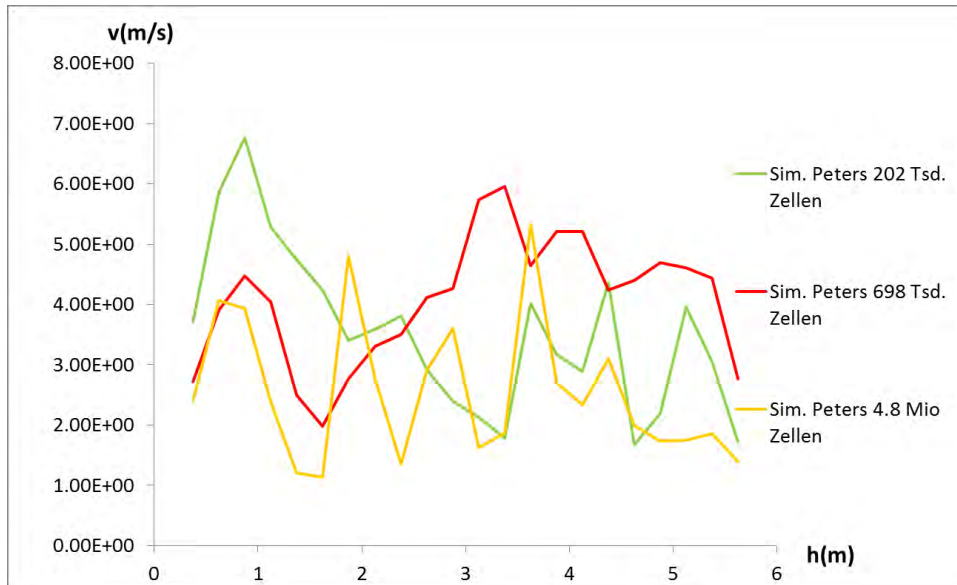
Der Test unterschiedlicher Korrelationen für die laminare Flammengeschwindigkeit hat gezeigt, dass keine in diesem Bericht untersuchten Korrelationen in der Lage sind, den Versuch hinreichend genau zu beschreiben. Mit der Korrelation Peters Le0.6 ist es aber möglich, eine zufriedenstellende Übereinstimmung zu erzielen (siehe Abschnitt 8.8.3). Die Korrelation lautet:

$$s_T^{Le06} = v_{lam}(1 + \sigma_t) Le^{-0.6}$$

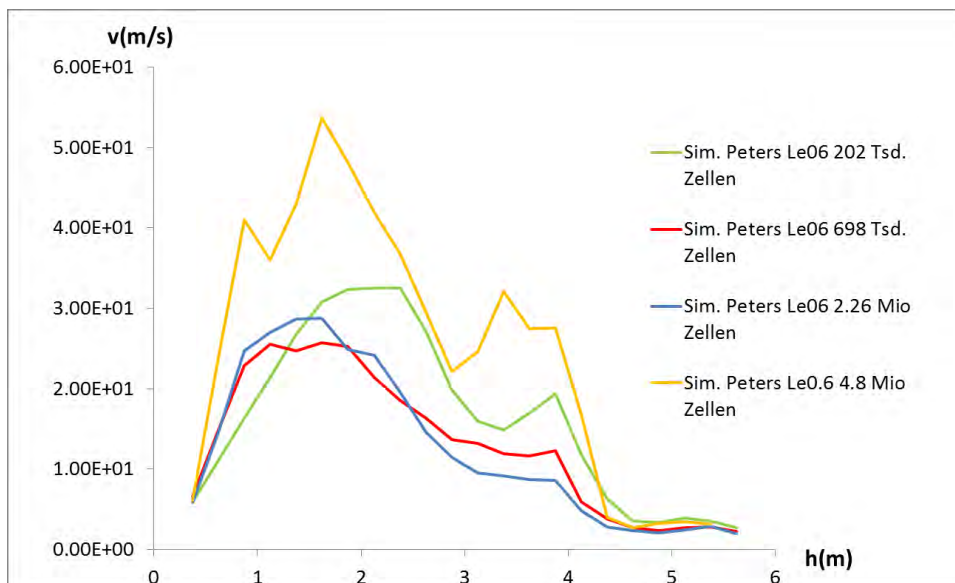
Mit dieser Korrelation wurde die Gitterstudie wiederholt (Abb. 8.49). Mit zunehmender Gitterfeinheit nimmt die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit auf den ersten zwei Metern zu. Im weiteren Verlauf der Verbrennung ist kein eindeutiger Trend auszumachen. Hier macht sich auch die unterschiedliche Vermischung des H<sub>2</sub>-reichen Gases aus dem Brennkanal mit der Luft aus dem umgebenden Behälter bemerkbar. Insbesondere die Simulation mit dem feinsten Gitter (4.87 Mio. Zellen) berechnet eine deutlich schnellere Flammenausbreitung. Die Unterschiede zwischen dem Gitter mit 4.8 Mio.

Zellen und dem mit 2.26 Mio. Zellen sind deutlich größer als bei den vorhergehenden Verfeinerungsschritten.

Insgesamt muss festgestellt werden, dass das Gitter noch einen signifikanten Einfluss auf das Simulationsergebnis hat. Eine weitere Gitterverfeinerung war mit den verfügbaren Ressourcen nicht praktikabel. Die Rechenzeit bei der Simulation mit der Peters-Korrelation und dem feinsten Gitter lag auf 36 CPUs bei etwa 2 Wochen.



**Abb. 8.48** Gitterstudie bei Modellierung der turbulenten Flammengeschwindigkeit mit der Peters-Korrelation



**Abb. 8.49** Gitterstudie bei Modellierung der turbulenten Flammengeschwindigkeit mit der PetersLe0.6-Korrelation

### 8.8.3 Simulationsergebnisse

Vor einem Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten soll der prinzipielle Verlauf der Verbrennung in den Rechnungen diskutiert werden. Exemplarisch ist dieser in den Abbildungen (Abb. 8.50-Abb. 8.52) anhand der Simulation mit der Korrelation Peters Le0.3 dargestellt. Details wie die exakte Form der Flammenfront sind von der verwendeten Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit abhängig, der prinzipielle Verlauf ist aber für die meisten Simulationen ähnlich.

Im Folgenden wird die Seitenwand des Verbrennungskanals, die der offenen Kanalseite gegenüber liegt, als Wand 1 (Koordinate  $z = 0$  m) bezeichnet. In der Anfangsphase ist die Flamme an der Wand 1 etwa genauso weit vorgeschritten wie in der Kanalmitte. An der offenen Seite ist die Flamme sogar etwas weniger weit fortgeschritten, da die Zündquelle, die in der Nähe von Wand 1 liegt, weiter entfernt ist. In dieser Versuchsphase detektieren die Messsonden den Teil der Flamme, der am weitesten fortgeschritten ist (Abb. 8.52, 0.2 s). Im weiteren Verlauf verlagert sich die Spitze der Flammenfront in Richtung der offenen Kanalseite (Abb. 8.51, 0.35 s; 0.45 s). Die Linie der Messsonden/Monitorpunkte entspricht nicht mehr der Richtung der Flammenausbreitung, und die aus den Ankunftszeiten an den Monitorpunkten berechnete Flammenausbreitungsgeschwindigkeit ist nur bedingt aussagekräftig. Dies ist der Grund dafür, dass die Flammengeschwindigkeit teilweise deutlich schwankt. Es treten deshalb teilweise sehr hohe Geschwindigkeiten auf, teilweise wird die Geschwindigkeit sogar negativ, was bedeutet, dass die Flammenfront einen weiter oben liegenden Messpunkt vor dem darunter liegenden erreicht hat. Um diese Effekte abzuschwächen erfolgt bei der Auswertung eine Differenzenbildung über drei Monitorpunkte. Auch im Experiment schwankt die gemessene Flammenausbreitungsgeschwindigkeit teilweise deutlich. Es liegt nahe zu vermuten, dass ähnliche Effekte auch im Experiment aufgetreten sind. Da die Messpunkte alle nahe an der Wand 1 lagen, gibt es im Experiment keine Information über die Position der Flamme in  $z$ -Richtung. Es kann deshalb nicht abschließend geklärt werden, inwieweit die Form der Flammenfront in der Simulation der im Experiment ähnelt.

Zu Beginn der Simulation liegt im Verbrennungskanal eine homogene  $H_2$ -Konzentration von 12 Vol.-% vor, außerhalb befindet sich kein  $H_2$ . In der Anfangsphase bleibt diese Verteilung nahezu erhalten (Abb. 8.50, 0.2 s). Durch die Expansion des heißen Gases und andere physikalische Prozesse (Konvektion, Auftrieb des leichteren  $H_2$ -haltigen Gases, turbulente Vermischung) wird  $H_2$  auch in Bereiche außerhalb des Brennkannals

transportiert und die  $H_2$ -Konzentration im Verbrennungskanal reduziert. Dies betrifft zuerst nur den Grenzbereich an der offenen Kanalseite. (Abb. 8.51, 0.35 s). Im späteren Verlauf gibt es oberhalb der Hindernisse Bereiche, bei denen nur noch in der Nähe der Wand 1  $H_2$  vorhanden ist (Abb. 8.52, 0.75 s). Je nach  $H_2$ -Verteilung findet die Verbrennung in einem Gasgemisch mit deutlich niedrigerer  $H_2$ -Konzentration statt, was zu einer entsprechenden Verlangsamung der Verbrennung führt.

Ein quantitativer Vergleich der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit zeigt (Abb. 8.53 – Abb. 8.55), dass die Simulation von ProScienceV15 von allen im Projekt simulierten Versuchen am anspruchsvollsten war, fast alle Simulationen waren nicht in der Lage, die Flammenbeschleunigung ansatzweise richtig zu berechnen.

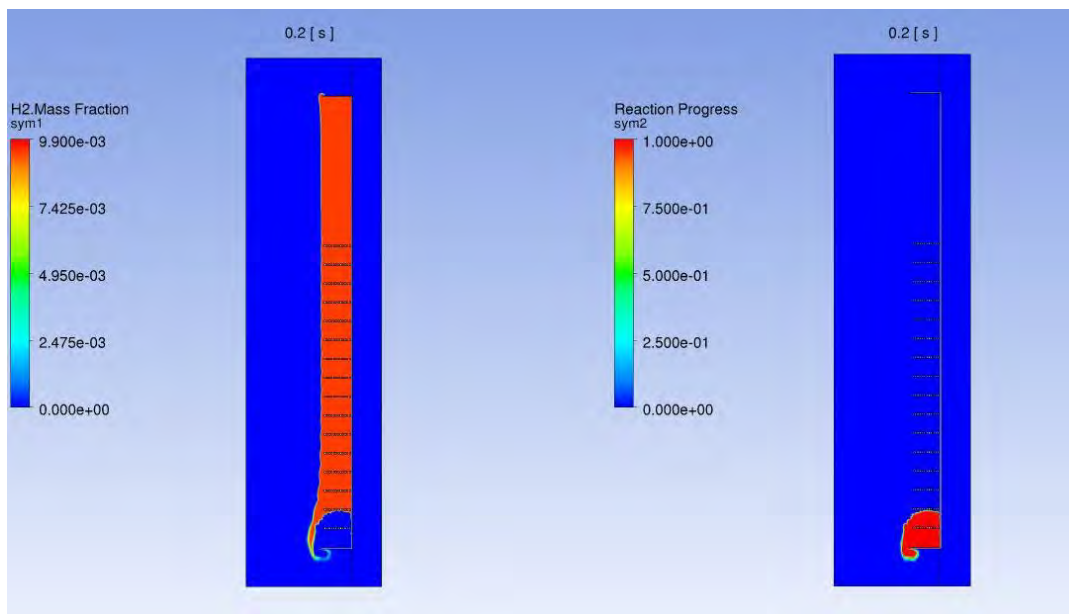
Bei vielen Korrelationen (Peters, Zimont, Dinkelacker, Peters Le0.3L und Peters Le1L) findet keine signifikante Beschleunigung an den Hindernissen statt. Mit den Korrelationen Peters, Zimont und Dinkelacker wird eine Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von 2 m/s – 4 m/s berechnet. Dies entspricht Werten, die auch ohne Hindernisse an der THAI-Anlage bei einer aufwärtsgerichteten Verbrennung (siehe z. B. HD-7, Abschnitt 8.5) simuliert werden. Insbesondere in der Anfangsphase sind die Werte für die Korrelationen Peters Le0.3L (bis zu 7 m/s) und Peters Le1L (bis zu 9.7 m/s) etwas höher, aber auch hier findet keine signifikante Beschleunigung an den Hindernissen statt.

Die Simulationen mit Peters Le0.3 und Peters Le0.3T sind von den in diesem Bericht untersuchten Korrelationen noch am ehesten in der Lage, den Versuch zu simulieren. Zumindest bis zu einer Höhe von 2 m – 3 m findet eine Beschleunigung der Flammenfront auf 16 m/s (Peters Le0.3) bzw. 26.4 m/s (Peters Le0.3T) statt. Der Abfall der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei Le0.3 nach 2 m/s hat damit zu tun, dass sich die Spitze der Flammenfront weg von der Wand 1 mit den Messsonden bewegt. (Abb. 8.52). Der Peak in der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit auf der Höhe 3 m ist darauf zurückzuführen, dass die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme nicht mehr entlang der Messsonden verläuft, sondern in diesem Bereich des Verbrennungskanals auch eine seitliche Verbrennung hin zu den Monitorpunkten stattfindet. Dadurch ist die aus den Ankunftszeiten an den Monitorpunkten berechnete Flammenausbreitungsgeschwindigkeit nicht mehr repräsentativ für den Fortschritt der Verbrennung.

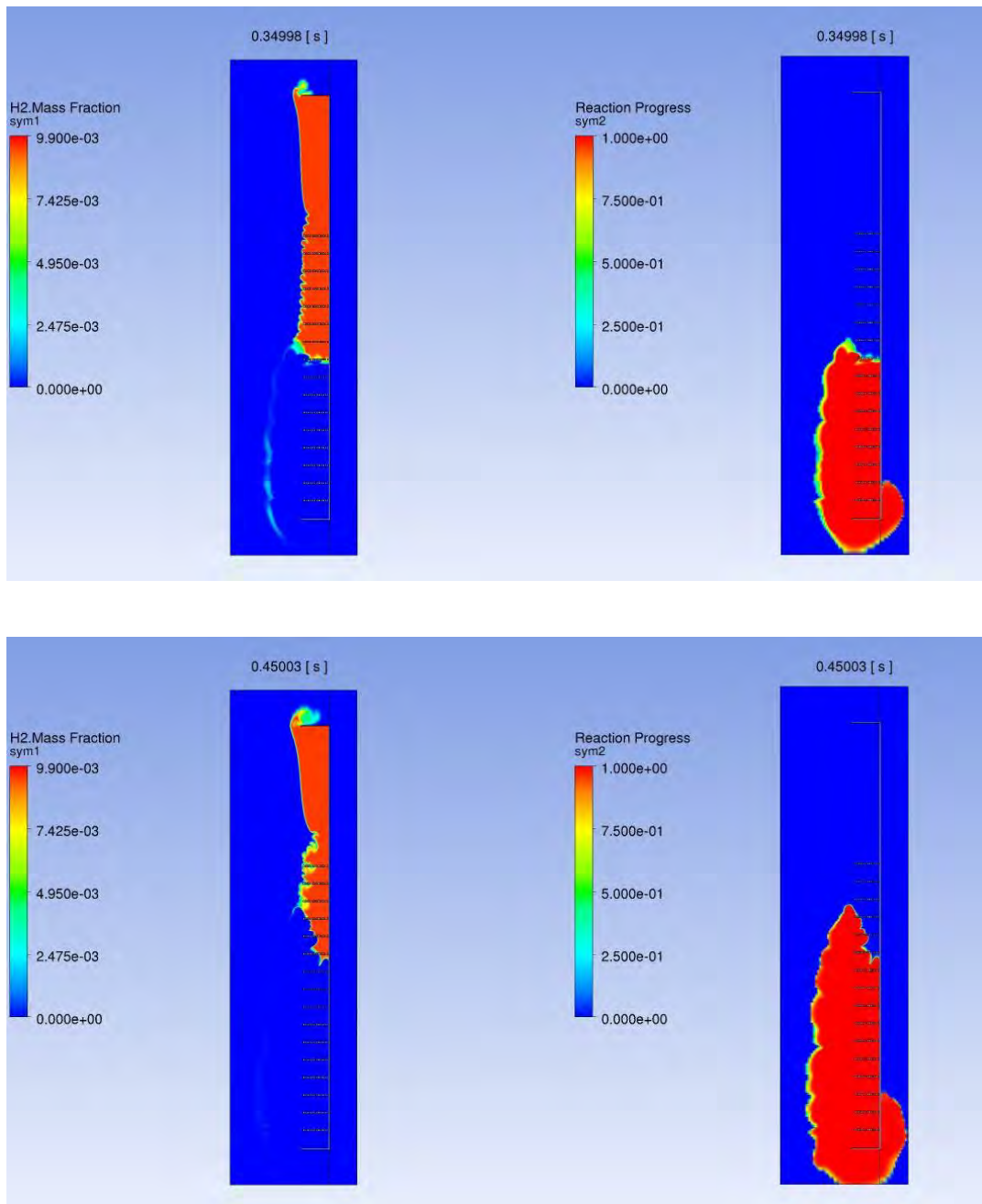
Bei Verwendung der Korrelationen Peters Le1 bzw. Peters Le1T wird die Flammenbeschleunigung signifikant überschätzt. Nach 2 m werden Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten von über 800 m/s – 1200 m/s berechnet. Dies liegt oberhalb der

Schallgeschwindigkeit des verbrannten Gases. Entsprechend werden bei diesen beiden Simulationen auch kurzzeitig Druckpeaks an den Monitorpunkten berechnet. An den Monitorpunkten in der Höhe 2.25 m – 4.25 m werden Druckspitzen von 20 bar – 60 bar berechnet. Bei allen anderen Simulationen treten wie im Experiment keine Druckpeaks auf.

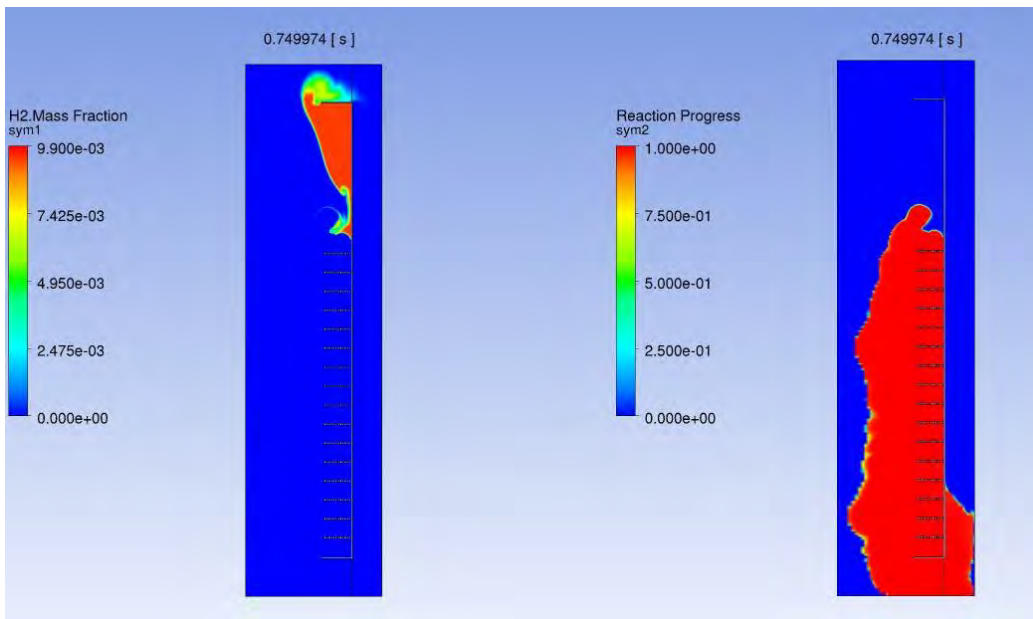
Da die Simulation mit Peters Le0.3 die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit unterschätzt, Peters Le1 dagegen zu einer viel zu schnellen Verbrennung führt, ist es nahe liegend anzunehmen, dass mit einem Exponenten zwischen -1 und -0.3 die Verbrennung besser simuliert werden kann. Es hat sich gezeigt, dass mit der Korrelation Peters Le06 der Versuch zufriedenstellend simuliert werden kann (Abb. 8.54). Mit dieser Korrelation wird die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit leicht unterschätzt.



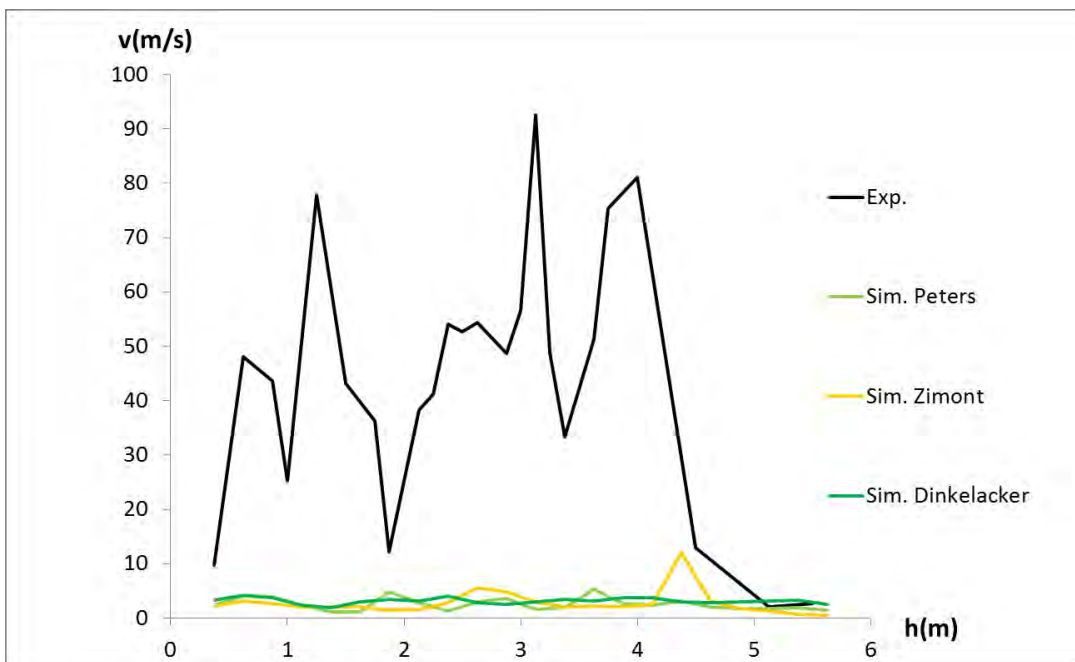
**Abb. 8.50** Zeitlicher Verlauf der Verbrennung bei Simulation mit der Korrelation Peters Le0.3. Links: unverbranntes H<sub>2</sub>, rechts: Reaktionsfortschrittsvariable



**Abb. 8.51** Zeitlicher Verlauf der Verbrennung bei Simulation mit der Korrelation Peters Le0.3. Links: unverbranntes H<sub>2</sub>, rechts: Reaktionsfortschrittsvariable

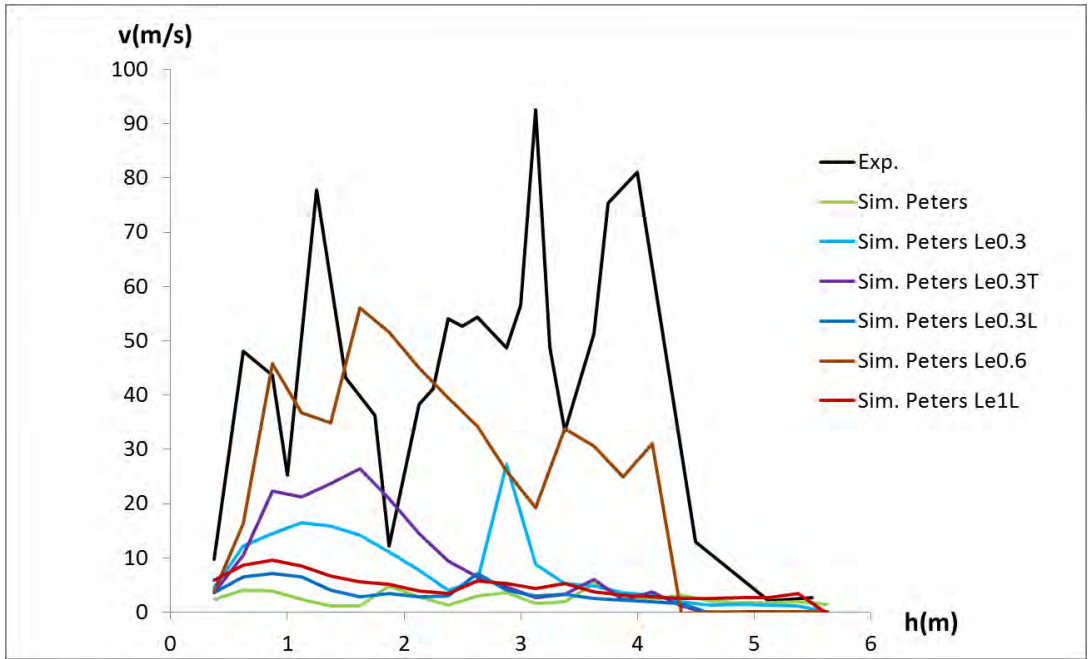


**Abb. 8.52** Zeitlicher Verlauf der Verbrennung bei Simulation mit der Korrelation Peters Le0.3. Links: unverbranntes H<sub>2</sub>, rechts: Reaktionsfortschrittsvariable

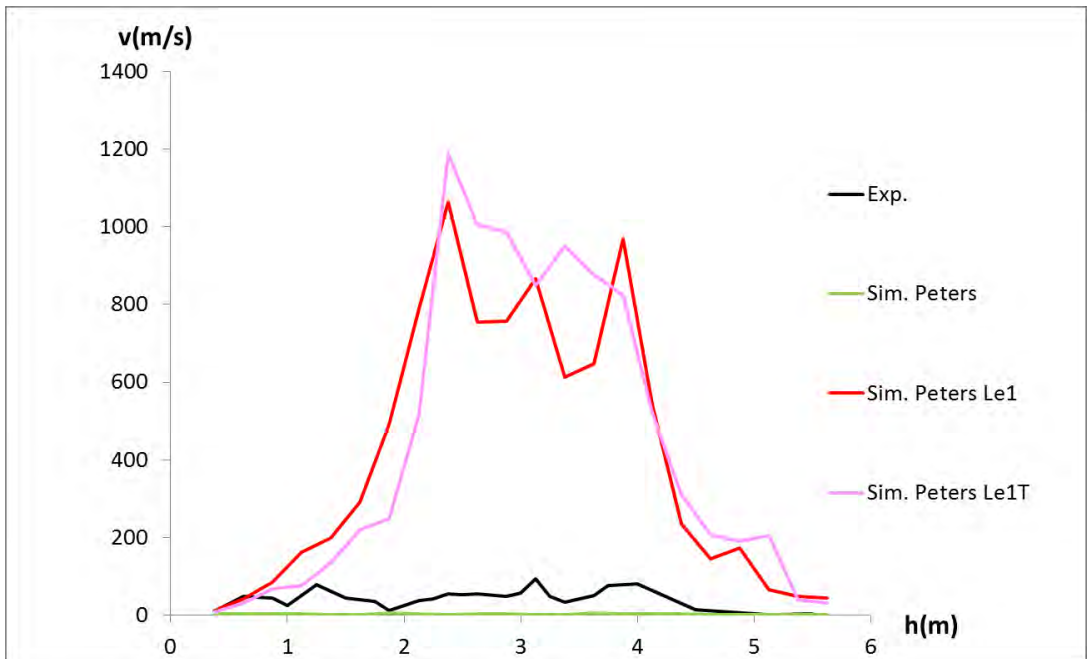


**Abb. 8.53** Flammenausbreitungsgeschwindigkeit im Experiment bei Simulation mit den Korrelationen Peters, Zimont und Dinkelacker





**Abb. 8.54** Flammenausbreitungsgeschwindigkeit im Experiment bei Simulation mit den Korrelationen Peters, PetersLe0.3, Peters Le0.3T, Peters Le0.3L, Peters Le1L und Peters Le0.6



**Abb. 8.55** Flammenausbreitungsgeschwindigkeit im Experiment bei Simulation mit den Korrelationen Peters, Peters Le1 und Peters Le1T



#### 8.8.4 Zusammenfassung ProScience V15

Der Versuch ProScience V15 wurde im Behälter A3 durchgeführt, in den ein vertikaler Kanal mit einer Querschnittsfläche von 40 cm x 40 cm und einer Höhe von 6 m eingebracht wurde. Der Kanal ist an einer Seite offen, so dass bei der Verbrennung ein seitliches Venting stattfindet. In den vertikalen Kanal wurden immer 16 Hindernisse mit komplexer Geometrie (12 waagerechte Balken, 2 vertikale Balken) eingebaut. Dieser Kanal wird mit 12 Vol.-% H<sub>2</sub> gefüllt.

Aus Arbeiten in RS1500 /SCH 14/ ist bekannt, dass ein sehr feines CFD-Gitter benötigt wird, um die ProScience Versuche mit seitlichem Venting zu simulieren. Deshalb wurde auch hier ein 2-dimensionaler Ausschnitt simuliert, in dem an den Seiten Symmetrierandbedingungen gesetzt werden. Trotzdem war es selbst bei einem Gitter von 2.26 Millionen Zellen bzw. 4.8 Millionen Zellen nicht möglich, eine gitterunabhängige Lösung zu erzielen. Hierbei spielt sicherlich auch die komplexe Hindernisgeometrie eine Rolle. Der Versuch wurde mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit berechnet. Ein quantitativer Vergleich der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit zeigt, dass die Simulation von ProScienceV15 von allen im Projekt simulierten Versuchen am anspruchsvollsten war. Fast alle Simulationen waren nicht in der Lage, die Flammenbeschleunigung ansatzweise richtig zu berechnen. Die Korrelationen Peters, Zimont, Dinkelacker, Peters Le0.3L und Peters Le1L simulieren keine signifikante Flammenbeschleunigung an den Hindernissen, die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit liegt weniger als 10 m/s und damit deutlich niedriger als im Experiment (20 m/s – 90 m/s). Die Simulationen mit den Korrelationen Peters Le1 und Peters Le1T berechnen eine viel zu schnelle Verbrennung (bis zu 1000 m/s). Von den im Projekt untersuchten Korrelationen waren Peters Le0.3 und Peters Le0.3T noch am ehesten in der Lage, das Experiment zu beschreiben, aber auch bei ihnen wird die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit deutlich unterschätzt. Mit der Korrelation Peters Le0.6 konnte dagegen das Experiment zufriedenstellend simuliert werden. Die Ergebnisse des ENACCEF-Experiments 13 Vol.-% (schon Peters Le0.3 überschätzt Flammenausbreitungsgeschwindigkeit klar) legen aber nahe, dass es auch mit dieser Korrelation nicht möglich ist, alle Experimente zufriedenstellend zu simulieren.

## 8.9 MITHYGENE-ETSON Benchmark

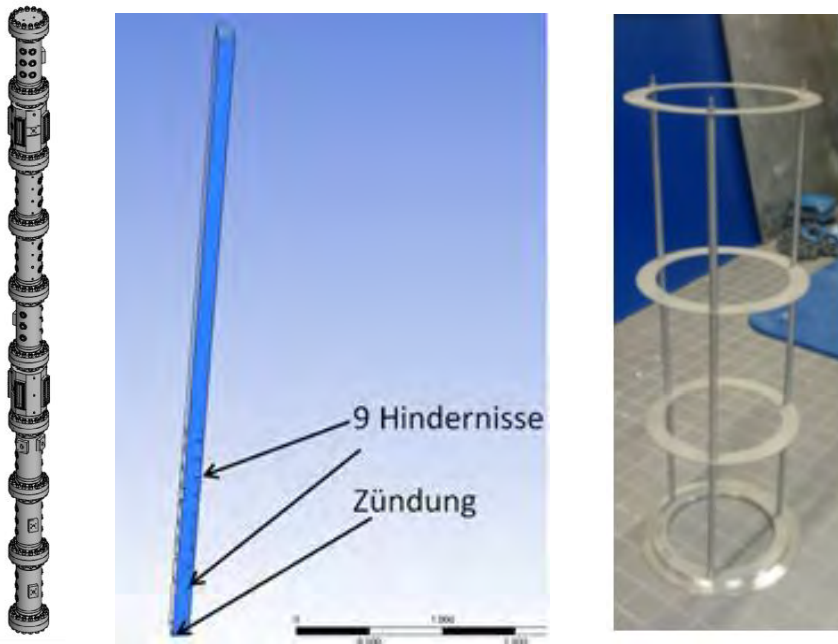
### 8.9.1 Versuchsbeschreibung

Die GRS hat sich mit Nachrechnungen an der offenen Phase des ETSON-MITHYGENE Verbrennungsbenchmarks beteiligt /BEN 17/. Weiterhin ist geplant, sich mit „blinden“ Vorausrechnungen an der 2. Phase des Benchmarks zu beteiligen. Die Abgabefrist für die Simulationsergebnisse ist voraussichtlich Anfang November 2017. Erst danach werden die experimentellen Daten offengelegt und deshalb liegen sie zum Zeitpunkt der Berichtserstellung nicht noch vor.

Die Versuche wurden an der neuen ENACCEF2-Versuchsanlage durchgeführt (Abb. 8.56). Sie besteht aus einem vertikalen Beschleunigungsrohr mit 7.65 m Höhe und einem Innendurchmesser von 0.25 m. Im Rohr befinden sich 9 ringförmige Hindernisse (Abb. 8.56) mit einer Dicke von 2 mm und einer Blockierrate von  $BR = 0.63$ . Das erste Hindernis befindet sich in 0.638 m Höhe, der Abstand zwischen den Hindernissen beträgt 0.23 m.

In der offenen Phase wird die Verbrennung von 13 Vol.-%  $H_2$  in Luft untersucht. In der 2. Phase soll die Verbrennung von 11 Vol.-% und 15 Vol.-%  $H_2$  blind vorausgerechnet werden. Alle Versuche wurden bei Atmosphärendruck und Raumtemperatur durchgeführt.

Bei den Versuchen wurde der absolute Druck an unterschiedlichen Messstellen gemessen. Weiterhin wurde mit UV-sensitiven Photomultipliern und Drucksensoren die Position der Flamme bestimmt. Der Versuch mit 13 Vol.-%  $H_2$  wurde wiederholt, um die Reproduzierbarkeit der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit und des Druckverlaufs zu untersuchen.



**Abb. 8.56** Rechts, Mitte: ENACCEF2 Beschleunigungsrohr, links: ringförmige Hindernisse /BEN 17/

### 8.9.2 Gitterstudie

Wie schon bei den ENACCEF-Versuchsnachrechnungen wurde die Achsensymmetrie ausgenutzt und nur ein Viertel des Beschleunigungsrohres in CFX simuliert (Abb. 8.56, Mitte). Es wurde eine Gitterstudie durchgeführt, bei der vier unterschiedlich feine CFD-Gitter (48.5 Tausend bis 4.5 Millionen Zellen) getestet wurden. Alle Gitter bestanden aus strukturierten Zellen (Hexagons). Im Bereich der Hindernisse wurde adaptiv verfeinert (Abb. 8.57).

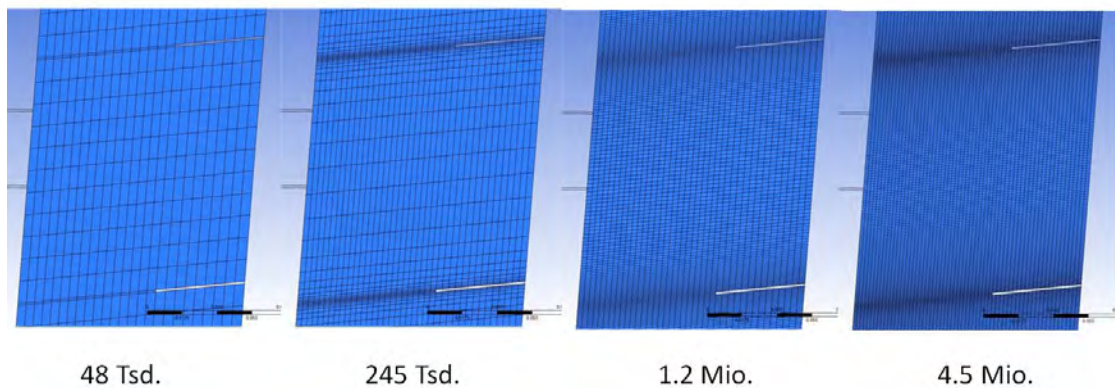
Die Gitterstudie wurde mit der Peters-Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit durchgeführt.

Die Simulationen mit 1.2 Millionen und 4.5 Millionen Zellen zeigen im Hinblick auf die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit sehr ähnliche Ergebnisse. Auch am Ende des Rohres sind die Unterschiede gering (Abb. 8.58, Abb. 8.59). Die Simulationen mit den gröbereren Gittern (245 000 und 48 000 Zellen) zeigen dagegen deutliche Abweichungen. Die Flammenbeschleunigung findet bei ihnen erst später im Rohr statt und das Geschwindigkeitsmaximum ist entsprechend verschoben. Die Maximalgeschwindigkeit ist allerdings ähnlich. Am Ende des Rohres wird in den Simulationen mit den gröbereren Gittern eine größere Flammenausbreitungsgeschwindigkeit berechnet.

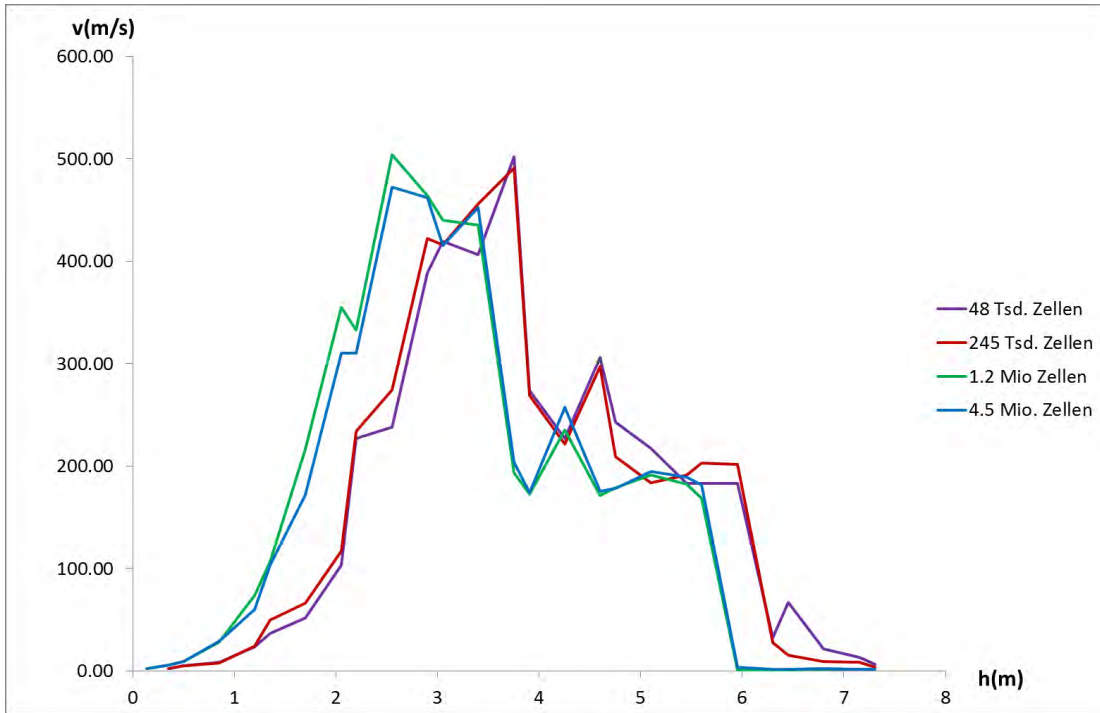
Der Vergleich der Reaktionsfortschrittsvariablen an den Monitorpunkten zeigt, dass oberhalb von 4.8 m der Verlauf der Reaktionsfortschrittsvariablen stark gitterabhängig ist und selbst bei den feinsten Gittern noch deutlich voneinander abweicht. In diesem Bereich findet eine Wechselwirkung der Flammenfront mit Druckwellen (siehe Abschnitt 8.9.3) statt.

Beim Vergleich des Druckverlaufs zeigt sich, dass die Höhe der kurzzeitigen Druckpeaks mit zunehmender Gitterfeinheit größer wird. Der Unterschied zwischen den beiden feinsten Gittern ist allerdings nur noch gering. Der Druckverlauf am Ende des Verbrennungsprozesses unterscheidet sich allerdings auch für diese beiden Gitter noch signifikant.

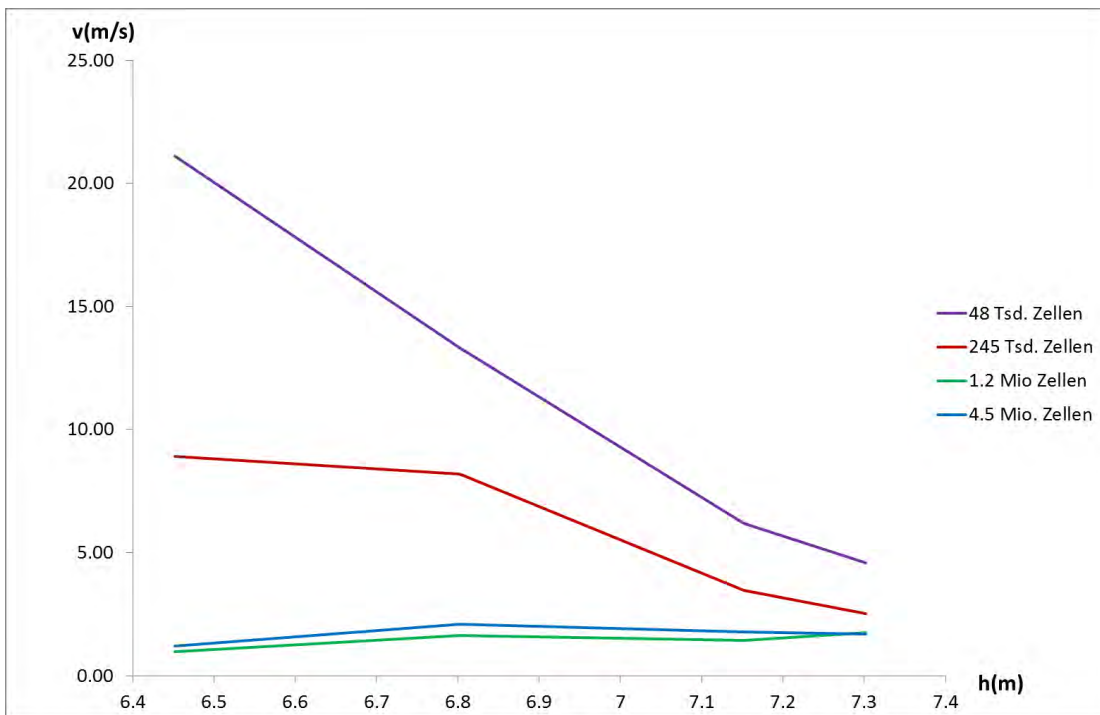
Es kann zusammengefasst werden, dass die Gitterstudie zeigt, dass im Hinblick auf die Flammenbeschleunigung durch die Hindernisse eine nahezu gitterunabhängige Lösung gefunden werden konnte. Für die am Ende der Verbrennung ablaufenden Prozesse (Abbremsen der Flamme, Wechselwirkung der Flammenfront mit Druckwellen, die durch das Beschleunigungsrohr laufen) ist aber eine noch starke Gitterabhängigkeit vorhanden.



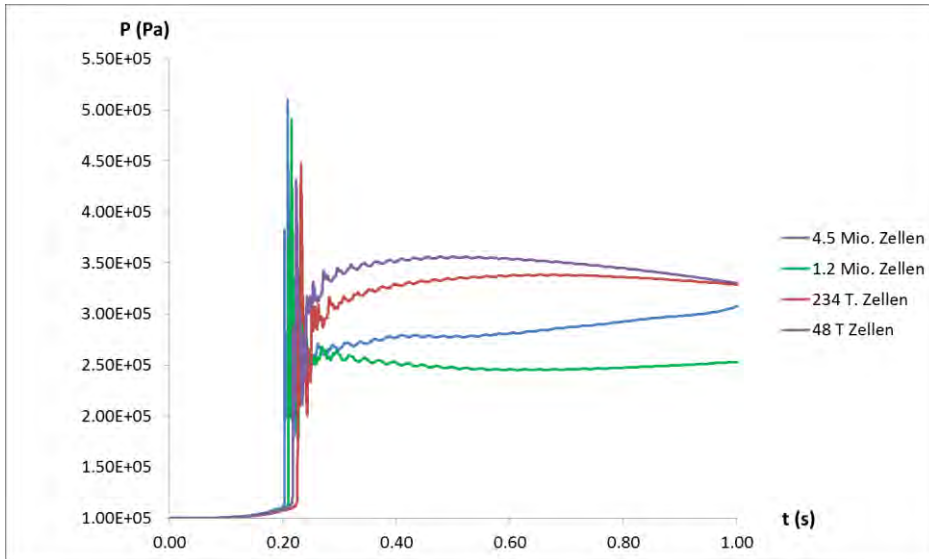
**Abb. 8.57** CFD-Gitter im Bereich der Hindernisse



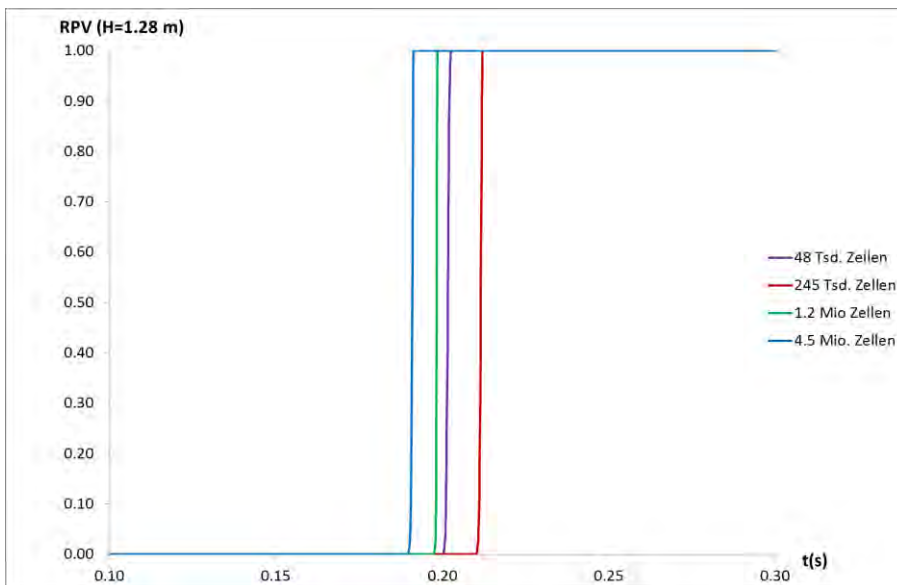
**Abb. 8.58** Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei unterschiedlich feinem Gitter



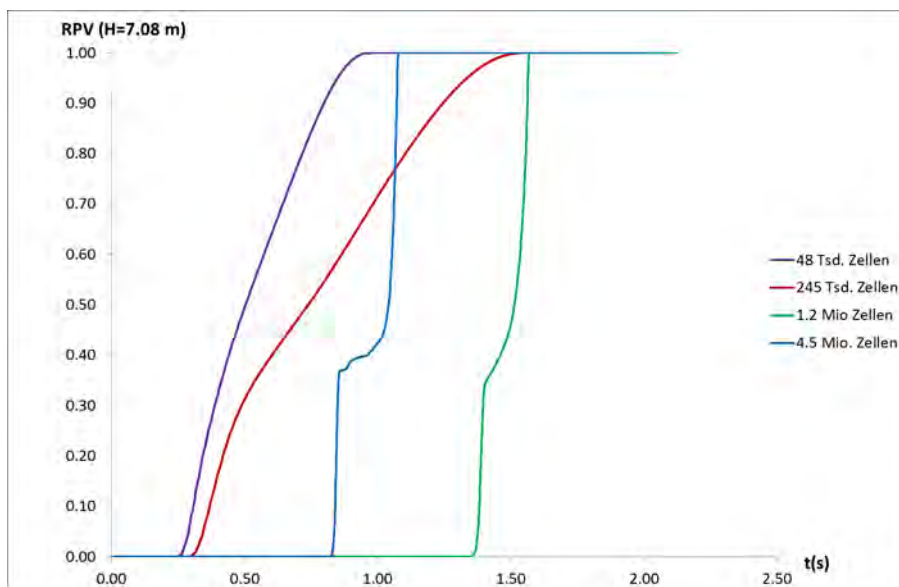
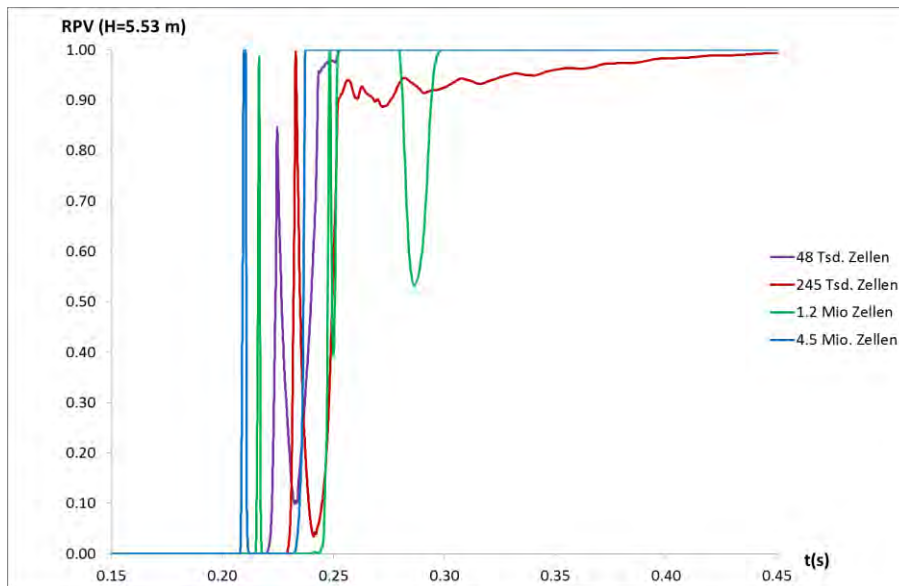
**Abb. 8.59** Flammenausbreitungsgeschwindigkeit am Rohrende bei unterschiedlich feinem Gitter



**Abb. 8.60** Druck in 6.377 m Höhe bei unterschiedlich feinem Gitter



**Abb. 8.61** Zeitlicher Verlauf der Reaktionsfortschrittsvariable am Messpunkt in der Höhen 1.28 m



**Abb. 8.62** Zeitlicher Verlauf der Reaktionsfortschrittsvariable an Messpunkten in den Höhen 5.53 m und 7.08 m

### 8.9.3 Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten

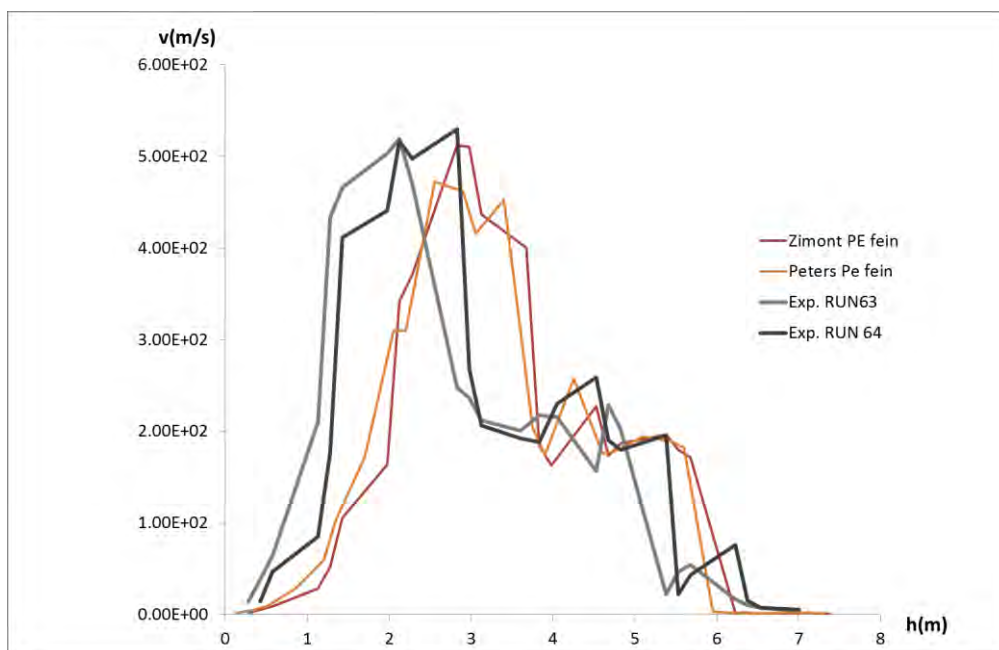
Für den Vergleich mit den experimentellen Daten wird das feinste Gitter mit 4.5 Millionen Zellen verwendet. Es wurden Simulationen mit der Peters- und mit der Zimont-Korrelation durchgeführt. Die Simulationsergebnisse sind sehr ähnlich, so dass sie nicht getrennt betrachtet werden müssen (Abb. 8.63, Abb. 8.65).

Beim Vergleich der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit zeigt sich eine relativ gute Übereinstimmung mit dem Experiment (Abb. 8.63). Die maximale Ausbreitungsgeschwindigkeit wird in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet, allerdings ist das Maximum um 0.5 m – 1 m zu einer größeren Höhe verschoben. Damit ist eine Unterschätzung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bis zu einer Höhe von 2 m verbunden. Das Abbremsen der Flamme wird in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Die in Abb. 8.63 dargestellte Flammenausbreitungsgeschwindigkeit beschreibt nicht umfassend die Bewegung der Flammenfront. Sie wird wie folgt berechnet: Die Reaktionsfortschrittsvariable wird an den Messpunkten zur Detektion der Flammenfront ausgewertet. Sobald die Reaktionsfortschrittsvariable den Wert 0.1 überschreitet, wird angenommen, dass die Flamme die Messstelle erreicht hat. Ein erneutes Absinken der Reaktionsfortschrittsvariable (RPV) wird nicht berücksichtigt. Diese Auswertung ist bis zu einer Höhe von ca. 5 m in der Lage, die Flammenausbreitung zuverlässig zu beschreiben. Sobald die Flamme den Monitorpunkt erreicht, wird  $RPV > 0$  und sie steigt dann sehr schnell auf  $RPV = 1$ . Der genaue Wert, für den das Erreichen der Flammenfront angenommen wird, spielt nur eine untergeordnete Rolle (Abb. 8.62, siehe  $H = 1.28$  m). Im Bereich von 5 m – 6 m Höhe ändert sich das Bild. Nach einem Anstieg der Reaktionsfortschrittsvariablen fällt sie wieder ab, teilweise wird  $RPV = 0$ . Nach einer kurzen Zeit steigt sie dann erneut an (Abb. 8.62, siehe 5.5 m). Dieses Verhalten hat folgende Ursache: Durch den schnellen Verbrennungsprozess im Bereich der Hindernisse werden lokale Druckspitzen erzeugt (Abb. 8.65). Die Druckwellen bewegen sich durch das Rohr. Nach 0.22 s liegt in der Simulation im oberen Bereich des Beschleunigungsrohres ein um etwa 1.8 bar höherer Druck vor als im unteren Bereich (Abb. 8.66). Nach 0.23 s liegt dagegen im unteren Bereich ein um etwa 1.2 bar höherer Druck vor. Die Druckwellen wechselwirken mit der Flammenfront. Bei  $t = 0.22$  s liegt die Flammenfront bei  $H \sim 5.25$  m (Abb. 8.66, gelbe Linie), nach  $t = 0.23$  s liegt sie dagegen nur noch bei  $H \sim 5.05$  m. Die abwärtswandernde Druckwelle hat also die Flammenfront nach unten verschoben. Oberhalb von 6 m beschreibt die in Abb. 8.63 dargestellte Flammenausbreitungsgeschwindigkeit dagegen wieder besser den Verbrennungsverlauf (Abb. 8.62,  $H = 7.08$  m).

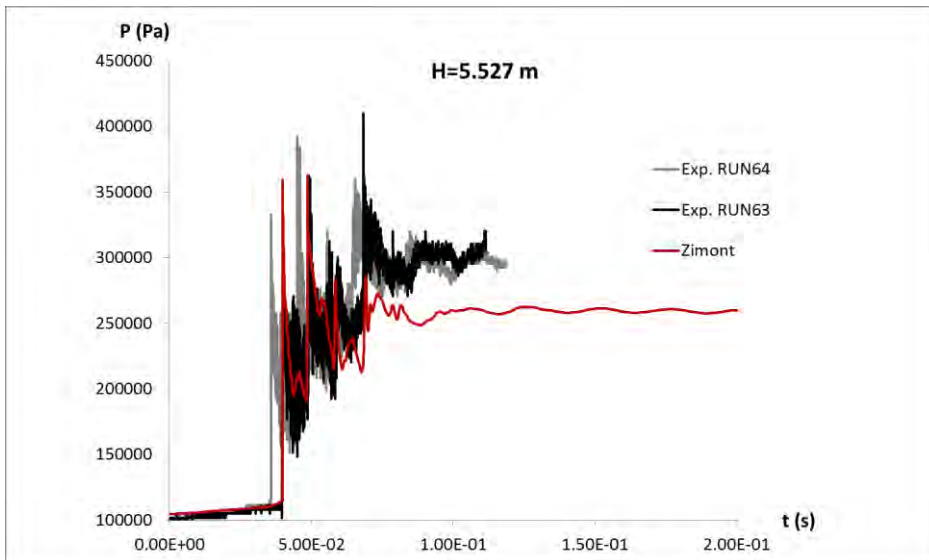
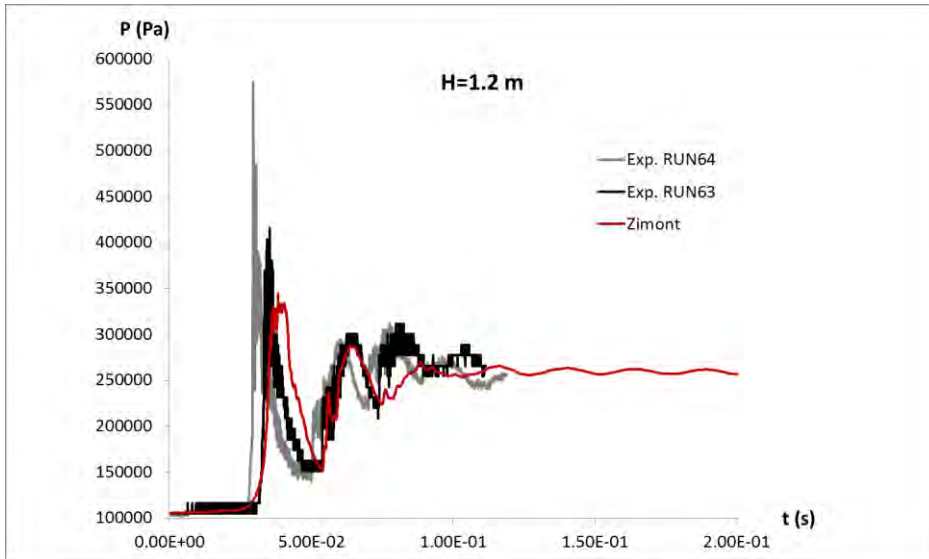
Um die Simulationsergebnisse für den Druck besser mit dem Experiment vergleichen zu können, wurde bei der Simulation mit der Zimont-Korrelation die Zeitachse um  $dt = 0.165$  s verschoben, und bei der Peters-Korrelation beträgt die Verschiebung  $dt = 0.162$  s. Qualitativ ist für den Druckverlauf eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment zu erkennen. Die Höhe der kurzzeitigen Druckpeaks ist stark von der Position der Messstelle abhängig. Die Messstelle bei 7.68 m zeigt mit Abstand den höch-



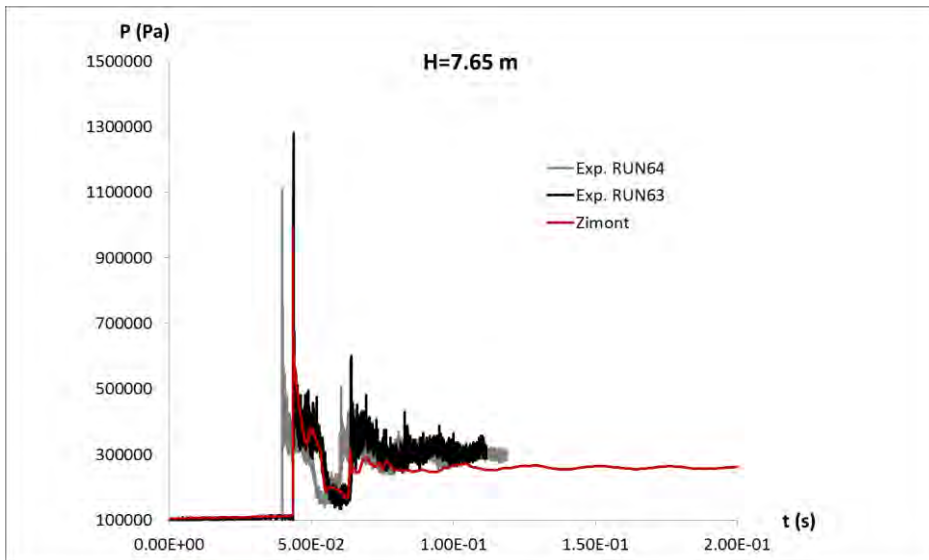
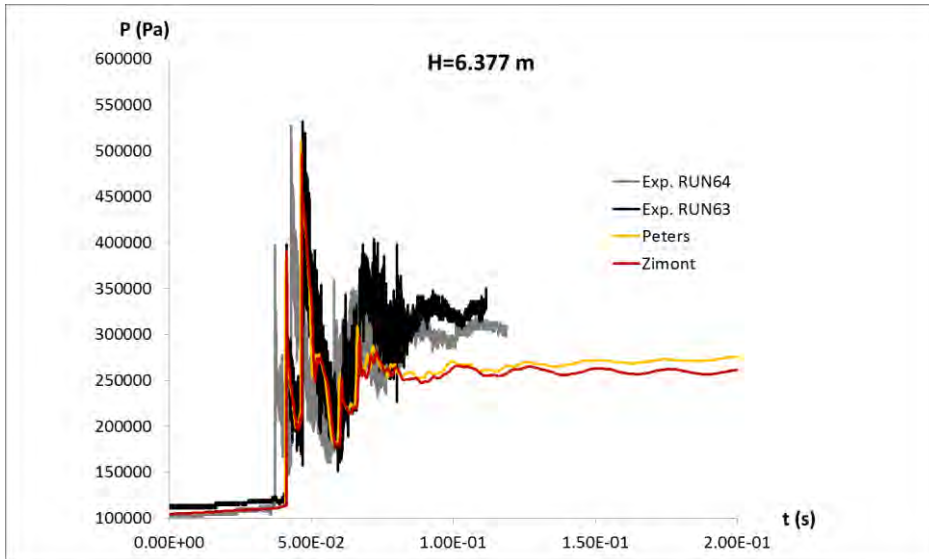
ten Peak ( $p \sim 11$  bar). Dieses Verhalten wird von den Simulationen richtig wiedergegeben. Ebenso der prinzipielle Verlauf der Druckschwankungen. Auch quantitativ ist die Übereinstimmung gut, wenn Messfehler und die teilweise nicht zu vernachlässigenden Unterschiede zwischen den beiden Experimenten RUN64 und RUN63 berücksichtigt werden. Tendenziell werden die Druckpeaks in den Simulationen aber etwas unterschätzt. Die Abweichung ist am Messpunkt  $H = 1.2$  m am größten. Der niedrigere Druckpeak in der Simulation korrespondiert dabei mit der langsameren Flammenausbreitung in der Anfangsphase des Experiments. Nach  $0.1$  s liegt der Druck in der Simulation unabhängig von der Messstelle bei etwa  $2.6$  bar. Im Experiment liegt er am Messpunkt bei  $1.2$  m ebenfalls bei diesem Wert. An anderen Messstellen liegt er dagegen höher ( $2.9$  bar –  $3.2$  bar). Die unterschiedlichen experimentellen Druckwerte sind zu hinterfragen. Nach Abklingen der Schwingungen kann davon ausgegangen werden, dass im Behälter in etwa der gleiche Druck vorliegt. Es ist davon auszugehen, dass hier erhebliche Messunsicherheiten vorliegen, vermutlich weil die Drucksensoren von der starken Temperaturänderung beeinflusst werden /GRO 17/. Auch bei den CFX-Simulationen liegen in diesem Bereich starke Unsicherheiten vor. Der Druckverlauf am Ende des Verbrennungsvorgangs war stark gitterabhängig (Abb. 8.60).



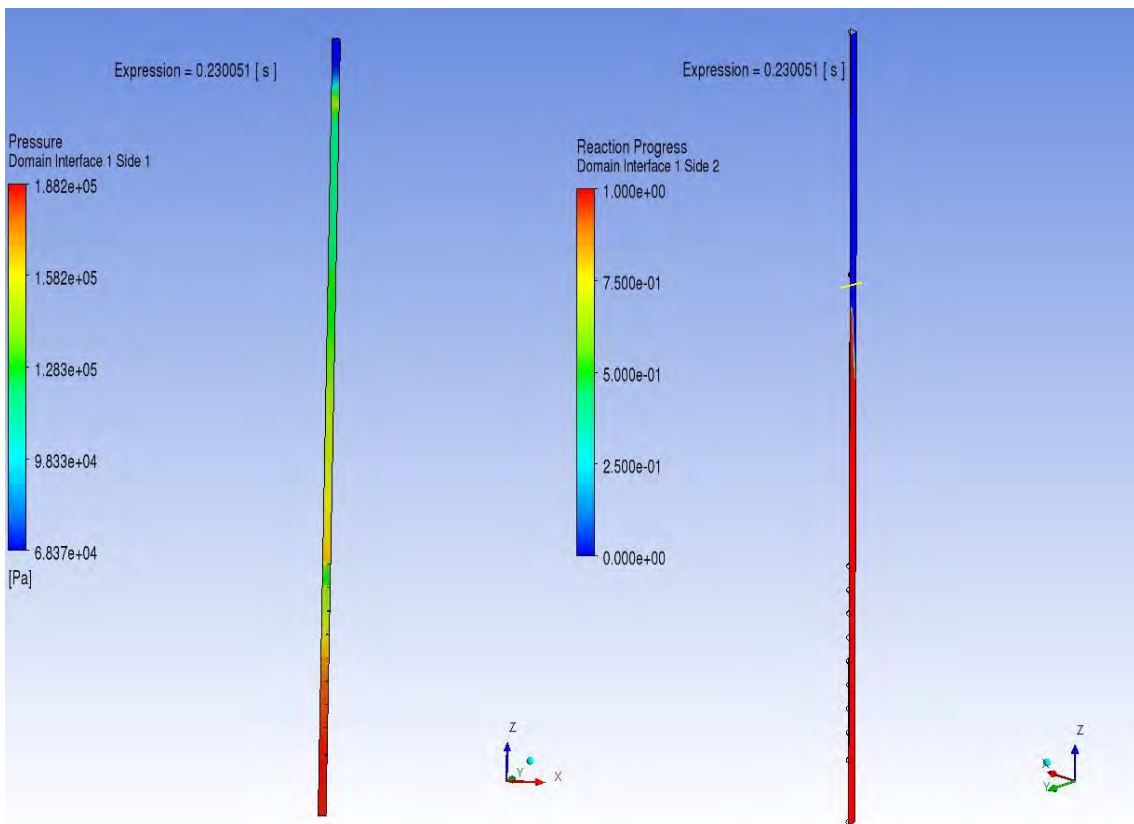
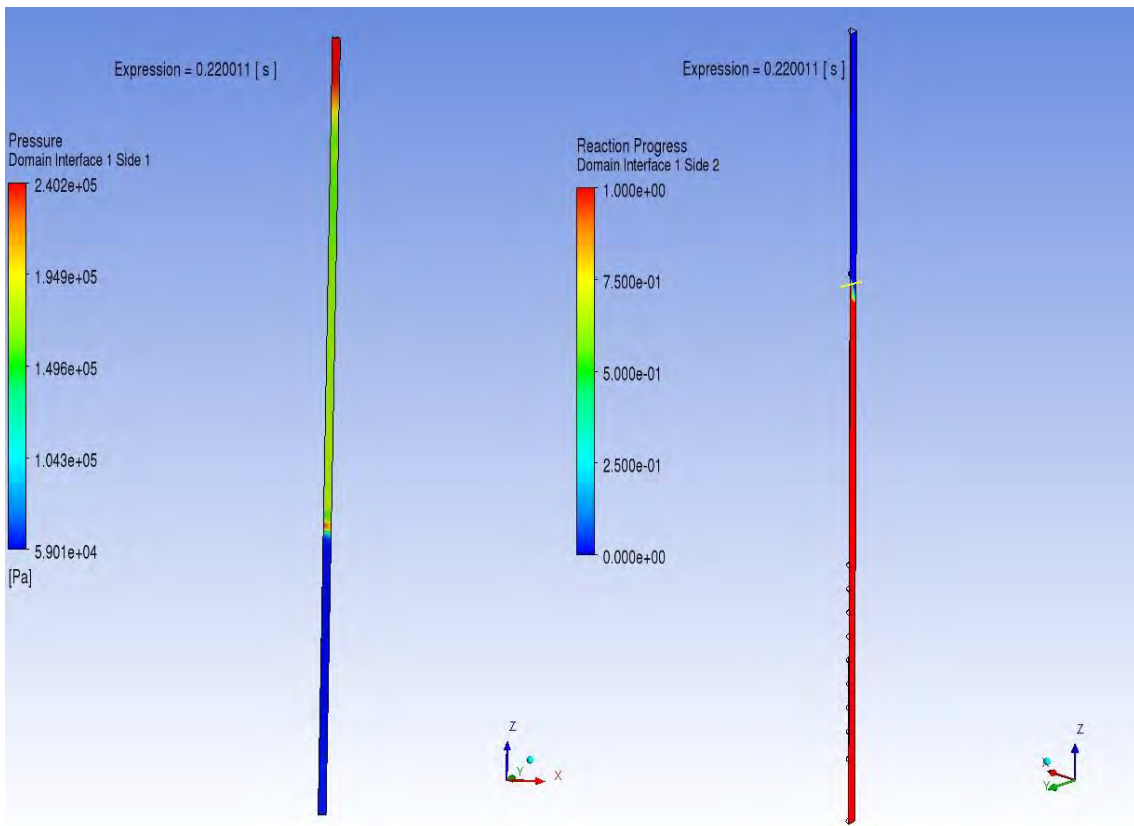
**Abb. 8.63** Flammenausbreitungsgeschwindigkeit im Experiment und in den Simulationen mit der Zimont- und der Peters-Korrelation



**Abb. 8.64** Druck im Experiment und in den Simulationen an Messpunkten in 1.2 m und 5.527 m Höhe



**Abb. 8.65** Druck im Experiment und in den Simulationen an Messpunkten in 6.377 m und 7.65 m Höhe



**Abb. 8.66** Druck(links) und Reaktionsfortschrittsvariable (rechts) in der Simulation mit der Zimont-Korrelation nach 0.22 s und 0.23 s

#### **8.9.4 Zusammenfassung MITHYGENE-ETSONBenchmark**

Die GRS hat sich mit CFX-Simulationen am ETSON-MITHYGENE-Verbrennungsbenchmark beteiligt. Da die Versuchsergebnisse der 2. Benchmarkphase zum Zeitpunkt der Berichtserstellung noch nicht veröffentlicht wurden, konnte nur die offene Nachrechnung des Versuchs mit 13 Vol.-% H<sub>2</sub> mit experimentellen Daten verglichen werden.

Eine Gitterstudie zeigt, dass im Hinblick auf die Flammenbeschleunigung durch die Hindernisse mit einem Gitter von 4.5 Millionen Zellen eine nahezu gitterunabhängige Lösung gefunden werden konnte. Für die zu Ende der Verbrennung ablaufenden Prozesse (insbesondere Wechselwirkung der Flammenfront mit Druckwellen) ist aber eine noch starke Gitterabhängigkeit vorhanden. Es wurden Simulationen mit der Peters- und der Zimont-Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit durchgeführt. Beide Simulationen berechnen sehr ähnliche Ergebnisse. Beim Vergleich der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit zeigt sich eine relativ gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Die maximale Ausbreitungsgeschwindigkeit wird in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet, allerdings ist das Maximum um 0.5 m – 1 m zu einer größeren Höhe verschoben. Damit ist eine Unterschätzung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bis zu einer Höhe von 2 m verbunden. Das Abbremsen der Flamme wird in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Die kurzzeitigen Druckpeaks konnten qualitativ und quantitativ in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden, wenn die Messunsicherheiten und die Reproduzierbarkeit des Experiments berücksichtigt werden. Tendenziell unterschätzt die Simulation aber die Höhe der Peaks geringfügig. Die Abweichung ist am untersten Messpunkt am größten. Die Unterschätzung dieses Druckpeaks korrespondiert mit der langsameren Flammenausbreitung in der Anfangsphase des Experiments.

#### **8.10 Untersuchung zur Modellierung der turbulenten Verlöschung**

##### **8.10.1 Einleitung**

Bei einigen ENACCEF-Versuchen wurde ein turbulentes Verlöschen der Flamme (turbulentes Quenching) beobachtet. Hierzu gibt es in CFX einen Modellansatz, der im Folgenden getestet werden soll. Im Zimont-Modell wird die turbulente Flammengeschwindigkeit beschrieben durch

$$s_T^{Zim.} = A u^{\frac{13}{4}} v_{lam}^{\frac{1}{2}} \lambda_u^{-1/4} l_t^{1/4} G$$

G ist hierbei der Flammenstreckungsfaktor, für den gilt:

$$G = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[ -\frac{1}{\sqrt{2}\sigma} \left( \ln(\varepsilon_{crit}/\bar{\varepsilon}) + \frac{\sigma}{2} \right) \right] \quad (8.1)$$

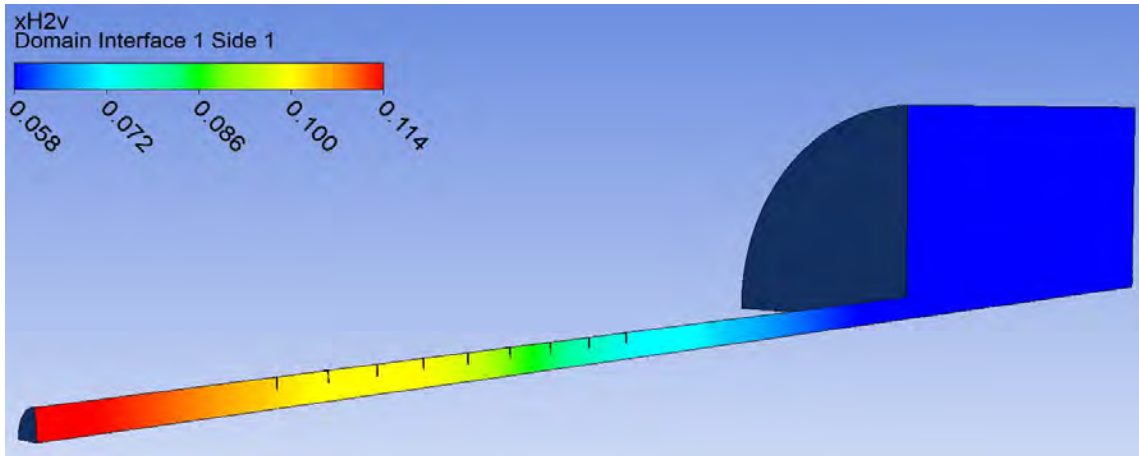
Hohe Werte für die Eddy Dissipation  $\varepsilon > \varepsilon_{crit}$  führen zu einer Verringerung von G und somit zu einer Verlangsamung der Flammengeschwindigkeit. In CFX wird die kritische Dissipationsrate  $\varepsilon_{crit}$  indirekt über den kritischen Geschwindigkeitsgradienten  $g_{crit}$  spezifiziert:

$$\varepsilon_{crit} = 15\nu g_{crit}^2 \quad (8.2)$$

Als sinnvoller Wert für  $g_{crit}$  wird im CFX-Handbuch nur ein Bereich von  $6\,000\text{ s}^{-1}$  bis  $10\,000\text{ s}^{-1}$  für Verbrennungskammern mit Methan/Luft-Gemischen angegeben. Für  $\text{H}_2$ /Luft-Gemische fehlt jegliche Literaturangabe. Aus diesem Grund soll im Folgenden dieser Parameter in einer Variationsrechnung in einem weiten Bereich verändert und der Einfluss auf eine Verbrennung untersucht werden.

## 8.10.2 Experimentelle Beschreibung und CFX-Setup

Als Experiment wird der ENACCEF-Versuch 736 mit einer  $\text{H}_2$ -Schichtung verwendet, bei dem der Effekt des Quenching beobachtet wurde. In Abschnitt 1.7 sind die ENACCEF-Anlage und das verwendete CFD-Gitter (3.24 Millionen Zellen) ausführlich beschrieben. In Abb. 8.67 ist die initiale  $\text{H}_2$ -Konzentration im Versuch ENACCEF 736 dargestellt. Es handelt sich um eine Schichtung mit ca. 6 Vol.-% (im Dom) bis ca. 11 Vol.-% (am Anfang der Beschleunigungsstrecke). Die  $\text{H}_2$ -Konzentration nimmt also im Lauf der Brennstrecke immer mehr ab. Die Turbulenz wird über das SST-Modell beschrieben, zusätzlich wurde das Discrete-Transfer-Wärmestrahlungsmodell aktiviert. Weitere Details zu numerischen Parametern finden sich in Tab. 8.1.



**Abb. 8.67** Initiale H<sub>2</sub>-Konzentrationen (Vol.-%)

**Tab. 8.1** Infobox zum ENACCEF-Experiment 736

Experiment	ENACCEF736
Phänomene	H <sub>2</sub> -Verbrennung mit Flammenverlöschung (Quenching)
Elementzahl	3 240 468
Materialien	Reacting Mixture (Hydrogen Oxygen)
Turbulenzmodell	SST
Verbrennungsmodell	BVM
Turbulente Brenngeschwindigkeit	Zimont (+ Flame Stretch Modell)
Wärmestrahlung	Discrete Transfer, 32 Strahlen
Konvergenz	RMS < 0.0001
CFX-Version	17.0

### 8.10.3 Vergleich von CFX-Ergebnissen mit experimentellen Daten

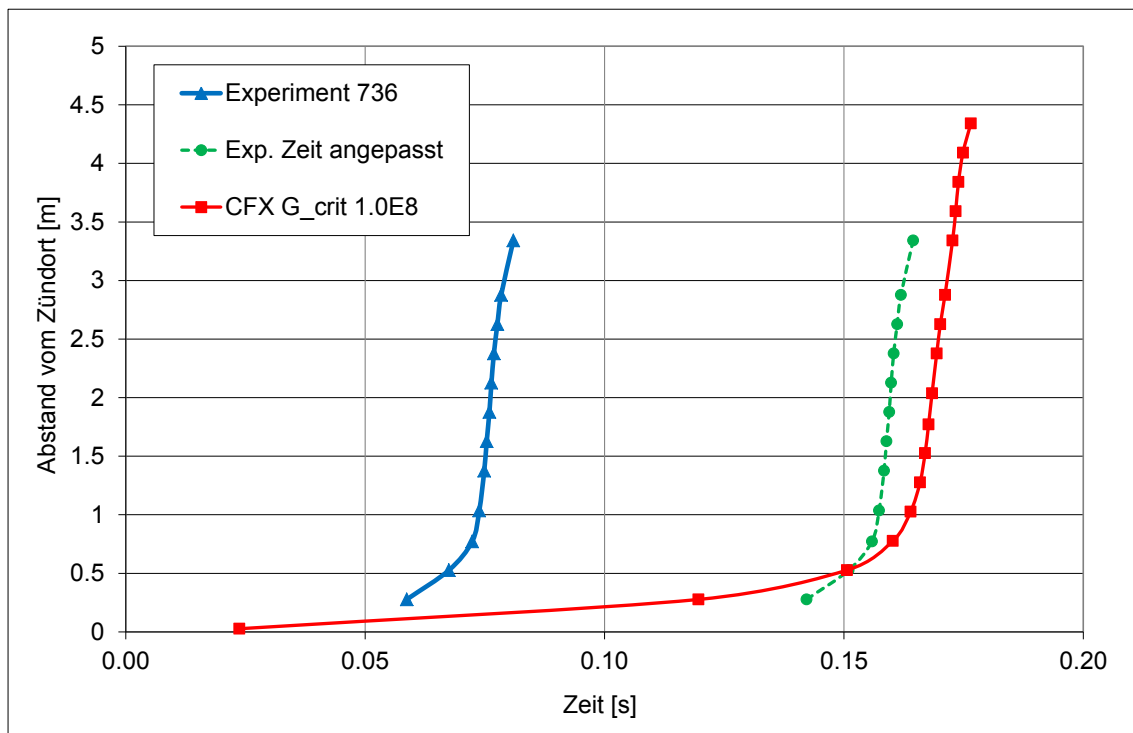
Zunächst wurde eine Rechnung mit einem sehr hohen Wert für den kritischen Geschwindigkeitsgradienten  $G_{crit}$  durchgeführt. Da dieser Wert zu keiner Zeit überschritten wird, ist dieses der Extrem-Fall, in dem keine Verlangsamung der Flammengeschwindigkeit stattfindet. Dies entspricht einer Verbrennungsmodellierung ohne Modell zur turbulenten Flammenverlöschung (Quenching).

Die Flammenausbreitung, registriert an verschiedenen Messpunkten, ist in Abb. 8.68 dargestellt. Der Grund für den zeitlichen Versatz zwischen Experiment und CFX liegt darin, dass der genaue Zeitpunkt der Zündung nicht exakt bekannt ist und entsprechend auch nicht in CFX abgebildet werden kann. Nach Anpassung des zeitlichen Ver-

satzes liegen die CFX-Werte (rote Kurve) relativ nahe an den experimentellen Daten (grüne Kurve). Der Verlauf der beiden Kurven scheint relativ ähnlich zu sein. Beim Experiment endet die Kurve bei ca. 3.5 m, da hier die Flammenverlöschung stattgefunden hat. In dieser CFX-Rechnung läuft die Flamme noch weiter.

Aus dieser Flammenausbreitung lassen sich auch die Geschwindigkeiten berechnen. Hieraus ergeben sich die in Abb. 8.69 dargestellten Geschwindigkeiten. Es zeigt sich, dass CFX innerhalb des Beschleunigungsrohrs im Bereich 0 – 3 m etwas zu niedrige Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten berechnet. Im Experiment findet dann im Dom eine Flammenverlöschung statt, während in CFX die Flamme noch (mit relativ hoher Geschwindigkeit) weiterläuft. Im Folgenden sollen  $G_{crit}$  variiert und die Auswirkungen auf die Verbrennung untersucht werden.

Abb. 8.70 zeigt den Druckverlauf im Experiment und in der Simulation. Im Experiment gibt es zunächst einen deutlichen Druckpeak und danach geht der Druck langsam (und schwankend) wieder auf das Ausgangsniveau von 1 bar zurück. Ursache hierfür ist das Verlöschen der Flamme. In der CFX-Rechnung findet sich nach dem ersten Druckpeak noch ein fortgesetztes Ansteigen des Drucks, was auf eine Fortsetzung der Verbrennung zurückzuführen ist. Hier hat also keine Verlöschung der Flamme stattgefunden. Das war bei dem hohen Wert für  $G_{crit}$  auch nicht erwartet worden.



**Abb. 8.68** Vergleich der Flammenausbreitung



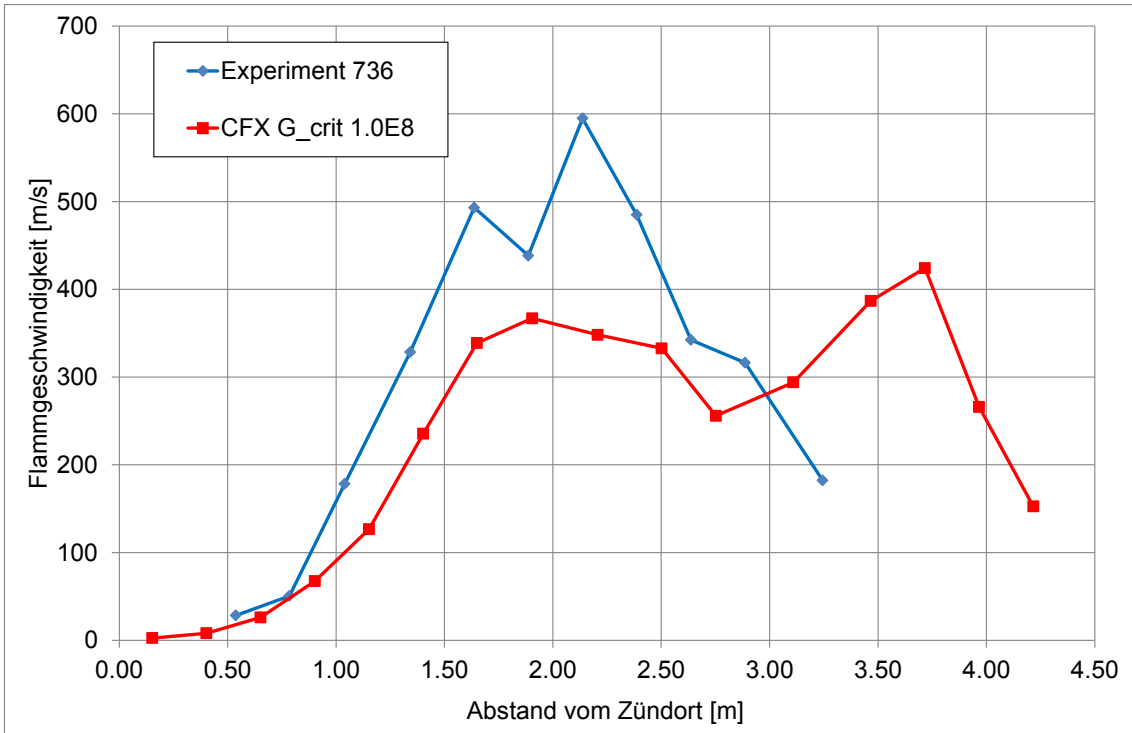


Abb. 8.69 Vergleich der Flammgeschwindigkeiten

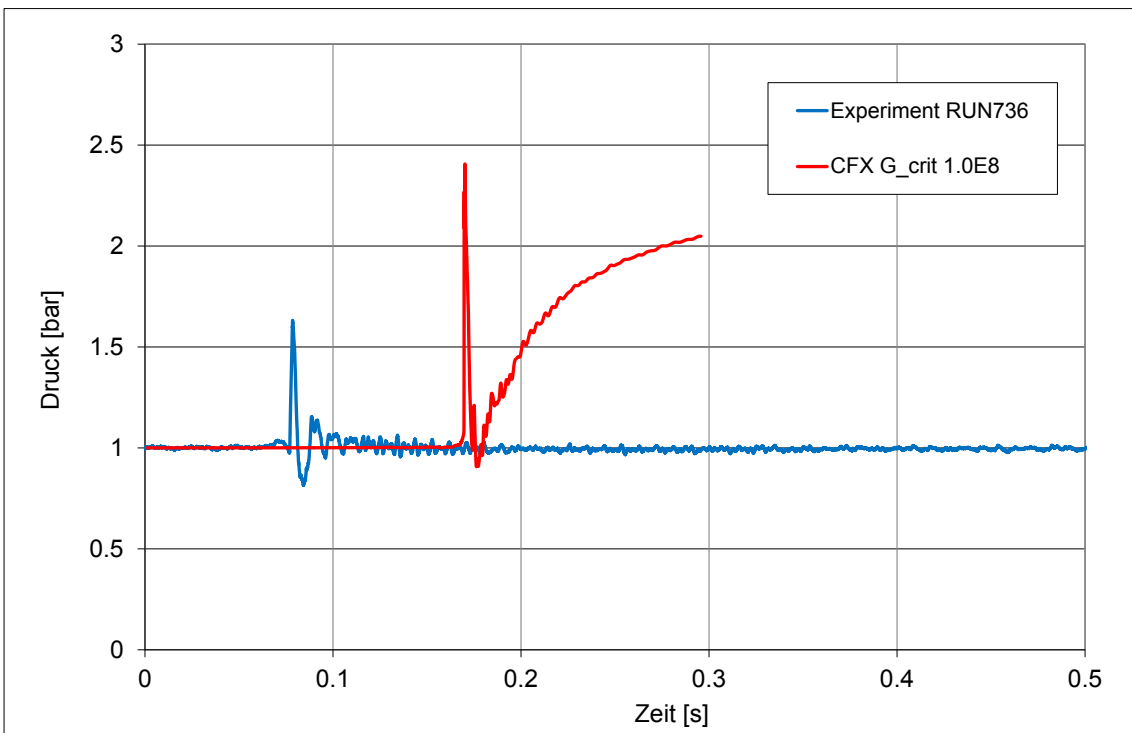


Abb. 8.70 Vergleich des Druckverlaufs

#### 8.10.4 Variation des kritischen Geschwindigkeitsgradienten $G_{crit}$

Bei einem niedriger gewählten Grenzwert  $G_{crit}$  wird diese Schwelle schneller überschritten, was über den Flammenstreckungsfaktor  $G$  zu einer Verlangsamung der turbulenten Brenngeschwindigkeit führt. Im Rahmen einer Parameterstudie wurde  $G_{crit}$  in einem sehr weiten Bereich von 0.1 bis  $1.0E8$  variiert. Abb. 8.71 zeigt den Einfluss auf die Flammenausbreitung. Bis ca. 0.7 m ist die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit für alle Simulationen gleich. Danach ist das Flammenstretching so stark, dass bei Wahl eines niedrigen  $G_{crit}$  eine Verlangsamung der Flamme eintritt. Je niedriger  $G_{crit}$  gewählt wird, desto früher wird das Verlöschungsmodell wirksam und desto stärker wird die Verbrennung abgebremst. Die beiden Kurven für  $G_{crit} = 1.0E8$  und 100 000 (rot und gelb) sind noch ziemlich ähnlich und liegen fast deckungsgleich übereinander. Für  $G_{crit} = 10\ 000$  (schwarz) breitet sich die Flamme schon etwas langsamer aus und bei  $G_{crit} = 0.1$  kommt die Flamme schon bei ca. 1.5 m fast zum Stillstand. Dieses Verhalten zeigt sich auch genauso bei den Flammengeschwindigkeiten in Abb. 8.72. Hier ist zu sehen, dass die Flammenausbreitung bei  $G_{crit} = 10\ 000$  (schwarze Kurve) schon innerhalb des Beschleunigungsrohres abgebremst wird und sich die Flammengeschwindigkeiten noch weiter von den experimentellen Werten entfernen. Dieses entspricht (noch) nicht dem erwünschten Effekt.

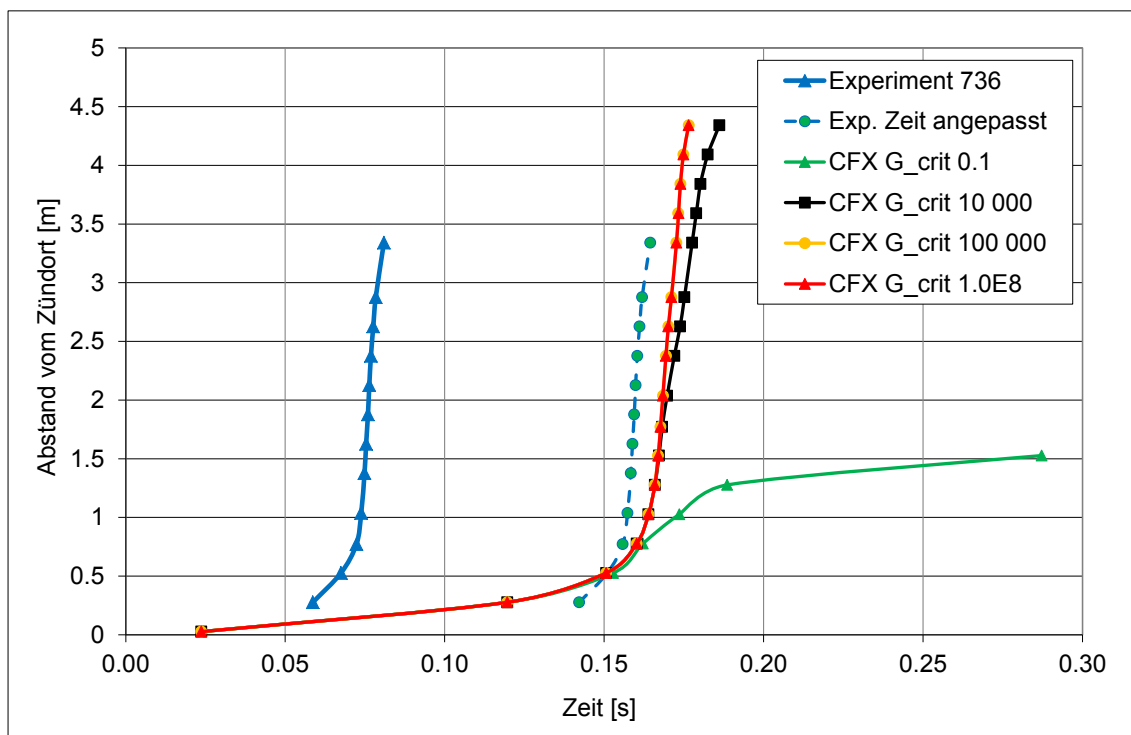
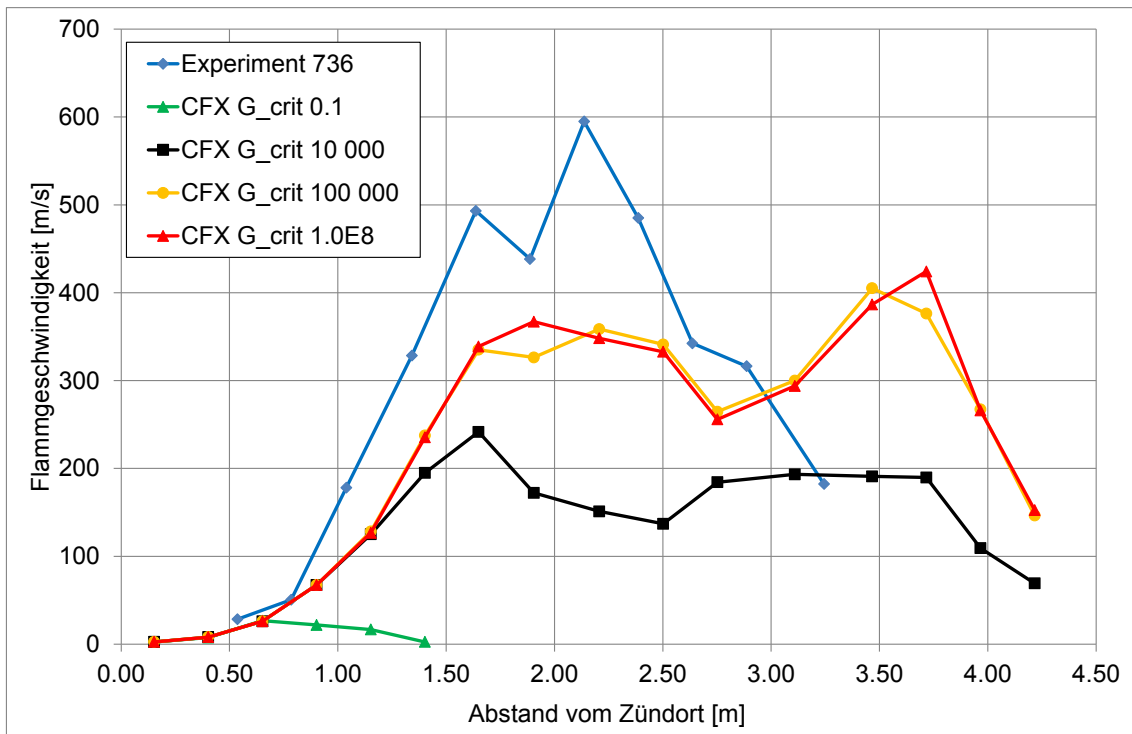
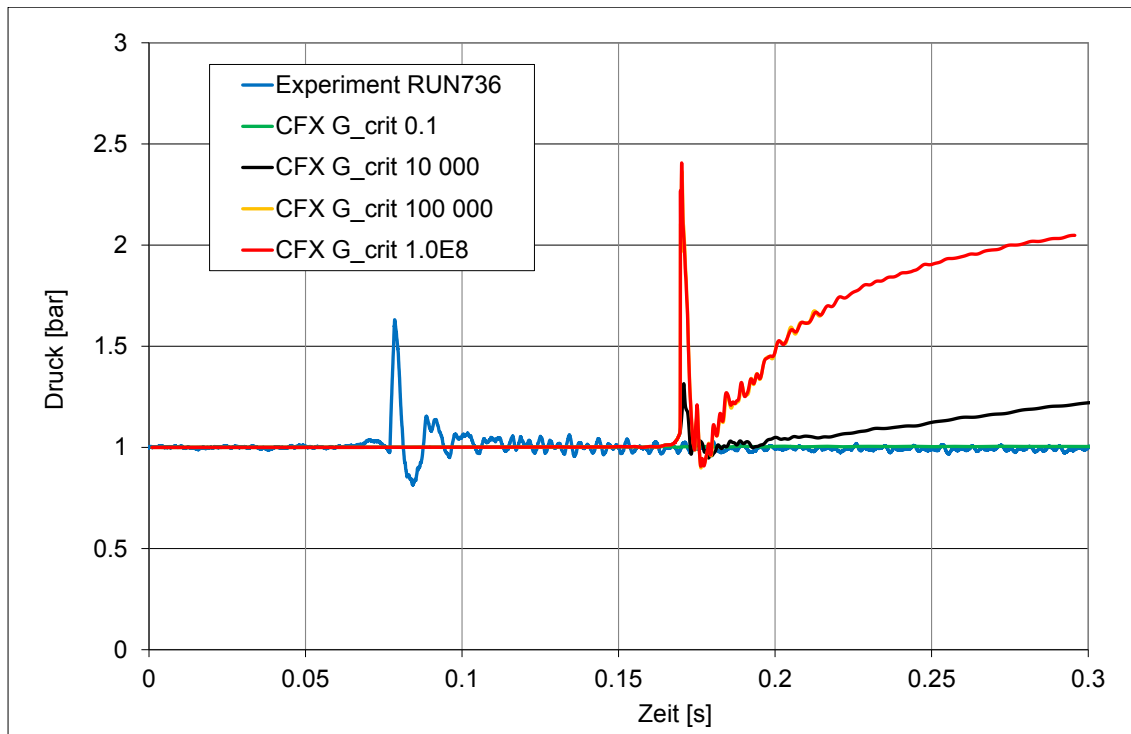


Abb. 8.71 Einfluss von  $G_{crit}$  auf die Flammenausbreitung



**Abb. 8.72** Einfluss von  $G_{crit}$  auf die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit

In Abb. 8.73 ist der Einfluss von  $G_{crit}$  auf den Druckverlauf dargestellt. Die Kurven für  $G_{crit} = 1.0E8$  und  $100\ 000$  liegen wieder deckungsgleich übereinander. Bei kleineren Werten für  $G_{crit}$  wird sowohl der initiale schnelle Druckpeak, als auch der langsame Druckanstieg danach immer kleiner, bis beide bei  $G_{crit} = 0.1$  ganz verschwinden. Der initiale schnelle Druckpeak hängt von der Flammenbeschleunigung im Rohr ab, der langsame Anstieg danach entsteht durch die Verbrennung im Dom. Im Experiment findet eine vollständige Verlöschung der Flamme am Ende des Beschleunigungsrohres bzw. am Domeintritt statt. Hier gibt es einen grundsätzlichen Unterschied zu dem Quenchingmodell in CFX. In dem CFX-Modell findet nur eine Verringerung der Verbrennungsgeschwindigkeit (abhängig von der lokalen Flammenstreckung zum jeweiligen Zeitpunkt) statt. Somit könnte bei einem Nachlassen der Turbulenz die Verbrennung in CFX wieder weiterlaufen bzw. wieder zunehmen. Dieses entspricht nicht der im Experiment beobachteten vollständigen Verlöschung.

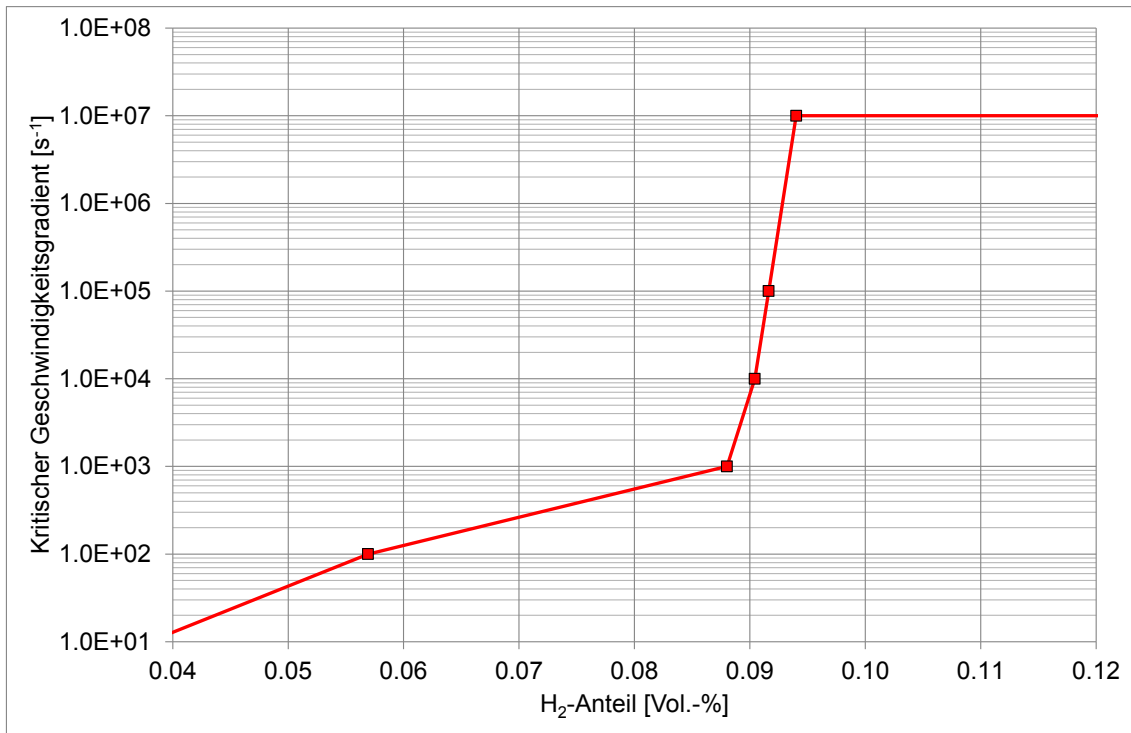


**Abb. 8.73** Einfluss von  $G_{\text{crit}}$  auf den Druckverlauf

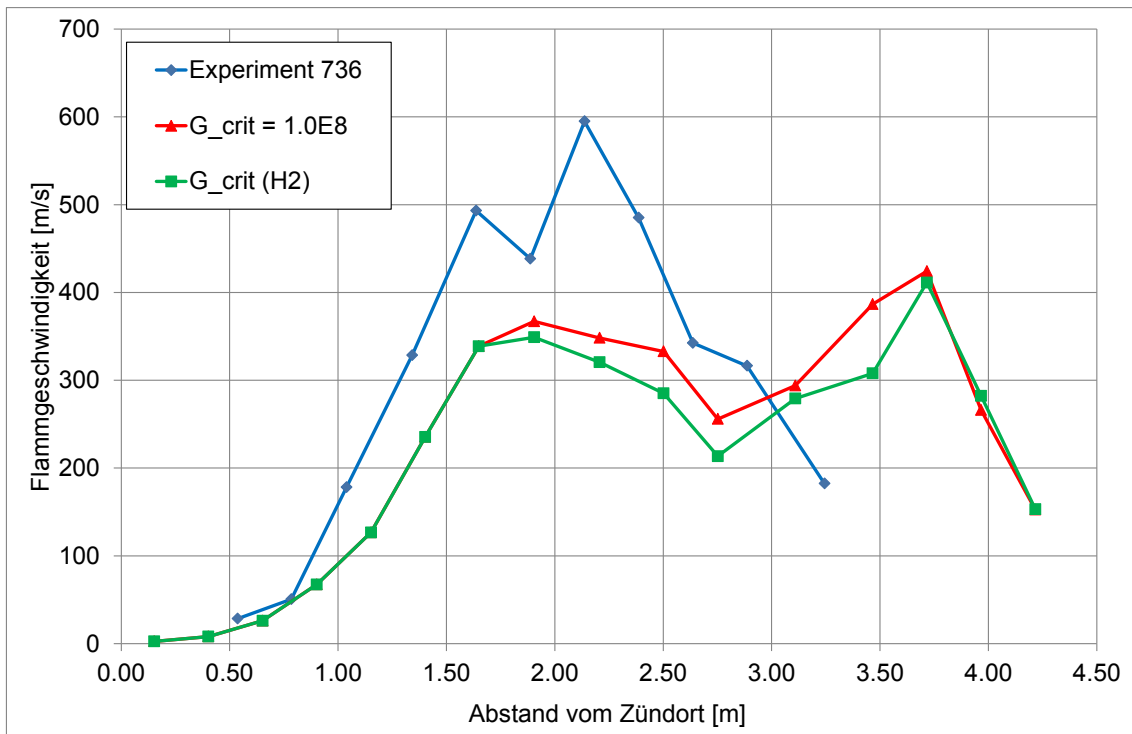
### 8.10.5 Berücksichtigung der $\text{H}_2$ -Konzentration

Sehr wahrscheinlich ist der kritische Grenzwert abhängig von der lokalen  $\text{H}_2$ -Konzentration. Diese ist im Rohr relativ hoch und im Dom deutlich niedriger. Grundsätzlich müsste der Grenzwert innerhalb des Rohres und damit bei höheren Konzentrationen so groß sein, dass die Flamme dort nicht abgebremst wird. Schon bei der Rechnung ohne Begrenzung ist die Verbrennung im Beschleunigungsrohr etwas zu langsam. Mögliche Ursachen sind Fehler bei der laminaren Flammengeschwindigkeit, bei der verwendeten Zimont-Korrelation oder experimentelle Unsicherheiten. Im Dom und damit bei kleineren  $\text{H}_2$ -Konzentrationen sollte der Wert für  $G_{\text{crit}}$  sinken, um so zu einer Verlangsamung der Flamme bis hin zum Verlöschen zu führen. Aus diesem Grund wurde eine von der  $\text{H}_2$ -Konzentration abhängige Funktion  $G_{\text{crit}}(\text{H}_2)$  erstellt (siehe Abb. 8.74) und damit eine weitere Berechnung durchgeführt. In Abb. 8.75 sind die berechneten Flammengeschwindigkeiten der Rechnung mit konstantem  $G_{\text{crit}} = 1.0\text{E}8 \text{ s}^{-1}$  und der Rechnung mit  $G_{\text{crit}} = G_{\text{crit}}(\text{H}_2)$  dargestellt. Hier zeigt sich eine Verringerung der Flammengeschwindigkeiten schon innerhalb des Beschleunigungsrohres und kaum eine Verringerung innerhalb des Domes. Bedeutet dies, dass die in Abb. 8.74 dargestellte Funktion ungeeignet ist, um das Quenching der Flamme im Dom zu erzeugen? Die Verbrennung innerhalb des Rohres ist im Rahmen der aktuellen Modellfähigkeiten

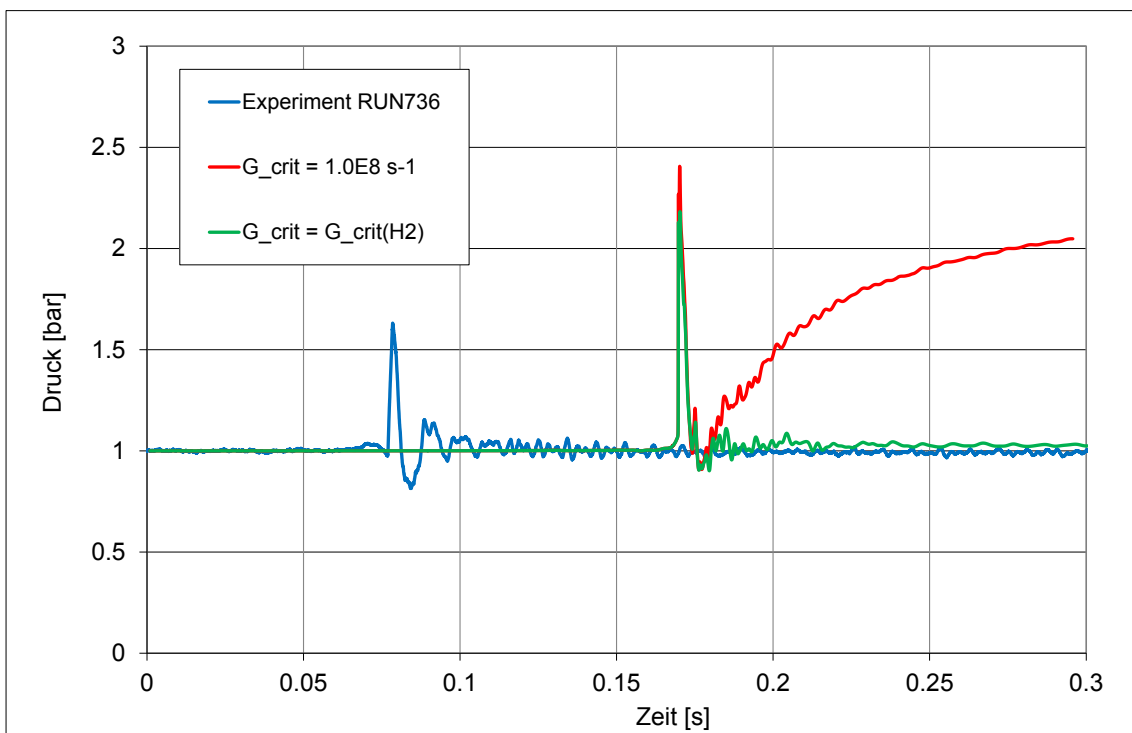
noch in Ordnung. In Abb. 8.76 ist der Einfluss der Funktion auf den Druckverlauf dargestellt. Es zeigt sich, dass der Druck nach dem anfänglichen Peak wieder auf seinen Ursprungswert zurückgeht. Dieses spricht für eine deutliche Verlangsamung der Flamme (beim Erreichen des Doms) und es entspricht auch dem Druckverlauf im Experiment. In Abb. 8.77 wird die Reaktionsfortschrittsvariable bei den beiden Rechnungen mit konstantem  $G_{\text{crit}}$  (1) und mit der Funktion  $G_{\text{crit}}(\text{H}_2)$  (2) dargestellt. Es zeigt sich, dass auch bei der Rechnung mit der Funktion  $G_{\text{crit}}(\text{H}_2)$  die Flamme den Dom erreicht, dass hier aber kaum eine Weiterentwicklung (bzw. deutlich verlangsamt) der Reaktionsfortschrittsvariablen stattfindet. Abb. 8.78 zeigt, dass zum Zeitpunkt  $t = 0.2$  s noch eine Reaktion stattfindet. Diese ist jedoch so langsam, dass sich dadurch der Druck nicht erhöht. Die Wärme wird also schneller abgeführt als erzeugt.



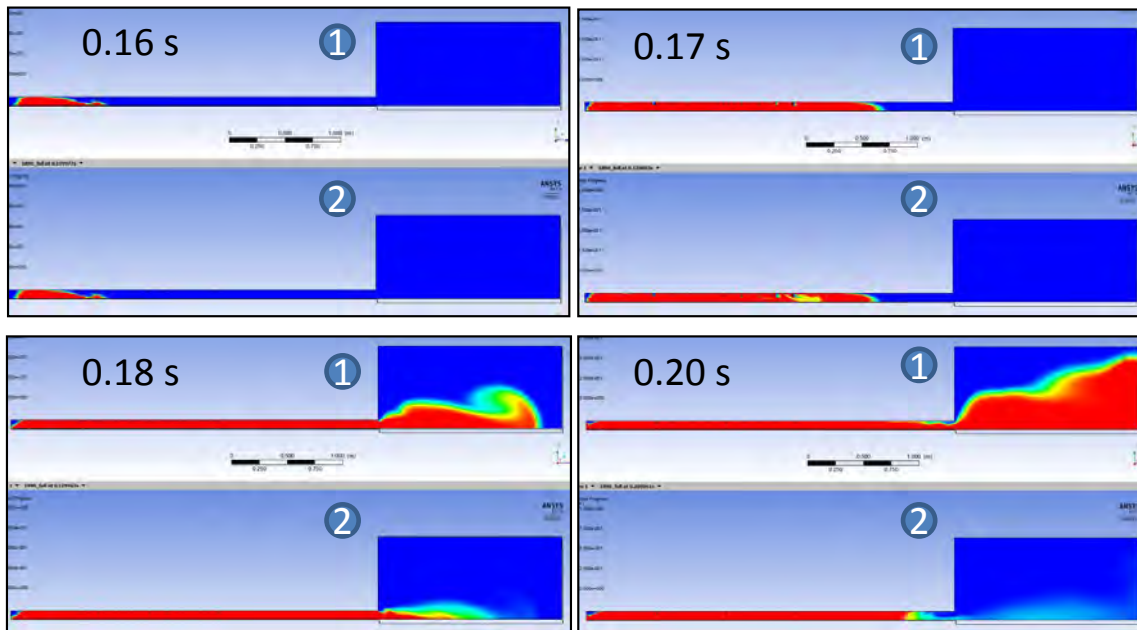
**Abb. 8.74** Funktion zur Beschreibung der H<sub>2</sub>-Abhängigkeit von  $G_{\text{crit}}$



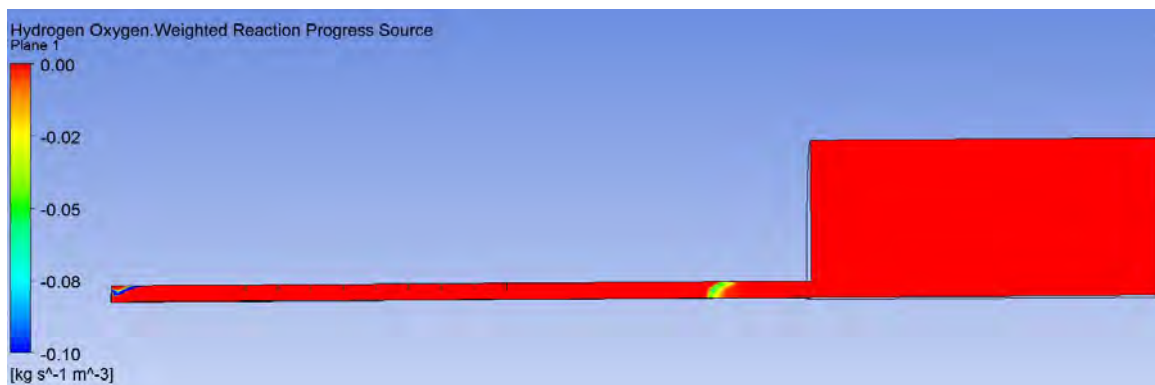
**Abb. 8.75** Einfluss der  $G_{crit}$ -Funktion auf die Flammgeschwindigkeiten



**Abb. 8.76** Einfluss der  $G_{crit}$ -Funktion auf den Druckverlauf



**Abb. 8.77** Reaktionsfortschritt: Vergleich der Rechnungen mit konstantem  $G_{crit}$  (1) und der von  $H_2$  abhängigen Funktion  $G_{crit}(H_2)$  (2)



**Abb. 8.78** Reaktionsrate bei der Rechnung mit der Funktion  $G_{crit}(H_2)$  zum Zeitpunkt  $t = 0.20$  s

### 8.10.6 Zusammenfassung und Fazit

In der vorliegenden Arbeit wurde ein Ansatz zur Beschreibung der Flammenverlöschung (Quenching) durch einen Flammenstreckungsfaktor  $G$  untersucht. Dazu wurde ein ENACCEF-Versuch nachgerechnet, bei dem ein Verlöschen der Flamme beobachtet wurde. Die Untersuchung hat gezeigt, dass durch Reduzierung des kritischen Grenzwertes  $G_{crit}$  eine deutliche Verlangsamung der Flammenausbreitung erzeugt werden kann. Eine Verlöschung wie im Experiment ist mit diesem Modell allerdings

nicht möglich. Es gibt einen grundsätzlichen Unterschied zwischen Experiment und dem Quenchingmodell in CFX. In dem CFX-Modell findet nur eine Verringerung der Verbrennungsgeschwindigkeit (abhängig von der lokalen Flammenstreckung zum jeweiligen Zeitpunkt) statt. Somit könnte bei einem Nachlassen der Turbulenz die Verbrennung in CFX wieder weiterlaufen bzw. wieder zunehmen. Dieses entspricht nicht der im Experiment beobachteten vollständigen Verlöschung.

Bei einer einfachen Anwendung des kritischen Grenzwertes findet die Verlangsamung sowohl im Beschleunigungsrohr als auch im Dom des ENACCEF-Experimentes im gleichen Maße statt. Sehr wahrscheinlich liegt noch eine zusätzliche Abhängigkeit des Grenzwertes von der  $H_2$ -Konzentration vor. Eine hierzu eingeführte Funktion führte zu einer deutlichen Verlangsamung der Flamme im Dombereich. Hierbei wird auch der weitere Druckanstieg unterbunden, da die Wärme schneller abgeführt als erzeugt wird.

## **8.11 Zusammenfassung**

Bei der Verbrennungsmodellierung mit CFX wird in den hier vorgestellten Arbeiten das Burning-Velocity-Modell verwendet. Bei diesem Modell wird die turbulente Flammengeschwindigkeit durch eine Korrelation modelliert. Fokus der hier vorgestellten Arbeiten war die Erprobung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit. Insbesondere wurden Korrelationen untersucht, bei denen der Effekt von thermo-diffusiven Flammeninstabilitäten aufgrund von  $Le < 1$  berücksichtigt wurde. Neben Korrelationen aus der Literatur (Dinkelacker, Peters, Zimont) wurde auch getestet, ob durch Erweiterung der Peters-Korrelation um einen zusätzlichen Term, der diesen Lewis-Zahl-Effekt modelliert, eine Verbesserung erzielt werden kann. Dazu wurden unterschiedliche Versuche nachgerechnet. Die Versuche unterscheiden sowohl in der Geometrie als auch in der  $H_2$ -Konzentration. Bei den THAI-HD-Versuchen (HD-7, HD-10 und HD-12) verläuft die Verbrennung langsam, die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit beträgt wenige Meter pro Sekunde. Bei dem simulierten Versuch an der ENACCEF-Versuchsanlage mit 13 Vol.-%  $H_2$  werden dagegen Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten von mehreren 100 m/s gemessen. Es wurden auch andere Effekte untersucht wie der Einfluss des Zündortes (aufwärts gerichtete Verbrennung HD-7, HD-12; abwärts gerichtete Verbrennung HD-10) und der Einfluss von seitlichem Venting (ProScienceV15). Dadurch wurde sichergestellt, dass die Gültigkeit der Korrelationen für einen weiten Geltungsbereich untersucht wurde.



Bei allen Korrelationen geht die laminare Flammgeschwindigkeit als zentraler Parameter ein. Deshalb wurden unterschiedliche Korrelationen für die laminare Flammgeschwindigkeit mit experimentellen Werten verglichen. Für die weiteren Arbeiten wurde eine Approximation aus der Dissertation von Ettner ausgewählt. Da diese nur für  $H_2$ /Luft-Verbrennungen gültig ist, wurde die Approximation um einen Term erweitert, der den Einfluss von Wasserdampf auf die laminare Flammgeschwindigkeit berücksichtigt.

Bei allen THAI-HD-Experimenten liegt der Maximaldruck im Experiment deutlich unter dem AICC-Druck. Die CFX-Simulationen berechnen einen höheren Druckwert, der deutlich näher am AICC-Druck liegt. Mögliche Ursachen für die Abweichungen ist eine ungenaue Simulation der Wärmeverluste am Behälter, aber es wurden auch experimentelle Unsicherheiten identifiziert. Neuere Untersuchungen an der ENACCEF-Anlage /GRO 17/ haben gezeigt, dass selbst bei thermischer Abschirmung der Messsonden die Druckmessung von den schnellen Temperaturänderungen beeinflusst werden kann.

Beim Versuch HD-7 werden 10 Vol.-%  $H_2$  in Luft verbrannt, wie bei allen THAI-HD-Experimenten befinden sich keine Hindernisse im THAI-Behälter. Es findet eine aufwärts gerichtete Verbrennung statt. Alle Simulationen waren in der Lage, die langsame Verbrennung mit moderaten Abweichungen beim Druck und der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit zu simulieren. Druckoszillationen wurden im Gegensatz zum Experiment bei keiner Simulation beobachtet. Im Experiment wurden als mögliche Ursachen hierfür akustische Wellen identifiziert, die in den Simulationen nicht modelliert werden. Die Dinkelacker-Korrelation und Le1T liefern ähnliche Ergebnisse. Sie können die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse sehr gut berechnen, den Druckanstieg unterschätzen sie aber etwas. Die modifizierten Peters-Korrelationen Le1 und Le1L überschätzen die Flammenausbreitung entlang der Mittelachse moderat, zeigen aber die beste Übereinstimmung bei der Berechnung des Druckanstiegs.

Bei Versuch HD-10 werden 12 Vol.-%  $H_2$  in Luft verbrannt, die Zündung findet unterhalb der Behälterdecke statt. Die meisten getesteten Korrelationen berechnen einen deutlich zu langsamen Druckanstieg. Bei der Simulation mit den Korrelationen Peters Le1 und Peters Le1L konnte das Experiment in guter Übereinstimmung nachgerechnet werden, wobei die Übereinstimmung bei Peters Le1 noch etwas besser ist. Auch wenn nicht alle Details exakt berechnet werden, so entspricht der Druckanstieg in etwas dem im Experiment.

Bei beiden Versuchen HD-2R und HD-12 erfolgt die Verbrennung von 8 Vol.-% Wasserstoffs in Luft. Alle verwendeten Korrelationen waren in der Lage eine langsame Verbrennung mit einer Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von wenigen Metern pro Sekunde vorherzusagen. Allerdings wird von allen Simulationen die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit überschätzt. Dies zeigt sich auch beim zu schnellen Druckanstieg. Die Peters- und die Zimont-Korrelation haben insgesamt die beste Übereinstimmung erzielen können. Dieser Versuch kann nur eingeschränkt zur Auswahl der Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit genutzt werden. Bei 8 Vol.-% liegen keine experimentellen Daten zur laminaren Flammengeschwindigkeit vor. Entsprechend groß ist die Unsicherheit bei den Korrelationen für die laminare Flammengeschwindigkeit für so niedrige Wasserstoffkorrelationen. Würde eine niedrigere laminare Flammengeschwindigkeit verwendet, so könnte mit anderen Korrelationen eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt werden.

Eine Verbrennung von 13 Vol.-%  $H_2$  in Luft in der ENACCEF-Anlage (Blockaderate = 0.5) wurde mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit simuliert. Die Simulationen mit der Zimont- und der Peters-Korrelation waren in der Lage, die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit und die Höhe des kurzzeitigen Druckpeaks in guter Übereinstimmung mit dem Experiment zu berechnen. Die Simulation mit der Dinkelacker-Korrelation unterschätzt die Beschleunigung der Flamme an den Hindernissen signifikant. Die Simulationen mit den Korrelationen Peters Le0.3, Peters Le0.3L, Peters Le0.3T und Peters Le1L berechnen eine zu starke Beschleunigung der Flamme an den Hindernissen, die Verlangsamung der Flamme nach den Hindernissen und die erneute Beschleunigung nach Eintritt in den Dom werden aber qualitativ richtig berechnet. Die Simulation mit Peters Le0.3L zeigt dabei die beste Übereinstimmung. Bei dieser Simulation ist verglichen mit der Peters-Korrelation sogar eine Verbesserung dahingehend festzustellen, dass die Beschleunigung der Flamme an den Hindernissen nicht mehr verzögert stattfindet. Die Simulationen mit Peters Le1 und Peters Le1T berechnen eine deutlich zu schnelle Flammenausbreitung, es findet auch kein Verlangsamen der Flamme nach den Hindernissen mehr statt.

Der Versuch ProScience V15 wurde im Behälter A3 durchgeführt, in den ein vertikaler Kanal eingebracht wurde. Der Kanal ist an einer Seite offen, so dass bei der Verbrennung ein seitliches Venting stattfindet. In den vertikalen Kanal wurden immer 16 Hindernisse mit komplexer Geometrie eingebaut. Dieser Kanal wird mit 12 Vol.-%  $H_2$  gefüllt. Bei der Simulation wird von einer nahezu 2-dimensionalen Geometrie ausgegangen, so dass Symmetrierandbedingungen an den Seitenwänden des Verbrennungskanals

nals gesetzt werden können. Trotz einem sehr feinen Gitter mit 4.2 Millionen Zellen konnte keine gitterunabhängige Lösung gefunden werden. Ein quantitativer Vergleich der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit zeigt, dass die Simulation von ProScienceV15 von allen im Projekt simulierten Versuchen am anspruchsvollsten war, fast alle Simulationen waren nicht in der Lage, die Flammenbeschleunigung ansatzweise richtig zu berechnen. Die Korrelationen Peters, Zimont, Dinkelacker, Peters Le0.3L und Peters Le1L simulieren keine signifikante Flammenbeschleunigung an den Hindernissen. Die Simulationen mit den Korrelationen Peters Le1 und Peters Le1T berechnen eine viel zu schnelle Verbrennung. Von den im Projekt untersuchten Korrelationen waren Peters Le0.3 und Peters Le0.3T noch am ehesten in der Lage, das Experiment zu beschreiben, aber auch bei ihnen wird die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit deutlich unterschätzt. Mit der Korrelation Peters Le0.6 konnte dagegen das Experiment zufriedenstellend simuliert werden. Die Ergebnisse des ENACCEF-Experiments 13 Vol.-% (schon Peters Le0.3 überschätzt Flammenausbreitungsgeschwindigkeit klar) legen aber nahe, dass es auch mit dieser Korrelation nicht möglich ist, alle Experimente zufriedenstellend zu simulieren.

Zusammengefasst kann festgestellt werden, dass bei langsamen Verbrennungsprozessen (z. B. THAI-HD) die Berücksichtigung der thermo-diffusiven Flammeninstabilitäten durch einen Faktor  $Le^{-1}$  zu einer besseren Übereinstimmung führt. Bei schnellen turbulent beschleunigten Verbrennungen wie beim simulierten ENACCEF-Versuch liefern die Korrelationen Peters bzw. Zimont bessere Ergebnisse. Bei Berücksichtigung von thermo-diffusiven Flammeninstabilitäten durch einen zusätzlichen Faktor (z. B.  $Le^{-1}$ ) wird die Verbrennungsgeschwindigkeit bei diesen Versuchen deutlich überschätzt. Bei ProScienceV15 liegt die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit zwischen diesen beiden Extremen. Hier führt ein geringerer Vorfaktor von  $Le^{-0.6}$  zu einer guten Übereinstimmung. Ohne Zusatzfaktor wird die Brenngeschwindigkeit deutlich unterschätzt, bei einem Faktor von  $Le^{-1}$  dagegen überschätzt. Eine plausible Erklärung ist, dass bei geringer Turbulenz eine (gewinkelte) Flammenfront vorliegt, bei der die thermo-diffusiven Prozesse eine deutliche Rolle spielen. Mit zunehmender Turbulenz wird die Flammenfront immer stärker gestört. Im Fall sehr starker Turbulenz kann die turbulente Damköhler-Zahl, die das Verhältnis der Zeitskala der chemischen Reaktion mit der der physikalischen Prozesse ins Verhältnis setzt, kleiner 1 werden. In diesem Bereich wechselwirken die Wirbel direkt mit der Flammenstruktur, die kaum mehr als Flammenfront bezeichnet werden kann (idealer Rührreaktor). In diesem Fall ist der Lewis-Zahl-Effekt zu vernachlässigen.

Mit diesen hier gewonnenen Erkenntnissen ist es möglich, je nach Verbrennungsregime des Versuchs eine geeignete Korrelation zu wählen. Für Containmentsimulationen ist diese Vorgehensweise allerdings unbefriedigend, da unterschiedliche Verbrennungsregimes vorliegen können. Hier wäre es wichtig, ein (lokales) Kriterium zu finden, das es CFX erlaubt, den Exponenten beim zusätzlichen Term entsprechend zwischen 0 und -1 zu wählen.

Die GRS hat sich mit CFX-Simulationen am ETSON-MITHYGENE-Verbrennungsbenchmark beteiligt. Da die Versuchsergebnisse der 2. Benchmarkphase zum Zeitpunkt der Berichterstellung noch nicht veröffentlicht wurden, konnte nur die offene Nachrechnung des Versuchs mit 13 Vol.-% H<sub>2</sub> mit experimentellen Daten verglichen werden. Entsprechend den Erkenntnissen aus den vorangegangenen Untersuchungen wurden die Simulationen mit der Peters- und der Zimont-Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit durchgeführt. Beide Simulationen berechnen sehr ähnliche Ergebnisse. Beim Vergleich der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit zeigt sich eine relativ gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Die kurzzeitigen Druckpeaks konnten qualitativ und quantitativ in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden, wenn die Messunsicherheiten und die Reproduzierbarkeit des Experiments berücksichtigt werden.

Als weiterer Arbeitspunkt wurde ein Ansatz zur Beschreibung der turbulenten Flammenverlöschung durch einen Flammenstreckungsfaktor  $G$  untersucht. Dazu wurde ein ENACCEF-Versuch nachgerechnet, bei dem ein Verlöschen der Flamme beobachtet wurde. Die Untersuchung hat gezeigt, dass durch Reduzierung des kritischen Grenzwertes  $G_{crit}$  eine deutliche Verlangsamung der Flammenausbreitung erzeugt werden kann. Bei Wahl eines von der H<sub>2</sub>-Konzentration abhängigen Wertes für  $G_{crit}$  können einige Messwerte (z. B. Druck) zufriedenstellend simuliert werden. Eine Verlöschung wie im Experiment ist mit diesem Modell allerdings nicht möglich, da in CFX nur eine Verringerung der Verbrennungsgeschwindigkeit abhängig von der lokalen Flammenstreckung zum jeweiligen Zeitpunkt stattfindet.



## **9           Arbeitspunkt 2 – Vergleich der Leistungsfähigkeit von OpenFOAM und CFX**

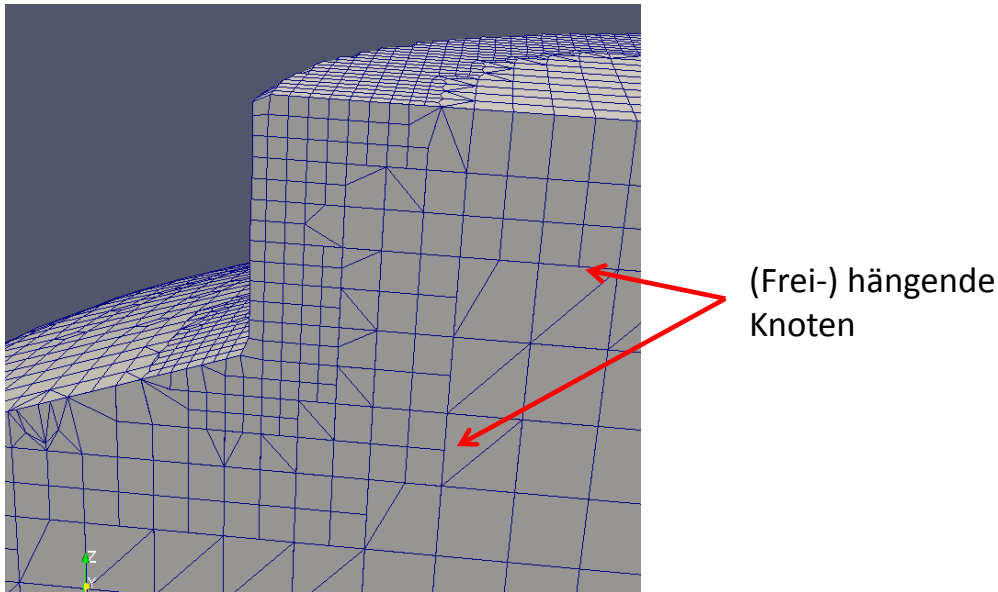
Ziel der vorliegenden Arbeiten ist der Vergleich der Leistungsfähigkeit der CFD-Software OpenFOAM mit der Leistungsfähigkeit der bisher verwendeten Software ANSYS-CFX in der Anwendung für Fragestellungen des Sicherheitsbehälters. Hierbei soll speziell nur der Aspekt der Gasverteilung (in einem Containment) untersucht werden. Dazu werden im Folgenden unterschiedliche Experimente nachgerechnet.

### **9.1           Allgemeine Gegenüberstellung von CFX und OpenFOAM**

Generell bietet OpenFOAM als Open-Source-Software die Möglichkeit, den Source-Code einzusehen und auch selber (um)-zuschreiben. Dies ist ein Vorteil gegenüber der kommerziellen Software CFX, bei der auf die Zuarbeit der Herstellerfirma ANSYS zurückgegriffen werden muss. Generell besteht auch bei beiden Codes die Möglichkeit, zusätzliche Modelle anzufügen. Weiterhin ist OpenFOAM frei verfügbar, so dass keine Lizenzkosten wie bei CFX anfallen. Dies macht sich insbesondere bei großen Rechnungen bemerkbar, für die eine Vielzahl von CFX-Lizenzen für die parallele Abarbeitung auf mehreren CPUs notwendig ist. Hier gibt es bei OpenFOAM keinerlei Begrenzungen durch fehlende Parallel-Lizenzen.

Da OpenFOAM kein kommerzielles Produkt ist, wird die Software-Pflege vermutlich nicht den gleichen Umfang wie beim kommerziellen Ansys CFX haben. Die Gesamtaufsicht für die Code-Pflege hat die OpenFOAM-Foundation und dort insbesondere der Entwickler Henry Weller. Einzelne Modelle sind sicherlich von einzelnen Anwendern zum Teil im Rahmen von Promotionsarbeiten detailliert untersucht und validiert worden. Aber z. B. bei einer neuen OpenFOAM-Version müsste ein anderer Anwender erst einmal selber testen, ob ältere Validierungsrechnungen noch zu den gleichen Ergebnissen führen. Dies stellt einen Nachteil gegenüber einer kommerziellen Software wie CFX dar. Weiterhin fehlt auch eine systematische Dokumentation, insbesondere des eigentlichen Source-Codes.

Bei der Vernetzung fällt auf, dass OpenFOAM generell die Möglichkeit hat, mit sogenannten „hängenden“ Knoten umzugehen (im Gegensatz zu CFX). Ein Beispiel hierfür ist in Abb. 9.1 dargestellt. Dies erlaubt eine lokale Netzverfeinerung, ohne dass diese Verfeinerung Auswirkungen auf das restliche Berechnungsgitter hat.



**Abb. 9.1** Detail eines OpenFOAM-Netzes mit (frei) hängenden Knoten

OpenFOAM enthält in der gegenwärtigen Version (5.0) zahlreiche Turbulenzmodelle, wie z. B. k-epsilon-Modelle (Standard, RNG, Launder-Sharma), (k-omega) SST und weitere, sowie die Möglichkeiten zur Durchführung von LES oder DNS-Berechnungen. Auch die gravitationsbedingte Turbulenzerzeugung und –dämpfung wurde in einem Turbulenzmodell (buoyantKEpsilon) berücksichtigt.

OpenFOAM enthält zahlreiche Solver für eine Vielzahl von Anwendungen. Alleine die als Standard-Solver im Handbuch aufgeführten Solver haben eine Anzahl von etwa 100. Darunter sind Solver für inkompressible und kompressible Strömungen, Mehrphasenströmungen, direkte numerische Simulationen (DNS), Verbrennung, Wärmetransport, Gravitation, Partikel-Tracking, Spannungsberechnung in Festkörpern und viele mehr. Für die vorliegende Problemstellung wurde der Solver `rohReactingBuoyantFoam` ausgewählt; mehr hierzu weiter unten.

Sowohl OpenFOAM als auch ANSYS-CFX bieten beide generell die Möglichkeit zur Parallelisierung der Berechnungen. ANSYS-CFX bietet dem Nutzer eine etwas komfortable Benutzeroberfläche, während OpenFOAM umständlicher über ASCII-Eingabefiles gesteuert werden muss. Tab. 9.1 fasst noch einmal diesen Vergleich der Eigenschaften von OpenFOAM und CFX zusammen.

**Tab. 9.1** Vergleich allgemeiner Eigenschaften von CFX und OpenFOAM

<b>CFX</b>	<b>OpenFOAM</b>
Source-Code nicht verfügbar	Open-Source-Software
Kommerzielle Software / hohe Lizenzkosten	Frei verfügbar / keine Lizenzkosten
Systematische Pflege und Dokumentation des Source-Codes	Dokumentation des Source-Codes nicht systematisch
Vernetzung: Strukturierte, unstrukturierte oder hybride Gitter möglich. Bei strukturierten Gittern keine hängenden Knoten möglich	Vernetzung: Direkter Import von CFX möglich (alle Netze) oder eigenständige Vernetzung mit SnappyHexMesh. Hier Vernetzung mit hängenden Knoten möglich
Turbulenzmodelle (u. a.): SST, k-epsilon, ...	Turbulenzmodelle (u. a.): SST, k-epsilon, ...
Berücksichtigung der Buoyancy-Turbulenz möglich	Berücksichtigung der Buoyancy-Turbulenz möglich
Modelle für Conjugated Heat Transfer, Wandkondensation, Strahlung vorhanden	Modelle für Conjugated Heat Transfer, Kondensation und Strahlung vorhanden. Informationen über erste Tests finden sich weiter unten im Text.
Parallelisierbar	Parallelisierbar
Aufsetzen mit Hilfe einer Bediener-Oberfläche	Aufsetzen von Rechnungen über ASCII-Files

Im Folgenden sollen drei Experimente mit Hilfe von OpenFOAM nachgerechnet werden. Anhand der Berechnungsergebnisse soll die Leistungsfähigkeit von OpenFOAM mit der von CFX speziell für den Aspekt Gas-Verteilung im Containment verglichen werden. Begonnen wird im folgenden Abschnitt mit dem THAI-Versuch TH-26 zur Auflösung einer Heliumschicht.

## 9.2 Nachrechnung des THAI-Versuches TH-26 mit OpenFOAM

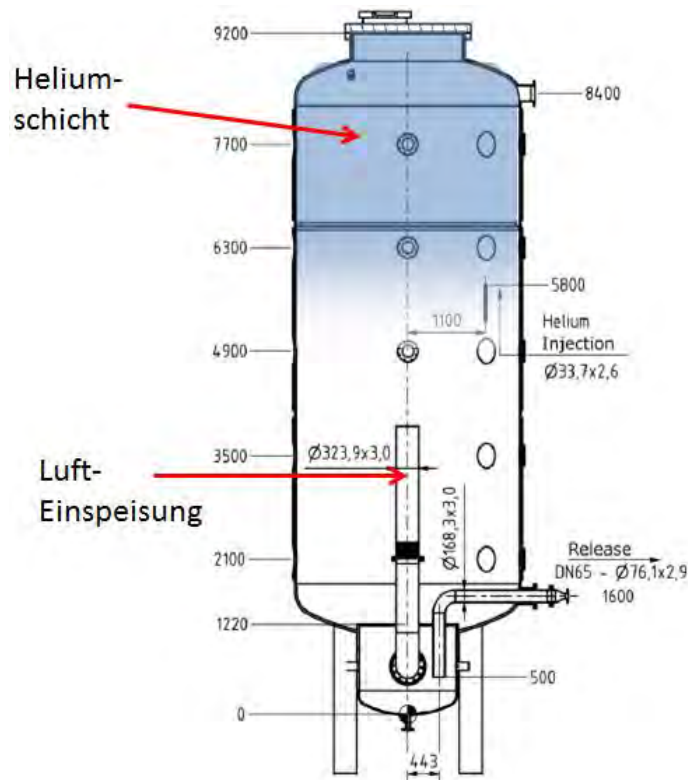
### 9.2.1 Experimentelles Setup

Das experimentelle Setup für den THAI-Versuch TH-26 ist in Abb. 9.2 dargestellt. Im oberen Bereich befindet sich die Heliumschicht mit maximal 6.9 % Helium (entspricht etwa 37 Vol.-%). Unten in der Mitte befindet sich ein Rohr, durch das ca. 144.1 g Luft pro Sekunde eingespeist werden. Durch den sich herausbildenden Freistrahler wird die Heliumschicht langsam abgebaut. Im unteren Bereich des THAI-Behälters gibt es noch



eine Venting-Öffnung, durch die ein konstanter Druck von 1.5 bar im Behälter gehalten wird.

In der im folgenden beschriebenen OpenFOAM-Nachrechnung wird nur die Phase des Helium-Abbaus (ab ca. 4400 s), nicht aber die vorrausgehende Helium-Aufbau-Phase berechnet. Die initialen Helium-Konzentrationen werden OpenFOAM als Startwerte mitgegeben.



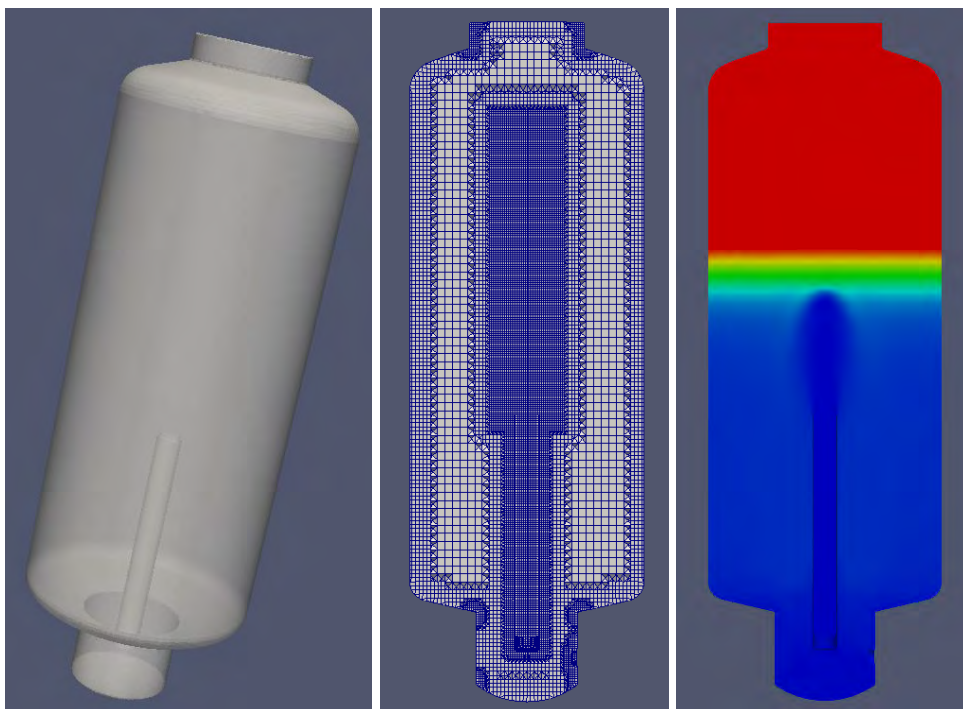
**Abb. 9.2** Experimentelles Setup des TH-26 Versuchs

### 9.2.2 Geometrie und Randbedingungen

Prinzipiell lassen sich mit Gridgen für CFX erstellte Gitter mit einem Konvertierungsprogramm (fluentMeshToFoam) in das OpenFOAM-Format konvertieren. Die Nutzung von CFX-Gittern war aber nur bedingt erfolgreich. Der OpenFOAM-Solver rhoReactingBuoyantFoam hat Konvergenzprobleme, wenn nicht-orthogonale Zellen vorkommen. Bei den importierten CFX-Gittern konnte in der Regel nur sehr schwer eine konvergente Lösung mit OpenFOAM gefunden werden, obwohl mit allen Gittern in CFX ohne Schwierigkeiten eine Berechnung durchgeführt werden konnte. Dieses gilt zunächst nur für die von uns verwendeten Solvareinstellungen. Ob es bei anderen Sol-

vereinstellungen zu einem besseren Konvergenzverhalten kommt ist unklar. Zudem lassen sich bei Verwendung von CFX-Gittern die Vorteile von OpenFOAM nicht voll nutzen. Die in OpenFOAM erlaubten „hängenden“ Knoten ermöglichen eine lokale Gitterverfeinerung, ohne dass andere Bereiche im Gitter hiervon beeinflusst werden. Dies ermöglicht in vielen Fällen die Erstellung von Gittern, die nur schwach nicht-orthogonale Zellen enthalten und damit besser den Anforderungen von OpenFOAM entsprechen.

In Abb. 9.3 sind die Geometrie und die Vernetzung für den TH-26-Fall dargestellt. Das Netz wurde mit Hilfe des OpenFOAM-Tools SnappyMesh aus einer STL-Oberfläche hergestellt und es enthält 762 077 Elemente. STL ist die Abkürzung für **ST**ereo**L**itho**g**raphie und bezeichnet ein spezielles Datei-Format. STL-Oberflächen lassen sich nach Erstellung einer Geometrie sowohl aus Gridgen als auch aus der ANSYS-Workbench heraus exportieren. Das OpenFOAM-Tool SnappyMesh verfeinert einen über der gesamten STL-Oberfläche liegenden Geometrie-Block in der Nähe der Oberfläche nach Benutzerangaben und eliminiert dann außerhalb der Geometrie liegende Elemente. Weitere Verfeinerungen können in vom Benutzer definierten Bereichen vorgenommen werden. Dies wurde bei der vorliegenden TH-26 Geometrie z. B. mittig in der Position des Einlass-Rohres und des Luft-Freistrahls durchgeführt.



**Abb. 9.3** OpenFOAM-Geometrie und Vernetzung für die Simulation des THAI-Experimentes TH-26

Für die anschließende Berechnung des OECD/PANDA-Benchmarks wurde OpenFOAM der Version 2.3.1 verwendet. Als Solver wurde der OpenFOAM-Solver rhoReactingBuoyantFoam ausgewählt, da dieser

- mehrere (Gas-)Spezies behandeln kann,
- kompressible Gase erlaubt,
- Temperaturen und Energieaustausch berechnet,
- ein Schwerfeld berücksichtigen kann.

Vielen anderen standardmäßig in OpenFOAM implementierten Solvern (z. B. simpleFoam, rhoCentralFoam, ...) fehlen eine oder mehrere dieser Eigenschaften. Weitere Berechnungsparameter finden sich in Tab. 9.2.

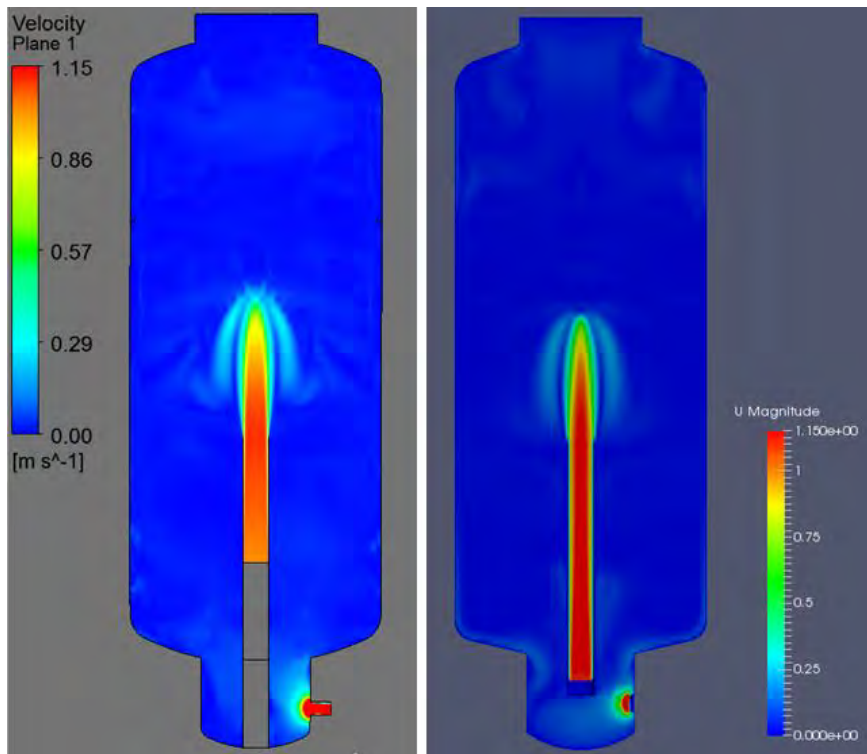
**Tab. 9.2** Berechnungsparameter und Randbedingungen

Software / Version	OpenFOAM 2.3.1
Solver	rhoReactingBuoyantFoam
Zeitschritte	Adaptiv (max. 0.04 s)
Turbulenzmodell	k-omega-SST
Diffusionskoeffizient	Konstant 8.0e-5
Elementzahl	762 077

### 9.2.3 Vergleich von OpenFOAM mit CFX und experimentellen Ergebnissen

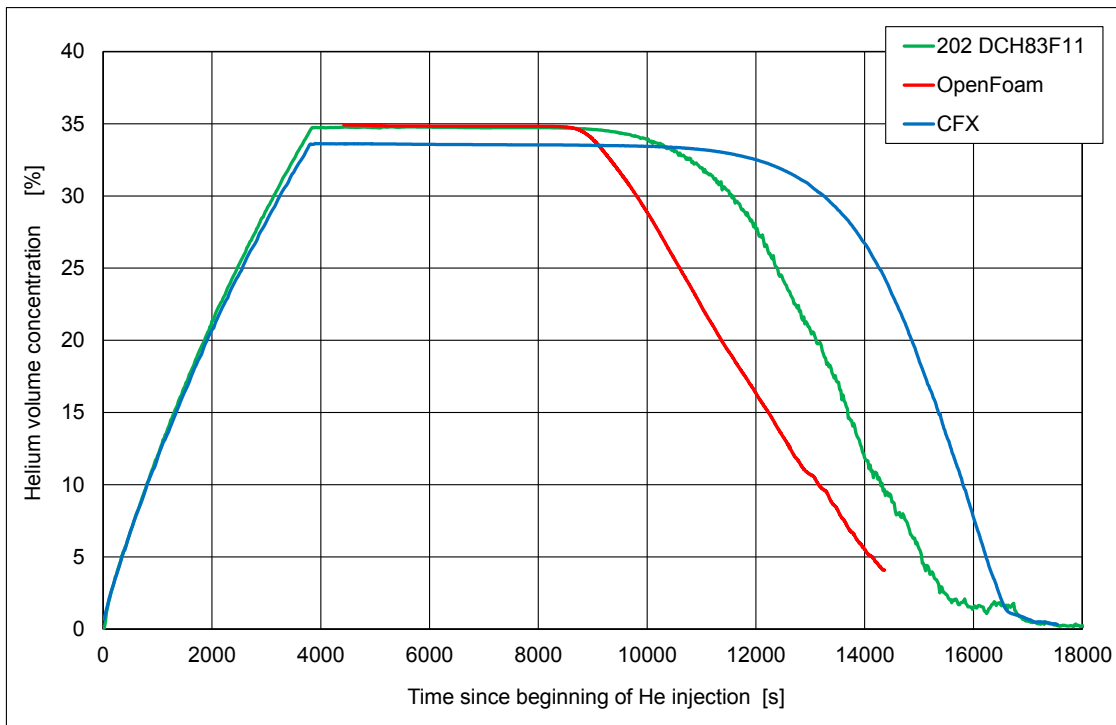
In Abb. 9.4 werden die Simulationsergebnisse von CFX und OpenFOAM miteinander verglichen. Zunächst einmal sehen die beiden Ergebnisse optisch sehr ähnlich aus, obwohl es einige kleinere Unterschiede in Form und Länge des Freistrahls gibt. Mögliche Ursachen für die Unterschiede sind:

- Unterschiedlich lange Einlassrohre (die CFX-Rechnung wurde hier nicht mehr verändert).
- Unterschiedliche Gitterstruktur: Das OpenFOAM-Gitter ist rechtwinkliger und insbesondere in vertikaler Richtung stärker verfeinert als das CFX-Gitter.
- Unterschiedliche Turbulenzmodellierung, insbesondere in Bezug auf die Buoyancy-Turbulenzterme. Dieser Punkt wird später noch ausführlicher diskutiert.

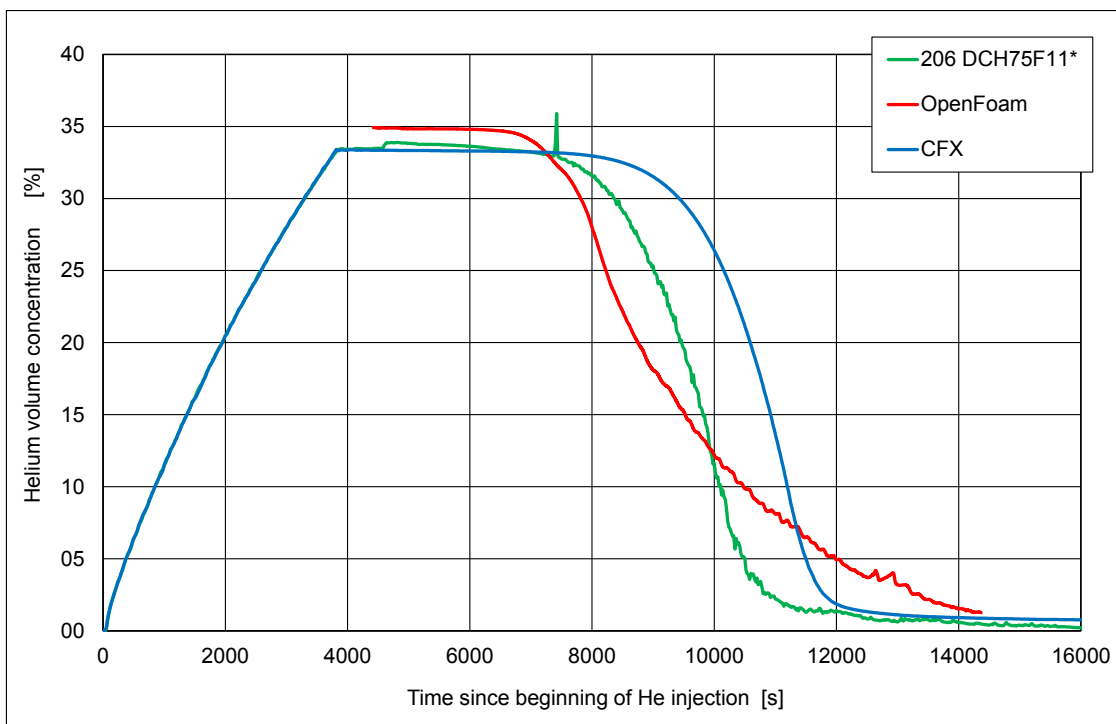


**Abb. 9.4** Vergleich von CFX- (links) und OpenFOAM- (rechts) Ergebnissen im Post-processor für TH-26

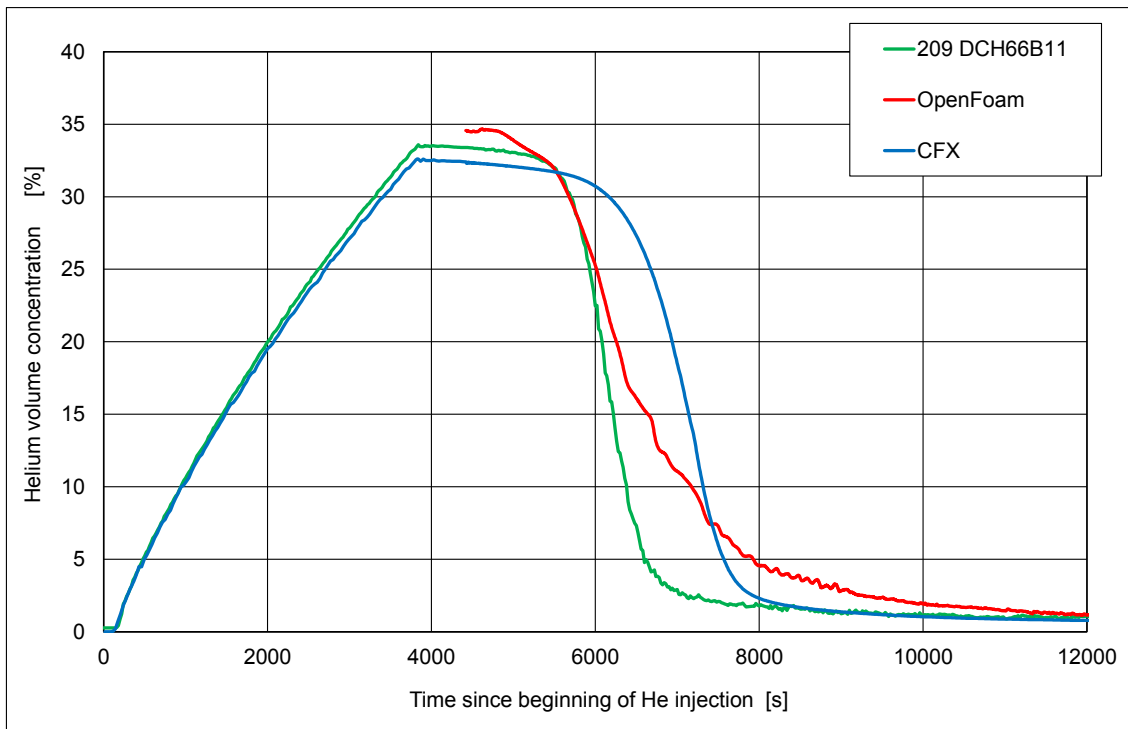
In den folgenden Abbildungen Abb. 9.5 bis Abb. 9.9 wird der Verlauf der mit OpenFOAM berechneten Heliumkonzentration mit den CFX-Ergebnissen und auch mit den experimentellen Werten verglichen. Hier zeigt sich im oberen Bereich ein etwas zu frühes Einsetzen des Helium-Abbaus (Abb. 9.5 und Abb. 9.6). Hier wie auch etwas tiefer geht die Kurve mit der Heliumkonzentration dann aber bei der OpenFOAM-Rechnung im Verhältnis zum Experiment etwas zu langsam nach unten. Im unteren Bereich (siehe Abb. 9.8 und Abb. 9.9) findet sich eine gute Übereinstimmung zwischen OpenFOAM-Ergebnissen und experimentellen Daten.



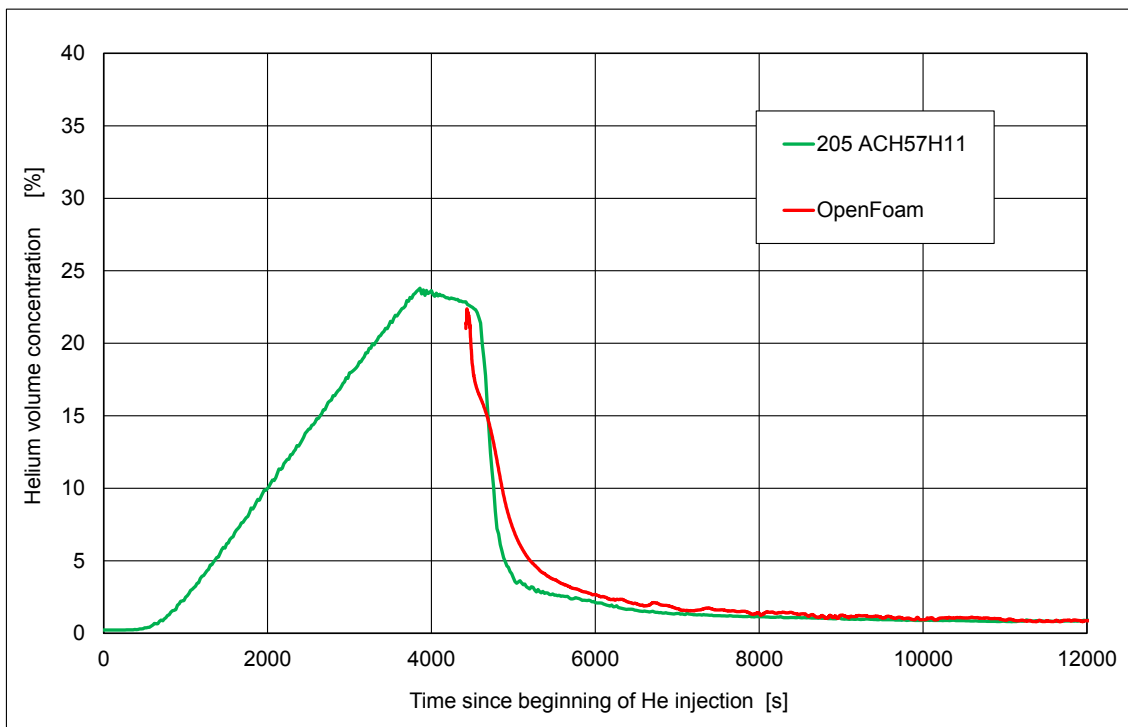
**Abb. 9.5** Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS\_27 (8.3 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter)



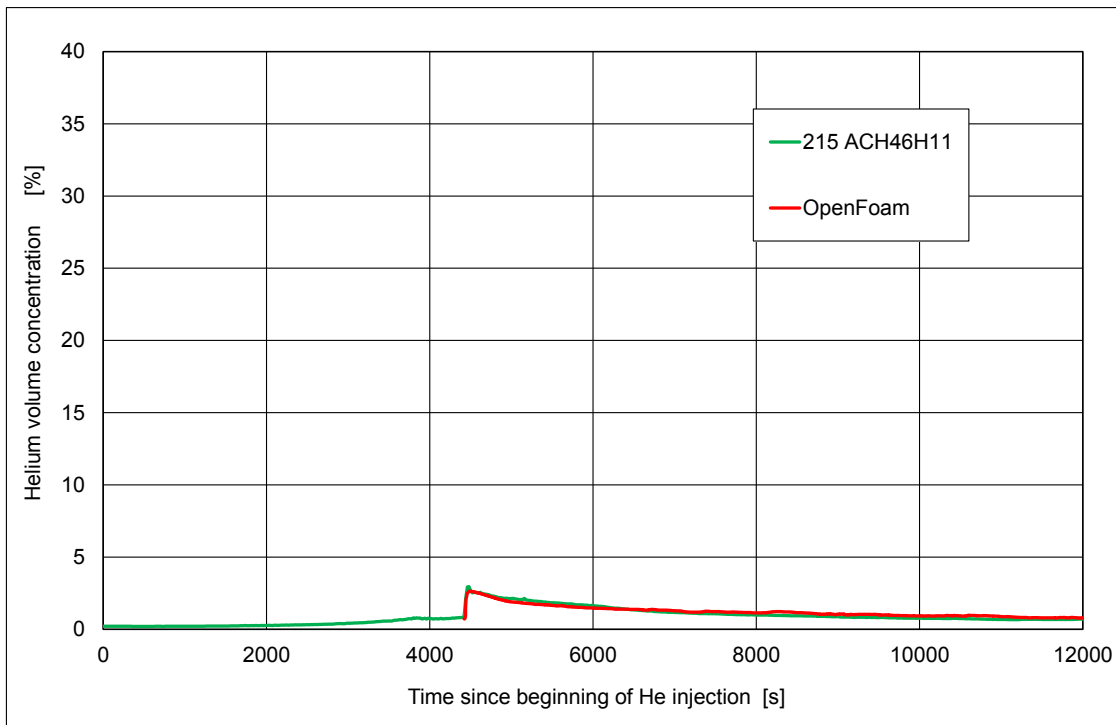
**Abb. 9.6** Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS\_23 (7.5 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter)



**Abb. 9.7** Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS\_20 (6.6 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter)



**Abb. 9.8** Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS\_16 (5.73 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter)

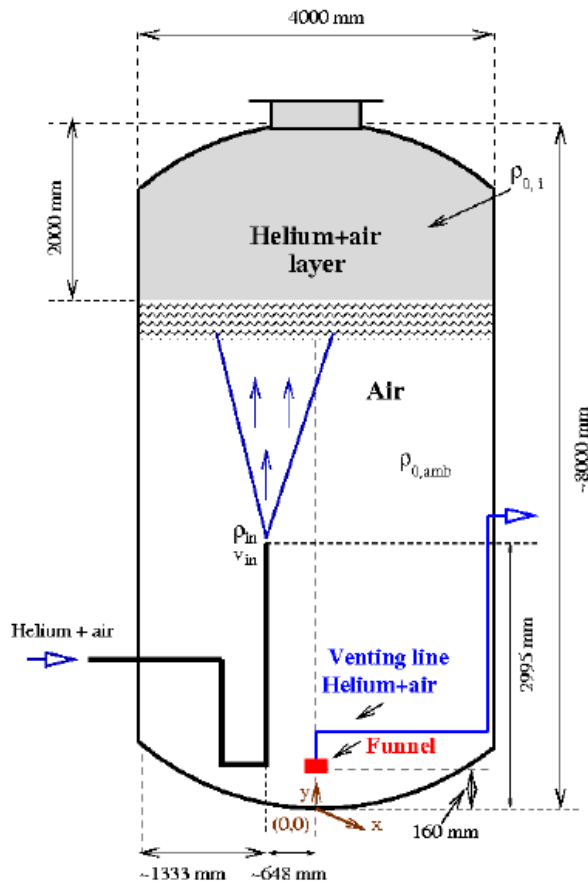


**Abb. 9.9** Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS\_13 (4.6 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter)

### 9.3 Nachrechnung des OECD/PANDA-Benchmarks mit OpenFOAM

#### 9.3.1 Experimentelles Setup

Das experimentelle Setup für den OECD/PANDA-Benchmark ist in Abb. 9.10 dargestellt. In groben Zügen ähnelt es dem Aufbau des THAI TH-26 Experimentes. Über ein vertikal ausgerichtetes Einlassrohr wird Luft eingespeist (mit einem minimalen Heliumanteil), mit dem eine bereits vorhandene Heliumschicht im PANDA-Behälter aufgelöst wird. Im unteren Bereich befindet sich eine Venting-Leitung, die über ein Ventil einen konstanten Druck von etwa 1 bar im Versuchsbehälter einstellt.



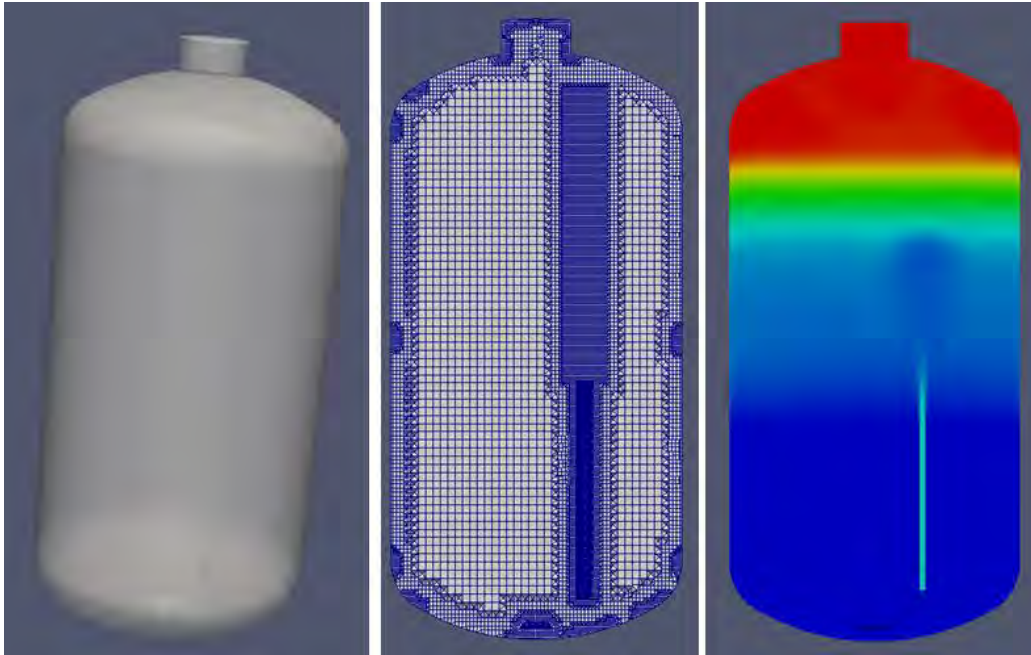
**Abb. 9.10** Experimenteller Setup des OECD/PANDA-Benchmark (Bildquelle /ADR 13/)

### 9.3.2 Geometrie und Randbedingung

Die zur Nachrechnung des PANDA-Experimentes erstellte Geometrie und das Netz sind in Abb. 9.11 dargestellt. Sie wurde mit Hilfe des OpenFOAM-Tools SnappyMesh aus einer STL-Oberfläche erstellt und enthält 951335 Elemente. Das Netz wurde insbesondere im Bereich des Einlassrohres und des Freistrahls verfeinert.

Die Berechnungsparameter für die PANDA-Nachrechnung sind in Tab. 9.3 aufgelistet. Es wurde wieder der Solver rhoReactingBuoyantFoam zusammen mit dem k-Epsilon Turbulenzmodell verwendet. Eine Simulation der thermischen Wärmestrahlung findet nicht statt. Dies ist physikalisch gerechtfertigt, da kein Dampf vorliegt und Temperaturen im Bereich von 22 °C – 27 °C liegen. Die entsprechenden CFX-Simulationen und weitere Informationen zum Versuch sind im Abschnitt 7.1 zu finden.





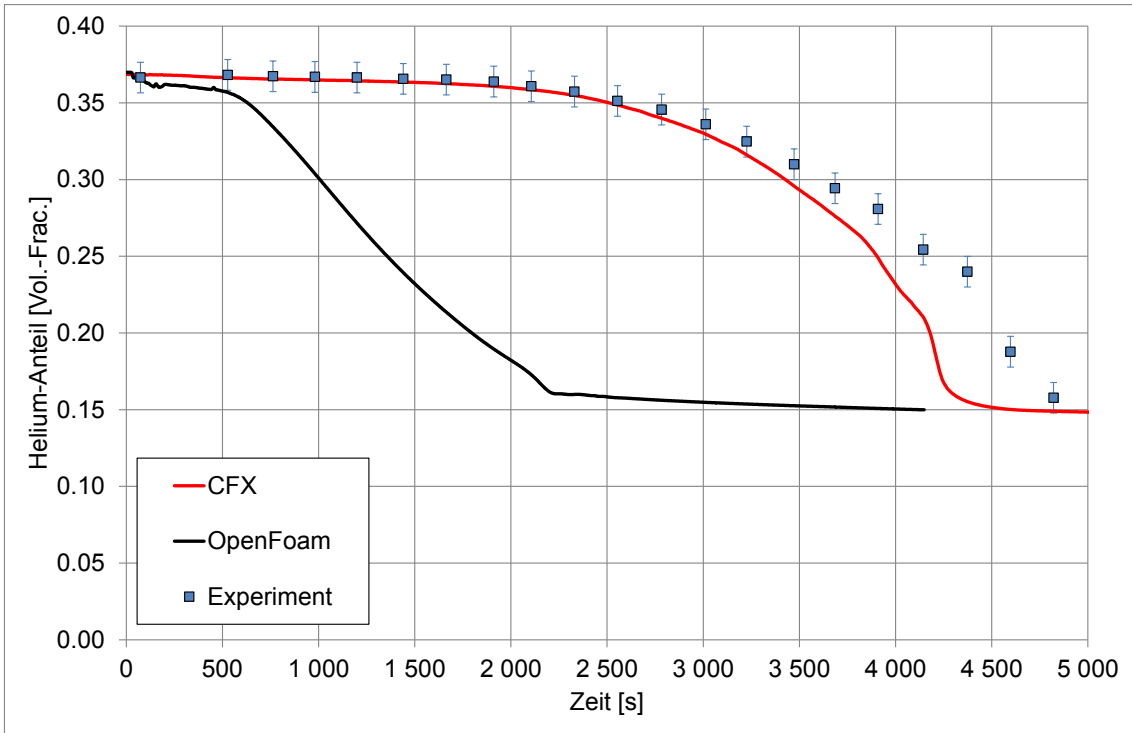
**Abb. 9.11** PANDA-Geometrie (links), Berechnungsnetz (Mitte) und ein Simulationsergebnis (rechts)

**Tab. 9.3** Berechnungsparameter für die OpenFOAM-Berechnung

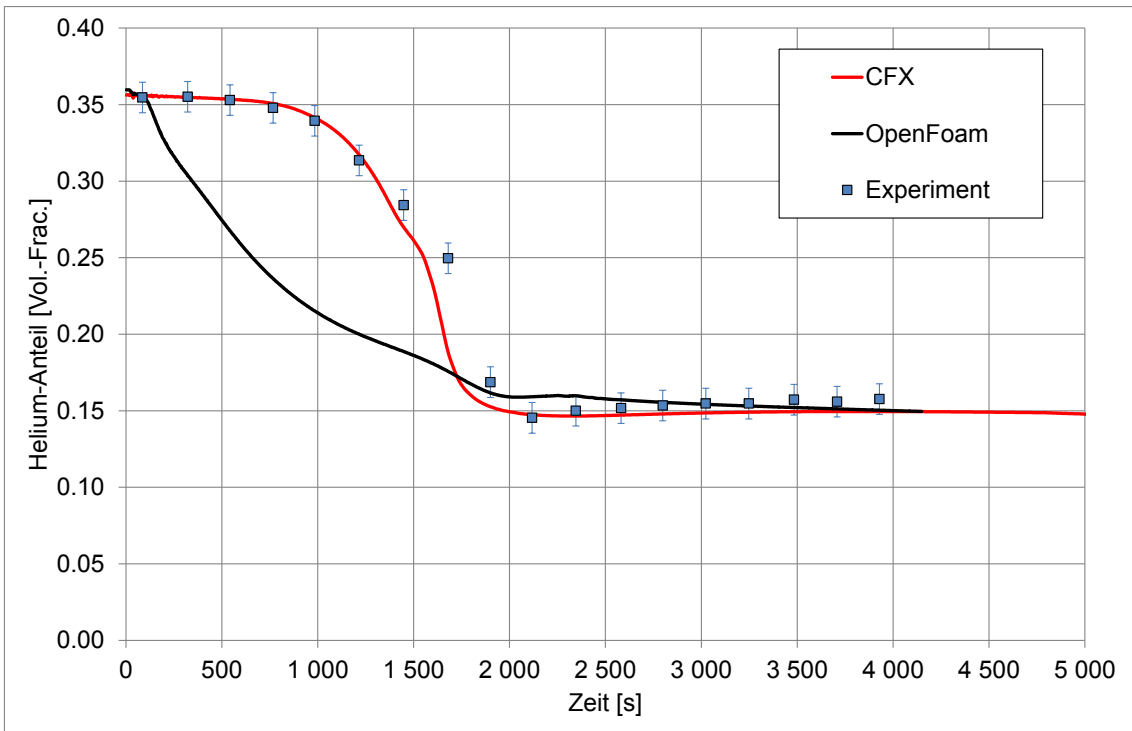
Software / Version	OpenFOAM 2.3.1
Solver	rhoReactingBuoyantFoam
Zeitschritte	Adaptiv (max. 0.0025 s)
Turbulenzmodell	k-Epsilon
Diffusionskoeffizient	Konstant 8.0e-5
Elementzahl	951 335

### 9.3.3 Vergleich von OpenFOAM mit CFX und experimentellen Ergebnissen

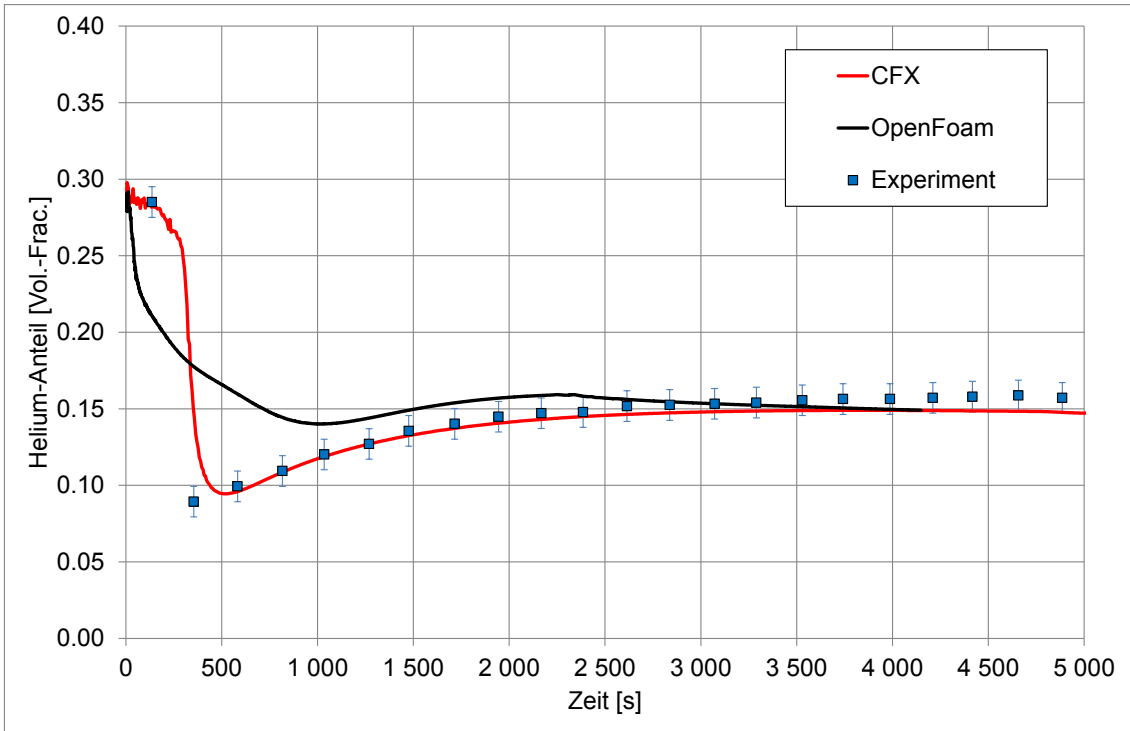
In Abb. 9.12 bis Abb. 9.15 ist der zeitliche Verlauf der Heliumkonzentration an unterschiedlichen Messpunkten dargestellt. Bei allen Messpunkten zeigt sich bei OpenFOAM eine deutlich zu frühe Auflösung der Heliumschiichtung. Während im Experiment die Heliumschiichtung erst bei ca. 5500 s vollständig aufgelöst wird, findet die Auflösung in der OpenFOAM-Rechnung schon innerhalb der ersten 2000 s statt. Die CFX-Rechnung gibt den Verlauf des Experimentes wesentlich besser als die OpenFOAM-Rechnung wieder. Eine mögliche Ursache hierfür ist die fehlende Berücksichtigung der Buoyancy-Turbulenz in OpenFOAM, dieser Aspekt wird im folgenden Abschnitt ausführlich diskutiert.



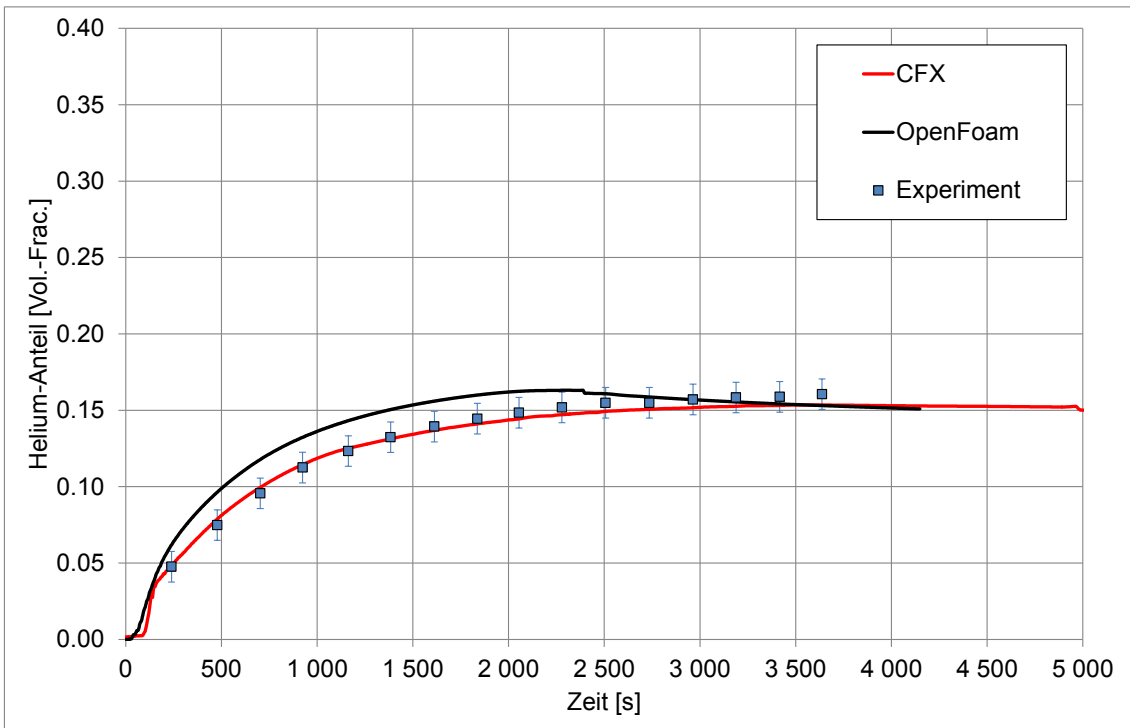
**Abb. 9.12** Heliumkonzentration bei Messpunkt MS\_1 (7.478 m Höhe / über dem Einlass)



**Abb. 9.13** Heliumkonzentration bei Messpunkt MS\_2 (6.706 m Höhe / über dem Einlass)



**Abb. 9.14** Heliumkonzentration bei Messpunkt MS\_4 (6.00 m Höhe / über dem Einlass)



**Abb. 9.15** Heliumkonzentration bei Messpunkt MS\_15 (3.676 m Höhe / seitlich im PANDA-Behälter)

## 9.4 Einfluss der gravitationsbedingten Turbulenzproduktion

### 9.4.1 Analysen anderer Institute

Auch andere Institute berichten von ähnlichen Erfahrungen mit OpenFOAM-Berechnungen, die im Folgenden kurz besprochen werden sollen.

#### *Forschungszentrum Jülich:*

Beim Forschungszentrum Jülich durchgeführte Simulationen zum Abbau einer Heliumschicht im Mini-PANDA-Experiment zeigen einen zu schnellen Abbau der Schichtung in OpenFOAM im Vergleich zum Experiment /KEL 15/. Als Ursache wird hierbei das Fehlen von Buoyancy-Termen im Turbulenzmodell angesehen. Weitere Erläuterungen hierzu finden sich im Abschnitt JAEA weiter unten.

#### *Institute for Energy, Petten / The Netherlands:*

L. Ammirabile und H. Wilkening berichten in einem Artikel der Zeitschrift Nuclear Engineering and Design von der Nachrechnung einer Heliumverteilung im Battelle-Model Containment /WIL 13/. Die prinzipielle Form des Helium-Jets und die Verteilung des Heliums in der OpenFOAM-Simulation entsprechen den experimentellen Werten bzw. einer ergänzenden CFX Rechnung. Im Detail gibt es jedoch (Konzentrations-) Unterschiede. Ammirabile zeigt in seinem Bericht, dass eine Verfeinerung des Battelle-Gitters (von ca. 1.2 Mio. Elementen auf ca. 1.6 Mio. Elementen, insbesondere im Bereich des Helium-Jets) zu einer Verbesserung der OpenFOAM-Ergebnisse führt.

#### *Japan Atomic Energy Agency (JAEA):*

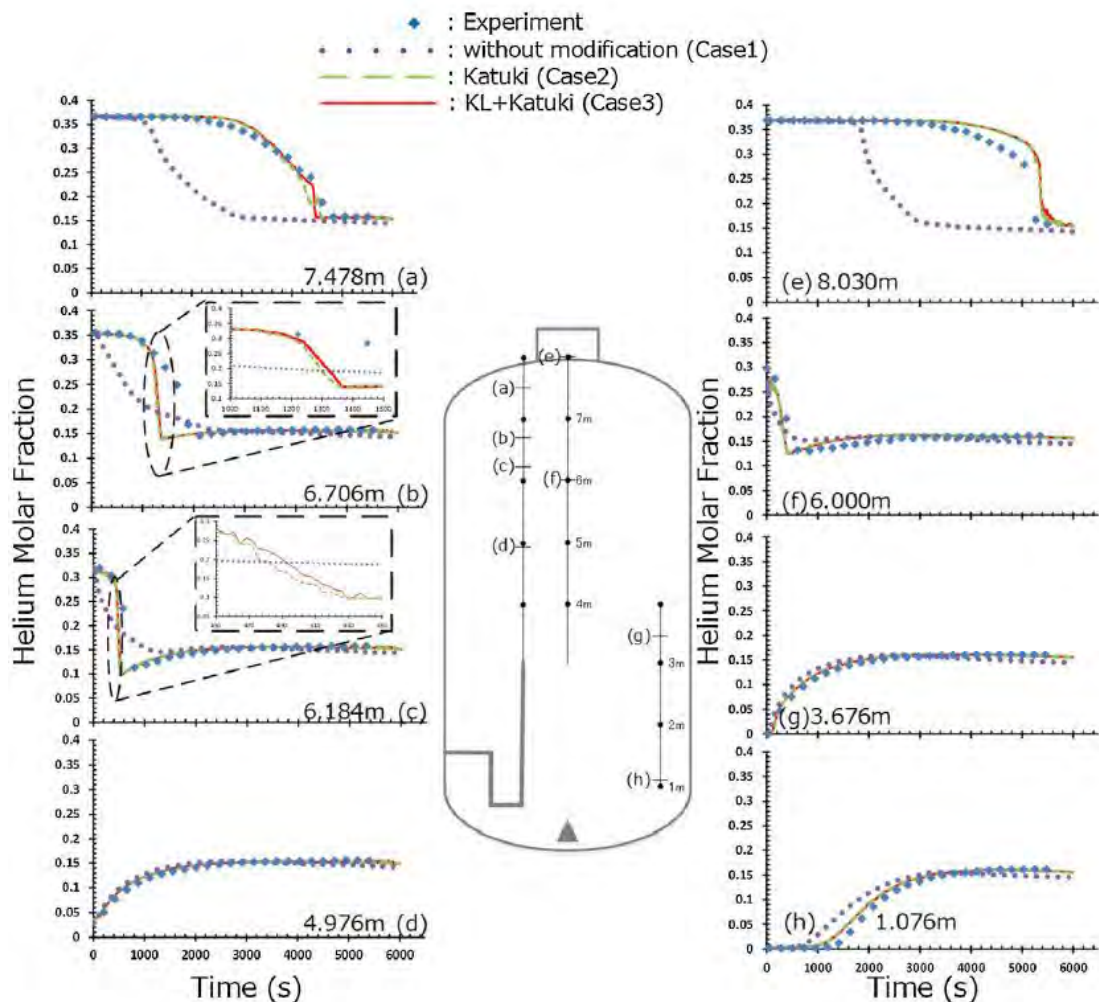
Von Satoshi Abe et al. wurde 2015 ein Artikel in der Zeitschrift Nuclear Engineering and Design zu einer Nachrechnung des OECD/PANDA-Benchmarks veröffentlicht /AIS 15/. Hierbei stellt er auch mit dem standardmäßig enthaltenen k-epsilon-Modell eine zu schnelle Auflösung der Schichtung fest (als Solver verwendet er auch rhoReactingBuoyantFoam). Er schlägt jedoch zwei mögliche Modifikationen des in OpenFOAM implementierten k-epsilon-Modells vor:

- Kato-Launder-Modifikation: Hierbei handelt es sich um eine Modifikation des Turbulenz-Produktionsterms, die sich insbesondere auf die Stagnationszone (im Experiment der Bereich, in dem der Freistrah auf die Heliumschicht trifft und umgelenkt

wird) auswirkt. Dort soll durch die Kato-Lauder-Modifikation eine Überschätzung der Turbulenzproduktion beim Standard-k-epsilon-Modell reduziert werden.

- Katsuki-Modifikation: Hierbei handelt es sich um eine Modifikation des Turbulenz-Produktionsterms, die die Turbulenzerzeugung durch Gravitation bzw. Dichteunterschiede berücksichtigt.

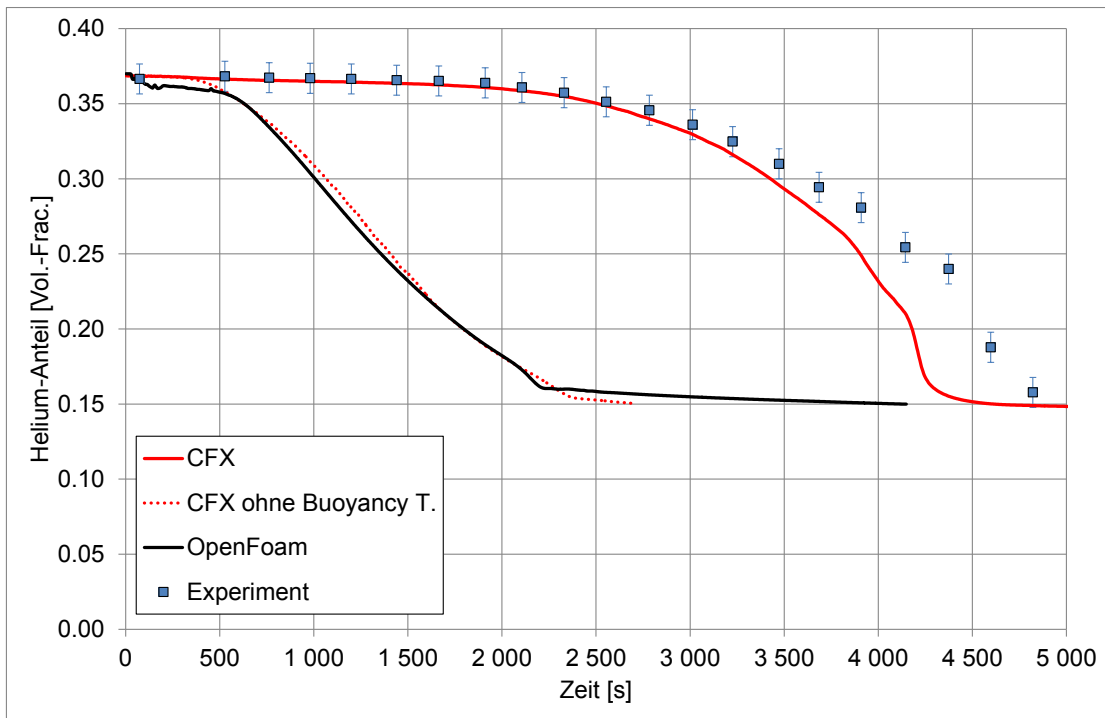
Die Kato-Lauder-Modifikation zeigt bei der von Abe durchgeführten Berechnung nur sehr geringe Effekte auf die Simulation des Heliumabbaus (siehe Abb. 9.16). Die Katsuki-Modifikation führt hingegen zu einer deutlichen Verlangsamung des Schichtabbaus und damit zu einer deutlichen Verbesserung der Rechnungen im Vergleich zum Experiment. Auch diese Ergebnisse sind in Abb. 9.16 dargestellt.



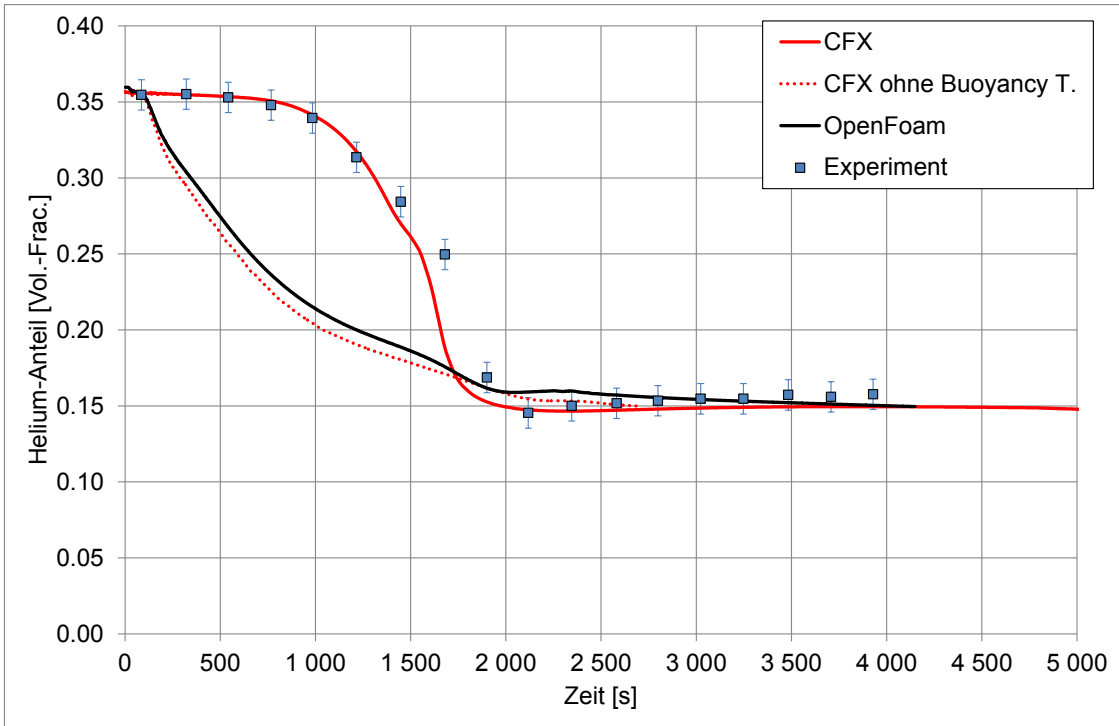
**Abb. 9.16** Nachrechnung des OECD/PANDA-Benchmarks durch Abe et al /AIS 15/

### 9.4.2 GRS-Analysen (OECD/PANDA)

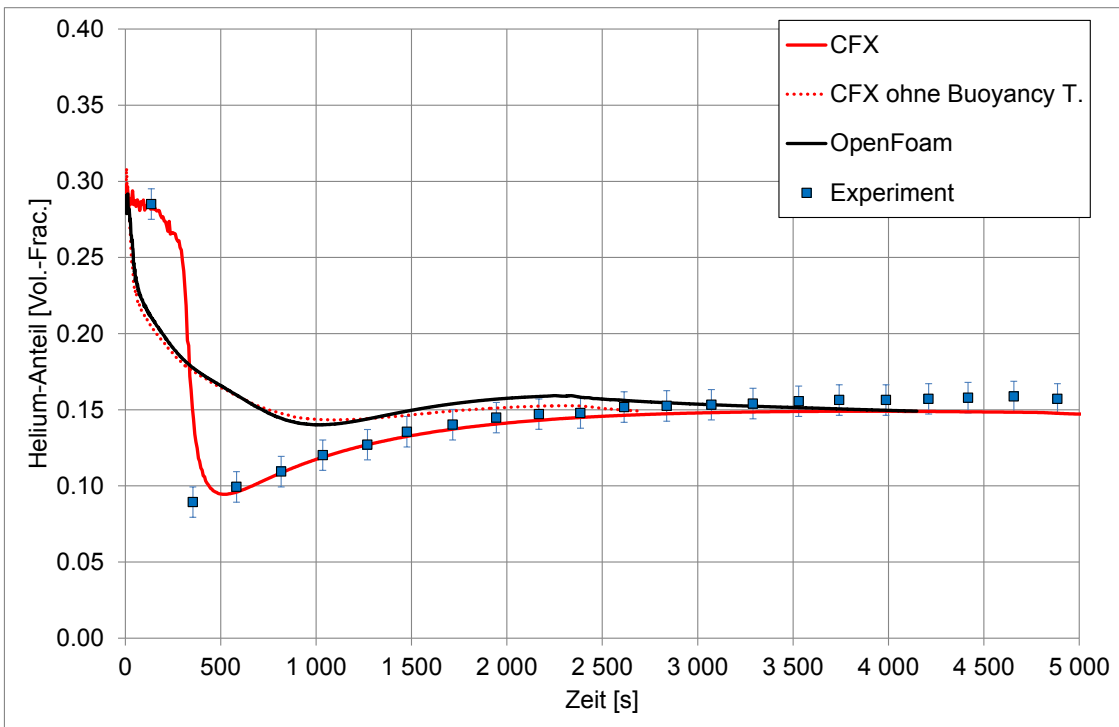
Um den Einfluss des Buoyancy-Production-Terms zu untersuchen, wurde er zunächst in der CFX-Rechnung ausgeschaltet und damit die OECD/PANDA-Rechnung erneut durchgeführt. Das Ergebnis ist in Abb. 9.17 bis Abb. 9.20 dargestellt. Hier zeigt sich, dass die CFX-Rechnung ohne den Buoyancy-Term sehr gut mit der OpenFOAM-Rechnung übereinstimmt. Dies ist ein guter Hinweis darauf, dass die These bzgl. des fehlenden Buoyancy-Terms in OpenFOAM richtig ist.



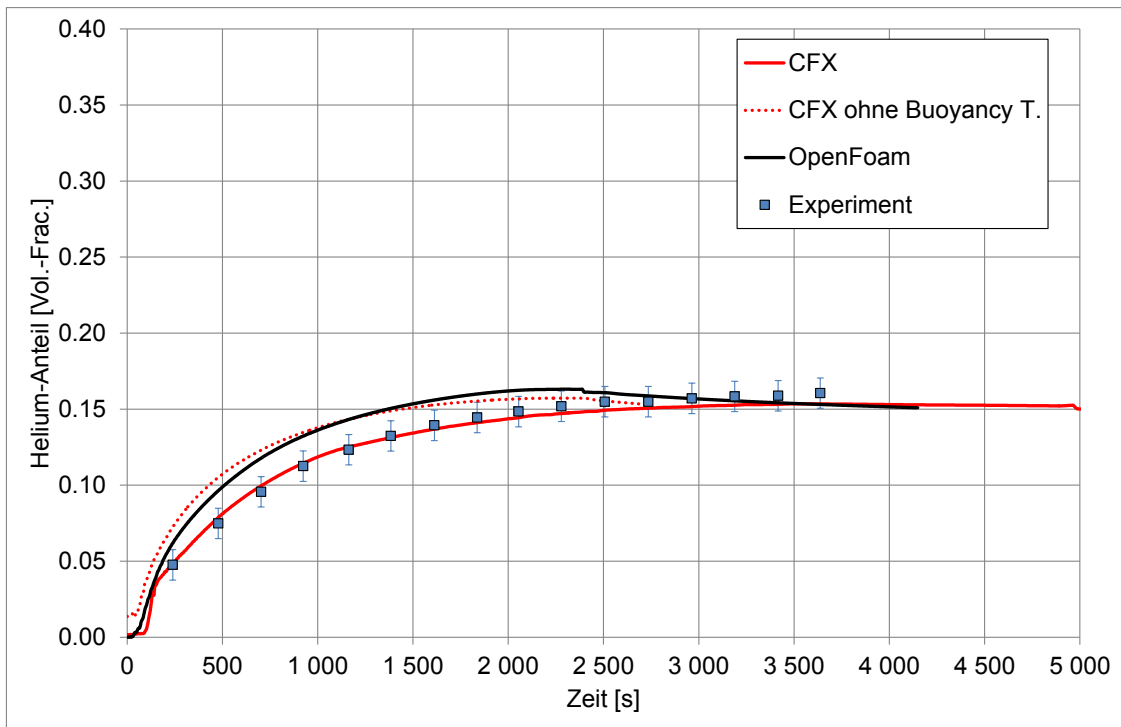
**Abb. 9.17** Heliumkonzentration bei Messpunkt MS\_1 (7.478 m Höhe / über dem Einlass)



**Abb. 9.18** Heliumkonzentration bei Messpunkt MS\_2 (6.706 m Höhe / über dem Einlass)



**Abb. 9.19** Heliumkonzentration bei Messpunkt MS\_4 (6.00 m Höhe / über dem Einlass)



**Abb. 9.20** Heliumkonzentration bei Messpunkt MS\_15 (3.676 m Höhe / seitlich im PANDA-Behälter)

Da es sich bei OpenFOAM um einen Open-Source-Code handelt, besteht die Möglichkeit, den Source-Code einzusehen und zu modifizieren. Um den Aspekt der Buoyancy-Produktion weiter zu untersuchen, wurde im Standard-k-Epsilon-Modell von OpenFOAM ein zusätzlicher Turbulenzproduktionsterm eingefügt:

$$P_{kb} = -g_i \frac{\mu_t}{\rho \sigma_\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \quad (9.1)$$

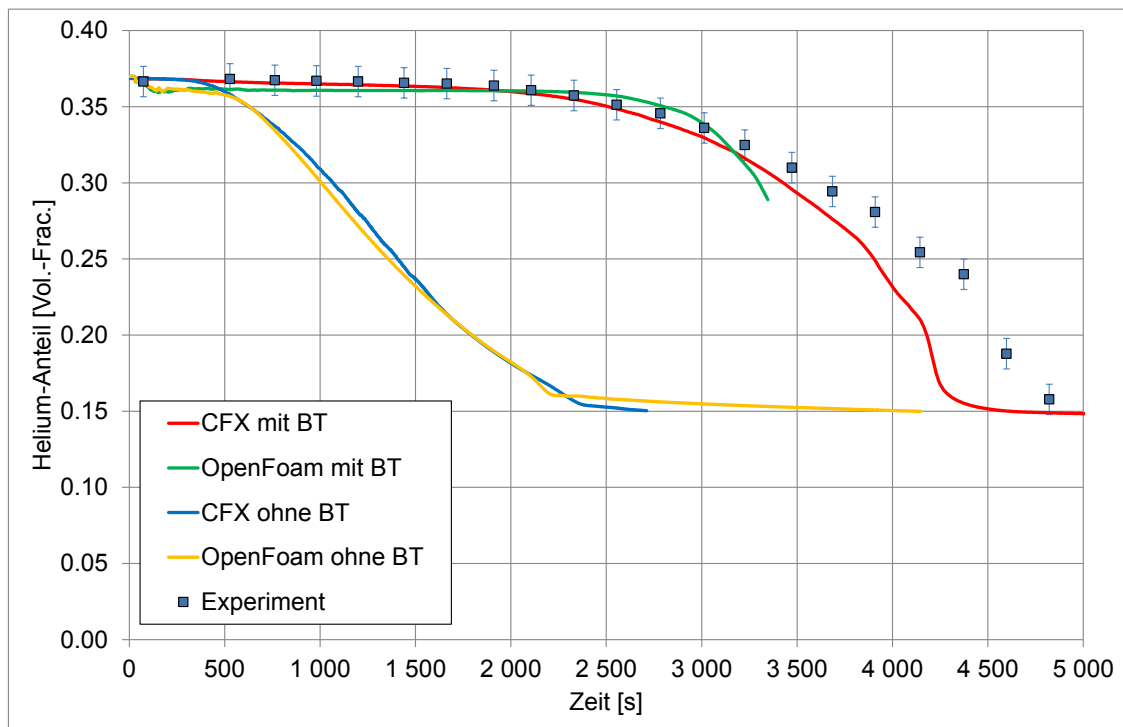
Hierbei ist die Turbulenzproduktion  $P_{kb}$  proportional zur Komponente des Gravitationsvektors  $g_i$ , sowie zum Dichtegradienten  $\partial \rho / \partial x_i$ . Weitere Faktoren sind die turbulente Viskosität  $\mu_t$  und die turbulente Schmidtzahl  $\sigma_\rho$ . Die GRS erhielt bei der Implementierung des Terms in das k-Epsilon-Turbulenzmodell fachkundige Unterstützung von Herrn Aram Amouzandeh /AMO 12/.

In Abb. 9.21 bis Abb. 9.24 werden die Ergebnisse einer neuen OpenFOAM Rechnung mit Bouyancy-Turbulenz (BT) mit den alten Ergebnissen ohne Bouyancy-Term verglichen. Es zeigt sich, dass der eingefügte Bouyancy-Term zu einem deutlich langsameren Abbau der Heliumschicht führt. Das Ergebnis von OpenFOAM mit Bouyancy-Term (grüne Linie) liegt nun ziemlich genau auf den experimentellen Werten und auch auf

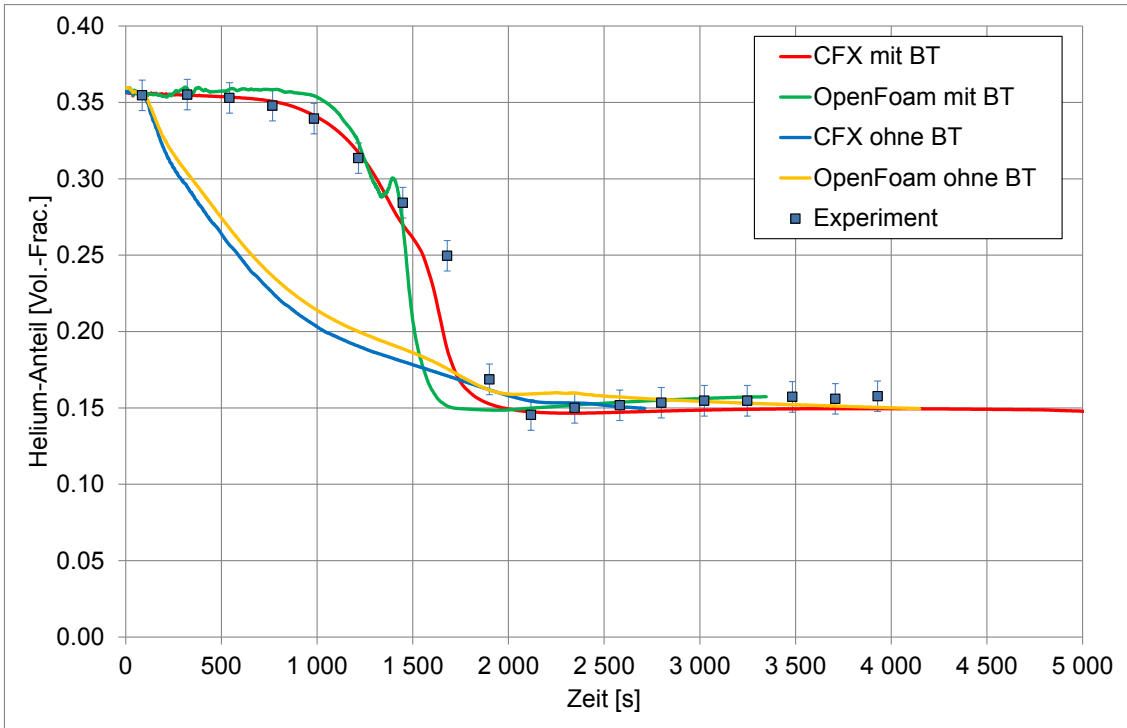


dem Verlauf der CFX-Rechnung (mit Bouyancy-Term / rote Linie). Grundsätzlich zeigt sich aber, dass der fehlende Turbulenz-Term erfolgreich in OpenFOAM eingefügt werden konnte und die Simulation nun ähnlich gute Ergebnisse wie CFX liefert.

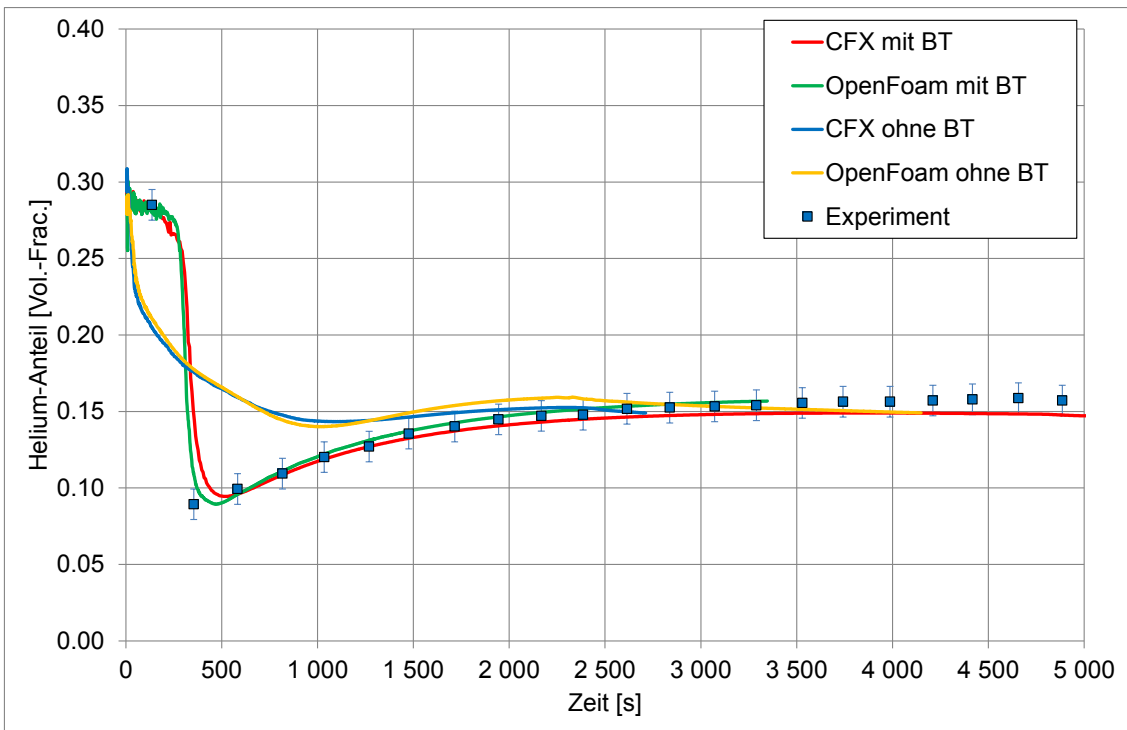
Anmerkung: In der aktuell erschienenen OpenFOAM-Version (Version 5 / erschienen August 2017) gibt es ein Turbulenzmodell in dem standardmäßig ein entsprechender Term eingebaut ist („buoyantKEpsilon-Turbulenzmodell“). Da das Projekt schon am Ende seiner Laufzeit war konnte dieses neue Modell an dieser Stelle noch nicht getestet werden.



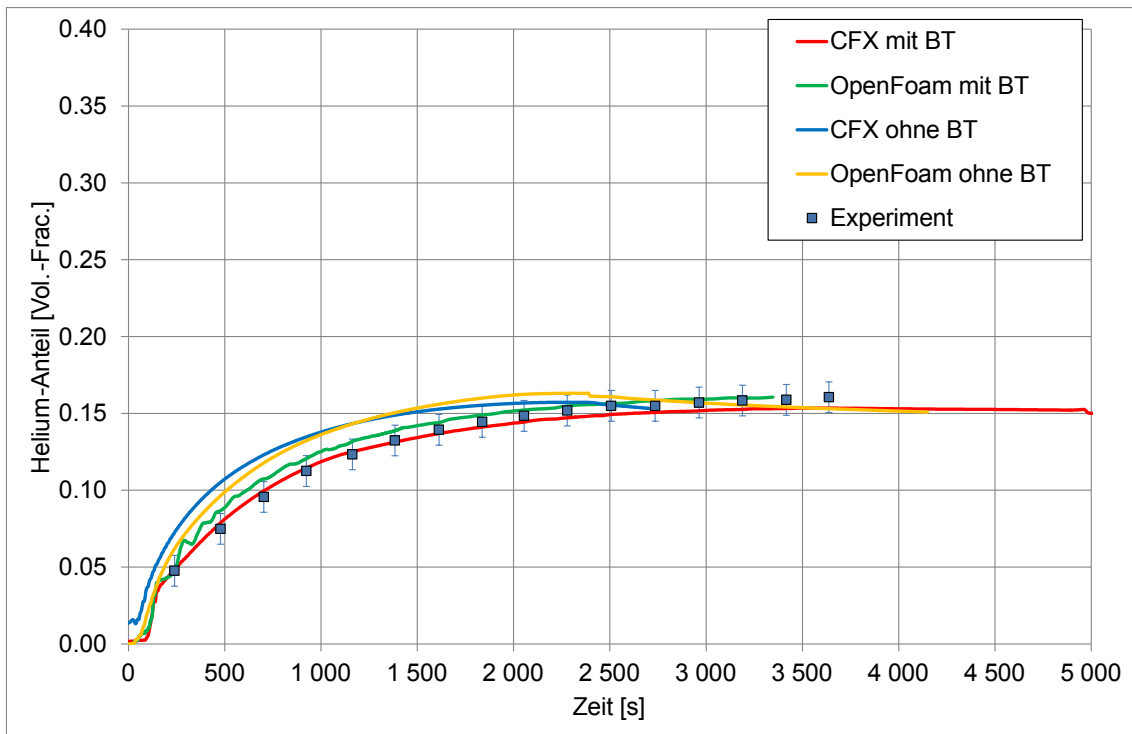
**Abb. 9.21** Heliumkonzentration bei Messpunkt MS\_1 (7.478 m Höhe / über dem Einlass)



**Abb. 9.22** Heliumkonzentration bei Messpunkt MS\_2 (6.706 m Höhe / über dem Einlass)



**Abb. 9.23** Heliumkonzentration bei Messpunkt MS\_4 (6.00 m Höhe / über dem Einlass)



**Abb. 9.24** Heliumkonzentration bei Messpunkt MS\_15 (3.676 m Höhe / seitlich im PANDA-Behälter)

### 9.4.3 GRS-Analysen (TH-26)

Auch für den Versuch TH-26 wurden die OpenFOAM-Rechnungen mit dem Buoyancy-Turbulenz-Term wiederholt. In Abb. 9.25 bis Abb. 9.29 werden die folgenden Rechnungen miteinander verglichen:

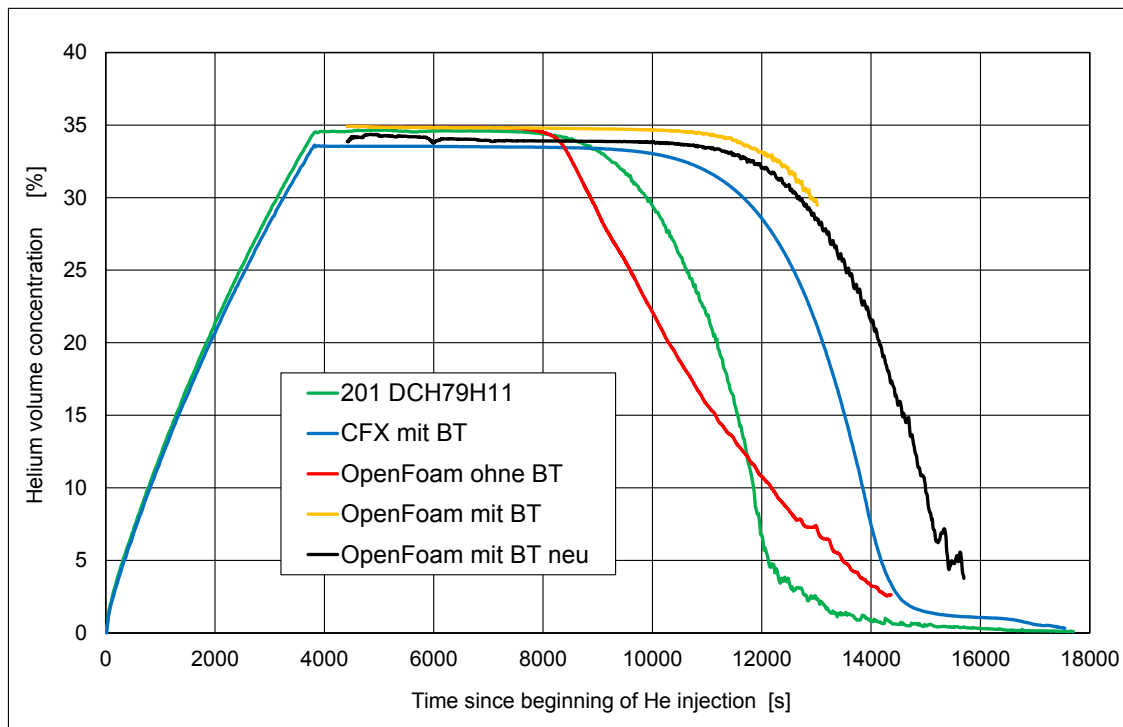
**Tab. 9.4** Vergleich der Rechnungen

Farbe	Rechnungsname	Buoyancy-Turbulenz	Sonstiges
Blau	CFX mit BT	Ja	CFX-Vergleich
Rot	OpenFOAM ohne BT	Nein	OpenFOAM-Standard
Gelb	OpenFOAM mit BT	Ja	Ergänzung des BT-Terms
Schwarz	OpenFOAM mit BT neu	Ja	Mit BT-Term & leichter Verbesserung der initialen Heliumschichtung
Grün			Experimentelle Referenz

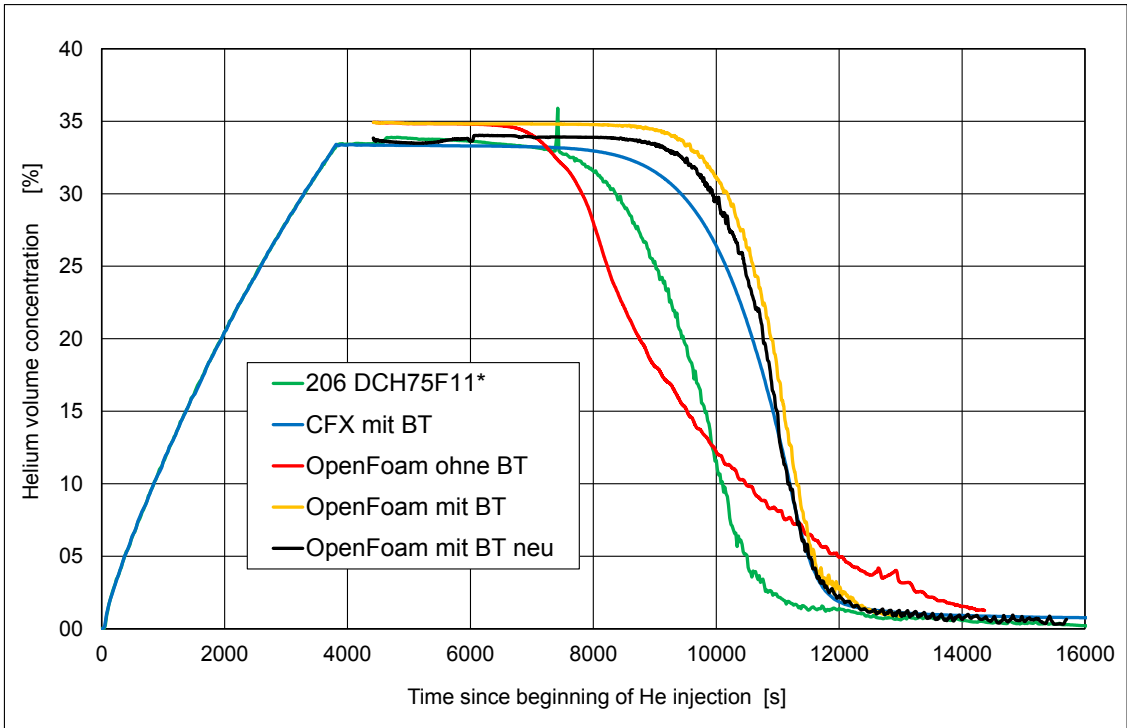
Der Einfluss des Buoyancy-Turbulenz-Terms (BT) zeigt sich insbesondere beim Vergleich der roten und der gelben Kurve für die OpenFOAM Analyse ohne und mit Buo-

yancy-Turbulenz. Bei den Rechnungen mit Buoyancy-Turbulenz setzt der Abbau der Heliumschicht später ein, dafür ist dann der Abfall der Konzentration steiler als bei der Rechnung ohne diesen Term. Insgesamt ist der berechnete Helium-Abbau nun ein wenig zu langsam, gerade im oberen Bereich. Die schwarze Kurve stellt eine Wiederholung der Rechnung mit Buoyancy-Term da, bei der aber die Startbedingungen (initiale Heliumkonzentration) etwas besser an die experimentellen Werte angepasst wurden. Dies macht aber im weiteren Verlauf nur einen kleinen Unterschied.

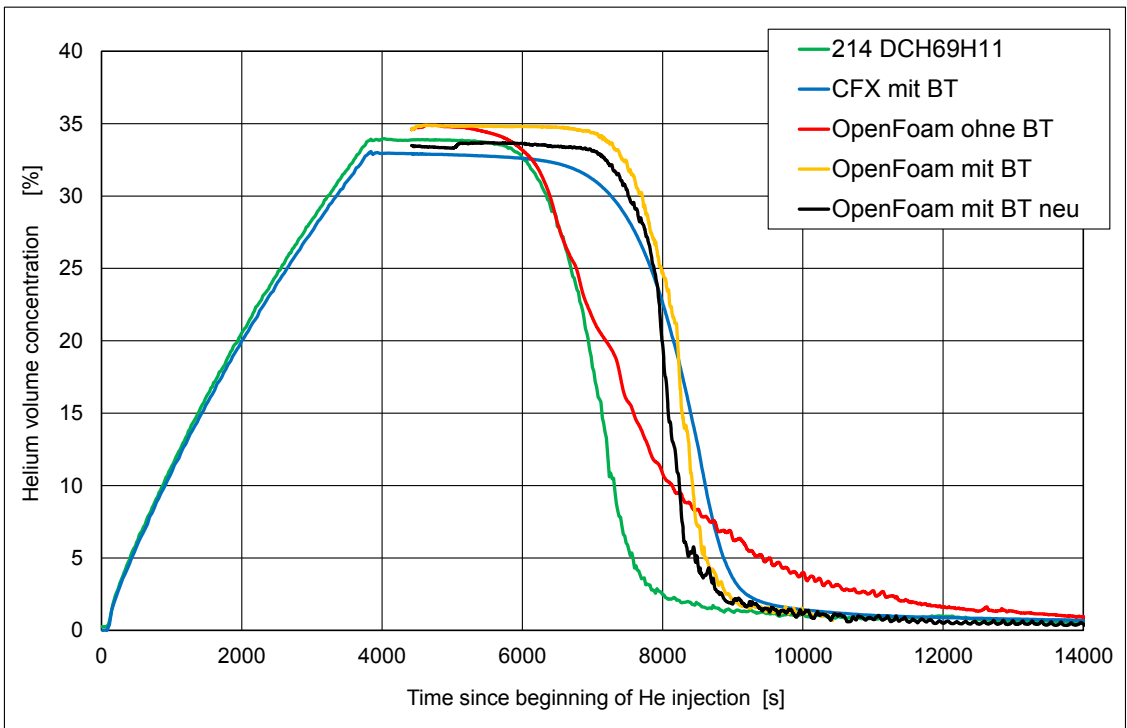
Die neuen OpenFOAM-Rechnungen sind generell in auffallend guter Übereinstimmung mit den CFX-Ergebnissen. Wie schon beim OECD/PANDA-Benchmark scheint OpenFOAM nach Einführung des Buoyancy-Terms nun in Bezug auf die Berechnung der Gasverteilung eine Leistung zu zeigen, die ziemlich ähnlich zu den CFX-Leistungen ist.



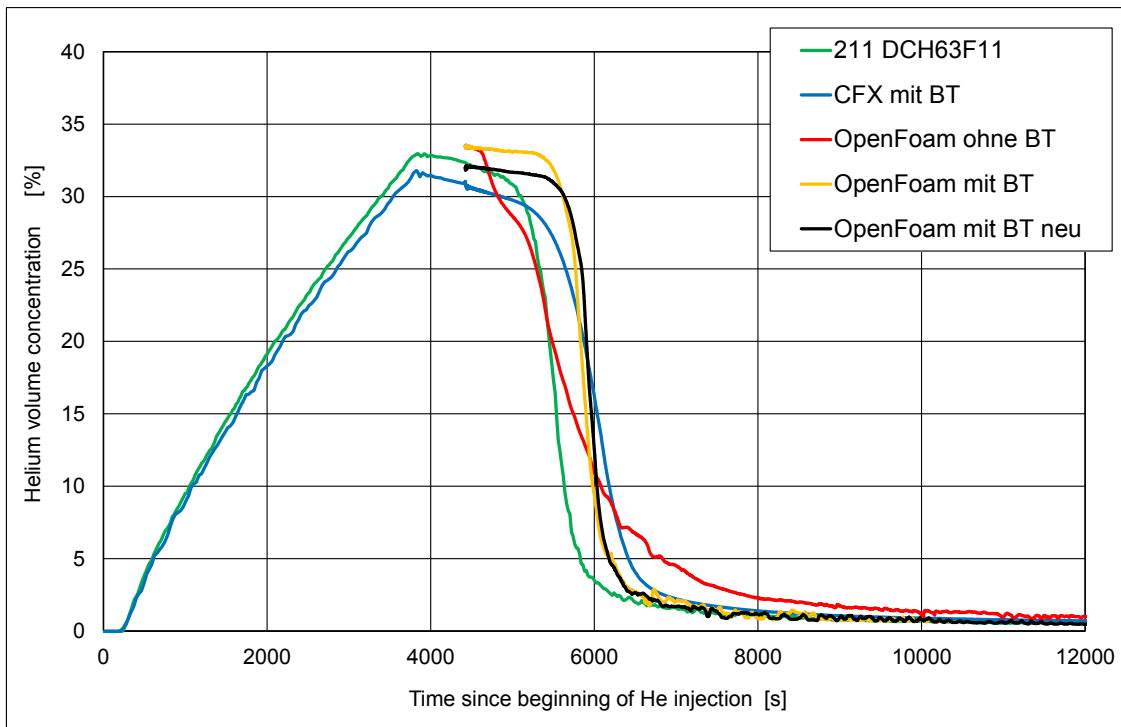
**Abb. 9.25** Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS\_25 (7.9 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter)



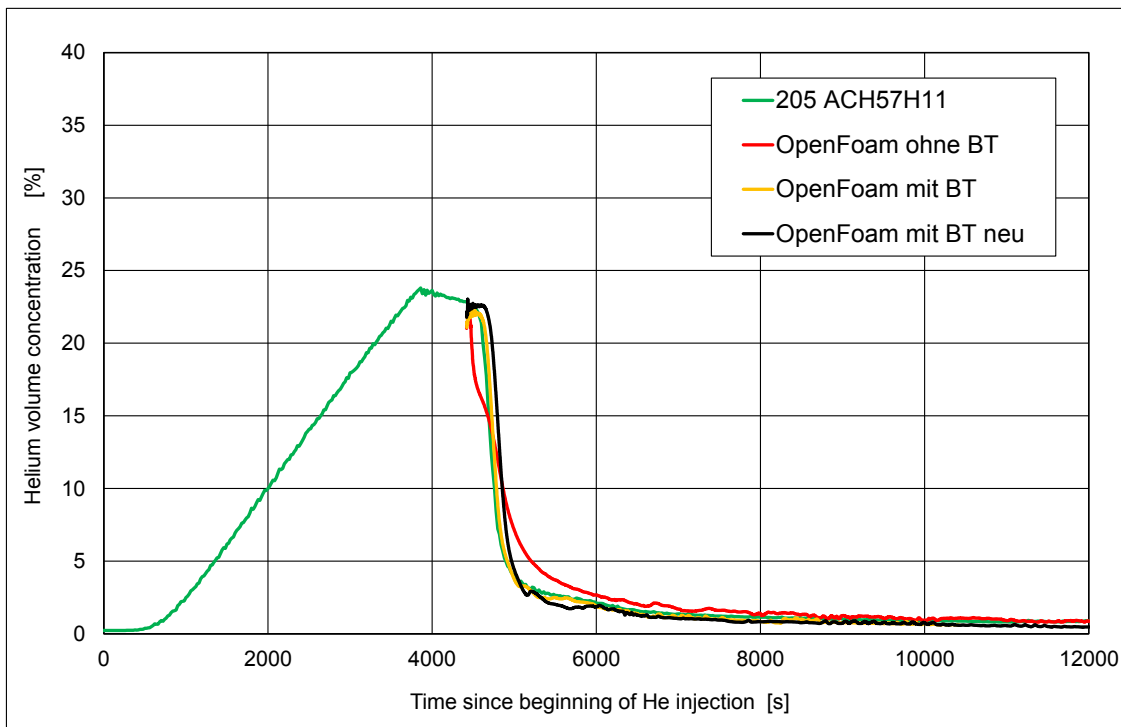
**Abb. 9.26** Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS\_23 (7.5 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter)



**Abb. 9.27** Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS\_21 (6.9 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter)



**Abb. 9.28** Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS\_19 (6.3 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter)

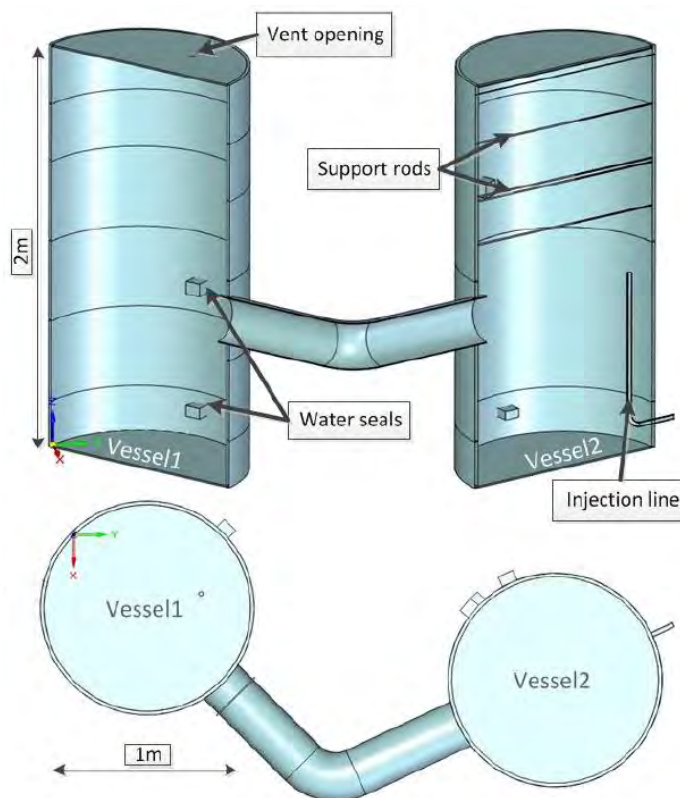


**Abb. 9.29** Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS\_16 (5.73 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter)

## 9.5 Nachrechnung des Mini-Panda-Benchmarks mit OpenFOAM

### 9.5.1 Experimentelles Setup

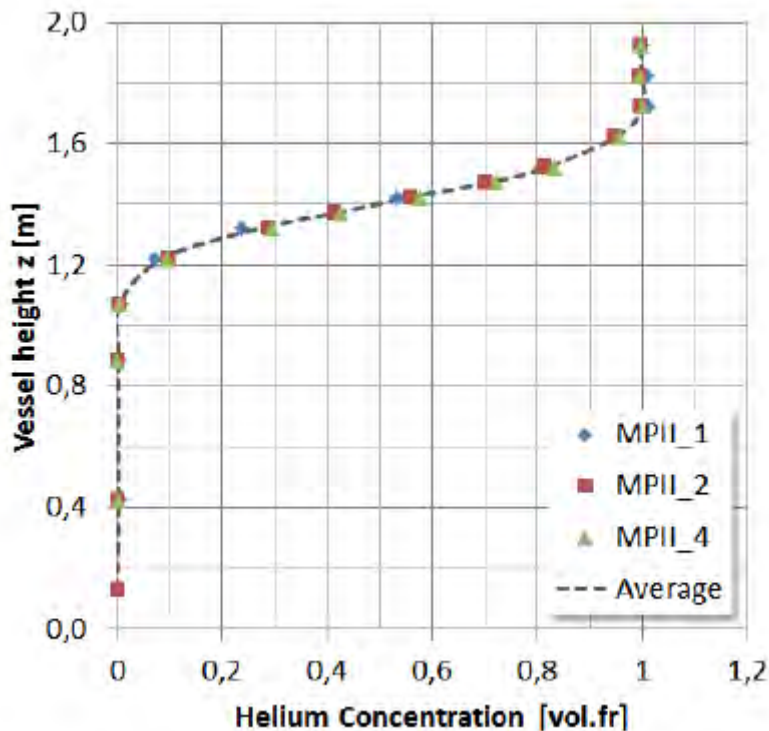
Auch mit den Experimenten im Mini-Panda-Behälter soll die Validierungsgrundlage für Gasverteilungsrechnungen verbessert werden. Hier gibt es nach der Auswertung und Nachrechnung der bisherigen Panda- und THAI-Versuche noch offene Fragestellungen, die im CFD-Verbund diskutiert wurden. Beim Mini-Panda-Experiment handelt es sich um eine verkleinerte Version des Panda-Behälters (Skalierungsfaktor 1:4, siehe Abb. 9.30). Die kleine Größe des Mini-Panda-Behälters erlaubt es, in CFD-Rechnungen besser die notwendigen Best-Practice-Guidelines wie z. B. zur Netzfeinheit einzuhalten. Darüber hinaus hat der Mini-Panda-Versuch eine innovative Messinstrumentierung, die detaillierte Aussagen z. B. über das Temperaturfeld erlaubt. Auch ein Experiment zur Auflösung einer Helium-Schicht an der Mini-Panda-Anlage wurde zur Validierung von OpenFoam genutzt.



**Abb. 9.30** Geometrie des Mini-Panda-Behälters (Abbildung aus /KEL 12/)

In Abb. 9.31 ist die initiale Heliumkonzentration im Vessel 2 im Experiment MPII\_1 dargestellt (der Vessel mit dem Einspeise-Rohr). Im oberen Bereich der Schicht hat man

im Maximum 100 % Helium. Diese Konzentration ist deutlich höher als bei den zuvor besprochenen THAI- bzw. Panda-Experimenten. Über das Einspeise-Rohr werden 0.68 g/s Luft in den Vessel 2 eingespeist und mit diesem Luftstrahl wird die Heliumschicht langsam abgebaut. Im Vessel 1 befindet sich eine Venting-Line, die für einen konstanten Druck (ca. 1 atm) sorgt. Weitere Details zu den Experimenten finden sich in /KEL 12/.

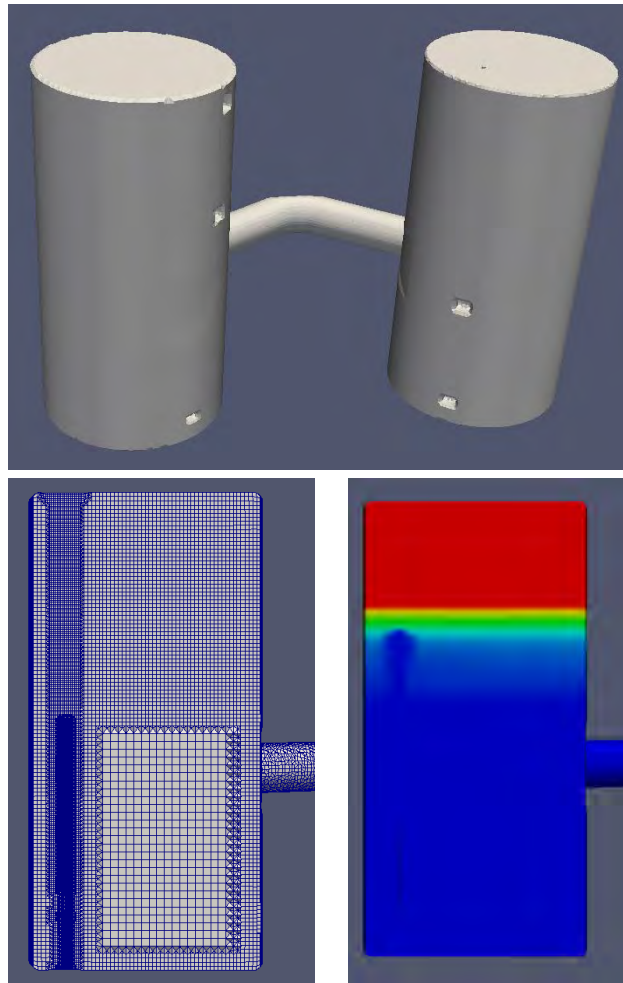


**Abb. 9.31** Initiale Helium-Konzentration (Abbildung aus /KEL 12/)

### 9.5.2 Geometrie und Randbedingungen

In Abb. 9.32 ist die für die OpenFoam Berechnung erstellte Geometrie und das Berechnungsnetz dargestellt. Es wurde wieder mit dem Werkzeug SnappyHexMesh von OpenFoam erstellt und ist insbesondere in der Nähe des Einlassrohres und der Heliumschicht verfeinert. Insgesamt hat das hier gezeigte Netz 955.436 Elemente, eine zusätzliche Gitterstudie wird im nächsten Abschnitt diskutiert. Als Solver wurde wieder rhoReactingBuoyantFoam und als Turbulenzmodell das k-Epsilon-Modell (mit zusätzlichem Buoyancy-Term) verwendet. Weitere Berechnungsparameter finden sich in Tab. 9.5.





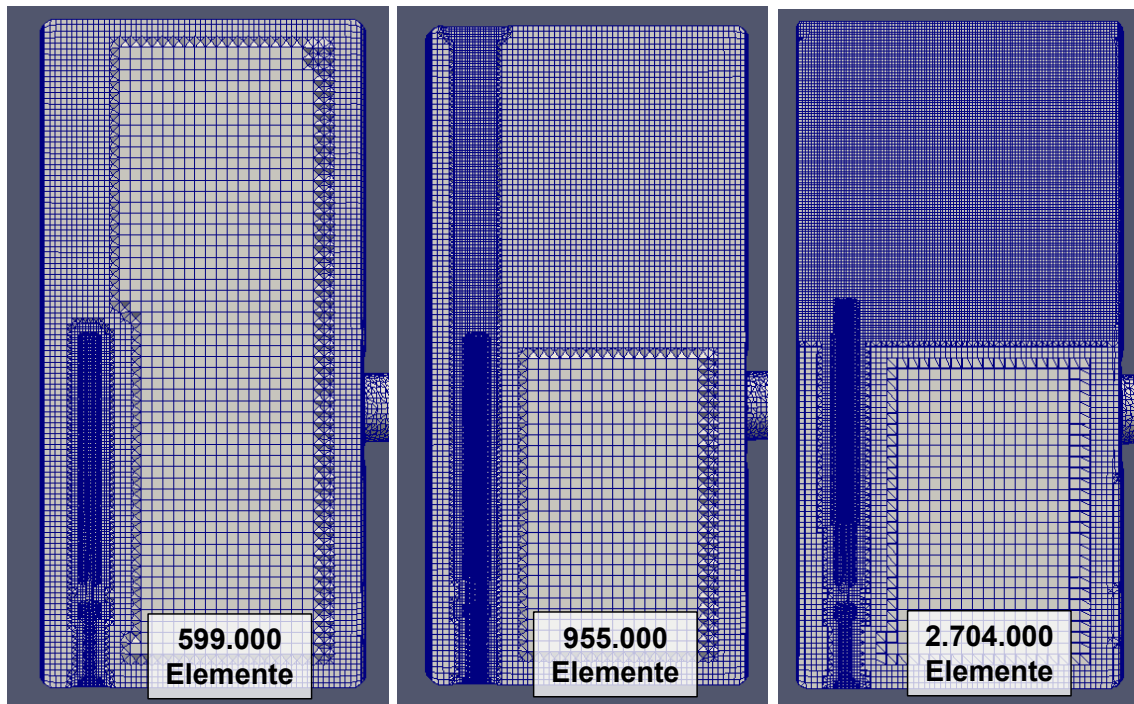
**Abb. 9.32** Mini-Panda-Geometrie (oben), Berechnungsnetz (links unten) und ein Simulationsergebnis (rechts unten)

**Tab. 9.5** Berechnungsparameter für die OpenFoam-Berechnung

Software / Version	OpenFoam 2.3.1
Solver	rhoReactingBuoyantFoam
Zeitschritte	Adaptiv
Turbulenzmodell	k-Epsilon (mit Buoyancy-Term)
Diffusionskoeffizient	Konstant $8.0e-5$
Elementzahl	0.6 bis 2.7 Mio.

### 9.5.3 Durchführung einer Gitterstudie

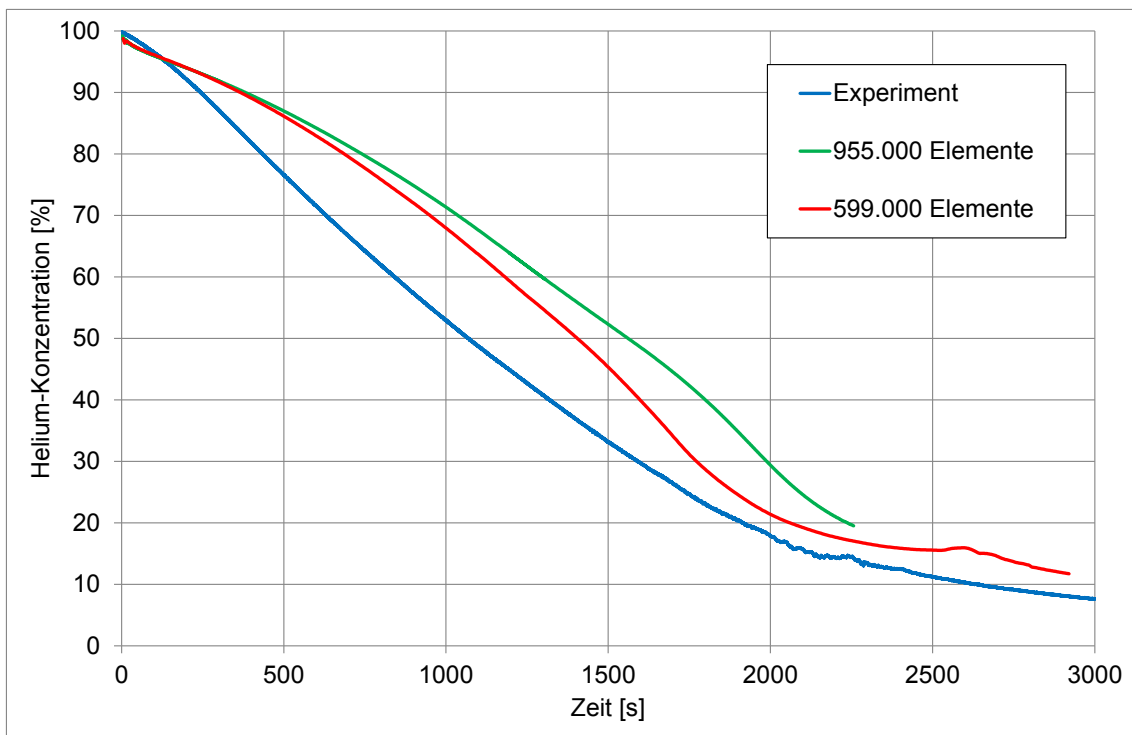
Um den Einfluss des Berechnungsgitters auf die Ergebnisse zu untersuchen wurden Berechnungen mit unterschiedlicher Gitterfeinheit durchgeführt. Die Gitter hatten zwischen 0.6 Mio. und 2.7 Mio. Elemente, siehe auch Abb. 9.33. Die Verfeinerungen fanden hauptsächlich in dem Behälter mit der Einspeisung und im Bereich der Helium-Schicht statt.



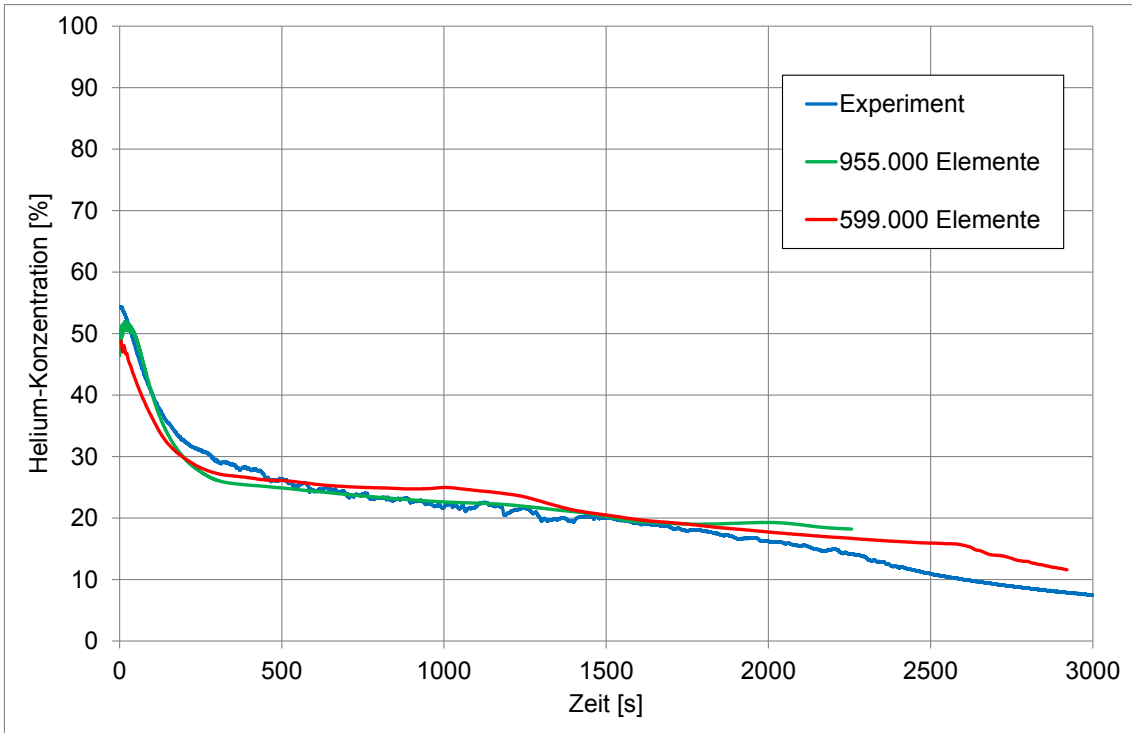
**Abb. 9.33** Gitter des MiniPanda-Behälters für die Gitterstudie

Die Berechnungen mit dem feinsten Netz (2.7 Mio. Elemente) lief trotz Parallelisierung sehr langsam, deshalb werden im Folgenden nur die Ergebnisse für das grobe und das mittlere Netz dargestellt. Die berechneten Heliumkonzentrationen werden in Abb. 9.34 bis Abb. 9.36 miteinander verglichen. Insbesondere bei dem obersten Messpunkt Kath28 zeigen sich leichte Unterschiede. Die Berechnung mit weniger Elementen zeigt eine etwas schnellere Auflösung der Heliumschicht. Bei den anderen Messpunkten sind die Unterschiede minimal.

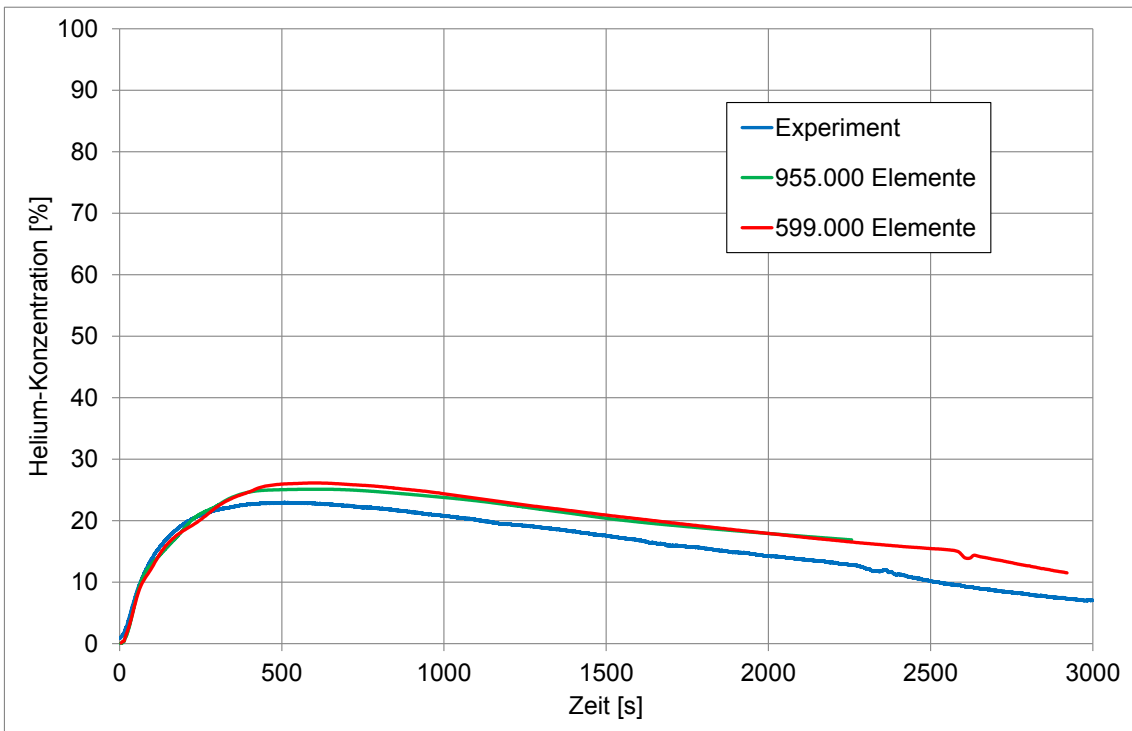
In Abb. 9.37 bis Abb. 9.39 ist der Temperaturverlauf in unterschiedlichen Höhen unterhalb und innerhalb der Heliumschichtung dargestellt. Insgesamt zeigt sich noch ein geringer Einfluss der Gitterfeinheit auf die Berechnungsergebnisse. Insbesondere kurz unterhalb der Heliumschicht steigen die Temperaturen in den ersten 1000 s im Verhältnis zu den experimentellen Werten aber noch zu stark an (TC7, siehe Abb. 9.38). Auch der Temperturabfall innerhalb der Heliumschicht passt nicht zu den experimentellen Werten (TC8, siehe Abb. 9.39). Diese Aspekte werden weiter unten noch diskutiert. Im Folgenden wird zunächst mit dem mittleren Gitter (mit ca. 955.000 Elementen) weiter gearbeitet.



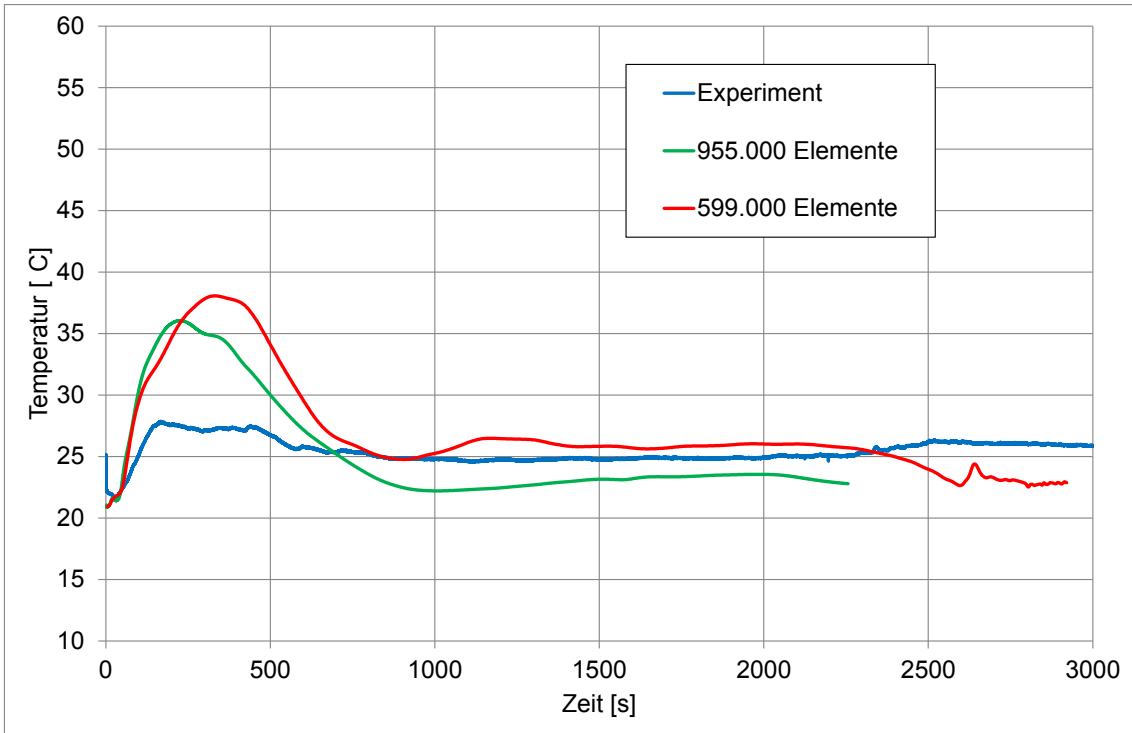
**Abb. 9.34** Heliumkonzentration in 1.723 m Höhe (Kath28)



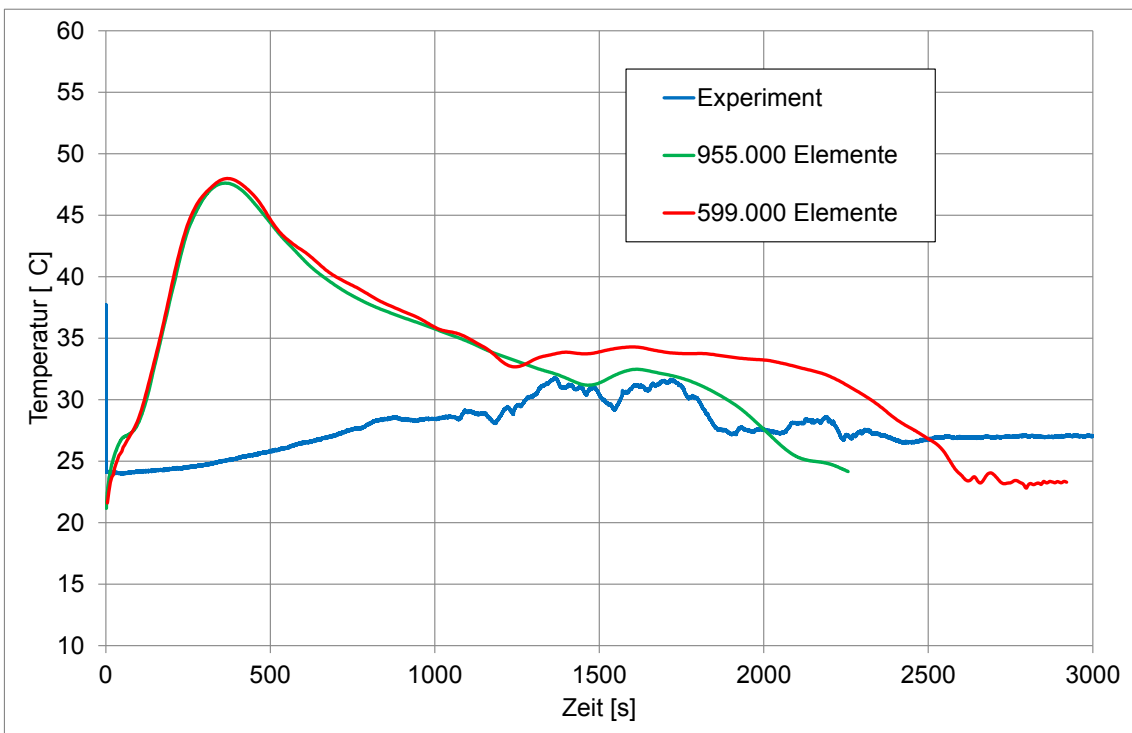
**Abb. 9.35** Heliumkonzentration in 1.423 m Höhe (Kath20)



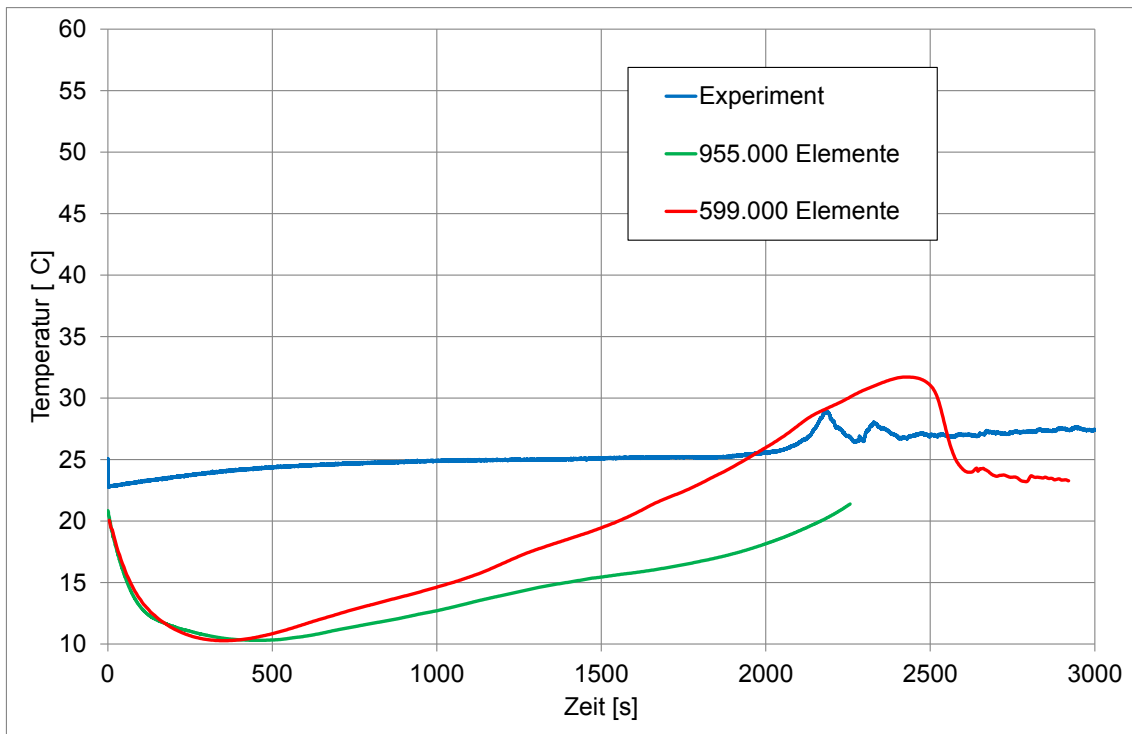
**Abb. 9.36** Heliumkonzentration in 1.073 m Höhe (Kath12)



**Abb. 9.37** Temperaturverlauf in 1.19 m Höhe (TC6)



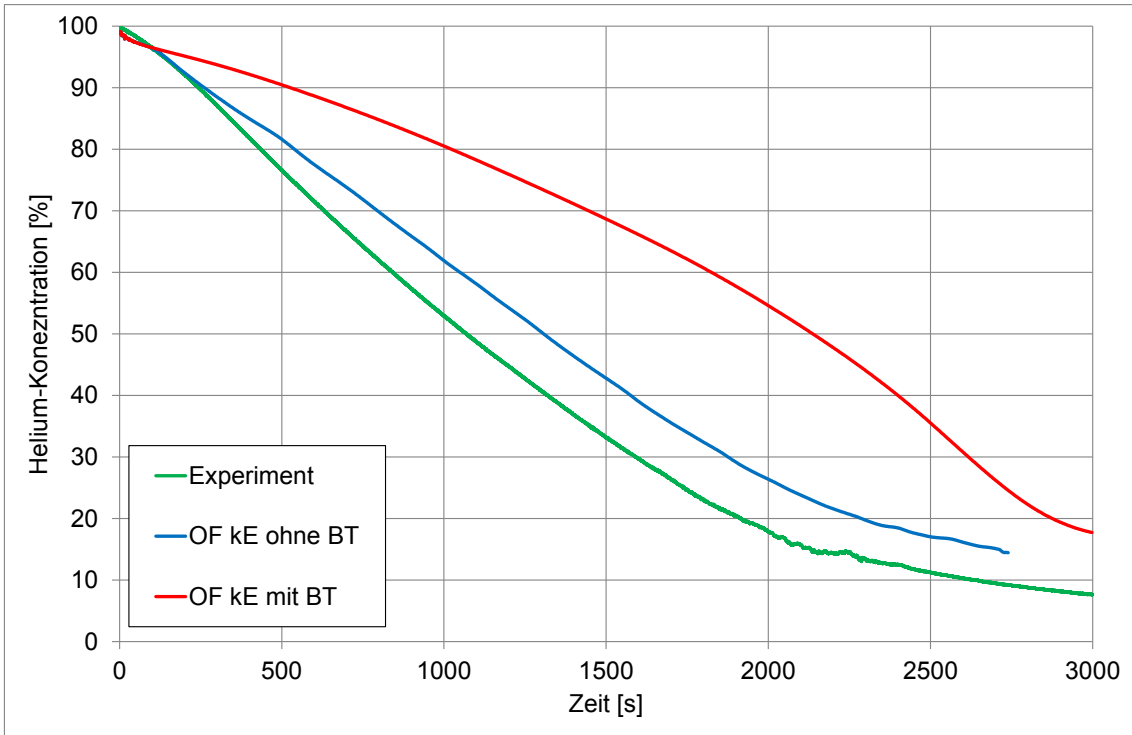
**Abb. 9.38** Temperaturverlauf in 1.46 m Höhe (TC7)



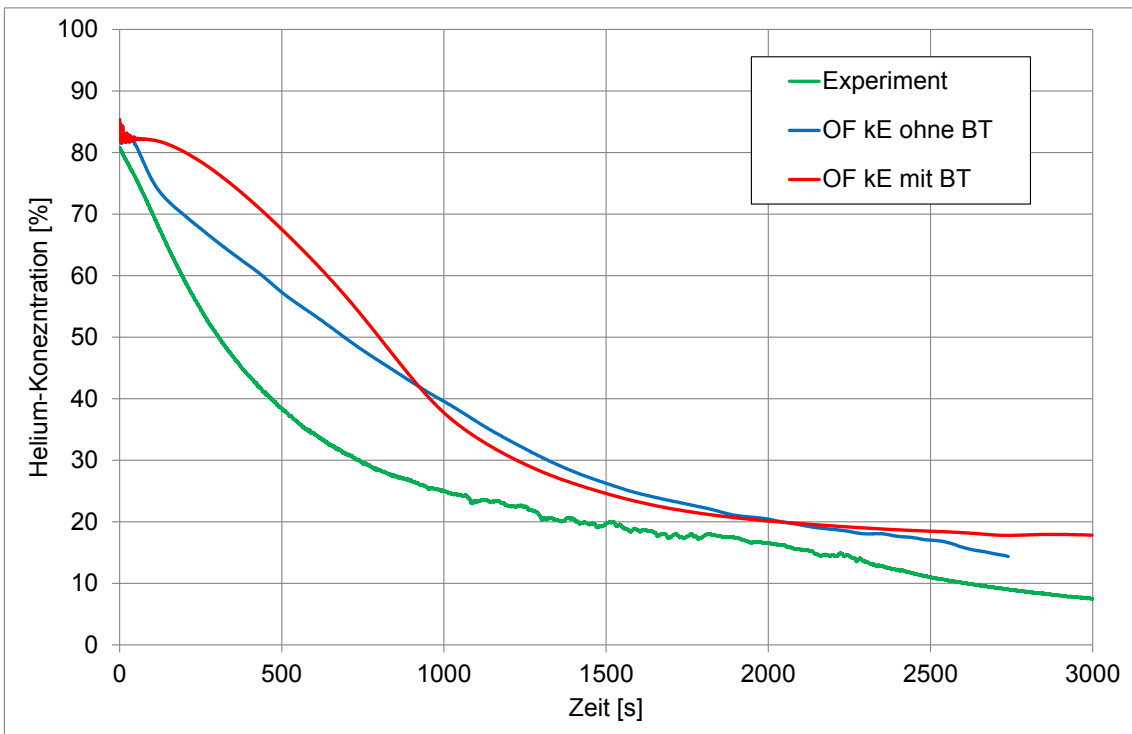
**Abb. 9.39** Temperaturverlauf in 1.79 m Höhe (TC8)

## 9.6 Einfluss des Buoyancy-Turbulenz-Terms

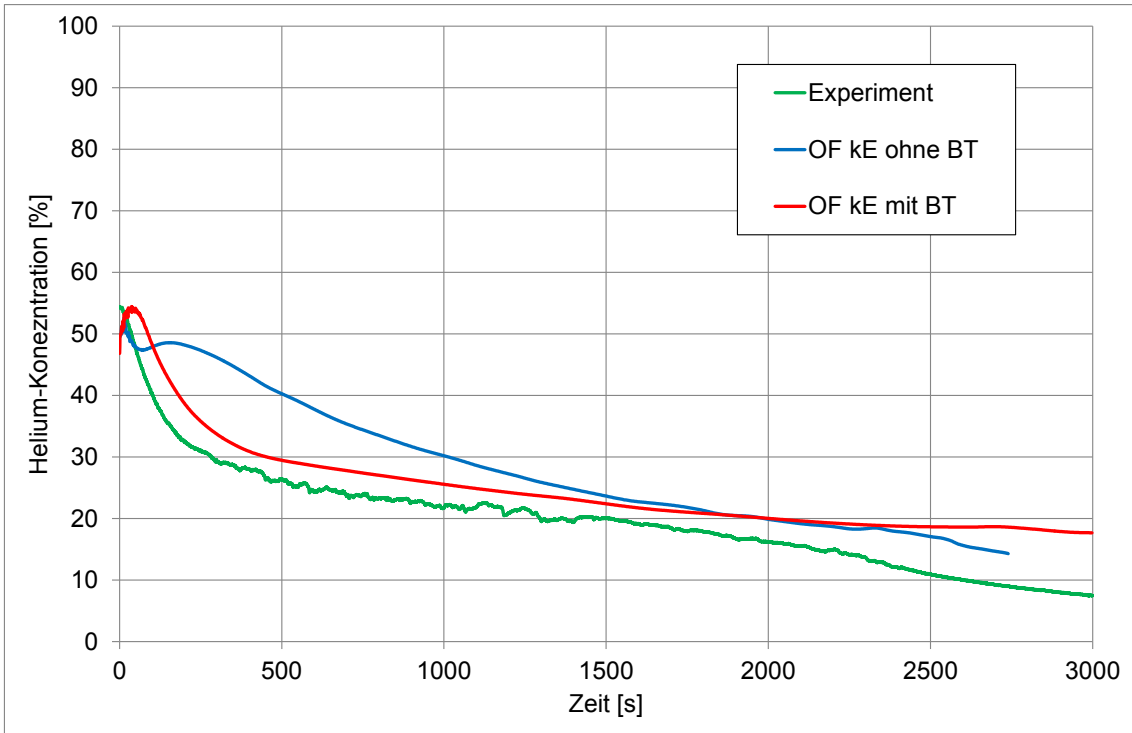
Wie bereits bei den Rechnungen zum OECD/Panda-Benchmark und zum TH-26 wurden auch hier beim MiniPanda-Benchmark Rechnungen sowohl mit als auch ohne den Buoyancy-Turbulenz-Term durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abb. 9.40 bis Abb. 9.43 dargestellt. Beim oberen Messpunkt in 1.7 m Höhe zeigt sich ein deutlich langsamerer Abbau bei Verwendung des Buoyancy-Terms. Dieses entspricht auch dem Verhalten, welches bereits beim OECD/Panda-Benchmark und beim TH-26 Experiment beobachtet wurde. Allerdings passt hier die Rechnung ohne den Buoyancy-Term besser zu den experimentellen Werten als die Rechnung mit Buoyancy-Term. Auch bei den weiter unten liegenden Messpunkten sieht man einen deutlichen Unterschied zwischen beiden Rechnungen (siehe Abb. 9.41 bis Abb. 9.43). Hier schneidet die Rechnung mit Buoyancy-Term aber im Vergleich zum Experiment ähnlich oder teilweise auch besser ab als die Rechnung ohne Buoyancy-Term. Da aber davon ausgegangen wird, dass der Buoyancy-Term für eine korrekte physikalische Modellierung notwendig ist, bauen die nun folgenden Parameterstudien auf der Rechnung mit dem Buoyancy-Term auf.



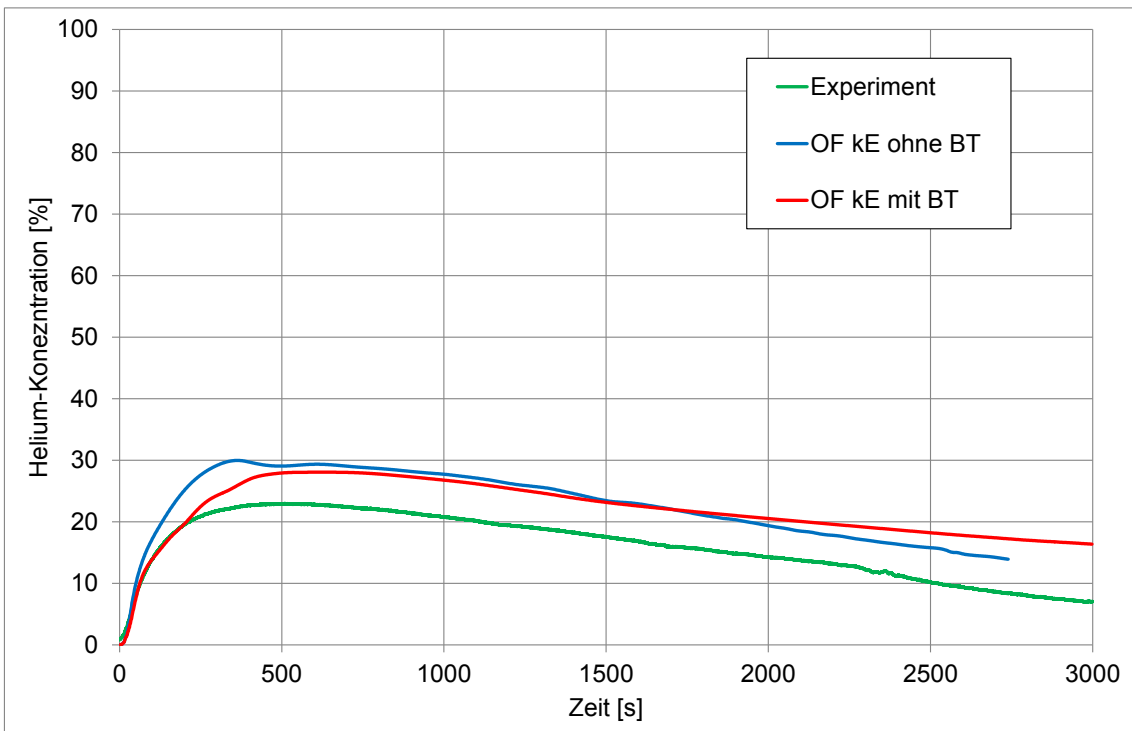
**Abb. 9.40** Heliumkonzentration in 1.723 m Höhe (Kath28)



**Abb. 9.41** Heliumkonzentration in 1.523 m Höhe (Kath24)



**Abb. 9.42** Heliumkonzentration in 1.423 m Höhe (Kath20)



**Abb. 9.43** Heliumkonzentration in 1.073 m Höhe (Kath12)



### 9.6.1 Einfluss der Zeitschrittweite (Courant-Zahl)

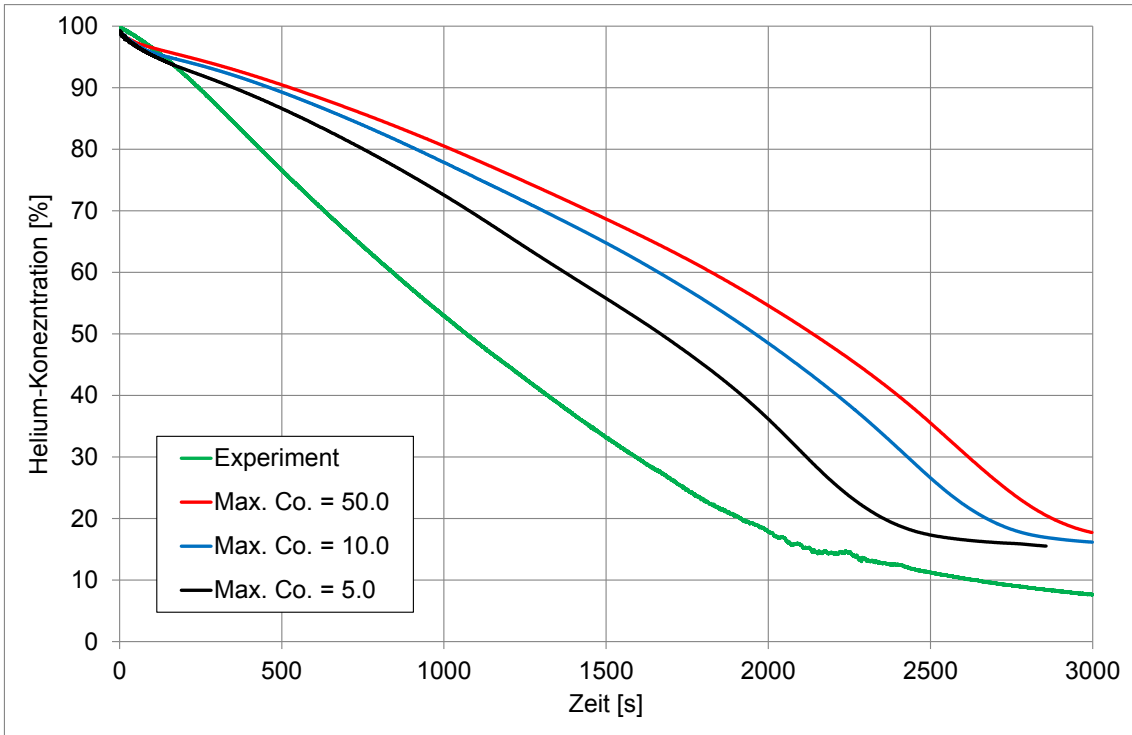
Um den Einfluss der Zeitschrittweite auf die Berechnungsergebnisse zu untersuchen wurden drei Rechnungen mit jeweils unterschiedlicher maximaler Courant-Zahl (siehe Tab. 9.6) durchgeführt. Über das Setzen der maximalen Courant-Zahl findet dann in OpenFoam eine Anpassung der Zeitschrittweiten statt.

**Tab. 9.6** Variation der Zeitschrittweiten und max. Courant-Zahlen

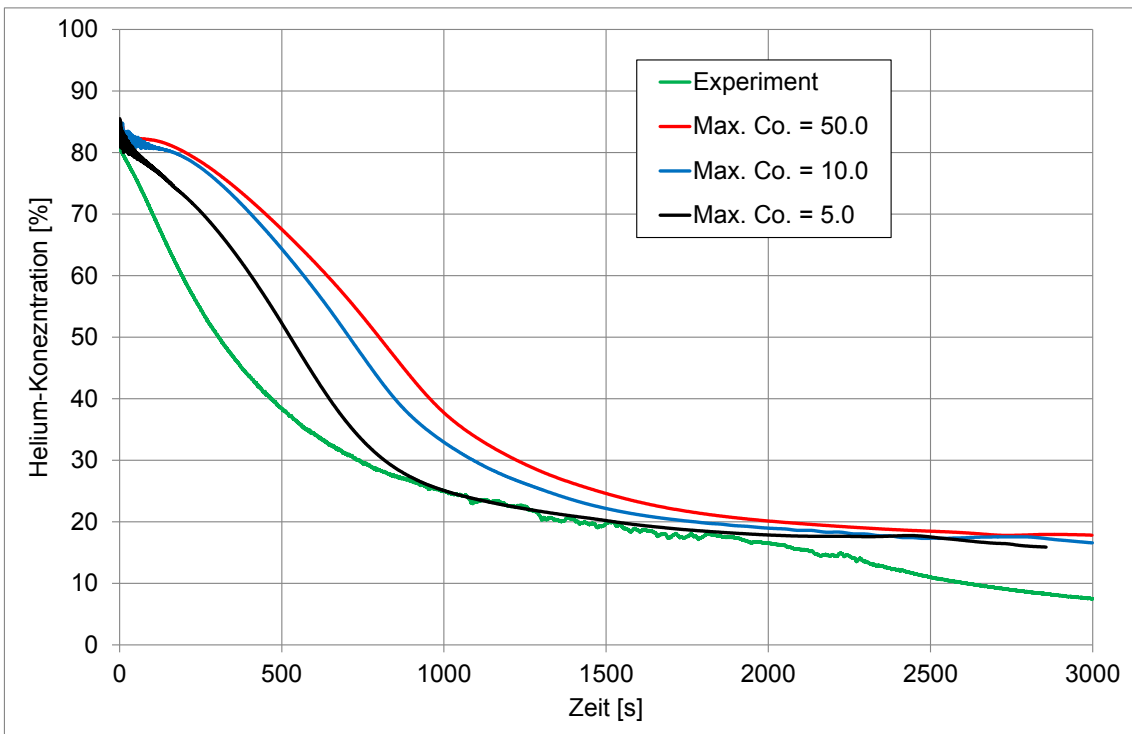
Rechnung	Max. Courant-Zahl	Durchschnittliche Zeitschrittweite
Rechnung 1	50	0.0059 s
Rechnung 2	10	0.0024 s
Rechnung 3	1 (0 s bis 170 s) 5 (170 s bis 2800 s)	0.0012 s

Die Rechnung mit der kleinsten maximalen Courant-Zahl (Rechnung 3) hatte die kleinsten Zeitschritte und sie hat am meisten CPU-Zeit zur Berechnung verbraucht. Diese Rechnung war ursprünglich mit einer maximalen Courantzahl 1 gestartet worden. Wegen der extrem langsamen Berechnung war ab ca. 170 s die Courantzahl jedoch auf den Wert 5 hochgesetzt worden.

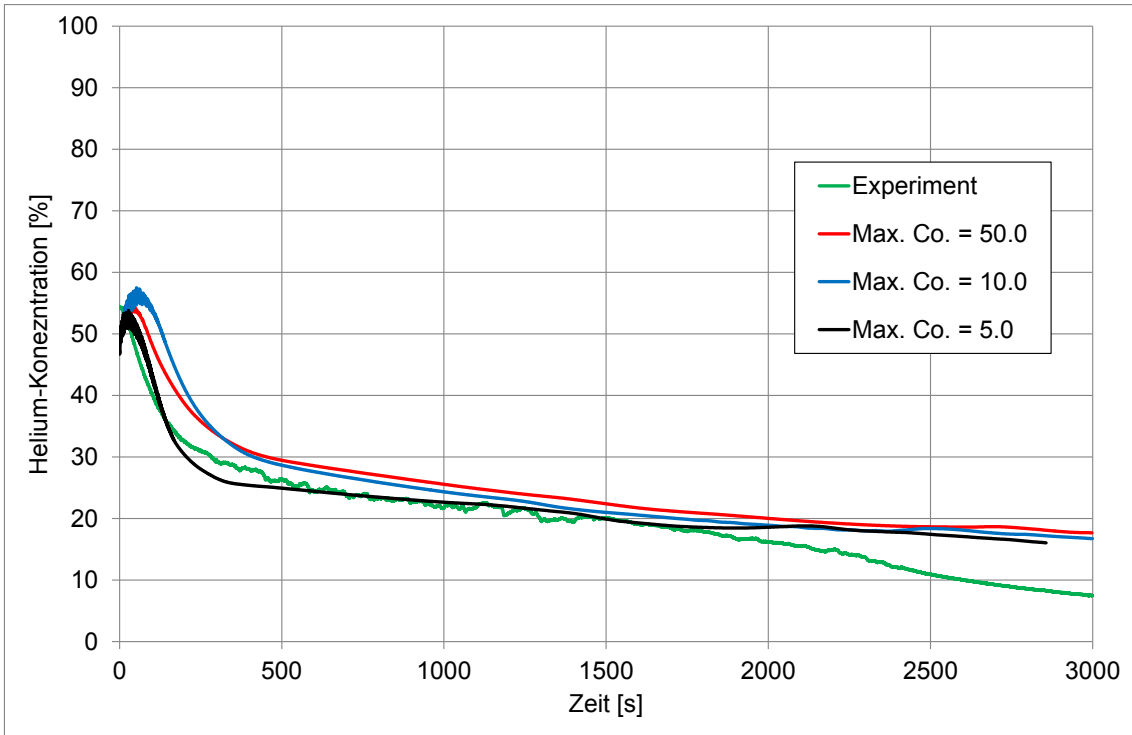
In Abb. 9.44 bis Abb. 9.47 sind die simulierten Heliumkonzentrationen und die experimentellen Ergebnisse dargestellt. Es zeigt sich eine deutliche Abhängigkeit des Ergebnisses von der Zeitschrittweite. Je kleiner die Courant-Zahl (und damit die Zeitschrittweite) ist, desto schneller findet der Abbau der Helium-Schicht statt. Die Ergebnisse mit kleinerer Courant-Zahl passen besser zu den experimentellen Messwerten als die Ergebnisse mit größerer Courant-Zahl. Hier scheinen die numerischen Fehler zuzunehmen. Die Ergebnisse mit der kleinsten Courant-Zahl stimmen allerdings immer noch nicht mit den experimentellen Ergebnissen überein. Insbesondere bei den weiter oben gelegenen Messpunkten (z. B. Kath28) zeigt sich noch ein zu langsamer Abbau der Heliumschicht. Bei den weiter unten gelegenen Messpunkten (Kath20 und Kath12) findet sich hingegen schon eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment.



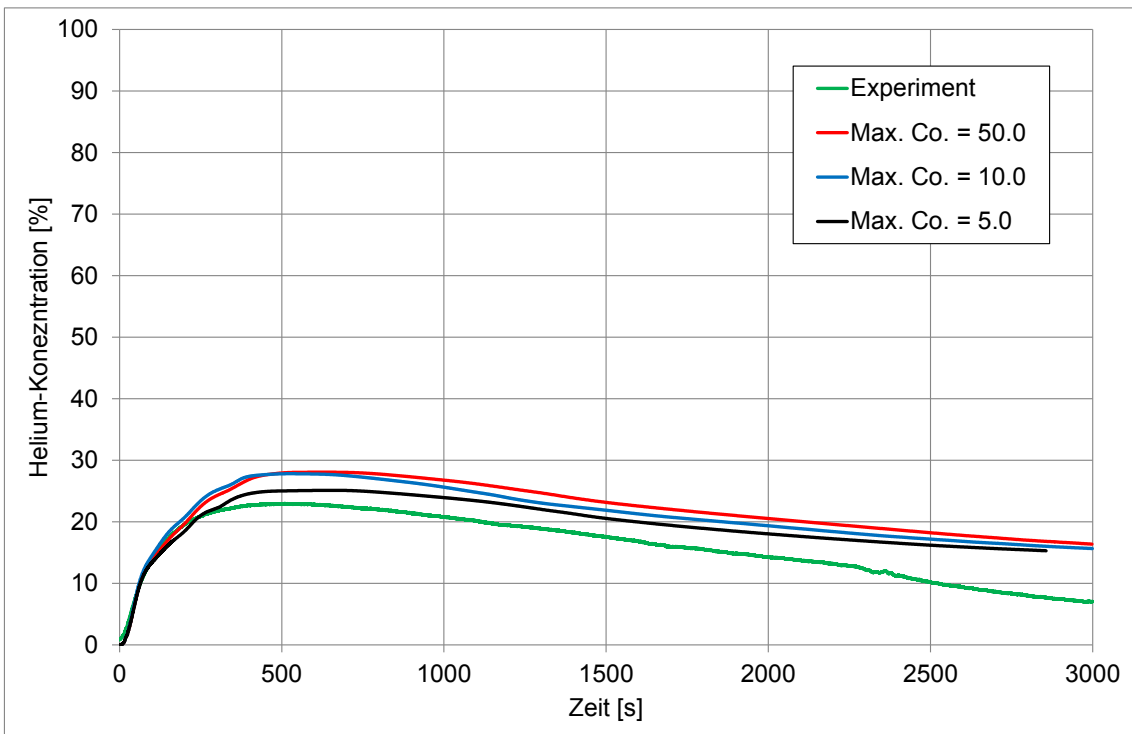
**Abb. 9.44** Heliumkonzentration in 1.723 m Höhe (Kath 28)



**Abb. 9.45** Heliumkonzentration in 1.523 m Höhe (Kath 24)

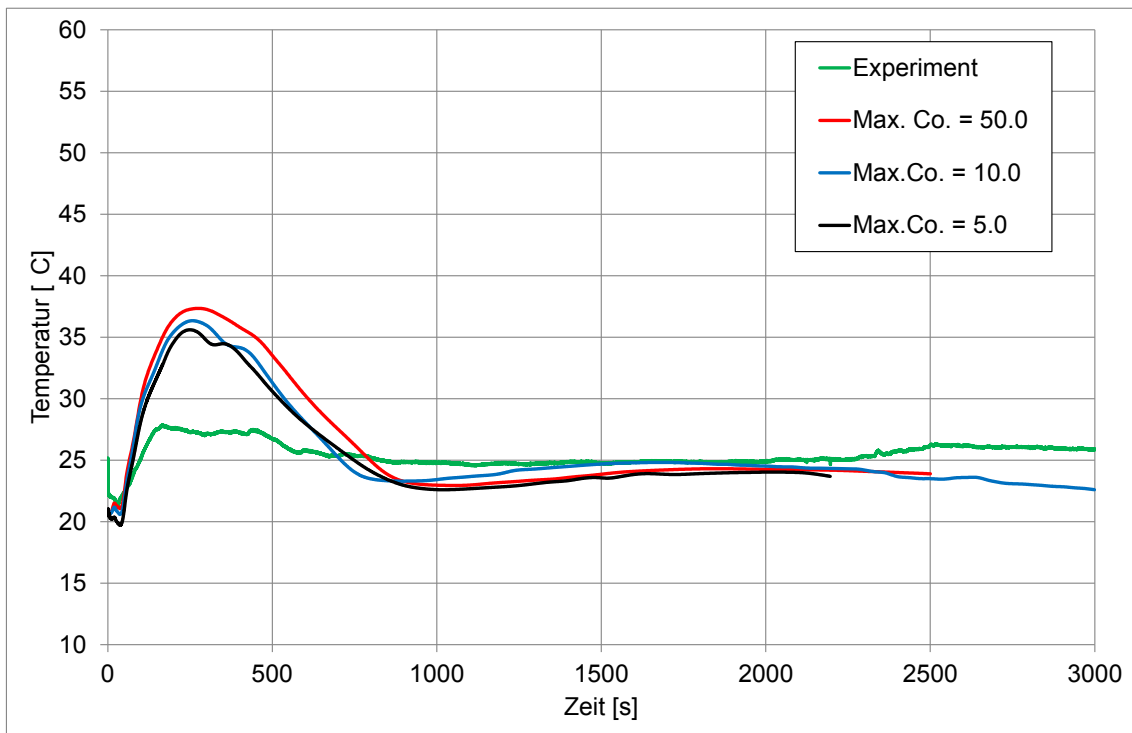


**Abb. 9.46** Heliumkonzentration in 1.423 m Höhe (Kath20)

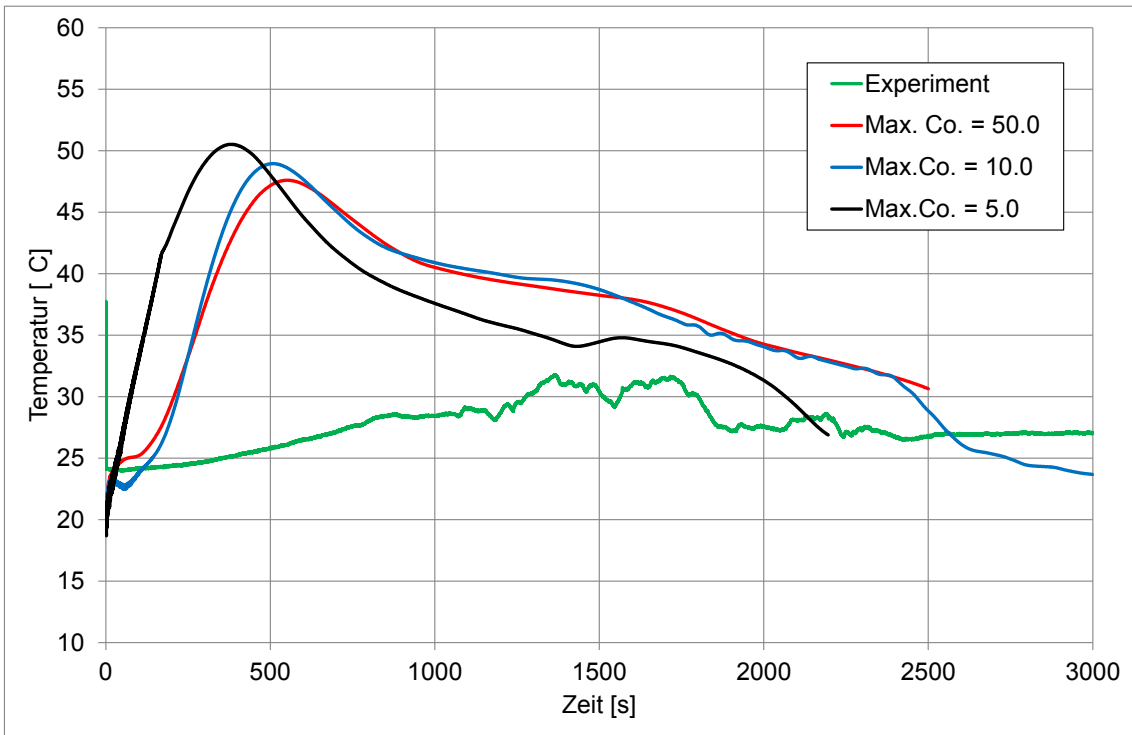


**Abb. 9.47** Heliumkonzentration in 1.073 m Höhe (Kath12)

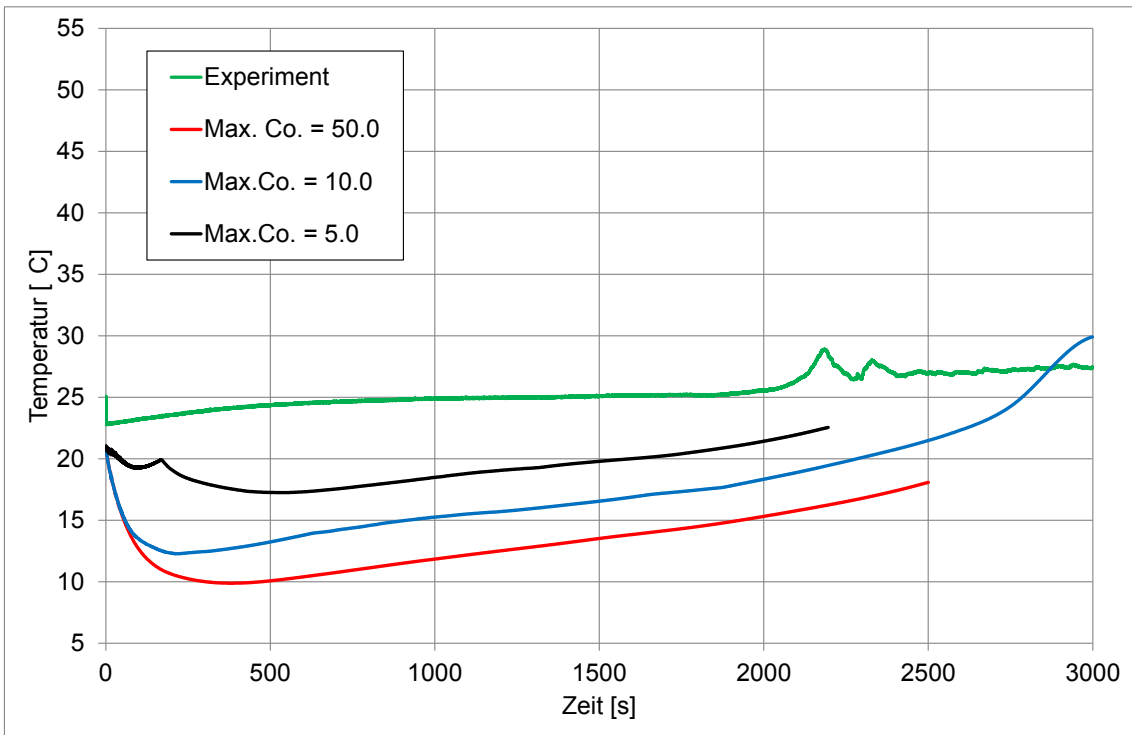
In Abb. 9.48 bis Abb. 9.50 ist der Temperaturverlauf in unterschiedlichen Höhen dargestellt. Auch hier zeigt sich teilweise ein deutlicher Einfluss der Courantzahl auf die Berechnungsergebnisse. Interessant ist insbesondere der Temperaturverlauf innerhalb der Heliumschicht (TC8, siehe Abb. 9.50). Hier sinken die Temperaturen in den Berechnungen – im Gegensatz zum Experiment – deutlich ab, was unphysikalisch ist. Dieser unphysikalische Effekt ist umso stärker, je größer die Courantzahl ist. Dieses deutet darauf hin, dass es hier bei zu großer Courant-Zahl und damit zu großer Zeitschrittweite zu numerischen Fehlern kommt. Insofern ist eine kleine Courant-Zahl unbedingt zu bevorzugen. Vermutlich würde eine Berechnung mit noch kleinere Courant-zahl hier noch besser zu den experimentellen Ergebnissen passen. Leider sind Rechnungen mit kleinerer Courant-Zahl und damit kleineren Zeitschritten aufgrund der langen Berechnungsdauer schwierig.



**Abb. 9.48** Temperaturverlauf in 1.19 m Höhe (TC6)



**Abb. 9.49** Temperaturverlauf in 1.46 m Höhe (TC7)



**Abb. 9.50** Temperaturverlauf in 1.79 m Höhe (TC8)

### 9.6.2 Detaillierter Vergleich mit CFX

Für den Vergleich mit CFX werden zwei OpenFoam-Rechnungen herangezogen – eine Rechnung mit grobem Gitter, aber feinem Zeitschritt und eine Rechnung mit feinem Gitter, aber etwas größeren Zeitschritten. Eine Rechnung mit feinem Gitter und feinen Zeitschritten war auf Grund der hohen benötigten Rechenzeit bisher nicht möglich. In Tab. 9.7 werden die Berechnungsparameter miteinander verglichen.

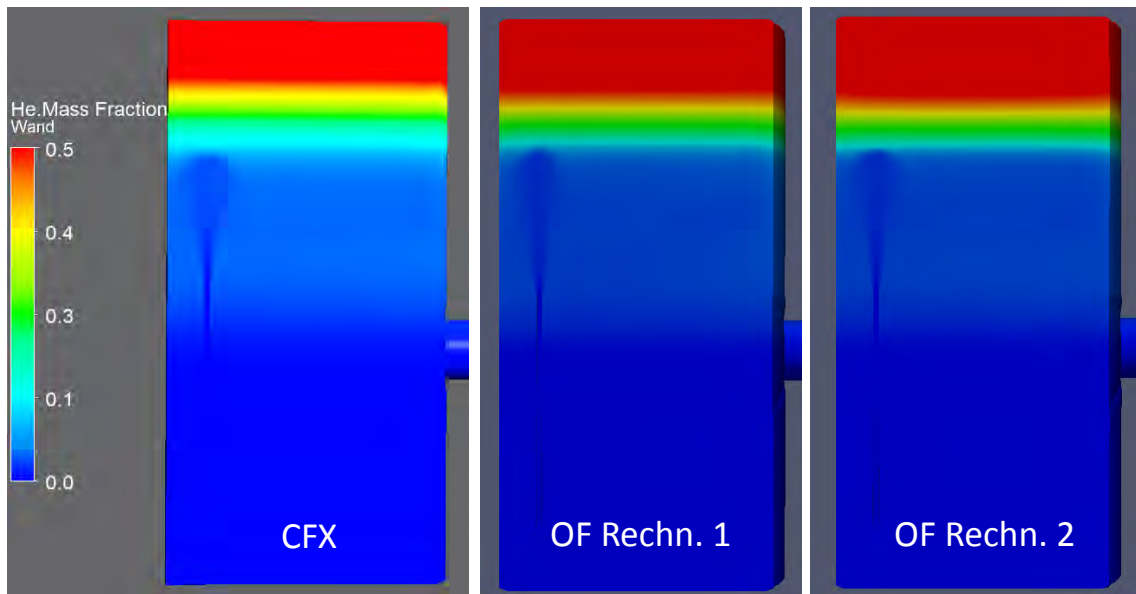
**Tab. 9.7** Berechnungsparameter für die Vergleichsrechnungen

	<b>OpenFoam Rechnung 1</b>	<b>OpenFoam Rechnung 2</b>	<b>CFX-Rechnung</b>
Turbulenzmodell	k-Epsilon (mit Buoyancy-Term)		SST (mit Buoyancy-Term)
Elementzahl	ca. 599 000	ca. 955 000	ca. 909 000
Mittlerer Zeitschritt	ca. 0.00033 s (max. Courant = 1.0)	ca. 0.0024 s (max. Co. = 10.0)	ca. 0.1 s
Strahlungsmodell	Ohne		Ohne

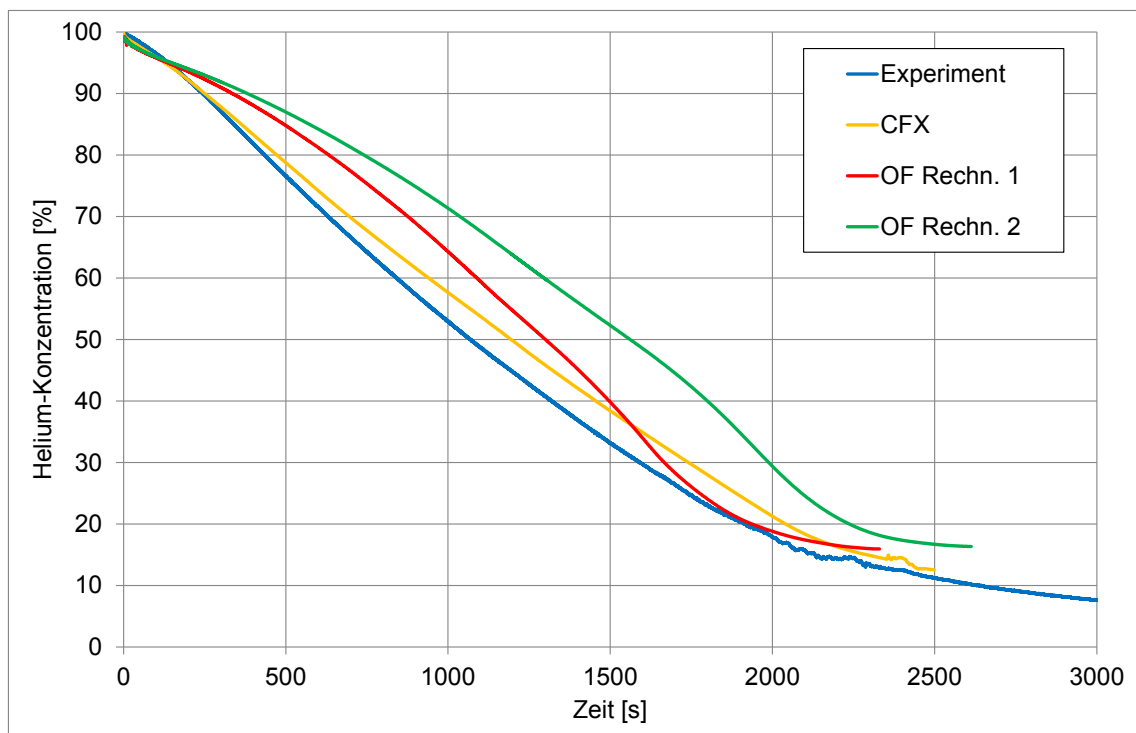
In Abb. 9.51 werden die Heliumkonzentrationen zum Zeitpunkt  $t = 300$  s für die drei unterschiedlichen Berechnungen miteinander verglichen. Ein grundsätzlicher Unterschied besteht schon darin, dass die CFX-Rechnung mit dem CFX-Postprocessor und die OpenFoam-Rechnungen mit Paraview ausgewertet wurden. Die beiden Postprocessoren haben eine leicht unterschiedliche Farb- und Helligkeitsdarstellung. Trotzdem kann man schon zu diesem Zeitpunkt leichte Unterschiede in der Heliumschiebung zwischen der CFX- und den OpenFoam-Rechnungen erkennen. Ursache hierfür ist die etwas problematische Initialisierung in OpenFoam (der Konzentrationsverlauf wird in Stufenform initialisiert).

In Abb. 9.52 bis Abb. 9.55 wird der Verlauf der Helium-Konzentrationen miteinander verglichen. Bei den unteren drei Messstellen ca. in 1.0 m bis 1.5 m Höhe zeigen die drei Simulationen und die experimentellen Werte einen relativ ähnlichen Verlauf. Es gibt zwar kleinere Unterschiede, jedoch hat keine der drei Simulationen einen deutlichen Vorteil gegenüber den anderen. Erst bei der obersten Messstelle (Kath28, in 1.72 m Höhe) zeigt sich ein etwas deutlicherer Unterschied zwischen den drei Simulationen. Hier wird der Verlauf der Heliumkonzentration am besten von der CFX-Rechnung wiedergegeben, die beiden OpenFoam-Rechnungen kommen auf eine etwas zu langsame Auflösung der Heliumschiebung an dieser Position. Von den beiden O-

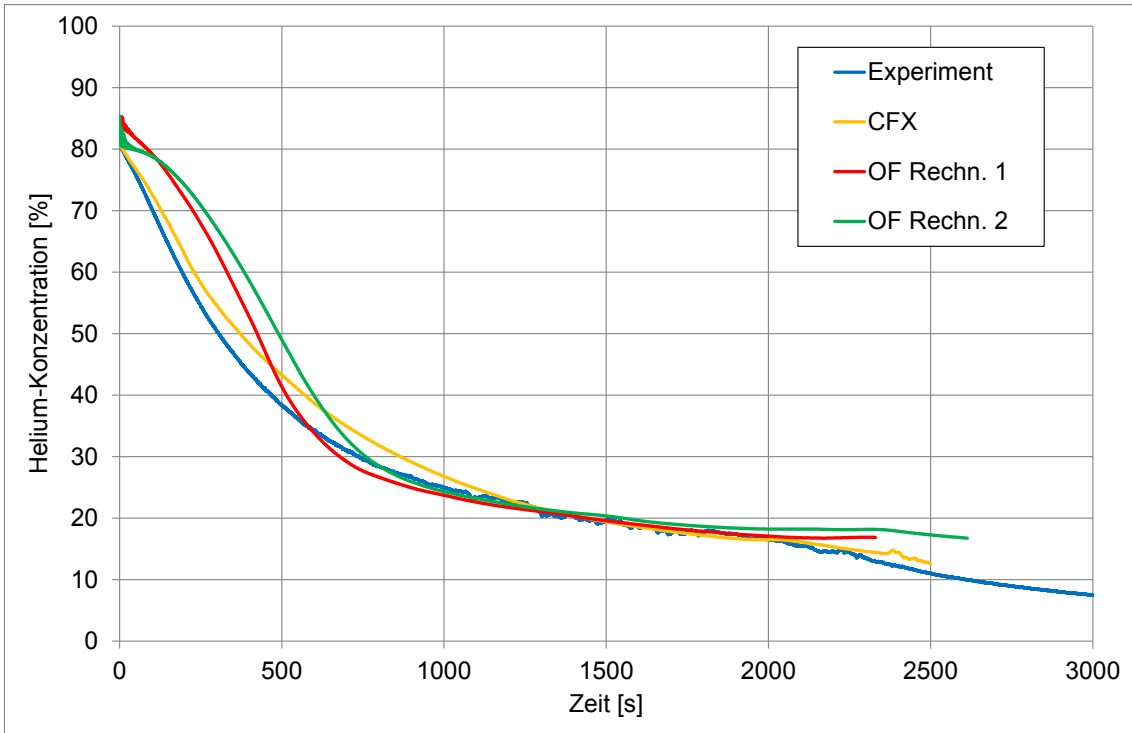
penFoam-Rechnungen passt aber Rechnung 1 (grobes Netz, kleine Zeitschritte) am besten zu den experimentellen Werten.



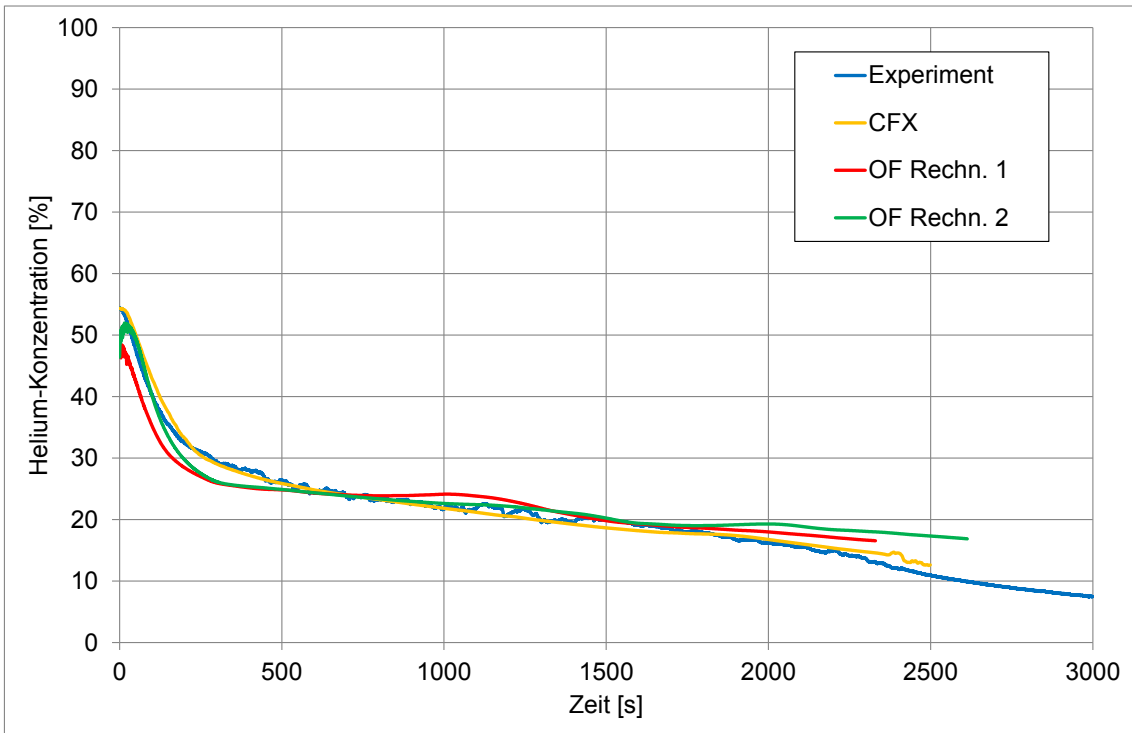
**Abb. 9.51** Vergleich der Heliumkonzentrationen (bei  $t = 300$  s)



**Abb. 9.52** Heliumkonzentration in 1.72 m Höhe (Kath28)

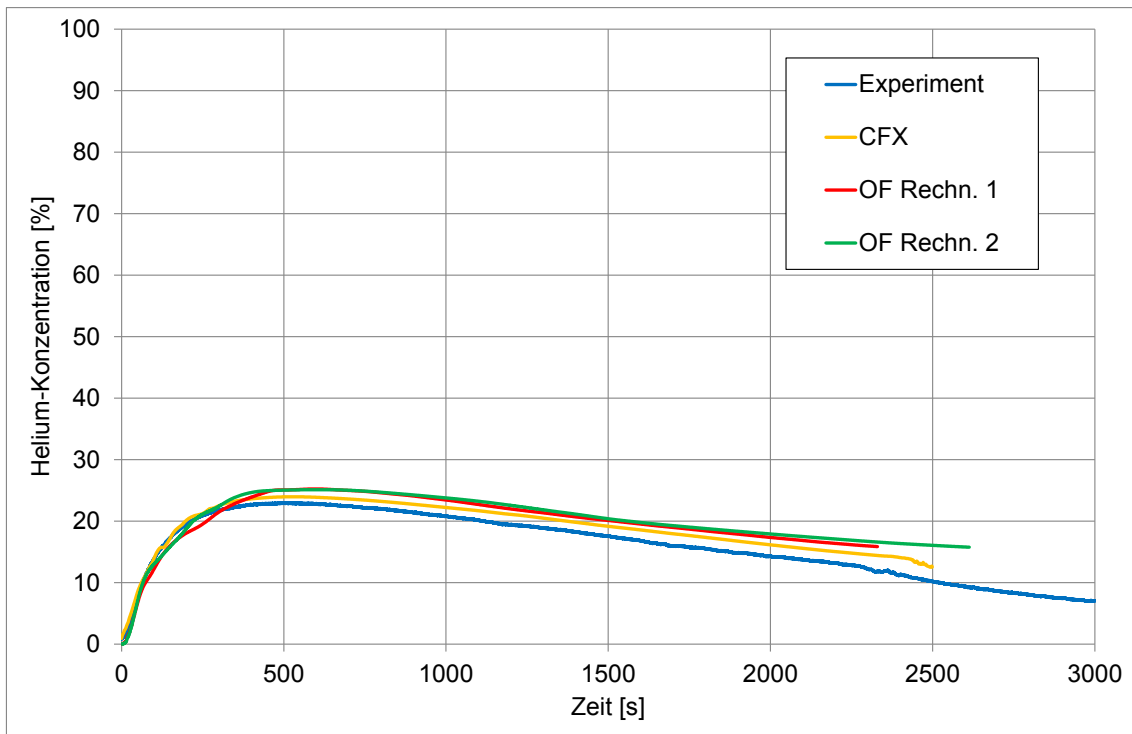


**Abb. 9.53** Heliumkonzentration in 1.52 m Höhe (Kath24)



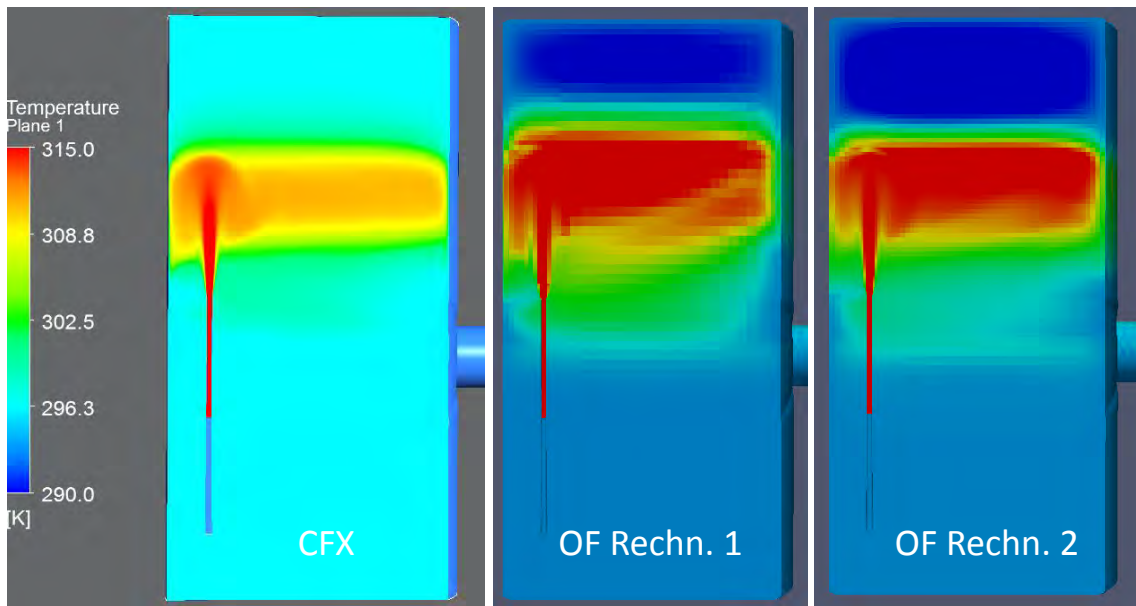
**Abb. 9.54** Heliumkonzentration in 1.42 m Höhe (Kath20)



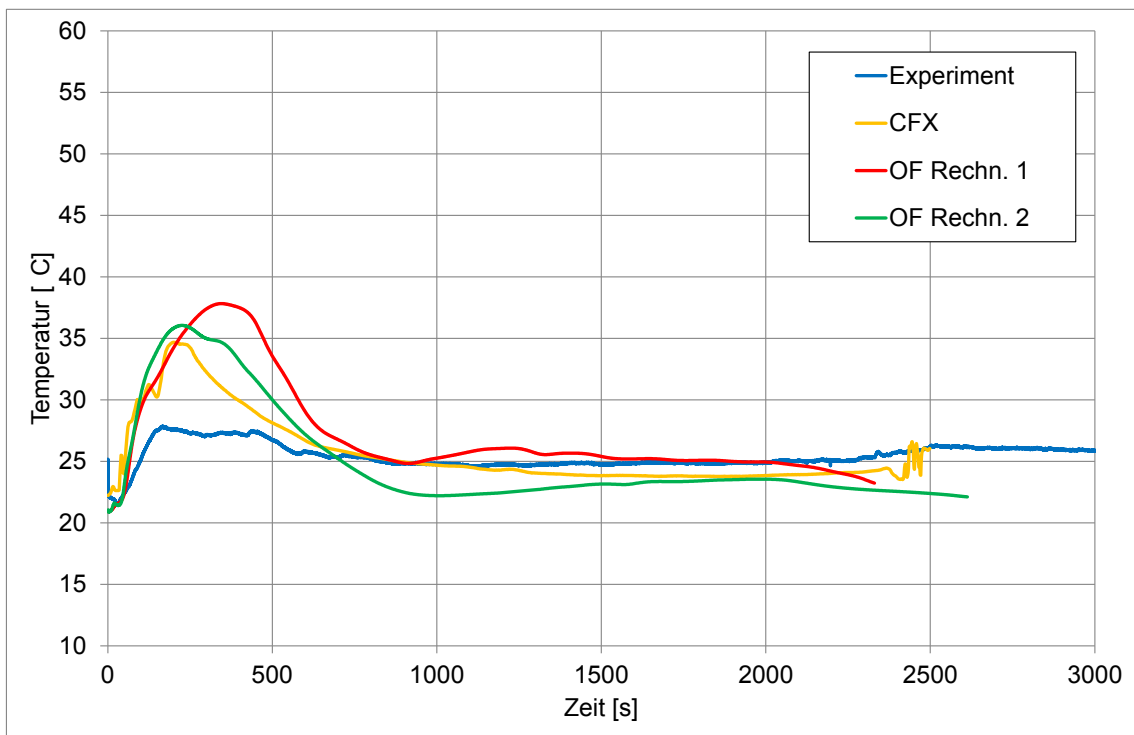


**Abb. 9.55** Heliumkonzentration in 1.07 m Höhe (Kath12)

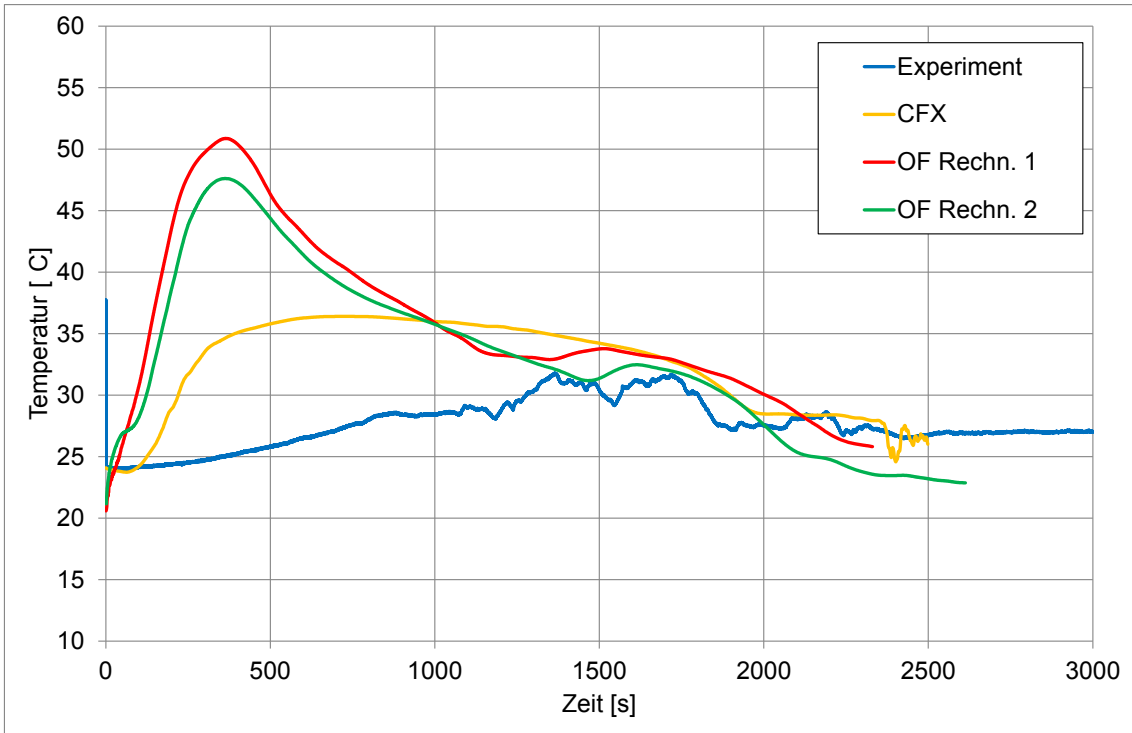
In Abb. 9.56 werden die Temperaturen zum Zeitpunkt  $t = 300$  s miteinander verglichen. Hierbei fällt auf, dass in beiden OpenFoam-Rechnungen innerhalb der Heliumschicht eine zu niedrige Temperatur herrscht, während sich unterhalb der Heliumschicht eine zu hohe Temperatur bildet. Innerhalb der Heliumschicht nimmt die Temperatur anfangs sogar gegenüber den initialen Werten ab, was unphysikalisch ist. Leider konnte bisher noch keine Solvereinstellung gefunden werden, die hier für eine bessere Abbildung sorgt. Insgesamt scheint der Effekt aber bei kleineren Zeitschritten geringer zu sein. Diese Effekte spiegeln sich auch in den Temperaturverläufen in Abb. 9.57 bis Abb. 9.59 wieder. In mittlerer Behälterhöhe liegen die mit OpenFoam und CFX berechneten Werte noch relativ nahe beieinander (siehe TC6, Abb. 9.57). Direkt unterhalb der Heliumschicht steigen die Temperaturen in den OpenFoam-Rechnungen zunächst zu stark an (siehe TC7, Abb. 9.58) um dann wieder auf das experimentelle Niveau abzusinken. Innerhalb der Heliumschicht kommt es dann zu dem erwähnten unphysikalischen Absinken der Temperaturen (siehe TC8, Abb. 9.59). Dieser Effekt ist jedoch bei OpenFoam-Rechn. 1 deutlich kleiner als bei Rechn. 2. Eine Rechnung mit noch kleineren Zeitschritten war aber auf Grund der enorm langen Rechenzeiten nicht möglich.



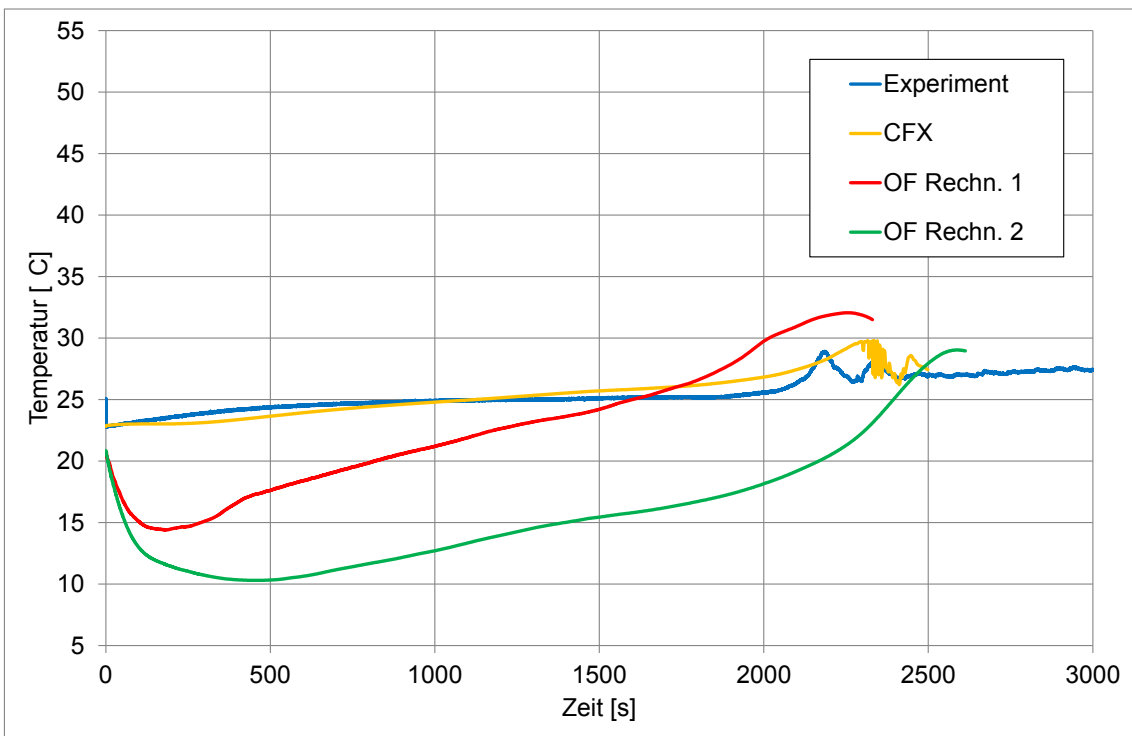
**Abb. 9.56** Vergleich der Temperaturen (bei  $t = 300$  s)



**Abb. 9.57** Temperaturverlauf in 1.19 m Höhe (TC6)



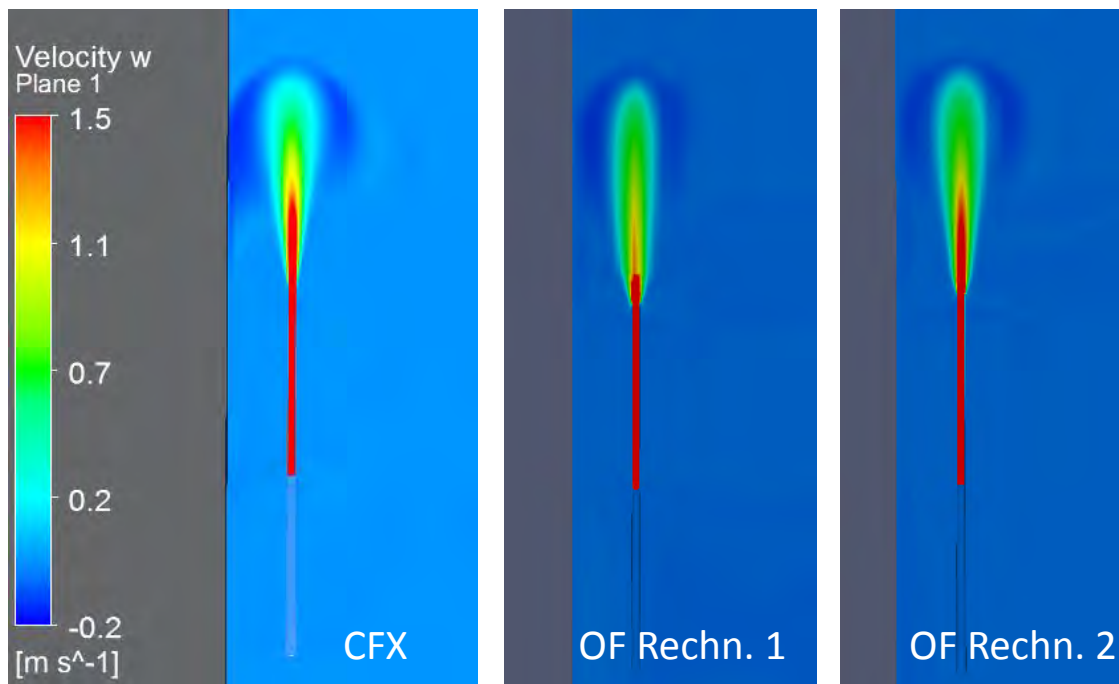
**Abb. 9.58** Temperaturverlauf in 1.46 m Höhe (TC7)



**Abb. 9.59** Temperaturverlauf in 1.79 m Höhe (TC8)

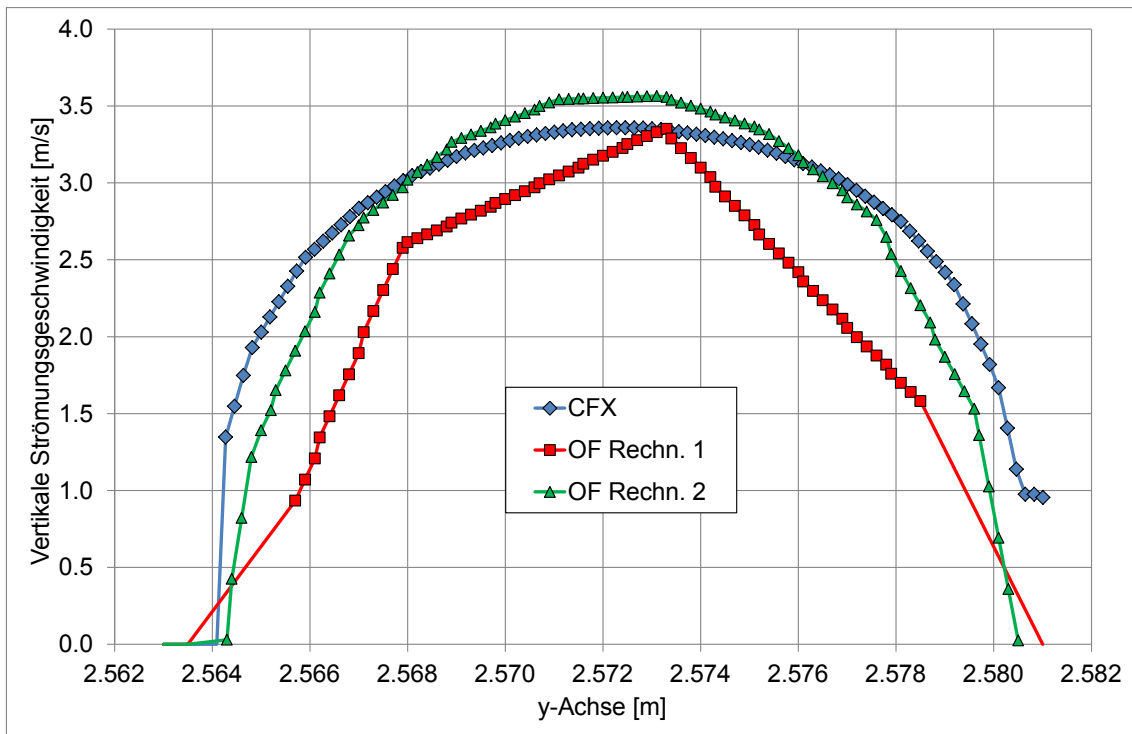
In Abb. 9.60 werden die vertikalen Geschwindigkeiten am Inlet-Rohr bei  $t = 300$  s miteinander verglichen. Diese Verteilungen von CFX und OpenFOAM Rechnung 2 sehen sich qualitativ ähnlich, auch wenn es leichte Abweichungen in der Form des Jets gibt.

Bei der Rechnung OpenFOAM 1 ist die Geschwindigkeit in der Jet-Mitte deutlich kleiner. Die Ursache hierfür ist das deutlich gröbere Netz.



**Abb. 9.60** Vergleich der vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten (bei  $t = 300$  s)

In Abb. 9.61 werden die mit OpenFoam berechneten Geschwindigkeitsprofile kurz vor Ende des Inlet-Rohres mit dem in CFX berechneten Geschwindigkeitsprofil verglichen. Es zeigen sich noch deutliche Unterschiede. Insbesondere bei der OpenFoam-Rechnung 1 fällt das eckige Geschwindigkeitsprofil auf. Ursache hierfür sind die unterschiedlichen Netze im Inlet-Rohr. Bei der OpenFoam-Rechnung 1 ist das Netz sehr grob und enthält nur wenige Elemente innerhalb des Inlet-Rohres, aber auch bei der OF-Rechn. 2 ist die Randschicht nicht besonders detailliert aufgelöst. Die unterschiedlichen Geschwindigkeitsprofile können wiederum Ursache für die unterschiedliche schnelle Abbaugeschwindigkeit des Heliums sein.



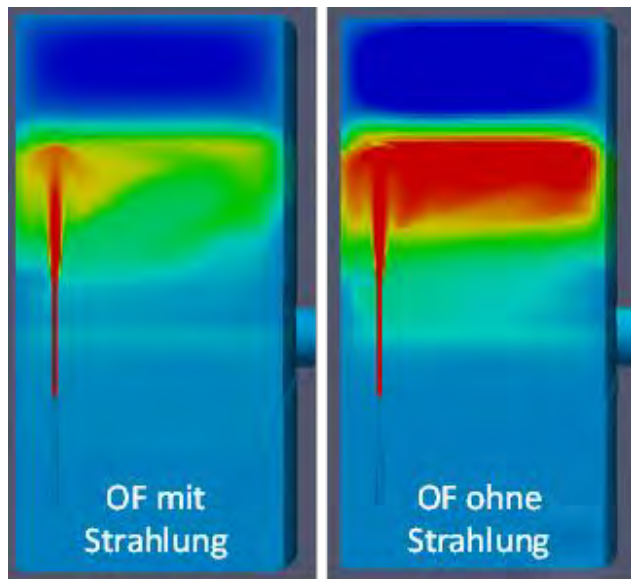
**Abb. 9.61** Vergleich des Geschwindigkeitsprofils im Inlet-Rohr (Höhe: 0.95 m,  $t = 300$  s)

## 9.7 Weitere Untersuchungen zur Eignung von OpenFoam für Containment-Simulationen

Im Rahmen einer Projektaufstockung wurden weitere kleinere Untersuchungen und Tests durchgeführt, um die Frage zu beantworten, ob sich OpenFOAM generell für Containmentanwendungen eignet. Hierzu wurden Modelle aus unterschiedlichen Bereichen getestet (Strahlung, Conjugated Heat Transfer,...). Ziel war hier nicht eine abschließende Validierung der Modelle sondern nur eine relativ oberflächliche Prüfung, ob bestimmte Modelle in OpenFOAM generell vorhanden sind und ob sie lauffähig sind und plausible Ergebnisse liefern.

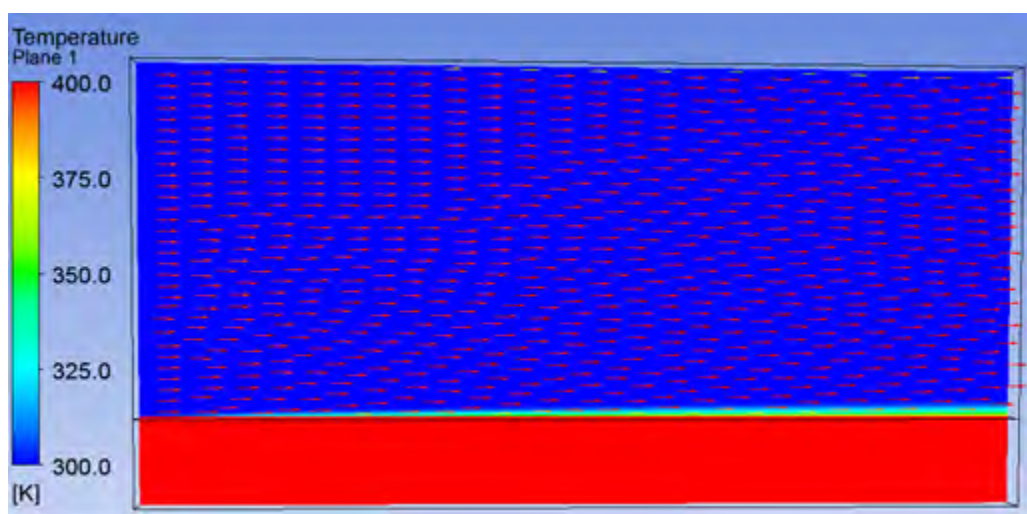
**Strahlungsmodelle:** Generell sind mehrere unterschiedliche Modelle in OpenFoam vorhanden (P1, fvDOM,...). Diese können ab OpenFOAM 5.0 auch standardmäßig zusammen mit dem Solver rhoReactingBuoyantFoam verwendet werden. Erste einfache Testbeispiele wurden mit dem P1-Modell durchgeführt. Die Ergebnisse sind etwas anders als bei CFX (auch mit P1 gerechnet), insgesamt erscheinen die Ergebnisse jedoch plausibel. Die Abbildung zeigt den MiniPanda-Benchmark, einmal ohne Strahlungsmodell und einmal mit dem P1-Strahlungsmodell gerechnet. Durch das Strah-

lungsmodell findet ein zusätzlicher Wärmeaustausch zwischen den einzelnen Bereichen statt.



**Abb. 9.62** Testbeispiel für Strahlungsmodellierung in OpenFOAM

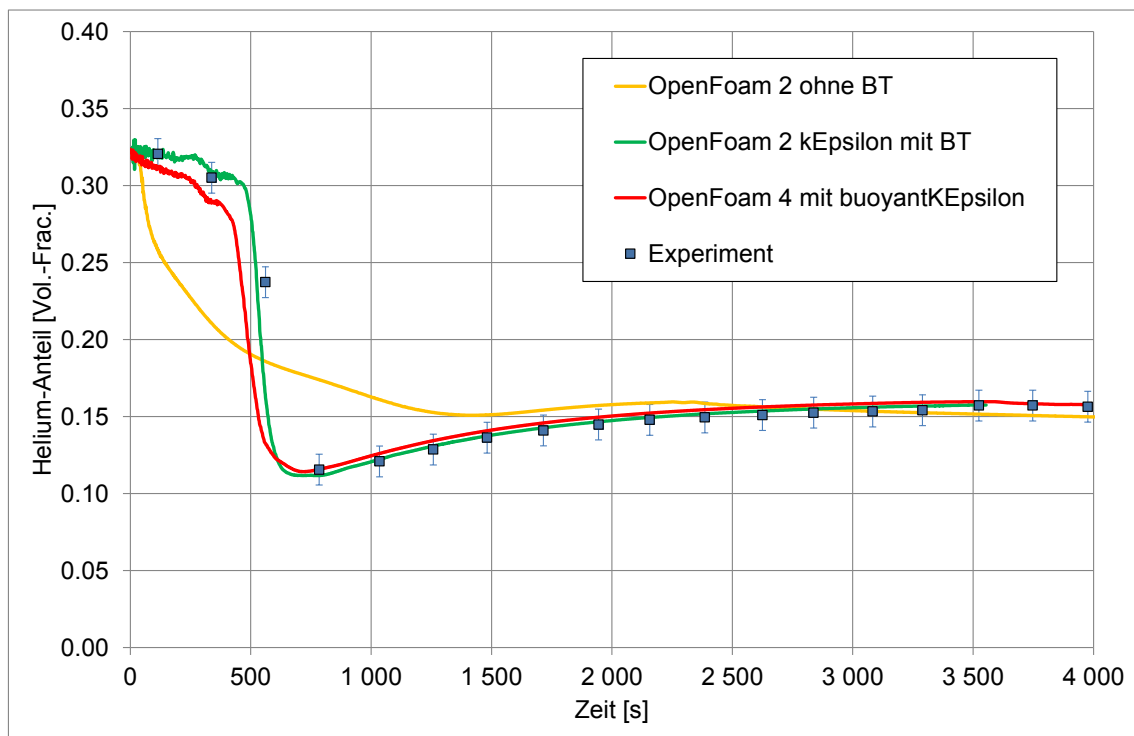
**Wand/Gas-Wärmeaustausch (Conjugated Heat Transfer):** Eine Kopplung des Wand/Gas-Wärmeaustausches mit rhoReactingFoam wurde von einem externen Nutzer bereits durchgeführt und veröffentlicht, ist aber nicht in der Standard-Version enthalten. Der neue Solver hat den Namen „chtMultiRegionFoam“, er ist gut dokumentiert und enthält ein Tutorial-Beispiel. Dieses Beispiel war bei der GRS lauffähig. Die Abbildung zeigt einen kalten Luftstrahl der an einer heißen Metallplatte entlang streicht. Hierdurch kommt es zu einer Erwärmung der Luft in einer Schicht nahe der Platte. Prinzipiell zeigt sich hier schon das erwartete Verhalten.



**Abb. 9.63** Testbeispiel für Conjugated Heat Transfer in OpenFOAM

**Buoyancy-Turbulenz Terme:** Ab OpenFOAM Version 4 gibt es in der Standardversion ein Turbulenzmodell, welches Terme für die Produktion und Dissipation von Turbulenz enthalten („buoyantKEpsilon-Modell). In der früheren Version 2 (diese wurde für bisherige Arbeiten verwendet) musste noch ein entsprechendes Modell selber vom Nutzer implementiert werden. Die Abbildung Abb. 9.64 zeigt einen ersten Test des neuen Modells in OpenFOAM 4. Die Auflösung des Heliumschicht in diesem OECD-Panda-Experiment scheint noch etwas zu schnell zu erfolgen (rote Linie), das generelle Verhalten scheint aber prinzipiell schon zu stimmen.

**Kondensation:** Ein Modell zur Kondensation ist vorhanden, baut aber auf einem generell unterschiedlichen Mehrphasen-Solver (interFOAM) auf und ist daher für Containmentanwendungen nicht geeignet. Es gibt aber in OpenFOAM kein Ein-Fluid Wand- oder Volumenkontensationsmodell. Als erster Test wurde untersucht, ob und wie sich in OpenFOAM Quellterme zur Modellierung von Volumenkontensation implementieren lassen. Hierzu wurden Quellterme in die Kontinuitäts- und die Energiegleichung eingefügt, die das Gleichgewicht in Richtung Sättigungsbedingungen verschieben. Erste Tests zeigten plausible Ergebnisse.



**Abb. 9.64** Test des buoyantKEpsilon-Modells (rote Kurve / OECD-Panda-Experiment)

## 9.8 Ergänzungen zur numerischen Stabilität von OpenFOAM

Bezüglich der numerischen Stabilität von OpenFOAM wurden unterschiedliche Beobachtungen gemacht, die im Folgenden stichpunktartig aufgeführt werden. Da in OpenFOAM sehr viele unterschiedliche Einstellungen (numerische Verfahren, Parameter) ausgewählt werden können, beziehen sich die hier vorgestellten Erfahrungen auf die im Projekt verwendeten Standardeinstellungen für OpenFOAM-2, rhoReactingBuoyantFoam und können nicht verallgemeinert werden:

- Höhere Orthogonalität des Gitters und gleichmäßig große Zellen erhöhen die Stabilität und ermöglichen größere Zeitschritte.
- Das Standard k-epsilon-Turbulenzmodell scheint stabiler zu sein als das Launder-Sharma-k-epsilon Modell.
- Das Einfügen des Buoyancy-Terms führte zu einer höheren Instabilität der Rechnung und zu kleineren Zeitschritten, aber zu besseren Ergebnissen.
- Manchmal stürzt OpenFOAM ab, wenn die Zeitschritte zu klein werden. Dann empfiehlt sich eine Umstellung von adaptiven zu konstanten Zeitschrittweiten.
- Die Stabilität der Rechnung lässt sich wesentlich durch gut gewählte Parameter in der Solution- and Algorithm-Control im fvSolution-File verbessern. Als gut hat sich insbesondere eine Erhöhung der „nOuterCorrectors“-Anzahl in Kombination mit einer Residual-Control erwiesen (optimierte Einstellungen sind in



- **Anhang A** dargestellt).

## **9.9 Zusammenfassung und Fazit**

Ziel der Arbeiten in diesem Arbeitspunkt des Vorhabens war ein Vergleich der Leistungsfähigkeit der frei verfügbaren Open Source Software OpenFOAM mit der kommerziellen Software ANSYS CFX. Hierzu wurde zunächst der Aspekt der Gasverteilung und Schichtungsauflösung anhand dreier Experimente untersucht (THAI TH-26, MiniPanda und ein OECD-PANDA-Benchmark).

Bei der Erstellung der OpenFOAM-Netze hat sich das mitgelieferte Programm SnappyHexMesh als gutes Werkzeug herausgestellt, das Netze von hoher Qualität erzeugen kann. Allerdings hat SnappyHexMesh noch Limitierungen (z. B. nur Gitterverfeinerung in allen Koordinaten gleichzeitig) die zukünftig behoben werden müssen. Ein direkter Import bzw. eine Konversion von CFX-Netzen ist zwar auch möglich, allerdings hat OpenFOAM bzgl. der Anforderung an die Orthogonalität des Berechnungsnetzes höhere Ansprüche als CFX und somit führte die Importierung zu Problemen. Dafür hat man mit OpenFOAM aber auch die Möglichkeit, sogenannte hängende Knoten zu verwenden, was eine gute lokale Verfeinerung des Netzes ermöglicht, ohne die Orthogonalität zu gefährden.

Bei der Auswahl des passenden Solvers scheint der OpenFOAM-Solver rhoReacting-BuoyantFoam am besten zu der vorliegenden Problemstellung (Leichtgasschichtung und Auflösung) zu passen. Nach einer ersten Berechnung hat sich allerdings gezeigt, dass OpenFOAM eine zu schnelle Schichtungsauflösung im Vergleich zum Experiment vorhersagt. Als Ursache hierfür wurde das Fehlen eines Terms zur Erzeugung gravitationsbedingter Turbulenz (Buoyancy-Turbulence) erkannt, und es konnten entsprechende Terme nachträglich in die Turbulenzgleichungen implementiert werden. In einer darauf folgenden weiteren Nachrechnung ergab sich eine längere Auflösungszeit für die Gasschichtungen, die nun besser zum Experiment passt. Der zeitliche Verlauf der Heliumkonzentrationen ähnelt nun stark demjenigen, der von CFX berechnet wird (obschon es noch einige Unterschiede bzgl. Gitter, Zeitschritten, Berechnungsparameter gibt). Die vorliegenden ersten Ergebnisse bzgl. der Gasverteilung und Schichtungsauflösung sind schon viel versprechend. Es müssen aber noch weitere Untersuchungen und gegebenenfalls auch Modellverbesserungen erfolgen.

Es gibt noch weitere Phänomene aus dem Bereich der Containment-Simulationen, die im Rahmen der Projektaufstockung mit kleinen Beispielen getestet wurden. Dazu gehören unter anderem Wärmeaustausch mit Festkörpern (Conjugated Heat Transfer), Volumencondensation sowie die Berechnung von thermischer Strahlung. Grundsätzlich scheint die Berechnung dieser Phänomene in OpenFOAM möglich zu sein. In RS1526 wurden hierzu nur erste oberflächliche Tests gemacht, eine tiefergehende Untersuchung und Validierung ist noch notwendig.



## 10 AP 3.1 – Simulation der Gasverteilung und der Sumpfbildung im Sicherheitsbehälter eines DWR KONVOI

Ziel der Arbeiten in diesem Abschnitt war es, die in diesem Projekt erzielten Modellfortschritte, insbesondere das Sumpfmodell und das IKE-Volumenkondensationsmodell, in den Konvoi-Datensatz zu integrieren und die Anwendbarkeit der Modelle in einem großen Datensatz zu testen.

### 10.1 Darstellung des Störfall-Szenarios

Im Rahmen der vorliegenden Arbeiten wurde auf ein Störfallszenario zurückgegriffen, das schon beim Generic-Containment-Benchmark (SARNET 2) verwendet wurde und das für die vorliegende Anwendungsrechnung modifiziert wurde. In Abb. 10.1 bis Abb. 10.3 finden sich die Einspeiseraten für Wasser, Dampf und H<sub>2</sub>. Im Vergleich zum Generic-Containment-Szenario wurde hier der Beginn der H<sub>2</sub>-Einspeisung von ca. 2000 s (0.6 h) auf 0 s vorverlegt. Dies hat ausschließlich praktische Gründe, um schnell eine Erhöhung der H<sub>2</sub>-Konzentrationen beobachten zu können. Das Szenario ist damit nur beispielhaft und nicht realistisch. In den vorliegenden Arbeiten soll aber der Fokus auch mehr auf dem Einbau und Test der Sumpfmodellierung liegen, nicht auf einer realistischen Störfallberechnung.

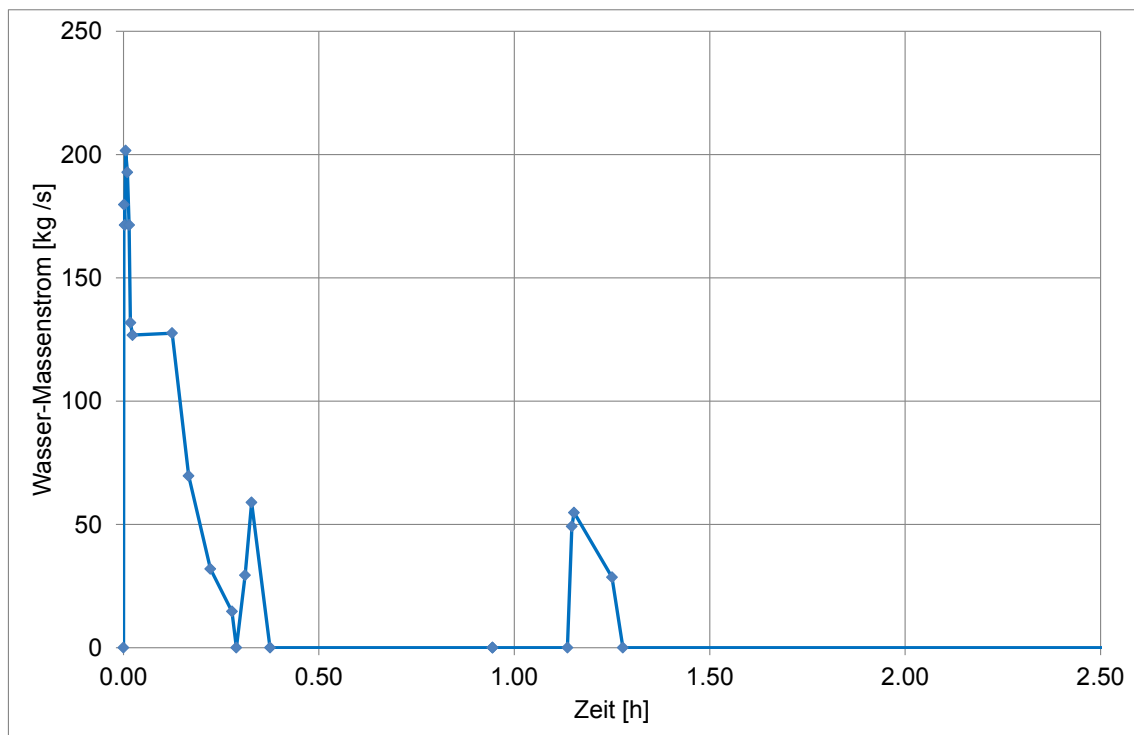
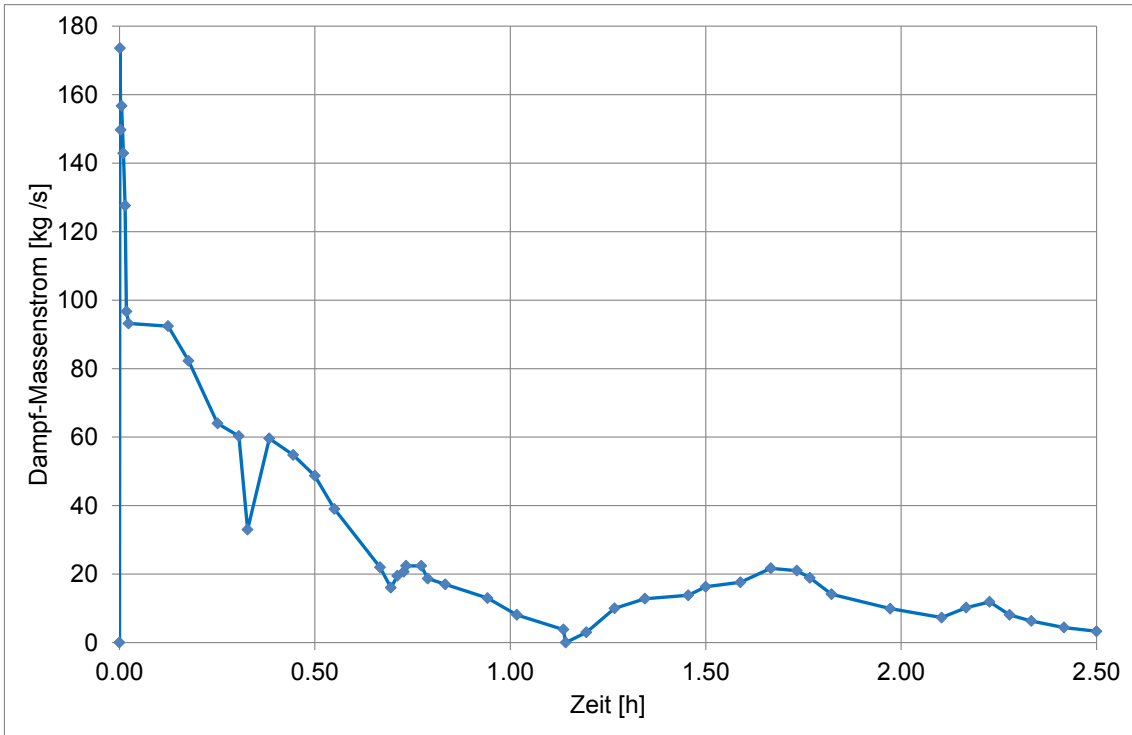
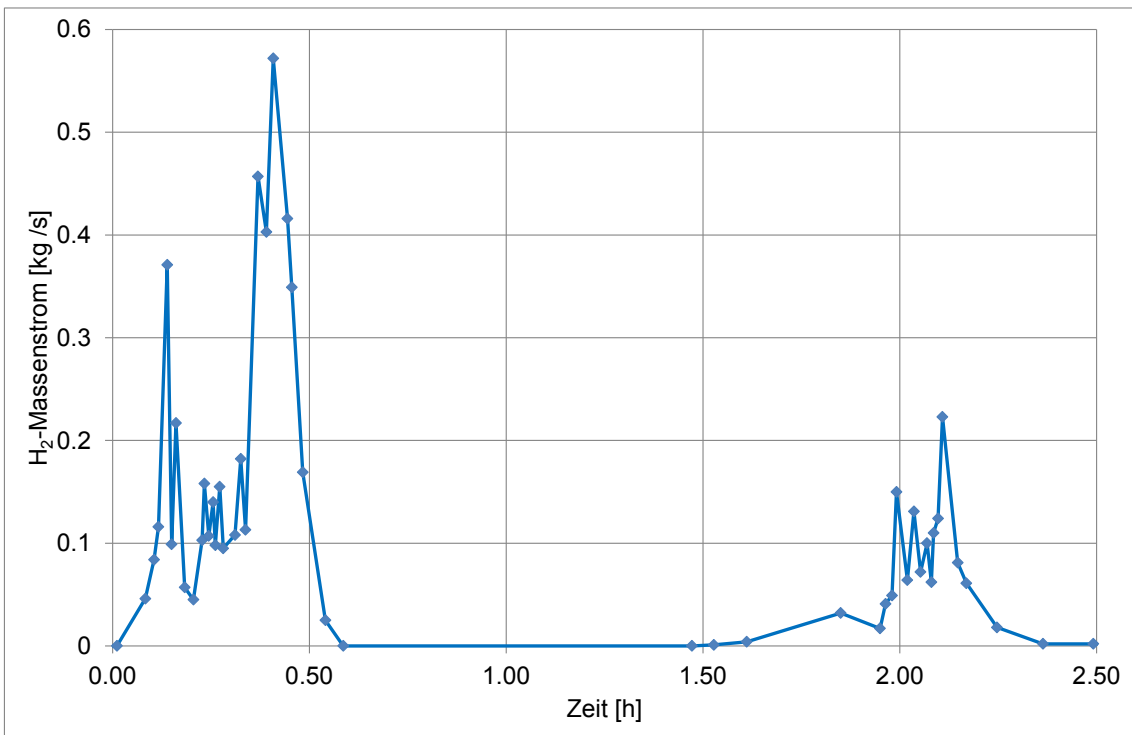


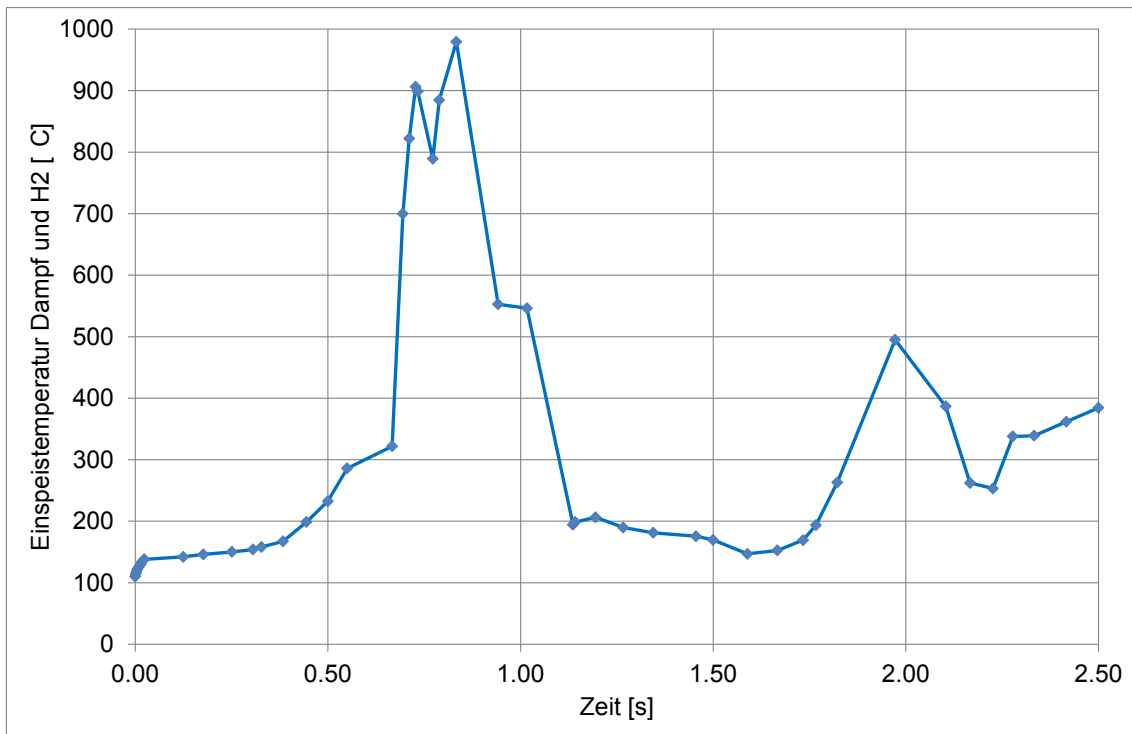
Abb. 10.1 Wasser-Einspeiseraten



**Abb. 10.2** Dampf-Einspeiseraten



**Abb. 10.3** H<sub>2</sub>-Einspeiseraten



**Abb. 10.4** Einspeisetemperatur Dampf und H<sub>2</sub>

## 10.2 CFX-Datensatz

Für die Berechnung mit CFX wurden unterschiedliche Gitter verwendet. Zunächst gab es eine Gitterstudie mit einem groben (5.4 Mio. Elemente) und einem feinen Netz (7.6 Mio. Elemente). Diese Gitterstudie wird im folgenden Abschnitt noch weiter erläutert. Dann wurden mehrere Berechnungen ohne Sumpf und mit Sumpf durchgeführt.

Ursprünglich wurden die Gase (Dampf und H<sub>2</sub>) und auch das Wasser jeweils über einen Inlet (Bruchstelle) in das Containment eingespeist. Hierbei traten jedoch sehr extreme Werte bzgl. der Strömungsgeschwindigkeiten auf, was zu erheblichen numerischen Schwierigkeiten führte. Aus diesem Grund wurde von einem Inlet-Freistrahler als Einspeisung abgesehen. Alternativ wurde eine volumetrische Quelle für die Gas-Einspeisung verwendet. Dabei werden im oberen Sumpfbereich Dampf und H<sub>2</sub> entsprechend den Einspeiseraten (siehe Abb. 10.2 und Abb. 10.3) als Volumenquelle freigesetzt. Dieses entspricht auch in etwa der Einspeisung in ein Volumen bei Lumped-Parameter-Codes wie COCOSYS. Die unterschiedliche Modellierung der Gaseinspeisung (Freistrahler / unterschiedliche Ausrichtung / Volumetrisch ...) könnte durchaus einen Einfluss auf die Verteilung der Gase im Containment und damit auf den Störfallablauf haben. Dieser Aspekt soll aber nicht hier untersucht werden.

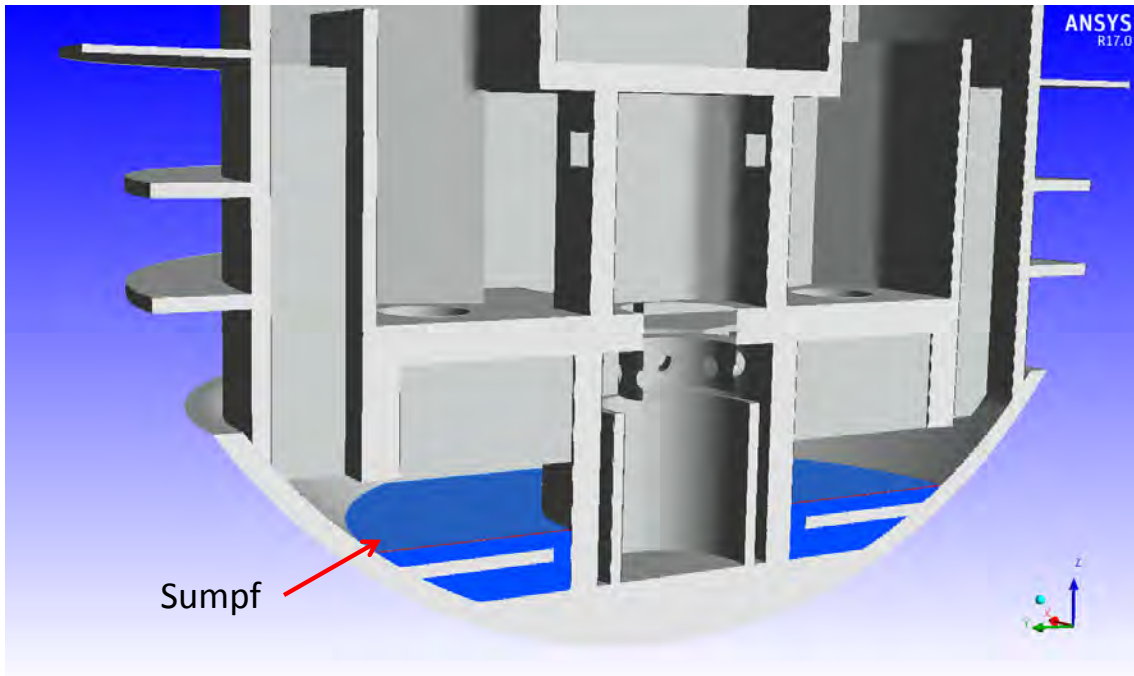
Als Turbulenzmodell wurde wieder das SST-Turbulenzmodell verwendet. Die Strahlung wird durch das DiscreteTransferModell simuliert. Ab CFX-Version 17 ist die Kombination von Strahlung und Multiphase prinzipiell auch möglich, allerdings noch als sogenanntes Beta-Feature, was bedeutet, dass diese Kombination noch in der Testphase ist. Abb. 10.40 und Abb. 10.5 zeigen den Containmentdatensatz mit dem Sumpf im unteren Bereich.

**Tab. 10.1** Numerische Parameter für die Containment-Simulation

Experiment	Konvoi-Anwendung
Phänomene	Modellierung des Containment-Sumpfes
Elementzahlen	5.40 Millionen Elemente (Rechnung grobes Netz) 7.60 Millionen Elemente (Rechnung feines Netz) 8.36 Millionen Elemente (Rechnung ohne Sumpf) 8.30 Millionen Elemente (Rechnung mit Solid-Sumpf) 8.13 Millionen Elemente (Multiphase-Rechnung)
Einspeisung	Volumetrische Quelle im Sumpfbereich
Materialien	Air Ideal Gas, H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> Og (Dampf), Water
Diffusionskoeffizient	Korrelation nach Fuller
Turbulenzmodell	SST
Kondensationsmodell	Wandkondensation (Ansys-Modell), Volumenkondensation (modifiziertes IKE-Modell)
Strahlungsmodell	Discrete Transfer (64 Strahlen)
Sumpfmmodell	Solid Block, Multiphase
Konvergenz	RMS < 0.0001
CFX-Version	17.0

Der Sumpf ist hier als Solid Block modelliert und in Abb. 10.5 ist der Sumpf innerhalb des Containments dargestellt. In dem hier gezeigten Beispiel wurde eine kalte Wasservorlage mit einer Starttemperatur von 30 °C verwendet. Grund hierfür ist, dass an diesem exemplarischen Beispiel der Einfluss des Sumpfes auf den Störfall maximiert werden sollte, um den Effekt des Sumpfes auf den Störfall möglichst deutlich herauszuarbeiten. Der Einfluss der Sumpftemperatur auf den Störfallablauf wurde im Rahmen einer Sensitivitätsstudie mit COCOSYS untersucht und er wird weiter unten noch beschrieben. Das Gitter wurde im Bereich der Grenzschicht sowohl im Wasser als auch in der Luft verfeinert. Der Solid-Block erhielt hierbei die Eigenschaften (Dichte, Wärme-

kapazität) von Wasser. Die Wärmeleitfähigkeit des Solid-Blocks wurde jedoch gegenüber Wasser um den Faktor 10 erhöht, um das Fehlen der konvektiven Wärmeströme zu kompensieren.



**Abb. 10.5** Räumliche Darstellung des Sumpfes im Containment

**Tab. 10.2** Eigenschaften des Sumpfwassers (Solid-Block)

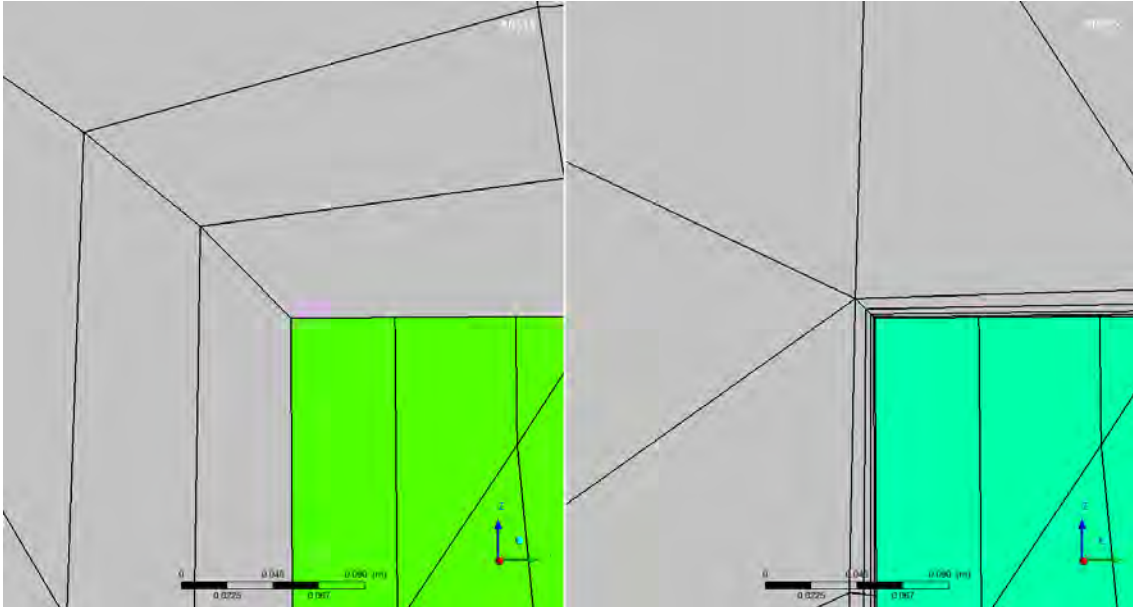
Dichte	997 kg/m <sup>3</sup>
Spezifische Wärmekapazität	4181.7 J/kgK
Spezifische Wärmeleitfähigkeit	6.1 W/mK

### 10.2.1 Durchführung einer Gitterstudie

Um den Einfluss der Netzfeinheit zu untersuchen, wurde zunächst eine Gitterstudie durchgeführt. Hierbei wurde das ursprünglich grobe Gitter im Beton nahe der Grenzschicht Beton/Gas deutlich verfeinert. Das feine Gitter hatte dann in der ersten Schicht eine Schichtdicke von 2 mm (siehe Abb. 10.6). Insgesamt erhöhte sich die Anzahl der Elemente damit von 5.4 Millionen auf 7.6 Millionen Elemente. Zu einem späteren Zeitpunkt wurde noch eine weitere Gitterverfeinerung durchgeführt, diesmal im Gas nahe der Grenzschicht Beton/Gas. Damit erhöhte sich die Elementzahl auf 8.3 Millionen Elemente. Da aber gleichzeitig weitere Veränderungen vorgenommen

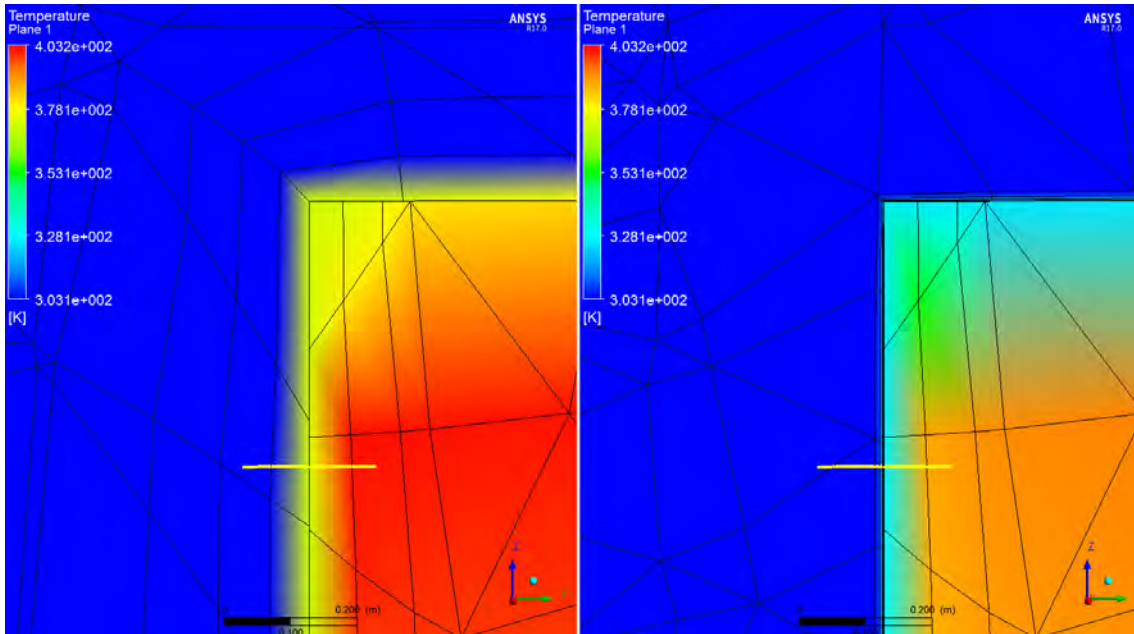


wurden (Sumpf, Strahlung, ...) ist ein direkter Vergleich der letzten Gitterverfeinerung mit den zwei anderen Rechnungen nicht möglich. Im Folgenden wird nur der Effekt der ersten Gitterverfeinerung (im Beton) dargestellt und diskutiert.

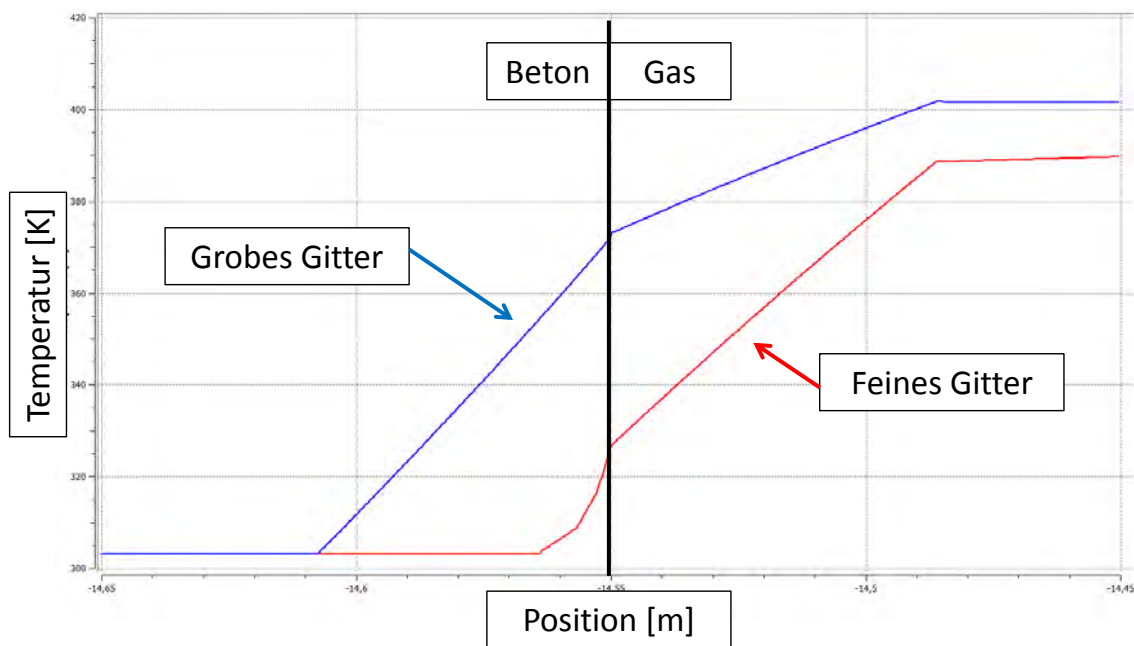


**Abb. 10.6** Gitterverfeinerung im Beton (links grobes Netz, rechts feines Netz mit 2 mm Dicke der ersten Schicht)

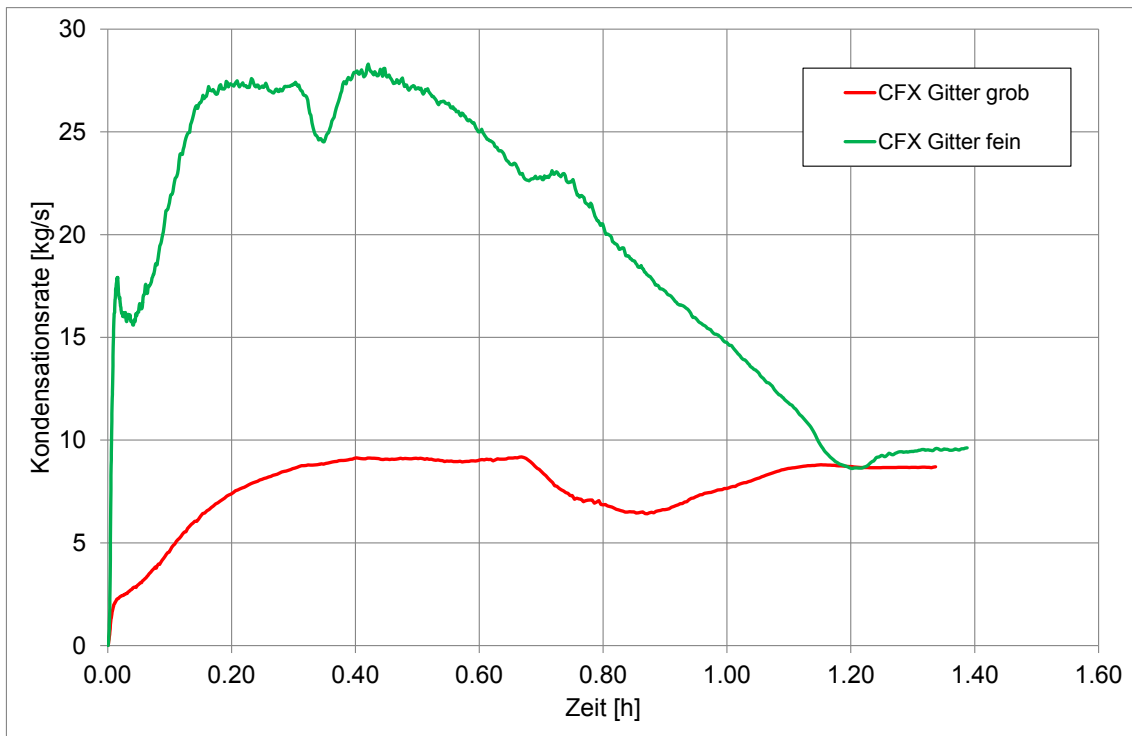
In Abb. 10.7 und Abb. 10.8 ist der Effekt der Gitterverfeinerung auf das Temperaturprofil an der Grenzfläche Beton/Gas dargestellt. Es zeigt sich, dass die Gitterverfeinerung zu einer niedrigeren Temperatur an der Beton/Gas-Grenzfläche und auch niedrigeren Temperaturen im Gas führt. Dieses führt zu einer höheren Kondensationsrate an der Wand. In Abb. 10.9 ist der Effekt der Gitterverfeinerung auf die integrale Kondensationsrate an den Betonwänden dargestellt. Dieser Effekt ist anders als der im Projekt RS1181 beobachtete Effekt einer Gitterverfeinerung im Containment. Allerdings wurde in dem älteren Projekt noch mit CFX-11 und dem GRS-Wandkondensationsmodell gerechnet, während im aktuellen Projekt mit CFX-17 und dem Ansys-Wandkondensationsmodell gerechnet wurde. Insgesamt führt ein feineres Gitter zu einer realistischeren Lösung. Bei einem gröberen Gitter kommt es zu mehr numerischen Ungenauigkeiten, die im aktuellen Fall eine zu hohe Wandtemperatur und damit zu niedrige Kondensationsraten bedeuten.



**Abb. 10.7** Temperaturen an der Beton/Gas-Grenzfläche

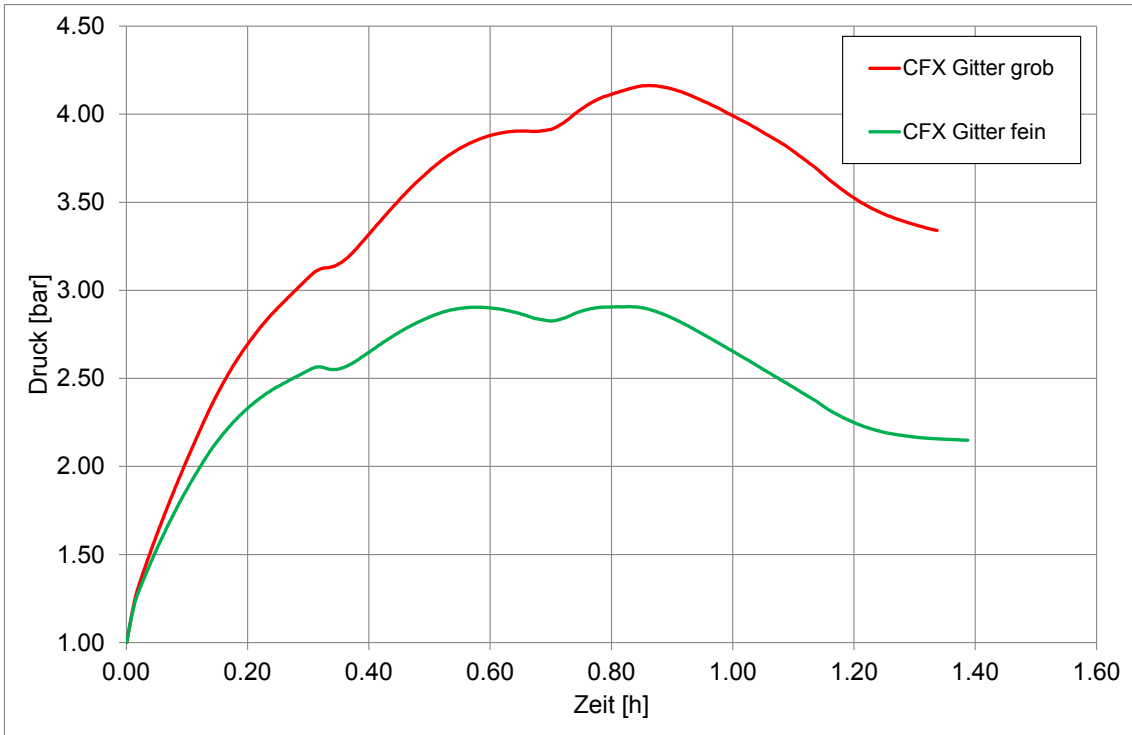


**Abb. 10.8** Temperaturprofil an der Grenzfläche Beton/Gas (entlang der gelben Linie in Abb. 10.7)

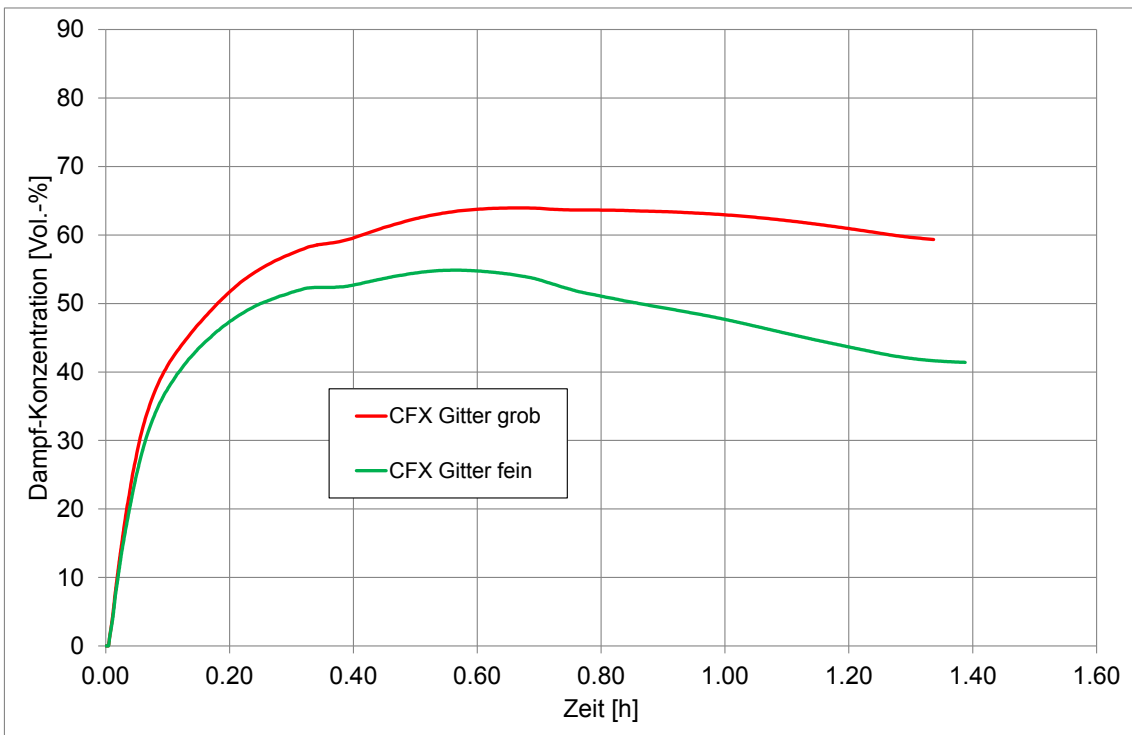


**Abb. 10.9** Einfluss der Gitterverfeinerung auf die integrale Wandkondensationsrate (am Beton)

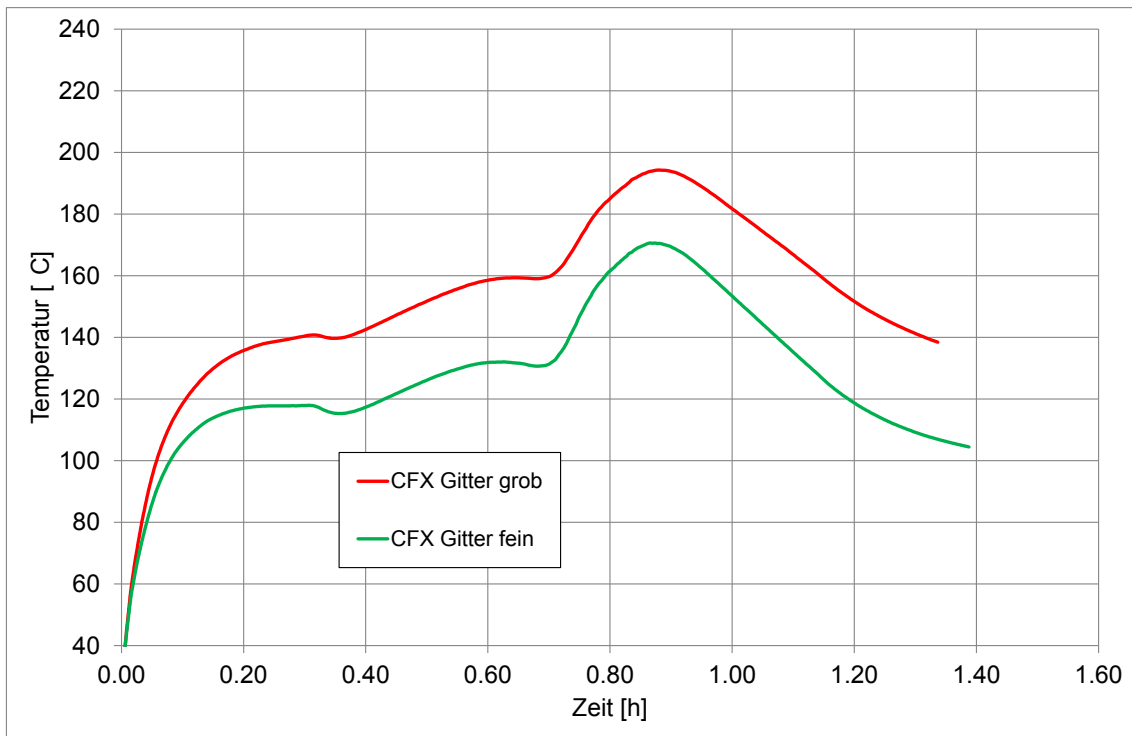
Zusammen mit den höheren Kondensationsraten sinkt auch der Druck im Containment bei Verwendung eines feineren Gitters ab. Dieses ist in Abb. 10.10 dargestellt. In Abb. 10.11 ist die Dampfkonzentration im Dom dargestellt. Auch hier zeigt sich ein deutlicher Einfluss der Gitterverfeinerung, die zu einem Absenken der Dampfkonzentrationen führt. Weiterhin führt die Gitterverfeinerung zu einer Absenkung der Temperaturen, wie in Abb. 10.12 anhand der Dom-Temperaturen dargestellt ist. Eine Gitterunabhängigkeit ist mit dieser Analyse allerdings noch nicht gezeigt worden. Dafür müssten noch weitere Berechnungen mit weiteren deutlichen Gitterverfeinerungen durchgeführt werden. Im Folgenden werden alle weitere Rechnungen mit dem feinen Gitter durchgeführt da dieses zu kleineren numerischen Fehlern führt.



**Abb. 10.10** Einfluss der Gitterverfeinerung auf den Druckverlauf



**Abb. 10.11** Einfluss der Gitterverfeinerung auf die Dampfkonzentration im Dom

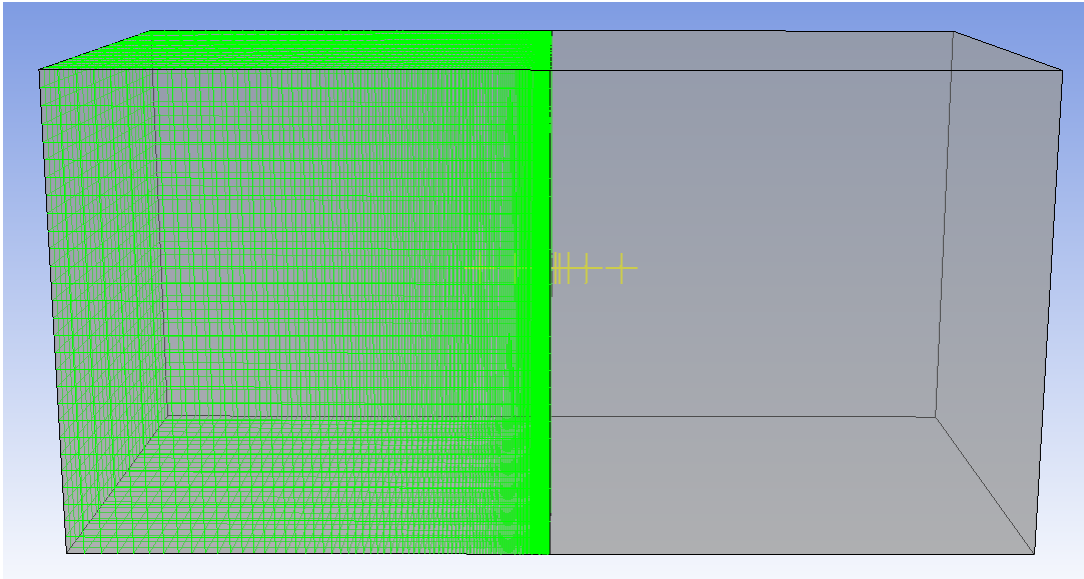


**Abb. 10.12** Einfluss der Gitterverfeinerung auf die Temperaturen im Dom

### 10.2.1.1 Detailstudie zur Gitterverfeinerung im Beton

Um den Einfluss der Gitterfeinheit im Beton genauer zu untersuchen wurde eine Parameterstudie mit einem vereinfachten Testbeispiel durchgeführt. In Abb. 10.13 ist die zugehörige Geometrie dargestellt. Es handelt sich um ein  $10 \text{ cm}^3$  großes Gasvolumen, das an eine  $10 \text{ cm}$  dicke Betonwand angrenzt. Das Gitter im Gas war bei allen Rechnungen grob (erste Schicht  $2 \text{ cm}$ ), während die Dicke der ersten Schicht im Beton variiert wurde (erste Schicht variiert zwischen  $0.1 \text{ mm}$  und  $20 \text{ mm}$ ). Die jeweiligen Parameter sind in Tab. 10.3 dargestellt. Als Startbedingungen wurden gewählt:  $T_{\text{Beton}} = 20 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $T_{\text{Gas}} = 90 \text{ }^\circ\text{C}$ , Dampf(massen)anteil im Gas  $70 \%$ . Es herrscht also ein starkes Ungleichgewicht, das zu einer starken Kondensation an der Wandfläche führen wird.

In Abb. 10.14 ist das Temperaturprofil nach  $2 \text{ s}$  dargestellt und für zwei ausgewählte Rechnungen ist das Temperaturprofil nach  $25 \text{ s}$  in Abb. 10.15 dargestellt. Es zeigt sich, dass ein feineres Gitter im Beton zu einer niedrigeren Temperatur im Gas führt. Dieser Unterschied verstärkt sich noch im Laufe der Zeit.



**Abb. 10.13** Testgeometrie für die Gitterstudie (links Beton, rechts Gas)

**Tab. 10.3** Parametervariationen für die Gitterstudie

Rechnungs-Nummer	Dicke der ersten Betonschicht	Dicke der ersten Gasschicht
Rechnung 1	20 mm	20 mm
Rechnung 2	10 mm	20 mm
Rechnung 3	5 mm	20 mm
Rechnung 4	1 mm	20 mm
Rechnung 5	0.1 mm	20 mm

Abb. 10.16 zeigt den Zeitverlauf der Wandkondensationsrate für die unterschiedlichen Gitterfeinheiten im Beton. Hier ist zu sehen, dass ein feineres Gitter zu einer höheren Wandkondensationsrate führt. Die Kurven für die beiden Gitter mit 0.1 mm und 1.0 mm liegen ziemlich dicht beieinander. Hier ist fast eine Gitterunabhängigkeit erreicht. Im zeitlichen Verlauf kommt es aber zu einer langsamen Annäherung der Kondensationsraten. Werden diese Kondensationsraten über die Zeit integriert, so erhält man nach die in Abb. 10.17 dargestellten Kondensatmassen. Auch hier zeigt sich die Abhängigkeit vom Gitter.

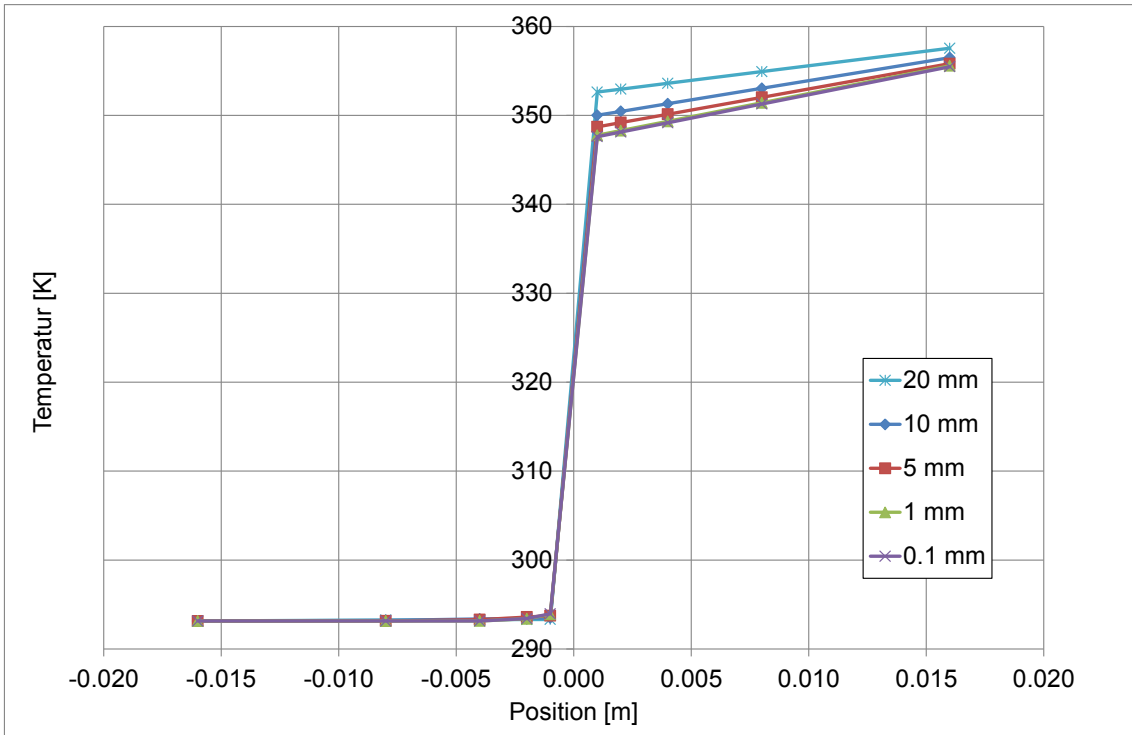


Abb. 10.14 Temperaturprofil nach 2 s

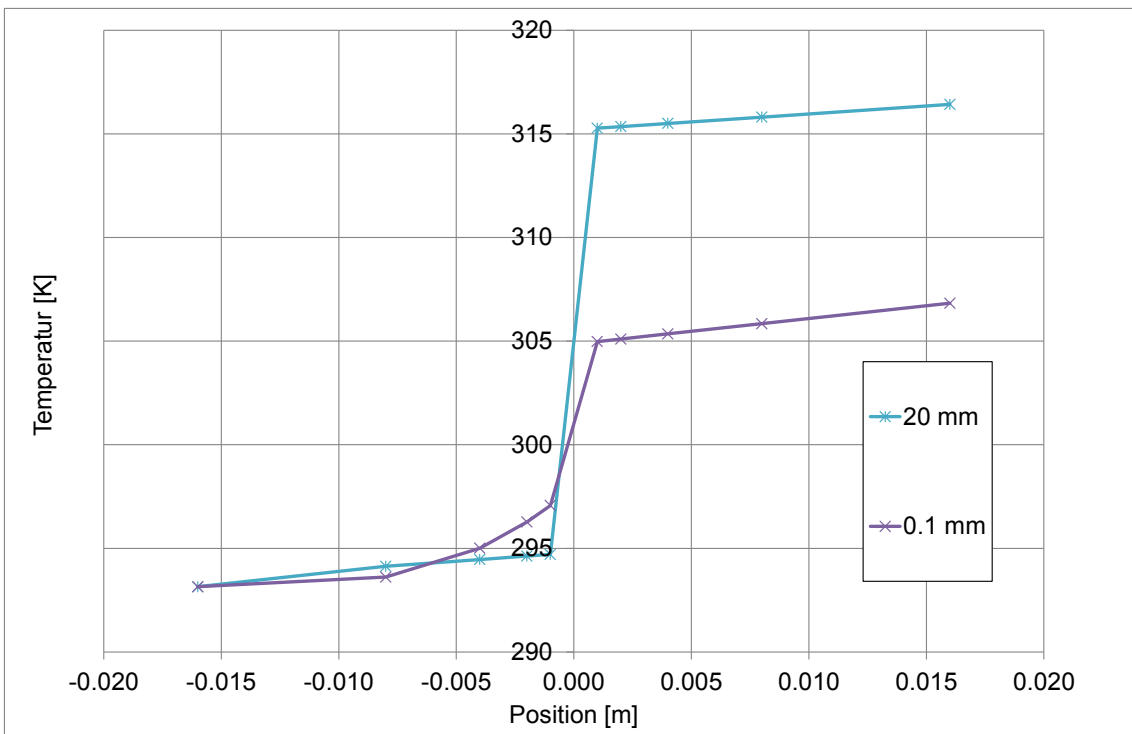
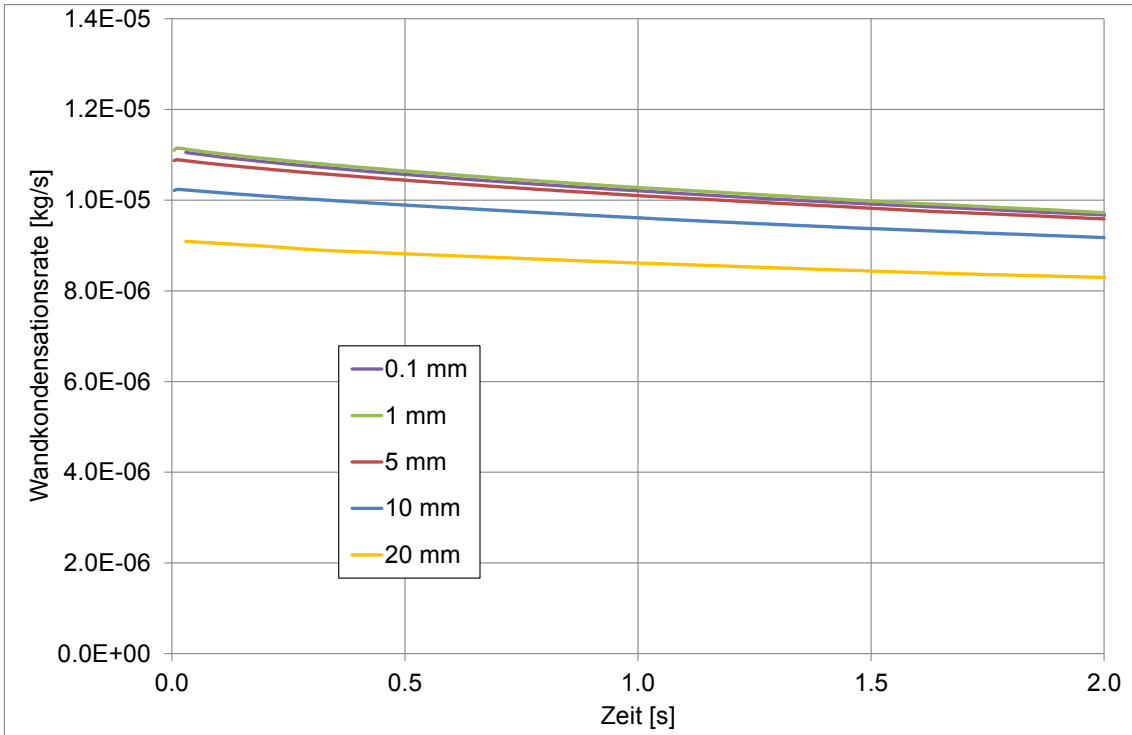
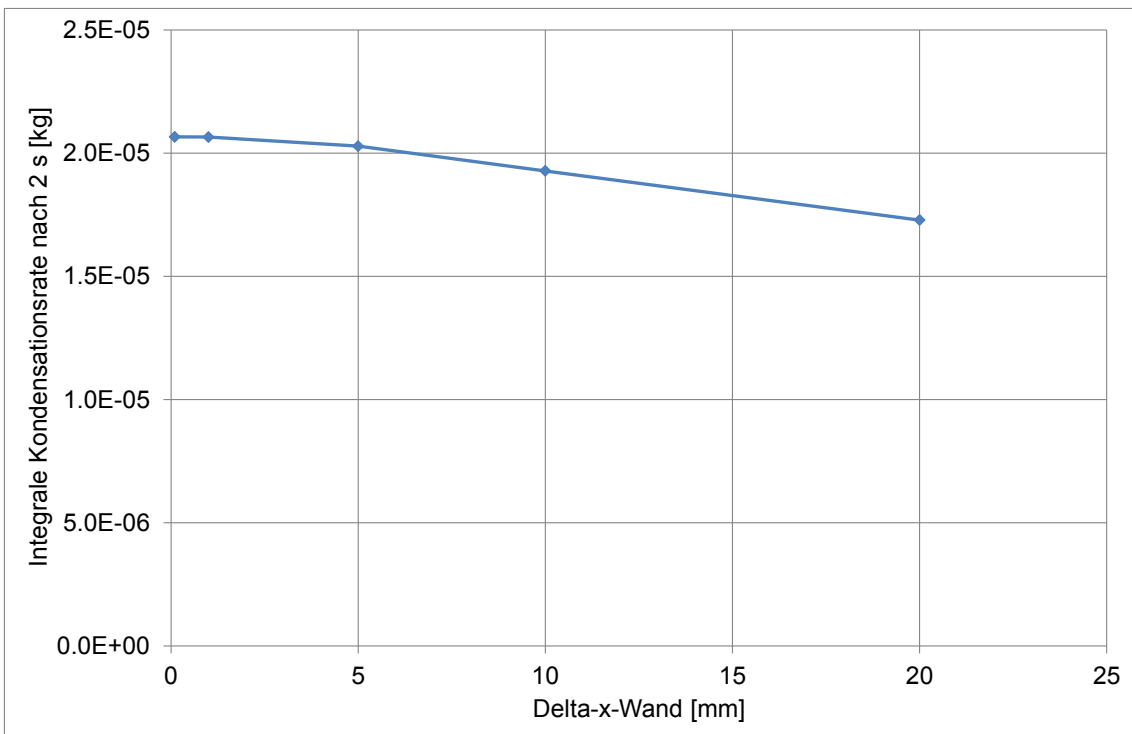


Abb. 10.15 Temperaturprofil nach 25 s



**Abb. 10.16** Verlauf der Wandkondensationsrate in Abhängigkeit vom Gitter im Beton



**Abb. 10.17** Integral der Kondensationsrate nach 2 s

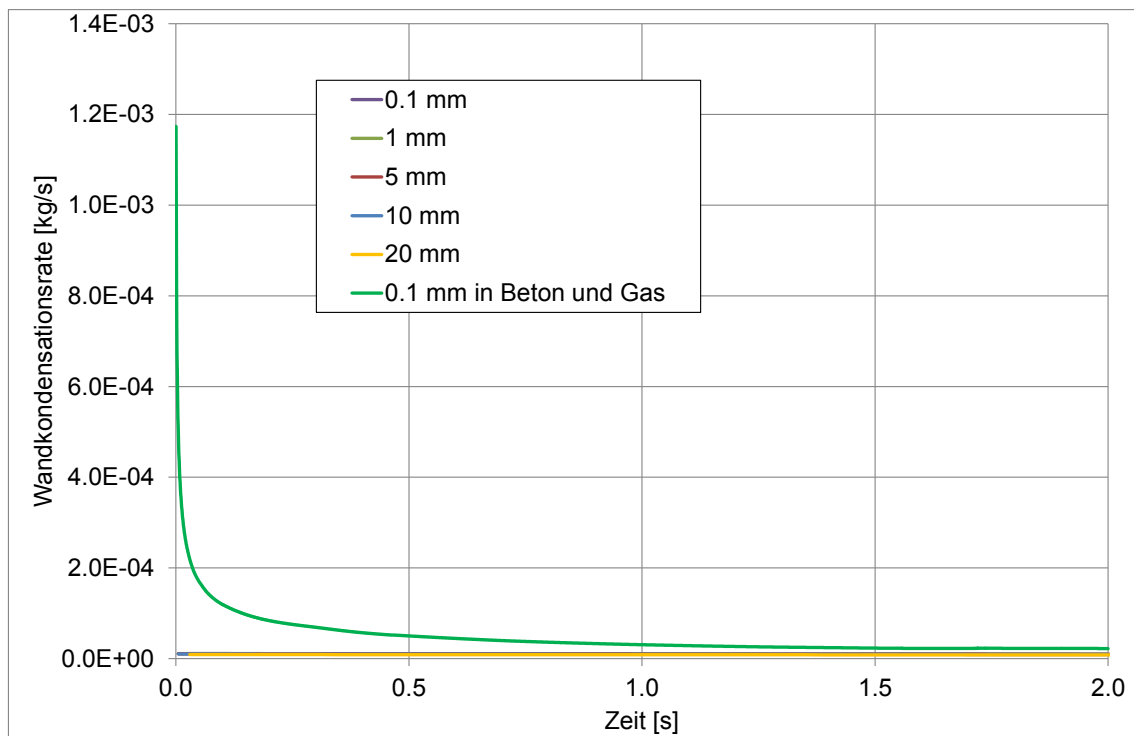
Bei einem feinen Netz ist die Kondensationsmenge größer. Diese Beobachtungen entsprechen auch den Beobachtungen, die an dem Containmentdatensatz gemacht wur-



den. Es gibt allerdings einige Unterschiede zum Containmentdatensatz, so dass nicht alles vergleichbar ist: Bei den Containmentrechnungen gibt es länger Zeiträume (diese führen zu einer Annäherung der integralen Kondensationsraten), weiterhin hat man im Containment eine bewegte Atmosphäre und es wird auch durch weitere Einspeisung und Konvektion Dampf zur Wand hin nachgeliefert. Hier ist nicht ganz klar, wie sich diese Unterschiede insgesamt auf die Kondensationsraten auswirken.

Wird das Gitter sowohl im Beton als auch im Gas auf 0.1 mm verfeinert, so steigt die Kondensationsrate noch einmal drastisch an. Dieses ist in Abb. 10.18 dargestellt. Insbesondere direkt nach Start der Berechnungen ist die Kondensationsrate bei einem feinen Gitter im Gas deutlich höher, sie sinkt dann aber im Zeitverlauf rasch ab. Hier stellt sich auch die Frage, wie repräsentativ das angenommene initiale Ungleichgewicht ist.

Auf Grund dieser bisherigen Gitterstudie kann als grobe Richtlinie gesagt werden, dass mindestens eine Gitterfeinheit von 1 mm im Beton und im Gas erreicht werden müsste, um numerische Fehler zu minimieren. Eine Gitterverfeinerung im Beton hat nicht so starke Auswirkungen auf die Rechenzeiten wie eine Gitterverfeinerung im Gas, da dort eine größere Anzahl an Differenzialgleichungen gelöst werden muss. Insofern ist fraglich, ob ein so feines Gitter im Gas noch mit vertretbaren Rechenzeiten erreichbar ist.

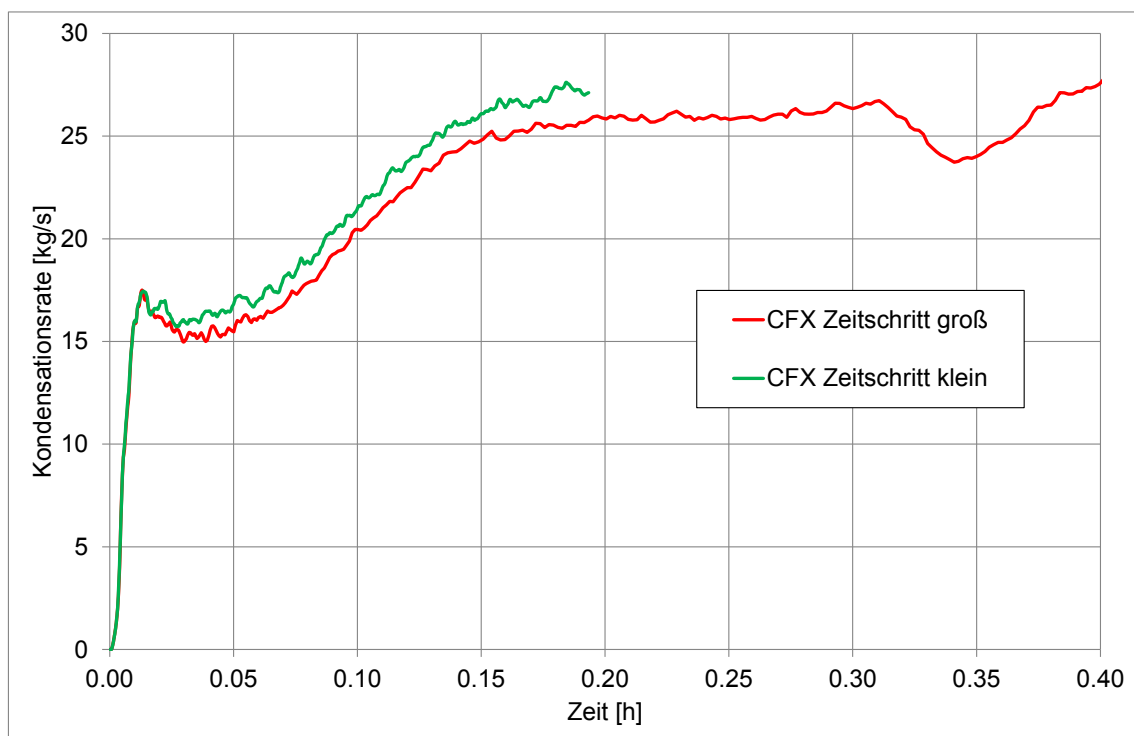


**Abb. 10.18** Wandkondensationsrate in Abhängigkeit von der Gitterfeinheit

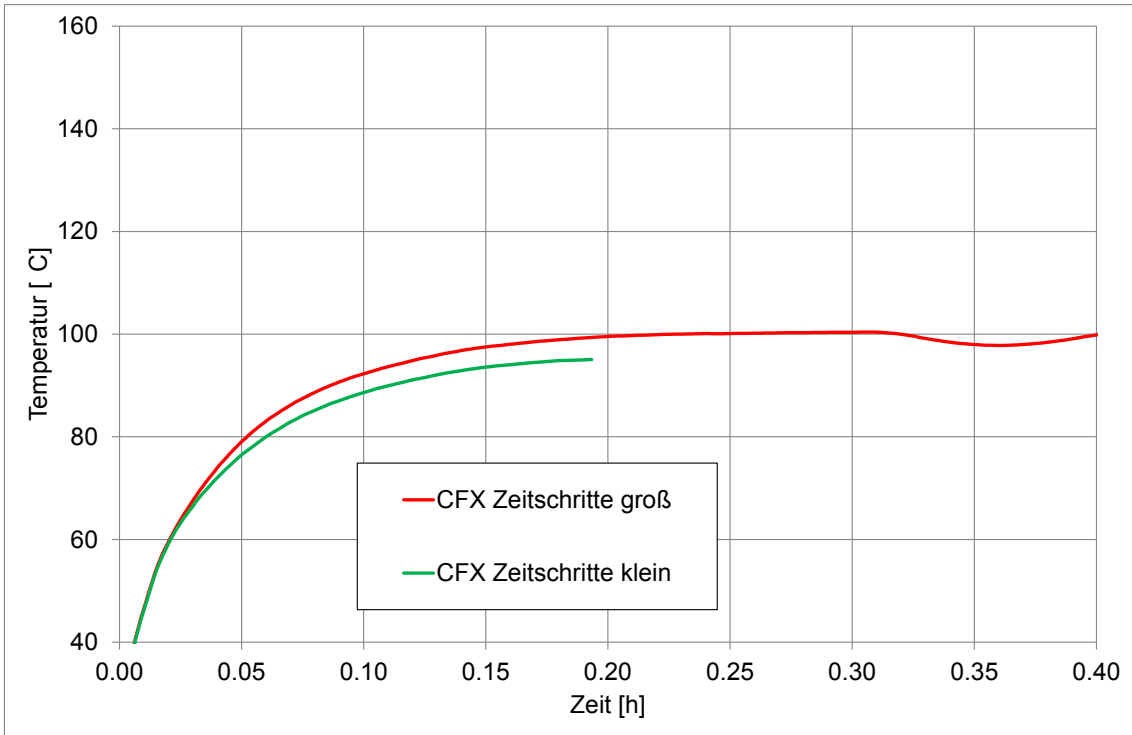
## 10.2.2 Durchführung einer Zeitschrittstudie

Um den Einfluss der Zeitschrittweite auf die Berechnungsergebnisse zu untersuchen, wurden zwei Berechnungen mit unterschiedlichen Zeitschritten durchgeführt. Die erste Berechnung hatte relativ grobe Zeitschritte (im Mittel 0.16 s, maximal 0.2 s). Die zweite Berechnung hatte deutlich feinere Zeitschritte (fester Wert von 0.01 s). Da die Rechnung mit den kleinen Zeitschritten sehr langsam läuft, wird hier nur ein Zeitraum von 700 s berechnet und im Folgenden diskutiert.

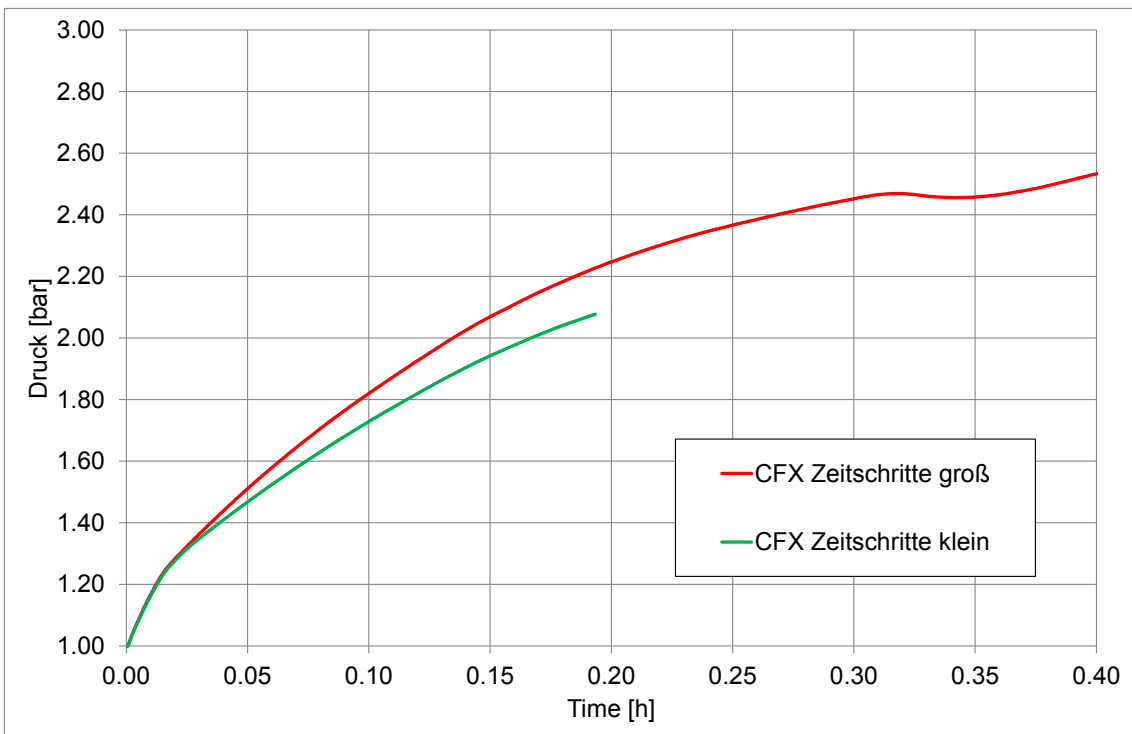
In Abb. 10.19 bis Abb. 10.21 ist der Einfluss der Zeitschrittweite auf die Wandkondensationsrate, die Temperaturen (im Dom) und auf den Druckverlauf dargestellt. Die deutlich kleineren Zeitschritte in der zweiten Rechnung führen zu einer etwas erhöhten Wandkondensationsrate, etwas niedrigeren Temperaturen und etwas niedrigerem Druck. Die Unterschiede sind sichtbar, aber moderat.



**Abb. 10.19** Einfluss der Zeitschrittweite auf die integrale Wandkondensationsrate



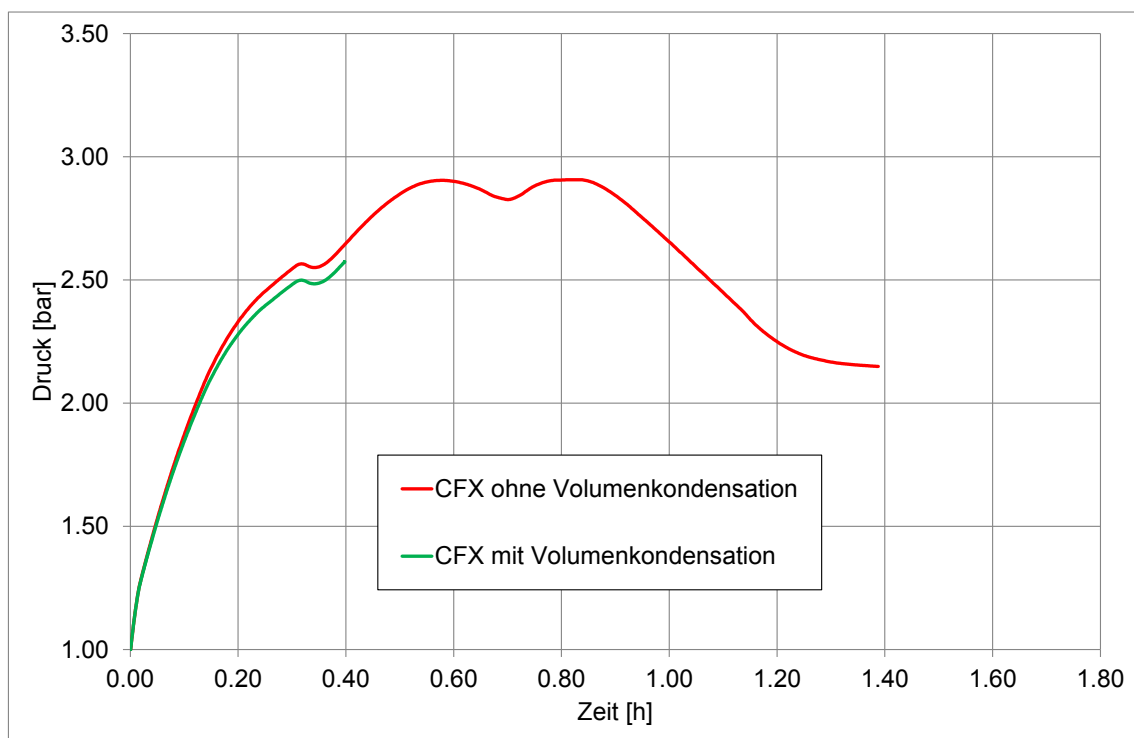
**Abb. 10.20** Einfluss der Zeitschrittweite auf die Temperaturen im Dom



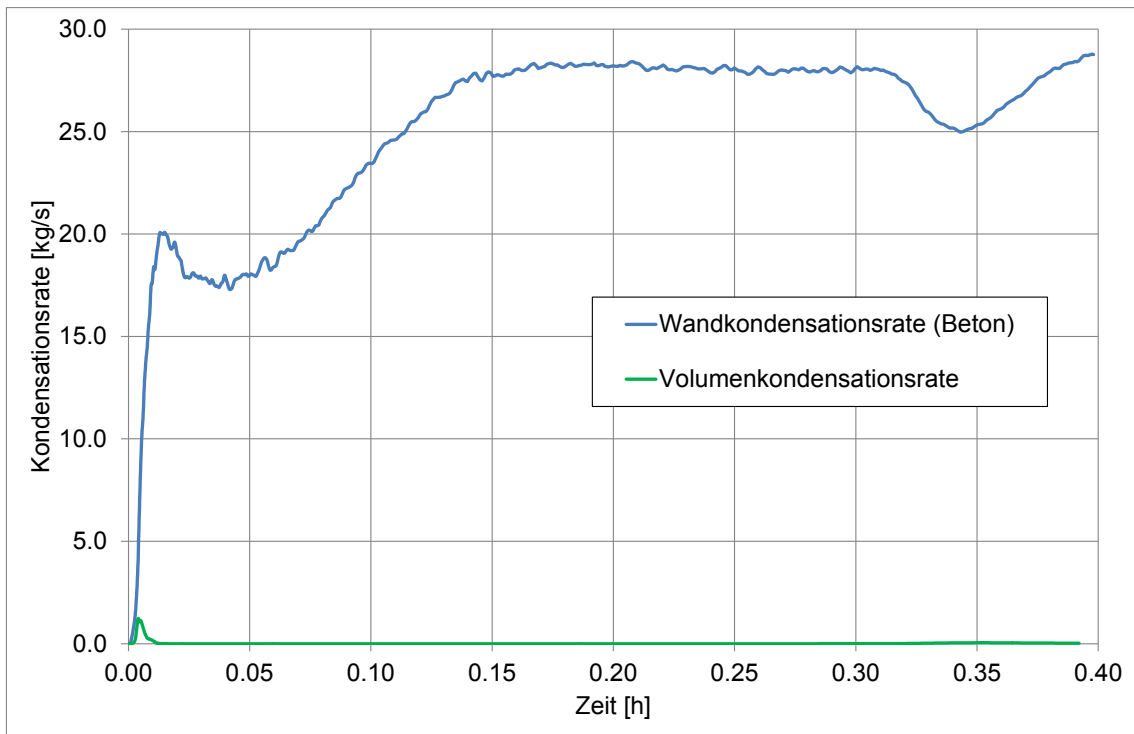
**Abb. 10.21** Einfluss der Zeitschrittweite auf den Druckverlauf

### 10.2.3 Einfluss des (IKE-)Volumenkondensationsmodells

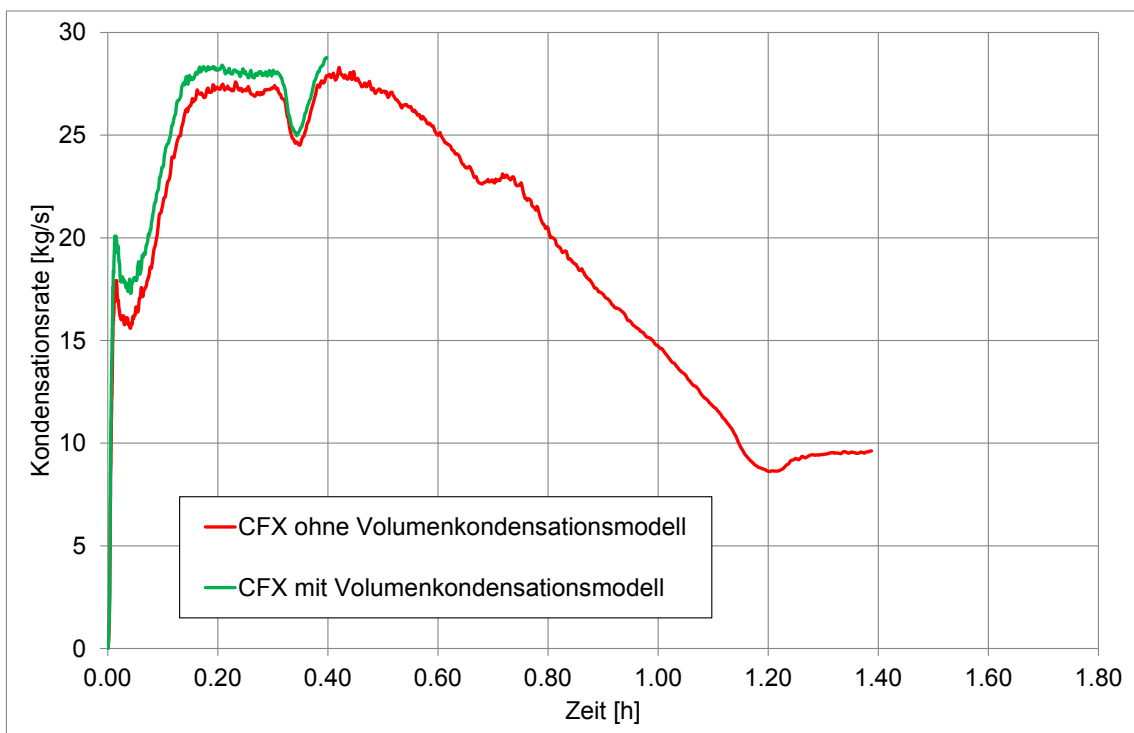
Um den Einfluss des (IKE-)Volumenkondensationsmodells zu analysieren, wurde eine Rechnung mit und eine Rechnung ohne das Modell durchgeführt. Beim Druckverlauf in Abb. 10.22 scheint das Volumenkondensationsmodell tatsächlich einen kleinen, aber merkbaren Unterschied zu bewirken. Die Berechnung mit Volumenkondensationsmodell ist ca. bei  $t = 0.4$  h abgestürzt. Hier gab es numerische Schwierigkeiten. Im direkten Vergleich zwischen der Volumen- und der Wandkondensationsrate (beides bei der Rechnung mit Volumenkondensationsmodell) in Abb. 10.23 zeigt sich jedoch, dass die Volumenkondensationsrate um einige Größenordnungen kleiner als die Wandkondensationsrate ist. Vermutlich bewirkt das Volumenkondensationsmodell in diesem Fall nur eine Verringerung der Zeitschritte, was dann wieder einen Einfluss auf andere Prozesse wie z. B. die Wandkondensation hat (die Raten hierfür sind in Abb. 10.24 dargestellt). Der Effekt ist auch von einer ähnlichen Größenordnung wie bei der reinen Zeitschrittstudie im vorangehenden Abschnitt. Insofern ist der Effekt der Volumenkondensation auf den Gesamtprozess (sowie auf Druck, Dampfkonzentrationen, Temperaturen, ...) vergleichsweise gering.



**Abb. 10.22** Druckverlauf mit und ohne Volumenkondensationsmodell



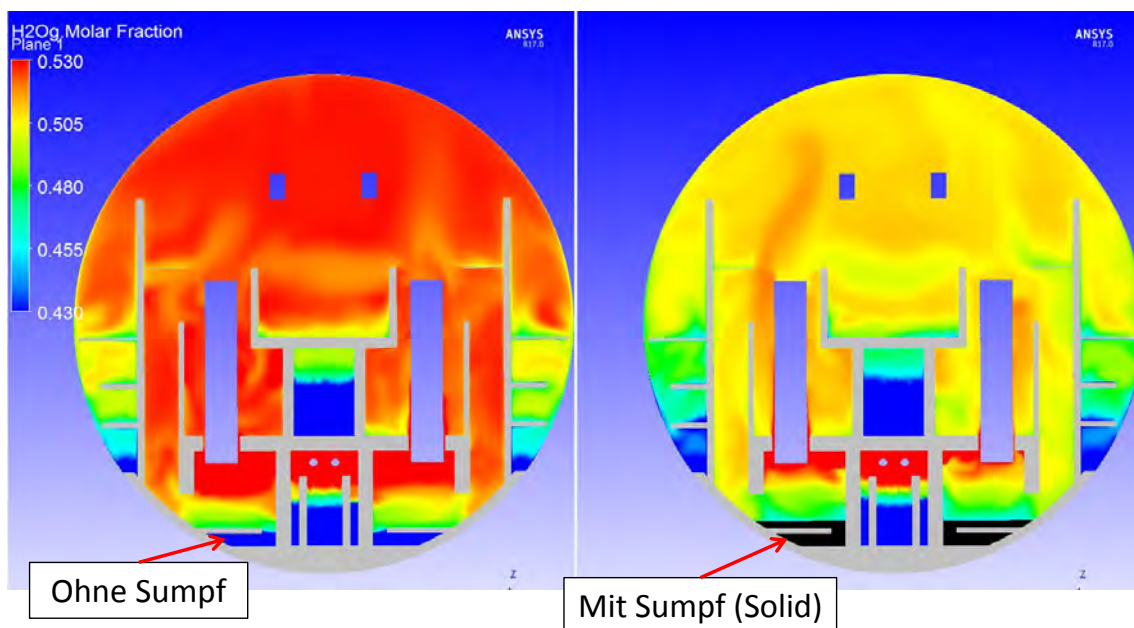
**Abb. 10.23** Vergleich von Wand- und Volumenkondensationsrate



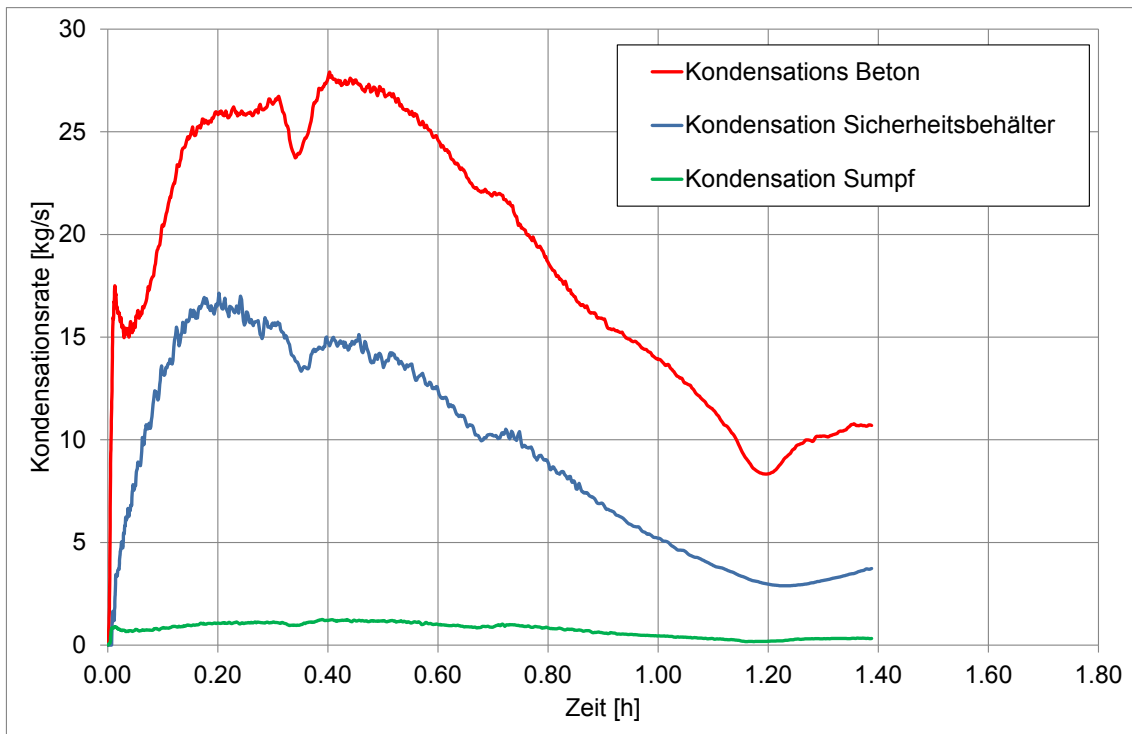
**Abb. 10.24** Wandkondensationsrate (am Beton) für die Rechnungen mit und ohne Volumenkondensationsmodell

#### 10.2.4 Einfluss des Sumpfes in CFX (Solid-Block)

In Abb. 10.25 werden zwei CFX-Rechnungen miteinander verglichen. Links ist das Ergebnis der Rechnung ohne Sumpf zu sehen, rechts das der Rechnung mit Sumpf. Der Sumpf ist bei dieser Rechnung als Solid-Block modelliert, er wurde hier schwarz dargestellt (um ihn hier besser sichtbar zu machen). Es zeigt sich in der Rechnung mit Sumpf eine etwas geringere Dampfkonzentration im gesamten Containment. Ursache hierfür ist, dass der Sumpf als zusätzliche Wärmesenke dient und dass an der Sumpfoberfläche auch ein Teil des Dampfes kondensieren kann. In Abb. 10.26 werden die unterschiedlichen Raten für die Kondensation am Beton, am Sicherheitsbehälter und an der Sumpfoberfläche miteinander verglichen. Hier zeigt sich der zusätzliche Beitrag der Dampfkondensation an der Sumpfoberfläche. Dieser ist zwar kleiner als die Kondensationsraten am Beton und am Sicherheitsbehälter, trotzdem aber größer als z. B. die Volumenkondensationsrate (siehe Abb. 10.23).

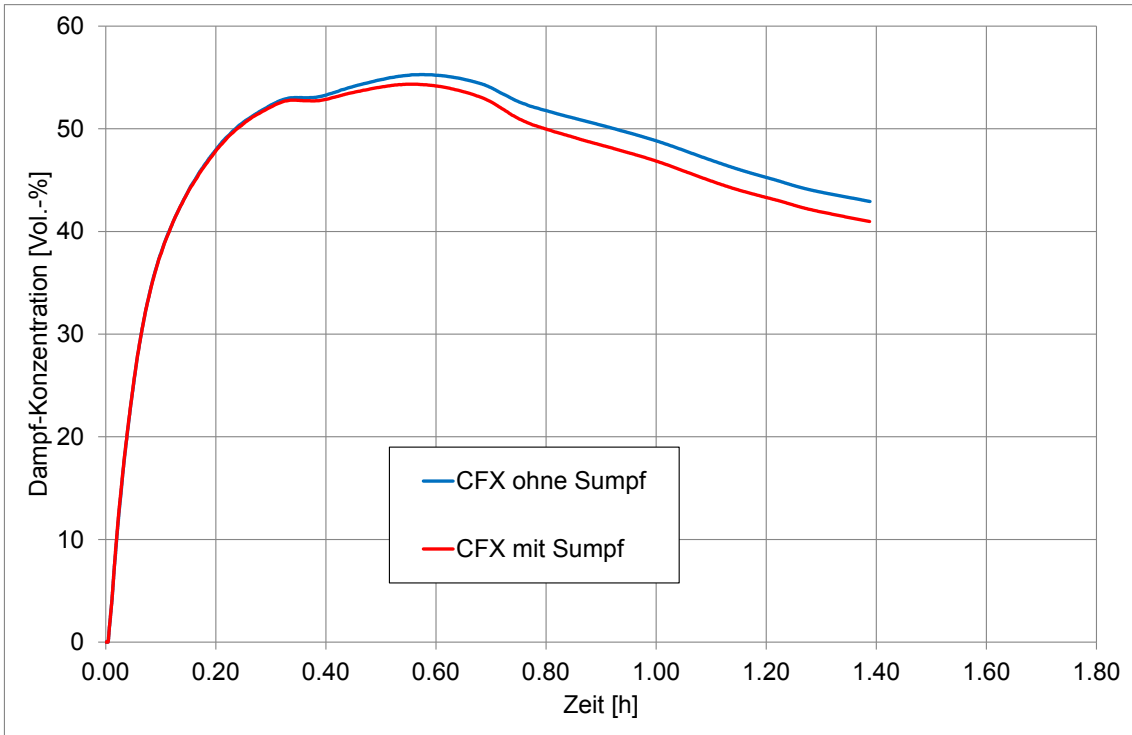


**Abb. 10.25** Vergleich der Rechnungen ohne und mit Sumpf (Solid-Block, hier schwarz dargestellt) im Containment zum Zeitpunkt  $t = 0.79$  h

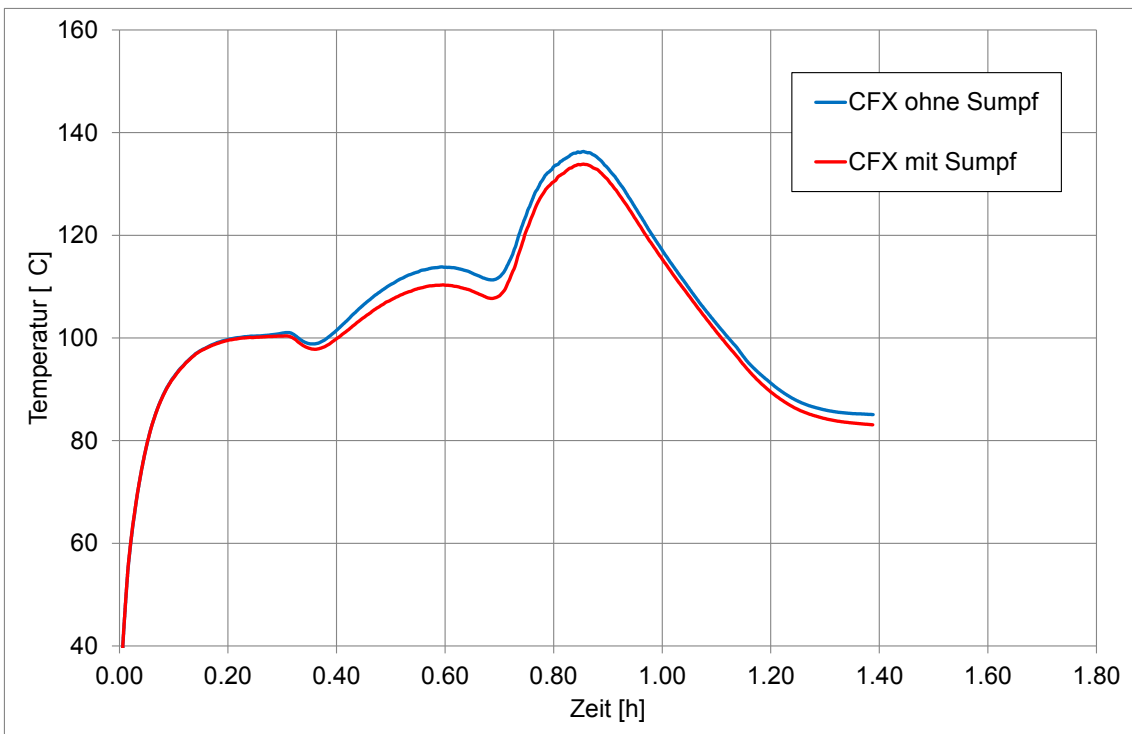


**Abb. 10.26** Vergleich der unterschiedlichen Kondensationsraten

Durch die erhöhte Kondensation bei einer Berücksichtigung des Sumpfes kommt es auch zu einem etwas niedrigeren Dampfgehalt (siehe Abb. 10.27), zu niedrigeren Temperaturen und zu einem niedrigeren Druck im Containment (siehe Abb. 10.29). Durch die Verringerung des Dampfgehaltes steigt aber die  $H_2$ -Konzentration an (siehe Abb. 10.30). Dieses hat auch eine sicherheitstechnische Relevanz, insofern ist eine Berücksichtigung des Sumpfes in der Containmentsimulation prinzipiell sinnvoll. Alle diese Effekte des Sumpfes zeigen sich aber erst nach einer gewissen Zeit (hier ca. ab 0.4 h) und werden dann im weiteren Zeitverlauf stärker. Insgesamt ist ein Einfluss des Sumpfes bemerkbar, er ist allerdings nicht allzu stark. In dem hier dargestellten Beispiel wurde zudem von einer kalten Wasservorlage im Sumpf ausgegangen. Dieses war gut, um den Einzeleffekt herauszuarbeiten. In einem realen Störfall wird jedoch heißes Wasser im Sumpf vorhanden sein und die hier genannten Effekte (Wärmesenke, Kondensation an der Sumpfoberfläche usw.) werden schwächer ausfallen.

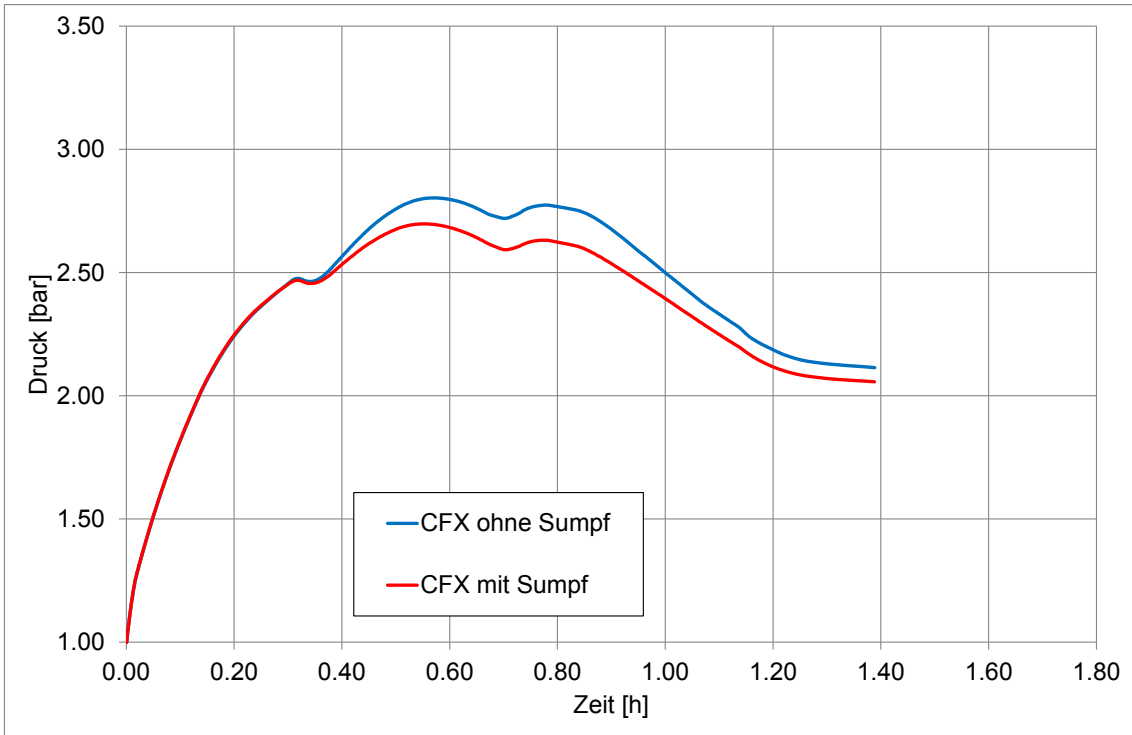


**Abb. 10.27** Dampfkonzentration im Dom mit und ohne Sumpf

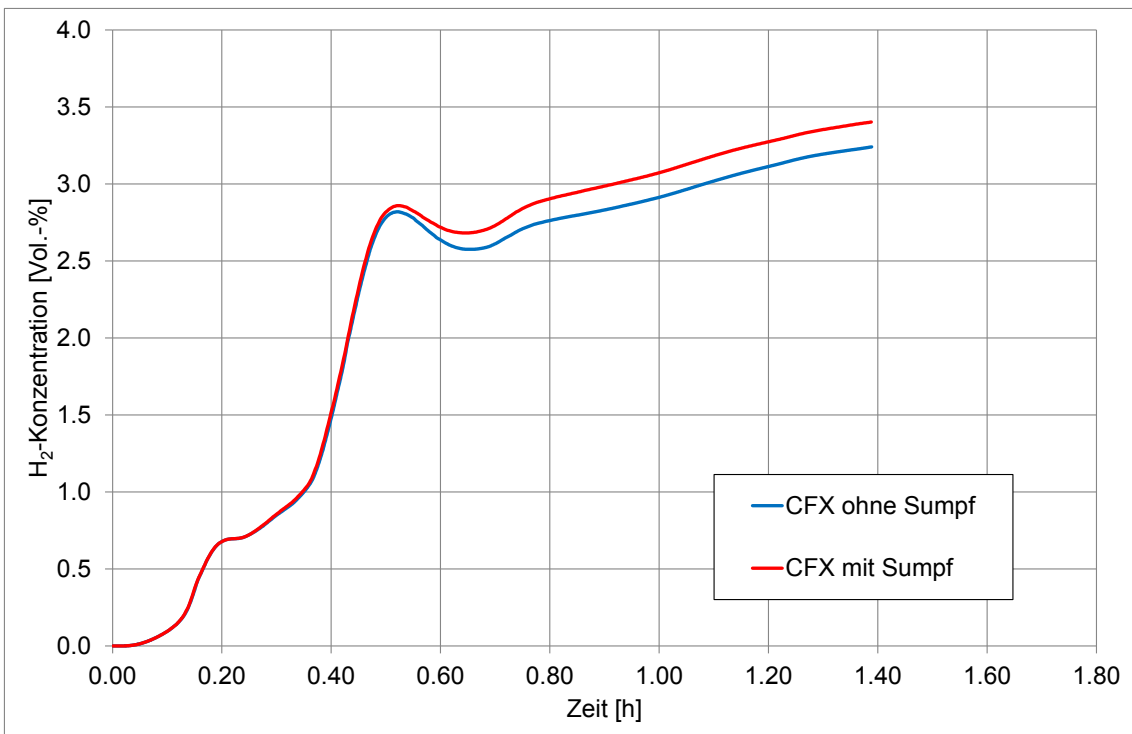


**Abb. 10.28** Temperaturverlauf im Dom mit und ohne Sumpf





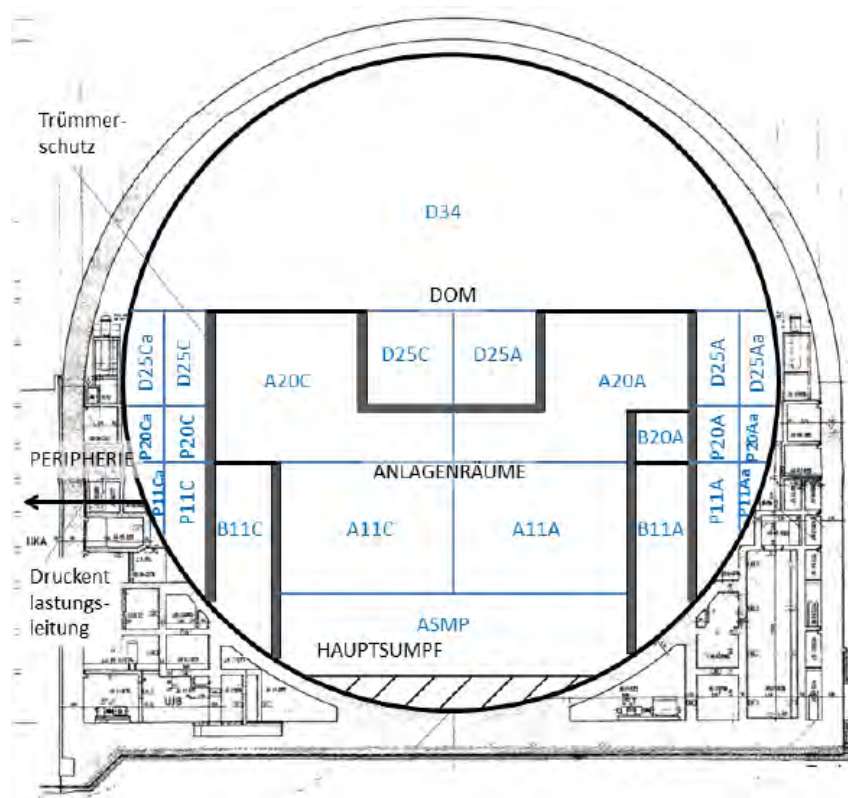
**Abb. 10.29** Druckverlauf mit und ohne Sumpf



**Abb. 10.30** H<sub>2</sub>-Konzentration im Dom mit und ohne Sumpf

### 10.3 COCOSYS-Datensatz

Im Rahmen einer solchen Containment-Rechnung liegen üblicherweise keine „experimentellen“ Ergebnisse vor. Aus diesem Grund werden die CFX-Rechnungen im Folgenden noch mit Ergebnissen von COCOSYS-Rechnungen verglichen. Dadurch können die Rechenergebnisse *beider* Programme abgesichert werden. In Abb. 10.31 ist die hierfür verwendete COCOSYS-Nodalisation dargestellt. Hierbei wurde nicht (wie im letzten Projekt) auf den Generic-Containment-Datensatz mit 16 Zonen zurückgegriffen, sondern ein etwas detaillierterer Datensatz mit 34 Zonen verwendet, um die Vergleichbarkeit mit CFX zu erhöhen. Dieser Datensatz orientiert sich an Arbeiten von Schwarz /SCH 15/. Als Einspeiseraten wurden diejenigen des in Kapitel 10.1 vorgestellten Störfallszenarios verwendet.



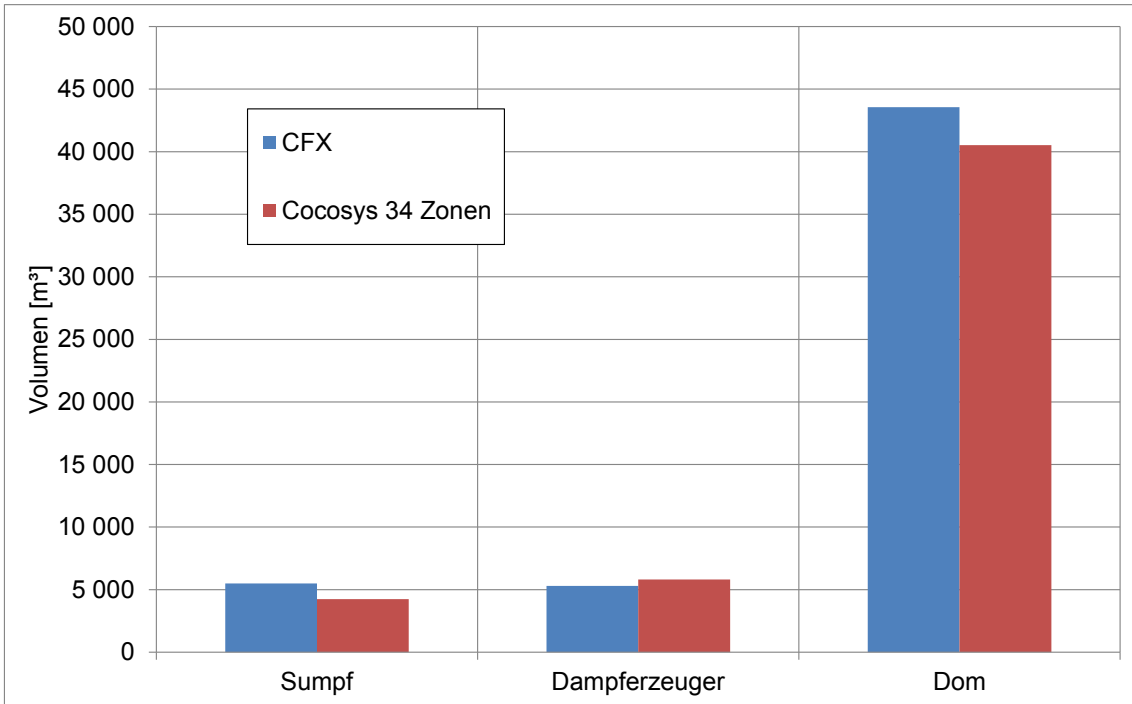
**Abb. 10.31** COCOSYS-Nodalisation für den Sicherheitsbehälter (Bild aus GRS-A-3791)

In Abb. 10.32 werden die freien Volumina des COCOSYS- und des CFX-Datensatzes miteinander verglichen. Diese stimmen gut überein, es gibt nur kleinere Abweichungen. Abb. 10.33 zeigt die Strukturoberflächen. Hier ist zu sehen, dass zwar die Oberflächen des Sicherheitsbehälters in COCOSYS und CFX gleich sind, es jedoch bei den Betonstrukturen Unterschiede gibt. Diese sind in CFX ca. 25 % kleiner als in dem

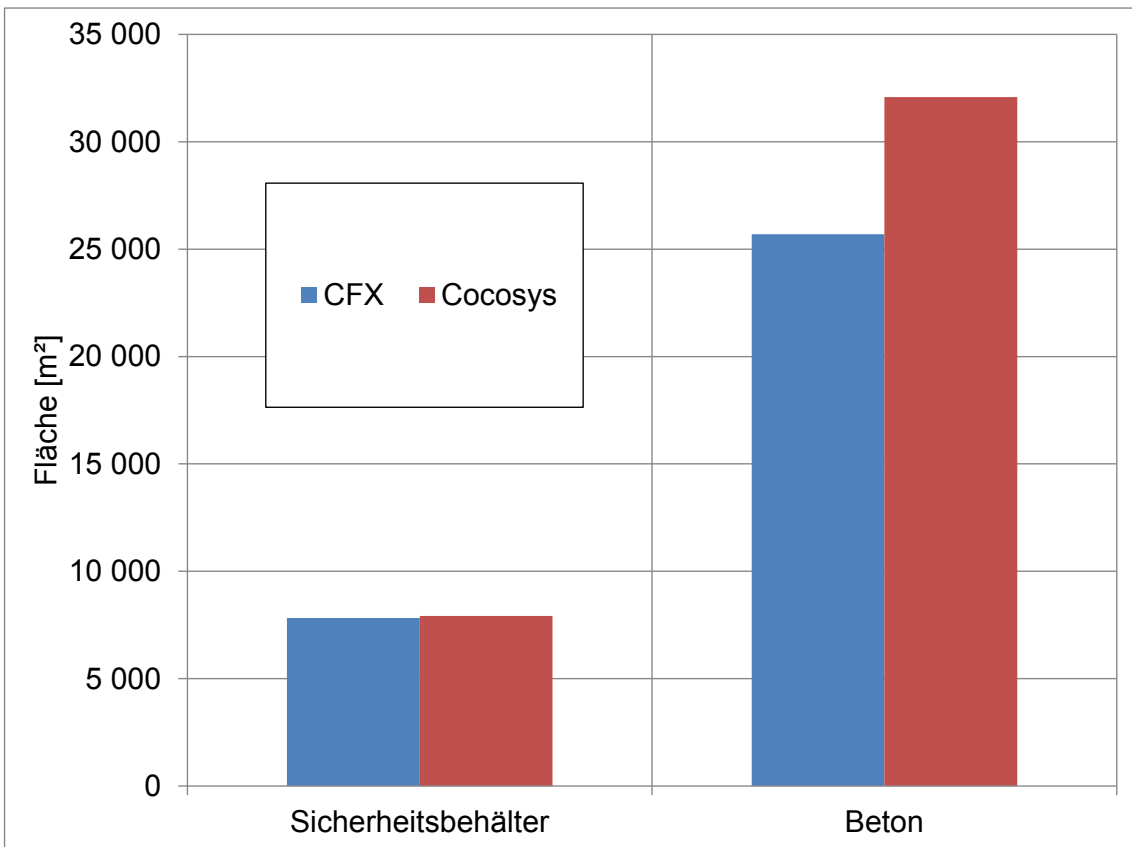
COCOSYS-Datensatz. Daneben sind noch weitere Unterschiede zwischen COCOSYS und CFX vorhanden:

- Die Dicke der ersten Schicht in der Beton-Wand ist unterschiedlich (COCOSYS: 0.4 mm / CFX: 2 mm). Diese Dicke in COCOSYS bzw. im CFX-Gitter hat einen Einfluss auf den Wärmetransport in die Wand und die Kondensation an der Wandoberfläche. Für CFX wurde hier schon eine Gitterstudie durchgeführt (siehe Abschnitt 10.2.1). Die Berechnung des Wärmeübergangs unterscheidet sich allerdings bei den beiden Programmen grundsätzlich. In CFX wird der Wärmeübergang durch Konvektion, Strahlung usw. explizit berechnet, während er in COCOSYS mit Hilfe unterschiedlicher Annahmen modelliert wird.
- Teilweise gibt es unterschiedliche Materialparameter, wie z. B. die Wärmeleitfähigkeit des Betons (COCOSYS: 2.1 W/mK / CFX: 1.4 W/mK). Auch dieses hat einen Einfluss auf den Wärmetransport aus der Gasphase in den Betonstrukturen.
- Es gibt unterschiedliche Überstömflächen zwischen den Räumen. Zum Beispiel hat die Verbindung zwischen dem Sumpf und den zwei Dampferzeugertürmen in CFX insgesamt eine Querschnittsfläche von 162 m<sup>2</sup>. Im COCOSYS-Datensatz wird für diese Verbindung (hier zwischen den Zonen ASMP und A11A/A11C, siehe Abb. 10.31) eine Gesamtfläche von 530 m<sup>2</sup> angegeben.
- In CFX gibt es in einzelnen Räumen häufig Schichtungen (z. B. von Dampf oder H<sub>2</sub>), während in COCOSYS eine Zone immer eine homogene Gasverteilung aufweist.
- Der Zusammenhang zwischen Sumpffüllstand und Sumpfvolumen (die Füllstandskurve) ist in der CFX-Geometrie und im COCOSYS-Datensatz unterschiedlich. Auch dieses beruht auf unterschiedlichen Geometrieannahmen, ähnlich wie bei den Überstromflächen.

Einige dieser Unterschiede könnten angeglichen werden (z. B. die Materialparameter), andere sind eher prinzipieller Natur (z. B. das Schichtungsverhalten). Zunächst wurde der COCOSYS-Datensatz aber in seiner jetzt vorliegenden Form für die Berechnungen verwendet.



**Abb. 10.32** Vergleich der freien Volumina



**Abb. 10.33** Vergleich der Strukturoberflächen

### 10.3.1 Einfluss des Sumpfes in COCOSYS

Um den Einfluss des Sumpfes in COCOSYS zu analysieren, wurde eine Parameterstudie durchgeführt. Die Details zu den einzelnen Rechnungen finden sich in Tab. 10.4. Die Berechnungen mit (heißer bzw. kalter) Wasservorlage wurden durchgeführt, um die Vergleichbarkeit mit der CFX-Rechnung (mit dem Solid-Block-Sumpf) herzustellen.

**Tab. 10.4** Sumpf-Sensitivitätsstudie mit COCOSYS

Ohne Sumpf	Alles anfallende Kondensat- und Sumpfwasser wurde sofort aus dem Containment entfernt. Diese Rechnung ist damit vergleichbar mit der CFX-Rechnung ohne Sumpf.
Mit Sumpf (heiß)	Es gab eine Wasservorlage (900 m <sup>3</sup> ) mit heißem Wasser (80 °C) im Sumpfbereich.
Mit Sumpf (heiß2)	Das (heiße) Wasser wurde entsprechend der Einspeiseraten (siehe Kapitel 1) in das Containment eingespeist.
Mit Sumpf (kalt)	Es gab eine Wasservorlage (900 m <sup>3</sup> ) mit kaltem Wasser (30 °C) im Sumpfbereich. Dieses entspricht der CFX-Rechnung mit dem (kalten) Solid-Block.

Zunächst einmal zeigt sich, dass das Einfügen eines Sumpfes einen ähnlichen Effekt wie bei den CFX-Rechnungen erzielt. Durch einen Sumpf (egal ob heiß oder kalt) kommt es zu einer Kondensation an der Sumpfoberfläche und dadurch sinkt die Dampfkonzentration im Containment (siehe Abb. 10.34). Gleichzeitig senkt dieses auch den Druck im Containment (siehe Abb. 10.35), während die H<sub>2</sub>-Konzentration z. B. im Dom ansteigt (siehe Abb. 10.36). Diese Effekte sind umso stärker, je kälter das Sumpfwasser ist.

Es wurden zwei Berechnungen mit heißem Sumpfwasser durchgeführt. Einmal wurde das Wasser aus dem Leck kommend in den Sumpf eingespeist, der sich dann langsam auffüllte (Rechnung „heiß“). Bei der zweiten Berechnung wurde angenommen, dass das vollständige Wasser sich bereits von Beginn an in Form einer Wasservorlage im Sumpf befand (Rechnung „heiß2“). Durch den Vergleich dieser zwei COCOSYS-Rechnungen wird gezeigt, dass sich die detaillierte Einspeisung auch durch eine leicht modifizierte Wasservorlage modellieren lässt. Das Ergebnis ist dann das gleiche (siehe z. B. den Druck in Abb. 10.35), was zeigt, dass der eigentliche Einspeisevorgang und die damit verbundene Volumenverdrängung kaum eine Rolle spielen und vernachlässigt werden können. Dieses ist wiederum ein Argument dafür, dass das Solid-Block-

Modell in CFX verwendet werden kann, ohne dass hierdurch zu starke Fehler gemacht werden.

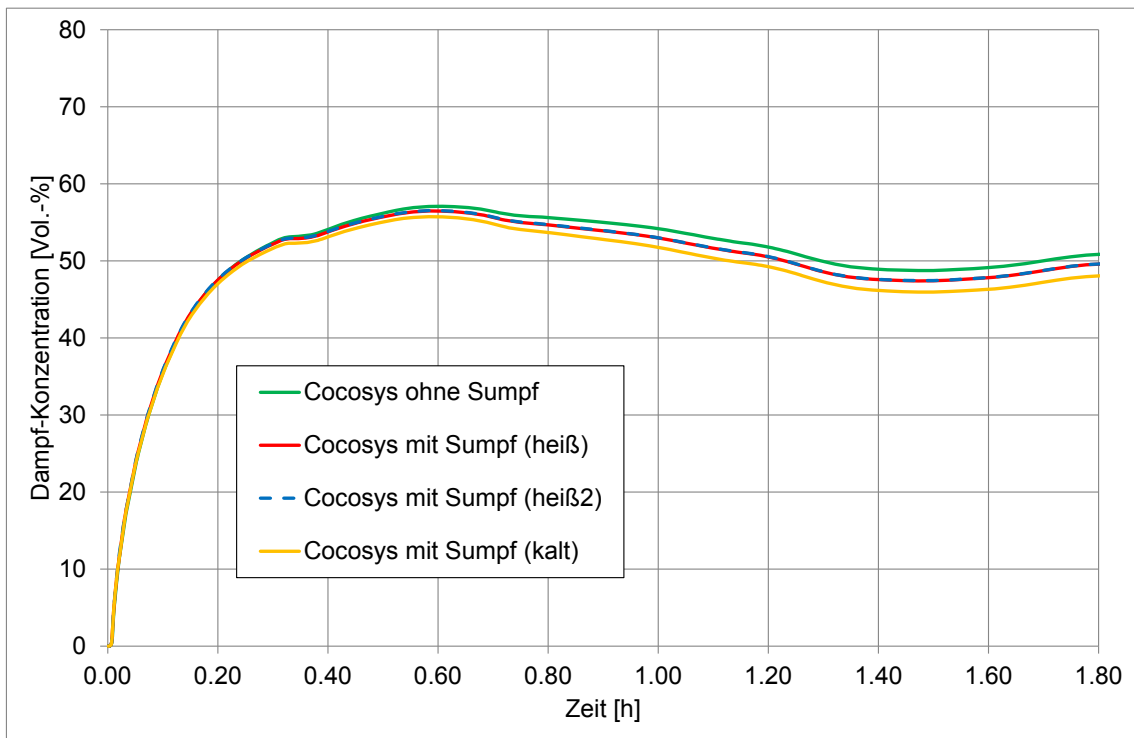


Abb. 10.34 Dampfkonzentration im Dom

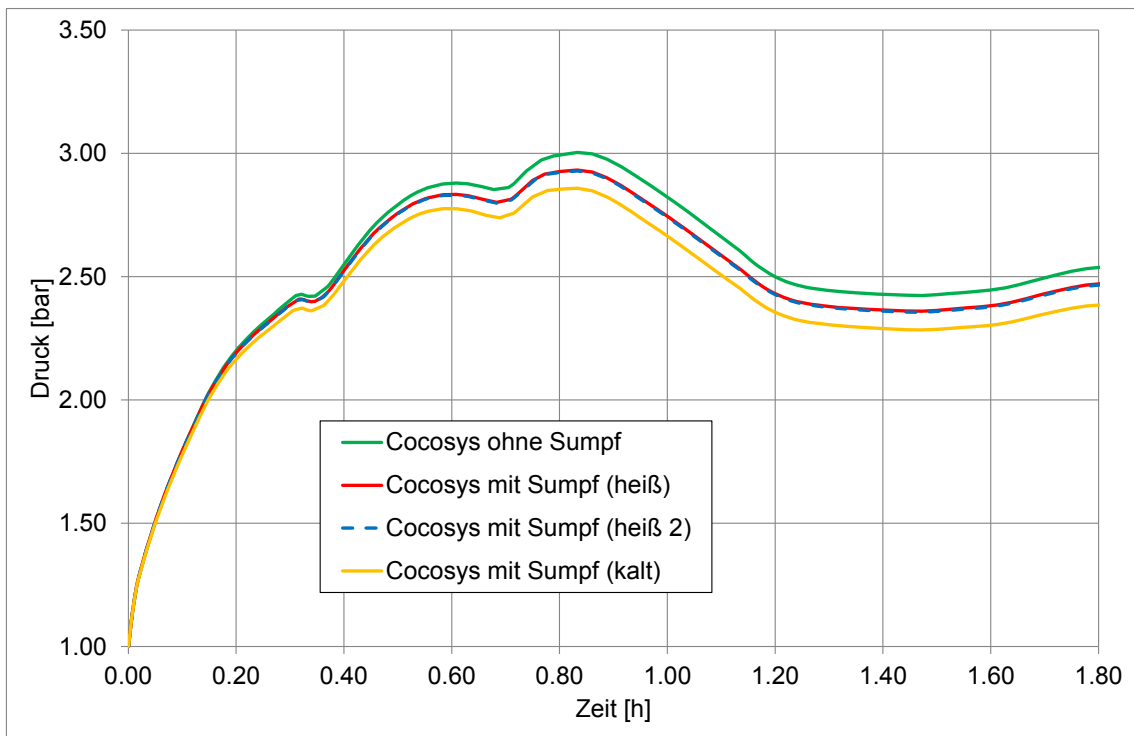
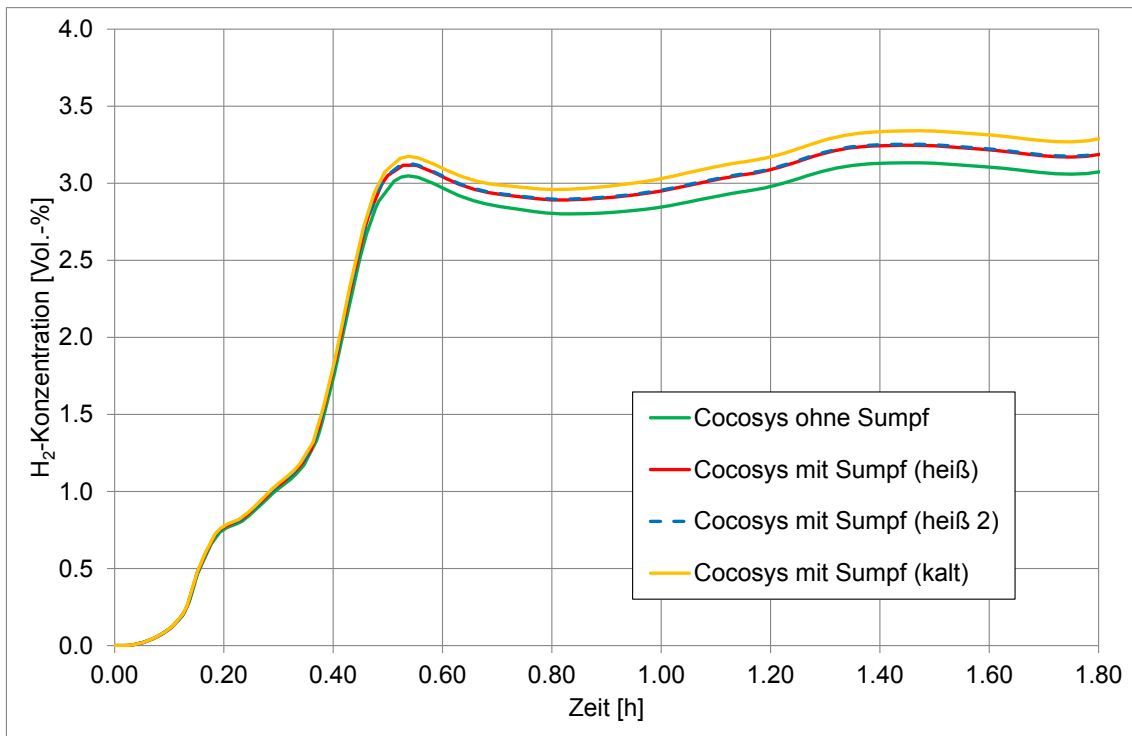


Abb. 10.35 Druckverlauf in COCOSYS



**Abb. 10.36** H<sub>2</sub>-Konzentration im Dom

### 10.3.2 Vergleich zwischen CFX und COCOSYS-Ergebnissen

In den Abbildungen Abb. 10.37 bis Abb. 10.44 werden die CFX- und COCOSYS-Ergebnisse direkt miteinander verglichen. Es ist jeweils eine Rechnung ohne Sumpf und eine Rechnung mit Sumpf (mit kalter Wasservorlage) dargestellt. Trotz der oben genannten Unterschiede zwischen den Datensätzen und den grundlegenden Unterschieden zwischen den Programmen zeigt sich insgesamt schon eine relativ gute qualitative Übereinstimmung.

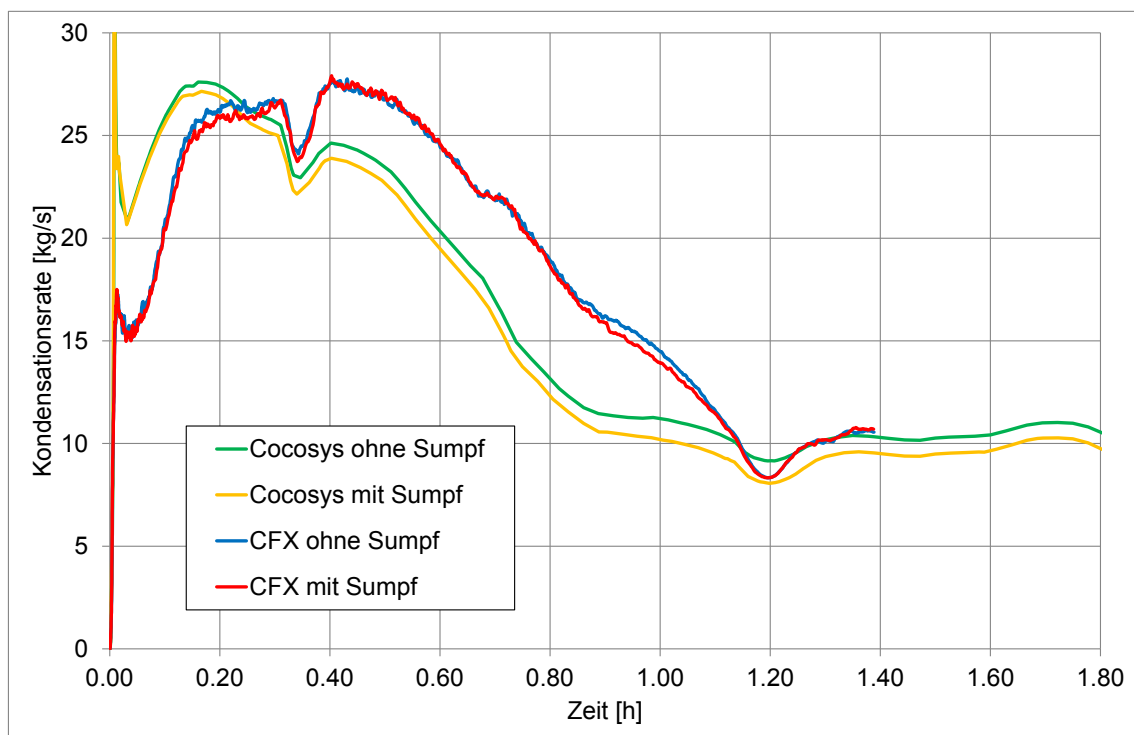
Insgesamt scheint in den CFX-Rechnungen mehr Dampf an den Wänden zu kondensieren, dieses zeigt sich insbesondere in den Zeiten ab 0.3 h (siehe Abb. 10.37 und Abb. 10.38). Die Ursache hierfür ist schwierig herauszufinden, da zahlreiche prinzipielle Unterschiede in der Modellierung des Wärmeübergangs vom Gas in die Wand bestehen. Neben den geometrischen Unterschieden (Wandfläche) bestehen auch grundsätzliche Modellunterschiede. In COCOSYS wird z. B. der Wärmeübergang an die Wand aus der Ähnlichkeitstheorie mit Hilfe von Nusselt-Zahlen ermittelt. Die hierzu verwendete charakteristische Länge kann nur abgeschätzt werden.

Insgesamt würden sich zum Vergleich von COCOSYS und CFX Untersuchungen zu folgenden Bereichen lohnen:

- Genauer Abgleich geometrischer Größen, wie z. B. freie Gas-Volumina, Strukturoberflächen, Überströmflächen zwischen Räumen, Verhältnis Füllstand/Volumen beim Sumpf, ...
- Detaillierte Studien zum Skalierungsverhalten bei Gesetzmäßigkeiten aus der Ähnlichkeitstheorie. Daraus Ableitung von Informationen z. B. zur Wahl von charakteristischen Längen, Widerstandsbeiwerten usw.
- Analyse des Einströmverhaltens bei einem Leckstörfall (gerichtete Quelle, Punktquelle, volumetrische Quelle).

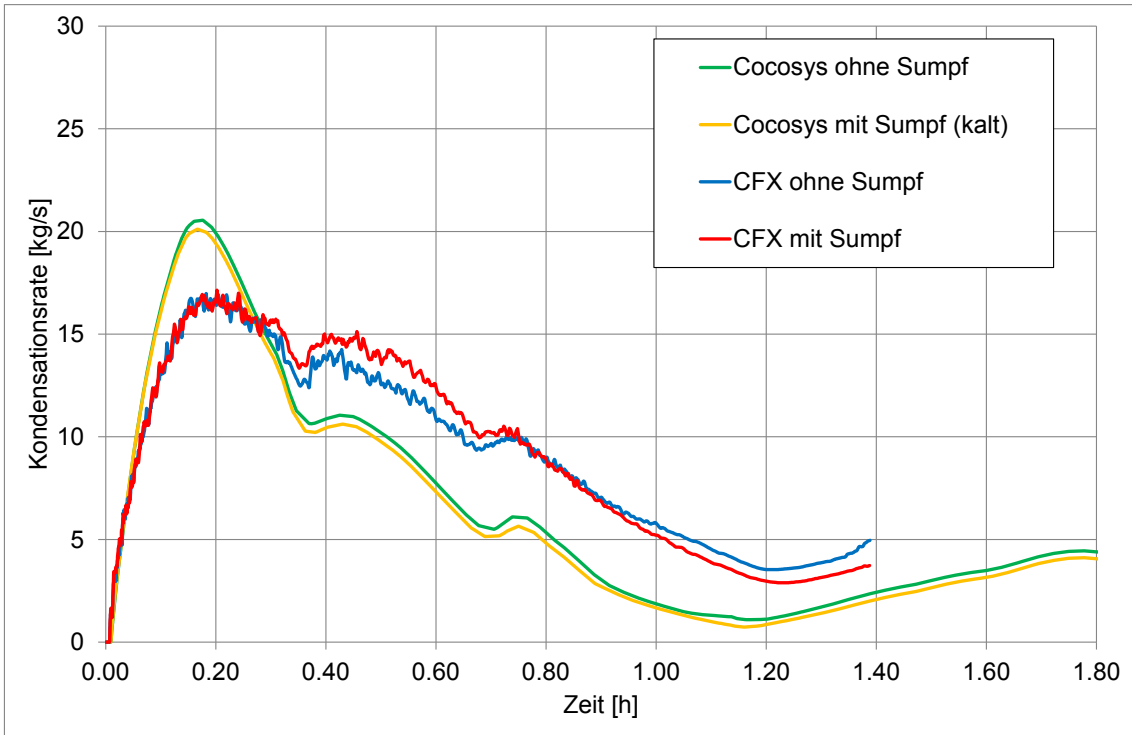
Solche grundlegenden Analysen würden jedoch den Rahmen dieses Arbeitspunktes sprengen.

An der Sumpfoberfläche kondensiert in CFX deutlich weniger als in COCOSYS (siehe Abb. 10.39). Die Ursache hierfür ist, dass sich in CFX (trotz der künstlich erhöhten Wärmeleitfähigkeit) ein Temperaturprofil mit einer höheren Temperatur direkt an der Sumpfoberfläche herausbildet. Dieses ist in Abb. 10.40 dargestellt.

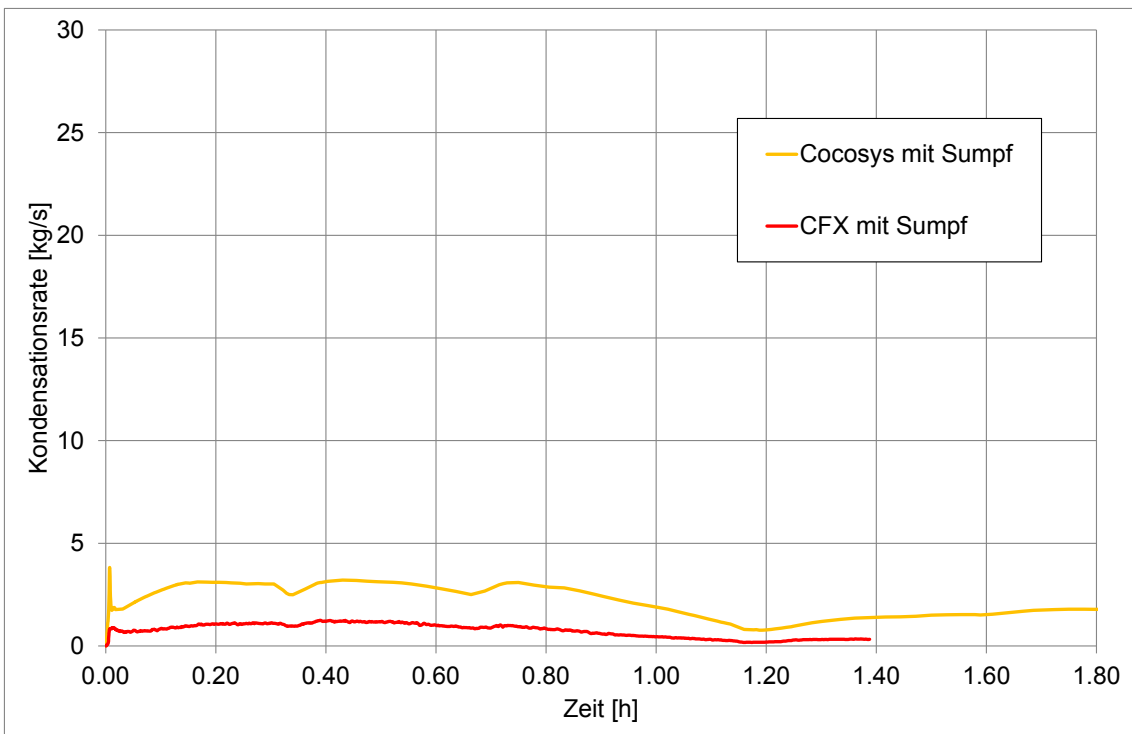


**Abb. 10.37** Integrale Kondensationsraten an Betonstrukturen

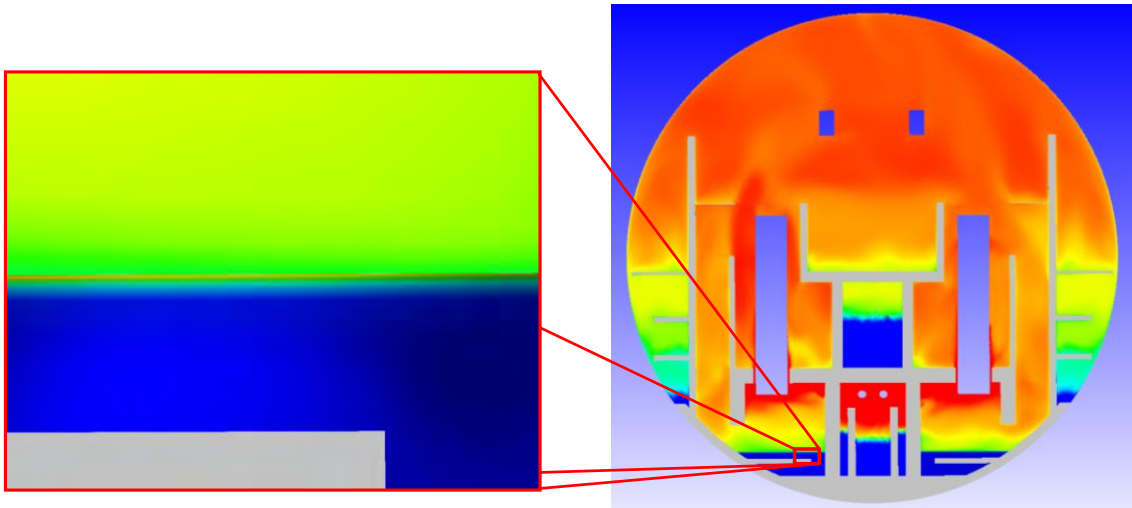




**Abb. 10.38** Integrale Kondensationsrate am Sicherheitsbehälter



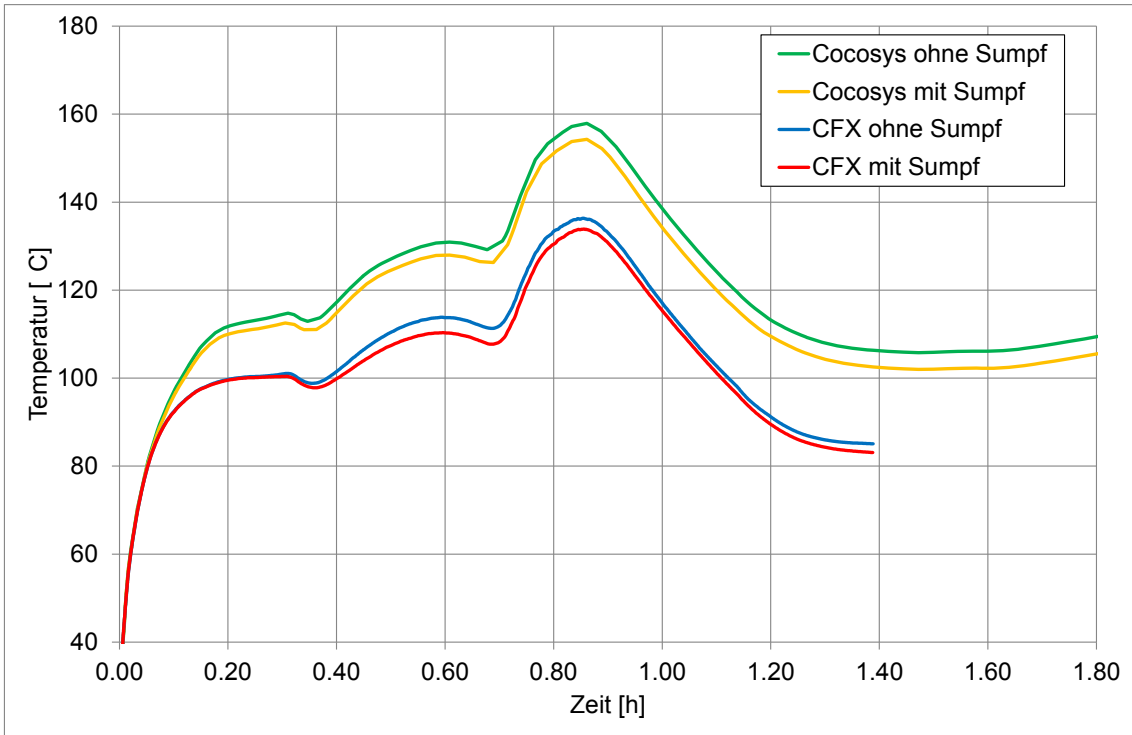
**Abb. 10.39** Kondensation an der Sumpfoberfläche



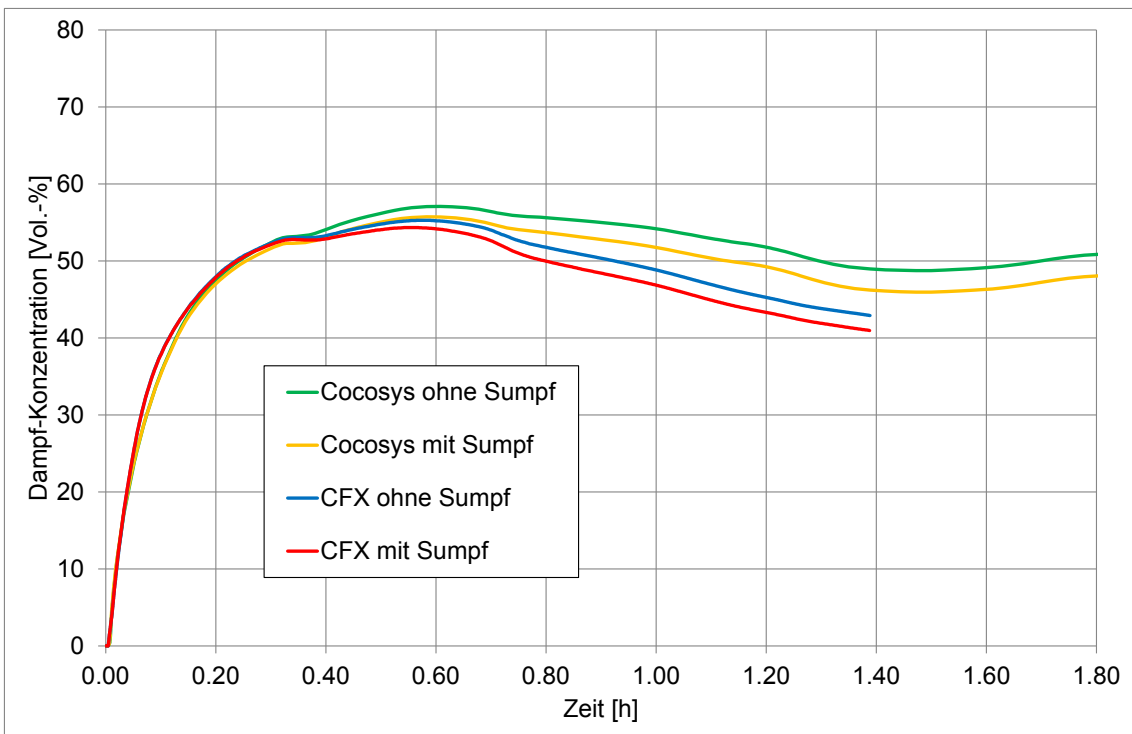
**Abb. 10.40** Containment mit Sumpf (Solid-Block, Sumpftemperatur-Profil im vergrößerten Ausschnitt)

Der unterschiedliche Wärmeübergang an den Containmentwänden macht sich insbesondere bei den Gastemperaturen bemerkbar, die bei den CFX-Rechnungen deutlich niedriger liegen (siehe Abb. 10.41). Bei den Dampfkonzentrationen sind die Unterschiede zwischen CFX und COCOSYS hierbei nicht so groß (siehe Abb. 10.42). Auch bei den H<sub>2</sub>-Konzentrationen und beim Druck sind die Unterschiede zwischen CFX und COCOSYS eher moderat (siehe Abb. 10.43 und Abb. 10.44).

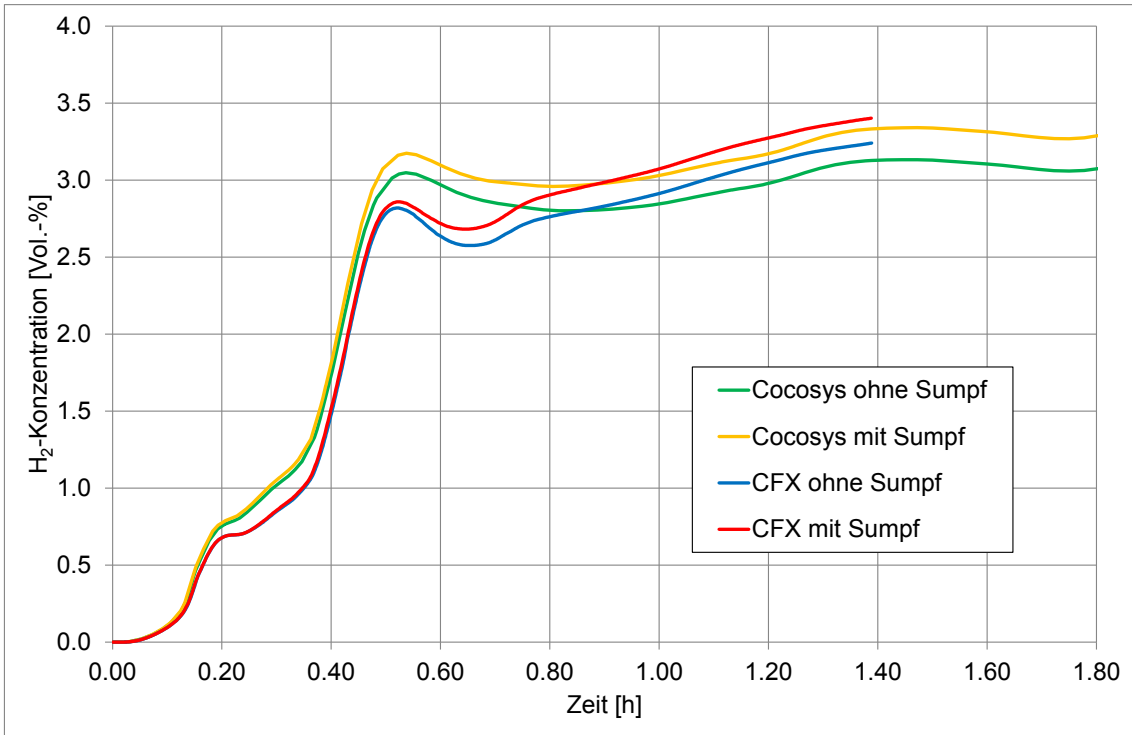
Der Effekt des Sumpfes auf den Druck, die Temperaturen und Gas-Konzentrationen (Dampf, H<sub>2</sub>) scheint bei CFX ähnlich zu sein, wie in den COCOSYS-Rechnungen. Insofern konnte anhand dieses Beispiels gezeigt werden, wie ein (vereinfachtes) Sumpfmodell erfolgreich in CFX eingebracht werden kann.



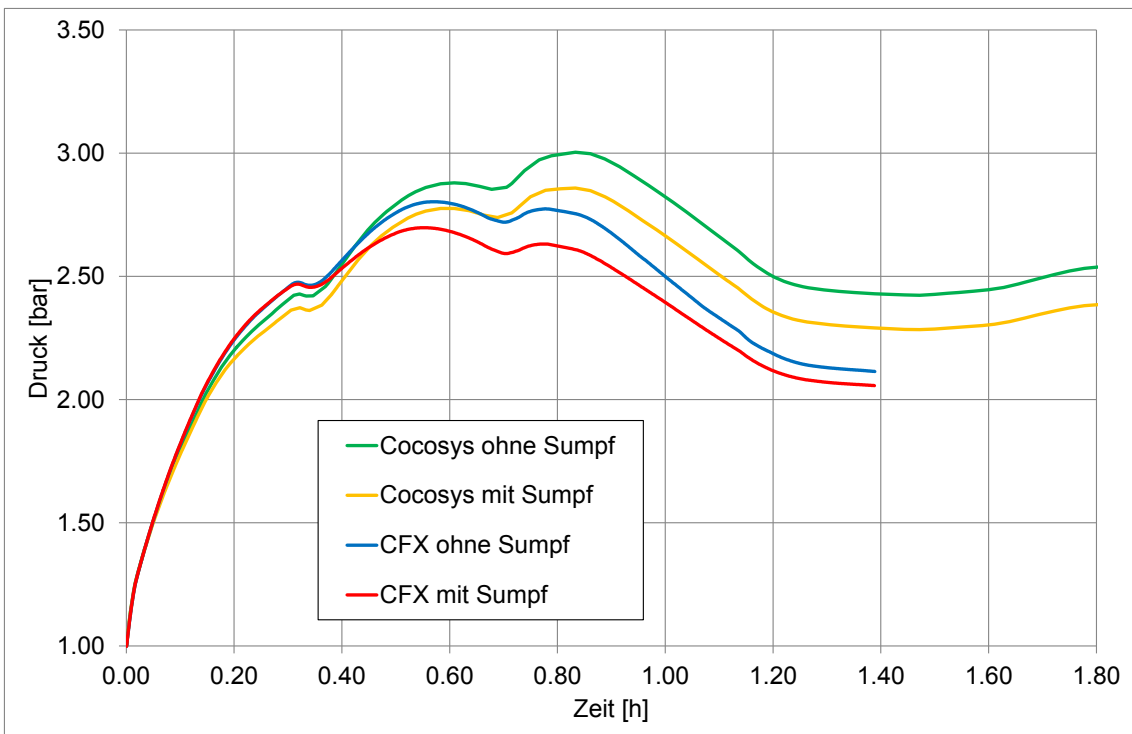
**Abb. 10.41** Temperaturverlauf im Dom



**Abb. 10.42** Dampfkonzentration im Dom



**Abb. 10.43** H<sub>2</sub>-Konzentration im Dom



**Abb. 10.44** Druckverlauf im Containment

### 10.3.3 Vergleich von CFX mit CoPool

Als weiterer Arbeitspunkt sollte eine CFX-Rechnung mit den Ergebnissen einer gekoppelten COCOSYS/CoPool-Rechnung bezüglich der Ausbildung und Zustände im Sumpf verglichen werden. Hierzu wurde das Testszenario etwas modifiziert, so dass nun eine kalte Sumpfvorlage besteht, in die das heiße Wasser mit der entsprechenden Rate eingespeist wird (siehe Abb. 10.1). Dadurch bildet sich im Sumpf eine Temperaturschichtung aus, deren Entwicklung sowohl in CFX wie auch in CoPool beobachtet werden soll. Hierzu wurden mehrere Datensätze erstellt:

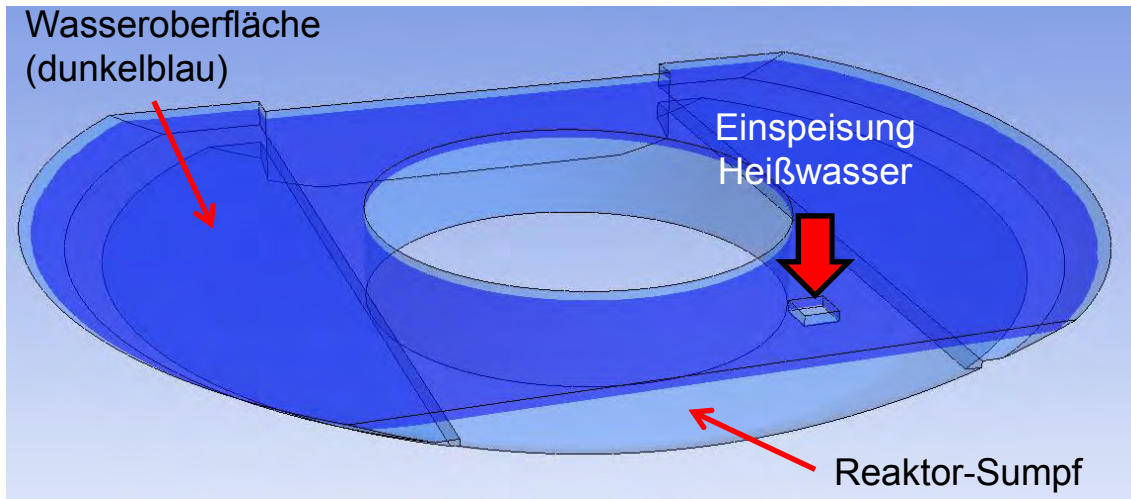
- CFX: Hierbei gab es den schon bekannten Datensatz des Gesamtcontainers, in dem nun sowohl die Wasservorlage als auch das eingespeiste Wasser durch eine zweite Phase in einer Multiphase-Rechnung simuliert wurden. Weiterhin wurde speziell der Sumpfbereich aus dem Gitter herausgenommen und einzeln in einer Art Stand-Alone-Rechnung simuliert (siehe Abb. 10.45).
- COCOSYS/CoPool: Für die gekoppelte Rechnung wurde ein Datensatz verwendet, der in COCOSYS schon recht fein nodalisiert ist (289 Zonen, siehe Abb. 10.47) und zu dem eine entsprechende CoPool-Geometrie gehört (siehe Abb. 10.46).

Ein Vergleich der Gitter zeigt, dass das CFX-Gitter wesentlich feiner als das CoPool-Gitter ist (siehe auch Tab. 10.5). Das CFX-Gitter passt sich auch besser der Geometrie an, ist dafür aber auch im Gegensatz zum CoPool-Gitter unstrukturiert. Während in CFX standardmäßig mit dem SST-Turbulenzmodell gerechnet wird, gibt es in CoPool kein Turbulenzmodell. Hier können alternativ feste Wert für die (horizontale / vertikale) turbulente Viskosität vorgegeben werden.

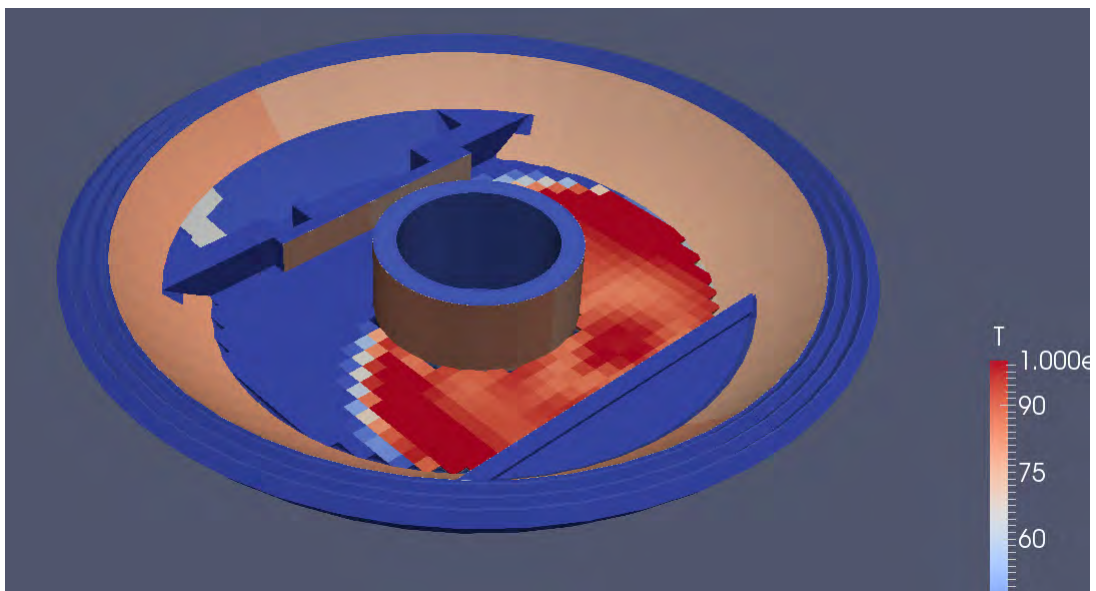
In Abb. 10.48 sind die Positionen der Monitorpunkte in der Nähe der Heißwassereinspeisung dargestellt, an denen der Verlauf der Temperatur überwacht wird. Monitorpunkte 1 – 6 befinden sich direkt an der Wasseroberfläche, während die Punkte 7 – 14 in vertikaler Richtung in die Tiefe gehen. Abb. 10.49 zeigt exemplarisch, wie sich das aus dem Leck kommende heiße Wasser auf dem Kaltwasserpool ausbreitet. Dabei entsteht eine Temperaturschichtung. Da über die Eigenschaften des Rechenprogramms CoPool noch nicht so viel bekannt ist, wurden zunächst einige Parameterstudien durchgeführt (Zeitschritte, Gitter, turbulente Viskosität). Diese sollen im Folgenden erläutert werden.

**Tab. 10.5** Berechnungsparameter für den CFX/CoPool-Vergleich

	CFX (Stand-Alone)	CoPool
Elementzahl (nur Sumpf)	520 000	3900 – 4400 (grob) 8000 – 10 500 (fein)
Max. Zeitschritte	0.1 s	0.1 s oder 0.2 s



**Abb. 10.45** Geometrie für die CFX-Stand-Alone-Sumpfrechnung



**Abb. 10.46** CoPool-Sumpfgometrie für die gekoppelte COCOSYS/CoPool-Rechnung

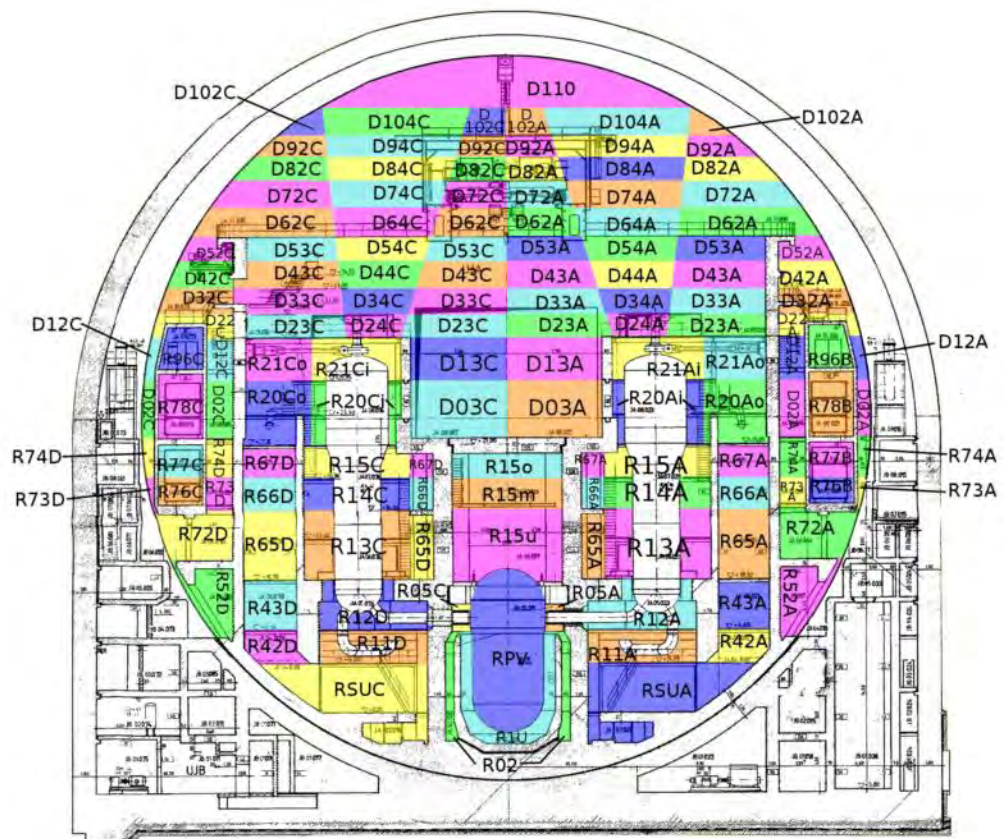


Abb. 10.47 COCOSYS-Nodalisierung für die gekoppelte COCOSYS/CoPool-Rechnung

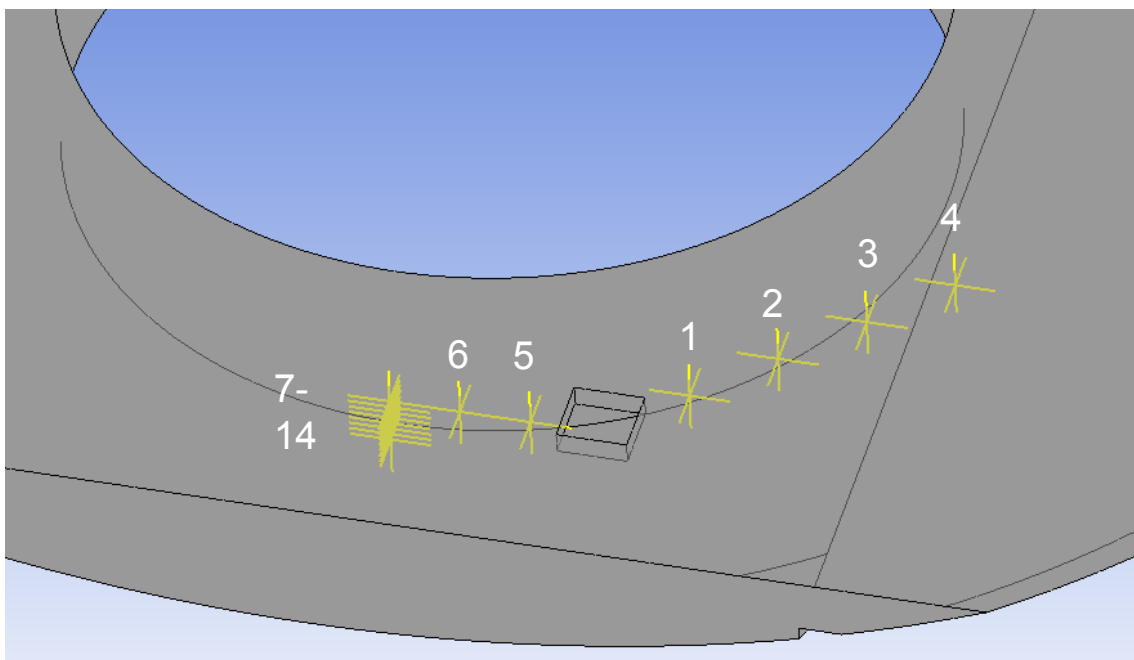
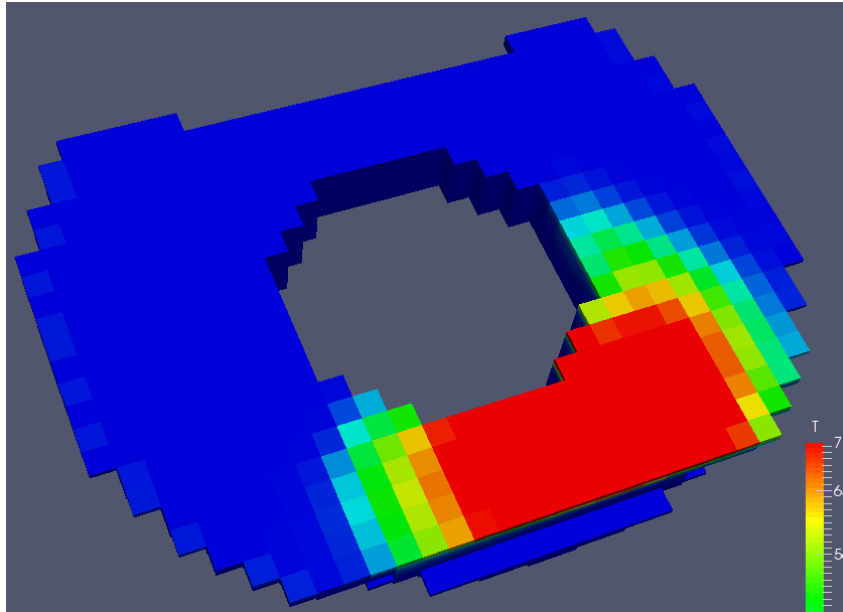


Abb. 10.48 Positionen der Monitorpunkte

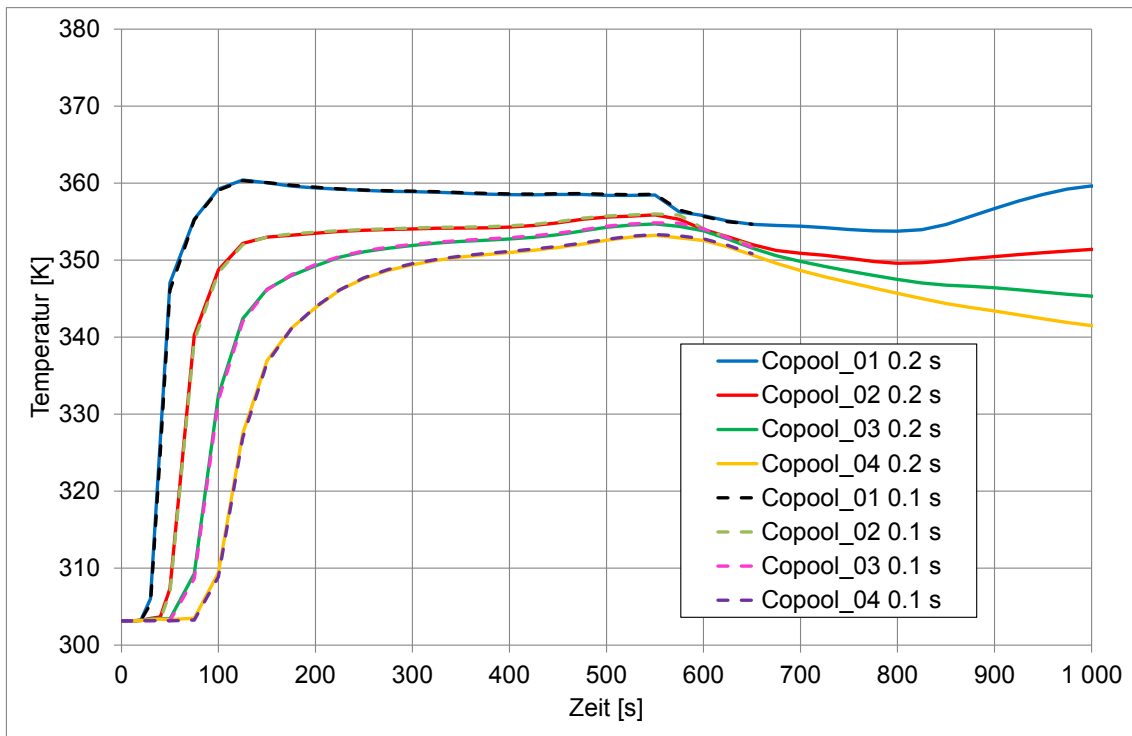


**Abb. 10.49** Ausbreitung des heißen Wassers auf dem Kaltwasserpool (Rechnung Co-Pool)

### 10.3.3.1 CoPool-Zeitschrittstudie

Um den Einfluss der Zeitschrittweite auf den Temperaturverlauf zu untersuchen, wurden zwei gekoppelte COCOSYS/CoPool-Rechnungen mit einer maximalen Zeitschrittweite von 0.1 s und 0.2 s durchgeführt. Diese maximale Zeitschrittweite wurde dabei in CoPool definiert, welches hier die COCOSYS-Rechnung steuert. Abb. 10.50 zeigt den Temperaturverlauf an den Messstellen 1 – 4. Dabei liegen jeweils die Kurven für die Rechnung mit 0.1 s und mit 0.2 s exakt übereinander. Die Rechnung mit 0.1 s ist nach ca. 650 s abgebrochen. Allerdings scheint die maximale Zeitschrittweite bis dahin noch keinerlei Einfluss gehabt zu haben. Das gleiche Bild ergibt sich auch für alle anderen Monitorpunkte.

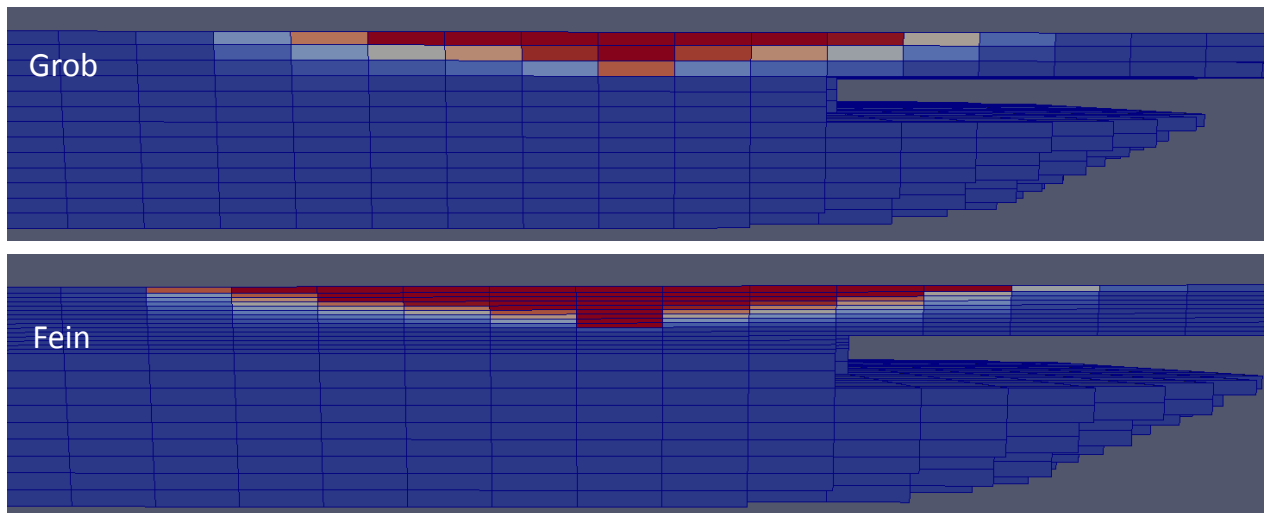




**Abb. 10.50** Einfluss der Zeitschrittweite auf den Temperaturverlauf

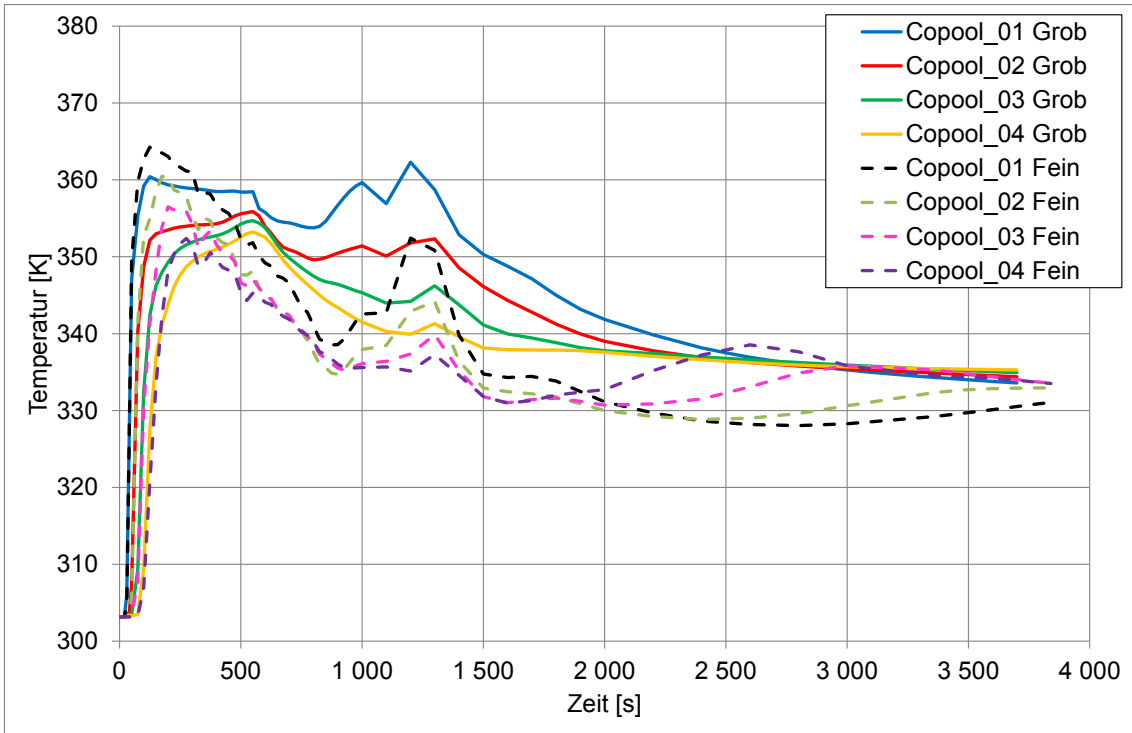
### 10.3.3.2 CoPool-Gitterstudie

Um den Einfluss des Gitters zu untersuchen wurden zwei Rechnungen mit unterschiedlichen feinen Gittern durchgeführt. Diese CoPool-Gitter hatten etwa 4000 bzw. 8000 Elemente für das Fluid (bei ansteigendem Wasserspiegel nimmt die Anzahl der Fluidelemente noch zu). Insbesondere im Bereich der Wasseroberfläche wurde das Gitter in vertikaler Richtung verfeinert, um die Schichtung feiner aufzulösen. Die beiden Gitter werden in Abb. 10.51 verglichen. Das grobe Gitter hat in der Nähe der Oberfläche 20 cm dicke Schichten, während das feine Gitter dort nur 5 cm dicke Schichten hat.

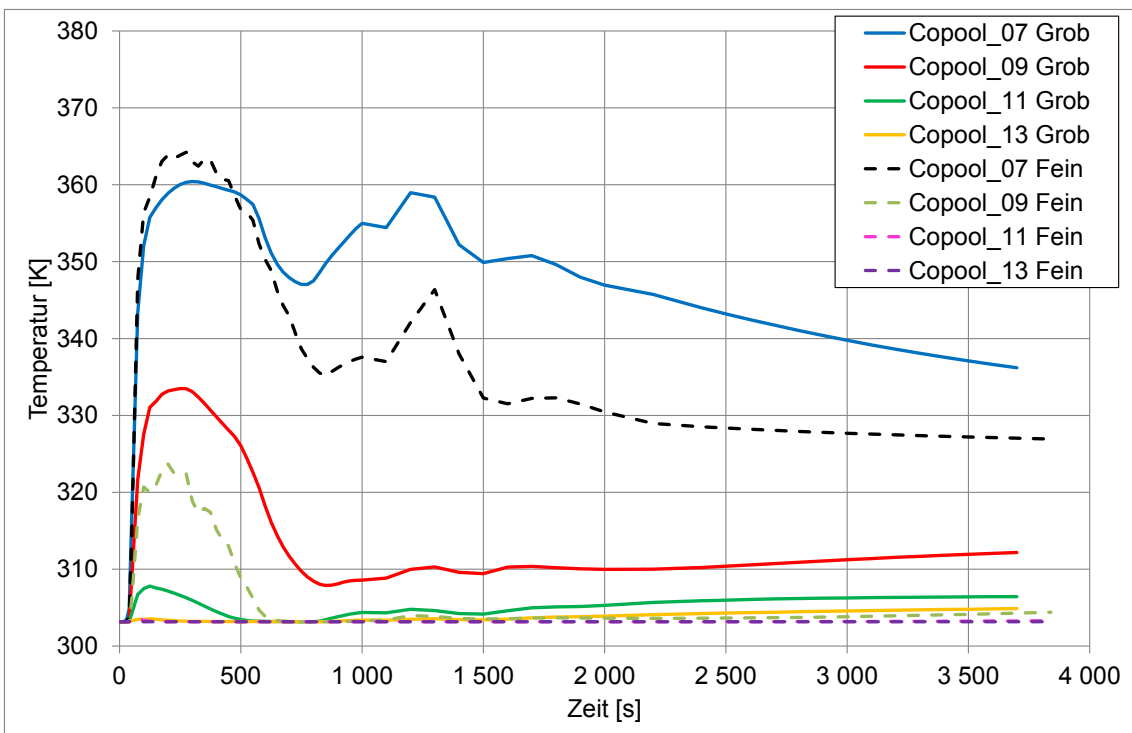


**Abb. 10.51** Unterschiedliche Gitterfeinheiten in CoPool (vertikaler Schnitt beim Heißwasser-Einlass)

Abb. 10.52 und Abb. 10.53 zeigen den Einfluss der Gitterfeinheit auf den Temperaturverlauf an unterschiedlichen Messpunkten. Insgesamt scheinen die Temperaturen bei diesen Messpunkten bei der Rechnung mit dem feinen Netz niedriger zu liegen als bei der Rechnung mit dem groben Netz. Die Rechenergebnisse sind also durchaus sensitiv auf die Netzfeinheit. Auf einer weitere Verfeinerung wird an dieser Stelle aber verzichtet, da die Veränderung des Netzes recht umständliche ist (insbesondere durch die Anpassung an die gekoppelte COCOSYS-Rechnung). Geht man von dem allgemeinen Bild einer CFD-Rechnung aus, so müssten bei der Rechnung mit dem feineren Gitter die geringeren Diskretisierungsfehler vorliegen, dieses Ergebnis sollte also näher an der Realität liegen. Daten zu einem realistischen Störfall liegen hier natürlich nicht vor, später wird aber noch ein Vergleich der Ergebnisse mit einer CFX-Rechnung durchgeführt.



**Abb. 10.52** Einfluss der Gitterfeinheit auf den Temperaturverlauf (Monitor 1 – 4)

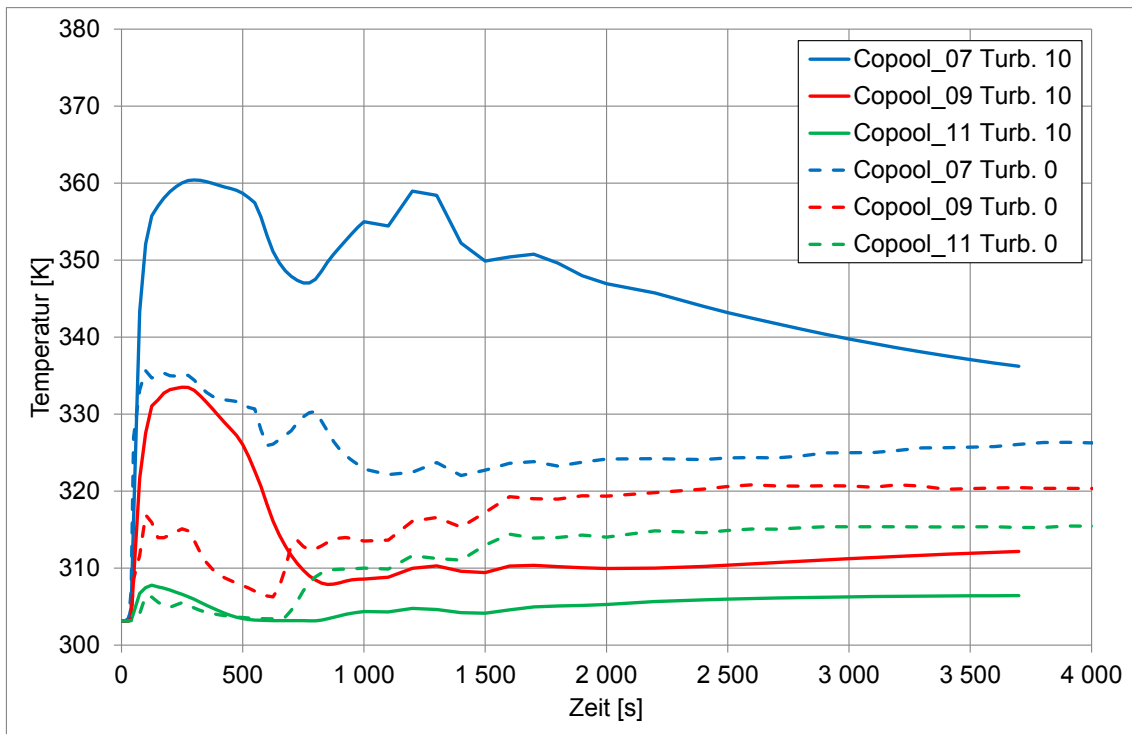


**Abb. 10.53** Einfluss der Gitterfeinheit auf den Temperaturverlauf (Monitor 7 – 13)

### 10.3.3.3 CoPool-Studie zur turbulenten Viskosität

CoPool hat zwar kein eigenes Turbulenzmodell, es ist jedoch möglich, eine turbulente Viskosität anzugeben (getrennt nach vertikaler und horizontaler Richtung). Diese turbulente Viskosität wird auf die dynamische Viskosität des Fluides addiert. In den bisherigen Rechnungen waren die Werte 0 Pas in horizontaler Richtung und 10 Pas in vertikaler Richtung eingestellt (dieses entsprach den Werten in dem übergebenen Beispieldatensatz). In CoPool-Analysen zu einem Experiment – der GES-Wanne – wird dieser Parameter in einem Bereich von 0 – 1 Pas sowohl für die horizontale als auch vertikale Richtung variiert /FRE 12/. Aus dieser Parameterstudie wird aber keine Empfehlung abgeleitet, wie dieser Wert zu setzen ist.

Grundsätzlich hat die turbulente Viskosität keinen festen Wert, sie ergibt sich vielmehr dynamisch aus der aktuell vorliegenden Strömung. Theoretisch kann dieser Wert mit Hilfe von Turbulenzmodellen berechnet werden. Dieses geschieht z. B. im SST-Modell von ANSYS CFX. In der Berechnung der Sumpfstände mit CFX ergeben sich allerdings insgesamt relativ kleine Werte für die turbulente Viskosität mit  $\eta_t < 0.001$  Pas. Aus diesem Grund wurde für die vorliegende CoPool-Parameterstudie neben dem bisherigen Wert 10 Pas auch der Wert 0 Pas für die vertikale turbulente Viskosität gewählt. Abb. 10.54 zeigt die Temperaturen an verschiedenen Messpunkten in unterschiedlicher Wassertiefe. Hier ist ein sehr deutlicher Einfluss der turbulenten Viskosität auf die Ergebnisse zu sehen. Eine kleinere Viskosität führt zu einer stärkeren Vermischung und zu einer geringeren Schichtungsbildung. Vor dem Hintergrund der CFX-Ergebnisse (Größe der ermittelten turbulenten Viskosität) sollte die Rechnung mit 0 Pas eher der Realität entsprechen.

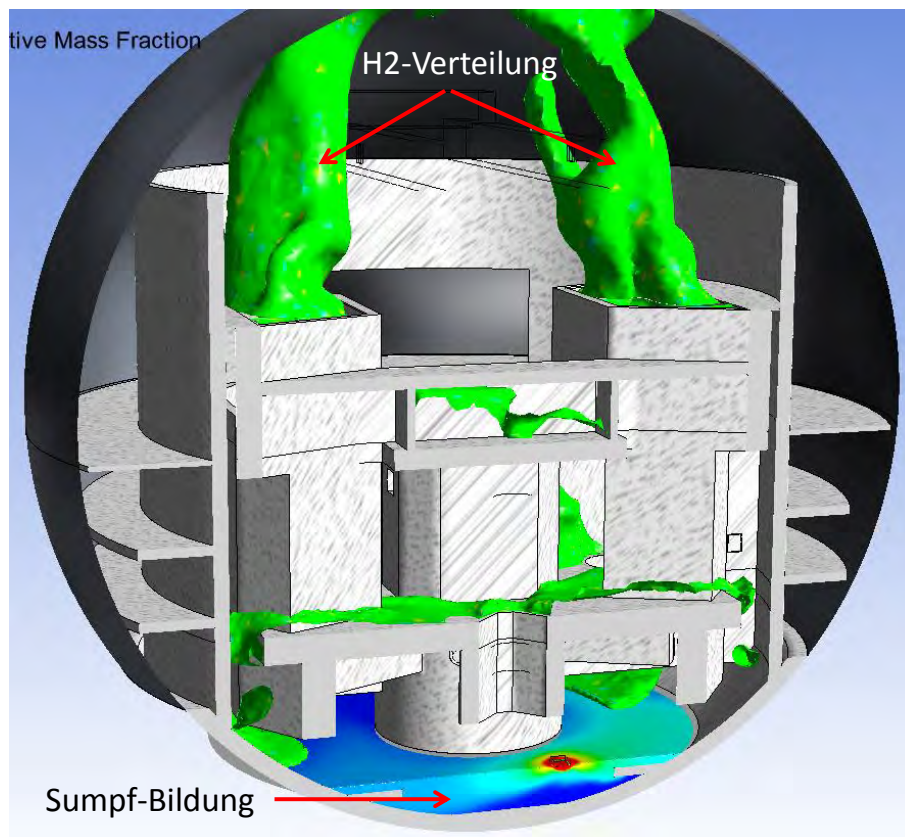


**Abb. 10.54** Einfluss der (vertikalen) turbulenten Viskosität auf den Temperaturverlauf

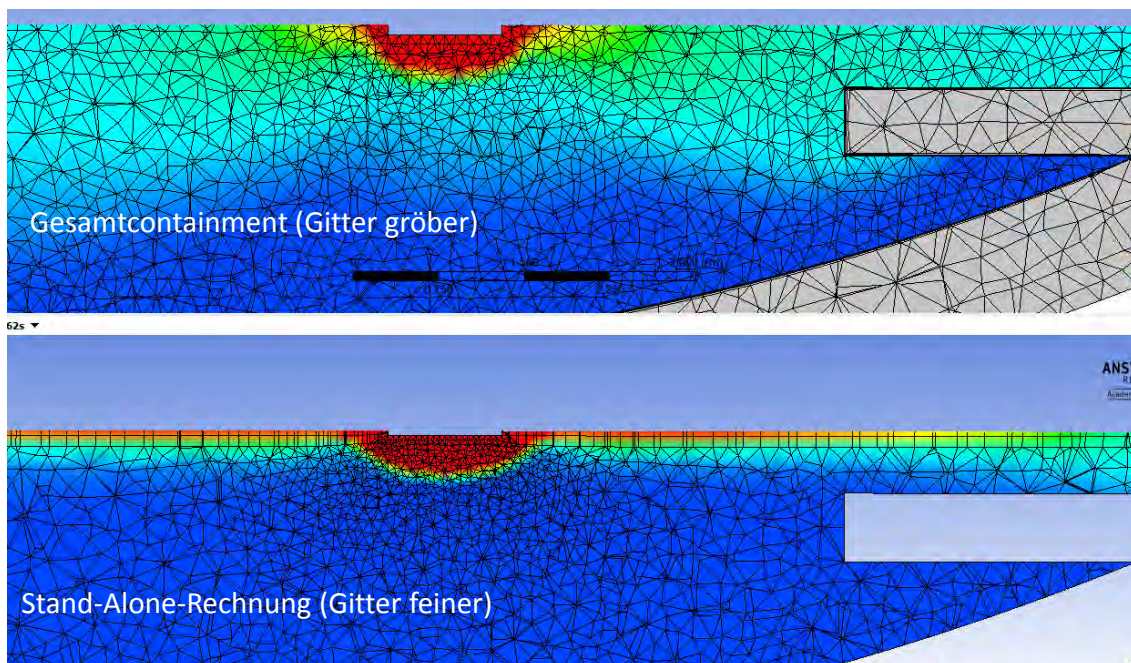
#### 10.3.3.4 CFX Gitterstudie

Neben der CFX-Stand-Alone-Rechnung des Sumpfes (siehe Abb. 10.45) wurde auch eine CFX-Rechnung durchgeführt, in welcher der Sumpf Teil des gesamten Konvoi-Datensatzes ist. Hier wurde neben der Gasfreisetzung auch heißes Wasser aus dem Leck in den schon vorhandenen kalten Sumpf eingespeist. Dieser Gesamtprozess ist in Abb. 10.55 dargestellt. Aufgrund des Umfangs der Gesamtrechnung (und numerischer Stabilitätsprobleme) wurde das Gitter innerhalb des Sumpfes verändert. Beim Gesamtcontainment ist das Gitter insbesondere in der Nähe des Warmwasser-Einlasses und an der Wasseroberfläche gröber als bei der Stand-Alone-Rechnung (siehe Abb. 10.56). Anhand Abb. 10.56 ist auch zu sehen, dass sich (bei gleichem Zeitpunkt) unterschiedliche Temperaturverteilungen bei den unterschiedlichen Gittern herausbilden. Auch bei der Betrachtung der Temperaturen an unterschiedlichen Monitorpunkten (siehe Abb. 10.57 und Abb. 10.58) zeigt sich sowohl an der Wasseroberfläche als auch in unterschiedlicher Wassertiefe, dass das Gitter einen wesentlichen Einfluss auf die Verteilung des warmen Wassers in dem kalten Wasserpool hat. Dabei wird davon ausgegangen, dass die Stand-Alone-Rechnung mit dem feineren Gitter einen geringeren numerischen Fehler aufweist. Hierbei muss aber noch keine Netzun-

abhängigkeit erreicht worden sein. Diese Stand-Alone-Rechnung wird deshalb im Folgenden für den Vergleich mit den CoPool-Ergebnissen herangezogen.

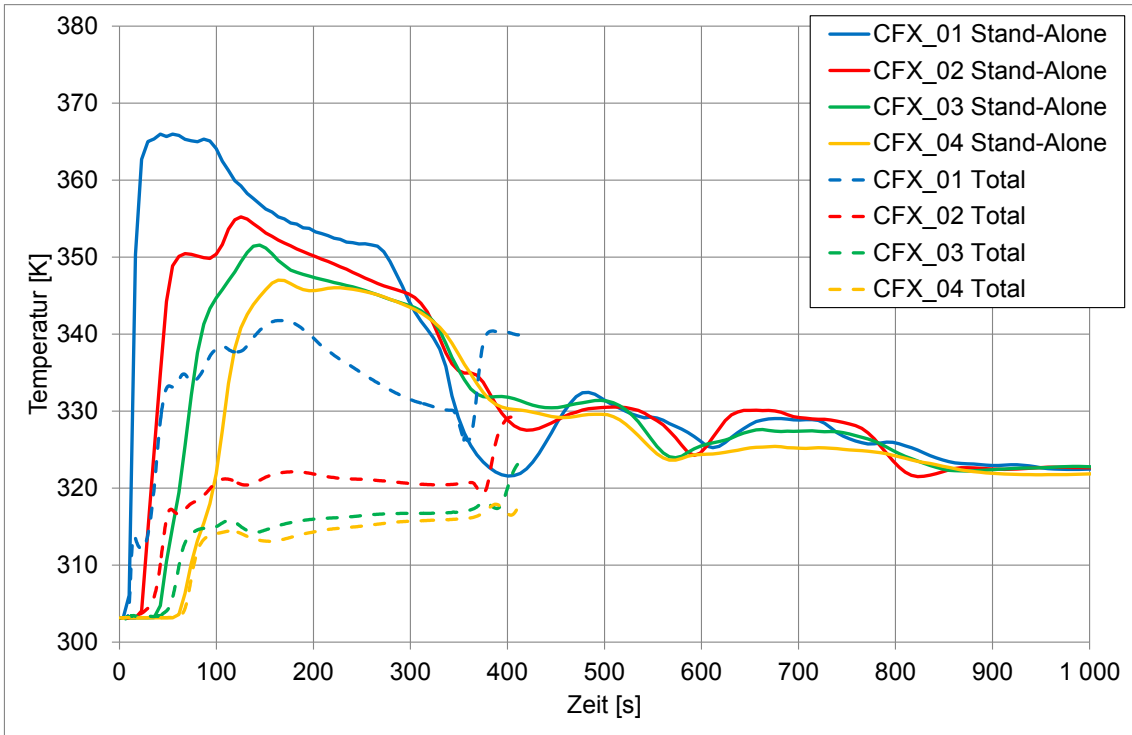


**Abb. 10.55** Gasverteilung und Sumpfbildung im Gesamtcontainment

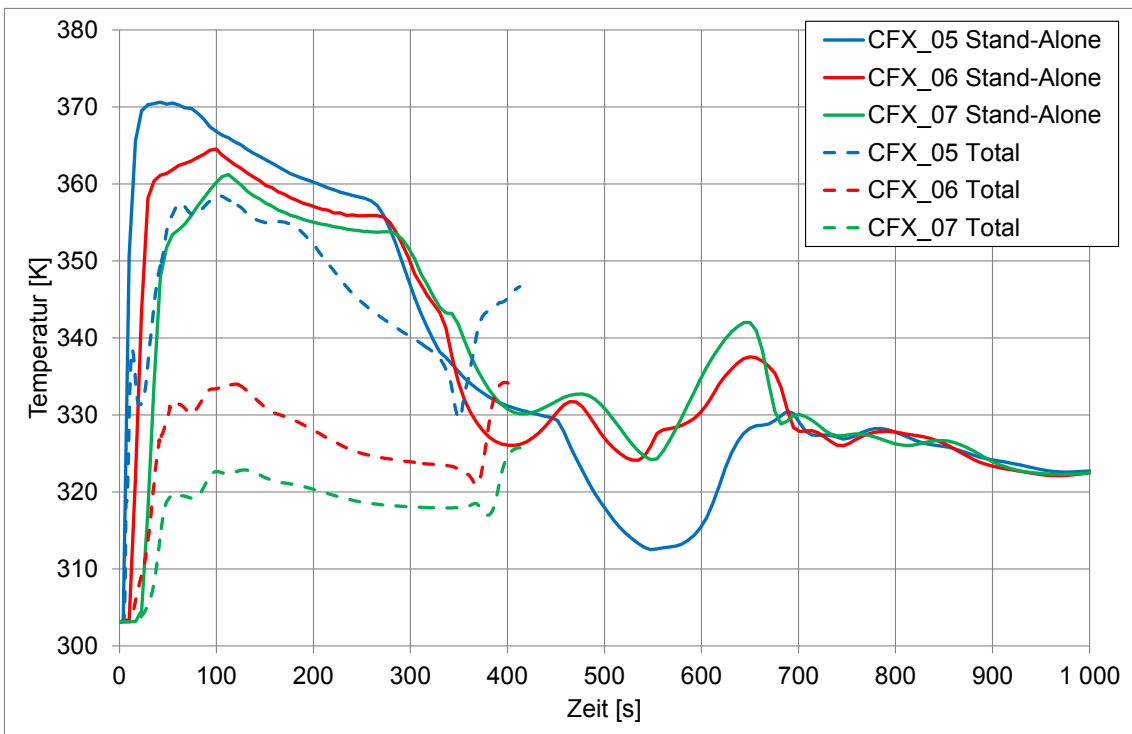


**Abb. 10.56** Unterschiedliche Gitterfeinheit im Sumpf





**Abb. 10.57** Monitorpunkte an der Wasseroberfläche (Multiphase-Rechnungen).



**Abb. 10.58** Monitorpunkte in unterschiedlicher Wassertiefe (Multiphase-Rechnungen).

### 10.3.3.5 Vergleich mit CFX

Nach diesen Parameterstudien sollen die CoPool-Ergebnisse jetzt mit den CFX-Ergebnissen verglichen werden. Dafür wird die CFX-Stand-Alone-Rechnung des Sumpfes herangezogen. Tab. 10.6 zeigt noch einmal in der Übersicht, welche CoPool-Rechnungen nun mit der CFX-Rechnung verglichen werden. Eine Kombination von feinem Gitter und niedriger turbulenter Viskosität hat sich leider als (numerisch) instabil herausgestellt und konnte daher nicht erfolgreich berechnet werden.

**Tab. 10.6** CoPool-Rechnungen für den Vergleich mit CFX

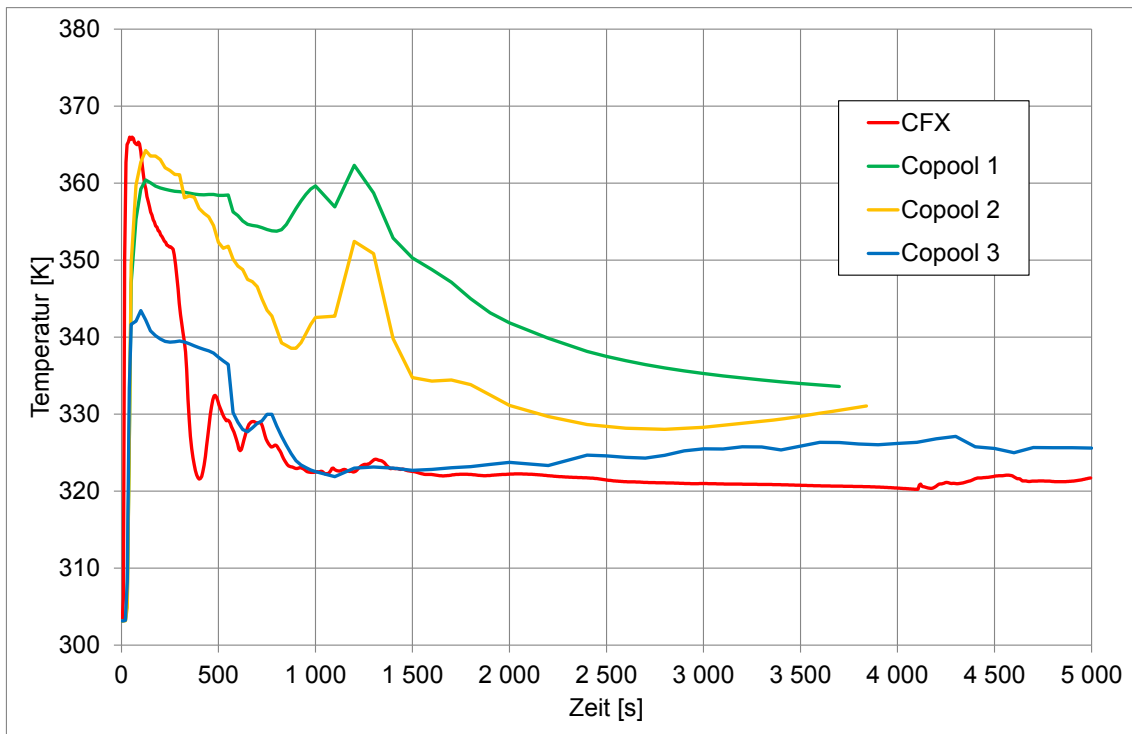
Rechnung	Gitter	(Vertikale) turbulente Viskosität
CoPool 1	Grob	10 kg/ms
CoPool 2	Fein	10 kg/ms
CoPool 3	Grob	0 kg/ms

In Abb. 10.59 und Abb. 10.60 ist dargestellt, wie sich die Temperatur an den Monitorpunkten 1 und 11 verhält. Monitorpunkt 1 liegt dabei an der Wasseroberfläche, während Monitorpunkt 11 ca. 40 cm unterhalb der Wasseroberfläche liegt. Die genaue Position ist in Abb. 10.48 zu sehen.

Insgesamt scheint CoPool-Rechnung 3, die mit der niedrigen turbulenten Viskosität, am nächsten an den CFX-Werten zu liegen. Hier gibt es sowohl nahe der Wasseroberfläche als auch in 40 cm Tiefe eine gute Übereinstimmung. Lediglich der kurzfristige starke Temperaturanstieg innerhalb der ersten ca. 400 s an der Wasseroberfläche (siehe Abb. 10.59) wird von CoPool-Rechnung 3 nicht richtig wiedergegeben.

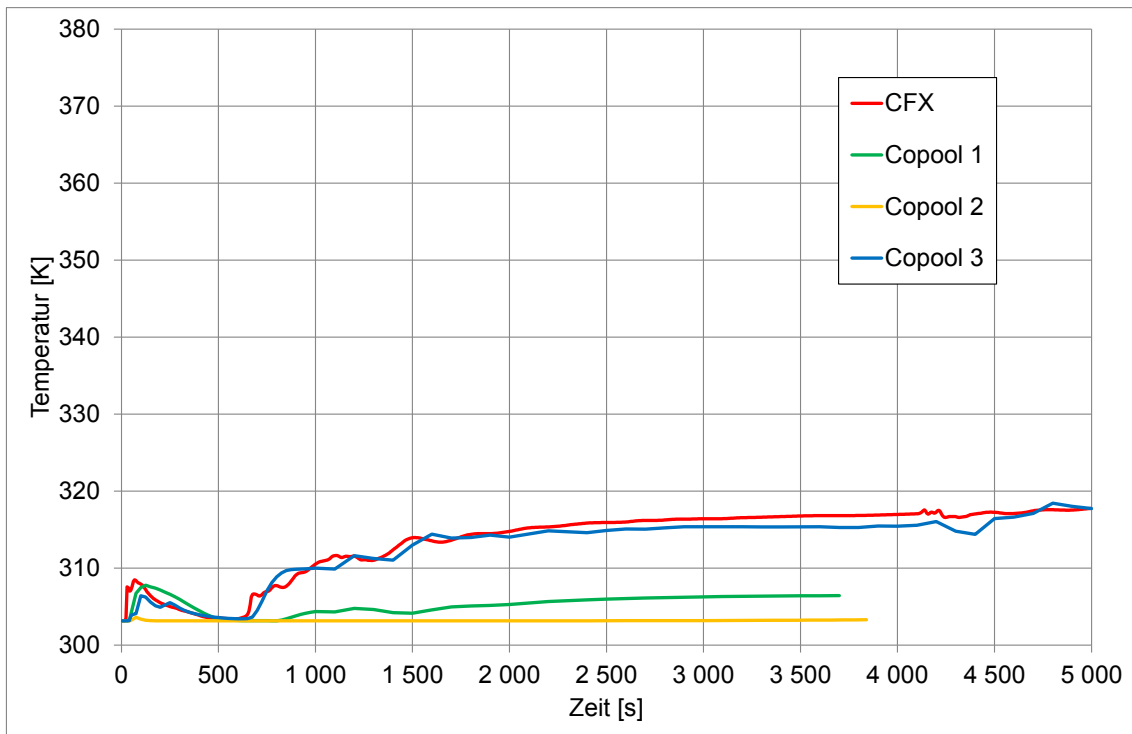
Die beiden anderen Rechnungen mit der höheren (vertikalen) turbulenten Viskosität zeigen eine deutlich stärkere Schichtung mit höheren Temperaturen an der Oberfläche und niedrigeren Temperaturen weiter unten. Diese beiden Rechnungen passen nicht so gut zu den CFX-Ergebnissen. Ähnlich sind die Ergebnisse auch an den anderen Monitorpunkten, die hier nicht einzeln gezeigt werden.





**Abb. 10.59** Monitorpunkt 1 (an der Wasseroberfläche)

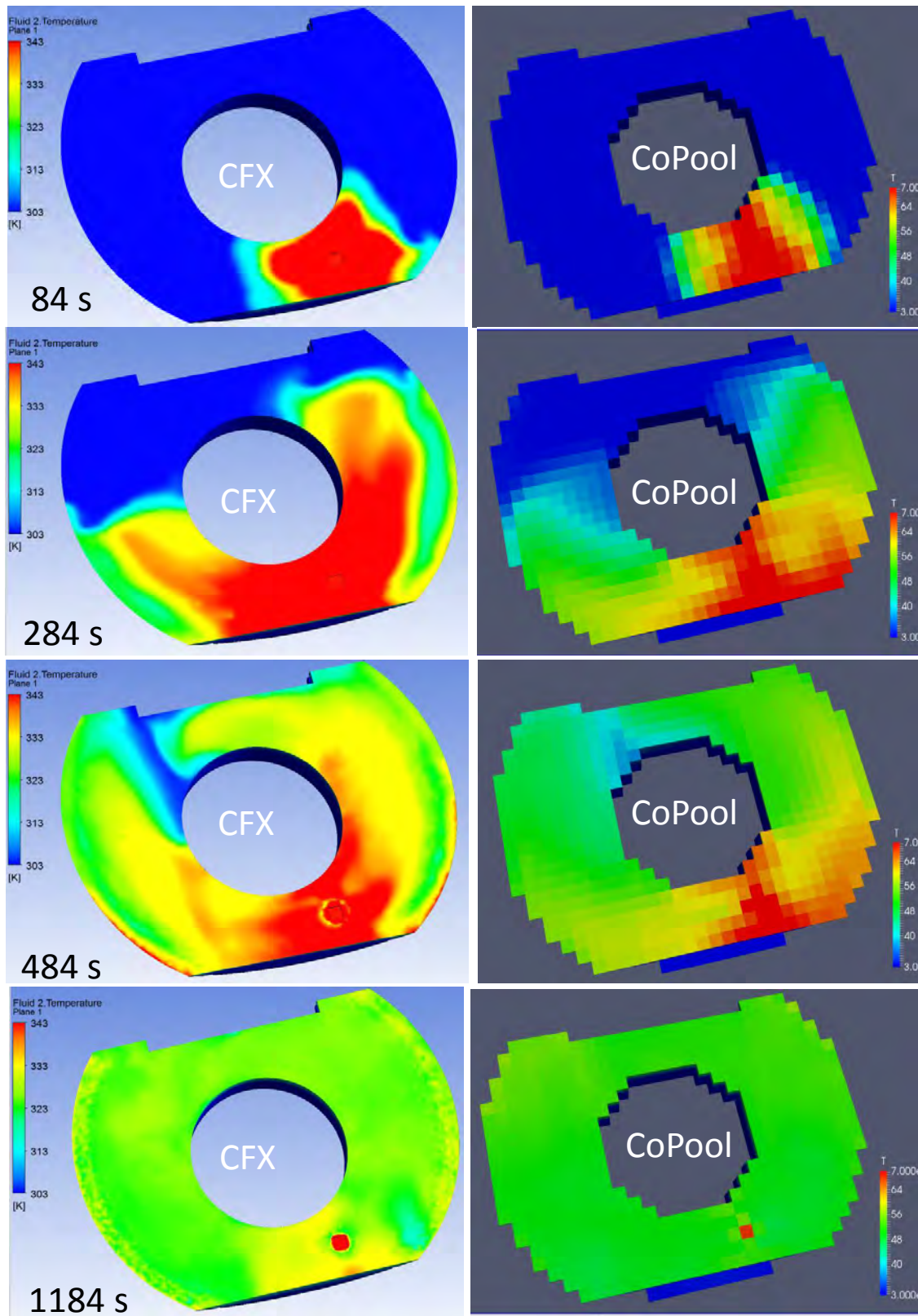
Abb. 10.61 zeigt einen Vergleich von CFX- und CoPool-Rechenergebnissen. Hierbei wurde die CoPool-Rechnung 3 verwendet. Dargestellt sind Temperaturen zwischen 30 und 70 °C. Es ist gut zu sehen, wie sich das heiße Wasser von der Einspeisestelle ausbreitet. Zu einem späteren Zeitpunkt gehen die hohen Temperaturen durch Vermischung wieder etwas runter. Grundsätzlich fällt die etwas gröbere Diskretisierung bei der CoPool-Rechnung im Vergleich zur CFX-Rechnung auf. Insgesamt sehen die Bilder aber für die CFX- und für die CoPool-Rechnung ziemlich ähnlich aus. Insofern kann man hier von einer guten Übereinstimmung sprechen.



**Abb. 10.60** Monitorpunkt 11 (in 40 cm Wassertiefe)

### 10.3.3.6 Fazit des CFX/CoPool-Vergleichs

Der Vergleich mit CoPool zeigt, dass trotz vorhandener Modellunterschiede (CoPool: Shallow-Water-Equation, ohne Turbulenzmodell, grobes Netz) eine vergleichsweise gute Übereinstimmung bei der Ausbildung der Zustände im Sumpf (z. B. bei der thermischen Schichtung) besteht. Dieses ist eine Bestätigung sowohl für die CFX- als auch für die CoPool-Simulation. Für die CoPool-Rechnung wird aufgrund der vorliegenden Ergebnisse eine feine Vernetzung in vertikaler Richtung (5 cm Schichtdicke) und niedrige Werte für die turbulente Viskosität (0 Pas horizontal und vertikal) empfohlen. Falls die Kombination instabil ist, dann sollte einer niedrigen Viskosität der Vorrang gegeben werden. Diese Empfehlung sollte aber noch mit weiteren Experimenten abgesichert werden. Bei Containment-Rechnungen empfiehlt sich weiterhin auch die kombinierte Anwendung von CFX und CoPool zur gegenseitigen Kontrolle.



**Abb. 10.61** Vergleich von CFX- und CoPool-Rechenergebnissen (Sumpftemperaturen)

## 10.4 Zusammenfassung und Fazit

In diesem letzten Arbeitspunkt wurde die Simulation einer Gasverteilung und Sumpfbildung in einem KONVOI-Containment beispielhaft untersucht. Zunächst wurde der CFX-Datensatz angepasst und eine Gitter- und Zeitschritt-Studie durchgeführt. Hier zeigen sich noch gewisse numerische Ungenauigkeiten. Diese konnten reduziert werden durch feinere Zeitschritte und ein feineres Gitter. Insbesondere die Gitterverfeinerung in der Gasphase erhöht aber die Rechendauer deutlich, so dass hier noch keine vollständige Gitterunabhängigkeit erreicht werden konnte. Eine Gitterfeinheit von 2 mm in der Wand ist aber durchaus schon gut möglich.

Im Rahmen einer weiteren Studie wurde zusätzlich das IKE-Volumenkondensationsmodell verwendet. Dieses hat allerdings nur einen vergleichsweise geringen Einfluss auf den Störfall (Druck, Temperaturen, Gaskonzentrationen). Da gleichzeitig der Rechenaufwand und die numerische Stabilität leiden, ist fraglich, ob die Verwendung dieses Modells sinnvoll ist.

In CFX wurde der Sumpf in zwei unterschiedlichen Rechnungen sowohl als Solid-Block, als auch mit dem Multiphase-Modell simuliert. Ähnlich wie bei den Sumpfsimulationen im THAI-Behälter zeigt sich auch hier die Solid-Block-Rechnung deutlich schneller und stabiler als die Multiphase-Rechnung. Mit ihr kann zwar nicht der Einfluss der Volumenverdrängung beim Auffüllvorgang simuliert werden. Dieser Effekt ist aber vergleichsweise gering. Insgesamt hat der Sumpf in den CFX-Rechnungen die Wirkung einer Wärmesenke, die zu mehr Kondensation, niedrigeren Temperaturen in der Gasphase, niedrigerem Druck und Dampfgehalt, aber etwas höherer  $H_2$ -Konzentration in der Atmosphäre führt. Der Effekt des Sumpfes auf die Gasatmosphäre ist moderat.

Diese CFX-Rechnungen wurden mit COCOSYS-Rechnungen verglichen. Hierzu wurde zunächst ein COCOSYS-Datensatz mit einer mittleren Nodalisierung mit 34 Zonen verwendet. Auch mit diesem Datensatz wurde der Störfall jeweils mit und ohne Sumpfwasser berechnet. Insgesamt findet sich (trotz der Modellunterschiede) eine gute Übereinstimmung von CFX- und COCOSYS-Ergebnissen. Sowohl der relative Effekt des Sumpfes auf die Atmosphäre, wie auch die absoluten Werte von Druck, Temperaturen und Gaskonzentrationen sind relativ ähnlich.

Zum Vergleich der Zustände im Sumpf wurden weitere Berechnungen durchgeführt. Hierbei wurde als Beispiel eine Schichtungsbildung simuliert. Für CFX wurde eine de-

taillierte Stand-Alone-Rechnung nur der Sumpfzone verwendet. Verglichen wurde diese mit einer gekoppelten COCOSYS/CoPool-Rechnung. Um erste Erfahrungen mit CoPool zu sammeln, wurden hier zunächst einige Parameterstudien durchgeführt (Gitter, Zeitschritte, turbulente Viskosität). Diese haben einen moderaten Einfluss des Gitters und einen deutlichen Einfluss der turbulenten Viskosität auf das Schichtungsverhalten in CoPool gezeigt. Im Vergleich mit der CFX-Rechnung zeigt sich, dass es an den unterschiedlichen Monitorpunkten insbesondere eine gute Übereinstimmung mit der CoPool-Rechnung mit turbulenter Viskosität 0 Pas gibt. Bei den Rechnungen mit höherer Viskosität entsteht eine zu starke Temperaturschichtung. Die Verteilung des heißen Wassers auf dem vorhanden kälteren Wasser konnte also mit guter Übereinstimmung von CFX und CoPool berechnet werden. Dieses Ergebnis ist sowohl für CFX als auch für CoPool eine gute Bestätigung.

## 11 Zusammenfassung

Ziel des Projekts ist die Validierung und gezielte Erweiterung von CFX für verschiedene unfalltypische Phänomene und die Erprobung des Open Source Codes OpenFOAM. Die längerfristige Zielsetzung ist die dreidimensionale Simulation der Thermodynamik im Sicherheitseinschluss unter Stör- und Unfallbedingungen.

Die Arbeiten sind in drei verschiedenen Arbeitspaketen gebündelt:

- AP1: Modellierung und Validierung von CFX bezüglich unfalltypischer Phänomene
- AP2: Vergleich der Leistungsfähigkeit von OpenFOAM und CFX
- AP3: Untersuchungen zu unfalltypischen Phänomenen bei reaktortypischen Randbedingungen und für anlagentypische Geometrie mit CFX

Im Arbeitspunkt AP1.1 wurden die Möglichkeiten zur Simulation eines Sumpfes in einem Containment mit CFX untersucht. Dabei wurden sowohl realistische Mehrphasensimulationen, als auch Rechnungen mit zwei vereinfachten Sumpfmolellen (Solid Block und Immersed Solid) durchgeführt und miteinander verglichen. Der Schwerpunkt lag dabei auf den Mehrphasensimulationen. Zu den durchgeführten Vergleichen zählen sowohl zwei Testbeispiele, wie auch die Experimente GES-Wanne und THAI TH-6.

Das Auffüllen eines Sumpfes hat in Testbeispielen gut funktioniert. Hier ist es nur für die Massenerhaltung wichtig, die Volume-Fraction-Kopplung einzuschalten. Auch bei der GES-Wanne hat die Berechnung der Temperaturschichtung gute Ergebnisse gezeigt. Der Versuch TH-6 konnte sowohl mit der Mehrphasensimulation als auch mit einer Simulation, bei der der Sumpf als Solid-Block simuliert wurde, in guter Übereinstimmung mit dem Experiment gerechnet werden. Bei der Simulation der Wassertemperatur gibt es Abweichungen. Diese können aber darauf zurückgeführt werden, dass unsicher ist, wo und mit welcher Temperatur das Kondensat in den Sumpf einfließt. Die Simulationen haben gezeigt, dass die Verwendung eines Solid Blocks anstelle des Sumpfwassers eine gute Möglichkeit ist, wenn der Sumpffüllstand vorgegeben und einigermaßen konstant ist. Hier gibt es die wenigsten numerischen Schwierigkeiten und der Wärmeaustausch sowie die Kondensation an der Sumpfoberfläche können sehr gut simuliert werden. Hierbei muss aber beachtet werden, dass innerhalb des Sumpfes kein konvektiver Wärmeaustausch simuliert werden kann. Sofern keine homogene Temperaturverteilung vorliegt, ist davon auszugehen, dass die Oberflächentemperatur des Sumpfes nicht exakt berechnet werden kann. Ist eine genaue Berechnung der

Temperaturverteilung im Sumpf notwendig oder muss eine Änderung des Wasserstands genau simuliert werden, so sollte eine Mehrphasensimulation durchgeführt werden. In diesem Fall ist aber mit einer deutlichen Erhöhung der Rechenzeit zu rechnen.

Im Rahmen des Arbeitspunkts AP1.2 geht es um den Test von unterschiedlichen Wandfunktionen im Fall von Wandkondensation. Im Rahmen des Vorhabens 1501407 „Weiterentwicklung von CFD-Modellen zur 3D-Simulation der Wasserstoffverteilung im Sicherheitseinschluss“ wurden von der RWTH Aachen Wandfunktionen ausgewählt und implementiert, die den wandnahen Bereich der Strömung im Fall von Wandkondensation modellieren, wenn grobe Gitter verwendet werden sollen, die die Vorgänge nicht einzeln simulieren lassen. Nach umfangreichen Literaturrecherchen und Tests wurden die Sucec-Wandfunktionen als am geeignetsten für Containment-Anwendungen identifiziert. Im Rahmen dieses Arbeitspunktes wurden die Sucec-Wandfunktionen am Beispiel von drei CONAN-Versuchen und der Experimente TH2 und Panda4bis getestet. Drei CONAN-Versuche wurden mit CFX bei Verwendung des SST-Turbulenzmodells nachgerechnet, wobei jeweils die in CFX implementierten Wandfunktionen und die Sucec-Wandfunktionen zum Einsatz kamen. Durch eine Variation der Gitterfeinheit konnte untersucht werden, wie sich die Wandfunktionen bei unterschiedlicher Gitterfeinheit auswirken. Bei größeren Gittern konnte durch Verwendung der Sucec-Wandfunktion eine leichte Verbesserung bei der Vorhersage der Wandkondensationsrate und auch bei dem Oberflächentemperaturprofil erzielt werden. Es verbleibt aber in allen Fällen noch eine unterschiedlich große Abweichung von den experimentellen Werten. Das Panda4bis-Experiment wurde sowohl mit dem in CFX implementierten „Automatic Wall Treatment“ als auch mit den Sucec-Wandfunktionen simuliert. Es kamen vier unterschiedliche CFD-Gitter zum Einsatz, bei denen die Gitterfeinheit in Wandnähe von  $5.0e-4$  m bis 0.02 m variiert wurde. Alle Simulationen liefern sehr ähnliche Simulationsergebnisse für die integrale Wandkondensationsrate, für die Dampfkonzentrationen und für die Temperaturen an den Messstellen. Bei einem gegebenen CFD-Gitter unterscheiden sich die Ergebnisse, die mit den in CFX implementierten Wandfunktionen erzielt werden, nur minimal von denen, die mit den Sucec-Wandfunktionen berechnet werden. Die Nachrechnung des TH-2 Experiments hat ebenfalls keine signifikanten Unterschiede zwischen der Simulation mit den in CFX implementierten Wandfunktionen und den Sucec-Wandfunktionen gezeigt.

Zusammenfassend kann für diesen Arbeitspunkt festgestellt werden, dass die Sucec-Wandfunktionen für die Simulation von containmenttypischen CFD-Anwendungen geeignet sind, allerdings ist die Verbesserung, die mit ihnen erzielt werden kann, eher als

gering einzuschätzen. Weitere Modellverbesserungen sind deshalb notwendig. An der RWTH Aachen/FZ Jülich laufen gegenwärtig umfangreiche experimentelle und analytische Arbeiten.

Ziel des Arbeitspunktes AP1.3 ist es, die von ANSYS/IKE Stuttgart entwickelten Volumenkonduktionsmodelle zu testen und ein Modell für die weiteren Arbeiten auszuwählen und zu validieren. Nach ersten Tests wurde das „1-Fluid“-Modell (Wassertröpfchen sind zusätzliche Komponente) ausgewählt, da beim „2-Fluid“-Modell (mehrphasige CFX-Simulation) die Rechenzeit deutlich höher ist und von einer ausreichenden Genauigkeit beim 1-Fluid-Modell ausgegangen werden kann. Bei diesem Volumenkonduktions-/Verdampfungsmodell ist die Tröpfchengröße ein zentraler Parameter, der vom Nutzer gewählt werden muss. Sie bestimmt, wie schnell die Kondensations- und Verdampfungsvorgänge ablaufen. Experimentelle Daten zur Tröpfchengröße sind nur im geringen Umfang vorhanden. Die Daten deuten darauf hin, dass in vielen Fällen eine in etwa konstante Tröpfchengröße von wenigen  $\mu\text{m}$  realistisch ist.

Es hat sich gezeigt, dass sich die benötigte Rechenzeit stark erhöht, falls kleinere Tröpfchendurchmesser ( $d < 200 \mu\text{m}$ ) verwendet werden. Das Absinken von Tröpfchen kann auch beim „1-Fluid“-Modell mit Hilfe des Algebraic Slip Modells (ASM) modelliert werden. Es wurde angenommen, dass für einen Tröpfchenmassenbruch, der kleiner als 0.05 ist, der für das ASM-Modell spezifizierte Tröpfchendurchmesser  $1 \mu\text{m}$  beträgt. Bei höheren Konzentrationen steigt er an, was eine höhere Sinkgeschwindigkeit zur Folge hat. Eine weitere Überprüfung dieser Annahme durch experimentelle Daten und Versuchsnachrechnungen ist notwendig. Es wurden einige Modellmodifikationen vorgenommen (Annahme einer minimalen Phasengrenzfläche, Unterdrückung der Volumenkonduktion in unmittelbarer Wandnähe etc.). Mit den Modellmodifikationen wurde das Panda4bis-Experiment erfolgreich nachgerechnet. Der Einfluss des Volumenkonduktions-/Verdampfungsmodells auf die Temperatur und die Dampfkonzentration an den Messstellen war aber eher gering. Eine Validierung anhand von TH-2 zeigt eine geringfügige Verbesserung bei der Vorhersage der Temperatur insbesondere in mittlerer Behälterhöhe. Der Versuch TH-24 konnte ebenfalls erfolgreich mit dem modifizierten Volumenkonduktions- und Verdampfungsmodell nachgerechnet werden. Hier zeigten sich ähnliche Ergebnisse bei Temperatur und Gaszusammensetzung wie bei älteren Simulationen mit dem GRS-Volumenkonduktionsmodell.

In AP1.4 wird das bestehende GRS PAR-Modell so erweitert, dass es zusammen mit dem Volumenkonduktionsmodell in CFX genutzt werden kann. Gegenwärtig stehen



der GRS keine Versuchsdaten zur Verfügung, bei denen der Einfluss von Wassertröpfchen auf das Abbauverhalten eines aktiven PARs gemessen wurde. Deshalb wurden einfache Modellannahmen gewählt, wie z. B. dass bei niedrigen Tröpfchenkonzentrationen alle Tröpfchen im PAR verdampfen. Das erweiterte PAR-Modell wurde durch Stand-Alone-Simulationen verifiziert und durch mehrere CFX-Simulationen wurde die Kopplung des erweiterten PAR-Modells mit CFX überprüft.

Ziel der in Arbeitspunkt AP1.5 durchgeführten Arbeiten war es, zu untersuchen, inwieweit sich das Aerosol- und Spaltproduktverhalten im Sicherheitseinschluss mit CFD-Simulationen sinnvoll und hinreichend abbilden lässt. Hierzu wurden unterschiedliche Phänomene (Ausbreitung, Sedimentation, Agglomeration, Edelgase, Zerfallswärme) einzeln als auch in Kombination untersucht. Zu den Phänomenen Sedimentation und Ablagerung von Aerosolpartikeln wurden Berechnungen mit einer vereinfachten Testgeometrie sowie die Nachrechnung eines KAEVER-Versuches durchgeführt. Es zeigt sich, dass die Ablagerung dem Stokes-Gesetz folgt. Im KAEVER-Versuch wird das Absinken der (luftgetragenen) Csl-Konzentration qualitativ richtig vorhergesagt. In CFX sinkt die Csl-Konzentration zwar etwas schneller als im Experiment, da es aber noch eine Reihe von (experimentellen) Unsicherheiten gibt, ist das Ergebnis aber auf jeden Fall trotzdem zufriedenstellend.

Zum Aspekt der Ausbreitung von Aerosolen mit der Gasströmung wurde das Verhalten in einem Aerosolspektrometer simuliert, die Nachrechnung eines Versuches aus der STORM-Versuchsreihe durchgeführt sowie das Verhalten von Partikeln in einer Impaktorstufe berechnet. Bei der Simulation des Aerosolspektrometers zeigte die CFX-Rechnung das Partikelverhalten bzw. die Reichweite, wie sie auch theoretisch vorhergesagt wird. Diese Aussage stimmt sowohl für das Algebraic Slip Modell als auch für das Lagrange Particle Tracking, die beide für die Simulation des Aerosolspektrometers verwendet wurden. Bei der Simulation des STORM-Versuches musste noch ein zusätzliches Modell zur Beschreibung der Thermophorese implementiert werden. Mit dieser Ergänzung konnte dann das Ausbreitungs- und Ablagerungsverhalten der Aerosole in guter Übereinstimmung mit dem Versuch berechnet werden.

Beim Impaktor spielt zusätzlich zur Ausbreitung auch noch die Trägheit der Partikel eine Rolle. In diesem Fall zeigte sich eine bessere Übereinstimmung mit dem theoretischen Verhalten bei einer Verwendung des Lagrange Particle Tracking Modells. Die Agglomeration von Aerosolpartikeln wurde anhand eines Testbeispiels mit einem zweifach umgelenkten Gasstrom untersucht. Anhand dieses Beispiels konnte gezeigt wer-

den, dass sich eine partikelzahlabhängige Agglomerationsrate berechnen lässt. Mit Hilfe dieses Wertes kann man dann in CFX den Übergang von einer Partikel(-größen-)klasse in eine andere Größenklasse beschreiben. Die einzelnen Größenklassen werden dabei von unterschiedlichen CFX-Komponenten repräsentiert, was auch den Rechenaufwand erhöht. Zur Beschreibung des Überganges zwischen den Größenklassen werden in CFX Quell-Terme und Senken verwendet. Die Berechnung des Testbeispiels zeigte plausible Ergebnisse.

Die Ausbreitung von Edelgasen mit der Gasströmung wurde durch die Einspeisung von Xenon in ein Testvolumen analysiert. An diesem Beispiel wurde auch der Einfluss der vom Xenon abgegebenen Zerfallswärme an die Behälteratmosphäre untersucht. Grundsätzlich lässt sich die Ausbreitung von radioaktiven Edelgasen sehr gut mit CFX berechnen. Einziger Unterschied zu anderen Gasen ist die frei werdende Zerfallswärme. Wird diese Wärme in Form von  $\alpha$ - oder  $\beta$ -Strahlung frei, so kann diese Wärmeabgabe in CFX als volumetrische Wärmequelle am Freisetzungsort modelliert werden. Dies wurde im Testbeispiel durchgeführt. Handelt es sich um  $\gamma$ -Strahlung, so kann diese ähnlich wie Wärmestrahlung mit Hilfe des in CFX bereits vorhandenen „Radiation-Heat-Transfer“-Modells beschrieben werden.

Es zeigte sich in dem Testbeispiel, dass die Abgabe von Zerfallswärme einen deutlichen Einfluss auf alle thermodynamischen Größen (Temperaturen, Druck, Gaskonzentrationen) hat. Dies ist ein wichtiges Argument für eine Berücksichtigung der Spaltprodukte und ihrer Zerfallswärme bei einer Containment-Simulation. In einer weiteren Testrechnung wurde die kombinierte Freisetzung sowohl von Aerosolen (CsI), als auch von radioaktiven Edelgasen in den THAI-Behälter und die damit verbundene Spaltproduktverteilung und auch deren Wärmeabgabe simuliert. Hierbei zeigte sich, dass sich diese Prozesse auch ohne eine signifikante Erhöhung der Laufzeiten für die Berechnung integrieren lassen. Ob diese Aussage zu den Laufzeiten nur für das vorliegende Beispiel gilt oder allgemein, kann aber noch nicht gesagt werden. Grundsätzlich zeigt sich, dass sich einige wesentliche Aspekte des Spaltproduktverhaltens im Containment sinnvoll mit CFX abbilden lassen. Hierzu stehen insbesondere zwei Modelle (Algebraic-Slip und Lagrange Particle Tracking) zur Verfügung, die unterschiedliche Stärken und Schwächen aufweisen.

In AP1.6 hat die GRS durch Simulation von 4 Experimenten (PANDA HP1\_2 und HP1\_6, MISTRA HM1-1 sowie OECD-PSI Benchmark) die Berechnung von Schichtungsauflösungen mit CFX validiert. Die Experimente unterscheiden sich hinsichtlich

der Geometrie, insbesondere hinsichtlich des erodierenden Gasstrahls. Bei den Simulationen wurden die in RS1500 als geeignet identifizierten Modelle und Parameter (SST-Turbulenzmodell, Diffusionskoeffizient nach Fuller, Berücksichtigung der Wärmestrahlung, ...) verwendet und Parametervariationen durchgeführt. Bei allen Versuchen konnte die Schichtungsauflösung erfolgreich nachgerechnet werden.

Beim OECD-PSI Benchmark konnte die Schichtungsauflösung in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden, bei den Experimenten HP1\_2 und HP1\_6 erfolgt die Schichtungsauflösung etwas schneller als im Experiment. Bei den Experimenten mit Dampfeinspeisung wurde die Modellierung der Wärmestrahlung als sensitiver Parameter identifiziert. Nur bei Berücksichtigung der Wärmestrahlung konnte die Temperatur in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden. Bei Vernachlässigung der Wärmestrahlung erfolgte auch die simulierte Schichtungsauflösung signifikant langsamer als im Experiment gemessen.

Bei den Experimenten HP1\_2 und HP1\_6 wurde die Modellierung des Einlassrohres variiert. Es zeigt sich, dass je nach Vereinfachung bei der Rohrgeometrie (Berücksichtigung der Rohrkrümmung ja/nein, Veränderung der Rohrlänge) ein anderes Geschwindigkeitsfeld am Rohrauslass vorliegt und dass dies auch die Schichtungsauflösung deutlich beeinflusst.

Im Arbeitspunkt AP 1.6 wurde die Verbrennungssimulation von H<sub>2</sub>/Luft-Gemischen mit CFX validiert. Bei der Verbrennungsmodellierung wird das Burning-Velocity-Modell verwendet. Bei diesem Modell wird die turbulente Flammengeschwindigkeit durch eine Korrelation modelliert. Fokus der hier vorgestellten Arbeiten war die Erprobung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit. Insbesondere wurden Korrelationen untersucht, bei denen der Effekt von thermo-diffusiven Flammeninstabilitäten aufgrund von  $Le < 1$  berücksichtigt wurde. Neben Korrelationen aus der Literatur (Dinkelacker, Peters, Zimont) wurde auch getestet, ob durch Erweiterung der Peters-Korrelation um einen zusätzlichen Term, der diesen Lewis-Zahl-Effekt modelliert, eine Verbesserung erzielt werden kann. Dazu wurden unterschiedliche Versuche nachgerechnet. Die Versuche unterscheiden sowohl in der Geometrie als auch in der H<sub>2</sub>-Konzentration. Bei den THAI-HD-Versuchen (HD-7, HD-10 und HD-12) verläuft die Verbrennung langsam, die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit beträgt wenige Meter pro Sekunde. Bei dem simulierten Versuch an der ENACCEF-Versuchsanlage mit 13 Vol.-% H<sub>2</sub> werden dagegen Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten von mehreren 100 m/s gemessen. Es wurden auch andere Effekte untersucht wie der Einfluss des

Zündortes (aufwärts gerichtete Verbrennung HD-7, HD-12; abwärts gerichtete Verbrennung HD-10) und der Einfluss von seitlichem Venting (ProScienceV15). Dadurch wurde sichergestellt, dass die Gültigkeit der Korrelationen für einen weiten Geltungsbe- reich untersucht wurde.

Bei allen Korrelationen geht die laminare Flammengeschwindigkeit als zentraler Para- meter ein. Deshalb wurden unterschiedliche Korrelationen für die laminare Flammen- geschwindigkeit mit experimentellen Werten verglichen. Für die weiteren Arbeiten wur- de eine Approximation aus der Dissertation von Ettner ausgewählt. Da diese nur für  $H_2$ /Luft-Verbrennungen gültig ist, wurde die Approximation um einen Term erweitert, der den Einfluss von Wasserdampf auf die laminare Flammengeschwindigkeit berück- sichtigt.

Zusammengefasst kann festgestellt werden, dass bei langsamen Verbrennungspro- zessen (z. B. THAI-HD) die Berücksichtigung der thermo-diffusiven Flammeninstabilitä- ten durch einen Faktor  $Le^{-1}$  zu einer besseren Übereinstimmung führt. Bei schnellen turbulent beschleunigten Verbrennungen wie beim simulierten ENACCEF-Versuch lie- fern die Korrelationen Peters bzw. Zimont bessere Ergebnisse. Bei Berücksichtigung von thermo-diffusiven Flammeninstabilitäten durch einen zusätzlichen Faktor (z. B.  $Le^{-1}$ ) wird die Verbrennungsgeschwindigkeit bei diesen Versuchen deutlich über- schätzt. Bei ProScienceV15 liegt die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit zwischen diesen beiden Extremen. Hier führt ein geringerer Vorfaktor von  $Le^{-0.6}$  zu einer guten Übereinstimmung. Ohne Zusatzfaktor wird die Brenngeschwindigkeit deutlich unter- schätzt, bei einem Faktor von  $Le^{-1}$  dagegen überschätzt. Mit diesen hier gewonnenen Erkenntnissen ist es möglich, je nach Verbrennungsregime des Versuchs eine geeig- nete Korrelation zu wählen. Für Containmentsimulationen ist diese Vorgehensweise al- lerdings unbefriedigend, da unterschiedliche Verbrennungsregimes vorliegen können. Hier wäre es wichtig, ein (lokales) Kriterium zu finden, dass es CFX erlaubt, den Expo- nenten beim zusätzlichen Term entsprechend zwischen 0 und -1 zu wählen.

Die GRS hat sich im Rahmen dieses Arbeitspunktes mit CFX-Simulationen auch an der offenen Phase des ETSON-MITHYGENE-Verbrennungsbenchmark beteiligt. Es wurde ein an der ENACCEF2-Anlage durchgeführter Versuch nachgerechnet bei dem 13 vol%  $H_2$  in Luft verbrannt werden. Entsprechend den Erkenntnissen aus den voran- gegangenen Untersuchungen wurden die Simulationen mit der Peters- und der Zimont- Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit durchgeführt. Beide Simulatio- nen berechnen sehr ähnliche Ergebnisse. Beim Vergleich der Flammenausbreitungs-

geschwindigkeit zeigt sich eine relativ gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Die kurzzeitigen Druckpeaks konnten qualitativ und quantitativ in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden, wenn die Messunsicherheiten und die Reproduzierbarkeit des Experiments berücksichtigt werden.

Ebenfalls wurde ein Ansatz zur Beschreibung der turbulenten Flammenverlöschung durch einen Flammenstreckungsfaktor  $G$  untersucht. Dazu wurde ein ENACCEF-Versuch nachgerechnet, bei dem ein Verlöschen der Flamme beobachtet wurde. Die Untersuchung hat gezeigt, dass durch Reduzierung des kritischen Grenzwertes  $G_{crit}$  eine deutliche Verlangsamung der Flammenausbreitung erzeugt werden kann. Bei Wahl eines von der  $H_2$ -Konzentration abhängigen Wertes für  $G_{crit}$  können einige Messwerte (z. B. Druck) zufriedenstellend simuliert werden. Eine Verlöschung wie im Experiment ist mit diesem Modell allerdings nicht möglich, da in CFX nur eine Verringerung der Verbrennungsgeschwindigkeit abhängig von der lokalen Flammenstreckung zum jeweiligen Zeitpunkt stattfindet.

Ziel der Arbeiten im Arbeitspunkt AP2 des Vorhabens war ein Vergleich der Leistungsfähigkeit der frei verfügbaren OpenSource-Software OpenFoam (Version 2.3.1) mit der kommerziellen Software Ansys CFX. Hierzu wurde zunächst der Aspekt der Gasverteilung und Schichtungsauflösung anhand dreier Experimente untersucht (THAI TH-26, ein OECD-Panda-Benchmark und ein Versuch an der MiniPanda-Anlage).

Bei der Erstellung der OpenFoam-Netze hat sich das mitgelieferte Programm SnappyHexMesh als gutes Werkzeug herausgestellt, das Netze von hoher Qualität erzeugen kann, allerdings hat auch SnappyHexMesh noch einige Schwächen (z. B. ungleichmäßige Verfeinerung in alle drei Raumrichtungen). Ein direkter Import bzw. eine Konversion von CFX-Netzen ist zwar auch möglich, allerdings hat OpenFoam bzgl. der Anforderung an die Orthogonalität des Berechnungsnetzes höhere Ansprüche als CFX und somit führte die Importierung zu Problemen. Dafür hat man mit OpenFoam aber auch die Möglichkeit, sogenannte hängende Knoten zu verwenden, was eine gute lokale Verfeinerung des Netzes ermöglicht, ohne die Orthogonalität zu gefährden.

Bei der Auswahl des passenden Solvers scheint der OpenFoam-Solver rhoReacting-BuoyantFoam am besten zu der vorliegenden Problemstellung (Leichtgasschichtung und Auflösung) zu passen. Nach einer ersten Berechnung hat sich allerdings gezeigt, dass OpenFoam eine zu schnelle Schichtungsauflösung im Vergleich zum Experiment vorhersagt. Als Ursache hierfür wurde das Fehlen eines Terms zur Erzeugung gravita-

tionsbedingter Turbulenz (Buoyancy-Turbulence) erkannt, und es konnte ein entsprechender Term nachträglich in die Turbulenzgleichungen implementiert werden. In einer darauf folgenden weiteren Nachrechnung ergab sich eine längere Auflösungszeit für die Gasschichtungen, die nun besser zum Experiment passt. Der zeitliche Verlauf der Heliumkonzentrationen ähnelt nun stark demjenigen, der von CFX berechnet wird (obschon es noch einige Unterschiede bzgl. Gitter, Zeitschritten, Berechnungsparameter gibt).

Anschließend wurde noch die Simulation eines Versuches an der MiniPanda-Anlage durchgeführt. Hier erforderte die schmale Geometrie des Einlassrohres dort sehr feine Zellen zu erstellen, was wiederum kleine Zeitschritte nötig machte. Im Rahmen einer Zeitschrittstudie konnte eine deutliche Abhängigkeit der Ergebnisse gefunden werden. Auch bei einer Courant-Zahl von 1 konnte noch keine Unabhängigkeit des Ergebnisses vom Zeitschritt festgestellt werden. Allerdings dauerte die Simulation dann so lange, dass von weiteren Zeitschrittverfeinerungen abgesehen werden musste. In einer Gitterstudie konnte gezeigt werden, dass der Einfluss des Gitters bei ca. 1 Millionen Zellen nur noch mäßig ist. Weiterhin zeigte sich ein deutlicher Einfluss des numerischen Parameters `nNonOrthogonalCorrectors`. Beim Vergleich der abschließenden Simulationen zeigte sich bei den Heliumkonzentrationen insgesamt schon eine gute Übereinstimmung der OpenFoam-Rechnungen sowohl mit den experimentellen Ergebnissen, als auch mit den CFX-Ergebnissen. Bei den Temperaturen zeigten sich in der Heliumschicht zu niedrige Werte und direkt unterhalb der Schicht zu hohe Werte in der OpenFoam-Rechnung. Es gibt noch weitere Phänomene aus dem Bereich der Containment-Simulationen, die im Rahmen der Projektaufstockung mit kleinen Beispielen getestet wurden. Dazu gehören unter anderem Wärmeaustausch mit Festkörpern (Conjugated Heat Transfer), Volumenkondensation sowie die Berechnung von thermischer Strahlung. Grundsätzlich scheint die Berechnung dieser Phänomene in OpenFOAM möglich zu sein. In RS1526 wurden hierzu nur erste oberflächliche Tests gemacht, eine tiefergehende Untersuchung und Validierung ist noch notwendig.

In diesem letzten Arbeitspunkt wurde die Simulation einer Gasverteilung und Sumpfbildung in einem KONVOI Containment beispielhaft untersucht. Zunächst wurde der CFX-Datensatz angepasst und eine Gitter- und Zeitschritt-Studie durchgeführt. Hier zeigen sich noch gewisse numerische Ungenauigkeiten. Diese konnten reduziert werden durch feinere Zeitschritte und ein feineres Gitter. Insbesondere die Gitterverfeinerung in der Gasphase erhöht aber die Rechendauer deutlich, so dass hier noch keine

vollständige Gitterunabhängigkeit erreicht werden konnte. Eine Gitterfeinheit von 2 mm in der Wand ist aber durchaus schon gut möglich.

Im Rahmen einer weiteren Studie wurde zusätzlich das IKE-Volumenkondensationsmodell verwendet. Dieses hat allerdings nur einen vergleichsweise geringen Einfluss auf den Störfall (Druck, Temperaturen, Gaskonzentrationen). Da gleichzeitig der Rechenaufwand und die numerische Stabilität leiden, ist fraglich ob die Verwendung dieses Modells sinnvoll ist.

In CFX wurde der Sumpf in zwei unterschiedlichen Rechnungen sowohl als Solid Block, als auch mit dem Multiphase-Modell simuliert. Ähnlich wie bei den Sumpfsimulationen im THAI-Behälter zeigt sich auch hier die Solid-Block-Rechnung deutlich schneller und stabiler als die Multiphase-Rechnung. Mit ihr kann zwar nicht der Einfluss der Volumenverdrängung beim Auffüllvorgang simuliert werden. Dieser Effekt ist aber vergleichsweise gering. Insgesamt hat der Sumpf in den CFX-Rechnungen die Wirkung einer Wärmesenke, die zu mehr Kondensation, niedrigeren Temperaturen in der Gasphase, niedrigerem Druck und Dampfgehalt, aber etwas höherer  $H_2$ -Konzentration in der Atmosphäre führt. Der Effekt des Sumpfes auf die Gasatmosphäre ist moderat.

Diese CFX-Rechnungen wurden mit Cocosys-Rechnungen verglichen. Hierzu wurde zu-nächst ein Cocosys-Datensatz mit einer mittleren Nodalisierung mit 34 Zonen verwendet. Auch mit diesem Datensatz wurde der Störfall jeweils mit und ohne Sumpfwasser berechnet. Insgesamt findet sich (trotz der Modellunterschiede) eine gute Übereinstimmung von CFX- und Cocosys-Ergebnissen. Sowohl der relative Effekt des Sumpfes auf die Atmosphäre, wie auch die absoluten Werte von Druck, Temperaturen und Gaskonzentrationen sind relativ ähnlich.

Zum Vergleich der Zustände im Sumpf wurden weitere Berechnungen durchgeführt. Hierbei wurde als Beispiel eine Schichtungsbildung simuliert. Für CFX wurde eine detaillierte Stand-Alone-Rechnung nur der Sumpfzone verwendet. Verglichen wurde diese mit einer gekoppelten Cocosys/CoPool-Rechnung. Um erste Erfahrung mit CoPool zu sammeln wurden hier zunächst einige Parameterstudien durchgeführt (Gitter, Zeitschritte, turbulente Viskosität). Diese haben einen moderaten Einfluss des Gitters und einen deutlichen Einfluss der turbulenten Viskosität auf das Schichtungsverhalten in CoPool gezeigt. Im Vergleich mit der CFX-Rechnung zeigt sich, dass es an den unterschiedlichen Monitorpunkten insbesondere eine gute Übereinstimmung mit der CoPool-Rechnung mit turbulenter Viskosität 0 Pas gibt. Bei den Rechnungen mit höherer

Viskosität entsteht eine zu starke Temperaturschichtung. Die Verteilung des heißen Wassers auf dem vorhanden kälteren Wasser konnte also mit guter Übereinstimmung von CFX und CoPool berechnet werden. Dieses Ergebnis ist sowohl für CFX als auch für CoPool eine gute Bestätigung.





## Anhang A

### Optimierte Einstellungen in der fv-Solution-Datei

```
PIMPLE
{
    momentumPredictor no;
    nOuterCorrectors 20;
    nCorrectors 1;
    nNonOrthogonalCorrectors 0;

    residualControl
    {
        HE
        {
            tolerance 1e-4;
            relTol 0.0;
        }
        p_rgh
        {
            tolerance 1e-4;
            relTol 0.0;
        }
        epsilon
        {
            tolerance 1e-5;
            relTol 0.0;
        }
        k
        {
            tolerance 1e-5;
            relTol 0.0;
        }
    }
}
```



## Literatur

- /ABD 13/ Abdo, D. et al.: MISTRA Facility Description, CEA 2013.
- /ADR 13/ Adreani, M.: OECD/NEA – PSI CFD Benchmark Specifications, Paul-Scherrer-Institut, 2013.
- /ALE 15/ Alengry, J., Studer, E., Ishigaki, M.: HM1-1 Benchmark Specifications, CEA 2015.
- /ALL 16/ Allelein, H. J., Lehmkuhl, J., Schulze, A., Kelm, S.: Weiterentwicklung von CFD Modellen zur 3D Simulation der Wasserstoffverteilung im Sicherheitseinschluss, Abschlussbericht zum Vorhaben 1501407.
- /AMB 09/ Ambrosini, W., Bucci, M., Forgone, 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, Universität di Pisa, 2009.
- /AMO 12/ Amouzandeh, A.: Development and Application of a Computational Fluid Dynamics Code to Predict the Thermal Impact on Underground Structures in Case of Fire, Dissertation am Institut für Mechanik der Werkstoffe und Strukturen der TU Wien, 2012.
- /AND 13/ Andreani, M. et al.: OECD/NEA–PSI CFD BENCHMARK SPECIFICATIONS, PSI 2013.
- /AND 14/ Andreani, M., Badillo, A., Kapulla, R.: SYNTHESIS OF THE OECD/NEA-PSI CFD BENCHMARK EXERCISE, CFD4-NRS-5 2014.
- /AIS 15/ Abe, S., Ishigaki, M., Sibamoto, Y., Yonomoto, T.: RANS analyses on erosion behavior of density stratification consisted of helium–air mixture gas by a low momentum vertical buoyant jet in the PANDA test facility, the third international benchmark exercise (IBE-3), Nuclear Engineering and Design 289, 2015.

- /AUB 05/ Auban, O. et al.: PANDA Test Facility Description and Geometrical Data, Paul Scherrer Institut, 2005.
- /BEN 04/ Bentaib, A.: Specification of ENACCEF benchmark exercise relative to hydrogen combustion, 2004.
- /BEN 11/ Bentaib, A., Chaumeix, N.: SARNET H<sub>2</sub> Combustion Benchmark: Specification of ENACCEF test Diluent effect on flame propagation, 2011.
- /BEN 17/ Bentaib, A., Chaumeix, N.: Specification report for Double Blind simulations of Flame propagation in the new ENACCEF2 facility, 2017.
- /BRA 92/ Bradley, D.: How fast can we burn? Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pages 247–262, 1992.
- /BRE 99/ Breitung et al.: State of the art report on Flame Acceleration and Deflagration-to-Detonation Transition in Nuclear Safety, 1999.
- /CAC 07/ De Cachard et al.: Large-Scale experimental investigation of gas mixing and stratification in LWR containments, Final Report, Paul Scherrer Institut, 2007.
- /CAS 99/ De Los Reyes Castelo, A. et al: International Standard Problem 40 – Aerosol Deposition and Resuspension, February 1999, EUR 18708 EN.
- /CFX 16/ CFX-16 User Manual.
- /CHA 12/ Chaumeix, N., Bentaib, A.: Laminar flame velocity correlation Effect of diluents, IRSN 2012.
- /DEV 14/ Devendish, B. J. et al.: Droplet growth in warm turbulent Clouds, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 138, 1401-1429 (2012).
- /DIL 98/ Dilara, P. et al: STORM Test SR11 – ISP 40 – Quick Look Report, April 1998.

- /DIN 11/ Dinkelacker, F. et al.: Modelling and Simulation of Lean Premixed Turbulent Methane/Hydrogen/Air Flames with an Effective Lewis Number Approach, Combustion and Flame Volume 158, 2011.
- /DRI 08/ Driscoll, J.: Turbulent premixed combustion: Flamelet structure and its effect on turbulent burning velocities, Progress in Energy and Combustion Science 34, 2008.
- /ETT 13/ Ettner, F.: Effiziente numerische Simulation des Deflagrations- Detonations-Übergangs, Dissertation Technische Universität München, 2013.
- /FIS 11/ Freitag, M., Gupta, S.: Specification Report for Blind Simulations of THAI Test TH-24 (CFD V5) – Dissolution of a Steam Stratification by Natural Convection, Becker Technologies GmbH, Eschborn, October 2011.
- /FRE 12/ Freitag, M., Fischer, K.: Unterstützende Arbeiten zur Entwicklung eines mehrdimensionalen Poolmodells, Abschlussbericht BT-70148-1, Becker Technologies GmbH, Eschborn, Februar 2012.
- /FRI 16/ Friedrich, A. et al.: Entwicklung von Kriterien für Flammenbeschleunigung und Detonationsübergang - Phase II: Untersuchungen für reaktor-nahe Bedingungen mit verschiedenen H<sub>2</sub>-Anfangsverteilungen, Hinderisgeometrien und Zündorten, ProScience Abschlussbericht, 2016.
- /GES 10/ Grieme, Fischer: Versuche zur mehrdimensionalen Temperaturmessung bei Kalt- und Warmwassereinspeisung in eine Stahlwanne, Technischer Bericht Nr. 09/12, GES, Januar 2010.
- /GRO 17/ Grosseuvres, R., Chaumeix, N., Bentaib, A.: Pressure Profiles Measurement in ENACCEF Facility for Fast Flame Propagation, NURETH, 2017.
- /GRS 89/ GRS: Deutsche Risikostudie – Phase B, Verlag TÜV Rheinland, 1989.
- /HIN 99/ Hinds, W. C.: Aerosol Technology, Verlag John Wiley & Sons, 1999, S.46.

- /IIJ 86/ Iijima, T., Takeno, T.: Effect of Temperature and Pressure on Burning Velocity, Combustion and Flame 1986.
- /JOR 99/ Jordan, M.: Zündung und Verbrennung in vorgemischten turbulenten Freistrahlen, Doktorarbeit, TU München, 1999.
- /KAN 03/ Kanzleiter, T. et al.: Abschlussbericht – Versuchsanlage und Programm zur Untersuchung offener Fragen zum Spaltproduktverhalten im Sicherheitsbehälter, Teil 1: Versuchsanlage und Thermohydraulik-Versuche, Becker Technologies GmbH, Eschborn, Oktober 2003.
- /KAN 08/ Kanzleiter, T., Langer, G.: Quick Look Report Hydrogen Deflagration Tests HD-2R and HD-12, Becker Technologies GmbH Report No. 150 1326–HD-QLR 1, 2008.
- /KAN 08b/ Kanzleiter, T., Langer, G.: Quick Look Report Hydrogen Deflagration Tests HD-1R, HD-4, HD-7, HD-8 and HD-10, Becker Technologies GmbH Report No. 150 1326–HD-QLR 2, 2008.
- /KAN 09a/ Kanzleiter, T.: Quick Look Report Hydrogen Recombiner Tests HR-1 to HR-5, HR-27 and HR28, Becker Technologies 2009.
- /KAN 09b/ Kanzleiter, T.: Quick Look Report Hydrogen Recombiner Tests HR-6 to HR-13, HR-29 and HR30, Becker Technologies 2009.
- /KEL 12/ Kelm, S. et al.: Specification and Proposal for the MiniPanda – Layer Breakup Evaluation and Code Benchmark, ETH Zürich und FZ Jülich, 2012.
- /KEL 15/ Kelm, S., Lehmkuhl, J.: Projekttreffen Jülich 2015.
- /KON 08/ Konnov, A.: Remaining Uncertainties in the Kinetic Mechanism of Hydrogen, Combustion. Combustion and Flame, 154:507–528, 2008.
- /LAN 74/ Launder, B. E., Spalding, D. B.: The numerical computation of turbulent flows, Comp Meth Appl Mech Eng, 3:269-289, 1974.
- /LAU 14/ E. Laurien, Vortrag CFD-Verbundtreffen, 2014 Köln

- /LEH 14/ Lehmkühl et al.: Improvement of Wall Condensation Modeling with Suction Wall Functions for Containment Application, CFD4NRS, Zurich, Sept 2014.
- /LIU 83/ Liu, D.D.S., MacFarlane, R.: Laminar burning velocities of Hydrogen-Air-Steam Flames, Combustion and Flame 49:59-71,1983.
- /NEE 97/ Neeb, K. H.: The Radiochemistry of Nuclear Power Plants with Light Water Reactors, Walter de Gruyter (Verlag), 1997.
- /NUC 15/ Decay schemes: <http://www.nucleonia.net>, abgefragt am 29.5.2015.
- /PAR 14/ Paranjape, S. et al.: OECD/NEA HYMERES PROJECT – PANDA Test HP1\_2 Quick-Look Report, Paul Scherrer Institut, Switzerland, April 2014.
- /PAR 15/ Paranjape, S., Fehlmann, M., Kapulla, R., Mignot, G., Suter, S., Andreani, M., Paladino, D.: OECD/NEA HYMERES Project: PANDA Test HP1\_6\_2 specifications for the blind benchmark with initial and boundary conditions, Paul Scherrer Institut, 2015.
- /PAR 15b/ Paranjape, S., Fehlmann, M., Kapulla, R., Mignot, G., Suter, S., Paladino, D.: OECD/NEA HYMERES Project: PANDA Test HP1\_6\_2 Quick-Look Report, Paul Scherrer Institut, 2015.
- /PET 00/ Peters, N.: Turbulent Combustion, Cambridge University Press, Cambridge, England, 2000.
- /PSO 15/ Das Periodensystem online (Xenon-133), abgefragt am 29.5.2015: <http://www.periodensystem-online.de/>.
- /POS 97/ Poss, G. et al: Versuche zum Verhalten von Kernschmelzaerosolen im LWR-Containment – KAEVER, Abschlussbericht zum BMBF Forschungsvorhaben 1500890, Battelle-Ingenieurtechnik GmbH, 1997.
- /SAT 12/ Sathiah, P. et al.: The role of CFD combustion modelling in hydrogen safety management II, Nuclear Engineering and Design, 2012.



- /SCH 10/ Schramm, B., Stewering, J., Sonnenkalb M.: Qualifizierung von CFX für die Simulation der Thermohydraulik im Sicherheitseinschluss, Abschlussbericht RS1181, GRS-A-3554, Juli 2010.
- /SCH 14/ Schramm, B., Stewering, J., Sonnenkalb, M.: Erprobung und Validierung von CFD-Codes für die Simulation von unfalltypischen Phänomenen im Sicherheitseinschluss, Abschlussbericht RS1500, GRS-324, März 2014.
- /SCH 15/ Schwarz, S., Sonnenkalb, M.: Bericht zum Vorhaben „Analyse der Belastung von Gleitdruckventuriwäschern in SHB-Ventingsystemen von DWR-Konvoi und SWR-72 bei Unfällen“, GRS-A-3791, 2015, S. 58.
- /SCH 16/ Schramm, B., Stewering, J., Sonnenkalb, M.: Einsatz von CFD-Codes für die Simulation von unfalltypischen Phänomenen im Sicherheitseinschluss: Validierung und gezielte Modellerweiterung, Zwischenbericht RS1526, GRS - A - 3860, Mai 2016.
- /VER 10/ Verhelst, S. et al.: A correlation for the laminar burning velocity for use in hydrogen spark ignition engine simulation, international journal of hydrogen energy 2011.
- /WIK 15a/ Bernoulli: Gesetz der großen Zahlen, abgefragt am 29.05.2015, [http://de.wikipedia.org/wiki/Gesetz\\_der\\_gro%C3%9Fen\\_Zahlen](http://de.wikipedia.org/wiki/Gesetz_der_gro%C3%9Fen_Zahlen).
- /WIK 15b/ Caesium iodide: Density, abgefragt am 29.5.2015, [https://en.wikipedia.org/wiki/Caesium\\_iodide](https://en.wikipedia.org/wiki/Caesium_iodide).
- /WIL 13/ Wilkening, H., Ammirabile, L.: Simulation of helium release in the Battelle Model Containment facility using OpenFOAM, Nuclear Engineering and Design 265, 2013.
- /ZBO 06/ Zboray, R. et al.: PANDA Test 4 bis-1 Quick-Look Report, Paul Scherrer Institut, 2006.
- /ZEM 10/ Zemitis, A., Iliev, O., Steiner, K.: On validation on simulations of thermal stratification on coarse grid using CoPool software, Technical Report, Fraunhofer ITWM, October 2010.

- /ZHA 13/ Zhang, J., Laurien, E.: Numerical Simulation of Flow with Volume Condensation in a Model Containment, High Performance Computing in Science and Engineering 2013.
- /ZHA 14/ Zhang, J., Laurien, E.: Numerical Simulation of Flow with Volume Condensation in Presence of Non-condensable Gases in a PWR Containment, ICAPP 2014.
- /ZIM 98/ Zimont, V. L. et al.: An efficient Computational Model for Premixed Turbulent Combustion at High Reynolds Numbers Based on a Turbulent Flame Speed Closure, Engineering for Gas Turbines and Power (Transactions of the ASME), Vol. 120, pp. 526-532, 1998.
- /ZIM 99/ Zimont, V. L.: Gas Premixed Combustion at High Turbulence. Turbulent Flame Closure Combustion Model, Proceedings of the Mediterranean Combustion Symposium, Istituto di Richerche sulla Combustione – CNR, 1999.
- /ZIM 01/ Zimont, V. L. et al.: Modelling turbulent premixed combustion in the intermediate steady propagation regime, Progress in Computational Fluid Dynamics, Vol. 1, 2001.



## Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Testbeispiel für die Mehrphasenmodelle.....	5
Abb. 2.2	Auffüllvorgang der Testgeometrie .....	6
Abb. 2.3	Darstellung der Wasseroberfläche als Iso-Fläche .....	7
Abb. 2.4	Vergleich der integralen Wassermasse in der Simulation mit der spezifizierten Einspeisemenge.....	7
Abb. 2.5	GES-Wanne mit Einlass (roter Pfeil) und Überlauf (grüner Pfeil) .....	9
Abb. 2.6	Position und Nummerierung der Temperaturmessstellen.....	10
Abb. 2.7	Einspeisung und Ausbreitung von warmem Wasser in der GES-Wanne (CFX-Simulation) .....	12
Abb. 2.8	Temperaturverlauf an Messstelle 21 (nahe Einlass, Höhe: 0.95 m) .....	13
Abb. 2.9	Temperaturverlauf an Messstelle 10 (Mitte oben, Höhe: 0.95 m) .....	13
Abb. 2.10	Temperaturverlauf an Messstelle 12 (nahe Auslass, Höhe: 0.95 m) .....	14
Abb. 2.11	Temperaturverlauf an Messstelle 6 (Behältermitte, Höhe: 0.55 m).....	15
Abb. 2.12	Temperaturverlauf an Messstelle 1 (Behältermitte, Höhe: 0.05 m).....	15
Abb. 2.13	CFX-Validierung: Vertikales Temperaturprofil bei $t = 3550$ s (Experiment ohne Prallplatte).....	16
Abb. 2.14	Testbeispiel zur Kombination von Sumpf und Volumenkondensationsmodell.....	17
Abb. 2.15	Vergleich der unterschiedlichen Sumpfmodellierungen ( $t = 20$ s).....	18
Abb. 2.16	Dampfkonzentration kurz über der Sumpfoberfläche .....	19
Abb. 2.17	Integrale Volumenkondensationsrate.....	20
Abb. 2.18	Einschalten der Wandkondensation beim Solid-Block-Modell.....	21
Abb. 2.19	Vergleich der Rechenzeiten für 20 Sekunden Problemzeit .....	22
Abb. 2.20	Schnittdarstellung des Experimentes TH-6 .....	23
Abb. 2.21	Dampfeinspeisung in Experiment und Simulation .....	25
Abb. 2.22	Vergleich der unterschiedlichen Sumpfmodellierungen.....	26
Abb. 2.23	Rechenzeiten für 50 s Problemzeit bei unterschiedlicher Sumpfmodellierung.....	26

Abb. 2.24	Druckverlauf beim Experiment TH-6 .....	27
Abb. 2.25	Temperaturverlauf in 8.4 m Höhe .....	28
Abb. 2.26	Temperaturverlauf in 5.6 m Höhe .....	28
Abb. 2.27	Temperaturverlauf in 3.5 m Höhe .....	29
Abb. 2.28	Temperaturverlauf in 1.2 m Höhe .....	29
Abb. 2.29	Temperaturverlauf an der Sumpfoberfläche (0.4 m Höhe) .....	30
Abb. 2.30	Wassertemperatur im Sumpf in 0.3 m Höhe .....	31
Abb. 2.31	Wandtemperaturen in 5.6 m Höhe .....	31
Abb. 2.32	Temperatur an der Sumpfoberfläche (0.4 m) .....	33
Abb. 2.33	Temperatur innerhalb des Sumpfes (0.3 m).....	33
Abb. 3.1	Tangentialgeschwindigkeit $u$ in Abhängigkeit vom Wandabstand $y$ /CFX 16/ .....	38
Abb. 3.2	Strömungsgeschwindigkeit parallel zur Wand in Abhängigkeit vom Wandabstand .....	40
Abb. 3.3	Versuchsaufbau für die CONAN-Experimente (SARNET-Benchmark Nr. 2 / Bild: /AMB 09/) .....	41
Abb. 3.4	CFD-Gitter bei Nr. 2 (oben), Nr. 5 (Mitte), Nr. 8 (unten) .....	43
Abb. 3.5	Ausschnitt des CFD-Gitters an der Grenzfläche bei Gitter Nr. 8.....	44
Abb. 3.6	Residuum der Energiegleichung bei einer nicht konvergierten Simulation mit der Sucec-Wandfunktion .....	45
Abb. 3.7	Temperatur (oben) und Dampfmassenbruch (unten) .....	45
Abb. 3.8	P10T30V25: Oberflächentemperatur bei Verwendung der CFX- Wandfunktionen in Abhängigkeit vom CFD-Gitter .....	47
Abb. 3.9	P10T30V25: Oberflächentemperatur bei den CFX-Wandfunktionen und den Sucec-Wandfunktionen bei Verwendung des CFD-Gitters Nr. 5.....	47
Abb. 3.10	P10T30V25: Oberflächentemperatur bei den CFX-Wandfunktionen und den Sucec-Wandfunktionen bei Verwendung des CFD-Gitters Nr. 2.....	47
Abb. 3.11	P10T30V25: Kondensationsrate über der Zelldicke $dy$ der ersten Gaszelle (oben) und über $y^+$ (unten).....	48

Abb. 3.12	P20T30V25: Oberflächentemperatur bei Verwendung der CFX-Wandfunktionen in Abhängigkeit vom CFD-Gitter .....	49
Abb. 3.13	P20T30V25: Oberflächentemperatur bei den CFX-Wandfunktionen bei Verwendung der CFD-Gitter Nr. 9 und Nr. 9b .....	50
Abb. 3.14	P20T30V25: Oberflächentemperatur bei den CFX-Wandfunktionen und den Sucec-Wandfunktionen bei Verwendung des CFD-Gitters Nr. 5.....	50
Abb. 3.15	P20T30V25: Oberflächentemperatur bei den CFX-Wandfunktionen und den Sucec-Wandfunktionen bei Verwendung des CFD-Gitters Nr. 2.....	50
Abb. 3.16	P20T30V25: Kondensationsrate über der Zelldicke $dy$ der ersten Gaszelle (oben) und über $y^+$ (unten) .....	51
Abb. 3.17	P30T30V25: Oberflächentemperatur bei Verwendung der CFX-Wandfunktionen in Abhängigkeit vom CFD-Gitter .....	52
Abb. 3.18	P30T30V25: Oberflächentemperatur bei den CFX-Wandfunktionen und den Sucec-Wandfunktionen bei Verwendung des CFD-Gitters Nr. 5.....	52
Abb. 3.19	P30T30V25: Oberflächentemperatur bei den CFX-Wandfunktionen und den Sucec-Wandfunktionen bei Verwendung des CFD-Gitters Nr. 2.....	52
Abb. 3.20	P30T30V25: Kondensationsrate über der Zelldicke $dy$ der ersten Gaszelle (oben) und über $y^+$ (unten) .....	53
Abb. 3.21	Vereinfachte Geometrie des Panda4bis Experiments .....	55
Abb. 3.22	Schnitt durch den ersten PANDA-Behälter mit Darstellung einer Auswahl der Messpunkte.....	57
Abb. 3.23	CFD-Gitter in der Gas-Domain im 1. PANDA-Behälter bei den Gittern Nr. 1 (oben links), Nr. 2 (oben rechts), Nr. 3 (unten links) und Nr. 4 (unten rechts) .....	58
Abb. 3.24	Mittleres (oben) und maximales (unten) $y^+$ bei unterschiedlich feiner Gitterauflösung in Wandnähe (Auswertezeitpunkt $t = 2000$ s).....	61
Abb. 3.25	$y^+$ nach 1500 s bei der Simulation mit den Sucec-Wandfunktionen bei der Simulation mit $dy = 5.0e-3$ m .....	62
Abb. 3.26	Räumlich integrierte Wandkondensationsrate bei unterschiedlicher Gitterverfeinerung bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX .....	62

Abb. 3.27	Räumlich integrierte Wandkondensationsrate bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und $dy = 0.02 \text{ m}$ .....	63
Abb. 3.28	Räumlich integrierte Wandkondensationsrate bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und $dy = 5.0e-3 \text{ m}$ .....	63
Abb. 3.29	Räumlich integrierte Wandkondensationsrate bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und $dy = 1.0e-3 \text{ m}$ .....	64
Abb. 3.30	Räumlich integrierte Wandkondensationsrate bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und $dy = 5.0e-4 \text{ m}$ .....	64
Abb. 3.31	Räumlich und zeitlich integrierte Wandkondensationsrate bei unterschiedlicher Gitterfeinerung bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX .....	65
Abb. 3.32	Räumlich und zeitlich integrierte Wandkondensationsrate bei unterschiedlicher Gitterfeinerung bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX (Zeitbereich: 3000 s – 4000 s).....	65
Abb. 3.33	Räumlich und zeitlich integrierte Wandkondensationsrate bei Sucec-Wand-funktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und $dy = 5.0e-4 \text{ m}$ .....	66
Abb. 3.34	Räumlich und zeitlich integrierte Wandkondensationsrate bei Sucec-Wand-funktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und $dy = 1.0e-3 \text{ m}$ .....	66
Abb. 3.35	Räumlich und zeitlich integrierte Wandkondensationsrate bei Sucec-Wand-funktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und $dy = 5.0e-3 \text{ m}$ .....	67
Abb. 3.36	Räumlich und zeitlich integrierte Wandkondensationsrate bei Sucec-Wand-funktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und $dy = 0.02 \text{ m}$ .....	67
Abb. 3.37	Volumenkondensationsrate bei unterschiedlicher Gitterverfeinerung bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX.....	68
Abb. 3.38	Molenbruch des Dampfes bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und $dy = 5.0e-4 \text{ m}$ .....	68
Abb. 3.39	Molenbruch des Dampfes bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic-Walltreatment“ in CFX und $dy = 1.0e-3 \text{ m}$ .....	69

Abb. 3.40	Molenbruch des Dampfes bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic-Walltreatment“ in CFX und $dy = 5.0e-3$ m.....	69
Abb. 3.41	Molenbruch des Dampfes bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic-Walltreatment“ in CFX und $dy = 0.02$ m .....	70
Abb. 3.42	Molenbruch des Dampfes bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic-Walltreatment“ in CFX und $dy = 5.0e-4$ m.....	70
Abb. 3.43	Molenbruch des Dampfes bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic Wall Treatment“ in CFX und $dy = 1.0e-3$ m.....	71
Abb. 3.44	Molenbruch des Dampfes bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic-Walltreatment“ in CFX und $dy = 5.0e-3$ m.....	71
Abb. 3.45	Molenbruch des Dampfes bei Sucec-Wandfunktionen und „Automatic-Walltreatment“ in CFX und $dy = 0.02$ m .....	72
Abb. 3.46	Integrale Wandkondensationsrate mit CFX- und FZJ-Wandfunktionen ....	74
Abb. 3.47	Integrale Volumenkondensationsrate.....	74
Abb. 3.48	Druckverlauf .....	75
Abb. 3.49	Temperaturverlauf in 8.4 m Höhe .....	75
Abb. 3.50	Temperaturverlauf in 6.3 m Höhe .....	76
Abb. 4.1	TH-7: FASP-Messung (Höhe 8.4 m; Radius 0.7 m) .....	84
Abb. 4.2	TH23.3: FASP-Messung (Höhe 4.2 m, Radius 1.42 m).....	84
Abb. 4.3	TH23.4: FASP-Messung (Höhe 4.2 m, Radius 1.42 m).....	85
Abb. 4.4	TH23.3: FASP-Messung (Höhe 4.2 m, Radius 1.42 m).....	85
Abb. 4.5	Sinkgeschwindigkeit von Tröpfchen nach der Stokes-Korrelation und bei CFX-Simulation mit dem Algebraic-Slip-Modell .....	87
Abb. 4.6	Thermische $T_{th}$ und dynamische Antwortzeit $T_{dyn}$ in Abhängigkeit vom Tröpfchendurchmesser /LAU 14/ .....	87
Abb. 4.7	Dampfkonzentration und Temperatur über der Zeit.....	90
Abb. 4.8	Abhängigkeit der Zeit bis zum Einstellen des Gleichgewichts vom initialen Wasseranteil (Tropfendurchmesser 0.2 mm) .....	91
Abb. 4.9	Abhängigkeit der Zeit bis zum Einstellen des Gleichgewichts vom Tropfendurchmesser (initialer Wasseranteil $1.0e-5$ ).....	92
Abb. 4.10	Vereinfachte Geometrie des Panda4bis Experiments .....	93



Abb. 4.11	Schnitt durch den ersten PANDA-Behälter. Dargestellt ist eine Auswahl der Messpunkte.....	93
Abb. 4.12	In den Parameterstudien verwendetes CFX-Gitter.....	94
Abb. 4.13	Volumenkondensationsrate bei unterschiedlichem Tröpfchenradius und unterschiedlichen Einspeisebedingungen .....	97
Abb. 4.14	Temperaturverlauf an den Messpunkten D1C20 und D2C20.....	98
Abb. 4.15	Dampfkonzentration in Abhängigkeit vom Volumenkondensationsmodell .....	99
Abb. 4.16	Iso-Surface Volumenkondensationsrate = $1e-4 \text{ kg/ (m}^3\text{/s)}$ bei der Simulation mit Tröpfcheneinspeisung d200 zum Zeitpunkt $t = 1500 \text{ s}$ .....	99
Abb. 4.17	Volumenkondensationsrate bei der Simulation mit Tröpfcheneinspeisung d200 zum Zeitpunkt $t = 1500 \text{ s}$ .....	100
Abb. 4.18	Volumenkondensationsrate und Phasengrenzfläche nach 1500 s bei der Simulation ohne Tröpfcheneinspeisung .....	100
Abb. 4.19	Volumenkondensationsrate und Phasengrenzfläche nach 1550 s bei der Simulation ohne Tröpfcheneinspeisung .....	101
Abb. 4.20	Volumenkondensationsrate und Phasengrenzfläche nach 1600 s bei der Simulation ohne Tröpfcheneinspeisung .....	101
Abb. 4.21	Dampfkonzentrationen bei unterschiedlicher minimaler Phasengrenzfläche.....	107
Abb. 4.22	Temperatur bei unterschiedlicher minimaler Phasengrenzfläche .....	108
Abb. 4.23	Räumliches Intergral der Volumenkondensation (links) und der Volumenverdampfung bei unterschiedlicher minimaler Phasengrenzfläche .....	109
Abb. 4.24	Integrale Massentransferrate (Kondensation + Verdampfung) bei unterschiedlichem Tröpfchendurchmesser (oben 0 – 8000 s, unten 0 – 2500 s) .....	113
Abb. 4.25	Integrale Volumenkondensationsrate bei unterschiedlichem Tröpfchendurchmesser (oben 0 – 8000 s, unten 0 – 2500 s).....	114
Abb. 4.26	Integrale Volumenverdampfungsrate bei unterschiedlichem Tröpfchendurchmesser (oben 0 – 8000 s, unten 0 – 2500 s).....	115
Abb. 4.27	Integrale Wandkondensationsrate (oben) und gesamte Kondensationsrate (Wandkondensation + Volumenmassentransferrate; unten) bei unterschiedlichem	

	Tröpfchendurchmesser und bei Simulation ohne Volumenkondensationsmodell .....	116
Abb. 4.28	Isoflächen mit hohen Kondensationsraten links nach 600 s ( $3.0e-7$ $\text{kg}/(\text{m}^3\text{s})$ ), rechts nach 4300 s ( $0.01 \text{ kg}/(\text{m}^3\text{s})$ ) bei der Simulation mit $d = 200 \mu\text{m}$ .....	117
Abb. 4.29	Volumen-Massentransferrate im 1. Behälter nach 600 s (links) und 1500 s (rechts) bei der Simulation mit $d = 200 \mu\text{m}$ .....	117
Abb. 4.30	$\text{H}_2\text{O}$ -Massenbruch im 1. Behälter nach 600 s (links) und nach 1500 s (rechts) bei der Simulation mit $d = 200 \mu\text{m}$ .....	118
Abb. 4.31	Volumen-Massentransferrate nach 1500 s bei der Simulation mit $d = 200 \mu\text{m}$ .....	118
Abb. 4.32	IsoSurface mit $Y_{\text{H}_2\text{O}} = 0.05$ nach 5000 s bei der Simulation mit $d = 200 \mu\text{m}$ .....	119
Abb. 4.33	Dampfkonzentration an unterschiedlichen Monitorpunkten .....	120
Abb. 4.34	Temperatur an unterschiedlichen Messstellen .....	121
Abb. 4.35	Temperatur an unterschiedlichen Messstellen .....	122
Abb. 4.36	Dargestellt sind Ergebnisse der Simulation mit dem Algebraic Slip Modell und der Korrelation 2 für den Tröpfchenradius. Links: $Y_{\text{H}_2\text{O}}$ nach 1622 s; rechts: Regionen (rot) mit schlechter Konvergenz (Residuum $Y_{\text{H}_2\text{O}} = 0.0005$ ).....	124
Abb. 4.37	Dargestellt sind Isoflächen hoher $Y_{\text{H}_2\text{O}}$ der Simulation mit dem Algebraic Slip Modell und der Korrelation 2 für den Tröpfchenradius. Links: Isofläche mit $Y_{\text{H}_2\text{O}} = 0.005$ , rechts: Isofläche mit $Y_{\text{H}_2\text{O}} = 0.1$ .....	125
Abb. 4.38	Wandkondensationsrate bei Simulation ohne ASM-Modell (rot) und bei Simulation mit dem ASM-Modell einschließlich der Einschränkung der Volumenkondensation in Wandnähe (blau) und bei Simulation ohne Volumenkondensationsmodell (grün).....	128
Abb. 4.39	Volumenkondensation (oben) und Volumenverdampfung (unten) bei Simulation ohne ASM-Modell und bei Simulation mit dem ASM-Modell einschließlich der Einschränkung der Volumenkondensation in Wandnähe .....	129
Abb. 4.40	Wasserdampf-Modellbruch an unterschiedlichen Messstellen im Experiment, bei Simulation ohne ASM-Modell und bei Simulation mit dem ASM-Modell einschließlich der Einschränkung der Volumenkondensation in Wandnähe.....	130

Abb. 4.41	Wasserdampf-Modellbruch an unterschiedlichen Messstellen im Experiment, bei Simulation ohne ASM-Modell und bei Simulation mit dem ASM-Modell einschließlich der Einschränkung der Volumen Kondensation in Wandnähe.....	131
Abb. 4.42	Temperatur an unterschiedlichen Messstellen im Experiment, bei Simulation ohne ASM-Modell und bei Simulation mit dem ASM-Modell einschließlich der Einschränkung der Volumen Kondensation in Wandnähe .....	132
Abb. 4.43	Temperatur an unterschiedlichen Messstellen im Experiment, bei Simulation ohne ASM-Modell und bei Simulation mit dem ASM-Modell einschließlich der Einschränkung der Volumen Kondensation in Wandnähe .....	133
Abb. 4.44	Dampfanteil (links), Kondensationsrate (Mitte) und Verdampfungsrate (rechts) .....	136
Abb. 4.45	Druckverlauf im THAI-Behälter .....	138
Abb. 4.46	Temperaturverlauf in 8.4 m Höhe .....	138
Abb. 4.47	Temperaturverlauf in 6.3 m Höhe .....	139
Abb. 4.48	Temperaturverlauf in 4.9 m Höhe .....	139
Abb. 4.49	Dampfkonzentration in 8.7 m Höhe.....	141
Abb. 4.50	Dampfkonzentration in 7.7 m Höhe.....	141
Abb. 4.51	Temperaturverlauf in 7.0 m Höhe .....	142
Abb. 4.52	Druckverlauf beim TH-24 Experiment .....	142
Abb. 4.53	Vergleich von Volumen- und Wandkondensationsraten.....	143
Abb. 5.1	Enthalpieänderung bei Temperaturerhöhung des Gasgemisches von 300 K auf 600 K (Gaszusammensetzung gemäß Tabelle).....	148
Abb. 5.2	„Stand-Alone“ PAR-Simulation, Austrittstemperatur des Gases in Abhängigkeit von H <sub>2</sub> -Molenbruch am PAR-Einlass .....	151
Abb. 5.3	„Stand-Alone“ PAR-Simulation, H <sub>2</sub> Og Molenbruch am PAR-Auslass in Abhängigkeit von H <sub>2</sub> -Molenbruch am PAR-Einlass .....	151
Abb. 5.4	„Stand-Alone“ PAR-Simulation, H <sub>2</sub> OI Molenbruch am PAR-Auslass in Abhängigkeit von H <sub>2</sub> -Molenbruch am PAR-Einlass .....	152
Abb. 5.5	„Stand-Alone“ PAR-Simulation, Austrittstemperatur des Gases in Abhängigkeit von H <sub>2</sub> -Molenbruch am PAR-Einlass .....	154

Abb. 5.6	„Stand-Alone“ PAR-Simulation, H <sub>2</sub> OI-Molenbruch am PAR-Auslass in Abhängigkeit von H <sub>2</sub> -Molenbruch am PAR-Einlass .....	154
Abb. 5.7	Tröpfchenmolenbruch am Auslass über dem Tröpfchenmolenbruch am Einlass bei einer konstanten H <sub>2</sub> -Eintrittskonzentration .....	156
Abb. 5.8	Dampfmolenbruch am PAR-Auslass über dem Tröpfchenmolenbruch am Einlass bei einer konstanten H <sub>2</sub> -Eintrittskonzentration .....	157
Abb. 5.9	H <sub>2</sub> -Molenbruch am PAR-Auslass über dem Tröpfchenmolenbruch am Einlass bei einer konstanten H <sub>2</sub> -Eintrittskonzentration .....	157
Abb. 5.10	Gasaustrittstemperatur am PAR-Auslass über dem Tröpfchenmolenbruch am Einlass bei einer konstanten H <sub>2</sub> -Eintrittskonzentration .....	158
Abb. 5.11	X <sub>H<sub>2</sub>OI</sub> (links) und X <sub>H<sub>2</sub>Og</sub> (rechts) nach 85 s .....	159
Abb. 5.12	Temperatur (links) und Strömungsgeschwindigkeit (rechts) nach 85 s. Der maximale Temperaturwert auf der Skala wurde verringert, um den heißen Plume besser sichtbar zu machen. ....	160
Abb. 5.13	Tröpfchenverdampfungsrate (links) und Volumenkondensationsrate (rechts) nach 85 s .....	160
Abb. 6.1	CFD-Volumen für die ASM-Testrechnungen (10 m x 10 m x 10 m) .....	164
Abb. 6.2	Vergleich der CFX-Ergebnisse mit dem Stokes-Gesetz .....	165
Abb. 6.3	CFD-Geometrie für die Nachrechnung der KAEVER-Experimente .....	166
Abb. 6.4	Position der Messinstrumentierung im KAEVER-Versuch (Bild aus /POS 97/)... ..	167
Abb. 6.5	(Normierter) zeitlicher Verlauf der Csl-Konzentration in den KAEVER-Experimenten .....	168
Abb. 6.6	Vergleich der CFX-Rechnung mit den experimentellen Daten des KAEVER-Versuches K100A .....	170
Abb. 6.7	Einfluss des Partikeldurchmessers auf das Ablagerungsverhalten .....	170
Abb. 6.8	Einfluss der Csl-Dichte auf das Ablagerungsverhalten .....	171
Abb. 6.9	Vergleich des Experimentes mit theoretischen Werten .....	172
Abb. 6.10	Prinzip eines Aerosolspektrometers (Bild aus: /HIN 99/)... ..	173
Abb. 6.11	Bewegung von Wassertröpfchen (Durchmesser 50 µm) in einer Luftströmung.....	174

Abb. 6.12	Vergleich des ASM mit dem Lagrange Particle Tracking Modell .....	176
Abb. 6.13	STORM Versuchsanlage, schematische Gesamtdarstellung (Bild: /CAS 99/)	177
Abb. 6.14	CFD-Gitter der Test-Sektion im STORM-Versuch.....	178
Abb. 6.15	Aerosoldeposition entlang der Rohr-Achse .....	180
Abb. 6.16	Vereinfachtes Impaktor-Modell (Bild aus: /HIN 99/)	182
Abb. 6.17	Typische reale und ideale Cutoff-Kurven (Actual Curve / Ideal Curve, Bild aus: /HIN 99/)	182
Abb. 6.18	Geschwindigkeitsfeld und Partikelbahnen in einer Impaktor-Stufe (CFX, Lagrange Partikel Tracking Modell) .....	184
Abb. 6.19	Vergleich der Collection Efficiency (Ideal, Lagrange und ASM)	185
Abb. 6.20	Testgeometrie für die Modellierung der Partikelagglomeration.....	187
Abb. 6.21	Die Agglomeration der Primärpartikel (1.0 $\mu\text{m}$ ) führt zu größeren Partikeln (1.26 $\mu\text{m}$ und 1.59 $\mu\text{m}$ ).....	188
Abb. 6.22	Agglomerations- und Übergangsrate (links: Klasse 1 $\rightarrow$ Klasse 2, rechts: Klasse 2 $\rightarrow$ Klasse 3) .....	188
Abb. 6.23	Einfluss der initialen Partikelkonzentration auf die Agglomeration.....	189
Abb. 6.24	Xe-133 Emission nach der Katastrophe von Fukushima (Bild: /PSO 15/)	190
Abb. 6.25	Zerfallsschema von Xe-133 (Bild: /NUC 15/)	191
Abb. 6.26	Testvolumen, Xenon-Einspeiseposition und Monitorpunkte .....	192
Abb. 6.27	Ausbreitung des Xenons im Testvolumen (Zeitpunkt $t = 500$ s) .....	193
Abb. 6.28	Verlauf der Xenon-Konzentration an den drei Messpunkten .....	193
Abb. 6.29	Temperaturverlauf im Testvolumen .....	194
Abb. 6.30	Druckverlauf im Testvolumen.....	194
Abb. 6.31	Ausbreitung von Xenon im Testvolumen mit und ohne Zerfallswärme zu vier unterschiedlichen Zeitpunkten. ....	195
Abb. 6.32	Vergleich des Xenon-Konzentration bei den Rechnungen mit und ohne Berücksichtigung der Zerfallswärme .....	196
Abb. 6.33	Temperaturverlauf mit und ohne Berücksichtigung der Zerfallswärme ...	197

Abb. 6.34	Temperaturverteilung (links: Standard, rechts: mit Xe, Kr, Csl).....	198
Abb. 6.35	Dampfkonzentrationen (links: Standard, rechts: mit Xe, Kr, Csl).....	199
Abb. 6.36	Einfluss der Zerfallswärme auf die Volumenkondensationsrate .....	200
Abb. 6.37	Einfluss der Zerfallswärme auf den Druck im THAI-Behälter.....	200
Abb. 6.38	Vergleich der Rechenzeiten für 800 s Simulationszeit .....	201
Abb. 6.39	Verteilung der Csl-Partikel im PANDA-Behälter (Die Partikel sind zur besseren Sichtbarkeit vergrößert.).....	202
Abb. 6.40	Partikelverteilung bei unterschiedlicher Stichprobengröße.....	204
Abb. 6.41	Temperaturverteilung im 1. PANDA-Behälter bei $t = 100$ s für unterschiedliche Partikelzahlen.....	205
Abb. 6.42	Temperaturdifferenz zwischen den zwei Rechnungen mit 5 000 und mit 1 250 000 Partikeln .....	205
Abb. 6.43	Abhängigkeit des relativen Fehlers von der Partikel- bzw. Trackzahl .....	206
Abb. 6.44	Abhängigkeit der Rechenzeit von der Partikel-Anzahl.....	207
Abb. 7.1	Schematische Darstellung des Experiments /AND 13/.....	212
Abb. 7.2	Links: CAD-Daten, die zur Erzeugung des CFD-Gitters genutzt werden, rechts: Schnitt durch CFD-Gitter .....	213
Abb. 7.3	Heliumkonzentration an den Messstellen S1, S2 und S9 bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter .....	214
Abb. 7.4	Messstellen und Heliumkonzentration zu Beginn des Experiments.....	216
Abb. 7.5	Heliumkonzentration an unterschiedlichen Messstellen .....	218
Abb. 7.6	Heliumkonzentration an unterschiedlichen Messstellen .....	219
Abb. 7.7	Heliumkonzentration an unterschiedlichen Messstellen .....	220
Abb. 7.8	Zeitpunkt, an dem die Heliumkonzentration unter 20 Vol.-% gesunken ist.....	220
Abb. 7.9	Temperaturverlauf an den Messstellen TC_3 und TC_5.....	221
Abb. 7.10	Gemessene und berechnete Vertikalgeschwindigkeit im Jet.....	222
Abb. 7.11	Heißer Dampf wird in den PANDA-Behälter eingespeist (links); dadurch löst sich die Heliumschicht langsam auf (rechts, $t = 640$ s) .....	224
Abb. 7.12	Druckverlauf im PANDA-Behälter .....	225

Abb. 7.13	Unterschiedliche CFD-Gitter für den HP1_2-Versuch .....	226
Abb. 7.14	Heliumanteil am Messpunkt MCG_D1A20 in 8.03 m Höhe .....	228
Abb. 7.15	Heliumanteil am Messpunkt MCG_D1B20 in 7.478 m Höhe .....	228
Abb. 7.16	Heliumanteil am Messpunkt MCG_D1C20 in 6.926 m Höhe .....	229
Abb. 7.17	Schematische Darstellung des Einlassrohres ( $L_2 = 1.92$ m) /AUB 05/....	230
Abb. 7.18	Geschwindigkeiten im verlängerten Einlassrohr .....	230
Abb. 7.19	Geschwindigkeitsprofile im (verlängerten) Einlassrohr. Die Position der einzelnen Linien ist in Abb. 7.18 dargestellt. ....	231
Abb. 7.20	Vergleich der Geschwindigkeitsprofile für unterschiedliche Rohrlängen.	231
Abb. 7.21	Temperaturen am oberen Rand der Prallplatte .....	232
Abb. 7.22	Heliumanteil am Messpunkt MCG_D1A20 in 8.03 m Höhe .....	233
Abb. 7.23	Heliumanteil am Messpunkt MCG_D1B20 in 7.48 m Höhe .....	233
Abb. 7.24	Heliumanteil am Messpunkt MCG_D1C20 in 6.93 m Höhe .....	234
Abb. 7.25	Heliumkonzentration in 8.03 m Höhe (Messpunkt MCG_D1A_20).....	235
Abb. 7.26	Heliumkonzentration in 7.48 m Höhe (Messpunkt MCG_D1B_20).....	235
Abb. 7.27	Heliumkonzentration in 6.93 m Höhe (Messpunkt MCG_D1C_20).....	236
Abb. 7.28	Heliumkonzentration in 6.28 m Höhe (Messpunkt MCG_D1D_20).....	236
Abb. 7.29	Temperaturverlauf in 8.03 m Höhe (Messpunkt MTG_D1A_20).....	237
Abb. 7.30	Temperaturverlauf in 6.93 m Höhe (Messpunkt MTG_D1C_20) .....	237
Abb. 7.31	Temperaturverlauf in 3.03 m Höhe (Messpunkt MTG_D1M_20).....	238
Abb. 7.32	Temperaturverlauf am Messpunkt MTG_D1B_20 .....	239
Abb. 7.33	Temperaturverlauf am Messpunkt MTG_D1M_20 .....	240
Abb. 7.34	Heliumkonzentration am Messpunkt MCG_D1A_20 .....	240
Abb. 7.35	Heliumkonzentration am Messpunkt MCG_D1B_20 .....	241
Abb. 7.36	Heliumkonzentration am Messpunkt MCG_D1C_20 .....	241
Abb. 7.37	Schematische Darstellung des Versuchsaufbaus (Bild aus /PAR 15/) ...	243
Abb. 7.38	Geometrie des Einspeiserohrs /PAR 15/.....	244
Abb. 7.39	Position der Helium-Messstellen.....	244

Abb. 7.40	Position der Temperaturmessstellen.....	245
Abb. 7.41	CFD-Gitter Nr. 1 (links oben) – Nr. 5 (rechts unten), die in der Gitterstudie verglichen wurden.....	248
Abb. 7.42	Detailansicht des Gitters mit 4.9 Millionen Elementen.....	248
Abb. 7.43	Detailansicht der Gitter mit vollem Rohr und Gitter mit geradem Rohr (7 Millionen Zellen) .....	249
Abb. 7.44	Abbau der Heliumschichtung in Abhängigkeit vom CFD-Gitter .....	252
Abb. 7.45	Temperaturverlauf in Abhängigkeit vom CFD-Gitter.....	253
Abb. 7.46	Vertikalgeschwindigkeit bei der Simulation mit geradem Rohr (Gitter Nr. 5) nach 110 s (links) und 150 s (rechts) .....	254
Abb. 7.47	Vertikalgeschwindigkeit bei der Simulation mit vollem Rohr (Gitter Nr. 4) nach 100 s (links) und 110 s (rechts) .....	254
Abb. 7.48	Dampfeinspeisemassenstrom und Temperatur.....	257
Abb. 7.49	Rohrgeometrie bei der Gitterstudie, die gelben Linien markieren die Position der ausgewerteten Geschwindigkeitsprofile .....	258
Abb. 7.50	CFD-Gitter beim Gitter 2 .....	258
Abb. 7.51	CFD-Gitter im Bereich des Rohrauslasses Gitter 1 .....	259
Abb. 7.52	CFD-Gitter im Bereich des Rohrauslasses. Oben links Gitter 2, oben rechts Gitter 3, unten links Gitter 4, unten rechts Gitter 5.....	259
Abb. 7.53	Geschwindigkeit in z-Richtung (Farbe) bei der Simulation mit dem Gitter 5.....	260
Abb. 7.54	Geschwindigkeit in z-Richtung bei den Simulationen mit dem Gitter Nr. 5.....	260
Abb. 7.55	Stromlinien bei der Simulation mit dem Gitter. Ansicht von oben (z-Achse) .....	261
Abb. 7.56	Stromlinien bei der Simulation mit dem Gitter Nr. 3 (links) und dem Gitter Nr. 5 (rechts). Seitenansicht.....	261
Abb. 7.57	Geschwindigkeitsprofile in unterschiedlichen Höhen (h) entlang der x-Achse .....	262
Abb. 7.58	Geschwindigkeitsprofile in unterschiedlichen Höhen (h) entlang der y-Achse .....	263



Abb. 7.59	Heliumkonzentration im Experiment und bei Simulation mit vollem Einlassrohr (Gitter Nr. 4) und mit geradem Einlassrohr (Gitter Nr. 5) .....	266
Abb. 7.60	Heliumkonzentration an der Messstelle MS_1 .....	267
Abb. 7.61	Heliumkonzentration an der Messstelle MS_4 .....	267
Abb. 7.62	Heliumkonzentration an der Messstelle MS_5 .....	268
Abb. 7.63	Temperaturverlauf an der Messstelle TC_2 .....	268
Abb. 7.64	Temperaturverlauf an der Messstelle TC_7 .....	269
Abb. 7.65	Temperaturverlauf an der Messstelle TC_5 .....	269
Abb. 7.66	Temperaturverlauf an der Messstelle TC_12 .....	270
Abb. 7.67	Temperaturverlauf an der Messstelle TC_14 .....	270
Abb. 7.68	Vertikalgeschwindigkeit in der Höhe 4.1 m entlang der x-Koordinate, oben t = 100 s, unten t = 200 s .....	271
Abb. 7.69	Vertikalgeschwindigkeit in der Höhe 4.1 m entlang der y-Koordinate, oben t = 100 s, unten t = 200 s .....	272
Abb. 7.70	Vertikalgeschwindigkeit in der Höhe 5.9 m entlang der x-Koordinate, oben t = 100 s, unten t = 200 s .....	273
Abb. 7.71	Vertikalgeschwindigkeit in der Höhe 5.9 m entlang der y-Koordinate, oben t = 100 s, unten t = 200 s .....	274
Abb. 7.72	Temperaturverteilung ohne Strahlung (links) und bei Berücksichtigung der Wärmestrahlung .....	276
Abb. 7.73	Vertikales Temperaturprofil oberhalb der Platte bei t = 200 s.....	277
Abb. 7.74	Temperaturverlauf in 4.0 m Höhe .....	277
Abb. 7.75	Temperaturverlauf in 7.48 m Höhe .....	278
Abb. 7.76	Verlauf der Heliumkonzentration mittig in 8.03 m Höhe.....	278
Abb. 7.77	Heliumkonzentration in Abhängigkeit vom Konvergenzkriterium.....	279
Abb. 7.78	Temperatur in Abhängigkeit vom Konvergenzkriterium.....	280
Abb. 7.79	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschicht (MS_1, mittig in 8.03 m Höhe) .....	281
Abb. 7.80	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschicht (MS_3, mittig in 6.93 m Höhe) .....	282

Abb. 7.81	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (TC_3, mittig in 6,71 m Höhe).....	282
Abb. 7.82	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (TC_2, mittig in 6,93 m Höhe).....	283
Abb. 7.83	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (TC_7, seitlich R = 0.65 m, in 6.93 m Höhe).....	283
Abb. 7.84	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (TC_8, seitlich R = 1.43 m, in 6.93 m Höhe).....	284
Abb. 7.85	Heliumkonzentration nach 400 s. Links: SST, rechts: k-epsilon .....	284
Abb. 7.86	Temperatur nach 400 s. Links: SST, rechts: k-epsilon .....	285
Abb. 7.87	Vertikal-Geschwindigkeit nach 50 s. Links: SST, rechts: k-epsilon.....	285
Abb. 7.88	Vertikal-Geschwindigkeit nach 75 s. Links: SST, rechts: k-epsilon.....	286
Abb. 7.89	Vertikal-Geschwindigkeit nach 125 s. Links: SST, rechts: k-epsilon.....	286
Abb. 7.90	Vertikal-Geschwindigkeit nach 400 s. Links: SST, rechts: k-epsilon.....	287
Abb. 7.91	Vertikal-Geschwindigkeit zum Zeitpunkt t = 400 s bei Simulation mit dem SST und dem k-epsilonModell auf den Höhen 4.8 m, 5.3 m und 7.0 m .....	288
Abb. 7.92	Turbulente Energie nach 400 s. Links: SST, rechts: k-epsilon .....	289
Abb. 7.93	Temperaturverteilung nach 420 s .....	292
Abb. 7.94	Heliumkonzentration nach 420 s.....	292
Abb. 7.95	Messstellen im MISTRA-Behälter. (K: Konzentrationsmessung, T: Temperaturmessung) .....	293
Abb. 7.96	Standardmäßig verwendetes CFD-Gitter .....	295
Abb. 7.97	Heliumkonzentration in 7.08 m Höhe bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter.....	295
Abb. 7.98	Heliumkonzentration in 6.08 m Höhe bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter.....	296
Abb. 7.99	Temperatur an der Messstelle T1 bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter.....	296
Abb. 7.100	Temperatur an der Messstelle T7 bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter.....	297

Abb. 7.101	Temperatur an der Messstelle T8 bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter.....	297
Abb. 7.102	Temperatur an der Messstelle T9 bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter.....	298
Abb. 7.103	Temperatur an der Messstelle T10 bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter.....	298
Abb. 7.104	Temperatur des Innenzylinders an der Messstelle TK12D0 .....	299
Abb. 7.105	Temperatur des Innenzylinders an der Messstelle TK12D3 .....	299
Abb. 7.106	Temperaturverlauf am Einlassrohr. Blau: in einem Vorversuch gemessene Temperatur; rot: Temperatur in der Simulation .....	300
Abb. 7.107	Heliumkonzentration an der Messstellen K19 in Abhängigkeit vom Absorptionskoeffizienten.....	303
Abb. 7.108	Heliumkonzentration an den Messstellen K19 und K15 in Abhängigkeit vom Absorptionskoeffizienten .....	304
Abb. 7.109	Temperatur an der Messstelle T1 in Abhängigkeit vom Absorptionskoeffizienten.....	304
Abb. 7.110	Temperatur an der Messstellen T7 in Abhängigkeit vom Absorptionskoeffizienten.....	305
Abb. 7.111	Temperatur an der Messstellen T8 in Abhängigkeit vom Absorptionskoeffizienten.....	305
Abb. 7.112	Temperatur an der Messstelle T9 in Abhängigkeit vom Absorptionskoeffizienten.....	306
Abb. 7.113	Temperatur an der Messstellen T10 in Abhängigkeit vom Absorptionskoeffizienten.....	306
Abb. 7.114	Temperatur der Innenzylinderwand an der Messstelle TK12D0 .....	307
Abb. 7.115	Temperatur der Innenzylinderwand an der Messstellen TK12D3 .....	307
Abb. 7.116	Temperatur der Innenzylinderwand an der Messstellen TK12D0 .....	308
Abb. 7.117	Temperatur der Innenzylinderwand an der Messstellen TK12D3 .....	309
Abb. 7.118	Heliumkonzentration an der Messstelle K19 .....	309
Abb. 7.119	Temperatur an der Messstelle T10 .....	310
Abb. 8.1	Laminare Flammenfronten für Gemische mit unterschiedlicher Lewis-Zahl, /JOR 99/ .....	316

Abb. 8.2	Durchgezogene Linie: Approximation von $v_{lam}$ durch Polynom nach Ettner; Symbole: experimentelle Daten (Zusammenstellung nach Konnov /KON 08/, /ETT 13/)	322
Abb. 8.3	Laminare Flammgeschwindigkeit bei Verbrennung von H <sub>2</sub> -Luft unter Standardbedingungen bei unterschiedlichen Korrelationen	322
Abb. 8.4	Laminare Flammgeschwindigkeit bei Verbrennung von H <sub>2</sub> -Luft unter Standardbedingungen bei unterschiedlichen Korrelationen, Bereich: 0 Vol.-% < x <sub>H2</sub> < 20 Vol.-%	323
Abb. 8.5	Temperaturrexponent- $\alpha$ -Vergleich zwischen theoretischen und experimentellen Daten /BRE 99/	324
Abb. 8.6	Abhängigkeit der laminaren Flammgeschwindigkeit vom initialen Druck /BRE 99/	325
Abb. 8.7	Abhängigkeit der laminaren Flammgeschwindigkeit vom initialen Druck bei einem Äquivalenzverhältnis von 0.39 und T <sub>u</sub> = 393 K /BRE 99/	325
Abb. 8.8	Laminare Flammgeschwindigkeit bei Verbrennung von H <sub>2</sub> -Dampf-Luft bei T <sub>u</sub> = 398 K p <sub>u</sub> = 1 bar und x <sub>H2O</sub> = 0.1 bei unterschiedlichen Korrelationen	327
Abb. 8.9	Laminare Flammgeschwindigkeit bei Verbrennung von H <sub>2</sub> -Dampf-Luft bei T <sub>u</sub> = 398 K p <sub>u</sub> = 1 bar und x <sub>H2O</sub> = 0.1 bei unterschiedlichen Korrelationen, Bereich: 0 Vol.-% < x <sub>H2</sub> < 30 Vol.-%	328
Abb. 8.10	Laminare Flammgeschwindigkeit bei Verbrennung von H <sub>2</sub> -Dampf-Luft bei T <sub>u</sub> = 398 K p <sub>u</sub> = 1 bar und x <sub>H2O</sub> = 0.5 bei unterschiedlichen Korrelationen	328
Abb. 8.11	Laminare Flammgeschwindigkeit bei Verbrennung von H <sub>2</sub> -Dampf-Luft bei T <sub>u</sub> = 398 K p <sub>u</sub> = 1 bar und x <sub>H2O</sub> = 0.5 bei unterschiedlichen Korrelationen, Bereich: 0 Vol.-% < x <sub>H2</sub> < 30 Vol.-%	329
Abb. 8.12	Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus bei den THAI-HD-Versuchen. Die roten Punkte zeigen die Positionen der Temperaturmessstellen, die blauen Rauten die Position der Druckmessungen /KAN 08/	332
Abb. 8.13	Über die Messstellen gemittelter Druck bei HD-2R und HD-12	333
Abb. 8.14	Flammgeschwindigkeit entlang der Behälterachse bei HD-2R und HD-12	333
Abb. 8.15	Maximaldruck und Maximaltemperatur verglichen mit dem AICC-Druck und der AICC-Temperatur /KAN 08b/	334

Abb. 8.16	Temperaturverlauf an den vier Messstellen auf der Höhe von 6.3 m. Oben: HD-2R, unten: HD-12 /KAN 08/.....	335
Abb. 8.17	Aus den Flammenankunftszeiten berechneter Verlauf der Flamme bei HD-12 /KAN 08/.....	336
Abb. 8.18	Druck beim Testbeispiel zur Gitterabhängigkeit der Wärmeverluste an den Wänden.....	338
Abb. 8.19	Gitterabhängigkeit des Druckverlaufs.....	338
Abb. 8.20	Gitterabhängigkeit der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Behälterachse.....	339
Abb. 8.21	Vergleich des Druckverlaufs bei Verwendung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit.....	342
Abb. 8.22	Vergleich des Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse bei Verwendung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit.....	342
Abb. 8.23	Experimenteller Druckverlauf an unterschiedlichen Messstellen.....	344
Abb. 8.24	Aus den Flammenankunftszeiten berechneter Verlauf der Flamme bei HD-7.....	345
Abb. 8.25	Druckverlauf im Experiment und in Simulationen mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit.....	348
Abb. 8.26	Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme entlang der Mittelachse im Experiment und in Simulationen mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit.....	349
Abb. 8.27	Experimenteller Druckverlauf an unterschiedlichen Messstellen.....	351
Abb. 8.28	Aus den Flammenankunftszeiten berechneter Verlauf der Flamme bei HD-10.....	352
Abb. 8.29	CFD-Gitter bei Simulation von HD-10.....	354
Abb. 8.30	Druckverlauf im Experiment und in Simulationen mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit.....	355
Abb. 8.31	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit über dem Abstand vom Zündort	355
Abb. 8.32	Reaktionsfortschritt nach $t = 2.5$ s, 7 s und 13.5 s bei der Simulation des HD-10-Experiments mit der Peters-Korrelation.....	356
Abb. 8.33	Reaktionsfortschritt nach $t = 0.8$ s, 1.2 s und 1.8 s bei der Simulation des HD-10-Experiments mit der Peters Le1.....	357

Abb. 8.34	Reaktionsfortschritt nach $t = 0.8$ s, $1.4$ s und $2.4$ s bei der Simulation des HD-10-Experiments mit der Peters Le1L.....	358
Abb. 8.35	Links: Skizze des ENACCEF-Versuchsstands mit Position der Messstellen. Rechts: Geometrie der Hindernisse, die ins Beschleunigungsrohr eingebracht wurden /BEN 11/.....	360
Abb. 8.36	Experimentelle Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei Wiederholung des Versuchs /BEN 04/.....	361
Abb. 8.37	CFD-Gitter bei der Simulation des ENACCEF-Versuchs: links: Gitter mit 17 Tausend, rechts: Gitter mit 3.2 Millionen. Zellen.....	362
Abb. 8.38	Druckverlauf bei unterschiedlich feiner räumlicher Diskretisierung.....	363
Abb. 8.39	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei unterschiedlich feiner räumlicher Diskretisierung .....	363
Abb. 8.40	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei der Peters-, Zimont- und Dinkelacker-Korrelation.....	366
Abb. 8.41	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei den Korrelationen Peters, Peters Le0.3, Peters Le03T und Peters Le0.3L .....	367
Abb. 8.42	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei den Korrelationen Peters, Peters Le1, Peters Le1T und Peters Le1L .....	367
Abb. 8.43	Druck bei der Peters-, Zimont- und Dinkelacker-Korrelation .....	368
Abb. 8.44	Druck bei den Korrelationen Peters, Peters Le0.3, Peters Le03T und Peters Le0.3L .....	368
Abb. 8.45	Druck bei den Korrelationen Peters, Peters Le1, Peters Le1T und Peters Le1L .....	369
Abb. 8.46	Links: Schematische Darstellung des Versuchsaufbaus, rechts: Foto des vertikalen Versuchskanals mit Hindernissen /FRI 16/.....	372
Abb. 8.47	Messsonden beim Versuch ProScienceV15 .....	373
Abb. 8.48	Gitterstudie bei Modellierung der turbulenten Flammengeschwindigkeit mit der Peters-Korrelation .....	375
Abb. 8.49	Gitterstudie bei Modellierung der turbulenten Flammengeschwindigkeit mit der PetersLe0.6-Korrelation .....	375
Abb. 8.50	Zeitlicher Verlauf der Verbrennung bei Simulation mit der Korrelation Peters Le0.3. Links: unverbranntes $H_2$ , rechts: Reaktionsfortschrittsvariable .....	378

Abb. 8.51	Zeitlicher Verlauf der Verbrennung bei Simulation mit der Korrelation Peters Le0.3. Links: unverbranntes H <sub>2</sub> , rechts: Reaktionsfortschrittsvariable .....	379
Abb. 8.52	Zeitlicher Verlauf der Verbrennung bei Simulation mit der Korrelation Peters Le0.3. Links: unverbranntes H <sub>2</sub> , rechts: Reaktionsfortschrittsvariable .....	380
Abb. 8.53	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit im Experiment bei Simulation mit den Korrelationen Peters, Zimont und Dinkelacker .....	380
Abb. 8.54	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit im Experiment bei Simulation mit den Korrelationen Peters, PetersLe0.3, Peters Le0.3T, Peters Le0.3L, Peters Le1L und Peters Le0.6.....	381
Abb. 8.55	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit im Experiment bei Simulation mit den Korrelationen Peters, Peters Le1 und Peters Le1T .....	381
Abb. 8.56	Rechts, Mitte: ENACCEF2 Beschleunigungsrohr, links: ringförmige Hindernisse /BEN 17/ .....	384
Abb. 8.57	CFD-Gitter im Bereich der Hindernisse.....	385
Abb. 8.58	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei unterschiedlich feinem Gitter.....	386
Abb. 8.59	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit am Rohrende bei unterschiedlich feinem Gitter .....	386
Abb. 8.60	Druck in 6.377 m Höhe bei unterschiedlich feinem Gitter.....	387
Abb. 8.61	Zeitlicher Verlauf der Reaktionsfortschrittsvariable am Messpunkt in der Höhen 1.28 m .....	387
Abb. 8.62	Zeitlicher Verlauf der Reaktionsfortschrittsvariable an Messpunkten in den Höhen 5.53 m und 7.08 m.....	388
Abb. 8.63	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit im Experiment und in den Simulationen mit der Zimont- und der Peters-Korrelation.....	390
Abb. 8.64	Druck im Experiment und in den Simulationen an Messpunkten in 1.2 m und 5.527 m Höhe .....	391
Abb. 8.65	Druck im Experiment und in den Simulationen an Messpunkten in 6.377 m und 7.65 m Höhe .....	392
Abb. 8.66	Druck(links) und Reaktionsfortschrittsvariable (rechts) in der Simulation mit der Zimont-Korrelation nach 0.22 s und 0.23 s .....	393
Abb. 8.67	Initiale H <sub>2</sub> -Konzentrationen (Vol.-%).....	396

Abb. 8.68	Vergleich der Flammenausbreitung .....	397
Abb. 8.69	Vergleich der Flammengeschwindigkeiten .....	398
Abb. 8.70	Vergleich des Druckverlaufs .....	398
Abb. 8.71	Einfluss von $G_{crit}$ auf die Flammenausbreitung .....	399
Abb. 8.72	Einfluss von $G_{crit}$ auf die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit .....	400
Abb. 8.73	Einfluss von $G_{crit}$ auf den Druckverlauf .....	401
Abb. 8.74	Funktion zur Beschreibung der $H_2$ -Abhängigkeit von $G_{crit}$ .....	402
Abb. 8.75	Einfluss der $G_{crit}$ -Funktion auf die Flammengeschwindigkeiten .....	403
Abb. 8.76	Einfluss der $G_{crit}$ -Funktion auf den Druckverlauf .....	403
Abb. 8.77	Reaktionsfortschritt: Vergleich der Rechnungen mit konstantem $G_{crit}$ (1) und der von $H_2$ abhängigen Funktion $G_{crit}(H_2)$ (2) .....	404
Abb. 8.78	Reaktionsrate bei der Rechnung mit der Funktion $G_{crit}(H_2)$ zum Zeitpunkt $t = 0.20$ s .....	404
Abb. 9.1	Detail eines OpenFOAM-Netzes mit (frei) hängenden Knoten .....	412
Abb. 9.2	Experimentelles Setup des TH-26 Versuches .....	414
Abb. 9.3	OpenFOAM-Geometrie und Vernetzung für die Simulation des THAI- Experimentes TH-26 .....	415
Abb. 9.4	Vergleich von CFX- (links) und OpenFOAM- (rechts) Ergebnissen im Postprocessor für TH-26 .....	417
Abb. 9.5	Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS_27 (8.3 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter) .....	418
Abb. 9.6	Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS_23 (7.5 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter) .....	418
Abb. 9.7	Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS_20 (6.6 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter) .....	419
Abb. 9.8	Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS_16 (5.73 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter) .....	419
Abb. 9.9	Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS_13 (4.6 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter) .....	420
Abb. 9.10	Experimenteller Setup des OECD/PANDA-Benchmark (Bildquelle /ADR 13/) .....	421



Abb. 9.11	PANDA-Geometrie (links), Berechnungsnetz (Mitte) und ein Simulations-ergebnis (rechts) .....	422
Abb. 9.12	Heliumkonzentration bei Messpunkt MS_1 (7.478 m Höhe / über dem Einlass).....	423
Abb. 9.13	Heliumkonzentration bei Messpunkt MS_2 (6.706 m Höhe / über dem Einlass).....	423
Abb. 9.14	Heliumkonzentration bei Messpunkt MS_4 (6.00 m Höhe / über dem Einlass).....	424
Abb. 9.15	Heliumkonzentration bei Messpunkt MS_15 (3.676 m Höhe / seitlich im PANDA-Behälter).....	424
Abb. 9.16	Nachrechnung des OECD/PANDA-Benchmarks durch Abe et al /AIS 15/.....	426
Abb. 9.17	Heliumkonzentration bei Messpunkt MS_1 (7.478 m Höhe / über dem Einlass).....	427
Abb. 9.18	Heliumkonzentration bei Messpunkt MS_2 (6.706 m Höhe / über dem Einlass).....	428
Abb. 9.19	Heliumkonzentration bei Messpunkt MS_4 (6.00 m Höhe / über dem Einlass).....	428
Abb. 9.20	Heliumkonzentration bei Messpunkt MS_15 (3.676 m Höhe / seitlich im PANDA-Behälter).....	429
Abb. 9.21	Heliumkonzentration bei Messpunkt MS_1 (7.478 m Höhe / über dem Einlass).....	430
Abb. 9.22	Heliumkonzentration bei Messpunkt MS_2 (6.706 m Höhe / über dem Einlass).....	431
Abb. 9.23	Heliumkonzentration bei Messpunkt MS_4 (6.00 m Höhe / über dem Einlass).....	431
Abb. 9.24	Heliumkonzentration bei Messpunkt MS_15 (3.676 m Höhe / seitlich im PANDA-Behälter).....	432
Abb. 9.25	Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS_25 (7.9 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter).....	433
Abb. 9.26	Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS_23 (7.5 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter).....	434
Abb. 9.27	Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS_21 (6.9 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter).....	434

Abb. 9.28	Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS_19 (6.3 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter).....	435
Abb. 9.29	Vergleich der Heliumkonzentration am Messpunkt MS_16 (5.73 m Höhe, seitlich im THAI-Behälter).....	435
Abb. 9.30	Geometrie des Mini-Panda-Behälters (Abbildung aus /KEL 12/).....	436
Abb. 9.31	Initiale Helium-Konzentration (Abbildung aus /KEL 12/).....	437
Abb. 9.32	Mini-Panda-Geometrie (oben), Berechnungsnetz (links unten) und ein Simulationsergebnis (rechts unten).....	438
Abb. 9.33	Gitter des MiniPanda-Behälters für die Gitterstudie .....	439
Abb. 9.34	Heliumkonzentration in 1.723 m Höhe (Kath28).....	440
Abb. 9.35	Heliumkonzentration in 1.423 m Höhe (Kath20).....	441
Abb. 9.36	Heliumkonzentration in 1.073 m Höhe (Kath12).....	441
Abb. 9.37	Temperaturverlauf in 1.19 m Höhe (TC6) .....	442
Abb. 9.38	Temperaturverlauf in 1.46 m Höhe (TC7) .....	442
Abb. 9.39	Temperaturverlauf in 1.79 m Höhe (TC8) .....	443
Abb. 9.40	Heliumkonzentration in 1.723 m Höhe (Kath28).....	444
Abb. 9.41	Heliumkonzentration in 1.523 m Höhe (Kath24).....	444
Abb. 9.42	Heliumkonzentration in 1.423 m Höhe (Kath20).....	445
Abb. 9.43	Heliumkonzentration in 1.073 m Höhe (Kath12).....	445
Abb. 9.44	Heliumkonzentration in 1.723 m Höhe (Kath 28).....	447
Abb. 9.45	Heliumkonzentration in 1.523 m Höhe (Kath 24).....	447
Abb. 9.46	Heliumkonzentration in 1.423 m Höhe (Kath20).....	448
Abb. 9.47	Heliumkonzentration in 1.073 m Höhe (Kath12).....	448
Abb. 9.48	Temperaturverlauf in 1.19 m Höhe (TC6) .....	449
Abb. 9.49	Temperaturverlauf in 1.46 m Höhe (TC7) .....	450
Abb. 9.50	Temperaturverlauf in 1.79 m Höhe (TC8) .....	450
Abb. 9.51	Vergleich der Heliumkonzentrationen (bei $t = 300$ s).....	452
Abb. 9.52	Heliumkonzentration in 1.72 m Höhe (Kath28).....	452

Abb. 9.53	Heliumkonzentration in 1.52 m Höhe (Kath24).....	453
Abb. 9.54	Heliumkonzentration in 1.42 m Höhe (Kath20).....	453
Abb. 9.55	Heliumkonzentration in 1.07 m Höhe (Kath12).....	454
Abb. 9.56	Vergleich der Temperaturen (bei $t = 300$ s).....	455
Abb. 9.57	Temperaturverlauf in 1.19 m Höhe (TC6) .....	455
Abb. 9.58	Temperaturverlauf in 1.46 m Höhe (TC7) .....	456
Abb. 9.59	Temperaturverlauf in 1.79 m Höhe (TC8) .....	456
Abb. 9.60	Vergleich der vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten (bei $t = 300$ s)....	457
Abb. 9.61	Vergleich des Geschwindigkeitsprofils im Inlet-Rohr (Höhe: 0.95 m, $t = 300$ s) .....	458
Abb. 9.62	Testbeispiel für Strahlungsmodellierung in OpenFOAM .....	459
Abb. 9.63	Testbeispiel für Conjugated Heat Transfer in OpenFOAM .....	459
Abb. 9.64	Test des buoyantKEpsilon-Modells (rote Kurve / OECD-Panda-Experiment) .....	460
Abb. 10.1	Wasser-Einspeiseraten.....	465
Abb. 10.2	Dampf-Einspeiseraten .....	466
Abb. 10.3	H <sub>2</sub> -Einspeiseraten.....	466
Abb. 10.4	Einspeisetemperatur Dampf und H <sub>2</sub> .....	467
Abb. 10.5	Räumliche Darstellung des Sumpfes im Containment .....	469
Abb. 10.6	Gitterverfeinerung im Beton (links grobes Netz, rechts feines Netz mit 2 mm Dicke der ersten Schicht).....	470
Abb. 10.7	Temperaturen an der Beton/Gas-Grenzfläche .....	471
Abb. 10.8	Temperaturprofil an der Grenzfläche Beton/Gas (entlang der gelben Linie in Abb. 10.7).....	471
Abb. 10.9	Einfluss der Gitterverfeinerung auf die integrale Wandkondensationsrate (am Beton).....	472
Abb. 10.10	Einfluss der Gitterverfeinerung auf den Druckverlauf .....	473
Abb. 10.11	Einfluss der Gitterverfeinerung auf die Dampfkonzentration im Dom .....	473
Abb. 10.12	Einfluss der Gitterverfeinerung auf die Temperaturen im Dom.....	474

Abb. 10.13	Testgeometrie für die Gitterstudie (links Beton, rechts Gas) .....	475
Abb. 10.14	Temperaturprofil nach 2 s .....	476
Abb. 10.15	Temperaturprofil nach 25 s .....	476
Abb. 10.16	Verlauf der Wandkondensationsrate in Abhängigkeit vom Gitter im Beton .....	477
Abb. 10.17	Integral der Kondensationsrate nach 2 s .....	477
Abb. 10.18	Wandkondensationsrate in Abhängigkeit von der Gitterfeinheit .....	478
Abb. 10.19	Einfluss der Zeitschrittweite auf die integrale Wandkondensationsrate ..	479
Abb. 10.20	Einfluss der Zeitschrittweite auf die Temperaturen im Dom .....	480
Abb. 10.21	Einfluss der Zeitschrittweite auf den Druckverlauf .....	480
Abb. 10.22	Druckverlauf mit und ohne Volumenkondensationsmodell .....	481
Abb. 10.23	Vergleich von Wand- und Volumenkondensationsrate .....	482
Abb. 10.24	Wandkondensationsrate (am Beton) für die Rechnungen mit und ohne Volumenkondensationsmodell .....	482
Abb. 10.25	Vergleich der Rechnungen ohne und mit Sumpf (Solid-Block, hier schwarz dargestellt) im Containment zum Zeitpunkt $t = 0.79$ h .....	483
Abb. 10.26	Vergleich der unterschiedlichen Kondensationsraten .....	484
Abb. 10.27	Dampfkonzentration im Dom mit und ohne Sumpf .....	485
Abb. 10.28	Temperaturverlauf im Dom mit und ohne Sumpf .....	485
Abb. 10.29	Druckverlauf mit und ohne Sumpf .....	486
Abb. 10.30	H <sub>2</sub> -Konzentration im Dom mit und ohne Sumpf .....	486
Abb. 10.31	COCOSYS-Nodalisierung für den Sicherheitsbehälter (Bild aus GRS- A-3791) .....	487
Abb. 10.32	Vergleich der freien Volumina .....	489
Abb. 10.33	Vergleich der Strukturoberflächen .....	489
Abb. 10.34	Dampfkonzentration im Dom .....	491
Abb. 10.35	Druckverlauf in COCOSYS .....	491
Abb. 10.36	H <sub>2</sub> -Konzentration im Dom .....	492
Abb. 10.37	Integrale Kondensationsraten an Betonstrukturen .....	493

Abb. 10.38	Integrale Kondensationsrate am Sicherheitsbehälter .....	494
Abb. 10.39	Kondensation an der Sumpfoberfläche .....	494
Abb. 10.40	Containment mit Sumpf (Solid-Block, Sumpftemperatur-Profil im vergrößerten Ausschnitt).....	495
Abb. 10.41	Temperaturverlauf im Dom .....	496
Abb. 10.42	Dampfkonzentration im Dom .....	496
Abb. 10.43	H <sub>2</sub> -Konzentration im Dom .....	497
Abb. 10.44	Druckverlauf im Containment.....	497
Abb. 10.45	Geometrie für die CFX-Stand-Alone-Sumpfrechnung .....	499
Abb. 10.46	CoPool-Sumpfgeometrie für die gekoppelte COCOSYS/CoPool-Rechnung .....	499
Abb. 10.47	COCOSYS-Nodalisierung für die gekoppelte COCOSYS/CoPool-Rechnung .....	500
Abb. 10.48	Positionen der Monitorpunkte .....	500
Abb. 10.49	Ausbreitung des heißen Wassers auf dem Kaltwasserpool (Rechnung CoPool) .....	501
Abb. 10.50	Einfluss der Zeitschrittweite auf den Temperaturverlauf.....	502
Abb. 10.51	Unterschiedliche Gitterfeinheiten in CoPool (vertikaler Schnitt beim Heißwasser-Einlass).....	503
Abb. 10.52	Einfluss der Gitterfeinheit auf den Temperaturverlauf (Monitor 1 – 4) ....	504
Abb. 10.53	Einfluss der Gitterfeinheit auf den Temperaturverlauf (Monitor 7 – 13) ..	504
Abb. 10.54	Einfluss der (vertikalen) turbulenten Viskosität auf den Temperaturverlauf .....	506
Abb. 10.55	Gasverteilung und Sumpfbildung im Gesamtcontainment.....	507
Abb. 10.56	Unterschiedliche Gitterfeinheit im Sumpf .....	507
Abb. 10.57	Monitorpunkte an der Wasseroberfläche (Multiphase-Rechnungen).....	508
Abb. 10.58	Monitorpunkte in unterschiedlicher Wassertiefe (Multiphase-Rechnungen).....	508
Abb. 10.59	Monitorpunkt 1 (an der Wasseroberfläche) .....	510
Abb. 10.60	Monitorpunkt 11 (in 40 cm Wassertiefe).....	511

Abb. 10.61 Vergleich von CFX- und CoPool-Rechenergebnissen (Sumpftemperaturen).....	512
---	-----



## Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Infobox Testbeispiel „Mehrphasenmodell homogen“ .....	5
Tab. 2.2	Rechenzeiten für unterschiedliche Modellvarianten .....	8
Tab. 2.3	Infobox GES-Wanne.....	11
Tab. 2.4	Infobox TH-6 Experiment.....	24
Tab. 2.5	Vergleich der unterschiedlichen Sumpfmmodellierungsarten.....	35
Tab. 3.1	Randbedingungen bei den nachgerechneten CONAN-Versuchen.....	42
Tab. 3.2	Zelldicke $d_y$ der 1. Gaszelle an der gekühlten Platte, Anzahl der Zellen in y- und z-Richtung.....	43
Tab. 3.3	Zelldicke $d_y$ der 1. Gaszelle an der gekühlten Platte, Anzahl der Zellen in y-und z-Richtung bei weiterer Gitterverfeinerung .....	43
Tab. 3.4	CFD-Gitter bei Panda4bis.....	57
Tab. 3.5	Infobox TH2-Experiment (Wandfunktionen-Rechnung).....	73
Tab. 4.1	Durchgeführte Parametervariationen (Temperatur vorher: 10°C, Dampfanteil vorher: 0.5 [Molar Fraction]).....	89
Tab. 4.2	Benötigte CPU-Zeit in CPU-Sekunden in Abhängigkeit von $\beta_{\min}$ ( $m^{-1}$ ) ....	109
Tab. 4.3	Benötigte Rechenzeit in CPU-Sekunden für die Berechnung des Experiments im angegebenen Simulationszeitbereich .....	111
Tab. 4.4	Unterstellte Zusammenhänge zwischen Tröpfchenradius $d$ und Tröpfchenmassenbruch $Y_{H_2O}$ .....	123
Tab. 4.5	Für die Nachrechnung von TH-2 gewählte Modelloptionen.....	136
Tab. 4.6	Infobox für das THAI TH-24 Experiment .....	140
Tab. 6.1	Freisetzung radioaktiver Spaltprodukte in das Containment (Beispielrechnung: 50 cm <sup>2</sup> Leck im heißen Strang, DWR) .....	163
Tab. 6.2	Infobox für den Aerosol-Testfall .....	164
Tab. 6.3	Infobox für das KAEVER-Experiment.....	168
Tab. 6.4	Einspeiseraten zum STORM SD11-Versuch (nach /CAS 99/).....	178
Tab. 6.5	Infobox für das STORM-Experiment .....	179
Tab. 6.6	Unterschiedliche Partikelklassen für die Agglomeration.....	186



Tab. 6.7	Auf das THAI-Behältervolumen skalierte Freisetzungsmassen für radioaktive Zerfallsprodukte (Vergleiche auch Tab. 6.1) .....	198
Tab. 6.8	Infobox für die PANDA-Rechnungen.....	203
Tab. 6.9	Partikelzahlen (Stichprobengröße) in den einzelnen Testrechnungen....	203
Tab. 7.1	Infobox PANDA HP1_2.....	224
Tab. 7.2	Unterschiedliche Gitter für den HP1_2 Versuch.....	227
Tab. 7.3	Infobox PANDA HP1_6.....	247
Tab. 7.4	Übersicht über verwendete CFX-Gitter .....	249
Tab. 7.5	Anzahl der Zellen bei den CFD-Gittern .....	257
Tab. 7.6	Zeitschritt und Rechenleistung in Abhängigkeit vom Konvergenzkriterium.....	279
Tab. 8.1	Infobox zum ENACCEF-Experiment 736 .....	396
Tab. 9.1	Vergleich allgemeiner Eigenschaften von CFX und OpenFOAM.....	413
Tab. 9.2	Berechnungsparameter und Randbedingungen.....	416
Tab. 9.3	Berechnungsparameter für die OpenFOAM-Berechnung.....	422
Tab. 9.4	Vergleich der Rechnungen .....	432
Tab. 9.5	Berechnungsparameter für die OpenFoam-Berechnung.....	438
Tab. 9.6	Variation der Zeitschrittweiten und max. Courant-Zahlen.....	446
Tab. 9.7	Berechnungsparameter für die Vergleichsrechnungen .....	451
Tab. 10.1	Numerische Parameter für die Containment-Simulation.....	468
Tab. 10.2	Eigenschaften des Sumpfwassers (Solid-Block) .....	469
Tab. 10.3	Parametervariationen für die Gitterstudie.....	475
Tab. 10.4	Sumpf-Sensitivitätsstudie mit COCOSYS .....	490
Tab. 10.5	Berechnungsparameter für den CFX/CoPool-Vergleich.....	499
Tab. 10.6	CoPool-Rechnungen für den Vergleich mit CFX .....	509

**Gesellschaft für Anlagen-  
und Reaktorsicherheit  
(GRS) gGmbH**

Schwertnergasse 1  
**50667 Köln**

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Boltzmannstraße 14

**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)