

CFDCONT

**Ertüchtigung von
CFD-Codes für
die Simulation von
störfalltypischen
Phänomenen im
Containment**

CFDCONT

Ertüchtigung von CFD-Codes für die Simulation von störfalltypischen Phänomenen im Containment

Abschlussbericht

Berthold Schramm
Jörn Stewering
Joachim Herb
Hemish Mistry
Andreas Wielenberg
Jürgen Sievers

Mai 2022

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Klimaschutz (BMWK) unter dem Förderkennzeichen RS1562 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei der GRS.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung der GRS wieder und muss nicht mit der Meinung des BMWK übereinstimmen.

Deskriptoren

CFD, CFX, Containment, OpenFOAM, Validierung

Kurzfassung

Zur Simulation und Beurteilung von unfalltypischen Vorgängen im Sicherheitsbehälter von Kernkraftwerken erlangen CFD-Simulationstechniken eine immer stärkere Bedeutung. Mit dem Forschungsvorhaben RS1562 hat die GRS dieser Entwicklung Rechnung getragen und Modelle für CFD-Simulationen mit ANSYS CFX und OpenFOAM weiterentwickelt und validiert. Im Vordergrund standen dabei nicht-stationäre, turbulente und anisotrope Strömungen und Phänomene in komplexen 3-D-Geometrien, so wie sie im Sicherheitsbehälter bei einem Störfall mit Leckage des Primärkreises auftreten können. Bedingt durch eine Strategieentscheidung im zuständigen BMWi-Projektkomitee wurden im Vorhaben zudem Koordinierungsarbeiten im CFD-Verbund zur Bereitstellung und abgestimmten Weiterentwicklung und Validierung des Open-Source-Code OpenFOAM für Containmentanwendungen durchgeführt. Im Sinne dieser Neuausrichtung wurden im Vorgängervorhaben begonnene Arbeiten mit ANSYS CFX sinnvoll abgeschlossen und für die Entwicklung- und Validierung von OpenFOAM-Modellen genutzt.

- **Erprobung von OpenFOAM:** Im Vorhaben wurde ein angepasster OpenFOAM-Solver zur Berechnung von Gasverteilungen unter Containment-typischen Bedingungen entwickelt und validiert. Ein Wand- und ein Volumenkondensationsmodell wurden implementiert und mithilfe mehrerer Experimente (Conan/SARNET, THAI TH-2, TH-24, Panda 4bis) validiert. Im Rahmen eines vom PSI organisierten Benchmarks (Code-zu-Code-Vergleich) zum Thema Wärmestrahlungsmodellierung wurden unterschiedliche Strahlungsmodelle getestet und Sensitivitätsstudien zu Parametern (Absorptionskoeffizient) durchgeführt. Dabei zeigte sich, dass die Berücksichtigung der Wärmestrahlung einen signifikanten Einfluss auf die Temperaturverteilung und die Geschwindigkeit der Schichtungsauflösung haben kann und zudem eine empfindliche Abhängigkeit vom gewählten Absorptionskoeffizienten vorliegt. Weiterhin wurden unterschiedliche Wärmestrahlungsmodelle durch Nachrechnung verschiedener Experimente (H2P1_3, H2P2) getestet. Es zeigt sich ein signifikanter Einfluss des Wärmestrahlungsmodells und auch der Absorptionskonstante von Dampf sowohl auf die Temperaturverteilung als auch auf die Erosionsgeschwindigkeit der Heliumschicht. Ein für ANSYS CFX entwickeltes PAR-Modell basierend auf modifizierten AREVA-Korrelationen wurde nach OpenFOAM übertragen. Das neu implementierte Modell wurde anhand mehrerer Testfälle und zweier Experimente (THAI HR-5 und HR-43) validiert. Hinsichtlich der Simulation von Gasverteilungen (insbesondere der Auflösung von stabilen Leichtgasschichtungen) wurden

die Panda-Experimente H2P1_3 und H2P1_10 sowie das THAI-Experiment TH-32 sowohl mit OpenFOAM als auch mit ANSYS CFX erfolgreich nachgerechnet.

- **Abschließende Arbeiten zu ANSYS CFX:** Im Vorhaben wurde die Simulation von H₂-Verbrennungen mit ANSYS CFX weiterentwickelt und validiert sowie eine Flamelet-Bibliothek für die Verbrennung von H₂/H₂O/Luft-Gemische erzeugt. Anhand mehrerer Experimente (THAI HD-7, HD-10, HD-39, verschiedene ENACCEF2-Experimente) wurden unterschiedliche Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit mit ANSYS CFX getestet und charakterisiert. Außerdem wurde das Aerosolmodell zur Berücksichtigung der Wechselwirkung von Aerosolen mit Dampf erweitert. Die in Einzeleffekt-Versuchen (KAEVER) gewonnenen Erkenntnisse wurden im Weiteren auf eine komplexere Mehrraum-Geometrie übertragen (Battelle-Modell-Containment / VANAM-M3-Versuch).
- **Containmentanwendung:** Unter Zuhilfenahme eines verfügbaren Datensatzes für die Gasverteilung in einem generischen Containment zeigten Untersuchungen mit ANSYS CFX, dass der Einfluss der Modellierung eines Lecks (Position, Richtung, Strahl/Volumetrisch) auf den weiteren Unfallablauf signifikant sein kann. Daher wird für ähnliche Untersuchungen eine realistische Simulation des Strahls empfohlen.
- **Koordinierung der OpenFOAM-Aktivitäten (Containment) im CFD-Verbund:** Die Arbeiten umfassten insbesondere die Bereitstellung von Modellen auf dem Gitlab-Server der GRS. Weiterhin wurden Vorschläge für die Weiterentwicklung von OpenFOAM für das Containment und für den Kühlkreislauf erarbeitet und die daraus resultierenden Positionspapiere mit den Partnern im CFD-Verbund abgestimmt. Mit den Partnern wurde darüber hinaus vereinbart, dass die Code-Version OpenFOAM Version 5.0 (oder neuere) der OpenFOAM-Foundation als Basisversion für die gemeinsame Entwicklung verwendet wird.

Abstract

For the simulation and assessment of typical accident scenarios in the containment of nuclear power plants, CFD simulation techniques are becoming more and more important. With the research project RS1562, GRS has taken this development into account and further developed and validated models for CFD simulations with ANSYS CFX and OpenFOAM. The focus was on non-stationary, turbulent, and anisotropic flows and phenomena in complex 3-D geometries, such as those that occur in the containment in case of an accident with a leak in the primary circuit. Due to a strategic decision in the responsible BMWi project committee, coordination work was also carried out in the CFD network for the provision and coordinated further development and validation of the open-source code OpenFOAM for containment applications. In line with this realignment, work started in the previous project with ANSYS CFX was completed and used for the development and validation of OpenFOAM models.

- **Testing of OpenFOAM:** In the project, an adapted OpenFOAM solver for calculating gas distributions under typical containment conditions was developed and validated. A wall and a bulk condensation model were implemented and validated using several experiments (Conan / SARNET, THAI TH-2, TH-24, Panda 4bis). As part of a benchmark (code-to-code comparison) organized by PSI on the subject of thermal radiation modeling, different radiation models were tested, and sensitivity studies were performed on parameters as the absorption coefficient. It was shown that the consideration of the thermal radiation can have a significant influence on the temperature distribution and the speed of the stratification dissolution and that there is also a sensitive dependence on the selected absorption coefficient. Furthermore, different thermal radiation models were tested by simulating various experiments (H2P1_3, H2P2). The thermal radiation model and the absorption constant of steam have a significant influence on both the temperature distribution and the erosion rate of the helium layer. A PAR model developed for ANSYS CFX based on modified AREVA correlations was transferred to OpenFOAM. The newly implemented model was validated on the basis of several test cases and two experiments (THAI HR-5 and HR-43). With regard to the simulation of gas distributions (especially the dissolution of stable light gas layers), the Panda experiments H2P1_3 and H2P1_10 as well as the THAI experiment TH-32 were successfully recalculated with both OpenFOAM and ANSYS CFX.
- **Concluding work on ANSYS CFX:** In the project, the simulation of H₂ combustion with ANSYS CFX was further developed and validated and a flamelet library

for the combustion of H₂ / H₂O / air mixtures was created. Using several experiments (THAI HD-7, HD-10, HD-39, various ENACCEF2 experiments), different correlations for the turbulent flame speed were tested and characterized with ANSYS CFX. In addition, the aerosol model has been expanded to take into account the interaction of aerosols with steam. The knowledge gained in single-effect experiments (KAEVER) was then transferred to a more complex multi-room geometry (Battelle model containment / VANAM-M3 experiment).

- **Containment application:** With the help of an available data set for the gas distribution in a generic containment, investigations with ANSYS CFX showed that the influence of the modeling of a leak (position, direction, jet / volumetric) on the further course of the accident can be significant. A realistic simulation of the beam is therefore recommended for similar investigations.
- **Coordination of OpenFOAM activities (containment) in the CFD network:** The work included in particular the provision of models on the GRS Gitlab server. Furthermore, suggestions for the further development of OpenFOAM for the containment and for the cooling circuit were worked out and the resulting position papers were coordinated with the partners in the CFD network. It was also agreed with the partners that the code version OpenFOAM Version 5.0 (or newer) of the OpenFOAM Foundation will be used as the basic version for joint development.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung	I
	Abstract	III
1	Einleitung	1
2	AP1 Ertüchtigung von OpenFOAM	5
2.1	AP1.1 Eingehende Analyse der verfügbaren Codeversion und erforderlicher Modellertüchtigungen, -erweiterungen und - validierungen	5
2.1.1	Zielsetzung	5
2.1.2	Einleitung.....	5
2.1.3	Analyse von OpenFOAM 5.x	7
2.1.4	OECD/NEA-PSI-Benchmark zur Auflösung von stabilen Leichtgasschichtungen	8
2.1.5	Mini-Panda-Benchmark	17
2.1.6	Zusammenfassung und Fazit.....	30
2.2	AP1.2 Entwicklung von Wand- und Volumenkondensationsmodellen	32
2.2.1	Einleitung.....	32
2.2.2	Diffusionsmodell	32
2.2.3	Volumenkondensationsmodell	38
2.2.4	Wandkondensationsmodell.....	43
2.2.5	Berechnung des THAI-Versuches TH-2.....	53
2.2.6	Berechnung des THAI-Versuches TH-24.....	59
2.2.7	Berechnung von Conan-Versuchen	61
2.2.8	Nachrechnung des Panda 4bis Experimentes	68
2.2.9	Zusammenfassung	74
2.3	AP1.3 Wärmestrahlung.....	76
2.3.1	Einleitung.....	76
2.3.2	Exercise 1 und Exercise 2: Code-Benchmark ohne und mit Wärmestrahlung	77
2.3.3	Exercise 3: Sensitivitätsstudie Absorptionskoeffizient des Gases	90

2.3.4	Simulation des H2P2-Experimentes.....	93
2.3.5	Zusammenfassung und Fazit aus AP1.3 (Wärmestrahlungsmodellierung)	100
2.4	AP1.4 Erstellung eines PAR-Modells für OpenFOAM	101
2.4.1	Zielsetzung	101
2.4.2	Implementierung in OpenFOAM	102
2.4.3	Simulation eines Testbeispiels.....	103
2.4.4	Simulation des THAI-Versuches HR-5.....	117
2.4.5	Simulation des THAI-Versuches HR-43.....	130
2.4.6	Zusammenfassung	141
3	AP2 Koordinierung der Zusammenarbeit mit Partnern des CFD- Verbundes zu OpenFOAM.....	143
3.1	Nicht-technische Randbedingungen und andere Entwicklungen.....	143
3.2	Durchgeführte Arbeiten.....	145
3.2.1	Pflege einer OpenFOAM-Version für Modelle zur Simulation containmentrelevanter Fragestellungen und regelmäßige Umstellung auf eine ausgewählte neue Basisversion	145
3.2.2	Bereitstellung einer Plattform zum Austausch von Code und Daten sowie zur Kommunikation	147
3.2.3	Regelmäßige Regressionstest, Verifikation und Validierung	148
3.2.4	Ergänzung der Codeversion je nach Entwicklungs- und Validierungsfortschritt um relevante Modelle.....	152
3.2.5	Anwendungssupport sowie Bearbeitung von Service Requests von den Partnern des CFD-Verbundes.....	152
3.2.6	Organisation von (halb)jährlichen CFD-Verbundmeetings, Organisation des Erfahrungsrückflusses.....	152
3.2.7	Pläne und Richtlinien	153
3.3	Vorschläge für die Weiterentwicklung von OpenFOAM im CFD- Verbund.....	153
3.3.1	Priorisierung für das Containment.....	154
3.3.2	Priorisierung für den Kühlkreislauf	161
3.4	Zusammenfassung, Ausblick und Empfehlungen.....	168

4	AP3 Modellentwicklung und Validierung von CFD-Codes für die Simulation unfalltypischer Phänomene an Experimenten.....	171
4.1	AP3.1 Gasverteilung und Schichtungsauflösung.....	171
4.1.1	Einleitung.....	171
4.1.2	Untersuchung zur Modellierung des Einlassrohres anhand des Versuchs H2P1_0.....	171
4.1.3	Panda-Test H2P1_3 CFD-Simulation mit OpenFOAM und Vergleich mit CFX-Ergebnissen.....	180
4.1.4	Panda H2P1_10_2	181
4.1.5	Simulation des Versuchs TH32.....	203
4.1.6	Zusammenfassung und Schlussfolgerungen aus den in AP3.1 erzielten Ergebnissen	218
4.2	AP3.2 H ₂ -Verbrennung	221
4.2.1	Erstellung einer neuen Flamelet-Tabelle für die Verbrennung von H ₂ /Luft/Dampfgemischen	222
4.2.2	Validierung der H ₂ -Verbrennungssimulation mit CFX.....	237
4.2.3	Fazit der Validierungsrechnungen zu H ₂ -Verbrennung	334
4.3	AP3.3 Aerosolmodellierung	336
4.3.1	KAEVER-Versuche.....	336
4.3.1.2	Erstellung eines CFX-Datens.....	344
4.3.2	Fazit der KAEVER-Versuche	358
4.3.3	VANAM M3.....	359
5	AP4 Anwendung von CFD-Codes zur Untersuchung unfalltypischer Phänomene unter reaktortypischen Randbedingungen und Geometrien	371
5.1	Aufgabenstellung	371
5.1.1	Geometrie und Randbedingungen	371
5.2	Ergebnisse der CFX Berechnungen	374
5.2.1	Einfluss des Zeitschritts auf die Öffnung von Berstscheiben	374
5.2.2	Variation der Leckposition im Sumpfraum.....	375
5.2.3	Einfluss einer volumetrischen Quelle	378

5.2.4	Einfluss der Einspeisemodellierung auf die Gasverteilung im Containment	382
5.2.5	Einfluss des Ansprechdruckes der Berstscheiben.....	384
5.2.6	Einfluss der Leckmodellierung auf den weiteren Unfallablauf.....	385
5.3	Zusammenfassung	395
6	Zusammenfassung / Fazit	397
	Literaturverzeichnis.....	407
	Abbildungsverzeichnis.....	415
	Tabellenverzeichnis.....	435

1 Einleitung

Zur Simulation und Beurteilung von unfalltypischen Vorgängen im Sicherheitsbehälter von Kernkraftwerken erlangen CFD-Simulationstechniken eine immer stärkere Bedeutung /OEC 22/. Insbesondere zu Fragestellungen in denen lokale Größen wie Temperatur oder Gaszusammensetzung sicherheitstechnisch relevant sind ist der Einsatz von CFD zur Ergänzung von Analysen mit Systemcodes sinnvoll und wird zunehmend auch in Genehmigungsverfahren eingesetzt.

Die durchgeführten Arbeiten bauen auf Ergebnissen der GRS-Forschungsvorhaben RS1526, RS1500 und RS1181 sowie auf Arbeiten anderer Partnerorganisationen (insbesondere des FZ Jülich und der TU München) und der OpenFOAM-Foundation und ANSYS auf. Zur Validierung der Modelle wurden u. a. von Becker Technologies (THAI-Anlage) und vom Paul Scherer Institut (Panda-Anlage) durchgeführte Experimente genutzt.

Im Forschungsvorhaben RS1562 wurden Modelle für CFD-Simulationen weiterentwickelt und validiert und auf nicht-stationäre, turbulente und anisotrope Strömungen und Phänomene in komplexen 3-D-Geometrien angewendet, wie sie innerhalb eines Containments im Fall eines Störfalls mit Leckage des Primärkreises auftreten. Des Weiteren hat die GRS auf Grundlage einer Strategieentscheidung des Projektkomitees (PK) Transienten und Unfallabläufe am 10.10.2017 koordinierende Arbeiten im CFD-Verbund zur Nutzung und abgestimmten Einwicklung von OpenFOAM für Containmentanalysen durchgeführt.

Bisher wurde in Forschungsvorhaben der GRS sowie der Partner im CFD-Verbund vorzugsweise der kommerzielle CFD-Code ANSYS CFX für diese Fragestellungen und Anwendungen genutzt, validiert und in Zusammenarbeit mit dem Codeersteller ANSYS modellmäßig wo erforderlich erweitert und verbessert. Das PK hat einvernehmlich beschlossen, dass zukünftig für Containmentfragestellungen verstärkt der frei verfügbare Open-Source-Code OpenFOAM erprobt, für derartige Anwendungen ertüchtigt und für Partner des CFD-Verbundes bereitgestellt werden soll. Im Rahmen von RS1562 hat die GRS durch Implementation und Validierung unterschiedlicher Modelle in OpenFOAM hierzu einen Beitrag geleistet.

Für ausgewählte Anwendungen – wie z. B. die Teilnahme an internationalen Benchmarkaktivitäten oder die Simulation von H₂-Verbrennungsvorgängen – war darüber

hinaus eine parallele Nutzung und Validierung von ANSYS CFX sinnvoll. Des Weiteren sollten im Vorläufervorhaben begonnene Arbeiten zur Modellierung des Aerosolverhaltens fortgeführt und sinnvoll beendet werden, so dass diese später für OpenFOAM adaptiert und weiter genutzt werden können.

Im Forschungsprojekt RS1562 waren fünf übergeordnete Arbeitspakete (AP) definiert, deren technische Arbeitsziele nachfolgend erläutert werden.

AP1: Ertüchtigung von OpenFOAM

Historisch bedingt gibt es unterschiedliche OpenFOAM-Entwicklungslinien (z. B. der OpenFOAM-Foundation oder von ESI). Zunächst war es deshalb notwendig, die für die Simulation von Containment-Fragestellungen relevanten Prozesse und Phänomene geeignete OpenFOAM-Version auszuwählen und dann eingehend zu analysieren, welche Modellertüchtigungen, -erweiterungen und -validierungen erforderlich sind (AP1.1 / AP2). Unabhängig von der jeweiligen Version war es notwendig, wichtige Modelle, die bereits für ANSYS CFX entwickelt wurden, in OpenFOAM verfügbar zu machen. In RS1562 lag der Schwerpunkt auf der Modellierung folgender Phänomene:

- Basierend auf den in ANSYS CFX verfügbaren Modellen für Wand- und Volumen Kondensation wurden im AP1.2 entsprechende Modelle in OpenFOAM implementiert und durch Nachrechnung mehrerer Versuche (CONAN, TH-24, Panda 4bis) validiert.
- In AP1.3 wurden in OpenFOAM und in CFX verfügbare Strahlungsmodelle und geeignete Modellparameter (insbesondere Absorptionskonstante von Dampf) getestet. Um den Aspekt der Wärmestrahlung genauer zu untersuchen, wurde im OECD-Vorhaben HYMERES-2 eine Versuchsserie durchgeführt. Aus dieser Versuchsserie wurden 2 Versuche mit OpenFOAM und CFX nachgerechnet. Weiterhin hat sich die GRS am Code-zu-Code-Benchmark HYMERES-2 zur Strahlungsmodellierung mit CFX- und OpenFOAM-Rechnungen beteiligt.
- Im Rahmen von AP1.4 wurde das von der GRS für ANSYS CFX entwickelte Modell für passive autokatalytische Rekombinatoren (PAR) in OpenFOAM implementiert und durch Nachrechnung der Versuche HR-5 und HR-43 validiert.

Neben der Implementation und Validierung von physikalischen Modellen wurde ein Fokus auf die Auswahl geeigneter numerischer Methoden/Parameter gelegt, da OpenFOAM dem Nutzer hierbei eine große Auswahl lässt.

AP2: Koordinierung der Zusammenarbeit mit Partnern des CFD-Verbundes zu OpenFOAM

Gemäß des Strategiebeschlusses des zuständigen BMWi-Projektkomitees sollen Modellentwicklungen in OpenFOAM in Zusammenarbeit mit Partnern aus dem CFD-Verbund bzw. unter Nutzung und Integration ihrer Arbeiten aus Forschungsvorhaben erfolgen. Die diesbezügliche Zusammenarbeit mit Partnern aus dem CFD-Verbund wird auf dem Fachgebiet Containment von der GRS koordiniert. Im Rahmen des Projekts wurden umfangreiche technische und inhaltliche Arbeiten zur Koordination von OpenFOAM-Containment durchgeführt.

Vor Austausch von OpenFOAM-Modellen mit Partnern musste geklärt werden, wie eine mit der GNU General Public Licence V3 sowie dem Rahmenvertrag der GRS mit dem BMWi konforme Weitergabe von OpenFOAM-Modellen rechtlich realisiert werden kann. Es wurde ein **GitLab**-Server zum Austausch von Modellen, Testbeispielen etc. eingerichtet. Partnerorganisationen aus dem CFD-Verbund erhalten auf Anfrage Zugang auf den Server und können dort den Partnern eigene Modelle zur Verfügung stellen bzw. Modelle der Partner herunterladen und für eigene Arbeiten nutzen. Für den Referenzsolver der GRS zur Berechnung der Gasverteilung in Containmentanwendungen wurden **Continuous-Integration-Prozesse (CI)** aufgesetzt. Zur inhaltlichen Koordinierung zukünftiger OpenFOAM-Arbeiten (Containment) wurde ein Konzeptpapier für die Priorisierung der OpenFOAM-Entwicklungs- und -Validierungsaktivitäten erstellt und im CFD-Verbund abgestimmt.

AP3: Modellentwicklung und Validierung von CFD-Codes für die Simulation unfalltypischer Phänomene an Experimenten

In RS1562 wurde mit der Erprobung und Validierung des bewährten CFD-Codes ANSYS CFX parallel noch fortgefahren:

- Im AP3.1 wurde die Validierung der Simulation der Gasverteilung und Schichtungsauflösung weitergeführt. In diesem Rahmen wurden CFX- und OpenFOAM-Simulationen parallel durchgeführt und die Simulationsergebnisse miteinander verglichen. Die GRS hat sich mit beiden Codes an einem vom Paul-Scherer Institut (H2P1_10_2) und einem von Becker Technologies organisierten Benchmark (TH-32) beteiligt.
- Die Simulation der H₂-Verbrennung wurde in RS1562 weiterhin mit ANSYS CFX durchgeführt. In AP3.2 wurden unterschiedliche Korrelationen für die laminare

und turbulente Flammengeschwindigkeit durch Nachrechnung unterschiedlicher Versuche (THAI HD-7, HD-10 und HD-39 sowie mehrerer ENACCEF-2 Versuche) getestet. Die GRS hat sich außerdem am von IRSN organisierten Verbrennungsbenchmark ETSON-SAMHYCO beteiligt.

- Bei den bisherigen Arbeiten mit ANSYS CFX im Vorläuferprojekt RS1526 wurde die Wechselwirkung von Aerosolen mit Dampf noch nicht modelliert. Das Aerosolmodell wurde in AP3.3 entsprechend erweitert. KAEVER-Versuche und der Versuch VANAM M3 wurden zur Modellvalidierung herangezogen.

AP4: Anwendung von CFD-Codes zur Untersuchung unfalltypischer Phänomene unter reaktortypischen Randbedingungen und Geometrien

Ausgehend von einem bestehenden Datensatz für ein generisches Containment (angelehnt an KONVOI) und einem generischen Kühlmittelverluststörfall wurde untersucht, welchen Einfluss die Modellierung der Leckeinströmung (Modellierung als gerichteter Strahl in verschiedene Richtungen oder als Volumenquelle) aus dem Kühlkreislauf ins Containment auf die Gasverteilung im Containment hat.

2 AP1 Ertüchtigung von OpenFOAM

2.1 AP1.1 Eingehende Analyse der verfügbaren Codeversion und erforderlicher Modellertüchtigungen, -erweiterungen und -validierungen

2.1.1 Zielsetzung

Ziel dieses Vorhabens ist u.a. die Erprobung und Bereitstellung eines OpenFOAM-Version-Solvers zur Berechnung der Gasverteilung bei Containment-relevanten Bedingungen und der dabei auftretenden wesentlichen Vorgänge. Mit den geplanten Arbeiten im Arbeitspunkt 1.1 soll die Auswahl einer geeigneten OpenFOAM-Code-Version und eines geeigneten Basis-Solvers als Ausgangspunkt für die Modellentwicklung erfolgen.

2.1.2 Einleitung

Im Forschungsvorhaben RS1526 (2014 – 2018) wurde erstmalig die Leistungsfähigkeit des Open-Source-Codes OpenFOAM untersucht und mit der kommerziellen Software ANSYS CFX verglichen. Dabei wurde in der GRS – wie auch bei Partnern des CFD-Verbundes – überwiegend die OpenFOAM-Release von Henry Weller genutzt. Ebenso wird dieses Release für Modellentwicklungen im Fachgebiet Kühlkreislauf genutzt.

Die damals aktuelle Version, mit der die GRS erste Erfahrungen sammelte, war OpenFOAM 2.1. Hier wurde der Solver rhoReactingBuoyantFoam verwendet, da er am besten zur Problemstellung Gasverteilung im Containment passt.

In der Zwischenzeit wurde OpenFOAM weiterentwickelt und bis zum Start des Forschungsvorhabens RS1562 (ab März 2018) lag die neue Version 5.x vor. Diese sollte als Ausgangspunkt für eine Untersuchung der Leistungsfähigkeit verwendet werden. Die Beschreibung der Analyse dieser Version findet sich im nächsten Kapitel (siehe Abschnitt 2.1.3). Diese Version zeigte eine gute Leistung bei der Berechnung von Gasverteilungen bzw. Schichtungsauflösungen.

Ab Juli 2018 lag noch eine neue Version (OpenFOAM 6.0) vor. Diese beinhaltete insbesondere Verbesserungen bei der Kombination von Gas-Regionen und Solid-Regionen (Wände, Strukturen, ...). Dazu wurde der Solver rhoReactingBuoyantFoam (für Fluid-Region) mit Solid-Regionen zusammengefasst und ein Wärmeaustausch erlaubt. Das Ergebnis war der kombinierte Solver chtMultiRegionFoam, der erstmals alle

notwendigen Funktionen für beide Regionen enthielt. Da in den geplanten Containment-Anwendungen die Wandstrukturen mit simuliert werden sollten (insbesondere als Wärmesenke und für die Wandkondensation) wurde später zu diesem Solver gewechselt. Die Analyse des berechneten Wärmeübergangs findet sich im Abschnitt AP1.2, Kapitel „Modellierung des Conjugated Heat Transfer (CHT) in OpenFOAM“. Anhand eines Testbeispiels wird der Wärmeübergang Gas/Festkörper simuliert und mit CFX verglichen. Dabei zeigt sich eine gute Übereinstimmung mit den CFX-Ergebnissen.

Am Solver chtMultiRegionFoam waren jedoch noch zwei Änderungen notwendig:

- Korrektur / Modifizierung der Diffusionsterme
- Einfügen von Quellen-/Senkentermen für die Wandkondensation

Für das Volumenkondensationsmodell und das PAR-Modell standen bereits geeignete Schnittstellen im Solver bereit. Das PAR-Modell wurde als codedFixedValue-Randbedingung und das Volumenkondensationsmodell als scalarCodedSource angebunden an OpenFOAM.

Der geänderte Solver wurde danach unter dem Namen chtMultiRegionSchmidtFoam geführt. Dieser Solver wurde anhand zahlreicher Experimente validiert (z. B. Panda H2P1_10, THAI TH-32, ...) und für weitere Entwicklungen (z. B. PAR-Modellierung, Wärmestrahlung, ...) als Basis genutzt.

Eine Übersicht über die unterschiedlichen bisher verwendeten OpenFOAM-Versionen und Solver findet sich in Tab. 2.1. Aktuell (Stand Juli 2021) liegt von der OpenFOAM-Foundation Version 8 vor. Da hier weitere Verbesserungen implementiert wurden (z. B. zum Thema Diffusion) wird in den weiteren Arbeiten ein Update auf diese Version 8 angestrebt.

Tab. 2.1 Verwendung und Vergleich unterschiedlicher OpenFOAM-Versionen

OpenFOAM-Version	Solver	Bemerkung	Ausführliche Beschreibung
OpenFOAM 2.1 (Foundation)	rhoReactingBuoyantFoam	Verwendung in RS1526	Abschlussbericht RS1526 (GRS-472), Kapitel 9
OpenFOAM 5.x (Foundation)	rhoReactingBuoyantFoam	Verwendung in RS1562	Abschlussbericht RS1562 (GRS-652), Kapitel 2.1.3

OpenFOAM-Version	Solver	Bemerkung	Ausführliche Beschreibung
OpenFOAM 6.0 (Foundation)	chtMultiRegionFoam	Kombination von rhoReactingBuoyantFoam (Fluid) mit einer Solid-Region	Abschlussbericht RS1562 (GRS-652), Kapitel 2.2.4.1
OpenFOAM 6.0 (Foundation)	chtMultiRegionSchmidtFoam	Korrektur von Diffusionstermen und Einfügen von Wandkondensation	Abschlussbericht RS1562 (GRS-652), Kapitel 2.2.4.2

2.1.3 Analyse von OpenFOAM 5.x

Zum Start des OpenFOAM-Projektes RS1562 gab es eine Reihe von Neuerungen seit dem Abschluss des Vorhabens RS1526:

- *Neue Code-Version:* Im letzten Projekt wurde für alle Rechnungen die damals aktuelle Version OpenFOAM 2.1 verwendet. Danach (Stand: März 2018) war Version 5.x aktuell. In dieser Version gibt es zahlreiche Veränderungen bzw. Verbesserungen, so dass auf die neue Version umgestellt werden soll.
- *Gittererstellung:* Im letzten Projekt wurde SnappyHexMesh verwendet. Hiermit können relativ einfach Gitter erstellt werden. Allerdings sind manche Details (z. B. an der Einlassgeometrie) schwierig abzubilden. Die Gitter können nun alternativ durch Pointwise/Gridgen-Gitter ersetzt werden. Diese entsprechen dann exakt den in CFX verwendeten Gittern. Somit können Details besser verfeinert werden und ein exakterer Vergleich zu den CFX-Rechnungen ist möglich.
- *Werte-Initialisierung:* Statt über setFields sollen die Gitter jetzt über funkySetFields initialisiert werden. Dieses ermöglicht glatte Gradienten (z. B. Heliumschicht) zu erzeugen, während vorher mit Stufenfunktionen gearbeitet werden musste.

Wegen der zahlreichen, zum Teil grundlegenden Neuerungen sollten zunächst nicht die neuen Versuche aus dem HYMERES2-Programm gerechnet werden, sondern erstmal die alten Versuche (Mini-Panda und OECD-Panda-Benchmark) mit den neuen Modellen bzw. mit der aktuellen OpenFOAM-Version gerechnet werden. Die HYMERES2-Versuchsergebnisse lagen zu Beginn des Projektes (Stand März 2018) auch noch nicht vor. Im Folgenden werden deshalb zuerst der OECD-Panda-Benchmark und der Mini-Panda-Benchmark neu gerechnet und anschließend diskutiert. Ziel dieser

Untersuchungen ist es, einen geeigneten OpenFOAM-Sovler für die weiteren Arbeiten auszuwählen und den Stand der Entwicklung – inklusive von Defiziten – zu Beginn der Arbeiten aufzuzeigen. Eine umfassende Untersuchung einschließlich Sensitivitätsstudien zu Einzelaspekten der Versuche wurde nicht durchgeführt, da sie bei der Auswahl eines geeigneten OpenFOAM-Basis-Solvers nicht notwendig ist.

2.1.4 OECD/NEA-PSI-Benchmark zur Auflösung von stabilen Leichtgasschichtungen

Da es zahlreiche Neuerungen seit dem letzten Projekt gab, wurde der OECD/NEA-Panda-Benchmark /AND 13/ zur Auflösung von stabilen Leichtgasschichtungen erneut gerechnet. Neben der OpenFOAM-Version (Update von 2.3.1 auf 5.x) wurde auch die Implementierung der Buoyancy-Terme (Auftriebseffekte) erneuert und die Diskretisierungsschemata wurden verändert. Im Folgenden werden der Einfluss numerischer Parameter (Gitter und Zeitschrittweite) sowie die zusätzliche Implementierung von Diffusionstermen in die Spezies- und Energiegleichung untersucht.

2.1.4.1 Einfluss des Gitters

Um den Einfluss des Gitters auf die Simulationsergebnisse zu studieren, wurden zwei Rechnungen mit unterschiedlichen Gittern durchgeführt. Einmal wurde das Gitter mit SnappyHexMesh (1,0 Mio. Elemente) erstellt und einmal wurde das Gitter mit Pointwise/Gridgen erstellt (1,2 Mio. Elemente). Die unterschiedlichen Gitter sind in Abb. 2.1 dargestellt. SnappyHexMesh erlaubt sehr gute Orthogonalität und lokale Verfeinerungen (als hanging nodes), die aber nicht richtungsabhängig gewählt werden können. Gridgen erlaubt Verfeinerungen in einzelnen Raumrichtungen, allerdings keine „hanging nodes“. Das Gridgen-Gitter wirkt deutlich feiner als das SnappyHexMesh, ist aber nur in die vertikale Raumrichtung verfeinert. Das Gridgen-Gitter hat insbesondere eine bessere Inlet-Geometrie und insgesamt feinere Elemente im Bereich der oberen Heliumschicht. Es hat ca. 20 % mehr Elemente als das SnappyHexMesh-Gitter. Es wurde auch genutzt, um eine entsprechende Berechnung des OECD-Panda-Benchmarks mit CFX durchzuführen.

In Tab. 2.2 finden sich die Modelle und numerischen Parameter für die beiden Rechnungen. Es wurde OpenFOAM Version 5.x mit dem rhoReactingBuoyantFoam-Solver verwendet. Als Turbulenzmodell wird das buoyantkOmegaSST-Modell des FZ Jülich genutzt. Neben den unterschiedlichen Gittern hatten beide Rechnungen auch noch

unterschiedliche Zeitschrittweiten. Diese hatten in dem Bereich (0,002 – 0,004 s) aber wahrscheinlich keinen Einfluss mehr auf das Ergebnis. Eine Untersuchung zu den Zeitschritten findet sich im nächsten Abschnitt.

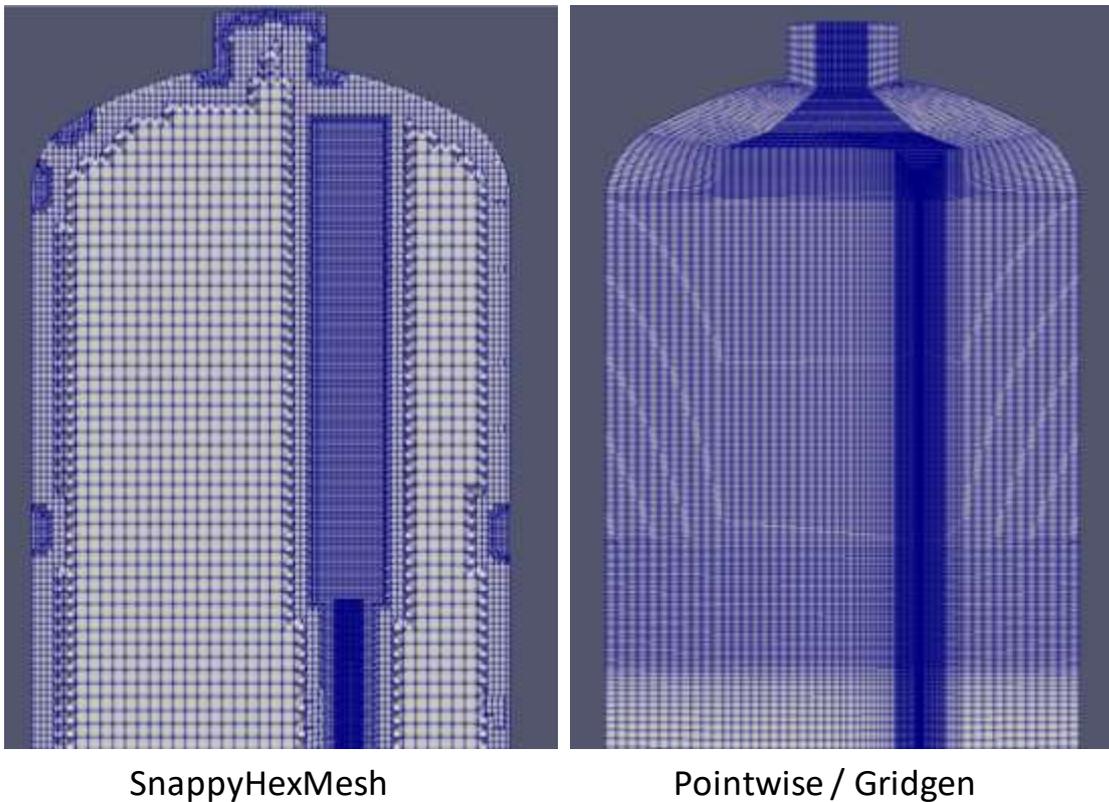


Abb. 2.1 Vergleich der unterschiedlichen Gitter

Tab. 2.2 Infobox für den OECD-Panda-Benchmark

Experiment	OECD/Panda-Benchmark
Phänomene	Auflösung einer Leichtgasschicht
Materialien	Air, He
Software / Version	OpenFOAM 5.x
Solver	rhoReactingBuoyantFoam
Zeitschritte	Konstant (0,002 s und 0,004 s)
Courant-Zahl	Max. ca. 1,5
Turbulenzmodell	buoyantkOmegaSST (FZ-Jülich)
Strahlungsmodell	Ohne
Gittererstellung	SnappyHexMesh und Pointwise / Gridgen
Elementzahl	1.004.763 und 1.178.482

In Abb. 2.2 bis Abb. 2.5 finden sich die Ergebnisse der Berechnungen. Es zeigt sich hierbei ein sehr deutlicher Einfluss des Gitters auf die Ergebnisse. Die Berechnung mit dem Gridgen-Gitter zeigt einen deutlich langsameren Abbau der Helium-Konzentration, insbesondere bei dem weiter oben gelegenen Messpunkt (siehe Abb. 2.2). Das Ergebnis mit dem Gridgen-Gitter liegt näher an den experimentellen Werten als das Ergebnis mit dem SnappyHexMesh-Gitter. Das Gridgen-Gitter wird für alle weiteren Untersuchungen (Zeitschritt, Diffusion) als Grundlage verwendet.

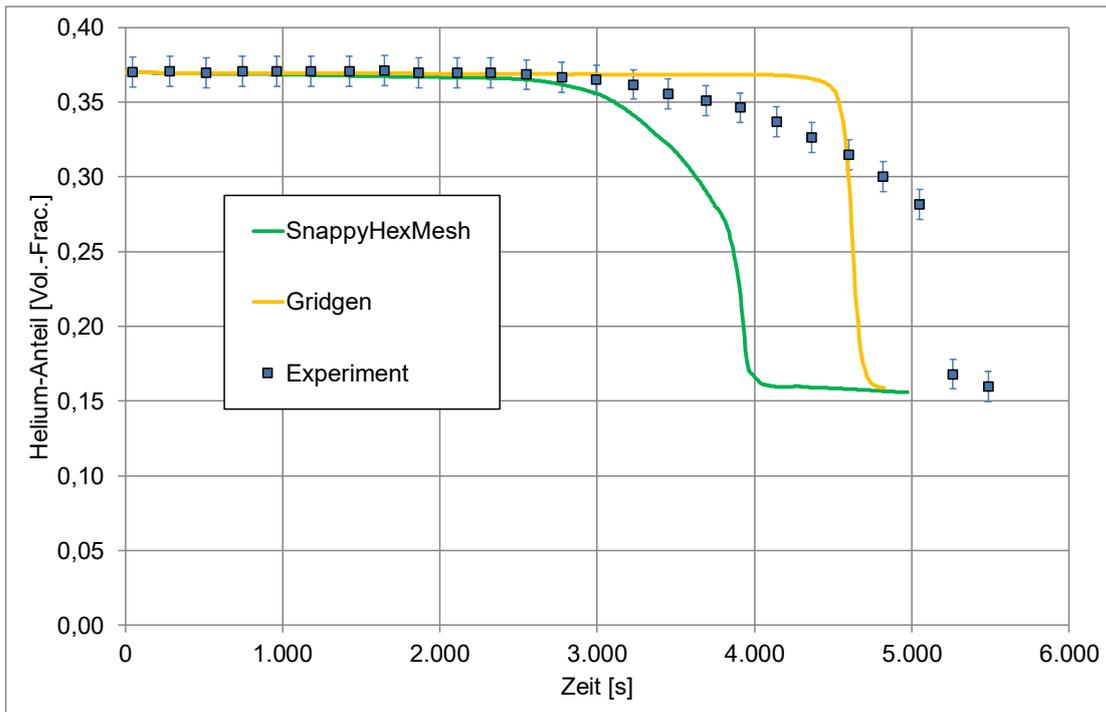


Abb. 2.2 Gittereinfluss: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_9 (Höhe 8,03 m)

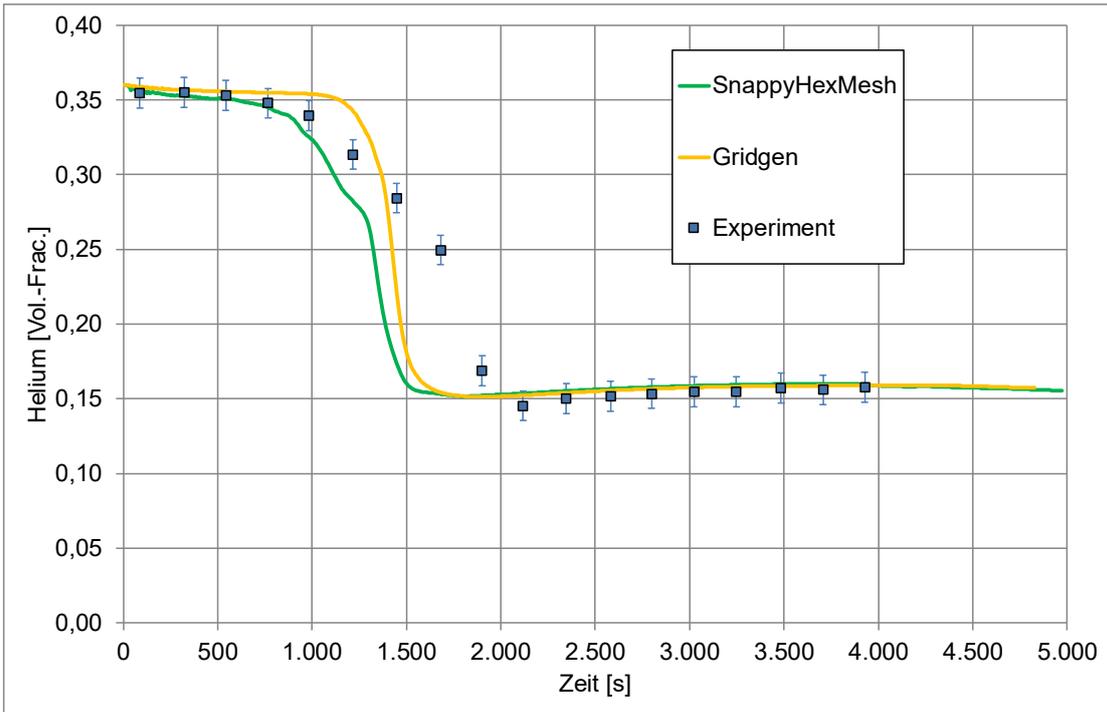


Abb. 2.3 Gittereinfluss: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_2 (Höhe 6,71 m)

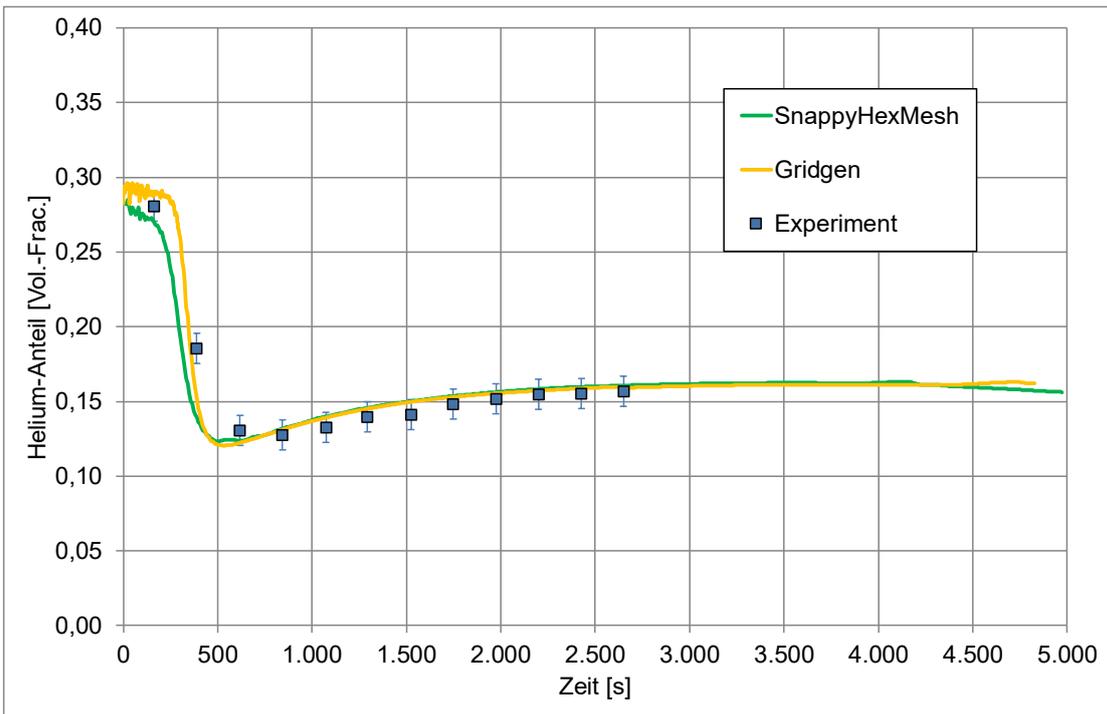


Abb. 2.4 Gittereinfluss: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_12 (Höhe 6,00 m)

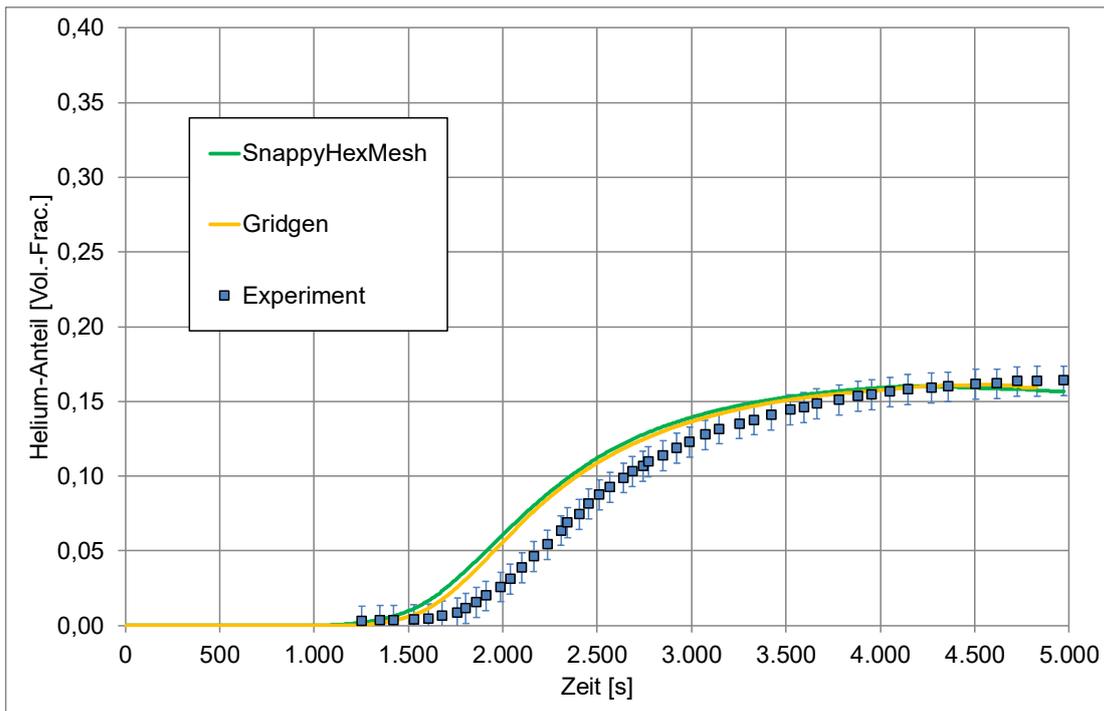


Abb. 2.5 Gittereinfluss: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_19 (Höhe 0,16 m)

2.1.4.2 Einfluss der Zeitschrittweite

Um den Einfluss der Zeitschrittweite zu untersuchen, wurden zwei Berechnungen mit 0,004 s und 0,025 s Zeitschrittweite durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abb. 2.6 bis Abb. 2.9 dargestellt. Es zeigt sich an allen Monitorpunkten fast kein Unterschied, die einzelnen Kurven liegen fast exakt übereinander. Somit liegt in diesem Bereich keine Abhängigkeit von der Zeitschrittweite vor. Die Berechnung mit dem größeren Zeitschritt kann für weitere Arbeiten genutzt werden, da sie deutlich schneller läuft. Die maximalen Courant-Zahlen liegen hier etwa bei 7.

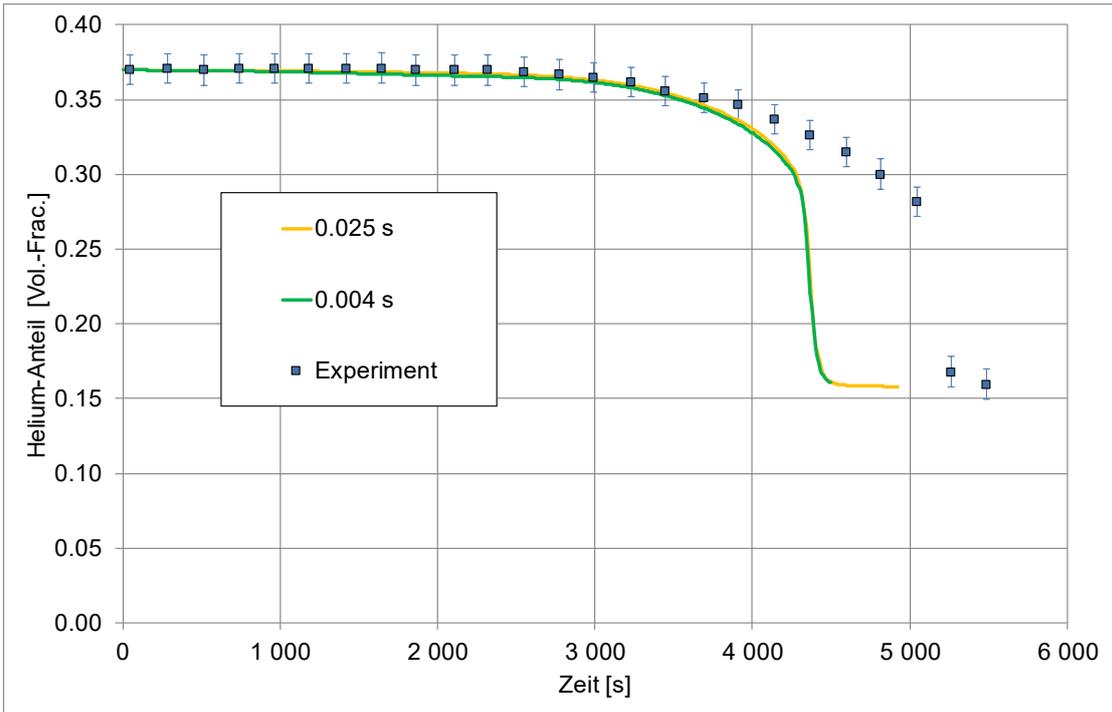


Abb. 2.6 Zeitschritte: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_9 (Höhe 8,03 m)

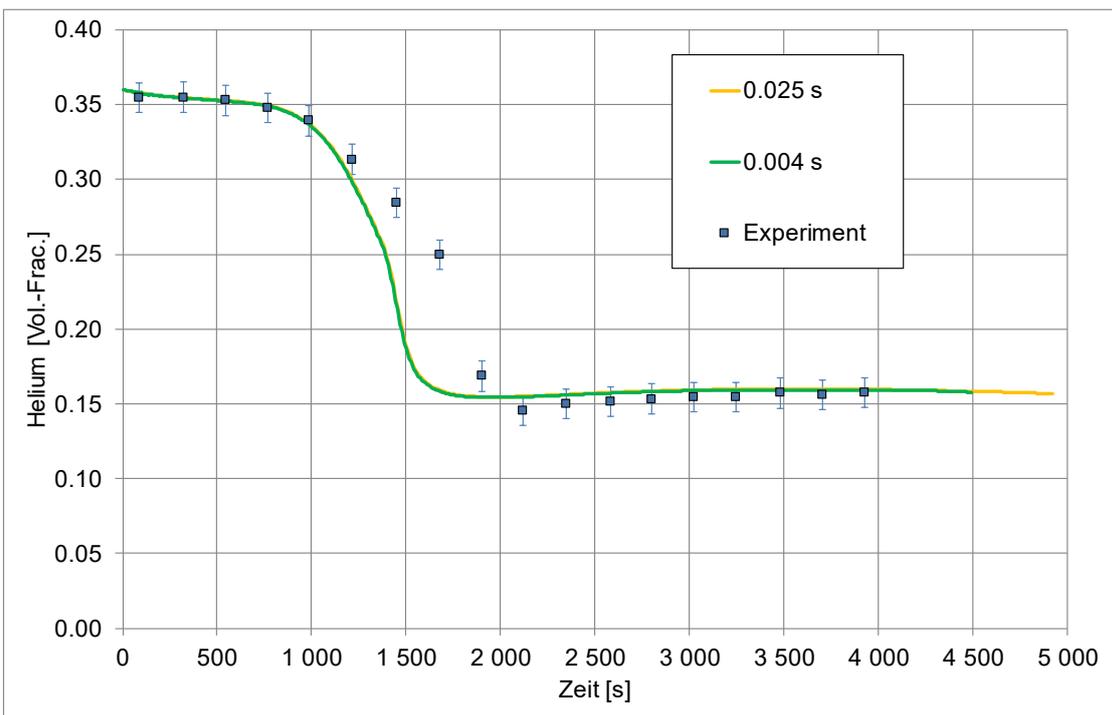


Abb. 2.7 Zeitschritte: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_2 (Höhe 6,71 m)

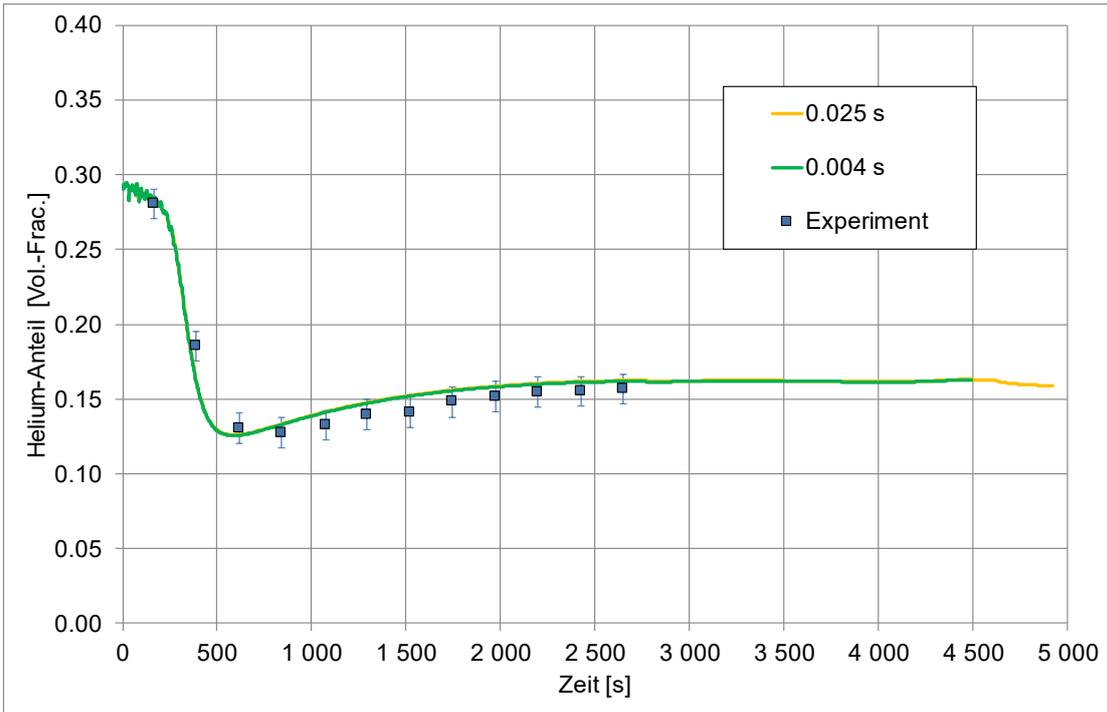


Abb. 2.8 Zeitschritte: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_12 (Höhe 6,00 m)

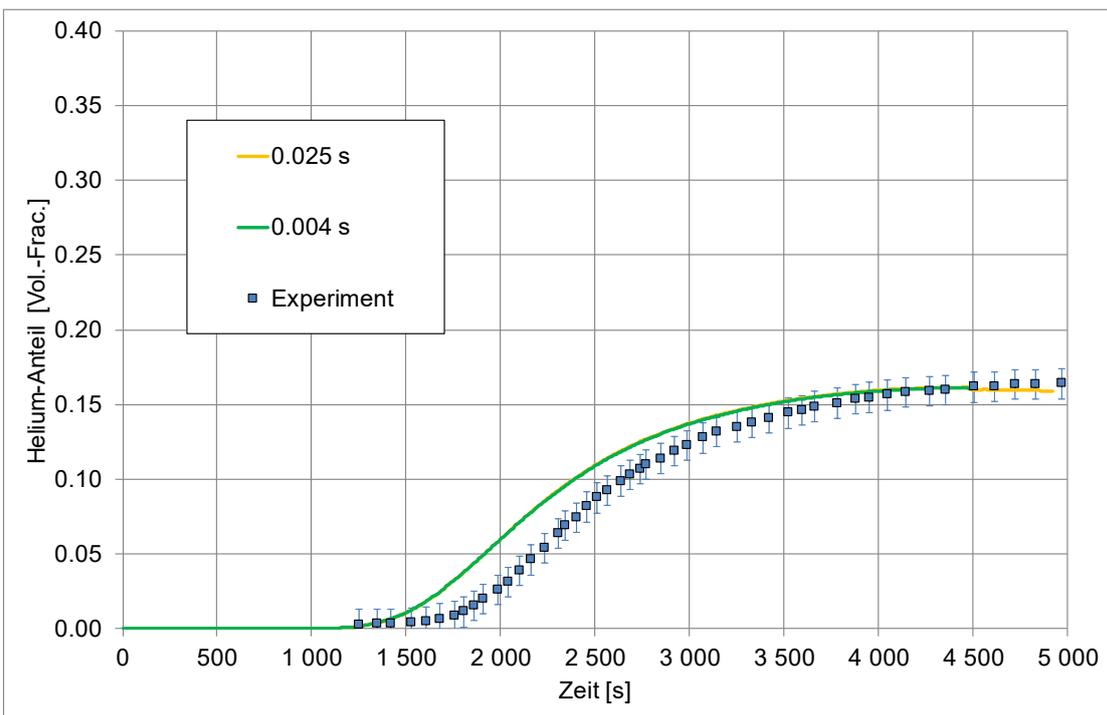


Abb. 2.9 Zeitschritte: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_19 (Höhe 0,16 m)

2.1.4.3 Abschließender Vergleich mit experimentellen Daten und CFX

In Abb. 2.10 bis Abb. 2.13 werden die Ergebnisse der OpenFOAM-Simulation mit den experimentellen Daten und auch mit einer CFX-Rechnung verglichen. Es wurde die

OpenFOAM-Rechnung mit dem Gridgen-Gitter und mit großer Zeitschrittweite (0,025 s) verwendet. Die CFX-Rechnung wurde mit dem gleichen Gitter (Pointwise / Gridgen) wie die OpenFOAM-Rechnung durchgeführt. Insbesondere beim obersten Messpunkt MS_9 (siehe Abb. 2.10) findet sich noch eine Abweichung zwischen der OpenFOAM- und der CFX-Rechnung. In der OpenFOAM-Rechnung wird die Heliumschicht etwas zu schnell abgebaut. Eine mögliche Ursache für die Unterschiede sind leicht unterschiedliche Werte-Initialisierungen (He-Schicht und Temperaturen) bei den beiden Simulationen. An den weiteren Messpunkten findet sich aber eine gute Übereinstimmung der beiden Berechnungen. Sie liegen auch beide relativ nahe an den experimentellen Werten. Grundsätzlich ist die Übereinstimmung von OpenFOAM mit dem Experiment und mit CFX schon zufriedenstellend.

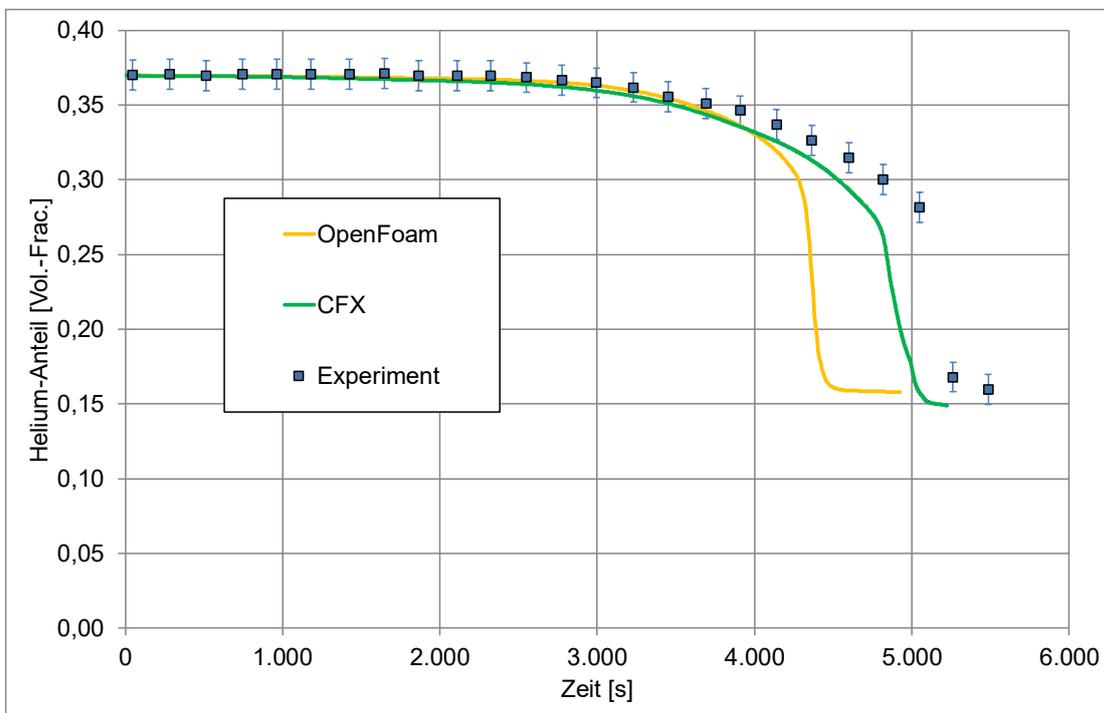


Abb. 2.10 CFX-Vergleich: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_9 (Höhe 8,03 m)

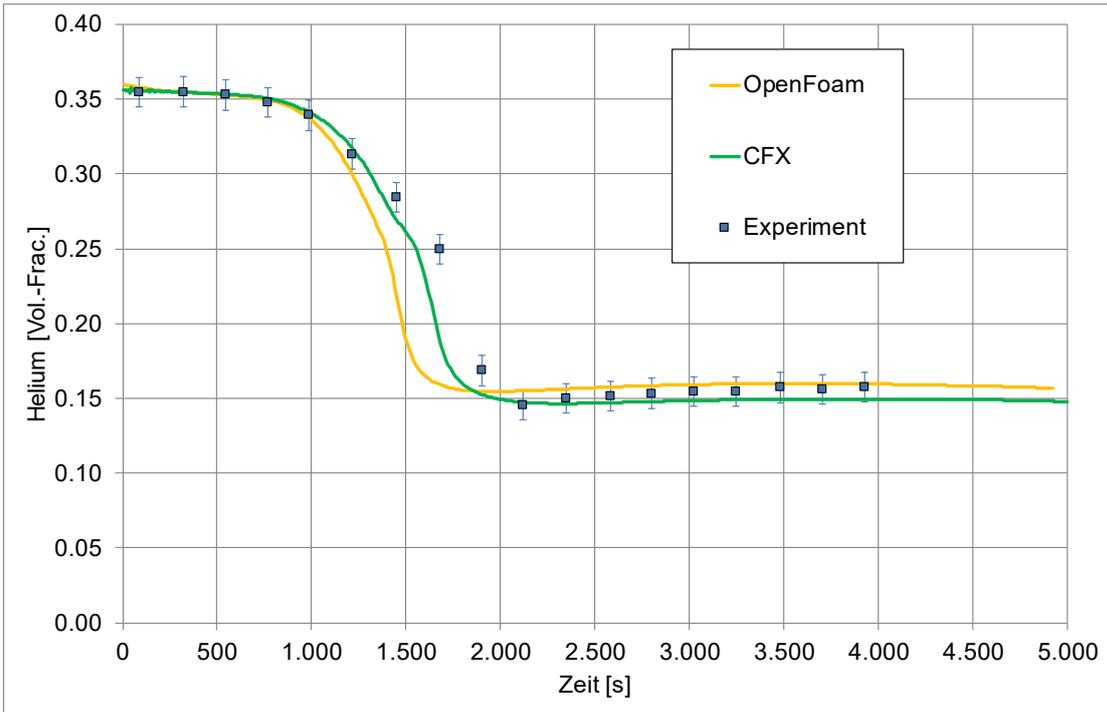


Abb. 2.11 CFX-Vergleich: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_2 (Höhe 6,71 m)

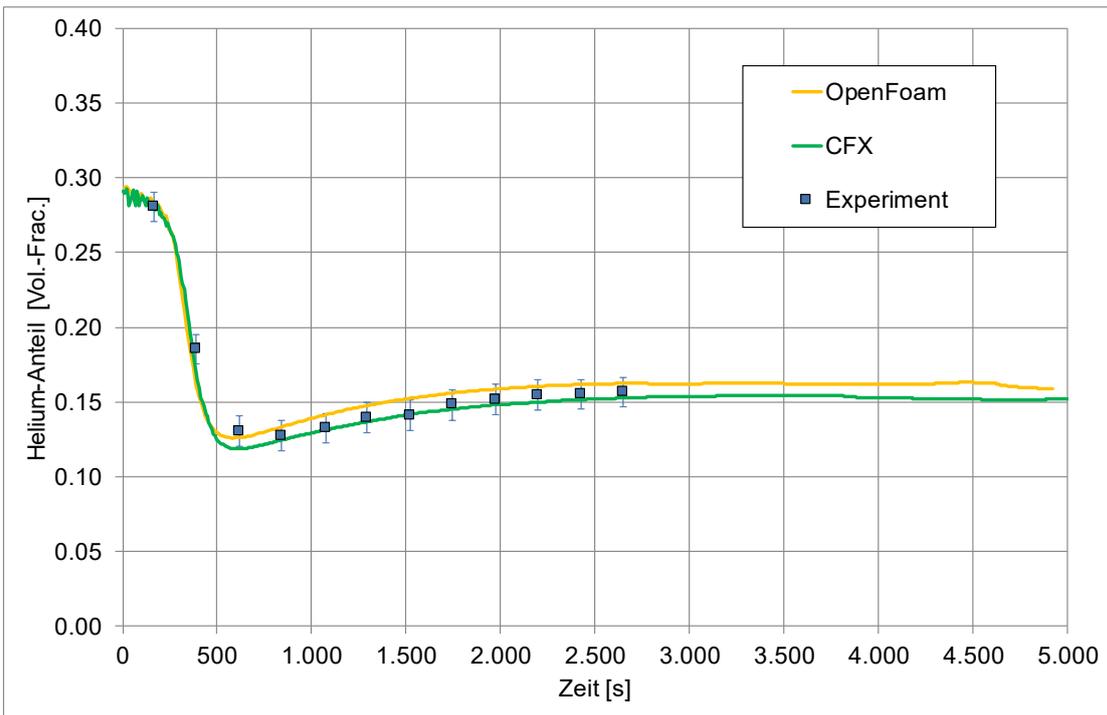


Abb. 2.12 CFX-Vergleich: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_12 (Höhe 6,00 m)

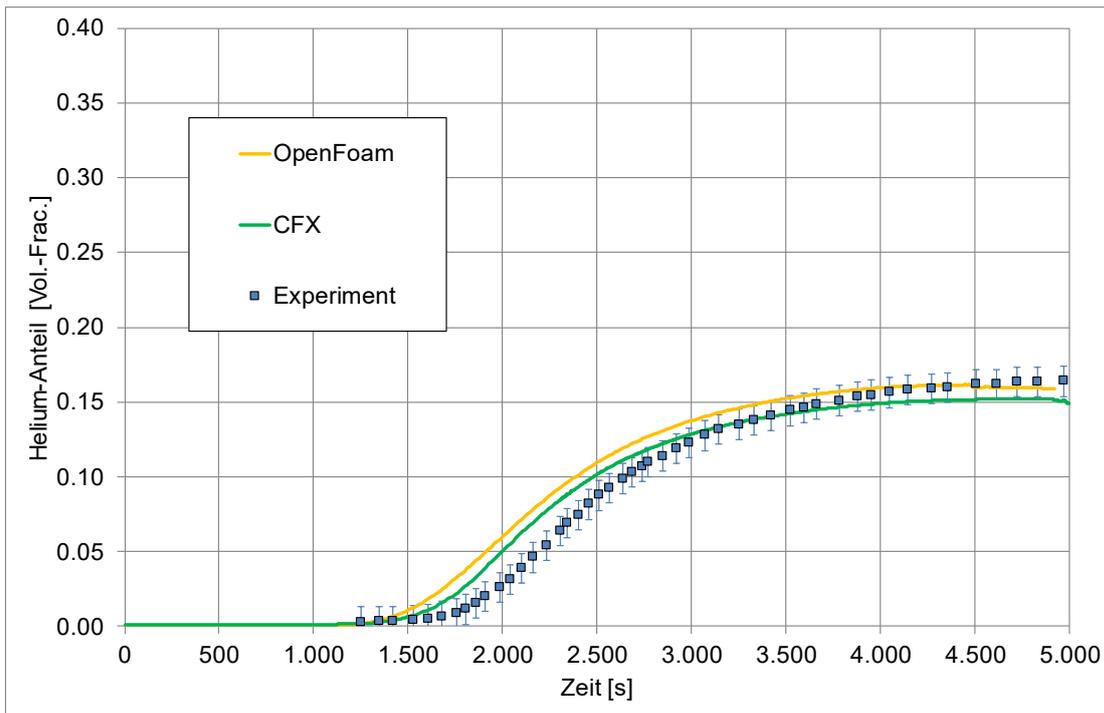


Abb. 2.13 CFX-Vergleich: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_19 (Höhe 0,16 m)

2.1.5 Mini-Panda-Benchmark

Zur weiteren Absicherung der am OECD/NEA-Benchmark gewonnenen Erkenntnisse wurde auch der Mini-Panda-Benchmark /KEL 12/ untersucht. Weiterhin wurden Untersuchungen zum Einfluss des Diskretisierungsschemas durchgeführt.

2.1.5.1 Einfluss des Gitters

Um den Einfluss des Gitters auf die Simulationsergebnisse zu studieren, wurden zwei Rechnungen mit unterschiedlichen Gittern durchgeführt. Einmal wurde das Gitter mit SnappyHexMesh (0,6 Mio. Elemente) erstellt und einmal wurde das Gitter mit Pointwise/Gridgen erstellt (1,2 Mio. Elemente). Die beiden Gitter sind in Abb. 2.14 dargestellt. Sie wurden insbesondere im Bereich des Einlasses verfeinert.

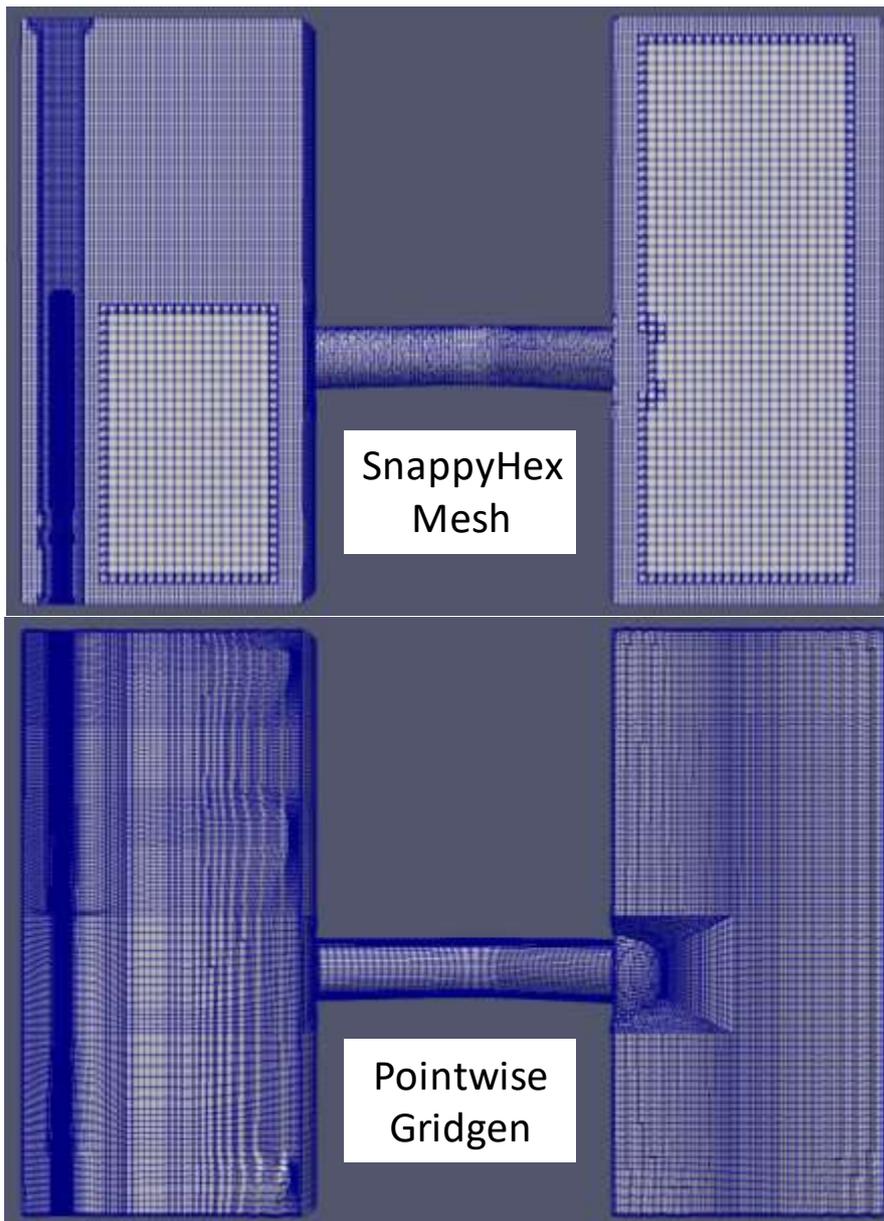


Abb. 2.14 Unterschiedliche Gitter für den Mini-Panda-Benchmark

In Tab. 2.3 sind die Modelle und numerischen Parameter für die beiden Rechnungen dargestellt. Rechn. 1 ist dabei die Rechnung mit dem SnappyHexMesh und Rechn. 2 ist die Rechnung mit dem Gridgen-Gitter. Beide Rechnungen wurden mit OpenFOAM 5.x und dem Solver rhoReactingBuoyantFoam durchgeführt. Als Turbulenzmodell wurde das buoyantkOmegaSST-Modell des FZ-Jülich verwendet.

Die Ergebnisse der beiden Rechnungen finden sich in Abb. 2.15 bis Abb. 2.18. Insgesamt zeigt sich ein relativ geringer Einfluss des Gitters auf die Berechnungsergebnisse. Dies ist anders als beim OECD-Panda-Benchmark.

Tab. 2.3 Infobox für den Mini-Panda-Benchmark

Experiment	Mini-Panda-Benchmark
Phänomene	Auflösung einer Leichtgasschicht
Materialien	Air, He
Software / Version	OpenFOAM 5.x
Solver	rhoReactingBuoyantFoam
Zeitschritte	Variabel (Rechn. 1) und konstant 0,004 s (Rechn. 2)
Courant-Zahl	Max. 10 (Rechn. 1) und max. 3.5 (Rechn. 2)
Turbulenzmodell	buoyantkOmegaSST (FZ-Jülich)
Strahlungsmodell	Ohne
Gittererstellung	SnappyHexMesh (Rechn. 1) und Pointwise / Gridgen (Rechn. 2)
Elementzahl	598.691 (Rechn. 1) und 1.155.559 (Rechn. 2)

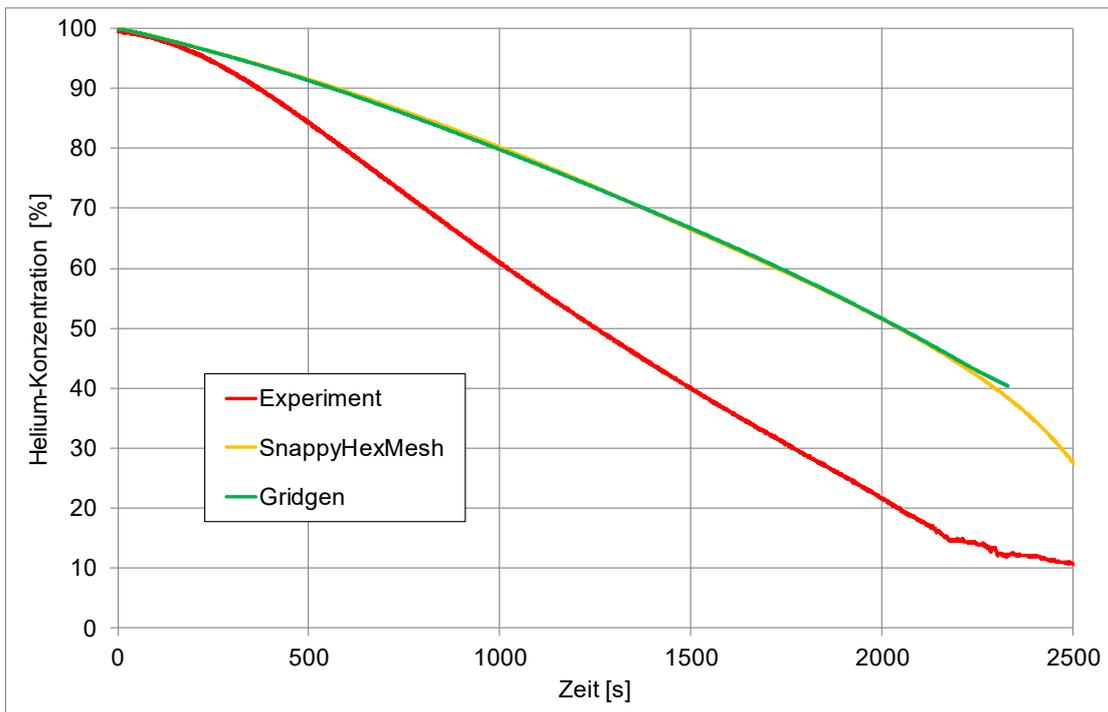


Abb. 2.15 Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_30 (Höhe: 1,82 m)

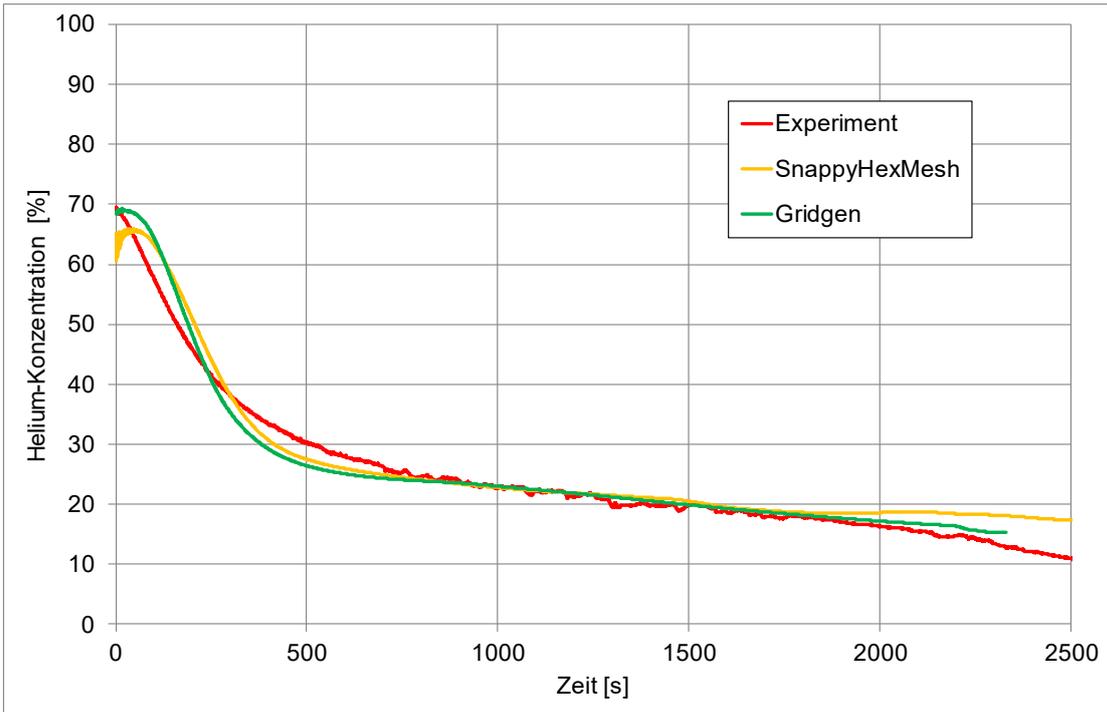


Abb. 2.16 Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_22 (Höhe: 1,47 m)

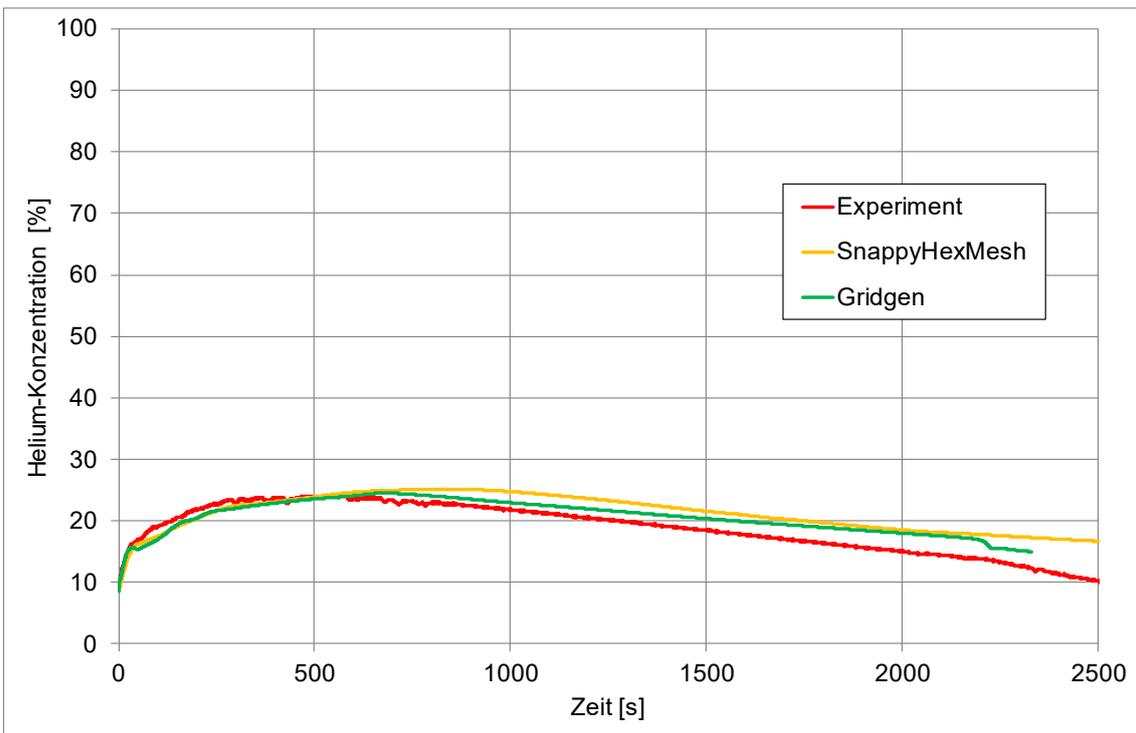


Abb. 2.17 Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_14 (Höhe: 1,22 m)

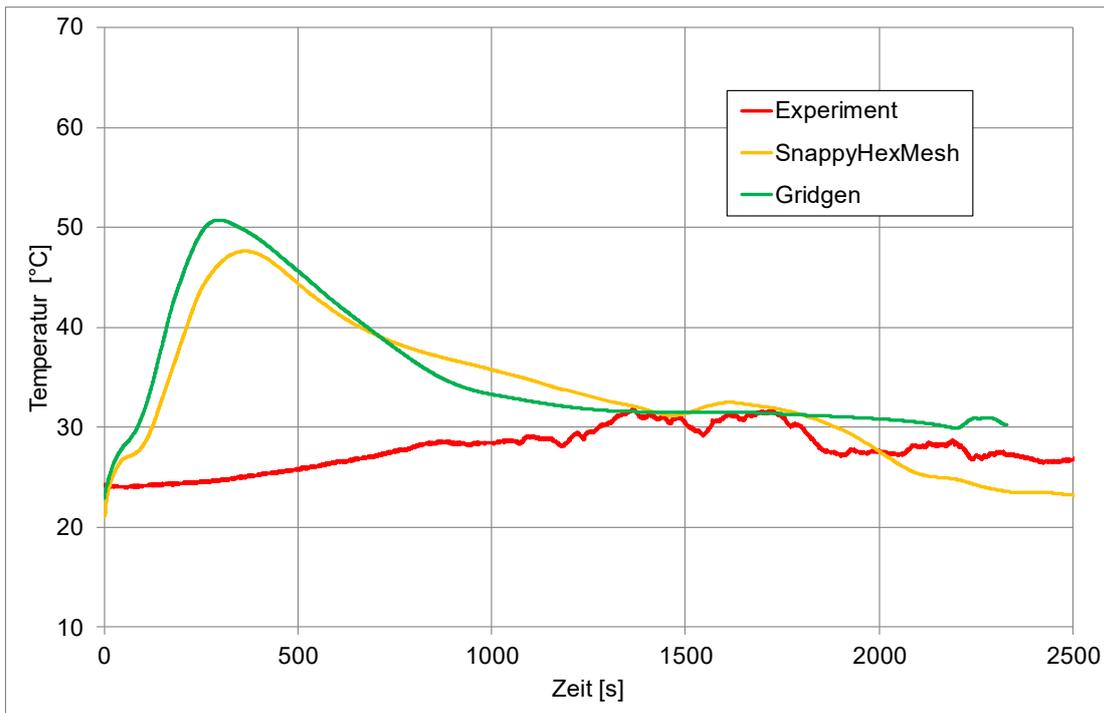


Abb. 2.18 Temperatur am Messpunkt TC_7 (Höhe: 1,46 m)

2.1.5.2 Einfluss des Diskretisierungsschematas

In einer weiteren Parameterstudie sollte der Einfluss des Diskretisierungsschematas auf die Berechnungsergebnisse untersucht werden. Dazu wurden drei Berechnungen durchgeführt und die in fvSchemes enthaltenen Schemata sind in Abb. 2.19 dargestellt. Variante 1 ist das Standardschema. In Variante 2 wurden die Gradienten- und Divergenz-Schemata verändert – hin zu höherer Genauigkeit. In Variante 3 wurden zusätzlich noch die Laplace- und snGradSchemes (Surface normal gradient schemes) hin zu höherer Genauigkeit verändert. Die Genauigkeit der Diskretisierung steigt also von Variante 1 zu Variante 2 und dann nochmal zu Variante 3. Es zeigte sich, dass dadurch die Berechnungsdauern bei Variante 2 und insbesondere bei Variante 3 deutlich anstiegen. Aus diesem Grund wurde die Berechnung mit Variante 3 bei ca. 750 s gestoppt.

Variante 1

```

ddtschemes
{
  default Euler;
}
gradSchemes
{
  default Gauss linear;
}
divSchemes
{
  default Gauss upwind;
  div(phi,u) Gauss upwind;
  div(phi,Yi_h) Gauss upwind;
  div(phi,K) Gauss upwind;
  div(phiD,p) Gauss upwind;
  div(phi,epsilon) Gauss upwind;
  div(phi,k) Gauss upwind;
  div(((rho*nuEff)*dev2(T(grad(U)))) Gauss lin
  //div((muEff*dev2(T(grad(U)))) Gauss line
  div((nuEff*dev2(T(grad(U)))) Gauss linear;
  div(phi,omega) Gauss limitedLinear 1;
  div((he2*grad(AIR))) Gauss linear;
  div((he1*grad(STEAM))) Gauss linear;
  div(phi,p) Gauss limitedLinear 1;
  div(((alphaEff|h)*grad(h))) Gauss linear;
  div(((2*D4)*((alphaEff|h)*grad(h)))) Gauss
  div(phiV,p) Gauss linear;
  div(U) Gauss linear;
  div((p*U)) Gauss linear;
  div(phi,h) Gauss linear;
  div(((he1*Leff)*(thermo:alpha+(rho*D3)))
}
laplacianSchemes
{
  default Gauss linear uncorrected;
}
interpolationSchemes
{
  default linear;
}
snGradSchemes
{
  default uncorrected;
}

```

Variante 2

```

ddtschemes
{
  default Euler;
}
gradSchemes
{
  default grad(U) Gauss linear;
  cellLimited Gauss linear 1;
}
divSchemes
{
  default Gauss upwind;
  div(phi,u) Gauss linearupwind grad(U);
  div(phi,Yi_h) Gauss upwind;
  div(phi,K) Gauss upwind;
  div(phiD,p) Gauss upwind;
  div(phi,epsilon) Gauss upwind;
  div(phi,k) Gauss upwind;
  div(((rho*nuEff)*dev2(T(grad(U)))) Gauss lin
  //div((muEff*dev2(T(grad(U)))) Gauss linear;
  div((nuEff*dev2(T(grad(U)))) Gauss linear;
  div(phi,omega) Gauss limitedLinear 1;
  div((he2*grad(AIR))) Gauss linear;
  div((he1*grad(STEAM))) Gauss linear;
  div(phi,p) Gauss limitedLinear 1;
  div(((alphaEff|h)*grad(h))) Gauss linear;
  div(((2*D4)*((alphaEff|h)*grad(h)))) Gauss li
  div(phiV,p) Gauss linear;
  div(U) Gauss linear;
  div((p*U)) Gauss linear;
  div(phi,h) Gauss linear;
  div(((he1*Leff)*(thermo:alpha+(rho*D3)))*gr
}
laplacianSchemes
{
  default Gauss linear uncorrected;
}
interpolationSchemes
{
  default linear;
}
snGradSchemes
{
  default uncorrected;
}

```

Variante 3

```

ddtschemes
{
  default Euler;
}
gradSchemes
{
  default grad(U) Gauss linear;
  cellLimited Gauss linear 1;
}
divSchemes
{
  default Gauss upwind;
  div(phi,u) Gauss linearupwind grad(U);
  div(phi,Yi_h) Gauss limitedLinear 1;
  div(phi,K) Gauss limitedLinear 1;
  div(phiD,p) Gauss limitedLinear 1;
  div(phi,epsilon) Gauss limitedLinear 1;
  div(phi,k) bounded Gauss linearupwind default;
  div(((rho*nuEff)*dev2(T(grad(U)))) Gauss line
  div((nuEff*dev2(T(grad(U)))) Gauss linear;
  div(phi,omega) Gauss limitedLinear 1;
  div((he2*grad(AIR))) Gauss linear;
  div((he1*grad(STEAM))) Gauss linear;
  div(phi,p) Gauss limitedLinear 1;
  div(((alphaEff|h)*grad(h))) Gauss linear;
  div(((2*D4)*((alphaEff|h)*grad(h)))) Gauss lin
  div(phiV,p) Gauss linear;
  div(U) Gauss linear;
  div((p*U)) Gauss linear;
  div(phi,h) Gauss linear;
  div(((he1*Leff)*(thermo:alpha+(rho*D3)))*grac
}
laplacianSchemes
{
  default Gauss linear limited 0.4;
}
interpolationSchemes
{
  default linear;
}
snGradSchemes
{
  default limited 0.4; // uncorrected;
}

```

Abb. 2.19 Unterschiedliche Diskretisierungsschemata

In Abb. 2.20 bis Abb. 2.23 werden die Ergebnisse der drei Variationsrechnungen miteinander verglichen. Insgesamt zeigen sich an den unterschiedlichen Messpunkten nur geringe Unterschiede. Dies gilt sowohl für die Heliumkonzentrationen als auch für die Temperaturen. Insgesamt scheint Variante 1 schon eine hinreichend hohe Genauigkeit zu haben und eine weitere Verfeinerung der Diskretisierungsschemata bringt keinen signifikanten zusätzlichen Nutzen mehr. Deshalb und wegen der deutlich höheren Rechenzeiten wird bei den weiteren Rechnungen Variante 1 verwendet. Dieses Ergebnis lässt sich nur eingeschränkt verallgemeinern, da auch die ablaufenden physikalischen Prozesse und das verwendete CFD-Gitter einen Einfluss haben. So wurde in dieser Untersuchung ein Gitter mit in großen Bereichen orthogonalen Zellen verwendet. In diesem Fall ist zu erwarten, dass die Vernachlässigung von Termen, die nur bei Nicht-Orthogonalität des Gitters eine Rolle spielen (z. B. LaplacianSchemes uncorrected), zu keiner signifikanten Abweichung führt.

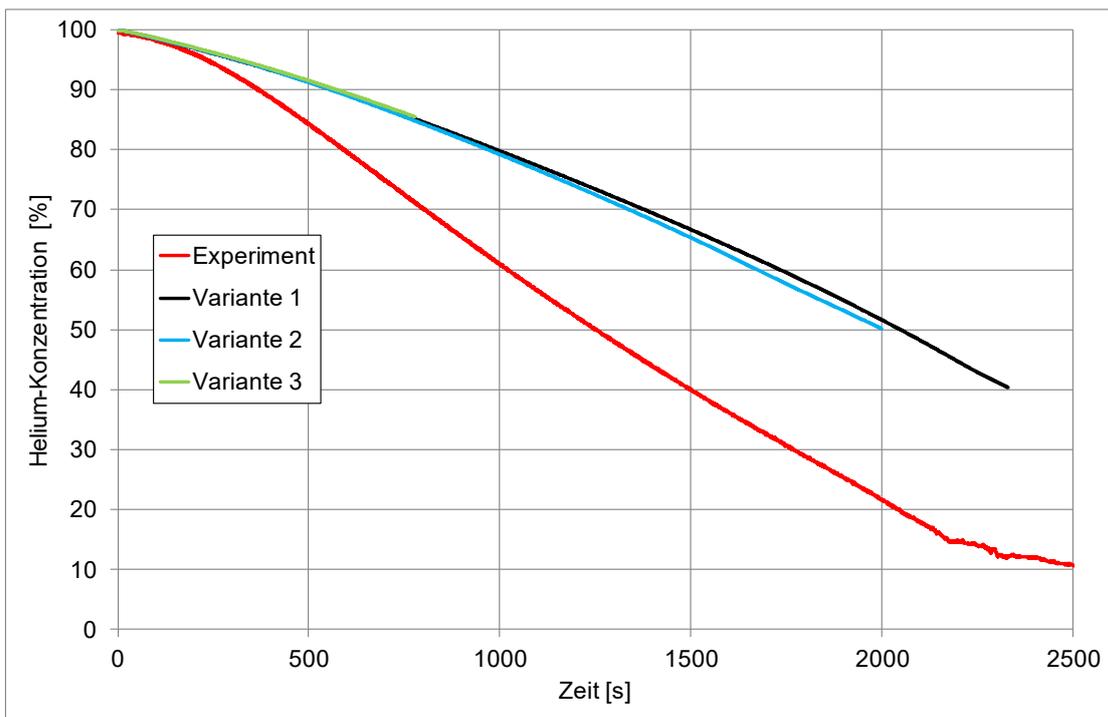


Abb. 2.20 Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_30 (Höhe: 1,82 m)

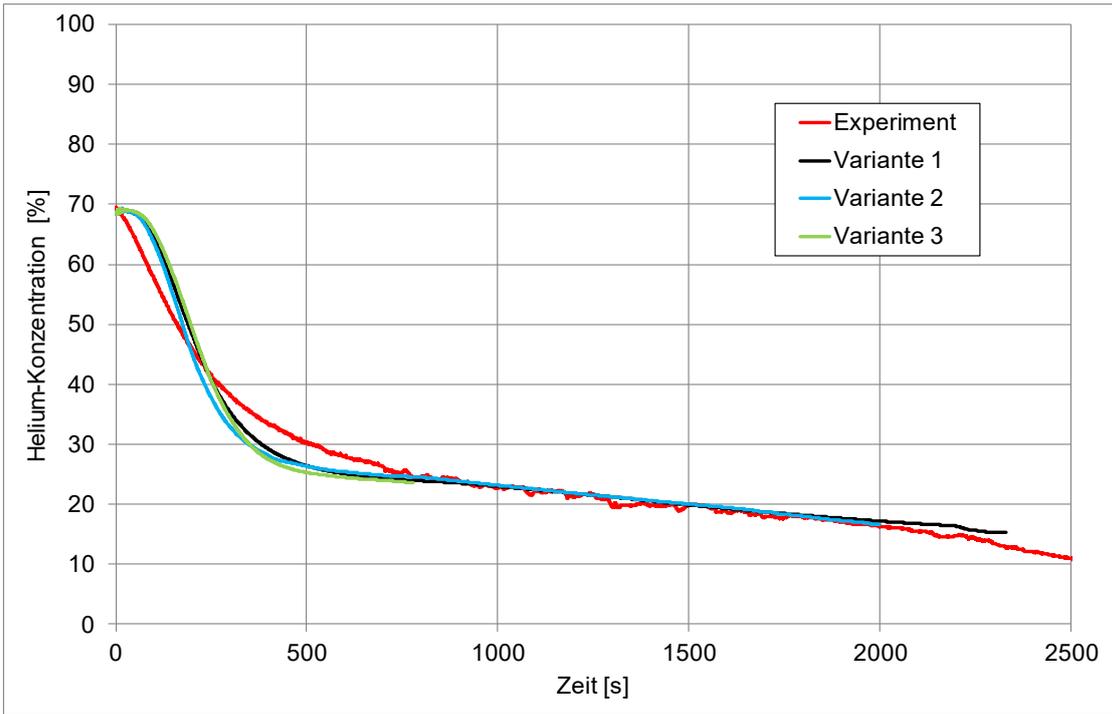


Abb. 2.21 Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_22 (Höhe: 1,47 m)

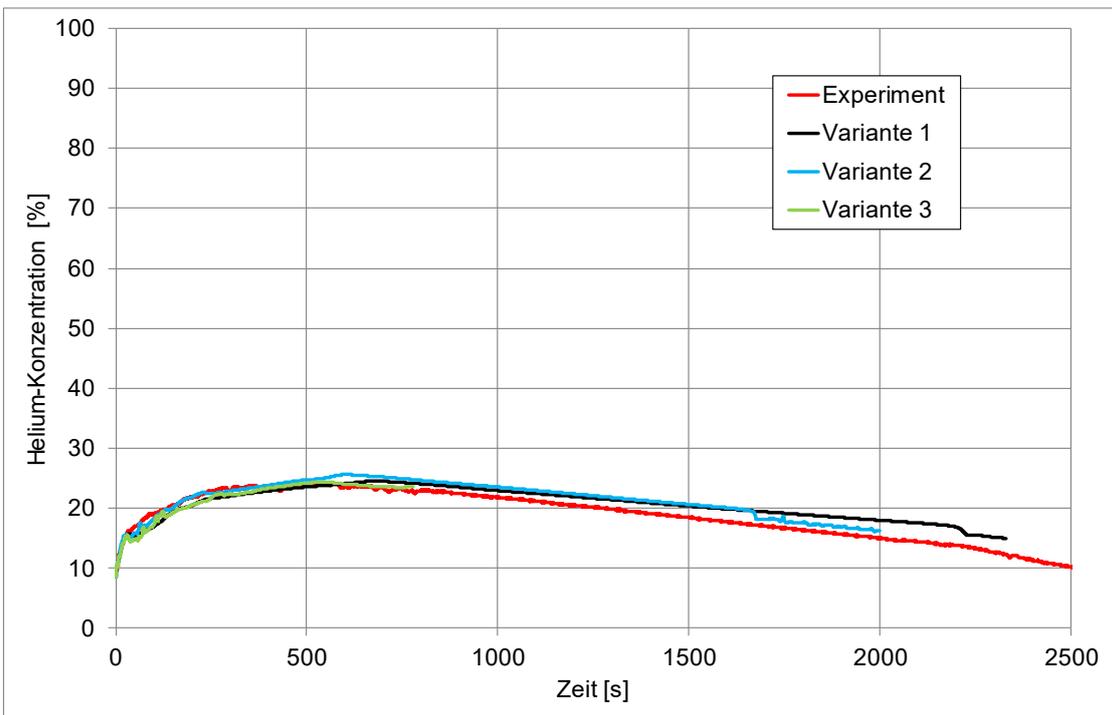


Abb. 2.22 Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_14 (Höhe: 1,22 m)

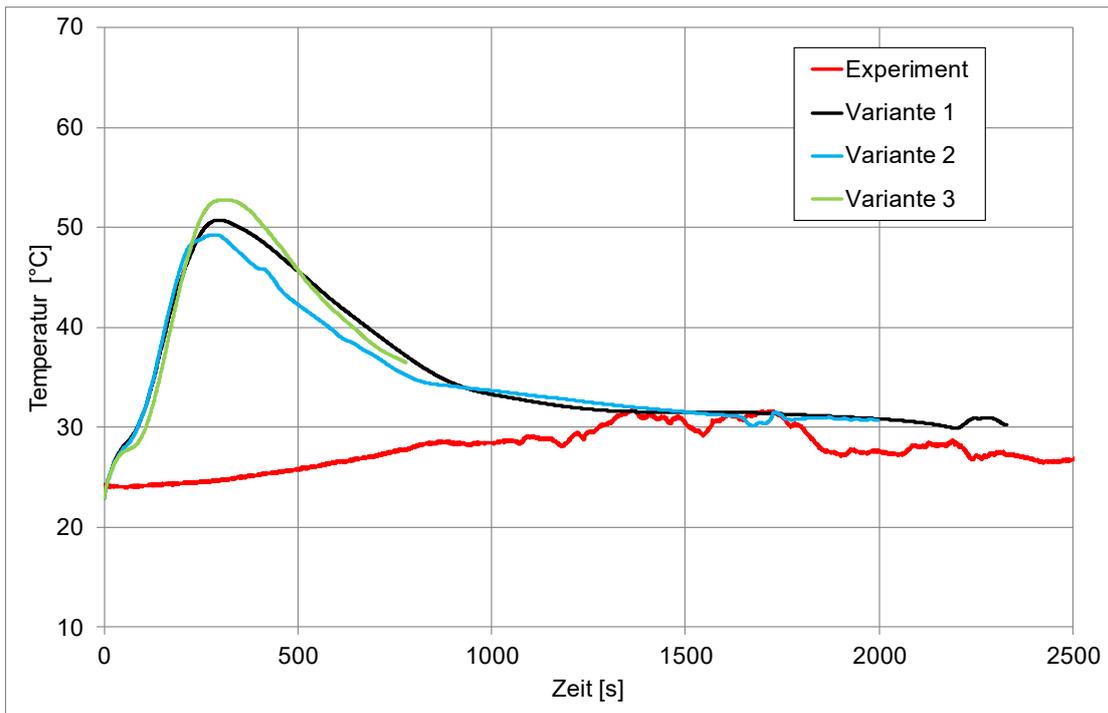


Abb. 2.23 Temperatur am Messpunkt TC_7 (Höhe: 1,46 m)

2.1.5.3 Einfluss der Zeitschrittweite

In einer weiteren Parameterstudie sollte auch beim Mini-Panda-Versuch der Einfluss der Zeitschrittweite untersucht werden. Dazu wurden zwei Rechnungen mit 0,004 s und 0,02 s Zeitschrittweite durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abb. 2.24 bis Abb. 2.27 dargestellt. Es zeigt sich bei allen Monitorpunkten fast keine Änderung der Ergebnisse, die Kurven liegen fast identisch übereinander. Insofern liegt in diesem Bereich eine Unabhängigkeit vom Zeitschritt vor. Aus Zeitgründen kann deshalb mit dem größeren Zeitschritt gerechnet werden, da diese Berechnung wesentlich schneller abläuft. Dieses Ergebnis ist ähnlich zu der Zeitschrittstudie beim OECD-Panda-Benchmark. Die maximalen Courantzahlen liegen bei 3,5 (Zeitschritt 0,004 s) und 10 (Zeitschritt 0,02 s).

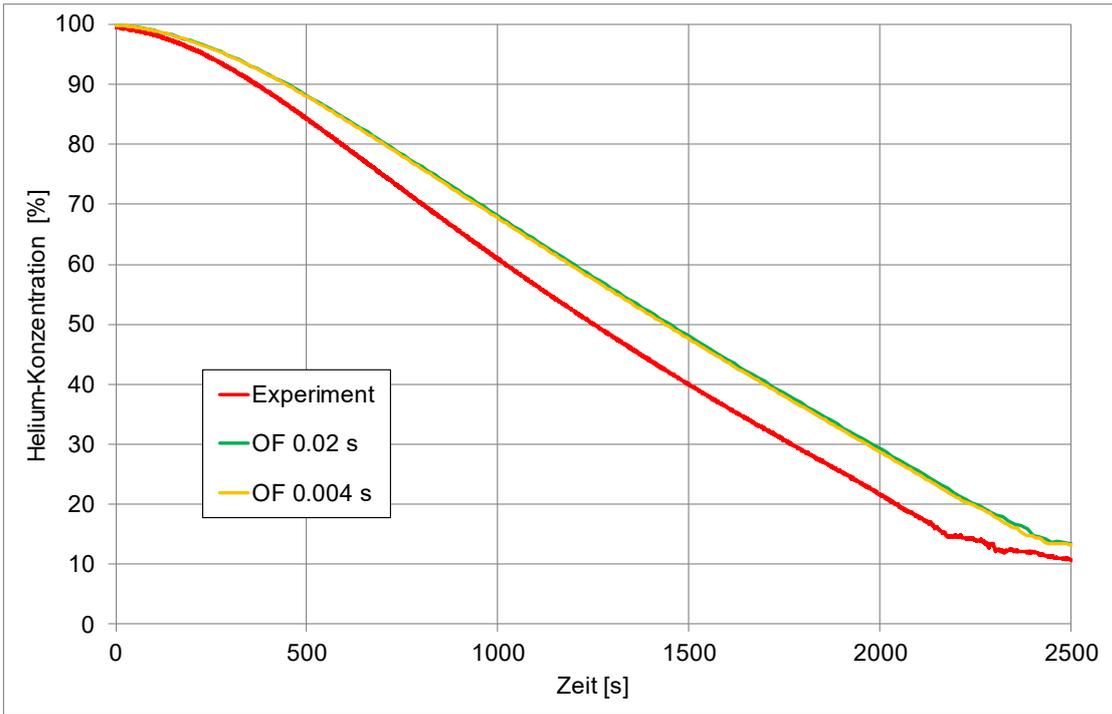


Abb. 2.24 Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_30 (Höhe: 1,82 m)

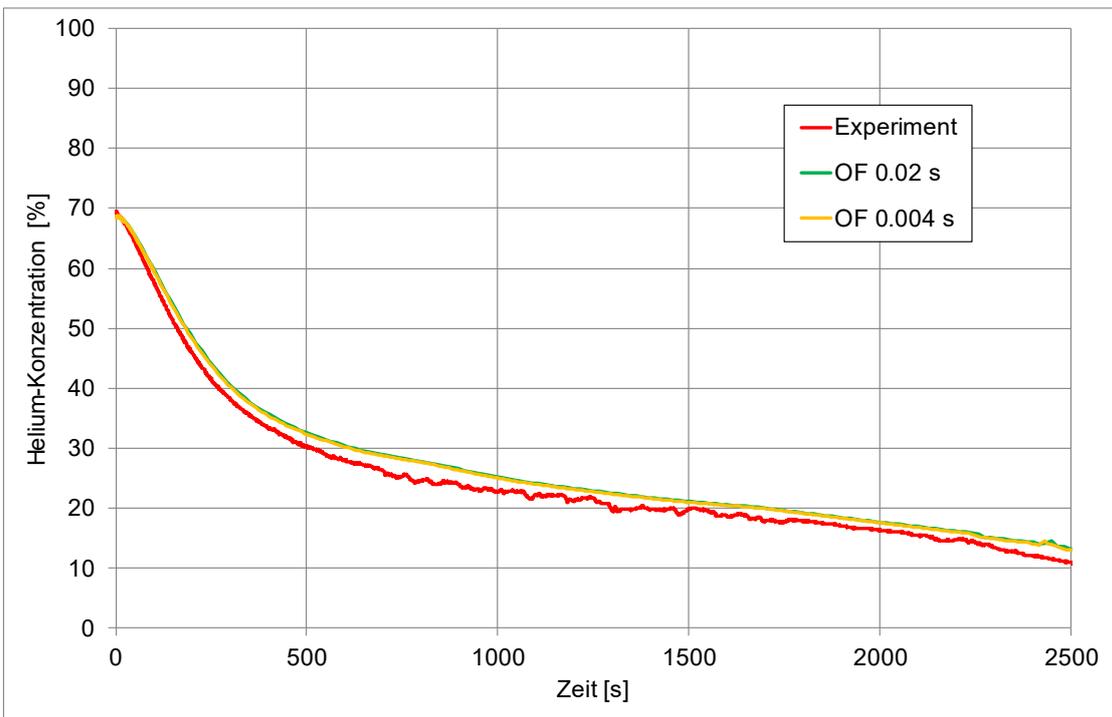


Abb. 2.25 Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_22 (Höhe: 1,47 m)

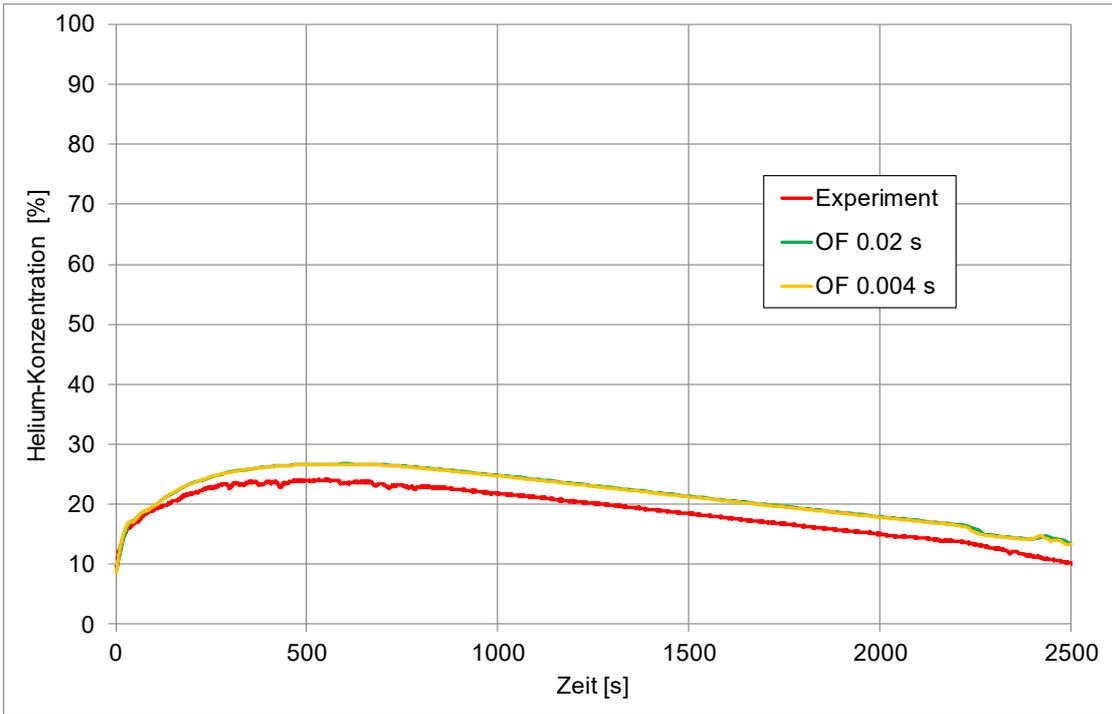


Abb. 2.26 Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_14 (Höhe: 1,22 m)

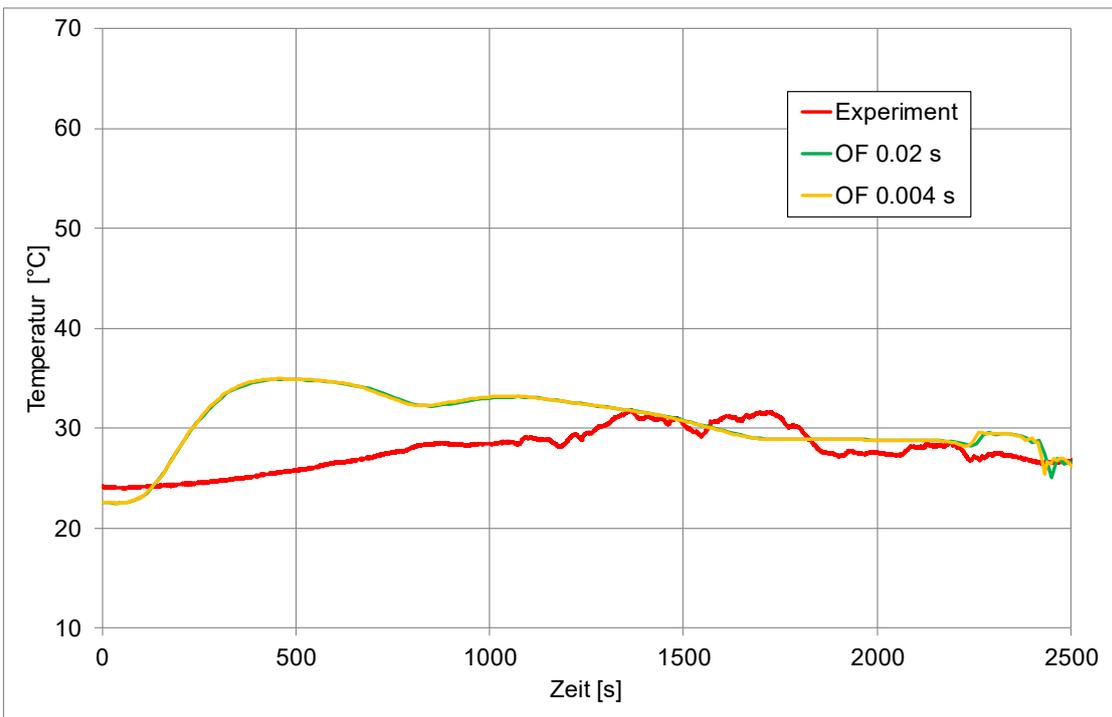


Abb. 2.27 Temperatur am Messpunkt TC_7 (Höhe: 1,46 m)

2.1.5.4 Abschließender Vergleich mit experimentellen Daten und CFX

In Abb. 2.28 bis Abb. 2.31 werden die Ergebnisse der OpenFOAM-Simulation noch einmal mit den experimentellen Daten und auch mit einer CFX-Rechnung verglichen. Hierbei wurde das Gridgen-Gitter mit großem Zeitschritt (0,02 s) verwendet. Für die CFX-Rechnung wurde das gleiche Gridgen-Gitter verwendet, das auch für die OpenFOAM-Rechnung verwendet wurde. Insgesamt zeigt sich bei allen Messpunkten eine sehr gute Übereinstimmung der OpenFOAM- und CFX-Rechnungen. Bei beiden ist die Abbauzzeit des Heliums relativ ähnlich (bei OpenFOAM dauert der Abbau nur minimal länger als bei CFX). Es gibt nur kleinere Unterschiede, die möglicherweise in leicht anderen Initialwerten der beiden Rechnungen liegen. Insgesamt konnte mit diesem Versuch erfolgreich nachgerechnet werden. Die Gittererstellung mit Pointwise/Gridgen ist praktikabel und ermöglicht die Erzeugung von qualitativ hochwertigen CFD-Gittern. Insbesondere im Einlassbereich ergaben sich Vorteile gegenüber SnappyHexMesh.

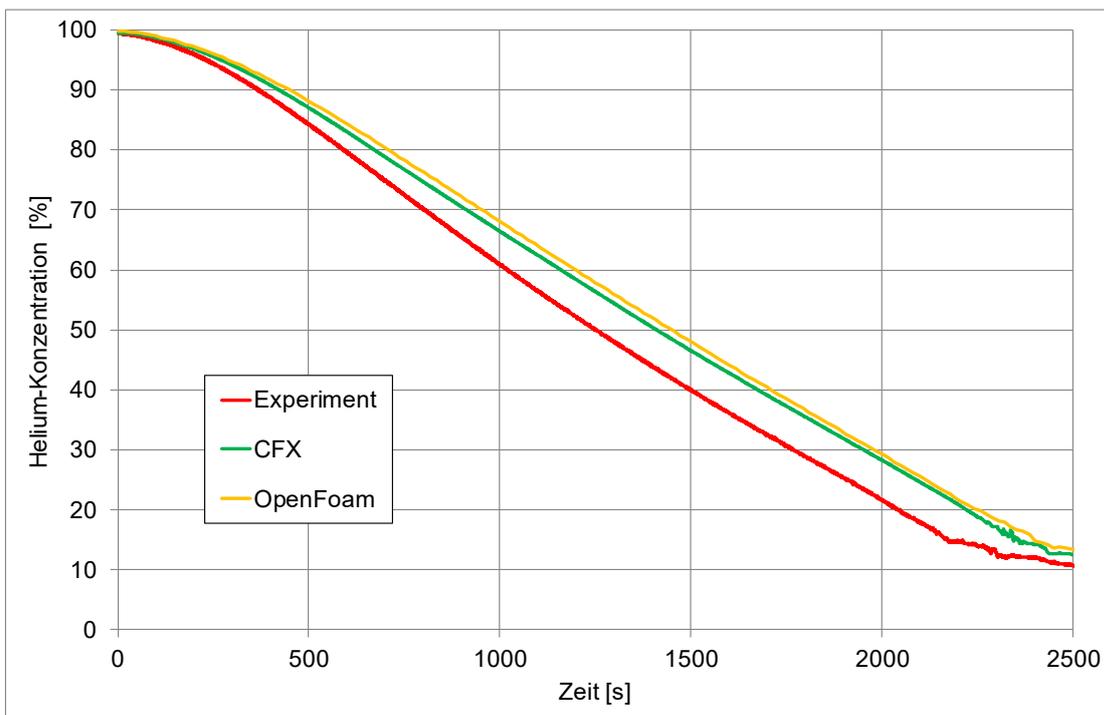


Abb. 2.28 Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_30 (Höhe: 1,82 m)

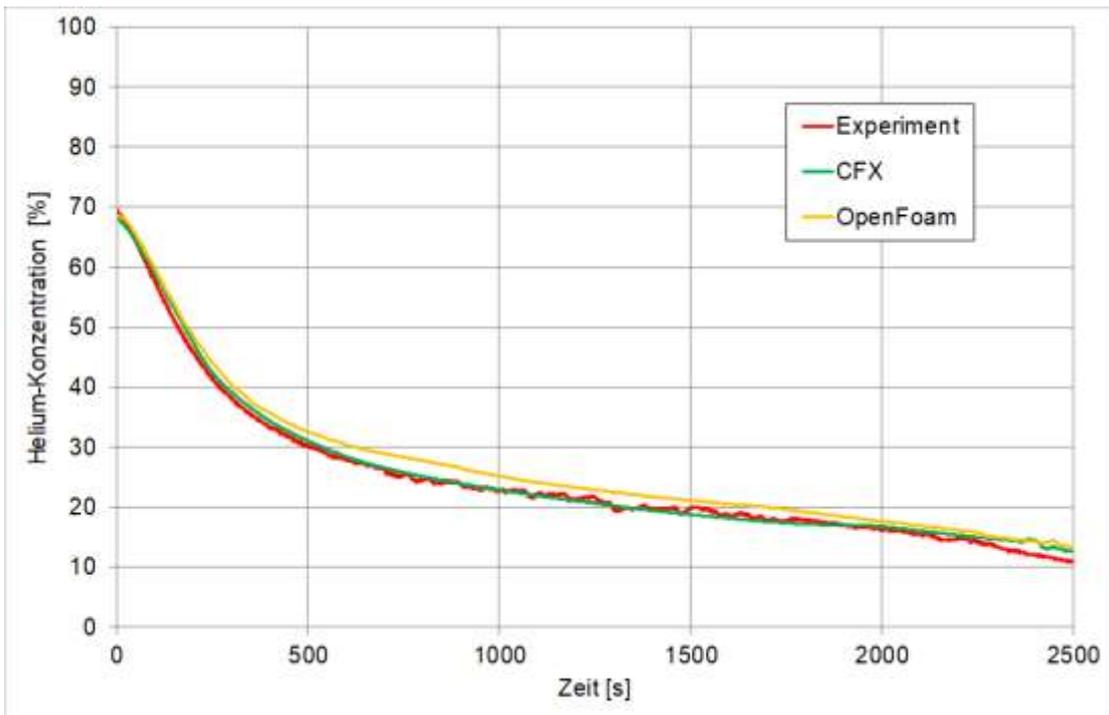


Abb. 2.29 Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_22 (Höhe: 1,47 m)

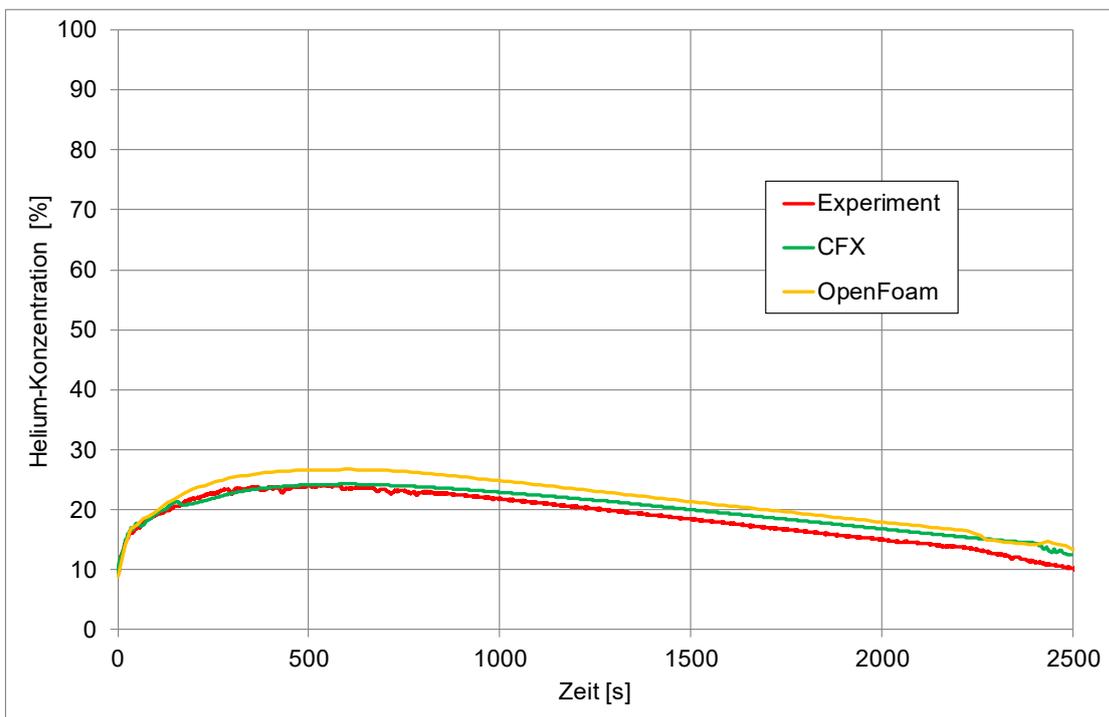


Abb. 2.30 Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_14 (Höhe: 1,22 m)

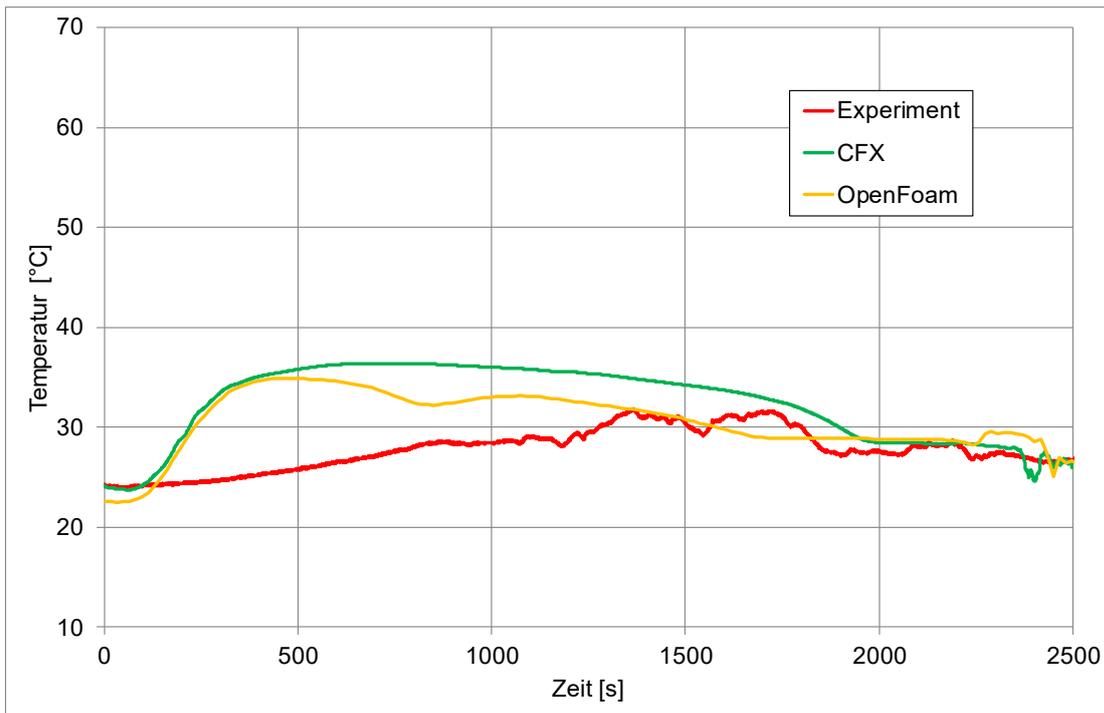


Abb. 2.31 Temperatur am Messpunkt TC_7 (Höhe: 1,46 m)

2.1.6 Zusammenfassung und Fazit

Zur Auswahl einer geeigneten OpenFOAM-Code-Version und eines geeigneten Basis-Solvers für die Simulation von Gasverteilungen wurden die Experimente OECD-Panda-Benchmark und Mini-Panda-Benchmark berechnet. Mit der Version 5.x der OpenFOAM-Foundation-Release von Henry Weller und dem Solver rhoReactingBuoyantFoam konnten beide Versuche zufriedenstellend nachgerechnet werden. Dabei kam das um Buoyancy-Terme erweiterte SST-Turbulenzmodell zum Einsatz. Für weitere Arbeiten sollte diese OpenFOAM-Version oder aber neuere Release der Foundation nach entsprechenden Regressionstests genutzt werden.

Es wurden Parameterstudien zum Einfluss der Zeitschritte und zum Einfluss der Diskretisierungsschemata durchgeführt. Die dabei gewonnenen Kenntnisse dienen als Ausgangspunkt für die OpenFOAM-Arbeiten in AP3.1.

Die Gittererzeugung sollte zukünftig wie schon für ANSYS-CFX-Simulationen mit dem Gittergenerator Pointwise/Gridgen erfolgen, da es für die geplanten Anwendungen besser geeignet ist als SnappyHexMesh. Insbesondere erlaubt Gridgen eine Verfeinerung in nur eine Raumrichtung, was z. B. zur besseren Vernetzung des Einlass-Bereiches

genutzt werden kann. Bei der Netzqualität können die bereits für CFX vorhandenen Richtlinien zur Gittererzeugung genutzt werden.

Für die in diesem Projekt durchgeführten Entwicklungsarbeiten wurde als Basisversion die OpenFOAM-Release 6 der Foundation ausgewählt:

In dieser OpenFOAM-Release liegen folgende relevanten Modelle vor:

- SST (Shear-Stress-Transport) -Turbulenzmodell einschließlich Buoyancy-Terme (als Erweiterung)
- P1 oder fvDom zur Simulation der Wärmestrahlung. Diese Modelle werden im Arbeitspunkt AP1.3 vertieft getestet.
- Wandfunktionen zur Beschreibung der Geschwindigkeit, Wärmetransport und Turbulenz in Wandnähe bei $y^+ > 1$, mit y^+ dimensionsloser Wandabstand. (Diese unterscheiden sich etwas von den in ANSYS CFX implementierten Wandfunktionen).

Folgende Modelle wurden im Rahmen dieses Projekts in dieser OpenFOAM-Version von der GRS implementiert:

- Diffusionsmodell (siehe AP1.2)
- Wandkondensationsmodell (siehe AP1.2)
- Volumenkondensationsmodell (siehe AP1.2)
- PAR-Modell (siehe AP1.4)

Es gibt eine Reihe von relevanten Modellen, die aus zeitlichen Gründen nicht im Rahmen dieses Projekts entwickelt werden konnten. Sie sollten in zukünftigen Projekten der GRS oder bei Partnerorganisationen entwickelt werden. Zu nennen wären u. a.:

- Modellierung von Türen bzw. Berstfolien
- Aerosolmodellierung
- Modellierung von Sümpfen und Wasservorlagen
- Sprays

2.2 AP1.2 Entwicklung von Wand- und Volumenkondensationsmodellen

2.2.1 Einleitung

In der aktuellen Standard-Version von OpenFOAM 6.0 gibt es bisher keine Wand- oder Volumenkondensationsmodelle. Diese sollten durch die GRS entwickelt und anhand von Testbeispielen und Experimenten validiert werden. Zunächst muss allerdings die Diffusionsmodellierung in OpenFOAM betrachtet werden, da hier Probleme auftraten. Danach wird die Implementierung und Validierung der Kondensationsmodelle erläutert. Die folgenden Abschnitte erläutern die Vorgehensweise und Ergebnisse der GRS-Arbeiten hierzu.

2.2.2 Diffusionsmodell

2.2.2.1 Modellierung der Diffusion in OpenFOAM

Wie im AP1 (siehe Kapitel 2) festgestellt wurde, treten bei der Standardversion von OpenFOAM 6.0 Inkonsistenzen/fehlende Terme zwischen der Spezies- und der Energiegleichung auf. Diese betreffen den Diffusionsterm. Nach dem Fick'schen Diffusionsgesetz gelten für Stoffsysteme bestehend aus zwei unterschiedlichen Spezies die im Folgenden dargestellten Grundgleichungen. Für den Speziestransport gilt:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla(\rho U Y_i) = -\nabla J_i$$

Dabei ist der diffusive Massenstrom der Spezies i :

$$J_i = -\rho(\Gamma_i)\nabla Y_i$$

$$\Gamma_i = \Gamma_{i,\text{molecular}} + \Gamma_{i,\text{turbulent}} = \frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t}$$

Für den Enthalpietransport gilt:

$$\frac{\partial(\rho h_{tot})}{\partial t} + \nabla(\rho U h_{tot}) = \frac{\partial p}{\partial t} + \rho U g - \nabla q_{conduction} - \nabla q_{radiation} - \sum_{i=1}^N \nabla J_i h_i$$

Hierbei sind

Y_i	(Massen-)Anteile der Spezies
ρ	Dichte, Γ : Diffusionskoeffizient
μ_t	Turbulente Viskosität
Sc	Schmidtzahl.

In Tab. 2.1 ist dargestellt, welche Terme ursprünglich (OpenFOAM 6.0 Standard) und welche Terme neu von der GRS in der Spezies- bzw. Energiegleichung implementiert wurden.

Hierbei sind

μ	Viskosität
C_p	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
C_v	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen
α	Temperaturleitfähigkeit
α_t	Turbulente Temperaturleitfähigkeit

In erster Näherung kann dabei Luft als eine Spezies aufgefasst werden, weil die relevanten Materialdaten (insbesondere Diffusion) der Hauptkomponenten N_2 und O_2 sehr ähnlich sind. Bei Systemen mit einer größeren Anzahl von Spezies ist das generalisierte Fick'sche Diffusionsgesetz mit binären Diffusionskonstanten anzuwenden. Für eine größere Anzahl von Spezies wird das hierbei zu lösende Gleichungssystem schnell sehr aufwendig. Deshalb kann die Verwendung von Vereinfachungen sinnvoll sein (z. B. mittlerer Diffusionskoeffizient, oder „effective diffusivity model“ /KUM 20/). Bei der vereinfachten Modellierung ist zu gewährleisten, dass die Summe aller Massenbrüche 1 bleibt.

Bei der OpenFOAM-Standard-Version führen die unterschiedlichen Formulierungen zwischen Spezies- und Energiegleichung zu einem Fehler bei den Temperaturen im Bereich starker Speziesgradienten, falls die Lewis-Zahl $\neq 1$ ist. Deshalb werden hier zwei alternative Formulierungen vorgeschlagen. In beiden wird die molekulare Diffusion durch den Term $\rho \cdot D$ berücksichtigt, die turbulente Diffusion durch den Term μ_t/Sc . Bei der Energiegleichung gibt es eine vereinfachte und eine korrekte Version:

- Vereinfachte Version: Hierbei wird in der Speziesgleichung die korrekte Formulierung verwendet. Um einen Temperaturfehler zu vermeiden, wird bei der

Energiegleichung der gleiche Term wie in der Speziesgleichung verwendet. In der neuen Formulierung tritt dann der Temperaturfehler nicht mehr auf. Dafür wird die Wärmeleitung bei einem Temperaturgradienten nicht berücksichtigt. Dieser Work-Around wird mit dem Namen **chtMultiRegionSchmidtFoam05** bezeichnet. Er wurde temporär genutzt, bis die korrekte Version in OpenFOAM implementiert und verifiziert wurde.

- Korrekte Version: Hier wird in der Spezies- und Energiegleichung die korrekte Formulierung verwendet. Die Wärmeleitung bei einem Temperaturgradienten wird hier berücksichtigt. Um Fehler zu vermeiden, mussten noch zusätzliche Terme, die den mit dem diffusiven Stofftransport verbundenen Energietransport berücksichtigen, ergänzt werden. Diese Version wird mit dem Namen **chtMultiRegionSchmidtFoam** bezeichnet.

Tab. 2.4 Alte und neue Definition der Diffusionsterme in OpenFOAM

Name	chtMultiRegion-Foam	chtMultiRegion-SchmidtFoam05	chtMultiRegion-SchmidtFoam
Diffusionsterme	Alt (OpenFOAM 6.0 Standard)	Temporärer Work-around (GRS)	Neu / korrekt (GRS)
Speziesgleichung	$\mu + \mu_t$	$\rho \cdot \Gamma_{i,molecular} + \mu_t / Sc_t$	$\rho \cdot \Gamma_{i,molecular} + \mu_t / Sc_t$
Energiegleichung	$(Cp/Cv) \cdot (\alpha + \alpha_t)$	$\rho \cdot \Gamma_{i,molecular} + \mu_t / Sc_t$	$-\nabla q_{conduction}$ $- \sum_{i=1}^N \nabla J_i h_i$

2.2.2.2 Verifikation der in OpenFOAM implementierten Diffusionsmodelle

Um die neu implementierten Modelle zu überprüfen wurde ein einfaches Testbeispiel aufgesetzt. Dieses ist in Abb. 2.32 dargestellt. Hierbei handelt es sich um ein Volumen, das zur Hälfte mit Luft und zur Hälfte mit Dampf gefüllt ist. Gravitation und Turbulenz werden vernachlässigt. Die beiden Spezies mischen sich nur durch reine Diffusion. Dieses Beispiel wurde sowohl mit OpenFOAM als auch mit CFX gerechnet.

Der zeitliche Verlauf der Dampfkonzentrationen an mehreren Messpunkten ist in Abb. 2.33 dargestellt. Zunächst wurde hier nur der vereinfachte Ansatz (chtMultiRegionSchmidtFoam05) verwendet. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung von OpenFOAM und CFX. Der Diffusionsterm kann somit in der neuen Implementierung die molekulare Diffusion richtig abbilden.

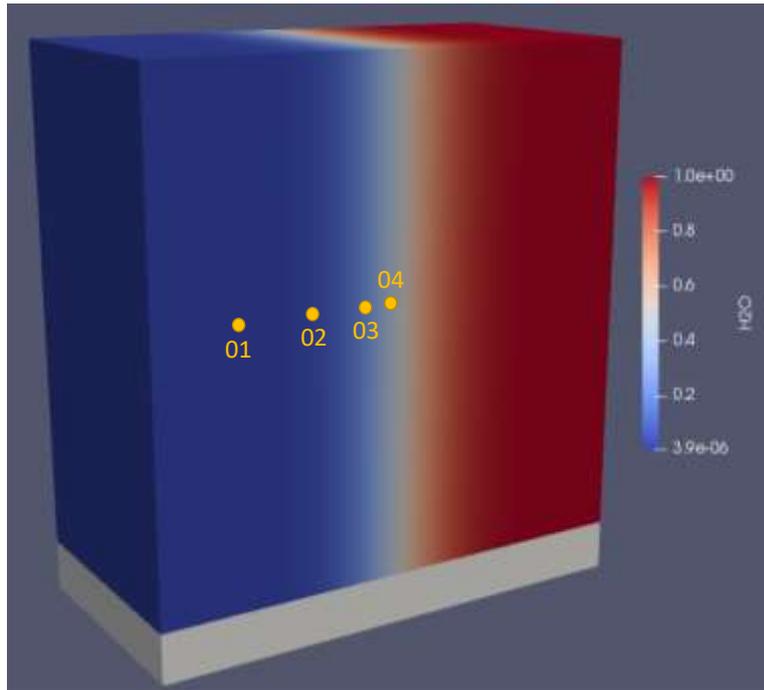


Abb. 2.32 Testbeispiel für das Diffusionsmodell mit Monitorpunkten

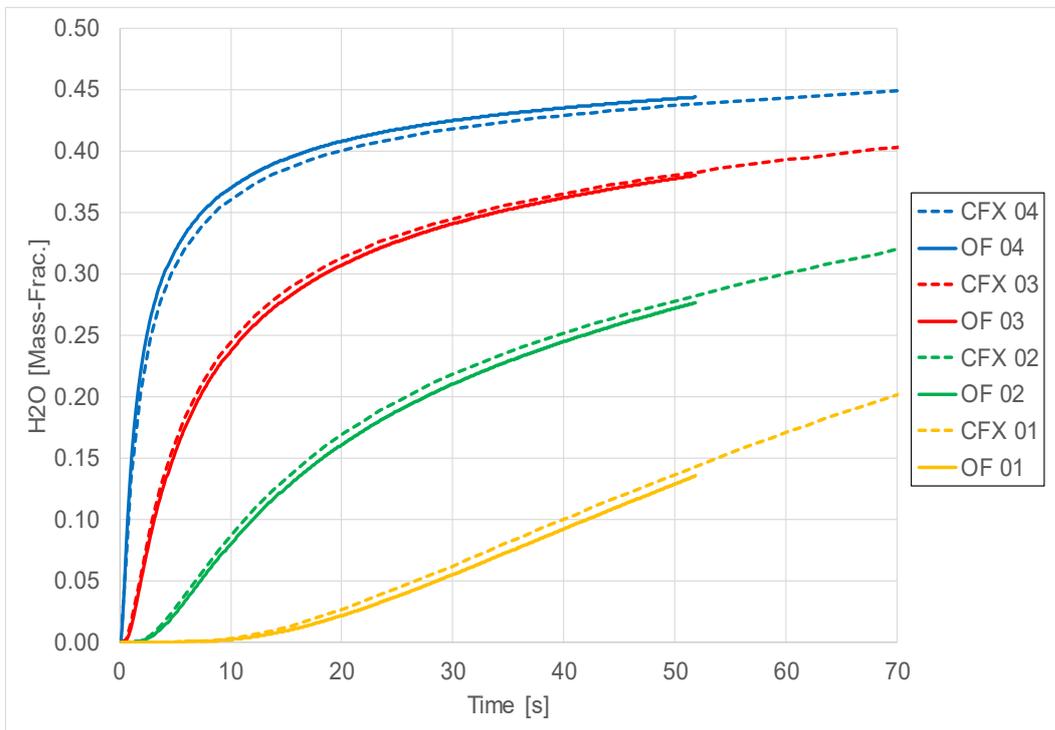


Abb. 2.33 Verlauf der Dampf-Massenbrüche an den unterschiedlichen Monitorpunkten (vereinfachter OpenFOAM-Ansatz / chtMultiRegionSchmidtFoam05)

In Abb. 2.34 wird das vereinfachte Modell noch einmal anhand des Monitorpunktes 04 mit dem verbesserten Diffusionsansatz (chtMultiRegionSchmidtFoam) und mit CFX

verglichen. Die beiden OpenFOAM-Rechnungen zeigen den identischen Verlauf. Die Kurven liegen direkt übereinander, da hier in der Speziesgleichung derselbe Term verwendet wurde. Weiterhin zeigt sich eine gute Übereinstimmung mit der CFX-Rechnung. In Abb. 2.35 werden die Temperaturen für diese Modelle an dem Monitorpunkt 04 in der Mitte dargestellt. Während CFX, das vereinfachte und das verbesserte OpenFOAM-Modell korrekt keine (oder kaum) eine Temperaturveränderung anzeigen, zeigt die OpenFOAM-Originalversion hier einen deutlichen Fehler bei der Energiegleichung.

Als Fazit kann gesagt werden, dass der vorhandene Fehler in OpenFOAM korrigiert werden konnte und die berechneten Diffusionsraten den mit CFX berechneten Diffusionsraten entsprechen. Falls Wärmeleitung im Gas eine Rolle spielt, dann wird diese nur mit dem vollständigen Diffusionsansatz von chtMultiRegionSchmidtFOAM korrekt berechnet.

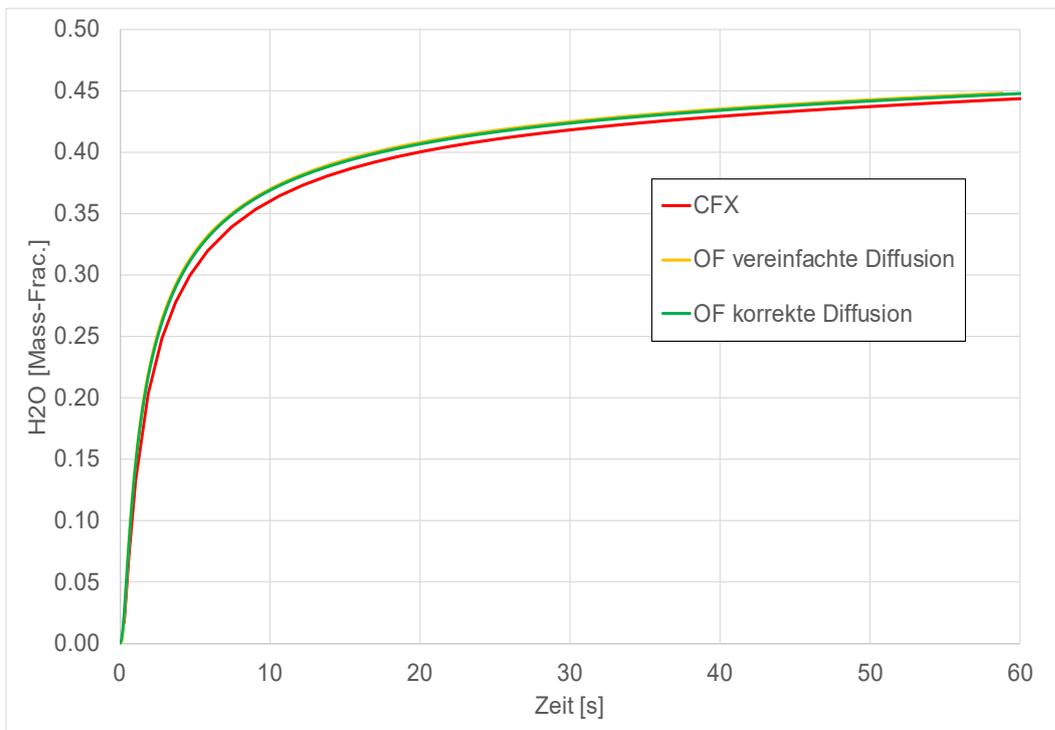


Abb. 2.34 Vergleich der Dampfkonzentration bei unterschiedlichen Diffusionsmodellen (bei Monitorpunkt 04)

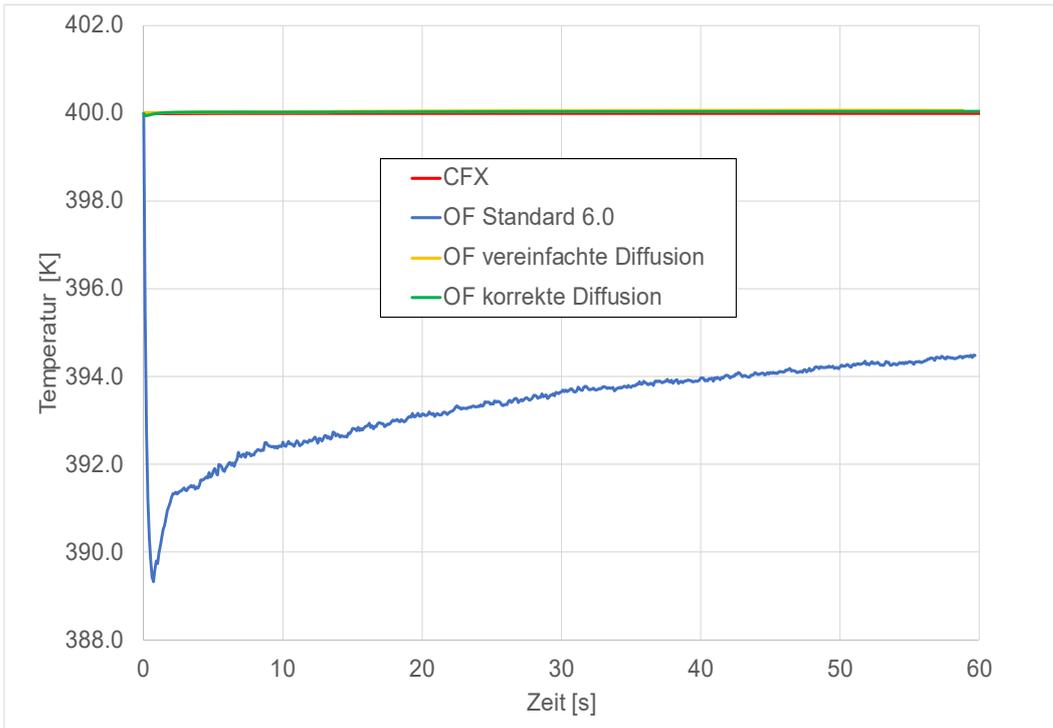


Abb. 2.35 Vergleich der Temperaturen bei unterschiedlichen Diffusionsmodellen (bei Monitorpunkt 04)

Weiterhin wurde eine Funktion implementiert, die auf Basis der Felder für Druck und Temperatur die lokale molekulare Diffusionskonstante nach der Gleichung berechnet:

$$\Gamma_{i,\text{molecular}} = \rho \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right] \times 1,18623 \times 10^{-9} \left(\frac{T [\text{K}]^{1.75}}{(1,205 \times 10^5 + p [\text{Pa}]) / 10^5} \right) \left[\frac{\text{m}^2}{\text{s}} \right]$$

Diese Funktion wird sowohl im modifizierten Solver `chtMultiRegionSchmidtFoam` wie auch in der neuen Randbedingung für die Wandkondensation verwendet, um die molekulare Diffusionskonstante von Wasserdampf in Luft in Abhängigkeit des lokalen Drucks und der lokalen Temperatur zu bestimmen.

In einem Refactoring der momentanen Implementierung sollte ein entsprechendes Feld im Solver hinzugefügt werden und die Berechnung nur einmal pro „äußeren“ Iteration in jedem Zeitschritt durchgeführt werden. Langfristig sollte geprüft werden, ob nicht in OpenFOAM eine generische Klasse für die Diffusion von unterschiedlichen Fluiden innerhalb eines Rechengebiets implementiert werden sollte. Dabei könnte analog zur momentanen Implementierung der Temperaturleitfähigkeit in Fluiden vorgegangen werden, wobei die molekulare und turbulente Prandtl-Zahl durch die entsprechenden Schmidt-Zahlen ersetzt würden.

```

tmp<volScalarField> ANSYS_D_H2O_in_Air
(
    const volScalarField& p,
    const volScalarField& T
);

```

Abb. 2.36 Deklaration der Funktion zur Berechnung der Diffusionskonstante von Wasserdampf in Luft

2.2.3 Volumenkondensationsmodell

2.2.3.1 Implementierung des Volumenkondensationsmodells

Die bei einer Volumenkondensation notwendigen Quellterme bzw. Senken für Masse, Spezies (H₂O) und Energie werden mit Hilfe der Datei „fvOptions“ als dynamischer Code eingefügt (Typ „scalarCodedSource“). Die eigentlichen Berechnungen werden dabei nochmal in eine Datei „bulkCond“ ausgelagert. Die Quellterme ergeben sich aus der Differenz zwischen aktuellem Partialdruck des Dampfes und dem Sättigungsdampfdruck. Der Sättigungsdampfdruck wird mit der Antoine-Gleichung (aus aktuellem Druck und Temperatur) berechnet, die genauso auch schon in ANSYS-CFX implementiert ist. Multipliziert wird dieser Ausdruck noch mit einem „Kondensations-Faktor“, der bestimmt, wie schnell die Differenz zwischen aktuellem Druck und Zielwert abnehmen soll (wird in CFD-Sprache allgemein auch oft als Relaxations-Faktor bezeichnet):

$$CondSource = -\left(\frac{CondFactor \cdot PDiff}{Step}\right)$$

Hierbei sind

CondFactor	Relaxationsfaktor
PDiff	Druckdifferenz aktuelle Dampf-Partialdruck und Sättigungsdampfdruck
Step	Zeitschrittweite

Ein sehr hoher „CondFactor“ hieße, dass die Gleichung die Differenz zu schnell überbrückt und das würde zu einem starken Überschwingen führen. Der Kondensationsfaktor wurde deshalb zunächst klein gewählt, so dass mehrere Zeitschritte notwendig sind, um ins Gleichgewicht zu kommen. Eine spätere Änderung / Verbesserung des Regelalgorithmus ist noch denkbar / sinnvoll. Der sich ergebende Quellterm „CondSource“ wird in

der Kontinuitäts- und Druckgleichung als Massensenke eingefügt. Aus diesem Quellterm wird weiterhin noch die freiwerdende latente Wärme berechnet:

$$LatentHeat = A \cdot (3.186e^6 - B \cdot T)$$

$$HeatSource = -LatentHeat \cdot CondSource$$

Mit

$$A = 1,0 \text{ [m}^2\text{/s}^2\text{]}$$

$$B = 2,494e^3 \text{ [K}^{-1}\text{]}$$

T Temperatur in Kelvin

Diese Energie wird dann über die Energiegleichung als Quellterm in das Volumen eingespeist. Weiterhin muss noch die H₂O-Konzentration in der Speziesgleichung angepasst werden.

2.2.3.2 Verifikation anhand eines einfachen Testbeispiels

Um das neue Volumenkondensationsmodell zu prüfen, wurde ein würfelförmiges Testvolumen (1 x 1 x 1 m) verwendet (siehe Abb. 2.37). Das Volumen ist recht grob in ein Gitter mit 10 cm Kantenlänge unterteilt. Das ist aber für den vorliegenden Test ausreichend. Im Anhang finden sich die verwendeten Materialmodelle (für Luft und Dampf). Ein entsprechendes Testbeispiel wurde zum Vergleich auch mit ANSYS-CFX und dem IKE-Volumenkondensationsmodell erstellt. Aufgrund kleinerer Modell-Unterschiede sind auch etwas unterschiedliche Ergebnisse bei den Berechnungen zu erwarten.

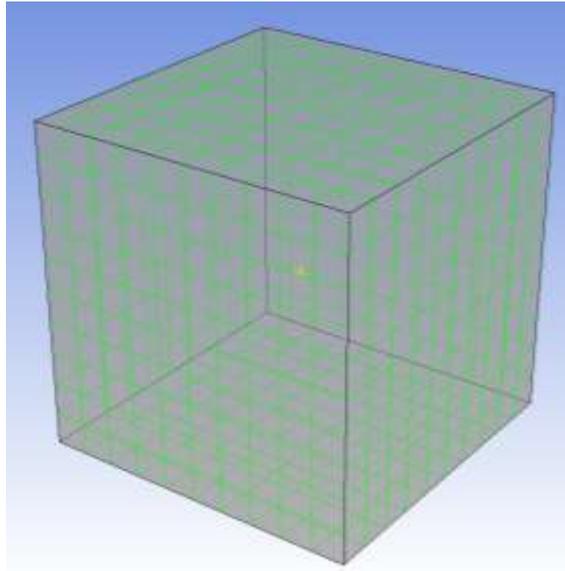


Abb. 2.37 Volumen und Gitter für die Testrechnungen

Grundsätzlich zeigte sich bei den OpenFOAM-Rechnungen mit dem neu implementierten Volumenkondensationsmodell ein gutes Rechenverhalten. Die Berechnungen liefen schnell und zeigten eine gute Konvergenz. Bei den Berechnungen wurden jeweils unterschiedliche Startbedingung vorgegeben, in denen sich das System im Ungleichgewicht befindet (siehe Tab. 2.5).

Tab. 2.5 Startbedingungen für die Parameterstudie

Rechnung	Startbedingungen		
	Druck	Temperatur	Dampfanteil
	[Bar]	[K]	[Mass Fraction]
1	1	300	0,5
2	1	300	0,2
3	1	300	0,8
4	1	350	0,5
5	1	350	0,2
6	1	350	0,8
7	2	300	0,5
8	2	300	0,2
9	2	300	0,8

Die OpenFOAM- und CFX-Berechnungen wurden mit diesen Startbedingungen gestartet und liefen so lange, bis sich ein Gleichgewicht eingestellt hatte. Die simulierte Dauer entsprach in den meisten Fällen nur ein paar Sekunden. Es waren also jeweils mehrere

Zeitschritte notwendig, um das System ins Gleichgewicht zu bringen. Wie schnell das Gleichgewicht erreicht wird, ist von der Wahl des Relaxationsfaktors abhängig. Die sich in den Berechnungen ergebenden Gleichgewichts-Endzustände sind in Abb. 2.38 bis Abb. 2.40 dargestellt. Die Übereinstimmungen bei Drücken, Temperaturen und Dampfkonzentrationen sind sehr gut. Somit konnte die korrekte Implementation der Quellterme validiert werden.

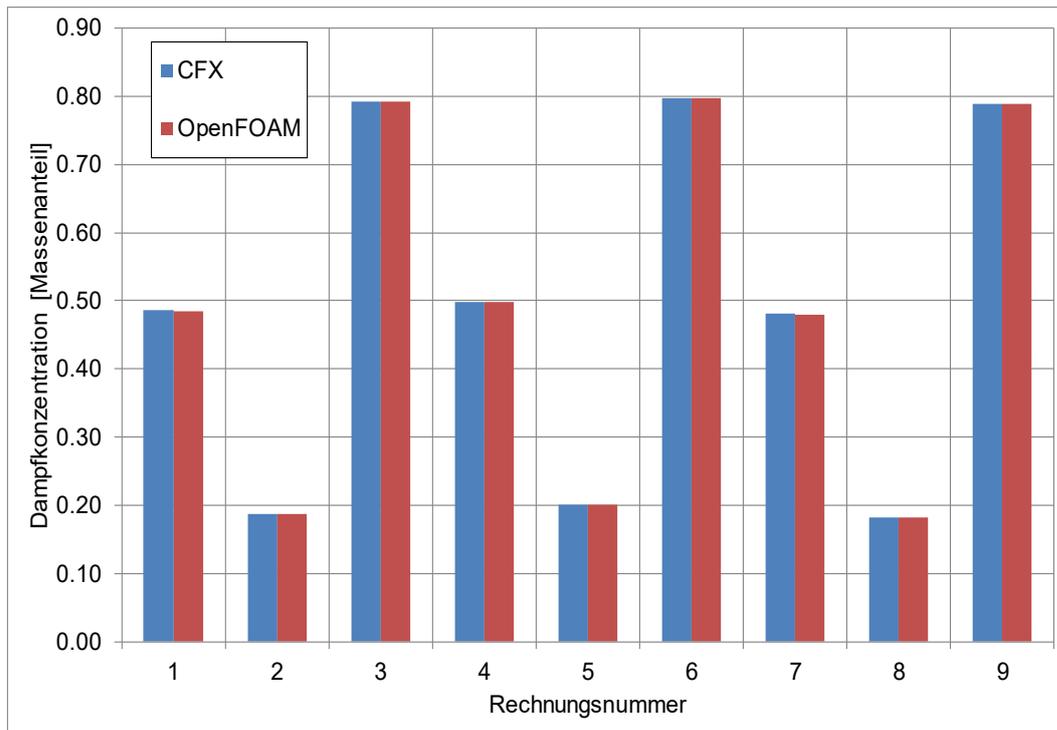


Abb. 2.38 Vergleich der Dampfkonzentrationen (Gleichgewichts-Endzustand)

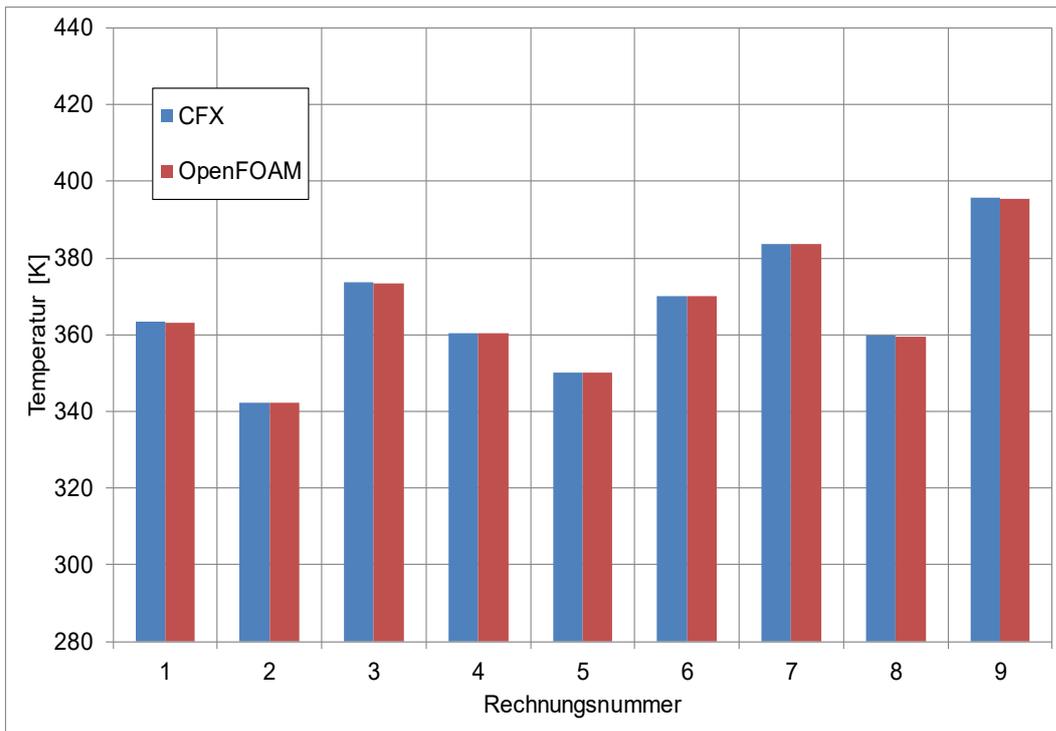


Abb. 2.39 Vergleich der Temperaturen (Gleichgewichts-Endzustand)

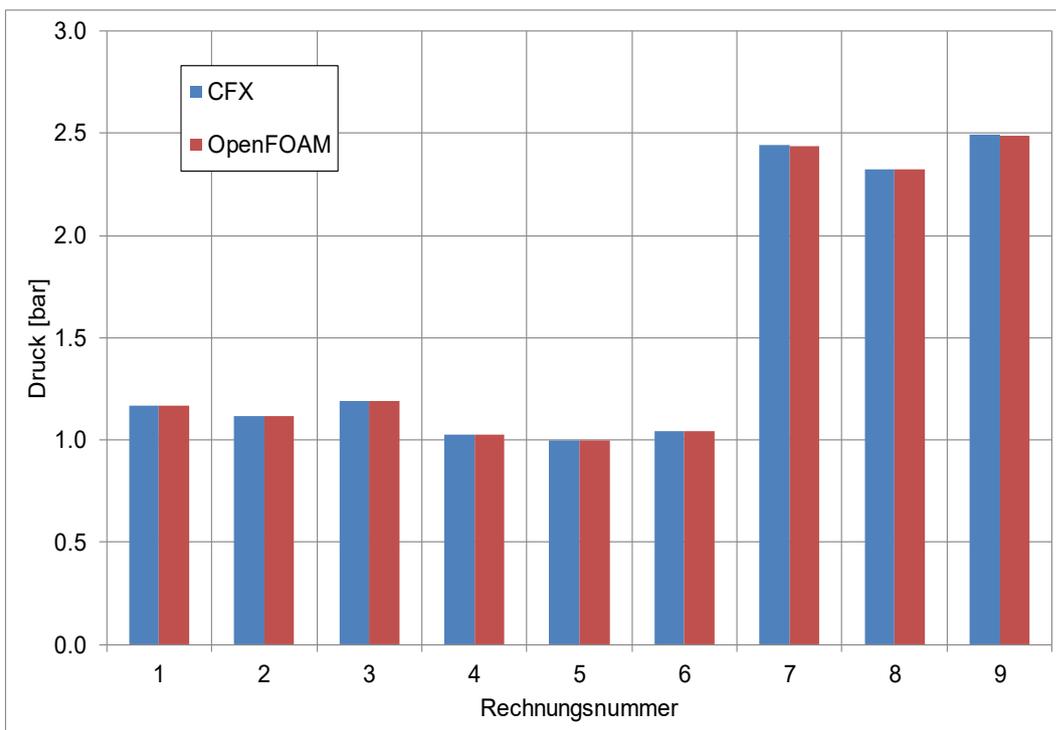


Abb. 2.40 Vergleich der Drücke (Gleichgewichts-Endzustand)

2.2.4 Wandkondensationsmodell

Als Voraussetzung für ein gut funktionierendes Wandkondensationsmodell werden folgende zwei Modelle benötigt:

- Ein gut funktionierendes Diffusionsmodell: Hier gab es in der Standardversion noch Probleme. Diese wurden im Abschnitt „Modellierung der Diffusion in OpenFOAM“ diskutiert und zwei unterschiedliche Lösungsvorschläge erarbeitet (siehe Kapitel 2.2.2).
- Die explizite Modellierung von Solid-Strukturen sowie ein Wärmeübergang von Fluid zu Solid und umgekehrt. Dieses Problem wird in OpenFOAM mit dem Solver chtMultiRegionFoam gelöst. Dieser wird zunächst einmal ohne Wandkondensation getestet und validiert.

Der Wärmeübergang zwischen Gas- und Solid-Strukturen wird im Folgenden zuerst untersucht, um dann darauf aufbauend ein neues Wandkondensationsmodell zu entwickeln.

2.2.4.1 Modellierung des Conjugated-Heat-Transfers (CHT) in OpenFOAM

Für die Entwicklung eines Wandkondensationsmodells müssen nicht nur die Prozesse im Gas, sondern zusätzlich auch diejenigen in der Wand modelliert werden. Die Wandstrukturen wärmen sich durch konvektiven Wärmeaustausch, Strahlung und auch durch die bei einer Kondensation freiwerdende latente Wärme auf. Die an der Wandoberfläche ankommende Wärme wird dann weiter ins Innere der Wandstruktur geleitet. Eine höhere Wandoberflächentemperatur wiederum führt zu einer niedrigeren Kondensationsrate, was auch einen Einfluss auf die Atmosphärenzustände (Druck, Temperatur, Dampfkonzentration, ...) hat.

In OpenFOAM gibt es den Solver chtMultiRegionFoam (Conjugated-Heat-Transfer-Solver), der eine Kombination von Gasphase und Solid-Struktur ermöglicht. Hierbei werden in einer zusätzlichen Berechnungsschleife die Lösungen für den Gas-Bereich und den Solid-Bereich einander iterativ angenähert.

Die GRS möchte im vorliegenden Arbeitspunkt testen, ob der Solver chtMultiRegionFoam auch für die Anwendung im Containmentbereich geeignet ist. Hierzu soll zunächst nur der Aspekt des Wärmeaustausches (Gas/Festkörper) untersucht und anhand einer

vergleichenden CFX-Rechnung validiert werden. Das hierzu aufgesetzte Testbeispiel entspricht der Conan-Geometrie und dem Conan-Versuch P20-T30-V25 (SARNET-Benchmark). Die Kondensation wurde zunächst ausgeschaltet, um nur speziell den Wärmeübergang zu simulieren.

Tab. 2.6 fasst alle wichtigen Berechnungsparameter zusammen. Kondensation und Strahlung wurden ausgeschaltet, als Turbulenzmodell wurde das buoyantkOmegaSST-Modell verwendet. Das Gitter für die Vergleichsrechnung ist in Abb. 2.41 dargestellt. Es hat 35.000 Elemente und einen Gasbereich (oben / warm) und eine Wandstruktur (unten / kalt). Es wurde an der Grenzfläche Gas/Solid verfeinert und die erste Zelle im Gas hat eine Dicke von 0,1 mm. Im Anhang finden sich die verwendeten Materialmodelle (für Luft und Dampf).

In der vergleichenden CFX-Rechnung wurden das gleiche Gitter, die gleichen Randbedingungen und auch die gleichen Modelle (Turbulenz, Material, ...) verwendet.

Tab. 2.6 Berechnungsparameter für den Conan/SARNET-Versuch

Versuch	SARNET Benchmark P20-T30-V25
Phänomene	Gasströmung, Conjugated Heat Transfer
Solver	chtMultiRegionFoam
Kondensationsmodell	Ohne
Strahlungsmodell	Ohne
Turbulenzmodell	bouyantkOmegaSST
Zeitschritte	Adaptiv, max. Co 20
Elementzahl	35.000
Software / Version	OpenFoam 5.x

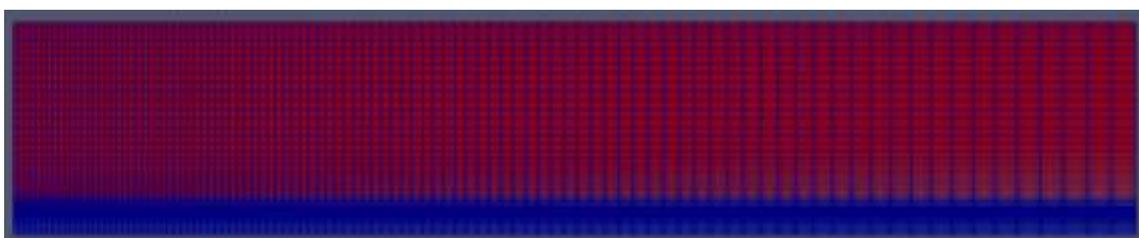


Abb. 2.41 Gitter für Conan-Versuche

In Abb. 2.42 werden die Strömungsprofile von OpenFOAM und CFX qualitativ miteinander verglichen. Der Geschwindigkeitsbereich wurde recht eng gewählt (2,50 – 2,65 m/s).

Die Profile sehen sich sehr ähnlich. Ein quantitativer Vergleich der Strömungsgeschwindigkeiten entlang einer Achse senkrecht zur Strömungsrichtung ist in Abb. 2.43 dargestellt. Hier findet sich eine gute Übereinstimmung der Geschwindigkeitsprofile mit nur kleinen Abweichungen.

Die Temperaturen im Strömungskanal und in der Wand werden in Abb. 2.44 qualitativ miteinander verglichen. Das von links einströmende heiße Gas wird an der kalten Platte etwas abgekühlt. Die Temperaturfelder sind in den beiden Simulationen sehr ähnlich. In Abb. 2.45 ist ein Temperaturprofil senkrecht zur Strömungsrichtung dargestellt. Hier zeigt sich wieder eine gute Übereinstimmung der Rechnungen mit OpenFoam und CFX. Es gibt nur kleinere Abweichungen in Wandnähe.

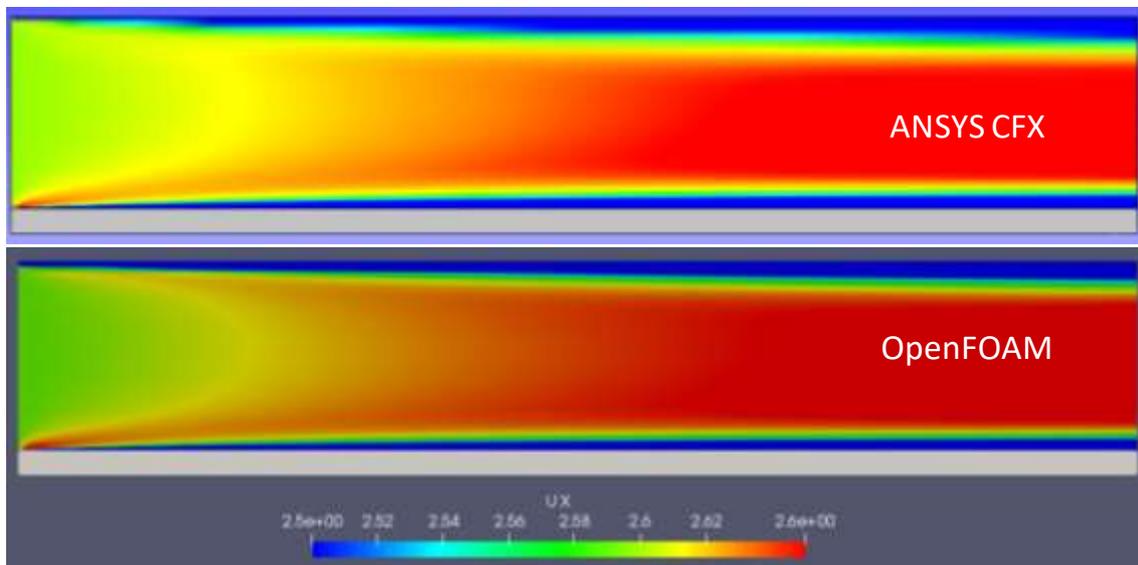


Abb. 2.42 Vergleich der Strömungsprofile von CFX und OpenFOAM

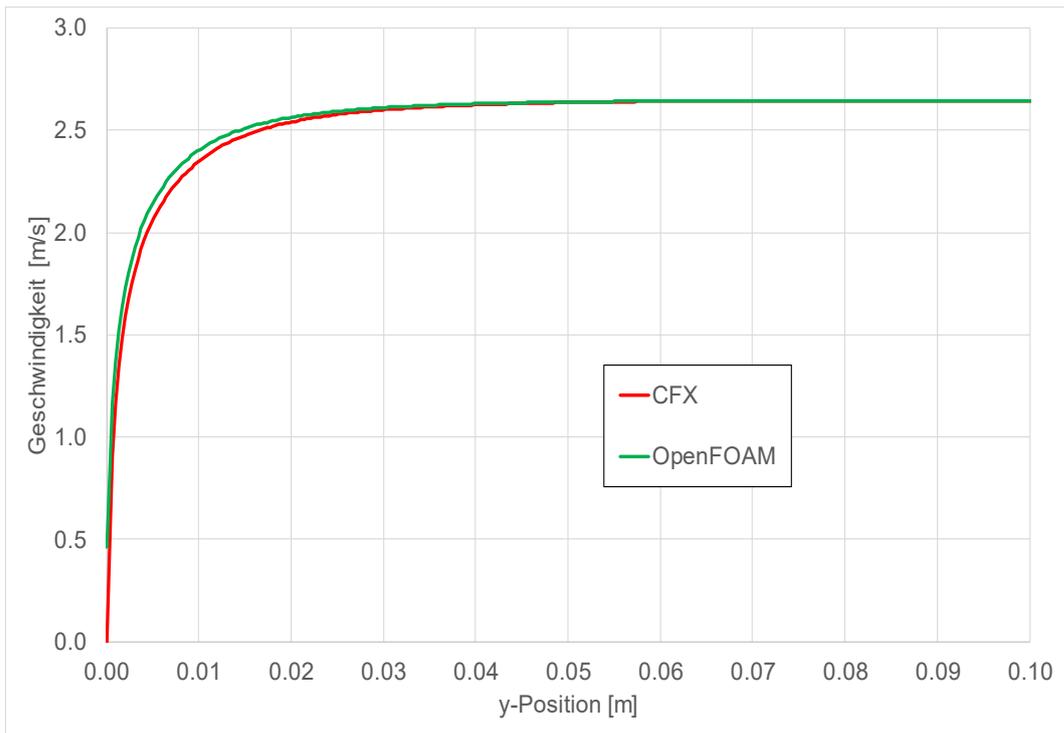


Abb. 2.43 Vergleich der Strömungsgeschwindigkeiten an der Wand

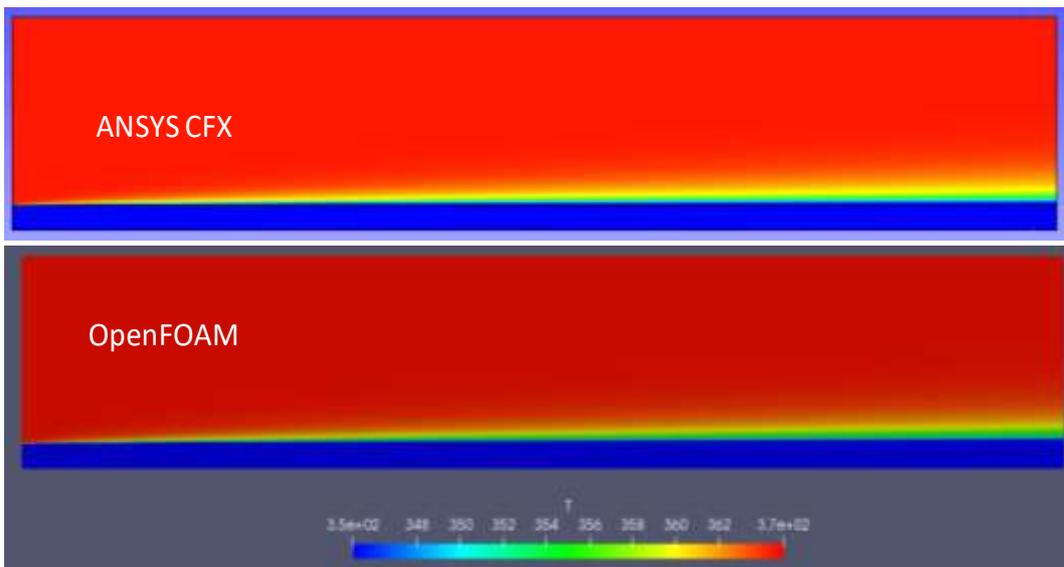


Abb. 2.44 Vergleich der Temperaturen in Strömungskanal und Wand

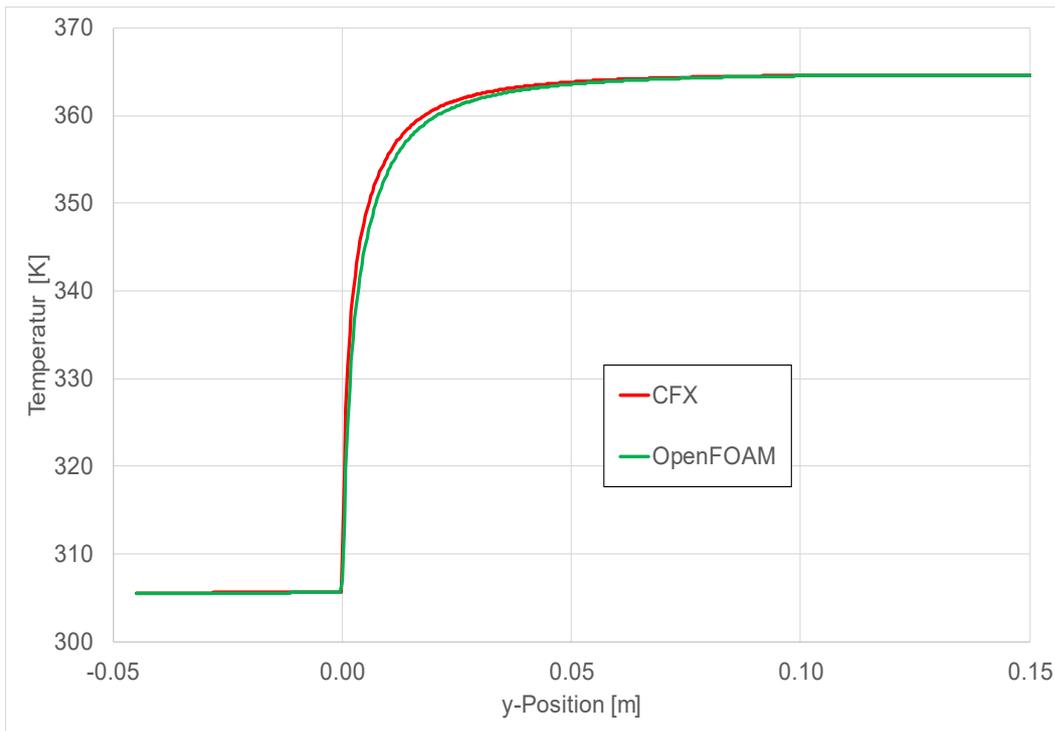


Abb. 2.45 Vergleich der Temperaturprofile an der Wand (senkrecht zum Strömungskanal)

In Abb. 2.46 ist der zeitliche Verlauf der Temperaturen im Solid dargestellt. Das Solid ist hier eine Aluminium-Platte und die Abbildung stellt den Aufheizvorgang dieser Platte (an einem mittig gelegenen Probepunkt) dar. Die Platte wird durch das heiße Gas aufgeheizt. Die Verläufe der Kurven für die CFX- und OpenFOAM-Rechnungen liegen dicht beieinander. Dieses zeigt, dass der Aufheizvorgang und der CHT zwischen Gas und Solid von OpenFOAM sehr ähnlich wie in CFX simuliert wird, was eine weitere positive Validierung von OpenFOAM darstellt.

Als Fazit dieser Untersuchung kann gesagt werden: Der kombinierte Solver chtMultiRegionFoam konnte erfolgreich getestet werden. Ein qualitativer und quantitativer Vergleich der OpenFOAM-Ergebnisse mit einer CFX-Rechnung zeigt eine gute Übereinstimmung bei den Geschwindigkeiten und Temperaturprofilen. Der Wärmeaustausch Gas/Solid kann mit OpenFOAM also grundsätzlich gut simuliert werden und es steht hiermit eine validierte Beispielrechnung für weitere Entwicklungen (z. B. Wandkondensationsmodell) zur Verfügung.

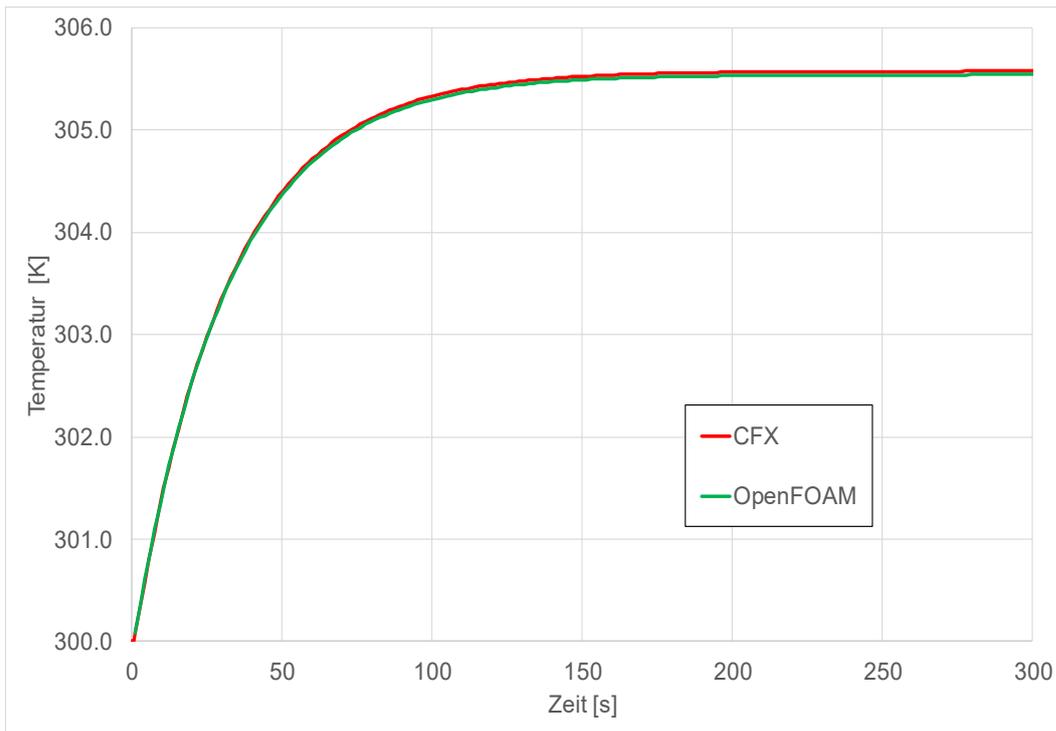


Abb. 2.46 Aufheizen der Solid-Strukturen (Zeitlicher Verlauf an Probepunkt mittig im Solid)

2.2.4.2 Theorie zur Wandkondensation

Transport von Dampf in Luft durch Konvektion und Diffusion

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U^j Y_i)}{\partial x^j} = \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\Gamma_i \rho \frac{\partial Y_i}{\partial x^j} \right) + S_{Y_i} \quad (2.1)$$

Diffusion setzt sich zusammen aus molekularer und turbulenter Diffusion:

$$\Gamma_i = \Gamma_{i,\text{molecular}} + \Gamma_{i,\text{turbulent}} = \frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \quad (2.2)$$

Molekulare Diffusion wird mit gleicher Korrelation berechnet, wie in der CFX-THAI-Rechnung. An der Wand kann die molekulare Diffusion wichtig werden, wenn das Rechengitter bis in den linearen (laminaren) Teil der Grenzschicht aufgelöst ist.

$$\Gamma_{i,\text{molecular}} = \varrho \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right] \times 1,18623 \times 10^{-9} \left(\frac{T [\text{K}]^{1.75}}{(1,205 \times 10^5 + p [\text{Pa}]) / 10^5} \right) \left[\frac{\text{m}^2}{\text{s}} \right] \quad (2.3)$$

Damit die Masse des Kondensats aus dem Fluidrechengebiet wirklich entzogen wird, muss noch ein Senkenterm zur Kontinuitätsgleichung hinzugefügt werden. Diese wird

beim hier zugrunde gelegten Solver chtMultiRegionFoam einmal als eigentliche Kontinuitätsgleichung und ein zweites Mal im Rahmen des Lösungsverfahrens für den Druck gelöst.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i)}{\partial x^j} = S_i \quad (2.4)$$

Damit die Kondensation des Dampfs an der Wand berücksichtigt wird, muss lokal die relative Feuchte größer als 1 % betragen und die Wandtemperatur kleiner als die Taupunkttemperatur sein. Falls diese Bedingungen erfüllt sind, dann wird der Kondensatmassenstrom aus der Annahme berechnet, dass in den Wandzellen eine Diffusion vom Zellmittelpunkt zur Wand gemäß Fick'schem Gesetz stattfindet.

$$\dot{m}_l = - \frac{\Gamma_{i,c} Y_{i,c} - Y_{i,w}}{y_c (1 - Y_{i,w})} \quad (2.5)$$

Dabei wird angenommen, dass die Konzentration des kondensierbaren Gases an der Wand dem Partialdruck bei Sättigungsbedingungen bei der Wandtemperatur entspricht.

$$Y_{i,w} = X_{i,w} \frac{M_i}{M} \quad (2.6)$$

$$X_{i,w} = \frac{p_{i,sat}(T_w)}{p_w} \quad (2.7)$$

Der Massenstrom wird durch Senkenterme (2.8) für die Wandzellen in den Gleichungen für den Dampfmassenanteil (2.1) und die Druckgleichung (entspricht der Kontinuitätsgleichung) berücksichtigt.

$$S_i = \frac{\dot{m}_l A_w}{V_c} \quad (2.8)$$

Die Berechnung der Kondensation an der Wand erfordert die Bestimmung der Wandtemperatur und damit der Energieflüsse, die zwischen Fluid und Wand sowie Wand und Festkörper stattfinden. Außerdem wird bei der Kondensation latente Wärme freigesetzt.

Die Energieflüsse von und zur Wand dienen dabei dazu, die Parameter für eine von der OpenFOAM-Basisklasse `mixedFvPatchScalarField` (https://www.openfoam.com/documentation/cpp-guide/html/classFoam_1_1mixedFvPatchField.html#details) abge-

leiteten Klasse zu bestimmen. Zur Bestimmung der Temperatur für jedes Flächenelement wird dazu Gleichung (2.9) verwendet.

$$T_p = wT_r + (1 - w) \left(T_c + \frac{\nabla_{\perp} T}{\Delta} \right) \quad (2.9)$$

Mit

- T_p Wert der Temperatur auf einem Flächenelement der Wand
- T_c Temperaturwert in der Mitte der angrenzenden Zelle
- T_r Referenzwert, der in der Randbedingung für das Flächenelement vorgegeben wird,
- $\nabla_{\perp} T$ vorgegebener Wert der Gradienten der Temperatur senkrecht zum Flächenelement
- Δ inverser Abstand des Zellmittelpunkts senkrecht zur Wand und
- w vorzugebender Gewichtungsfaktor

w , T_r und $\nabla_{\perp} T$ sind nun so zu bestimmen, dass T_p einen solchen Wert annimmt, dass die damit berechneten Energieflüsse konsistent sind. Diese Flüsse sind für jedes Oberflächenelement der Wand im Einzelnen:

- Wärmetransport von der ersten Zelle im Fluid zur Wandoberfläche (Wärmeleitung als Diffusion unter Berücksichtigung der Turbulenz):

$$q_{fluid} = \Delta_{fluid} \kappa_{fluid,eff} (T_{fluid,c} - T_p) \quad (2.10)$$

- Wärmetransport von der ersten Zelle in der Wand zur Wandoberfläche (Wärmeleitung als Diffusion):

$$q_{solid} = \Delta_{wall} \kappa_{wall} (T_{solid,c} - T_p) \quad (2.11)$$

- Freisetzung der latenten Wärme durch die Kondensation:

$$q_{cond} = \dot{m}_l L \quad (2.12)$$

- Erhöhung der gespeicherten Energie des Fluidfilms auf der Wand unter der Annahme, dass der Fluidfilm die gleiche Temperatur besitzt, wie die Wandoberfläche:

$$q_{film} = \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p (T_{film}(t) - T_{film}(t - \Delta t)) = \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p (T_p - T_p(t - \Delta t)) \quad (2.13)$$

Dabei wurden die in Tab. 2.7 definierten Größen verwendet.

Tab. 2.7 Definition der thermodynamischen Größen an der Wand und angrenzenden Zellen

$\kappa_{fluid,eff}$	Turbulente Wärmeleitfähigkeit im Fluid
$T_{fluid,c}$	Temperatur des Fluids im Mittelpunkt der mit der Wandfläche verbundenen Zelle
$T_{solid,c}$	Temperatur des Festkörpers im Mittelpunkt der mit der Wandfläche verbundenen Zelle
T_p	Temperatur im Mittelpunkt der Wandfläche
κ_{wall}	Wärmeleitfähigkeit im Festkörper
\dot{m}_t	Massenstromdichte durch die Kondensation an der Wand
L	Latente Wärme der Kondensation des Dampfes
m_{film}	Masse des Kondensatfilms an der Wand
A_w	Wandfläche
$T_{film}(t)$	Temperatur des Kondensatfilms (Annahme: gleich der Wandtemperatur $T_p(t)$)
Δt	Zeitschrittweite der CFD
Δ_{wall}	Inverser Abstand des Zellmittelpunkts der Wandzelle im Festkörper
Δ_{fluid}	Inverser Abstand des Zellmittelpunkts der Wandzelle im Fluid

Dabei wird die effektive Wärmeleitfähigkeit des Fluids nach Gleichung (2.14) berechnet.

$$\kappa_{fluid,eff} = \kappa_{fluid,molecular} + \kappa_{fluid,turbulent} = \frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \quad (2.14)$$

Insgesamt ergibt sich dann die folgende Gleichung für die Wärmebilanz der Wand:

$$q_{fluid} + q_{cond} + q_{solid} - q_{film} = 0 \quad (2.15)$$

Einsetzen der Gleichungen (2.10) – (2.13) ergibt dann im Fall des Rechengebiets für das Fluid:

$$\Delta_{fluid} \kappa_{fluid,eff} (T_{fluid,c} - T_p) + \dot{m}_i L + \Delta_{wall} \kappa_{wall} (T_{solid,c} - T_p) - \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p (T_p - T_p(t - \Delta t)) = 0 \quad (2.16)$$

$$T_p \left(-\Delta_{fluid} \kappa_{fluid,eff} - \Delta_{wall} \kappa_{wall} - \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p \right) = -\Delta_{wall} \kappa_{wall} T_{solid,c} - \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p T_p(t - \Delta t) - \dot{m}_i L - \Delta_{fluid} \kappa_{fluid,eff} T_{fluid,c} \quad (2.17)$$

$$T_p \left(\Delta_{fluid} \kappa_{fluid,eff} + \Delta_{wall} \kappa_{wall} + \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p \right) = \Delta_{wall} \kappa_{wall} T_{solid,c} + \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p T_p(t - \Delta t) + \dot{m}_i L + \Delta_{fluid} \kappa_{fluid,eff} T_{fluid,c} \quad (2.18)$$

$$T_p = \frac{\Delta_{wall} \kappa_{wall} + \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p}{\Delta_{fluid} \kappa_{fluid,eff} + \Delta_{wall} \kappa_{wall} + \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p} \frac{\Delta_{wall} \kappa_{wall} T_{solid,c} + \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p T_p(t - \Delta t) + \dot{m}_i L}{\Delta_{wall} \kappa_{wall} + \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p} + \left(1 - \frac{\Delta_{wall} \kappa_{wall} + \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p}{\Delta_{fluid} \kappa_{fluid,eff} + \Delta_{wall} \kappa_{wall} + \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p} \right) T_{fluid,c} \quad (2.19)$$

Ein Vergleich von Gleichung (2.9) mit Gleichung (2.19) liefert die gesuchten Größen:

$$w = \frac{\Delta_{wall} \kappa_{wall} + \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p}{\Delta_{fluid} \kappa_{fluid,eff} + \Delta_{wall} \kappa_{wall} + \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p} \quad (2.20)$$

$$T_r = \frac{\Delta_{wall} \kappa_{wall} T_{solid,c} + \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p T_p(t - \Delta t) + \dot{m}_i L}{\Delta_{wall} \kappa_{wall} + \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p} \quad (2.21)$$

$$\nabla_{\perp} T = 0 \quad (2.22)$$

Wird Gleichung (2.15) analog für das Rechengebiet des Festkörpers aufgelöst, so sind die gesuchten Größen:

$$w = \frac{\Delta_{fluid} \kappa_{fluid} + \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p}{\Delta_{fluid} \kappa_{fluid,eff} + \Delta_{wall} \kappa_{wall} + \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p} \quad (2.23)$$

$$T_r = \frac{\Delta_{fluid} \kappa_{fluid} T_{fluid,c} + \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p T_p (t - \Delta t) + \dot{m}_l L}{\Delta_{fluid} \kappa_{fluid} + \frac{m_{film}}{A_w \Delta t} c_p} \quad (2.24)$$

$$\nabla_{\perp} T = 0 \quad (2.25)$$

2.2.4.3 Änderungen am Solver chtMultiRegionFoam

Der Solver chtMultiRegionFoam aus der Release 6 der OpenFOAM Foundation wurde für die Implementierung der Wandkondensation modifiziert („chtMultiRegionSchmidtFoam“). Es wurden zwei neue Felder hinzugefügt: Für die Senkenterme durch die Wandkondensation in den Gleichungen für Masse und Energie. Deren Werte werden für die Zellen an der Wand, an der Kondensation stattfindet, in der entsprechenden Randbedingung berechnet. Sie werden dann bei der Lösung der Kontinuitäts-, der Druck- und der Energiegleichung berücksichtigt.

2.2.5 Berechnung des THAI-Versuches TH-2

2.2.5.1 Geometrie, Gitter und numerische Parameter

In einer weiteren Analyse sollen die neuen Wand- und Volumenkondensationsmodelle am THAI-Versuch TH-2 validiert werden. Der TH-2-Versuch war ein einfacher Versuch im THAI-Behälter, bei dem durch einen ringförmigen Inlet im oberen Teil ein konstanter Dampfstrom eingespeist wurde. Abb. 2.47 zeigt die erstellte OpenFOAM-Geometrie, das Gitter und ein erstes Berechnungsergebnis mit OpenFOAM. Das Gitter enthält insgesamt 450.237 Elemente und wurde von einer CFX-Rechnung übernommen. Die Behälterwände sind in diesem Gitter explizit modelliert. An diesen Wänden können Wärmeübergang und Wandkondensation stattfinden.

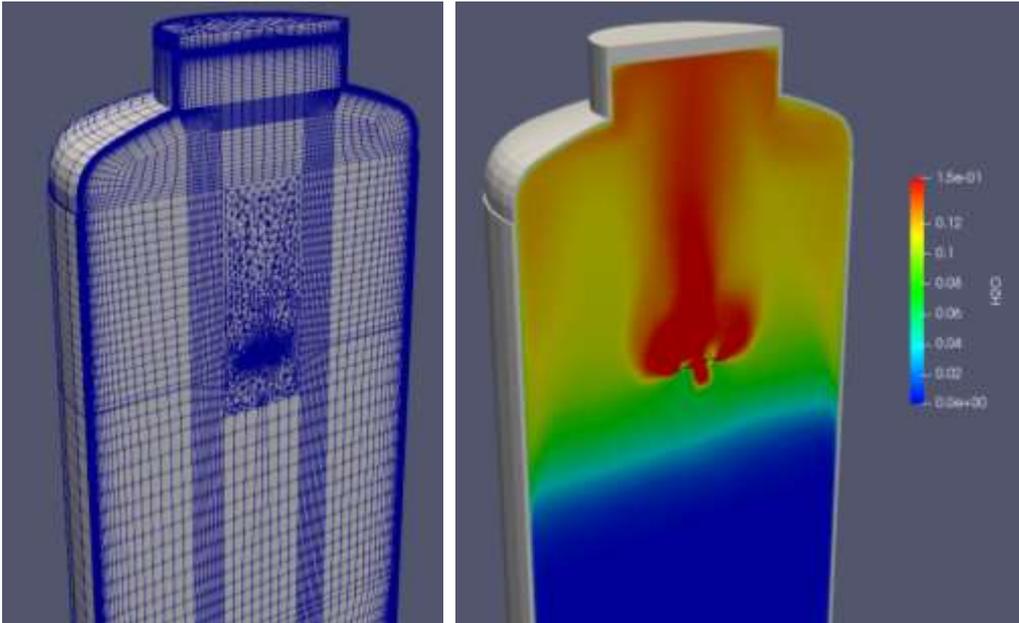


Abb. 2.47 THAI-Versuch TH-2: OpenFOAM-Geometrie, Gitter und Berechnungsergebnis

In Tab. 2.8 sind die Modelle und numerischen Berechnungsparameter für den TH-2-Versuch dargestellt. Neben dem oben schon beschriebenen Gitter wird der Solver `chtMultiRegionFoam` verwendet. Dieser wurde um die Terme für die Wandkondensation erweitert. Das Wandkondensationsmodell ist das von der GRS neu entwickelte Wandkondensationsmodell. Das (Volumen-)Kondensationsmodell ist das von der GRS neu entwickelte Modell. Es ist als `scalarCodedSource` implementiert und wird jeweils beim Start der Rechnung neu kompiliert. Weiterhin wurde das Turbulenzmodell „`buoyantkOmegaSST`“ genutzt. Zur Berechnung wird die aktuelle OpenFOAM-Version 6.0 der OpenFOAM-Foundation verwendet.

Tab. 2.8 Berechnungsparameter für den TH2-Versuch

Versuch	THAI TH2
Phänomene	Gasverteilung, Kondensation
Solver	<code>chtMultiRegionSchmidtFoam05</code>
Kondensationsmodell	Volumenkondensation (GRS-Modell) Wandkondensation (GRS-Modell)
Strahlungsmodell	Ohne
Turbulenzmodell	<code>buoyantkOmegaSST</code>
Zeitschritte	Konstant 0,05 s
Elementzahl	450 237
Software / Version	OpenFoam 6.0

2.2.5.2 Vergleich der TH-2-Simulationsergebnisse mit Experiment und CFX-Ergebnissen

In Abb. 2.48 ist der mit OpenFOAM berechnete Druckverlauf dargestellt. Er liegt oberhalb des experimentellen Drucks und auch leicht oberhalb des mit CFX berechneten Drucks. Mögliche Ursache ist, dass in OpenFOAM (und CFX) die Startbedingungen nicht vollständig bekannt waren bzw. nicht ganz korrekt gewählt wurden (insbesondere Temperaturen / Temperaturprofile in den Wänden). Der Druckanstieg verläuft bei OpenFOAM ab ca. 500 s parallel zu den experimentellen Werten. Der Temperaturverlauf an unterschiedlichen Messpunkten im Gas ist in Abb. 2.49 bis Abb. 2.51 dargestellt. In 8,4 m Höhe passt der Temperaturverlauf bei der OpenFOAM-Rechnung besser zu den experimentellen Werten als bei der CFX-Rechnung. Bei den anderen Messpunkten ähneln sich OpenFOAM- und CFX-Ergebnisse stark. Abb. 2.52 und Abb. 2.53 zeigen einen Vergleich von Wand- und Volumenkondensationsraten mit den CFX-Werten. Hierzu liegen leider keine experimentellen Vergleichswerte vor. In OpenFOAM wird eine etwas höhere Wandkondensationsrate und eine etwas niedrigere Volumenkondensationsrate berechnet. Möglicherweise kann das noch durch eine andere Wahl des Wandabstands-Limiters für das Volumenkondensationsmodell verändert werden. Aktuell liegt er bei 1,0 cm, innerhalb dieses Abstands von der Solid-Struktur findet keine Volumenkondensation statt. Er sollte so gewählt werden, dass mindestens eine Gaszelle innerhalb des Limits liegt. Abb. 2.54 zeigt die integrale Dampfmasse, die in CFX etwas höher als in OpenFOAM ist. Insgesamt ist die Übereinstimmung von OpenFOAM mit den experimentellen Werten und mit CFX für den längerfristigen Verlauf gut, in der Anfangsphase des Experiments kommt es aber zu Abweichungen, die zumindest teilweise auf etwas fehlerhafte Startwerte zurückzuführen sind.

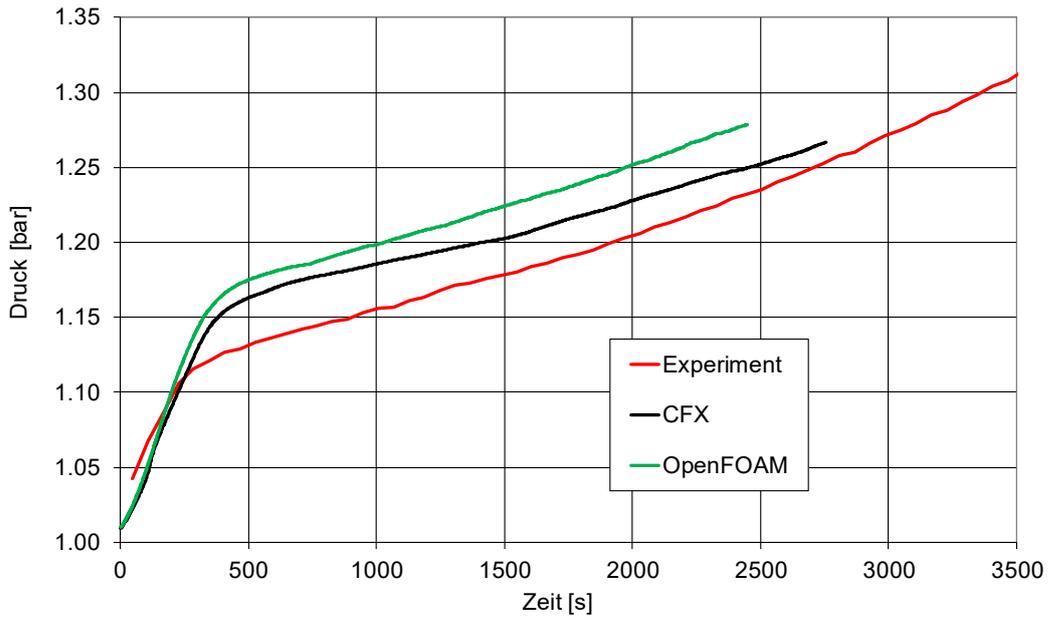


Abb. 2.48 Druckverlauf beim THAI Experiment TH-2

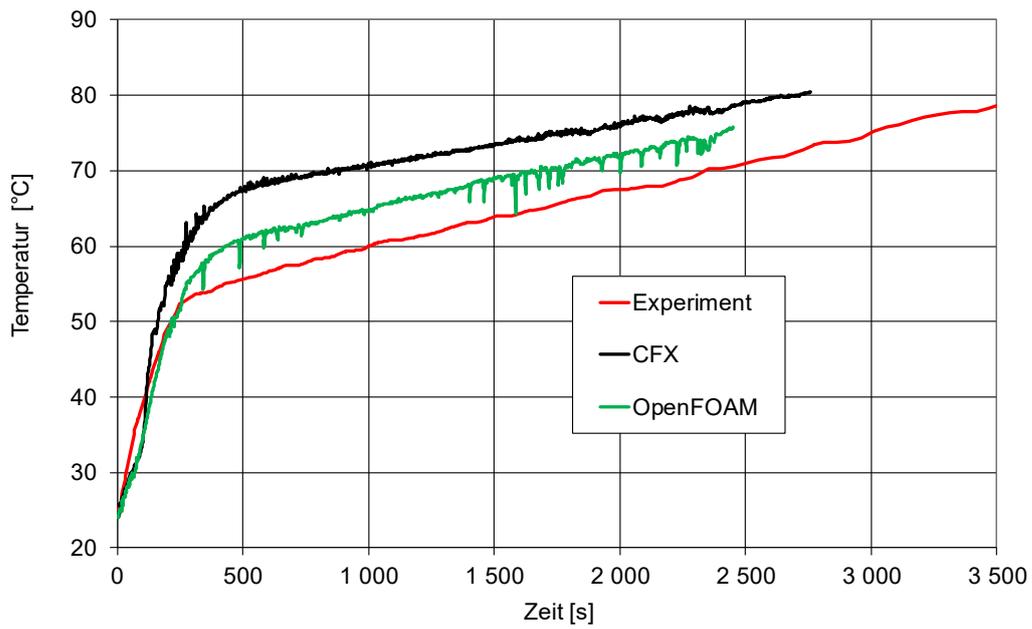


Abb. 2.49 Temperaturverlauf in 8,4 m Höhe

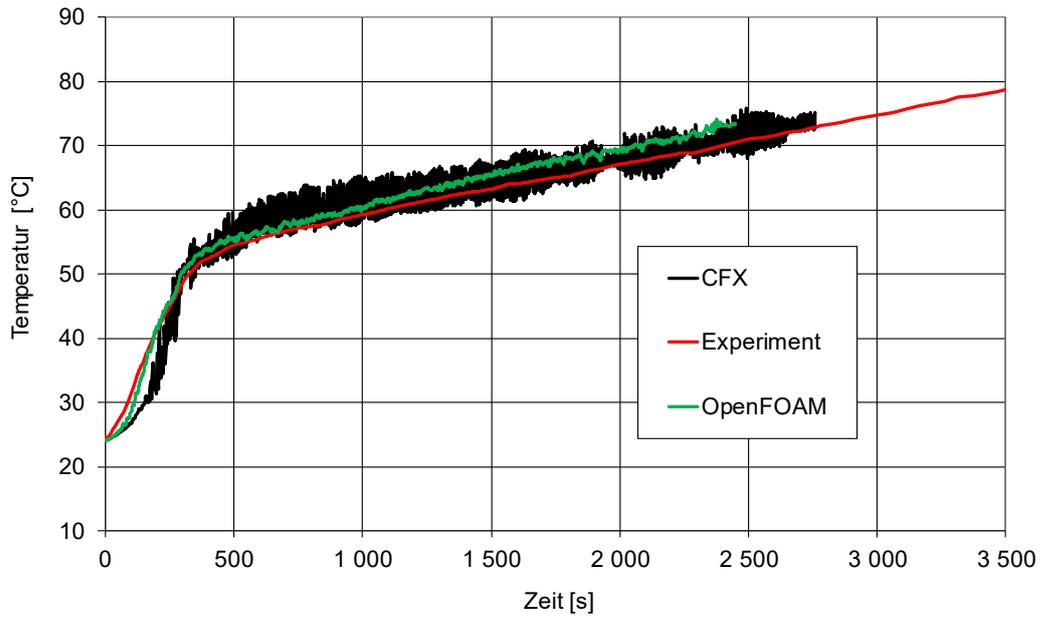


Abb. 2.50 Temperaturverlauf in 6,3 m Höhe

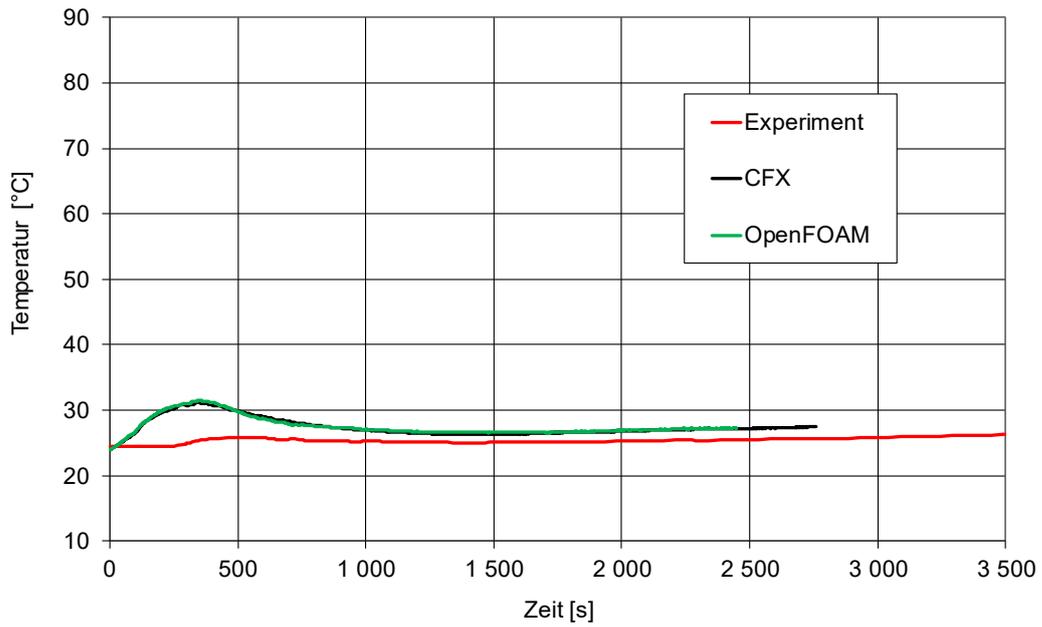


Abb. 2.51 Temperaturverlauf in 3,5 m Höhe

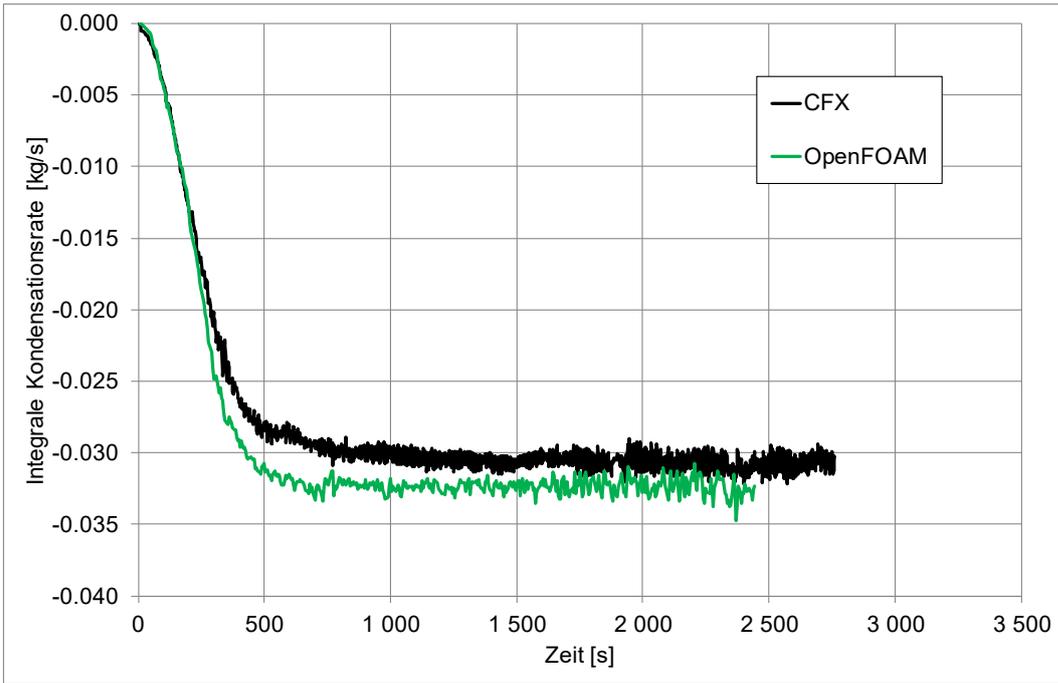


Abb. 2.52 Integrale Wandkondensationsrate

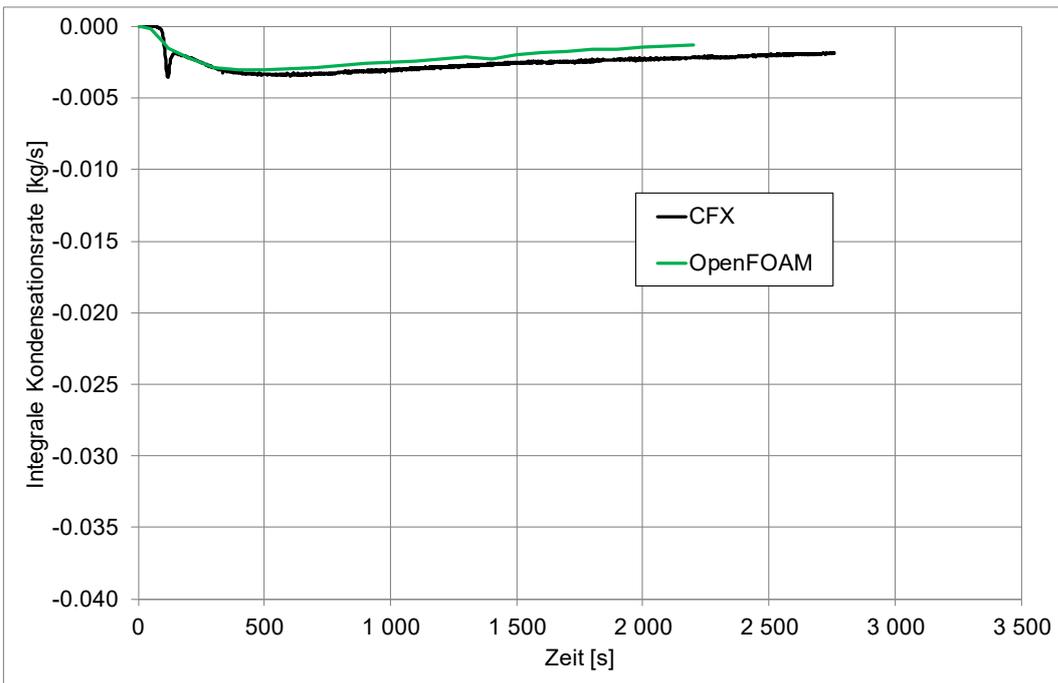


Abb. 2.53 Integrale Volumenkondensationsrate

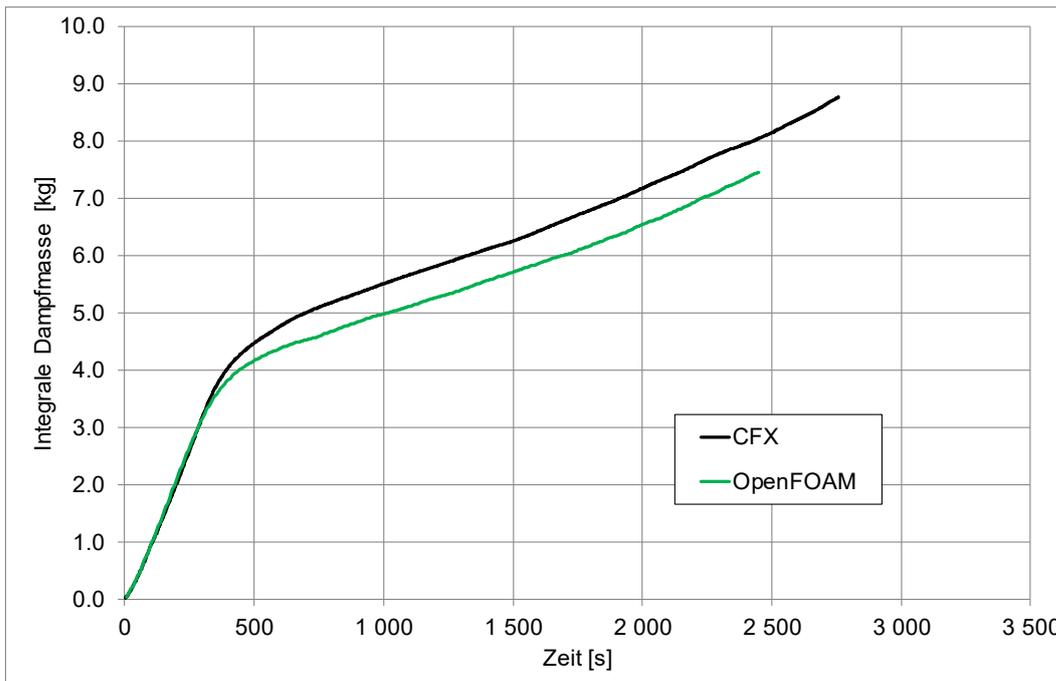


Abb. 2.54 Integrale Dampfmasse

2.2.6 Berechnung des THAI-Versuches TH-24

2.2.6.1 Versuchsbeschreibung

Beim THAI-Versuch TH-24 wird in der 1. Phase des Experimentes die Wand des THAI-Behälters im unteren Bereich erhitzt (beide unteren Segmente, 100 °C) und im oberen Bereich gekühlt (oberes Segment, 60 °C, siehe Abb. 2.55), so dass zwei Naturkonvektionsschleifen in der Behälteratmosphäre entstehen (siehe Abb. 2.56). Dann wird (in der 2. experimentellen Phase) an einer seitlichen Position Dampf eingespeist. Diese Dampfeinspeisung unterbricht die Naturkonvektionen und es bildet sich eine Dampfschicht im oberen THAI-Behälter. Durch die aufsteigende warme Luft (vom Heizmantel) sowie durch Wandkondensation (am Kühlmantel) erodiert diese Dampfschicht langsam und sie löst sich schließlich auf (Phase 3). Daraufhin etablieren sich wieder zwei Naturkonvektionsschleifen. Dieser Versuch mit etwas komplexeren Strömungsbildern soll im Folgenden auch zur Validierung von OpenFOAM (Gasverteilung, Kondensation) genutzt werden. Hierbei werden aber nur die Phasen 2 und 3 (Dampfeinspeisung und Schichtungsauflösung) simuliert. Weitere Details zum Experiment finden sich in /GUP 12/.

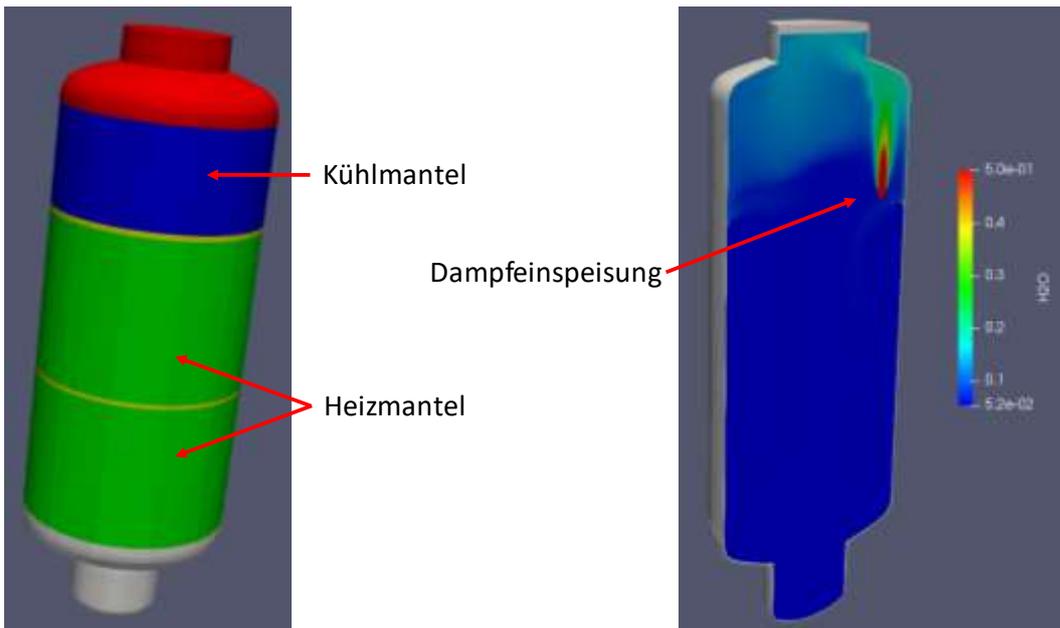


Abb. 2.55 Konfiguration des THAI-Versuches TH-24

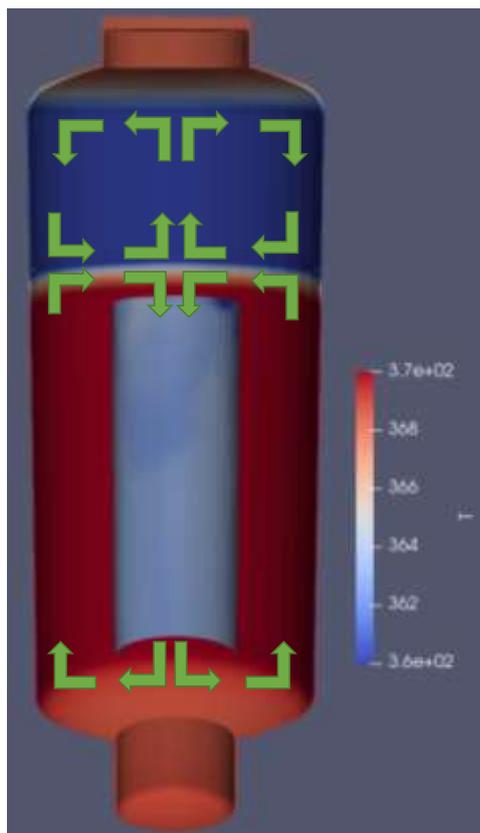


Abb. 2.56 Naturkonvektionsschleifen durch unterschiedliches Heizen / Kühlen beim TH-24-Experiment

In Tab. 2.9 finden sich die Berechnungsparameter für den THAI-Versuch TH-24. Als Solver wird wieder chtMultiRegionFoam verwendet. Wand- und Volumen Kondensation werden durch die bei der GRS entwickelten Modelle simuliert. Bei der Diffusion werden die weiter vorne beschriebenen (GRS-)Terme verwendet. Für die Turbulenzmodellierung wird das buoyantkOmegaSST-Modell verwendet, Strahlung wird bisher nicht berücksichtigt.

Im Gegensatz zur CFX-Rechnung wurde die OpenFOAM-Rechnung nicht durch eine stationäre Rechnung initialisiert. Die initialen Werte für den Beginn der 2. Phase (Temperaturen und Druck) werden anhand der experimentellen Werte abgeschätzt. Weiterhin wird (nur) bei der OpenFOAM-Rechnung ein Wärmetransferkoeffizient an den Heiz- und Kühlmänteln berücksichtigt. Dass die Modellierung über Wärmetransferkoeffizient realistischer ist, war ein Ergebnis der Diskussionen im CFD-Verbund im Rahmen der TH-24-Nachrechnungen. Die CFX-Rechnung aus dem Projekt RS1526 wurde hier aus zeitlichen Gründen nicht noch einmal mit geänderten Randbedingungen wiederholt. Für den Vergleich mit OpenFOAM werden hier von der CFX-Rechnung nur der Druckverlauf und die Kondensationsraten verwendet, da ein detaillierter Vergleich wegen der unterschiedlichen Modellierung der Randbedingungen nicht sinnvoll ist.

Tab. 2.9 Berechnungsparameter für den TH-24-Versuch

Versuch	THAI TH-24
Phänomene	Gasverteilung, Kondensation
Solver	chtMultiRegionSchmidtFoam05
Kondensationsmodell	Volumenkondensation (GRS-Modell) Wandkondensation (GRS-Modell)
Strahlungsmodell	Ohne
Turbulenzmodell	buoyantkOmegaSST
Zeitschritte	Konstant 0,05 s
Elementzahl	1.343.666
Software / Version	OpenFoam 6.0

2.2.7 Berechnung von Conan-Versuchen

Zur Validierung des neu entwickelten Wandkondensationsmodells wurden unterschiedliche Conan-Versuche verwendet. Bei diesen Versuchen wird ein warmer dampfbeladener Gasstrom entlang einer kalten Wand geführt, an der dann Dampfkondensation stattfindet. Es gab mehrere Versuche mit unterschiedlichen Dampfkonzentrationen, die dann

auch zu unterschiedlichen Kondensationsraten geführt haben. Weitere Details zu den Conan-Versuchen finden sich in /SCH 14/, /AMB 09/.

In Abb. 2.57 findet sich die Geometrie und ein Berechnungsergebnis des Conan-Benchmarks. Das Gitter entspricht dem bei der vorhergehenden CHT-Simulation verwendeten Gitter (35.000 Elemente, erstes Element im Gas hat eine Dicke von 0,1 mm). In Abb. 2.57 ist die lokale Dampfkonzentration dargestellt, die im Verlauf der Strömung durch Kondensation an der kalten Platte immer mehr abnimmt. Weitere Berechnungsparameter für die OpenFOAM-Simulation finden sich in Tab. 2.10.

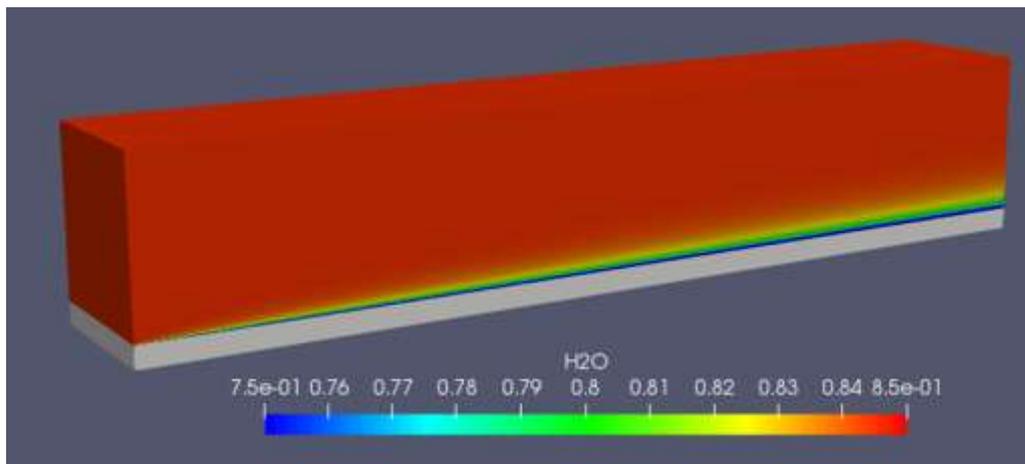


Abb. 2.57 Geometrie für den Conan-Benchmark

In Abb. 2.58 finden sich die Berechnungsergebnisse für unterschiedliche Conan-Versuche. Von links nach rechts steigt die Dampfkonzentration der Versuche und damit auch die Wandkondensationsrate. Bei den mittleren Versuchen (P15-T30-V25 bis P25-T30-V25) findet sich eine sehr gute Übereinstimmung mit den CFX-Ergebnissen und eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Beim Versuch mit der geringsten Dampfkonzentration (P10-T30-V25) wird die Kondensationsrate von OpenFOAM unterschätzt. Bei dem Versuch mit der höchsten Dampfkonzentration (P30-T30-V25) wird die Kondensationsrate überschätzt. Die Abweichungen bei hohen Dampfkonzentrationen bei OpenFOAM und CFX können zumindest teilweise darauf zurückzuführen sein, dass der Einfluss des sich bei der Wandkondensation bildenden Wasserfilms nur stark vereinfacht berücksichtigt wird. Das Abfließen des Films wird im Modell nicht berücksichtigt. Bei heftiger Kondensation an langen vertikalen Flächen/Rohren (z. B. bei Gebäudekondensatoren) kann es zu einem Übergang von laminaren zu turbulenten Strömungen im Wasserfilm kommen.

Tab. 2.10 Berechnungsparameter für den Conan-Benchmark

Versuch	SARNET Conan-Benchmark
Phänomene	Wandkondensation
Solver	chtMultiRegionFoam05
Kondensationsmodell	Wandkondensation (GRS-Modell)
Strahlungsmodell	Ohne
Turbulenzmodell	buoyantkOmegaSST (FZ-Jülich-Modell)
Zeitschritte	Konstant 0,005 s
Elementzahl	35 000
Software / Version	OpenFoam 6.0

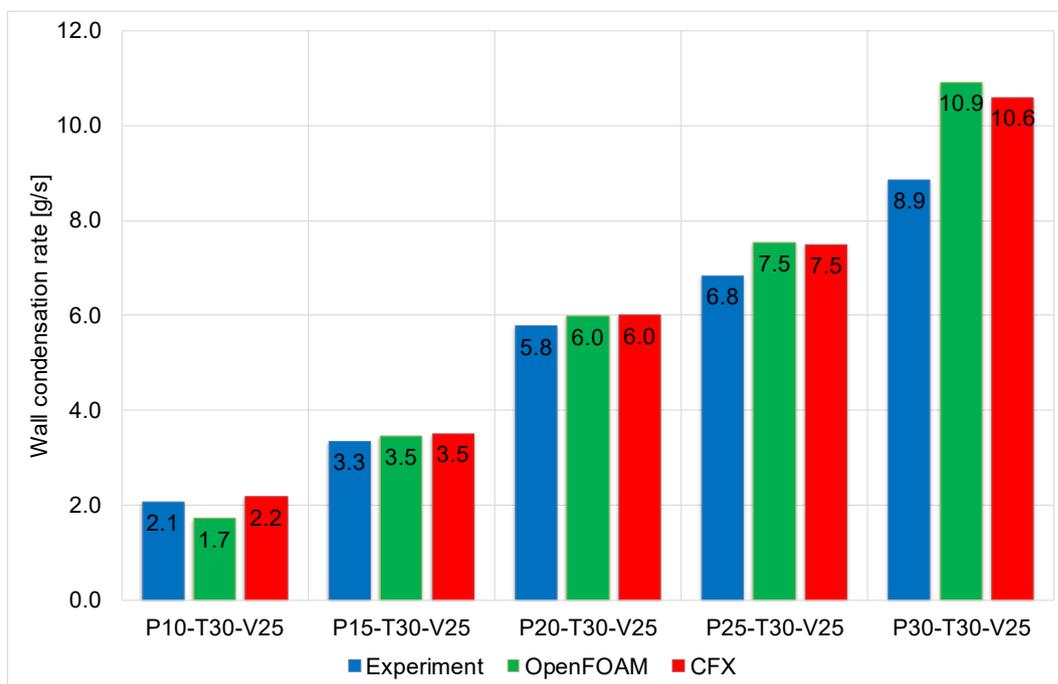


Abb. 2.58 Berechnungsergebnisse des Conan-Benchmarks

2.2.7.1 Vergleich der TH-24-Simulationsergebnisse mit Experiment und CFX-Ergebnissen

In Abb. 2.59 wird der mit OpenFOAM berechnete Druckverlauf mit den experimentellen Werten und mit dem CFX-Druckverlauf verglichen. Es zeigt sich bis ca. 800 s eine sehr hohe Übereinstimmung mit dem CFX-Verlauf, danach liegt der Druckverlauf bei OpenFOAM etwas niedriger. Beide Druckverläufe liegen aber unter den experimentellen Werten. Ursache hierfür ist wahrscheinlich eine fehlerhafte Spezifikation der eingespeisten Dampfmengen aufgrund von messtechnischen Unsicherheiten (siehe auch /GUP 12/).

Der Verlauf der Dampfkonzentrationen in unterschiedlichen Höhen ist in Abb. 2.60 bis Abb. 2.63 dargestellt. Im oberen und unteren Bereich sind die berechneten Dampfkonzentrationen etwas zu niedrig. Im mittleren Bereich passt der Verlauf gut. Die Übereinstimmung der OpenFOAM-Rechnung mit dem Experiment ist aber insgesamt zufriedenstellend.

Abb. 2.64 und Abb. 2.65 zeigen beispielhaft einen Temperaturverlauf in 7,7 m und 2,1 m Höhe im Gas. Hier findet sich eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten.

Die berechneten integralen Kondensationsraten finden sich in Abb. 2.66. Hierzu liegen keine Messwerte vor. Dafür zeigt sich bei der Wandkondensation eine gute Übereinstimmung mit den CFX-Werten bei Berücksichtigung der unterschiedlichen Modellierung der Wände.

Volumenkondensation spielt bei diesem Versuch aufgrund der höheren Initialtemperaturen kaum eine Rolle. Insgesamt zeigt sich für OpenFOAM eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Werten.

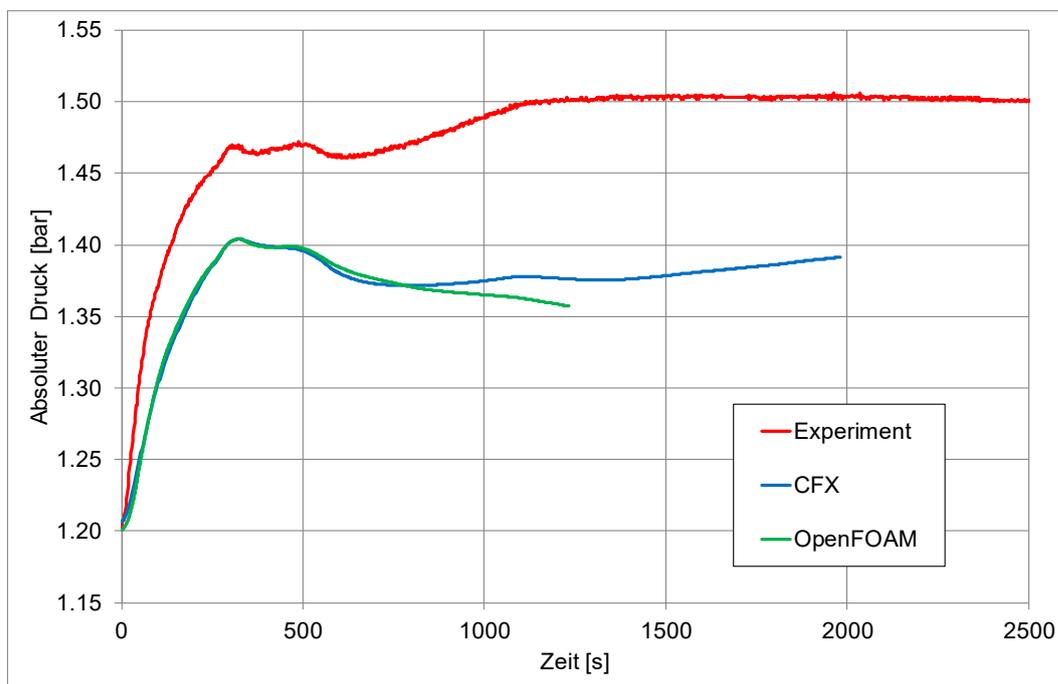


Abb. 2.59 Druckverlauf beim TH-24-Experiment

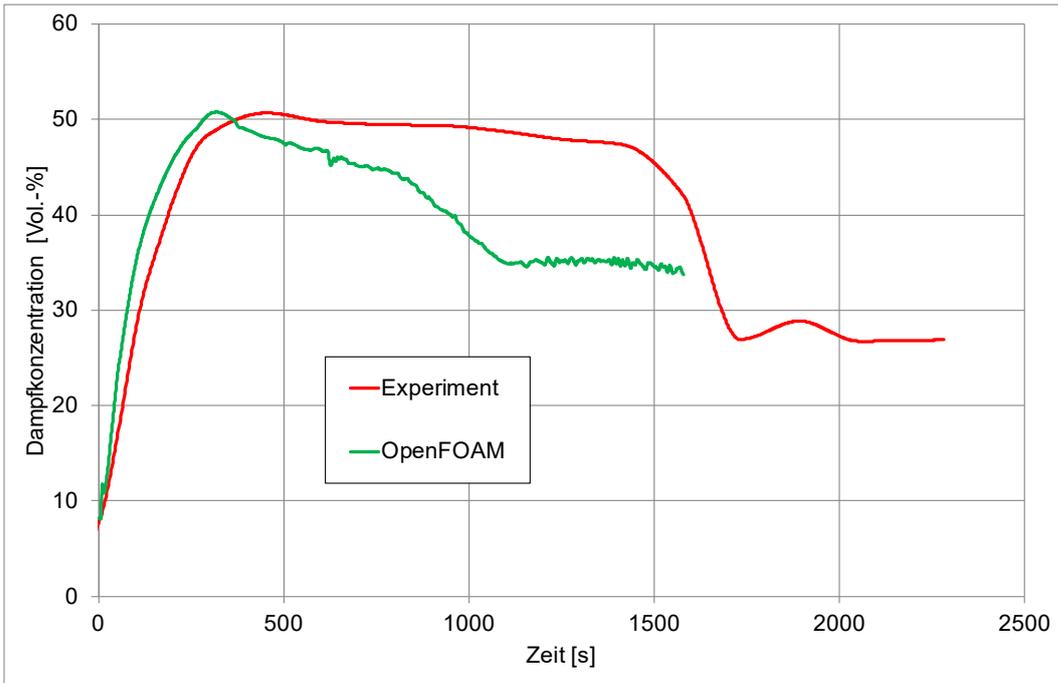


Abb. 2.60 Dampfkonzentration in 8,7 m Höhe

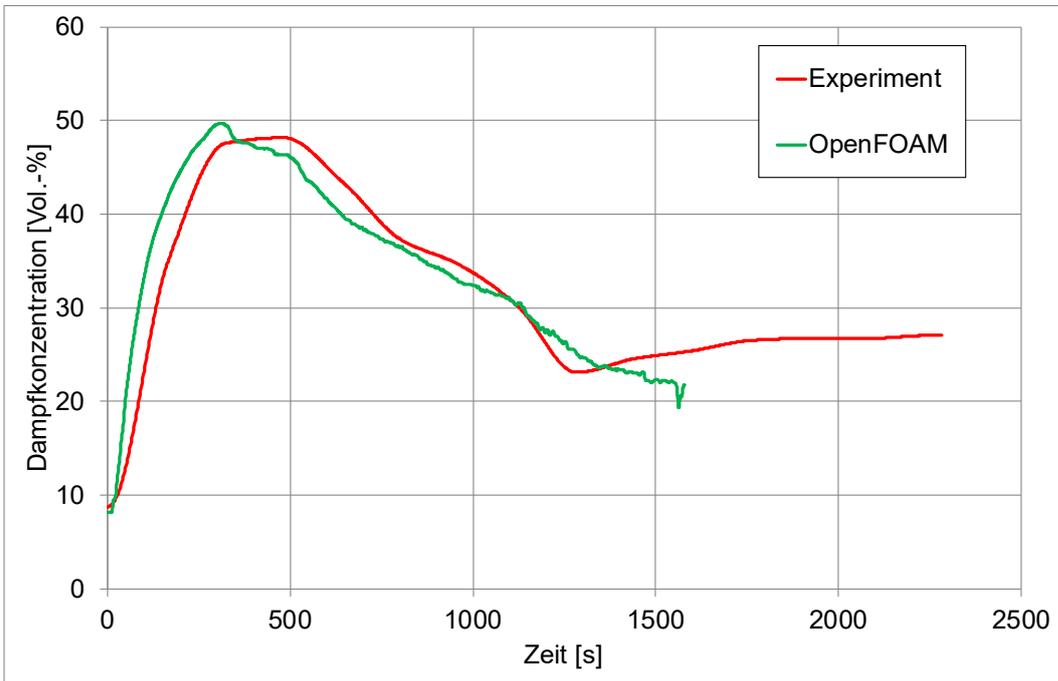


Abb. 2.61 Dampfkonzentration in 7,7 m Höhe

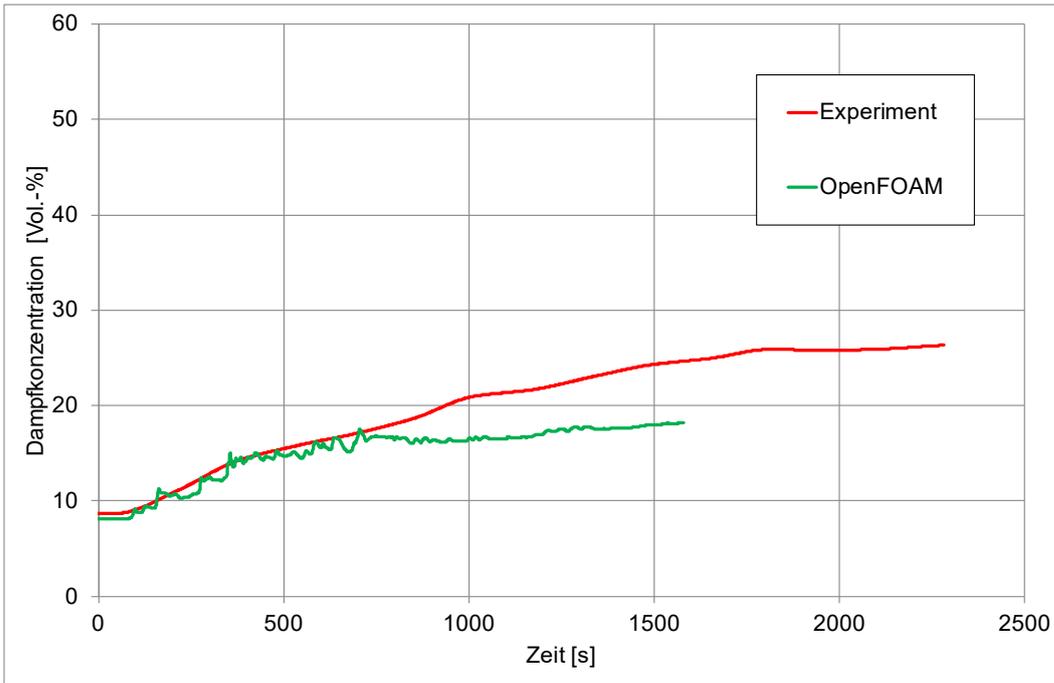


Abb. 2.62 Dampfkonzentration in 5,6 m Höhe

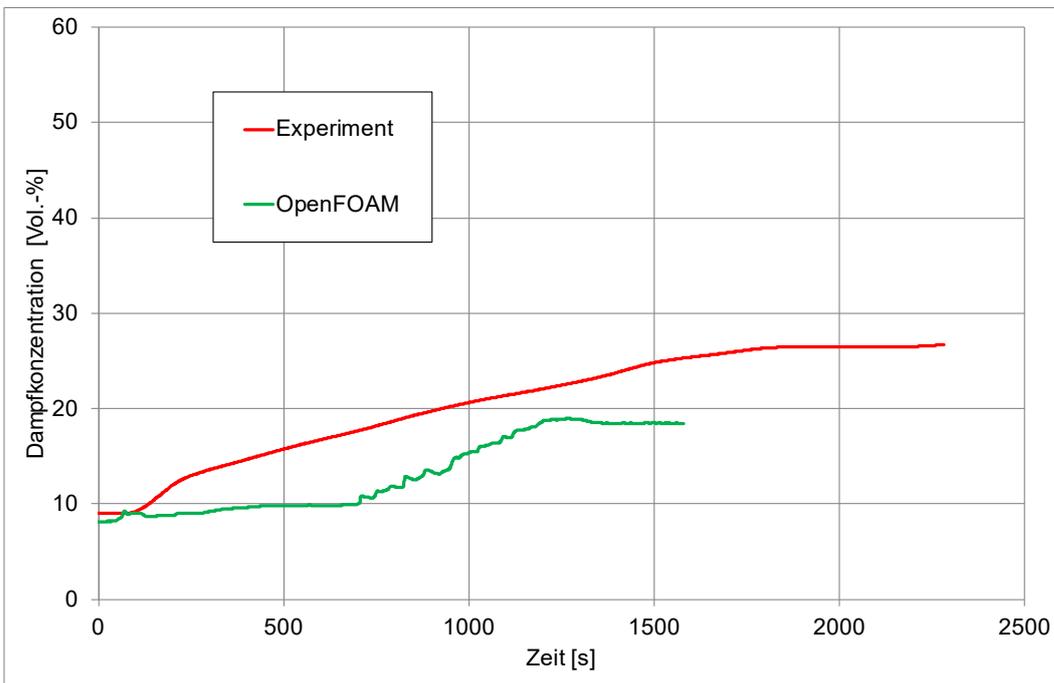


Abb. 2.63 Dampfkonzentration in 2,8 m Höhe

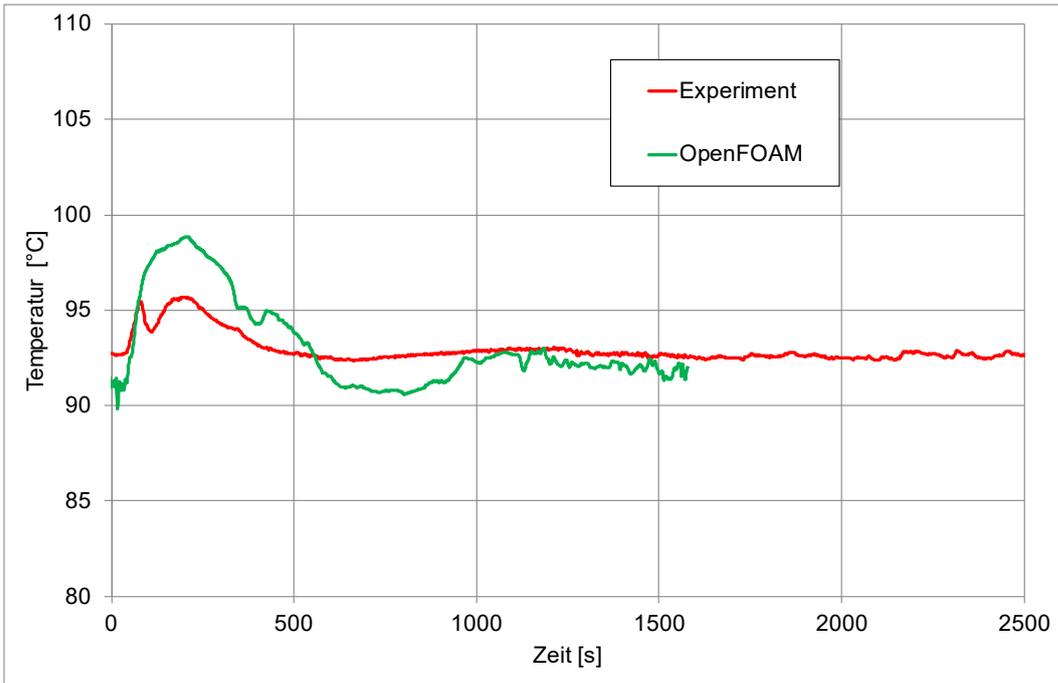


Abb. 2.64 Temperaturverlauf in 7,7 m Höhe

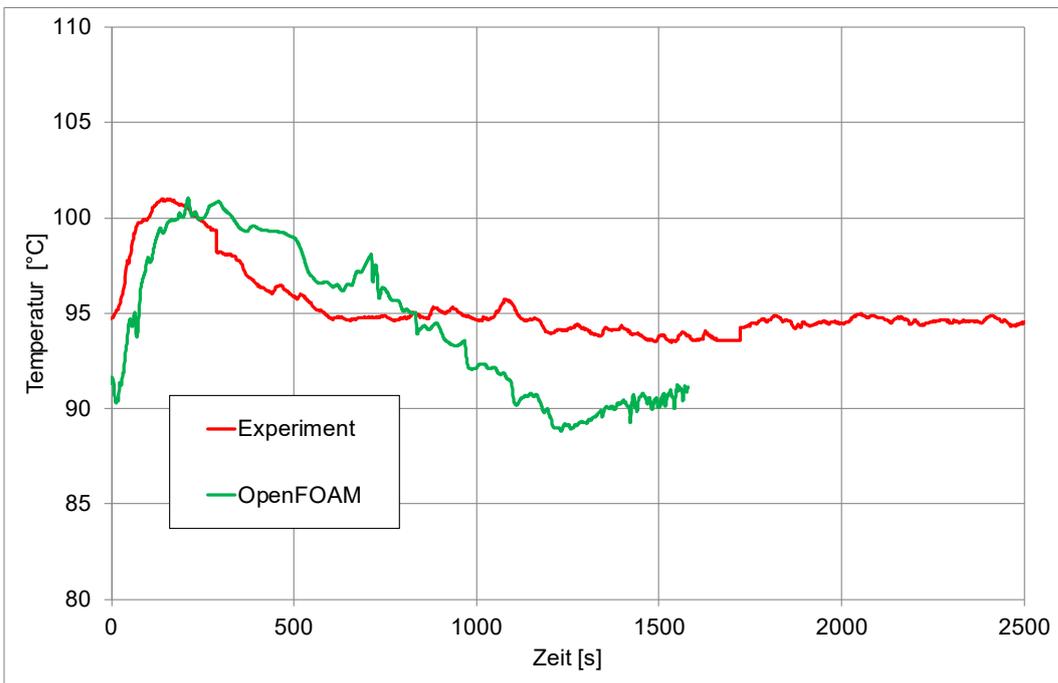


Abb. 2.65 Temperaturverlauf in 2,1 m Höhe

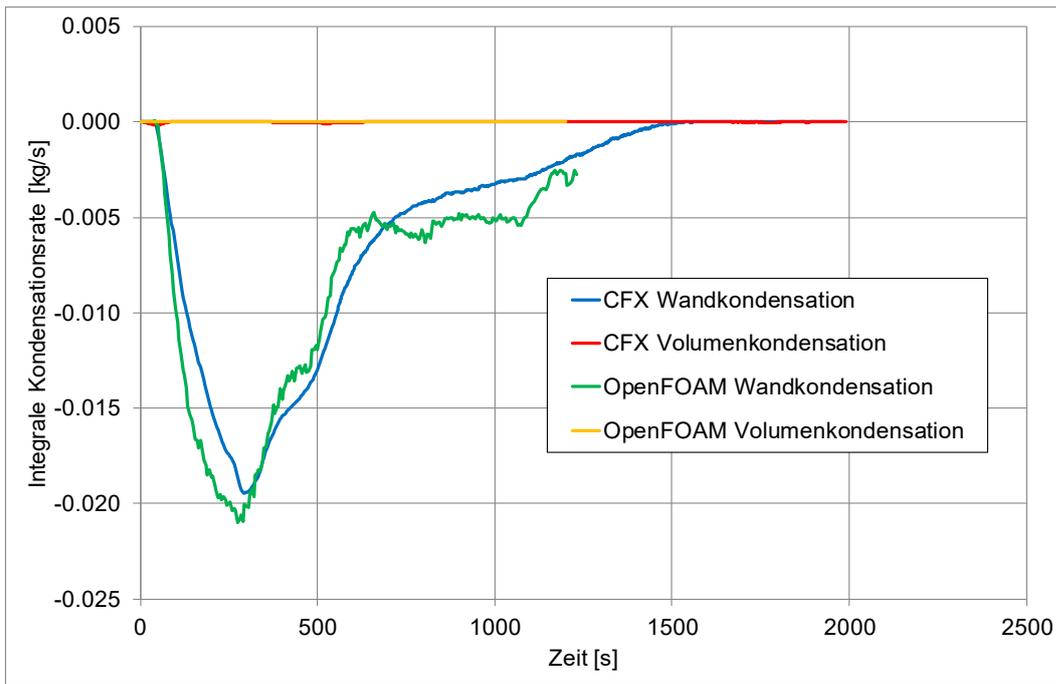


Abb. 2.66 Integrale Wand- und Volumenkondensationsraten

2.2.8 Nachrechnung des Panda 4bis Experimentes

Auch das Panda-Experiment 4bis sollte zur Validierung des neu entwickelten OpenFOAM-Wandkondensationsmodells genutzt werden. Dieses wurde bereits im Vorhaben RS1181 für die Validierung des CFX-Wandkondensationsmodells /SCH 10/ und in RS1526 zum Einfluss unterschiedlicher Wandfunktionen /SCH 17/ genutzt.

2.2.8.1 Beschreibung des Experimentes

In Abb. 2.67 ist der Aufbau des Panda 4bis Experimentes schematisch dargestellt. Das Experiment besteht aus zwei Behältern, die über ein gekrümmtes Rohr (110°) miteinander verbunden sind. Am Anfang sind beide Behälter mit Luft gefüllt, sie haben einen Druck von 1,3 bar und eine Gastemperatur von 76°C . Der Druck wird über ein Venting-Ventil im Behälter 2 konstant auf diesem Wert von 1,3 bar gehalten. Über ein horizontales Rohr wird in den Behälter 1 Dampf eingespeist ($107,8^\circ\text{C}$ / $54,16\text{ g/s}$). Die Dauer der Einspeisung beträgt 7200 s. Die Dampfkonzentration und die Temperaturen wurden an mehreren Stellen im Behälter gemessen. Weitere Details zum Experiment finden sich in /ZBO 06/, /SCH 10/.

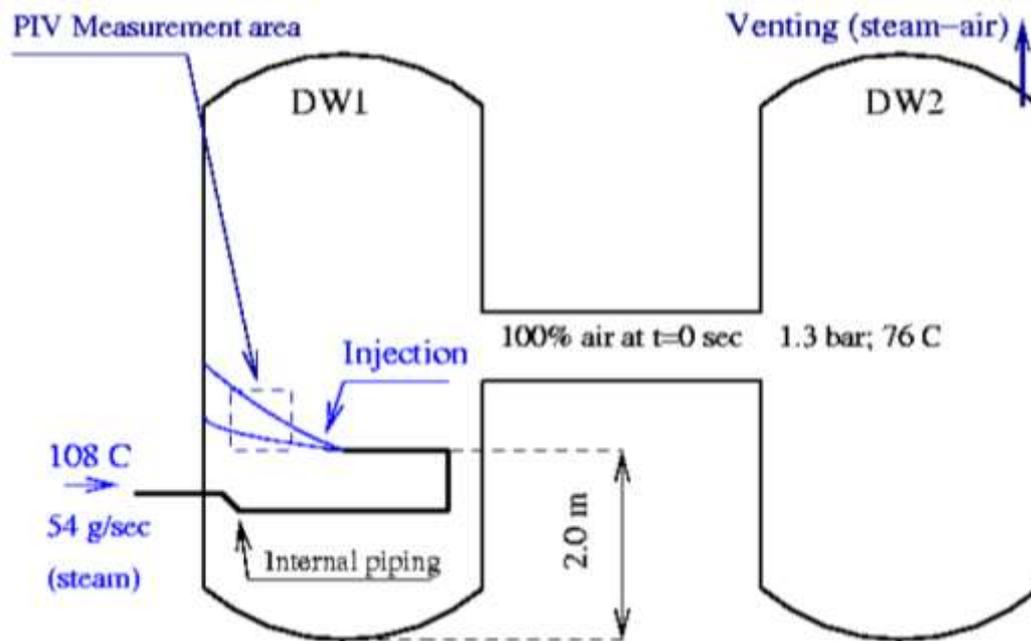


Abb. 2.67 Schematische Darstellung des Experimentes Panda 4bis /ZBO 06/

2.2.8.2 Setup der OpenFOAM-Berechnung

Der Versuch wurde mit dem Solver chtMultiRegionSchmidtFoam basierend auf OpenFOAM 6 nachgerechnet.

Tab. 2.11 Infobox: Panda-Experiment 4bis zur Wandkondensation

Experiment	Panda-Experiment 4bis
Phänomene	Gasverteilung / Wandkondensation
Materialien	Luft (Air) und Dampf (H ₂ O)
Software / Version	OpenFOAM 6
Solver	chtMultiRegionSchmidtFoam
Zeitschritte	Variabel
Courant-Zahl	Max. 10
Turbulenzmodell	buoyantkOmegaSST
Strahlungsmodell	P1
Wandkondensation	GRS-Modell
Gittererstellung	Pointwise
Elementzahl	958.278

Für die Turbulenz wurde das buoyantkOmegaSST-Modell verwendet. Die Strahlung wurde mit dem P1-Modell berechnet. Das neue Wandkondensationsmodell, welches mit

diesem Versuch validiert werden sollte, wurde bei dieser Berechnung verwendet. Das Gitter wurde mit Pointwise erstellt und hatte insgesamt 958.278 Elemente. Die Dicke der 1. Gaszelle an der Wand beträgt ca. 2 cm. Es ist in Abb. 2.68 dargestellt. Alle Details zum Setup finden sich auch in Tab. 2.11.

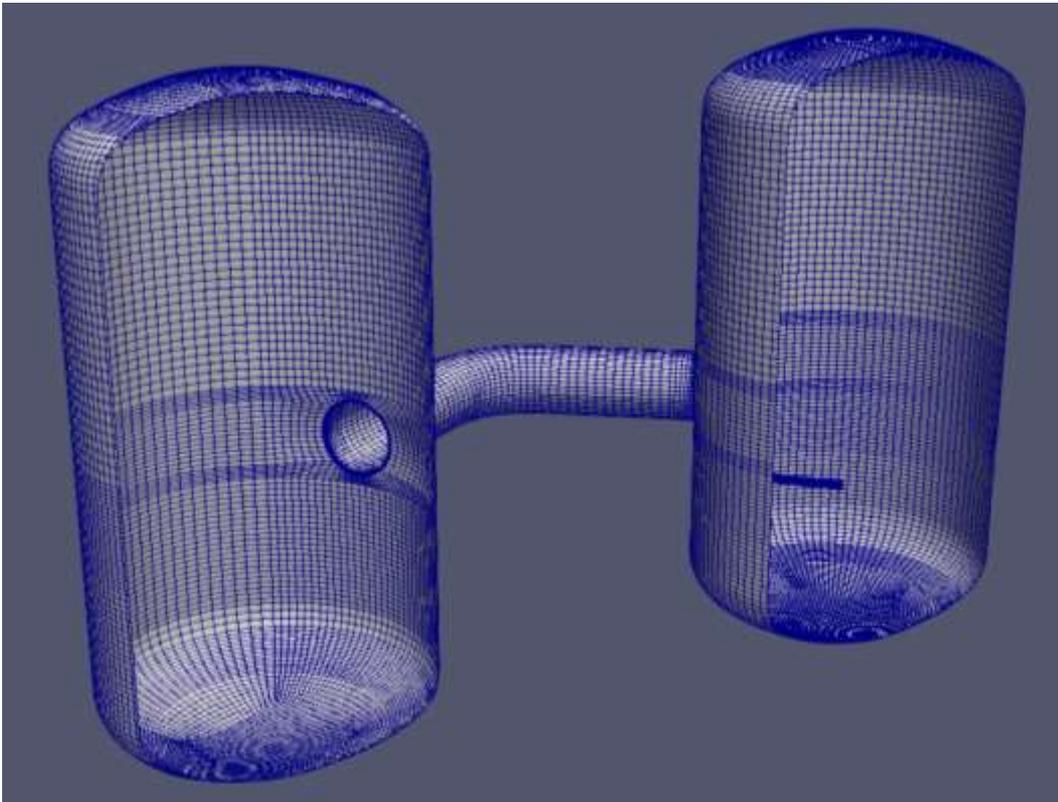


Abb. 2.68 Verwendete CFD-Gitter (rechts: Behälter 1 mit Einspeiserohr, links: Behälter 2)

2.2.8.3 Ergebnisse der OpenFOAM-Berechnung

In Abb. 2.69 ist beispielhaft ein Ergebnis der OpenFOAM-Berechnung dargestellt. Hier sieht man für den Zeitpunkt $t = 1000$ s, wie sich der Dampf auf die beiden Behälter verteilt. Die Dampfkonzentration erhöht sich zunächst im Behälter 1. Aufgrund von Dichteunterschieden (der heiße Dampf ist leichter als die initial vorhandene kältere Luft) kommt es zu einem Austausch mit dem 2. Behälter über das Verbindungsrohr. In ihm wird eine Gegenströmung beobachtet. Im 2. Behälter erhöht sich zunächst die Dampfkonzentration im oberen Teil. In Abb. 2.70 bis Abb. 2.73 werden die von OpenFOAM berechneten Dampfkonzentrationen an mehreren Messpunkten sowohl mit den experimentellen Werten als auch mit den Werten der (in RS1526 /SCH 17/ durchgeführten) CFX-Rechnung

verglichen. Hier zeigt sich insgesamt eine gute Übereinstimmung. Leichte Abweichungen vom Experiment gibt es hauptsächlich im zweiten Behälter (siehe Abb. 2.72 und Abb. 2.73).

In Abb. 2.74 werden die von OpenFOAM und CFX berechneten integralen Wandkondensationsraten miteinander verglichen. Experimentelle Daten liegen hierzu nicht vor. Der Verlauf ist zunächst ähnlich, bei OpenFOAM gibt es allerdings bei ca. 1500 s einen unplausiblen Sprung in den Werten und danach relativ starke Schwankungen. Bei Betrachtung der Ausgabedatei fiel auf, dass die OpenFOAM-Rechnung zunächst (bis ca. 350 s) gut, später aber nicht mehr vollständig konvergierte. Insbesondere die Werte der Wandkondensation schwankten sehr stark zwischen den einzelnen Iterationsschritten. Dieses Verhalten änderte sich nur bei sehr kleinen Zeitschritten (ca. $1,0 \cdot 10^{-6}$ s), die aber praktisch nicht verwendet werden können. Bei allen anderen Versuchen und Testrechnungen trat dieses Problem nicht auf. Möglicherweise entsteht das Problem durch die sehr hohen Dampfkonzentrationen an Bereichen der Wand nahe der Dampfeinspeisung, die im Verlauf des Experiments auftreten. Die Konvergenzprobleme in dieser speziellen Situation müssen zukünftig noch näher untersucht werden. Aufgrund der fehlenden Konvergenz sind die Ergebnisse mit Unsicherheiten behaftet. Die gute Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit einer entsprechenden CFX-Rechnung und auch dem Experiment kann deshalb nur bedingt als erfolgreiche Validierung gewertet werden.

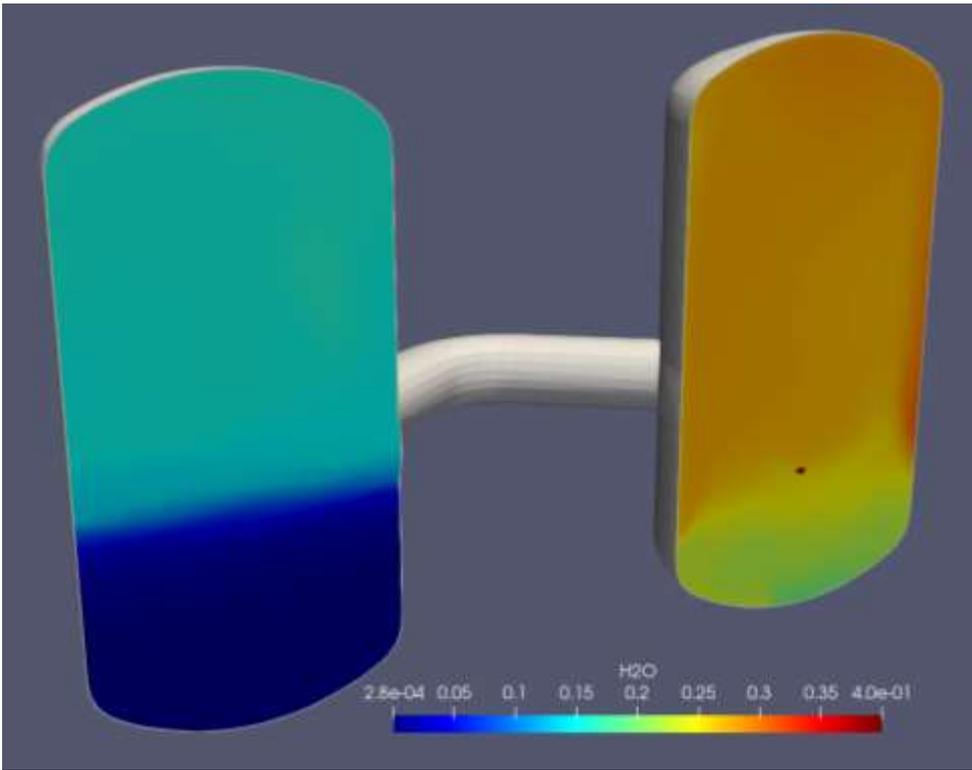


Abb. 2.69 Dampf-Molenbruch zum Zeitpunkt $t = 1000$ s (rechts: Behälter 1, links: Behälter 2)

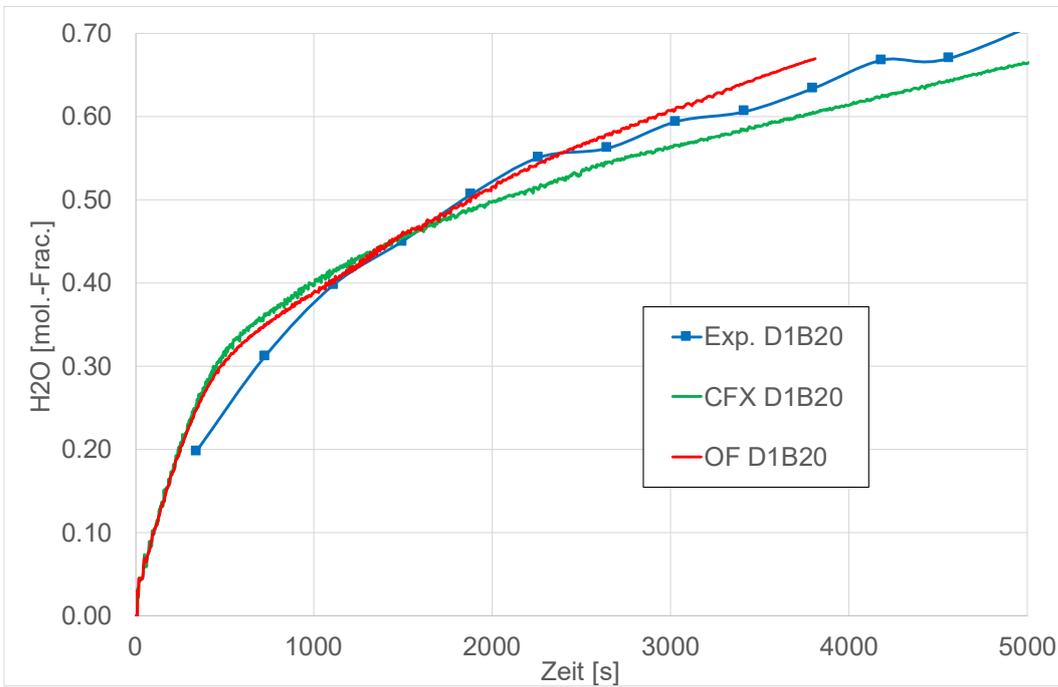


Abb. 2.70 Dampf-Molenbruch am Messpunkt D1B20 (Behälter 1, Höhe 7,478 m)

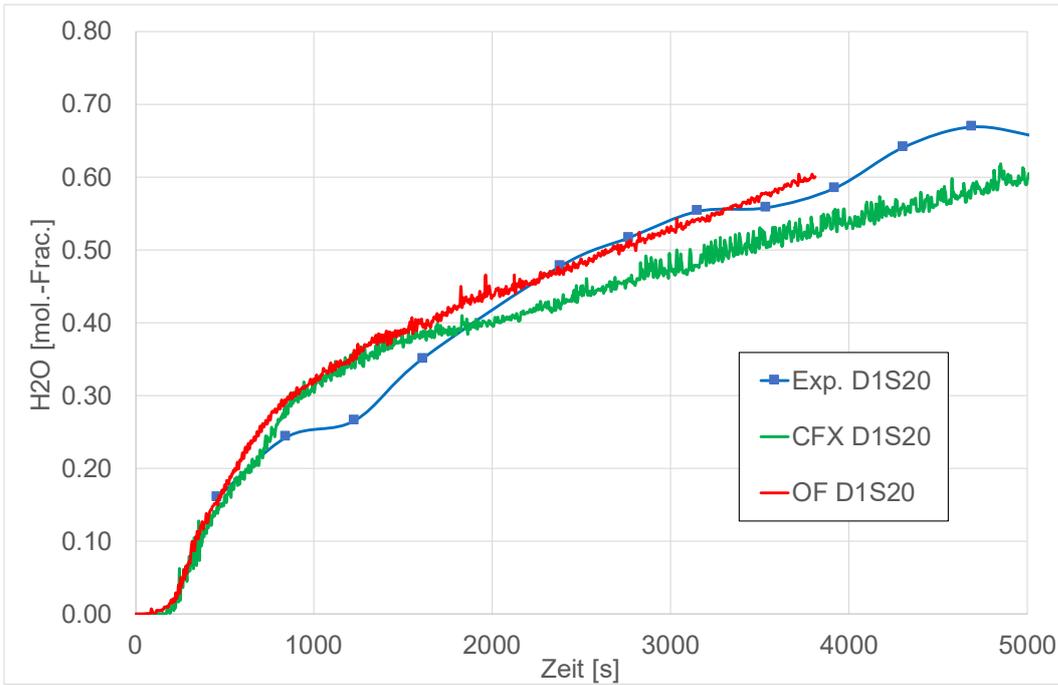


Abb. 2.71 Dampf-Molenbruch am Messpunkt D1S20 (Behälter 1, Höhe 1,076 m)

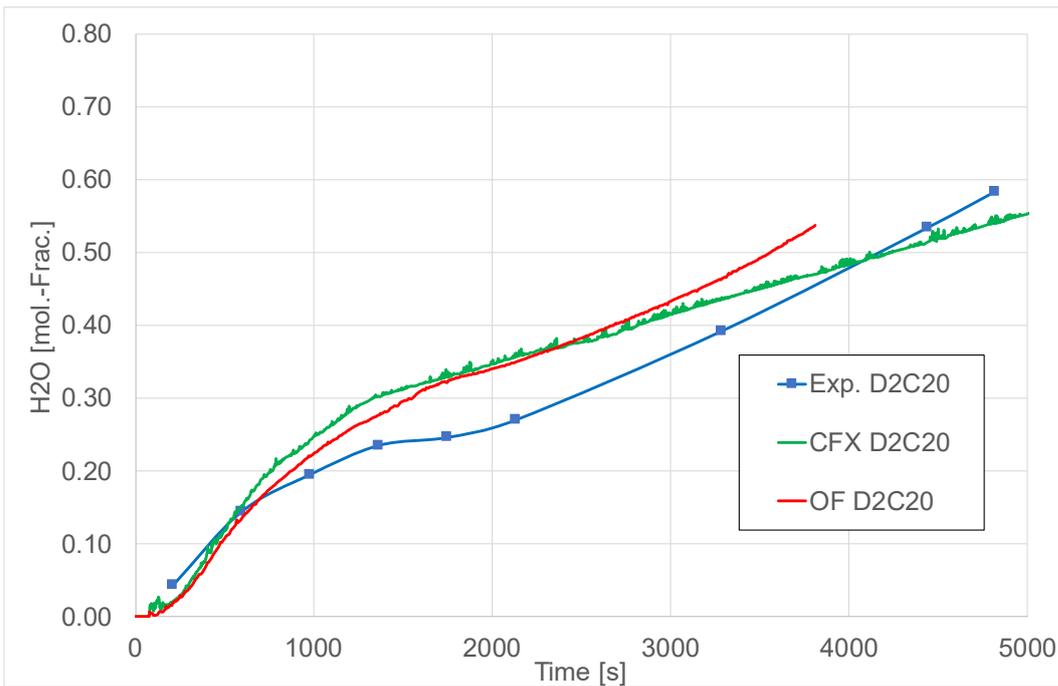


Abb. 2.72 Dampf-Molenbruch am Messpunkt D2C20 (Behälter 2, Höhe 6,93 m)

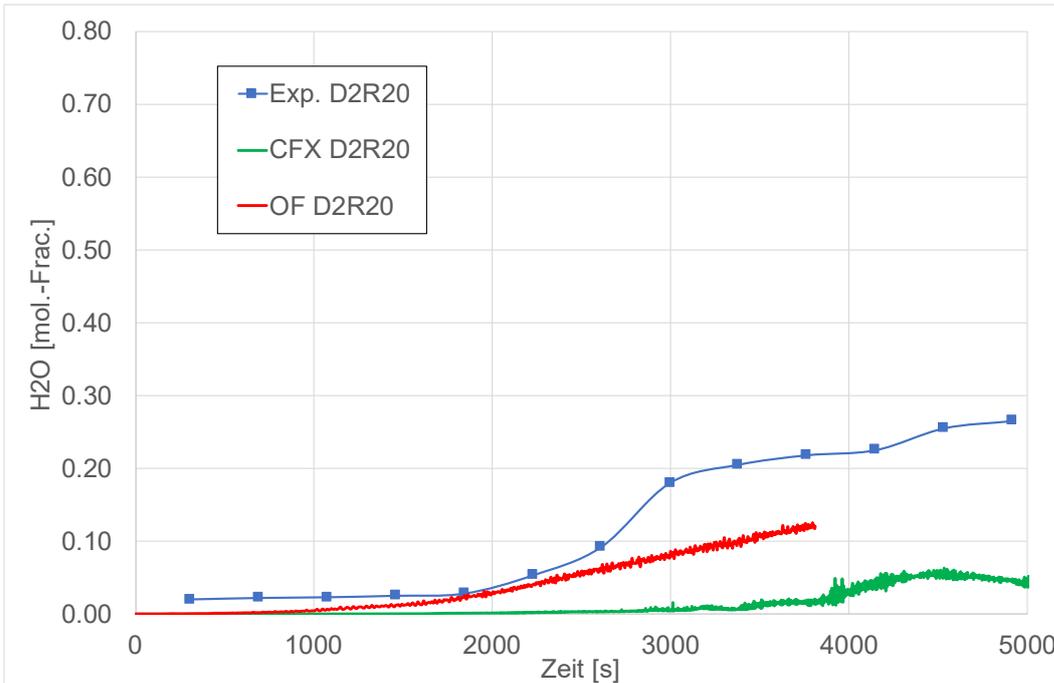


Abb. 2.73 Dampf-Molenbruch am Messpunkt D2R20 (Behälter 2, Höhe 1,726 m)

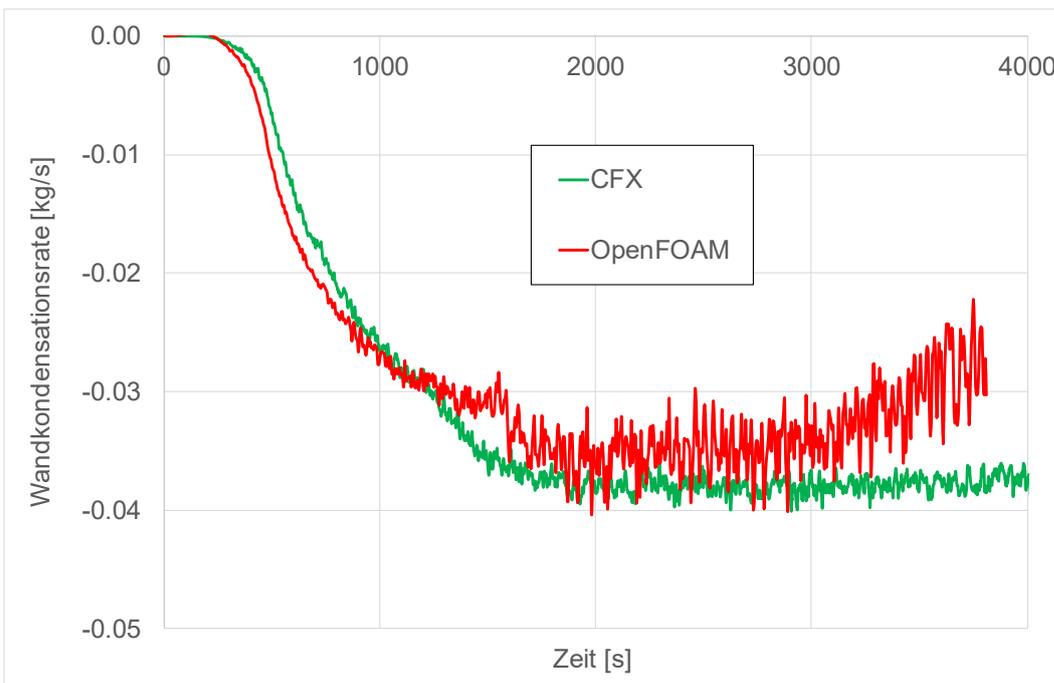


Abb. 2.74 Vergleich der berechneten integralen Wandkondensationsraten

2.2.9 Zusammenfassung

In dem vorliegenden Arbeitspunkt wurde OpenFOAM um mehrere Modelle erweitert. Hierzu zählen insbesondere die Implementierung eines Volumenkondensationsmodells

(in fvOptions) und eines Wandkondensationsmodells (als neue Randbedingung). Weiterhin war die Implementierung von Diffusionstermen notwendig.

Der Stofftransport basiert auf dem Fick'schen Diffusionsgesetz. Bei unterschiedlichen spezifischen Enthalpien der Spezies führt ein Stofftransport auch zu einem Energietransport. Dies und die Wärmeleitung aufgrund von Temperaturgradienten wurde in der Erhaltungsgleichung für die Energie implementiert. Die neu implementierten Diffusionsterme zeigten in einem Testbeispiel das richtige Diffusionsverhalten (Stofftransport ist sehr ähnlich zu CFX). Weiterhin konnten die Probleme in der Energiegleichung durch die neue Implementierung gelöst werden.

Für viele Containment-Fragestellungen spielt der Wärmetransfer zwischen Gasen und Strukturen eine wichtige Rolle, so auch bei der Wandkondensation. Deshalb wurde die Berechnung des Conjugated-Heat-Transfers (CHT) im neuen OpenFOAM-Solver anhand eines – an den Conan-Versuch angelehnten – Testbeispiels überprüft. Hier zeigte sich eine gute Übereinstimmung mit nur kleinen Abweichungen zwischen OpenFOAM und CFX. Die Temperaturprofile und das Aufheizen der Metallplatte verlaufen in OpenFOAM sehr ähnlich wie in CFX. Kleine Abweichungen lassen sich durch etwas unterschiedliche – in CFX und OpenFOAM implementierte – Wandfunktionen erklären.

Das Volumenkondensationsmodell basiert auf der Annahme, dass das System mit einer Zeitkonstante in das Gleichgewicht zwischen gasförmigem und flüssigem Wasser (Nebeltröpfchen) übergeht. Für das Volumenkondensationsmodell wurden Testrechnungen durchgeführt, bei denen ein System im Ungleichgewicht in den Gleichgewichtszustand (Sättigungsdampfdruck) übergeht. Die OpenFOAM-Ergebnisse wurden mit CFX-Ergebnissen (mit dem IKE-Volumenkondensationsmodell) verglichen. Hier zeigte sich eine sehr gute Übereinstimmung beider Ergebnisse bei den sich einstellenden Gleichgewichten. Die Quell- und Senkenterme für Masse, Energie und Spezies wurden also korrekt implementiert.

Analog zu ANSYS CFX wurde ein Wandkondensationsmodell in OpenFOAM implementiert. Es wurde durch Nachrechnung von Conan-Versuchen validiert. Es wurden insgesamt fünf Conan-Versuche mit unterschiedlichen Dampfkonzentrationen berechnet. Bei den Versuchen mit mittlerer Dampfkonzentration findet sich eine sehr gute Übereinstimmung mit CFX und auch mit dem Experiment. Bei den Versuchen mit sehr kleiner und sehr großer Dampfkonzentration finden sich noch leichte Abweichungen bei den berechneten Kondensationsraten. Abweichungen bei hohen Wandkondensationsraten lassen

sich u. a. durch Vernachlässigung des ablaufenden Wasserfilms im gegenwärtigen Wandkondensationsmodell erklären.

Weiterhin wurde das Volumen- und das Wandkondensationsmodell durch Nachrechnung der Versuche TH-2, TH-24 und Panda 4bis validiert. Sowohl bei THAI TH-2 als auch bei THAI TH-24 findet sich eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten. Die Temperaturen und Dampfkonzentrationen passen recht gut zu den experimentellen Werten. Sie sind auch ähnlich zu den CFX-Werten. Gewisse Unterschiede zu CFX liegen vermutlich in etwas geänderten Randbedingungen (durch neue Erkenntnisse), wie auch im Fehlen eines Strahlungsmodells (welches nur bei der CFX-Rechnung zum TH-2 verwendet wurde). Auch die in den beiden Versuchen berechneten Volumen- und Wandkondensationsraten stimmen gut mit den CFX-Werten überein. Hierzu gibt es keine experimentellen Werte. Auch bei Nachrechnung des Experiments Panda 4bis konnte mit dem neu erstellten OpenFOAM-Solver eine ähnlich gute Übereinstimmung wie mit ANSYS CFX im Hinblick auf die Gastemperaturen und den Dampfgehalt erzielt werden. Allerdings traten im Verlauf der Simulation Konvergenzprobleme auf. Deshalb sind die Ergebnisse mit Unsicherheiten behaftet und die gute Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit einer entsprechenden CFX-Rechnung und auch dem Experiment kann deshalb nur bedingt als erfolgreiche Validierung gewertet werden.

Insgesamt konnte dieser Arbeitspunkt (Implementierung und Validierung von Kondensationsmodellen) erfolgreich abgeschlossen werden. Es liegen nun Modelle vor, die bei weiteren Rechnungen (Validierung und Anwendung) genutzt werden können. Weitere Modellverbesserungen wie die Modellierung des ablaufenden Wasserfilms bei Wandkondensation oder die Modellierung des Transports und der Sedimentation von Nebeltröpfchen sind zukünftig sinnvoll. Weiterhin sollen die numerischen Methoden weiter verbessert werden, um eine stabile und schnell konvergierte Lösung zu gewährleisten.

2.3 AP1.3 Wärmestrahlung

2.3.1 Einleitung

Ziel dieses Arbeitspunktes ist der Vergleich und die Bewertung von Wärmestrahlungsmodellen und die Auswahl geeigneter Modellkonstanten (z. B. der Absorptionskonstante für Dampf). Hierzu sollten mehrere Versuche aus dem OECD-Vorhaben HYMERES-2 mit CFX und OpenFOAM nachgerechnet werden. Vom Paul-Scherrer-Institut (PSI) wurden zu diesem Thema drei Benchmarks organisiert:

- HYMERES-2 / Exercise 1: Dies war ein reiner Code-zu-Code-Vergleich, zunächst ohne Strahlung. Berechnet werden sollte die Erosion einer Heliumschichtung durch einen Dampfstrahl im Panda-Behälter.
- HYMERES-2 / Exercise 2: Es wurde der gleiche Versuch wie in Exercise 1 gerechnet, diesmal aber mit Strahlung. Der Absorptionskoeffizient für die Wärmestrahlung sollte konstant bei 1 m^{-1} festgehalten werden.
- HYMERES-2 / Exercise 3: Es wurde wieder der gleiche Versuch gerechnet, aber diesmal sollte eine Sensitivitätsstudie bzgl. des Absorptionskoeffizienten (der Wärmestrahlung) durchgeführt werden.

Die GRS hat sich an allen drei Benchmarks mit eigenen Rechnungen (CFX und OpenFOAM) beteiligt. Die Ergebnisse werden in den folgenden Kapiteln diskutiert.

2.3.2 Exercise 1 und Exercise 2: Code-Benchmark ohne und mit Wärmestrahlung

Bei dem Testbeispiel des Code-Benchmarks handelt es sich um die Auflösung einer Heliumschicht durch einen heißen Dampfstrahl (siehe Abb. 2.75, hier ist die Heliumkonzentration kurz nach Beginn der Dampfeinspeisung dargestellt). Hierbei galten folgende Initial- und Randbedingungen:

- Initialbedingungen: 390 K / 1,361 bar
- Dampf-Einspeiserate: 29,82 g/s
- Einspeise-Temperatur: 416 K
- Heliumkonzentration: Bis 6 m Höhe: 0 vol.-%, ab 6 m Höhe: 25,3 vol.-%

Bei der Geometrie handelt sich um eine vereinfachte 3D-Geometrie eines Panda-Behälters. Das Gitter hat insgesamt 423.136 Elemente und ist in Abb. 2.75 dargestellt. Die orthogonalen Elemente weisen eine hohe Gitterqualität auf.

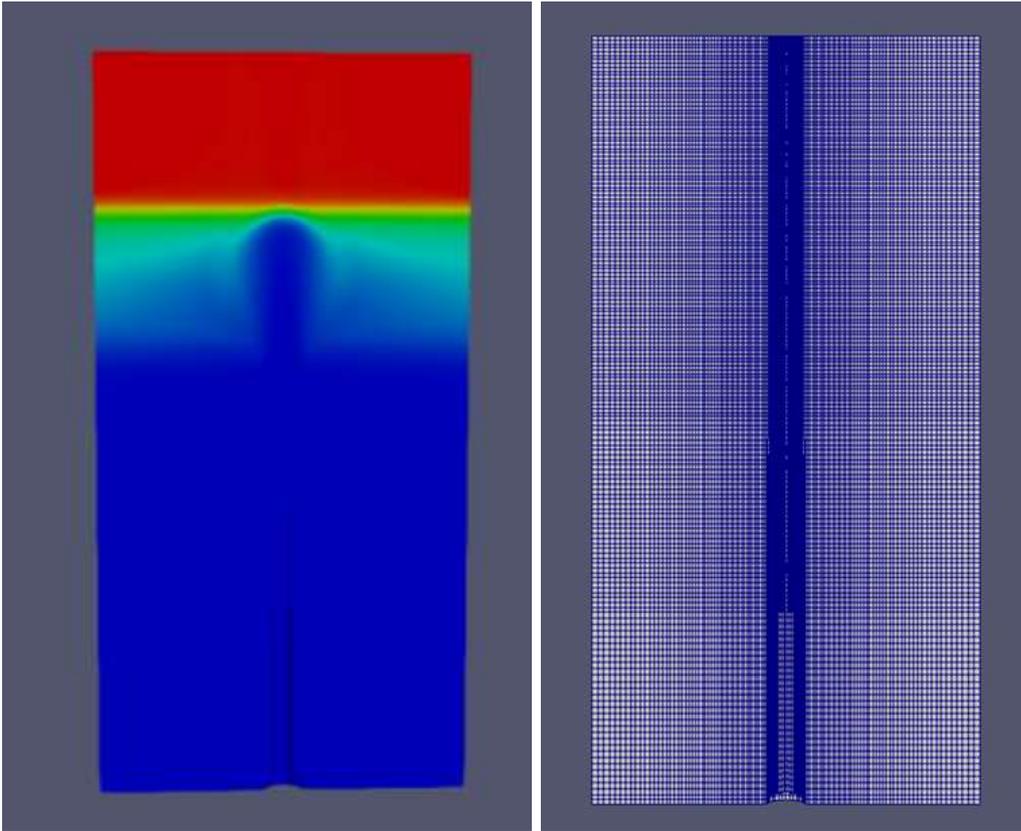


Abb. 2.75 Links: Helium-Molenbruch im Wärmestrahlungsbenchmark (Skala 0 – 25 vol.-%), rechts: Verwendetes CFD-Gitter

Modellierung in OpenFOAM

In Tab. 2.12 sind die in der OpenFOAM-Rechnung verwendeten Modelle und Modellparameter dargestellt. Es wurde OpenFOAM-Version 6.0 und der Solver chtMultiRegionSchmidtFoam05 verwendet. Auf eine Wiederholung der OpenFOAM-Simulationen mit dem Solver chtMultiRegionSchmidtFoam (verbessertes Diffusionsmodell) wurde verzichtet, da keine Messwerte für einen quantitativen Vergleich vorliegen. Die Turbulenz wurde mit dem SST-Turbulenzmodell berechnet. Die Zeitschrittweite war variabel mit einer maximalen Courant-Zahl von 8. Die Wärmestrahlung war in diesem ersten Schritt zunächst ausgeschaltet.

Eine weitere Rechnung wurde mit CFX durchgeführt. Dabei wurden das gleiche Gitter, die gleichen Materialparameter und auch das SST-Turbulenzmodell verwendet.

Tab. 2.12 Infobox HYMERES-2-Benchmark zur Wärmestrahlungsmodellierung

Experiment	HYMERES-2 Code-Benchmark
Phänomene	Gasverteilung / Schichtungsauflösung
Materialien	Dampf (Steam) und Helium (He)
Software / Version	OpenFOAM 6
Solver	chtMultiRegionSchmidtFoam05
Zeitschritte	Variabel
Courant-Zahl	Max. 8
Turbulenzmodell	buoyantkOmegaSST
Strahlungsmodell	unterschiedlich, Absorptionskonstante von Dampf 1 m^{-1}
Diffusionsmodell	GRS-Modell / vereinfachte Diffusion
Gittererstellung	Pointwise
Elementzahl	423 136

In Exercise 2 wurde eine ähnliche Berechnung wie im ersten Schritt durchgeführt – diesmal aber mit Berücksichtigung von Wärmestrahlung. Der Absorptionskoeffizient sollte dabei konstant bei $1,0 \text{ m}^{-1}$ liegen. Der Einfluss unterschiedlicher Wärmestrahlungsmodelle auf die Simulationsergebnisse wird – zunächst getrennt für CFX und OpenFOAM – im Folgenden untersucht. Alle Rechnungen in diesem Abschnitt wurden mit den hier genannten Modellen und Einstellungen durchgeführt.

CFX

Mit ANSYS CFX wurden Rechnungen mit den P1-, Discrete-Transfer- und Monte-Carlo-Strahlungsmodellen durchgeführt. Diese ergeben relativ ähnliche (vertikale und horizontale) Temperaturprofile (siehe Abb. 2.76 und Abb. 2.77). Nur die Rechnung ohne Wärmestrahlung ergibt eine deutlich andere Temperaturverteilung. Die Rechnung ohne Wärmestrahlung zeigt auch eine deutlich langsamere Auflösung der Heliumschicht als die Rechnungen mit Wärmestrahlung (siehe Abb.2.78). Die Auflösung dauert in diesem Fall in etwa doppelt so lange. Die Auflösungszeiten der Rechnungen mit Wärmestrahlung liegen – verglichen mit der Simulation ohne Wärmestrahlungsmodell – relativ nahe beieinander. Die Auflösungszeit bei der Wärmestrahlungsmodellierung mit dem P1-Modell unterscheidet sich von der bei Verwendung des Discrete-Transfer-Modells aber um mehr

als 300 s, was einer relativen Abweichung bei der Schichtungsauflösung von über 10 % entspricht. Die Auswahl des Wärmestrahlungsmodells ist also von Bedeutung.

Bei den vertikalen und horizontalen Strahlungsprofilen zeigen sich etwas unterschiedliche Werte für P1, Discrete Transfer und Monte Carlo (siehe Abb. 2.79 und Abb. 2.80). Die grundsätzliche Form ist aber ähnlich.

Bei der Incident-Radiation sind beim Monte-Carlo-Modell starke Schwankungen zu beobachten. Diese sind auf die begrenzte Zahl von Partikeln (50 Millionen im Rechengebiet) im Monte-Carlo-Modell zu erklären. Auch beim Discrete-Transfer-Modell machen sich bei dieser Größe noch numerische Fehler aufgrund der geringen Anzahl (32) von Strahlen pro Volumenelement bemerkbar. Weiterhin wird bei beiden Strahlungsmodellen das ursprüngliche CFD-Gitter für die Berechnung der Wärmestrahlung von CFX automatisch vergrößert, um Rechenzeit zu sparen. Für die Berechnung der Temperatur ist die gewählte Genauigkeit der Wärmestrahlungsmodellierung aber ausreichend, da hier keine signifikanten Schwankungen mehr auftreten und auch die Lösung der Energiegleichung konvergiert ist (RMS-Residuum $< 1,0e-4$).

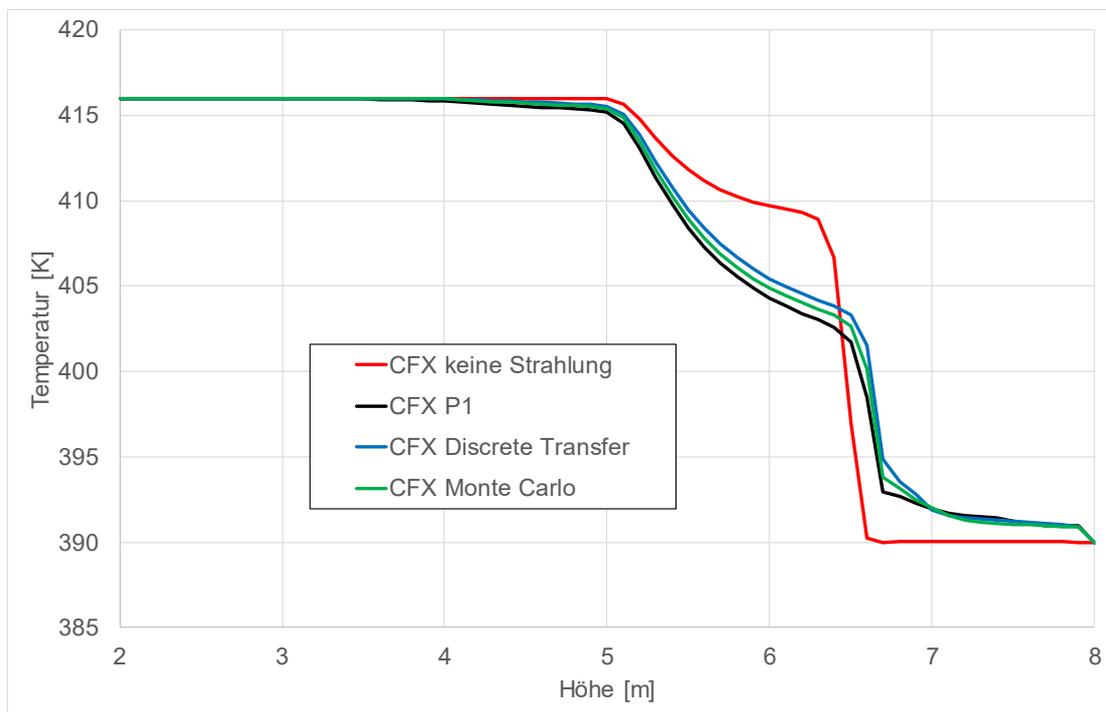


Abb. 2.76 Vergleich der Temperaturen entlang der Mittelachse ($t = 400$ s)

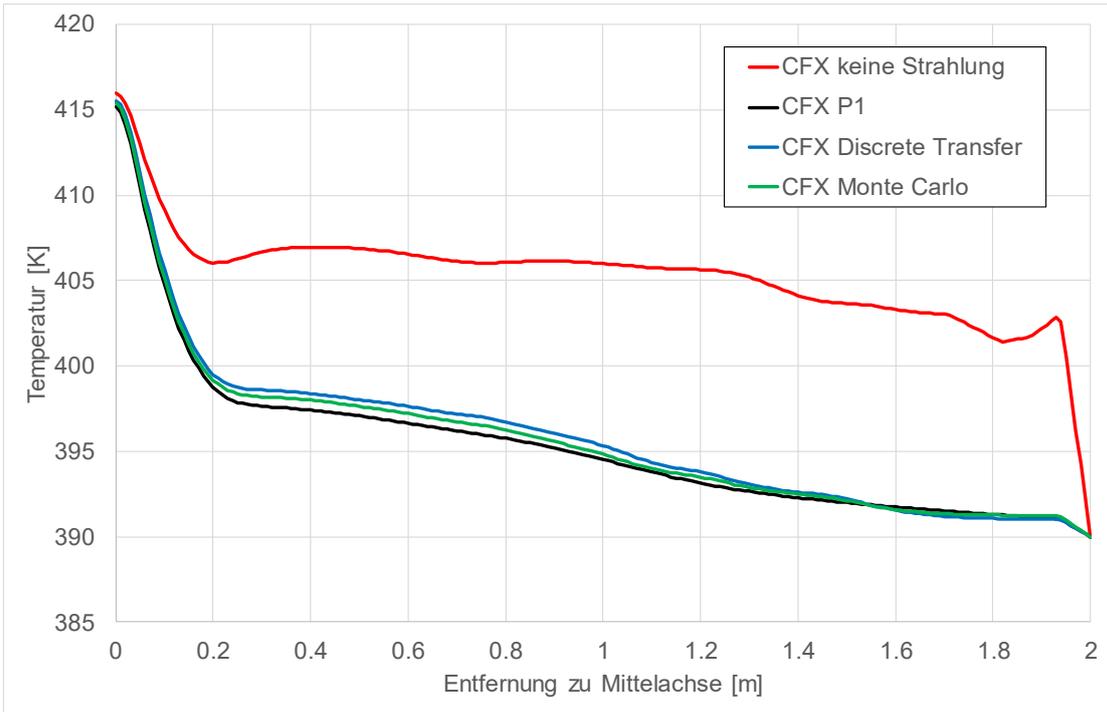


Abb. 2.77 Horizontales Temperaturprofil in 5,0 m Höhe (t = 400 s)

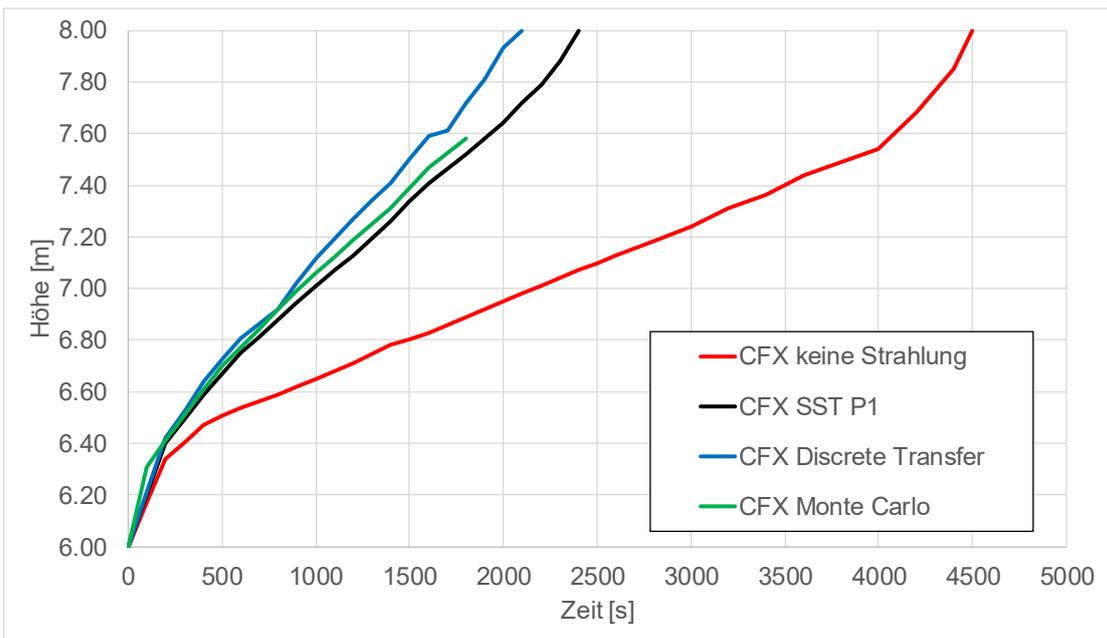


Abb.2.78 Auflösung der Heliumschicht (Höhe, in der Helium-Molenbruch 0,1 ist)

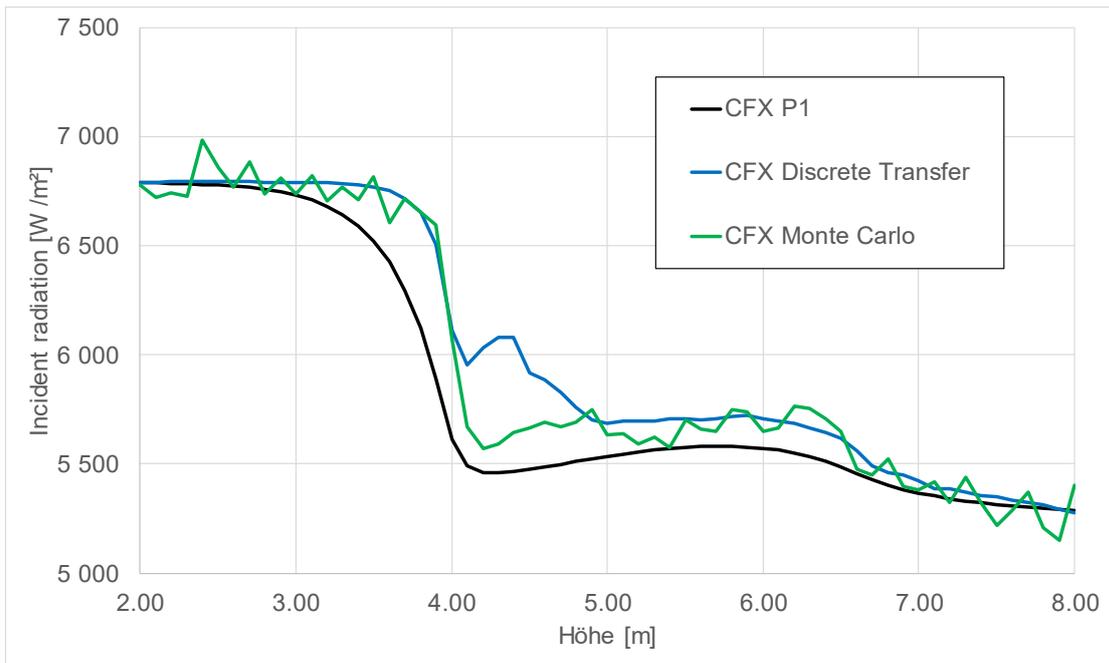


Abb. 2.79 Vergleich der einfallenden Strahlung entlang der Mittelachse (t = 400 s)

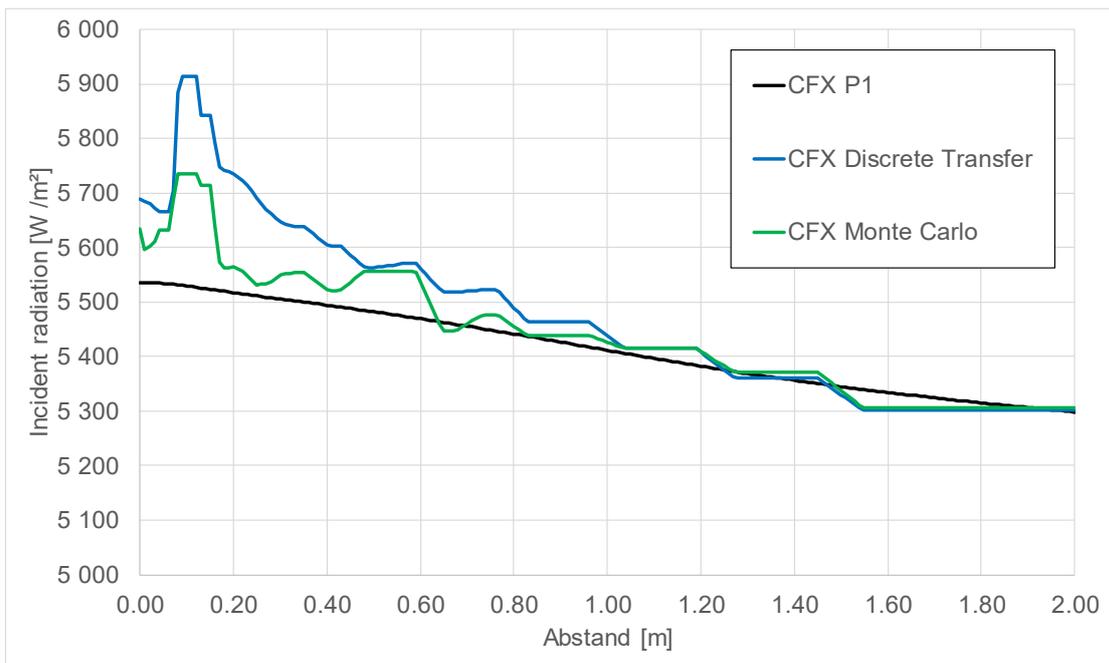


Abb. 2.80 Horizontales Strahlungsprofil in 5,0 m Höhe (t = 400 s)

OpenFOAM

Bei OpenFOAM wurden Rechnungen mit dem P1- und dem fvDOM-Strahlungsmodell durchgeführt. Diese ergeben ähnliche (vertikale und horizontale) Temperaturprofile (siehe Abb. 2.81 und Abb. 2.82). Genau wie bei CFX ergibt die Rechnung ohne Wärmestrahlung eine deutlich andere Temperaturverteilung und zeigt auch eine langsamere

Auflösung der Helium-Schicht (siehe Abb. 2.83). Die Auflösungszeiten der beiden Rechnungen mit Wärmestrahlung liegen nahe beieinander. Bis ca. 7,6 m Höhe ist die Schichtungsauflösung in beiden Rechnungen nahezu identisch. Beim höchsten Punkt (8 m) Höhe ist die Schichtungsauflösung mit dem P1-Modell um etwa 100 s langsamer.

Bei den vertikalen und horizontalen Strahlungsprofilen zeigen sich etwas unterschiedliche Werte für P1 und fvDOM (siehe Abb. 2.84 und Abb. 2.85).

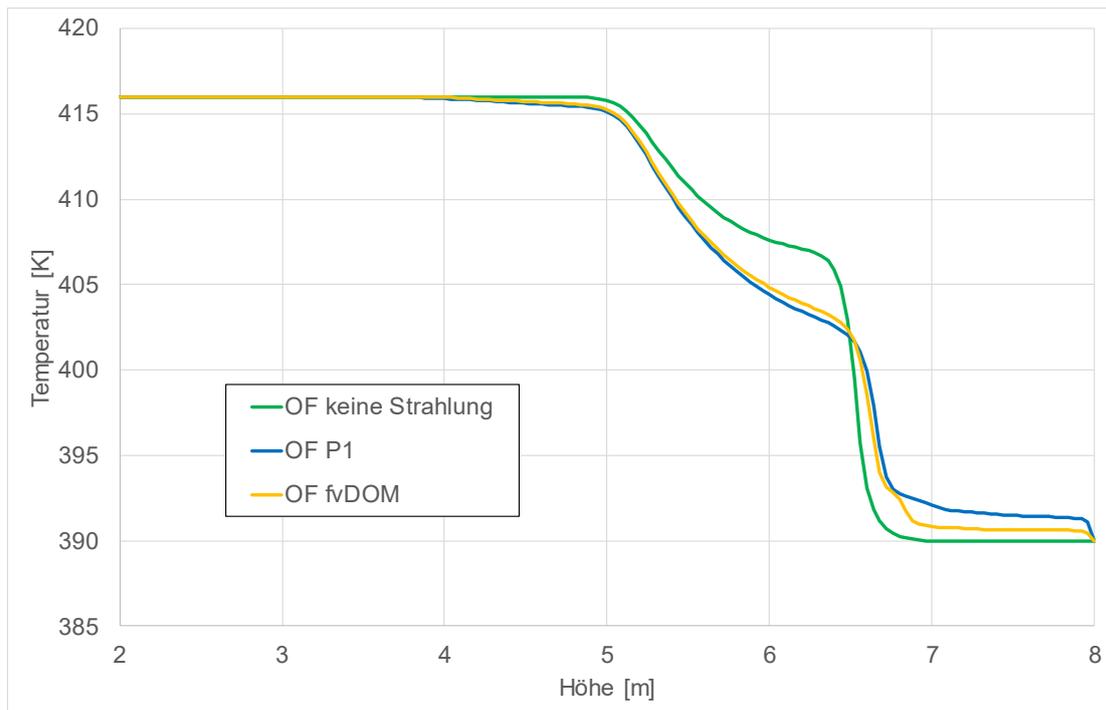


Abb. 2.81 Vergleich der Temperaturen entlang der Mittelachse ($t = 400$ s)

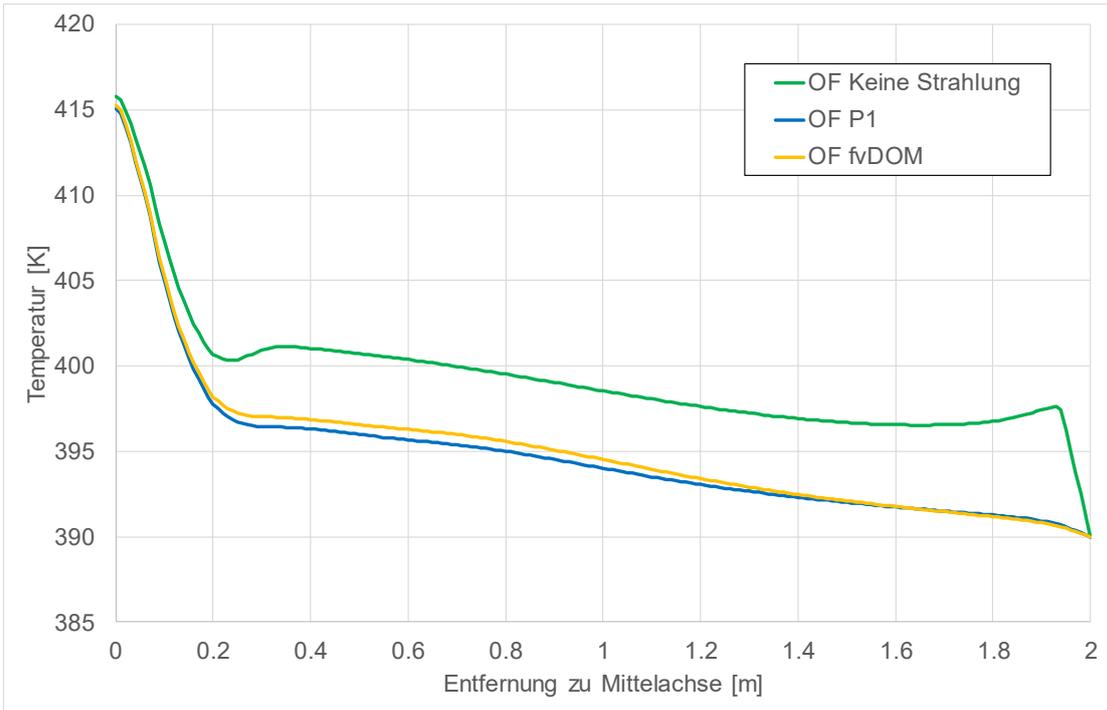


Abb. 2.82 Horizontales Temperaturprofil in 5,0 m Höhe (t = 400 s)

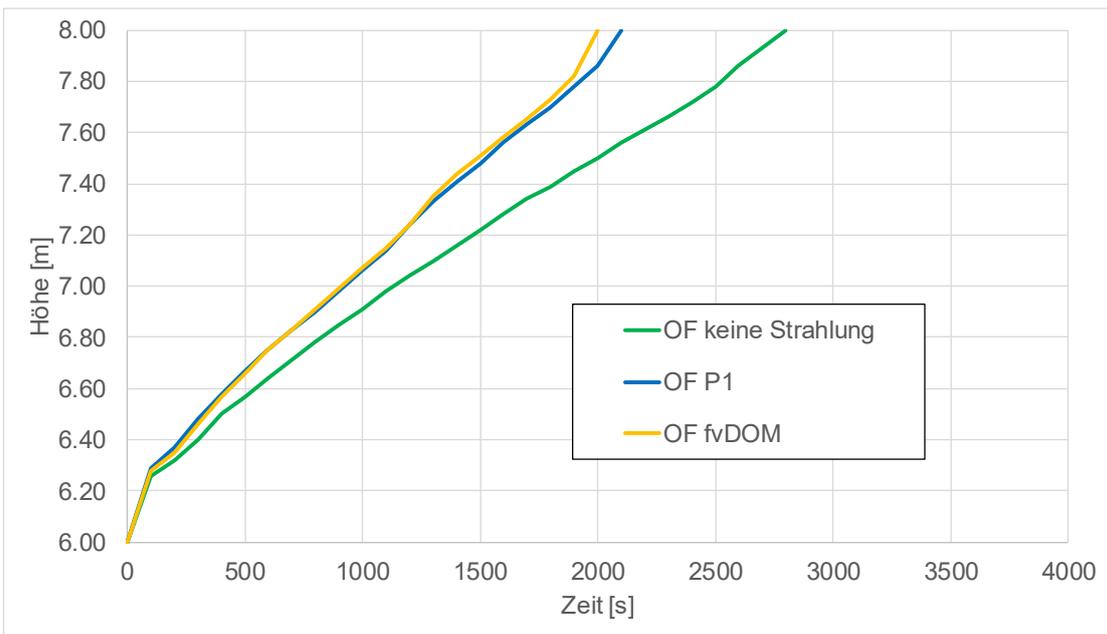


Abb. 2.83 Auflösung der Heliumschicht (Höhe, in der die Helium-Molenbruch 0,1 beträgt)

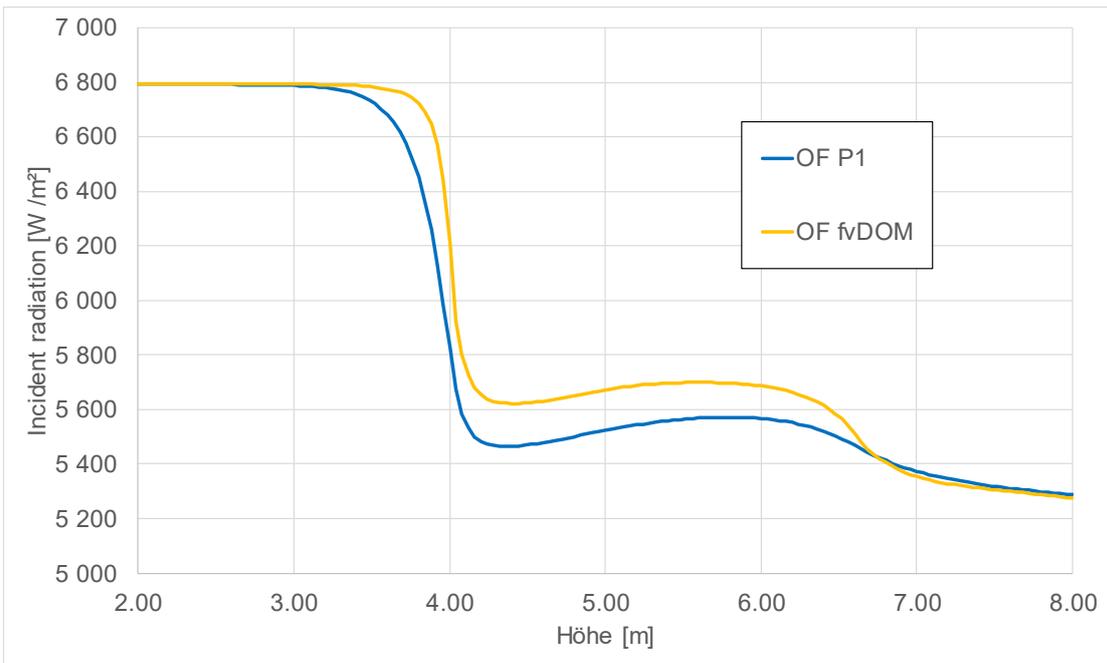


Abb. 2.84 Vergleich der einfallenden Strahlung entlang der Mittelachse (t = 400 s)

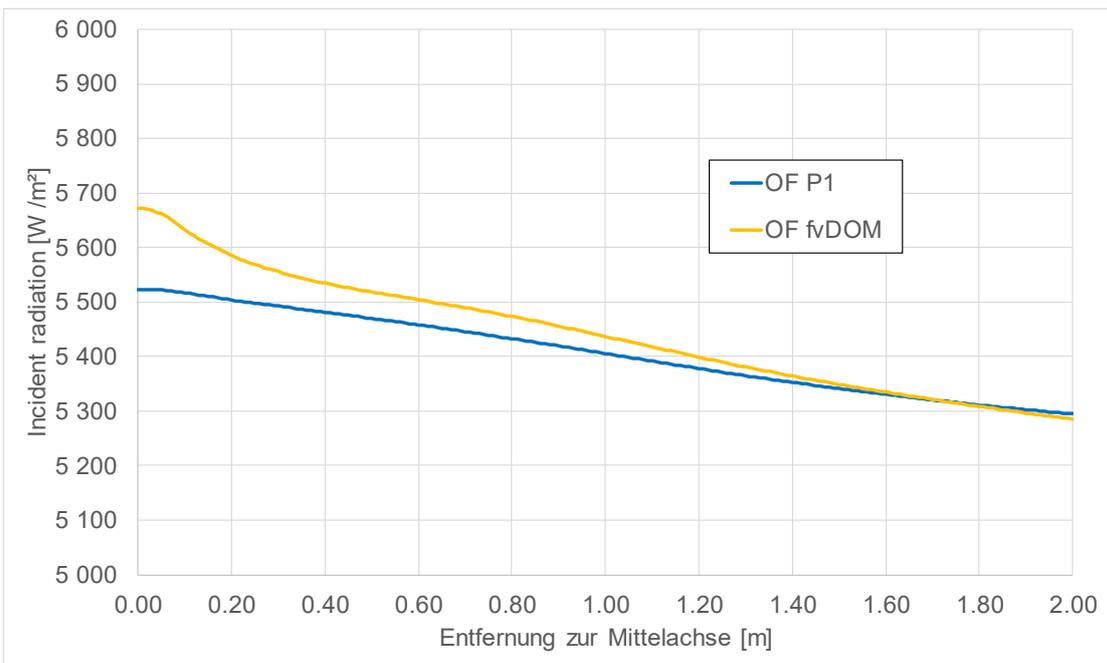


Abb. 2.85 Horizontales Strahlungsprofil in 5,0 m Höhe (t = 400 s)

Vergleich von CFX und OpenFOAM-Ergebnissen

Im Folgenden werden die CFX- und OpenFOAM-Rechnungen mit dem P1-Strahlungsmodell miteinander verglichen. Insgesamt zeigt sich eine schnellere Auflösung der Heliumschicht bei OpenFOAM im Vergleich zu CFX (siehe Abb. 2.86). Eine mögliche Ursache ist, dass die etwas unterschiedlichen Wandfunktionen bei OpenFOAM zu einem

anderen Geschwindigkeitsprofil im Inlet-Rohr führen. Weiterhin kann auch der „Work-Around“ bei der Diffusionsmodellierung im Solver einen Einfluss auf die Temperaturverteilung und die Schichtungsauflösung haben.

Die Unterschiede zwischen CFX- und OpenFOAM-Simulation mit Strahlungsmodell P1 sind aber deutlich kleiner als bei den Rechnungen ohne Wärmestrahlung. Weiterhin zeigen sich sehr ähnliche Vertikalgeschwindigkeiten, Helium-Molenbrüche und Temperaturen im vertikalen Profil bei $t = 400$ s (siehe Abb. 2.87 bis Abb. 2.89). Im horizontalen Temperaturprofil bei $t = 400$ s zeigen sich kleinere Unterschiede (siehe Abb. 2.90).



Abb. 2.86 Auflösung der Heliumschicht (Höhe, in der Helium-Molenbruch 0,1 ist)

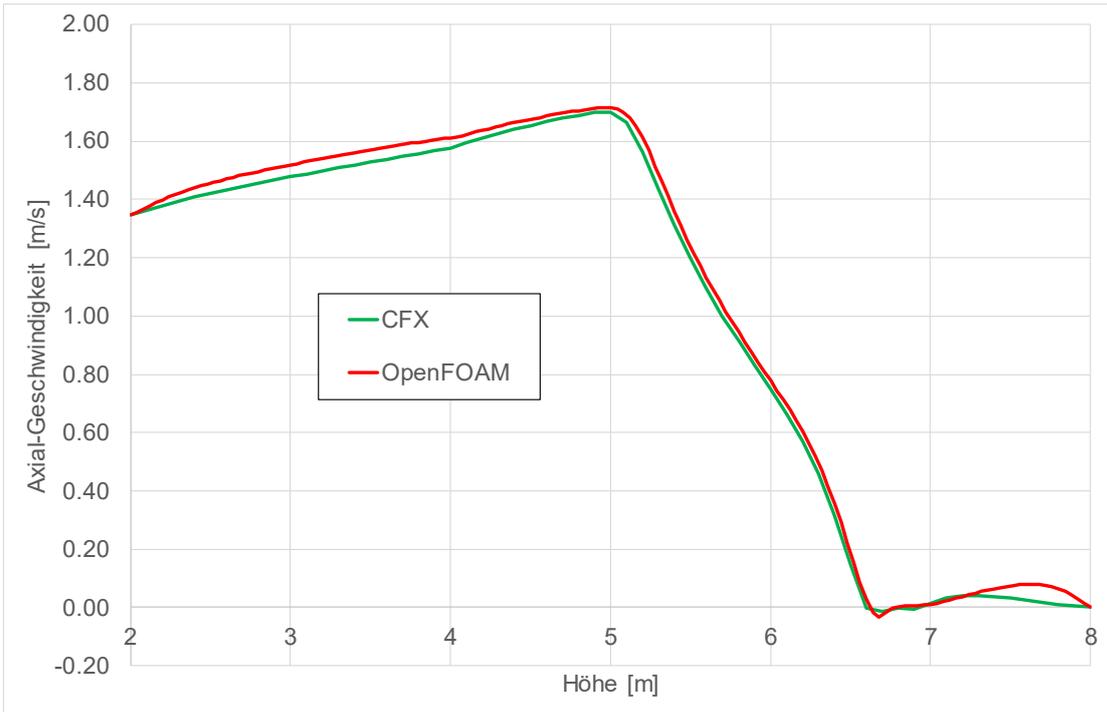


Abb. 2.87 Vergleich der Vertikalgeschwindigkeiten entlang der Mittelachse (t = 400 s)

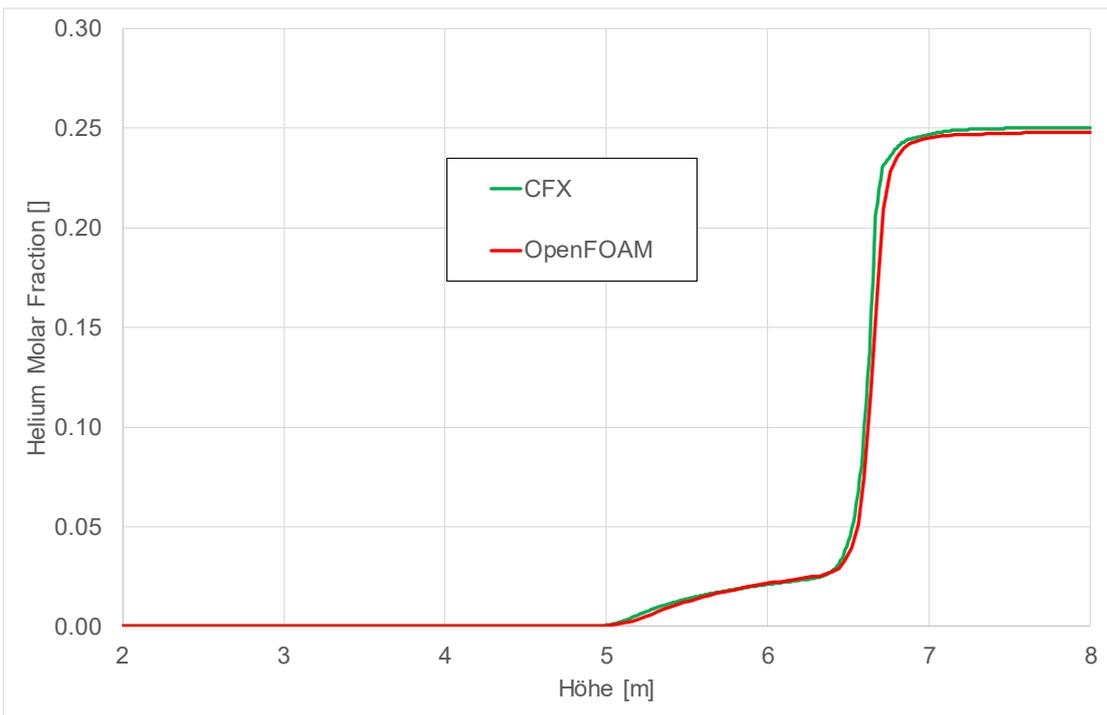


Abb. 2.88 Vergleich der Helium-Molenbrüche entlang der Mittelachse (t = 400 s)

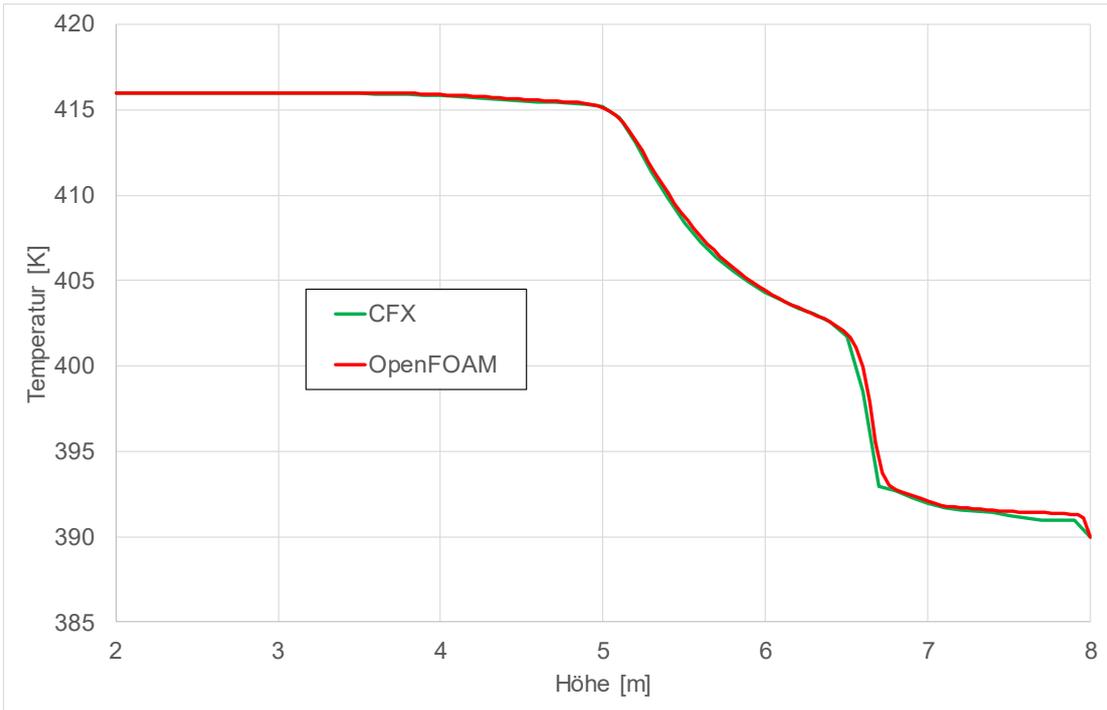


Abb. 2.89 Vergleich der Temperaturen entlang der Mittelachse (t = 400 s)

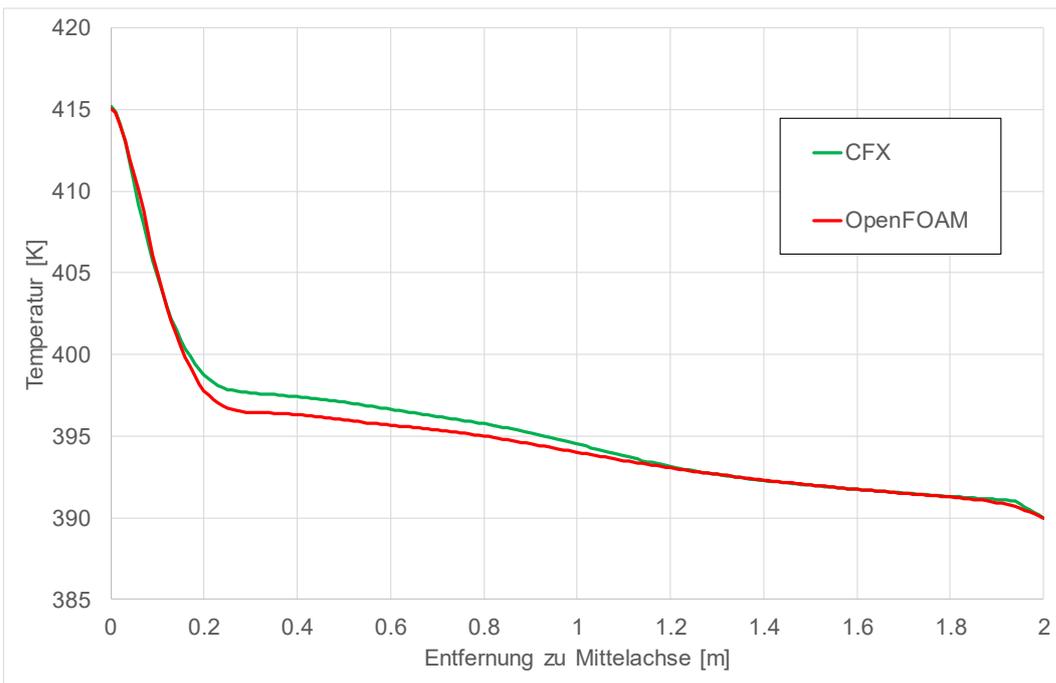


Abb. 2.90 Horizontales Temperaturprofil in 5,0 m Höhe (t = 400 s)

Bei den vertikalen und horizontalen Profilen der einfallenden Strahlung werden im Folgenden alle Strahlungsmodelle von CFX und OpenFOAM miteinander verglichen (siehe Abb. 2.91 und Abb. 2.92). Die Profile von CFX P1 (rote Linie) und OpenFOAM P1 (schwarze Linie) sind im freien Gasraum sehr ähnlich. Nur im Einlassrohr unterhalb von 4,0 m hat CFX einen niedrigeren Wert als OpenFOAM. Die OpenFOAM-Rechnung mit

fvDOM ähnelt stark den CFX-Rechnungen Discrete-Transfer und Monte-Carlo. In Open-FOAM sind allerdings nicht so starke Schwankungen zu beobachten.

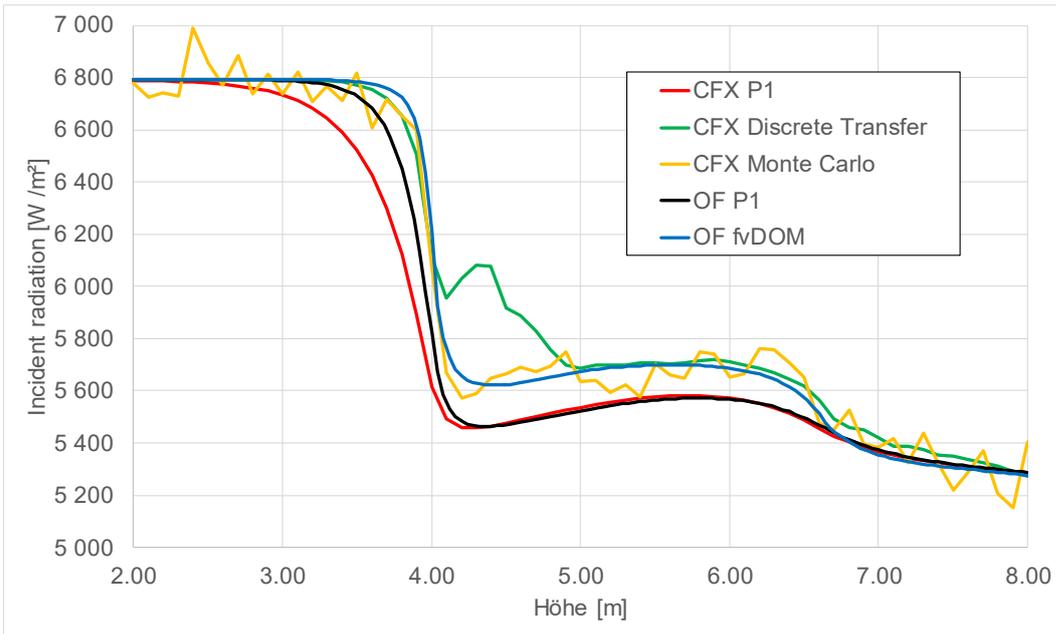


Abb. 2.91 Vergleich der einfallenden Strahlung entlang der Mittelachse (t = 400 s)

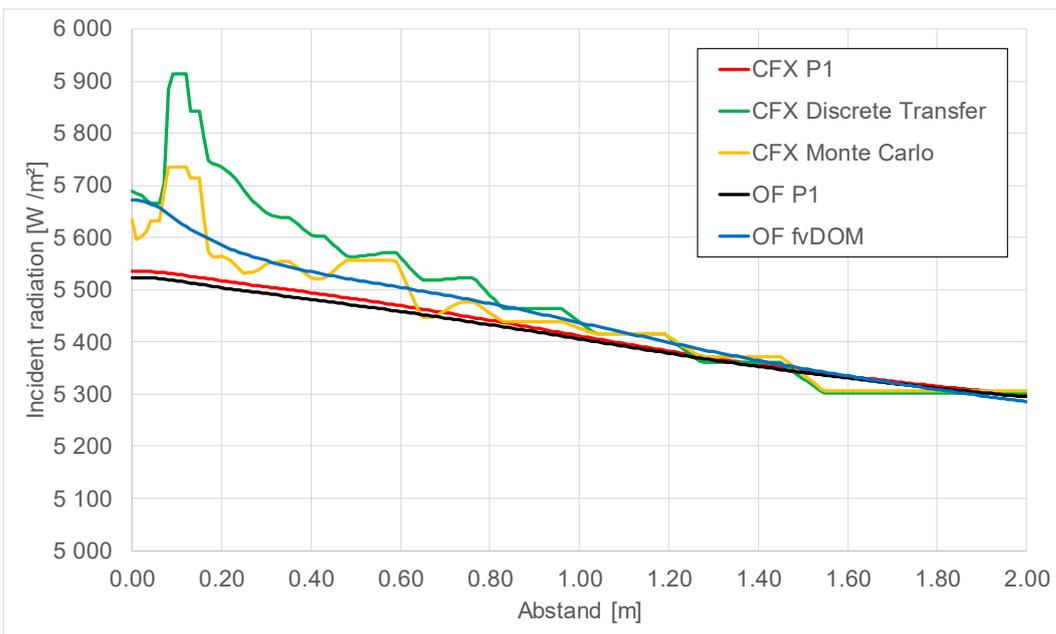


Abb. 2.92 Horizontales Strahlungsprofil in 5,0 m Höhe (t = 400 s)

2.3.3 Exercise 3: Sensitivitätsstudie Absorptionskoeffizient des Gases

Bei den bisherigen Rechnungen wurde ein konstanter Absorptionskoeffizient von $1,0 \text{ m}^{-1}$ verwendet. Im Folgenden soll dieser im Rahmen einer Sensitivitätsstudie variiert werden. In den OpenFOAM- und CFX-Simulationen wurden die gleichen Modelle und das gleiche CFD-Gitter wie für die ersten beiden Benchmarks genutzt (siehe Abschnitt 2.3.2).

Bei CFX zeigt sich ein starker Einfluss des Absorptionskoeffizienten auf die Auflösungszeit (siehe Abb. 2.93). Der kleinste Koeffizient ($0,05 \text{ m}^{-1}$) ergibt eine wesentlich langsamere Auflösungszeit als der Absorptionskoeffizient von 10 m^{-1} . Es wird allerdings kein monotonen Verhalten beobachtet. Ein Koeffizient von 50 m^{-1} hat (entgegen dem Trend) wieder eine etwas langsamere Auflösungszeit zur Folge. Ein weiteres wichtiges Ergebnis des Benchmarks ist, dass selbst bei einem kleinen Absorptionskoeffizienten von nur $0,05 \text{ m}^{-1}$ eine signifikant schnellere Schichtungsauflösung vorhergesagt wird als bei der Simulation ohne Wärmestrahlungsmodellierung.

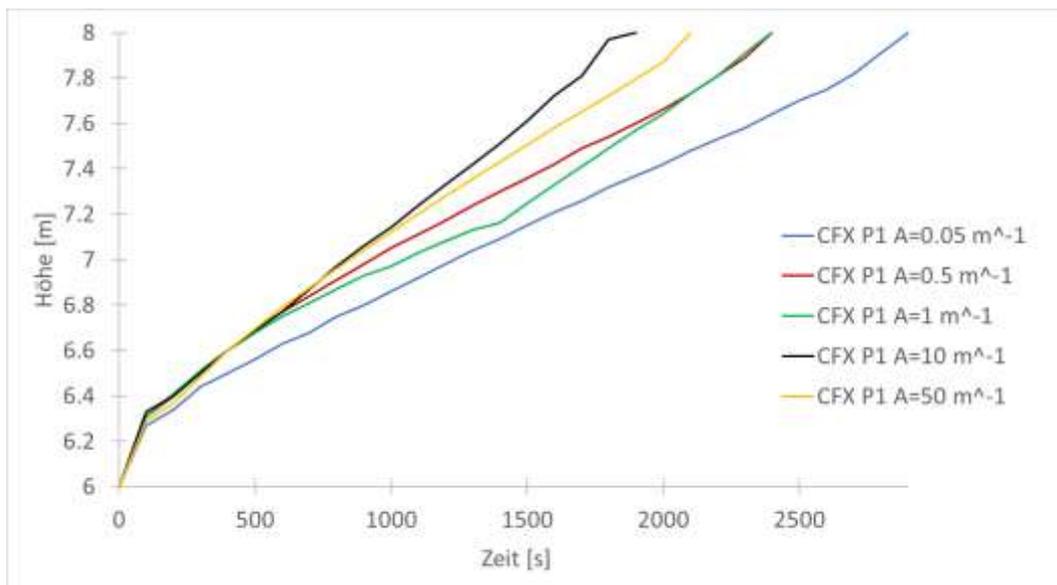


Abb. 2.93 CFX: Einfluss der Absorptionskoeffizienten auf die Auflösung der Heliumschicht

Bei OpenFOAM zeigt sich auch ein starker Einfluss des Absorptionskoeffizienten (siehe Abb. 2.94). Bei den hier betrachteten Absorptionskoeffizienten führt ein größerer Absorptionskoeffizient zu einer schnelleren Auflösung der Heliumschicht.

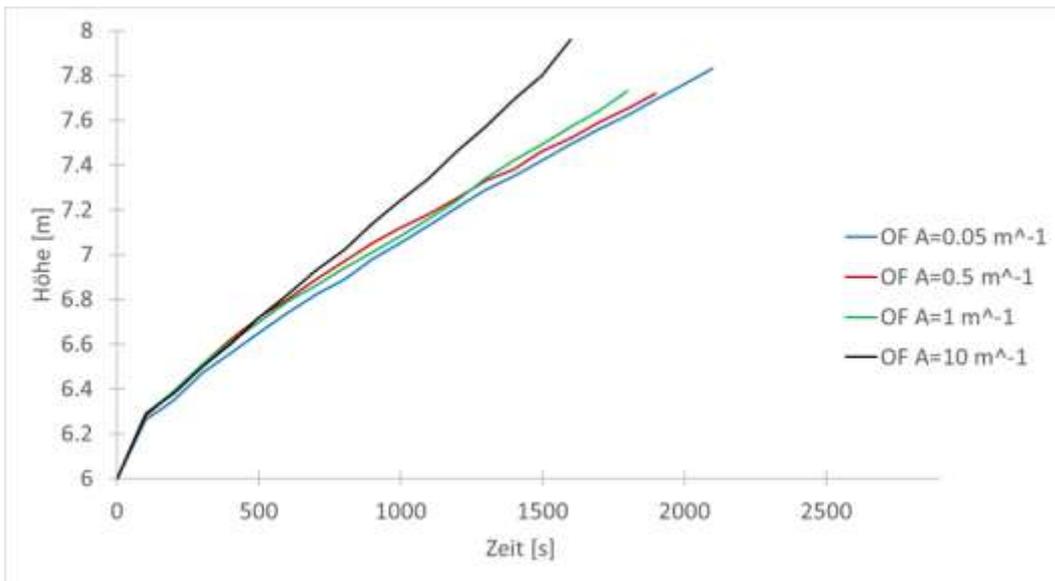


Abb. 2.94 OpenFOAM: Einfluss der Absorptionskoeffizienten auf die Auflösung der Heliumschicht

Bei den Rechnungen zeigt sich, dass der Wärmeaustausch an der Wand durch den Strahlungsanteil dominiert wird und der konvektive Anteil wesentlich kleiner ist (siehe Abb. 2.95 und Abb. 2.96). Dieses gilt für alle berücksichtigten Absorptionskoeffizienten und für beide CFD-Codes.

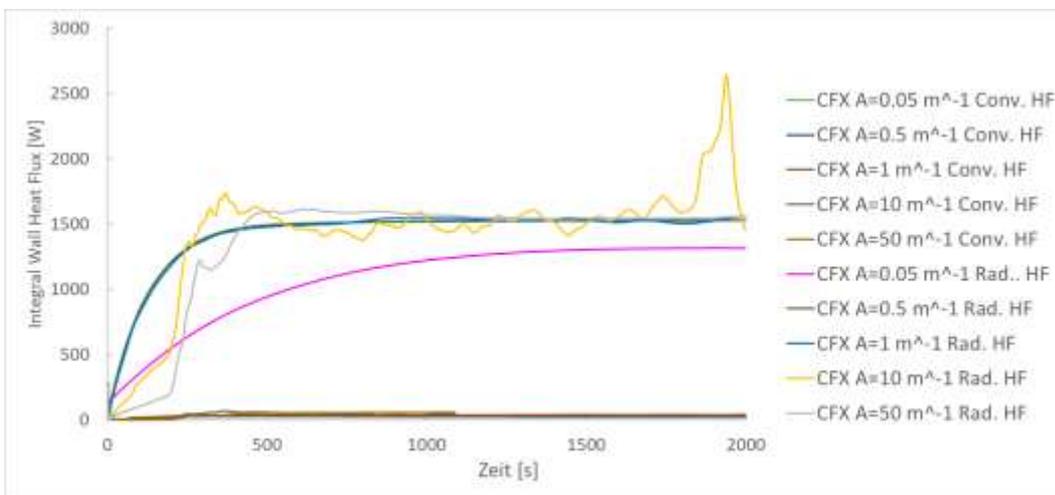


Abb. 2.95 CFX: Integraler konvektiver und radiativer Wärmeaustausch mit der Wand

Der Vergleich von CFX- und OpenFOAM-Rechnungen zeigt ähnliche Werte für den Strahlungs-Wärmeaustausch. Die Größe des Wärmeaustauschs mit der Wand ist in CFX und OpenFOAM ähnlich hoch, im Detail ergeben sich aber insbesondere für die Absorptionskonstanten $0,05\text{ m}^{-1}$ und 10 m^{-1} Unterschiede, meist liegen hier die OpenFOAM-Werte für den radiativen Austausch etwas niedriger (siehe Abb. 2.96).

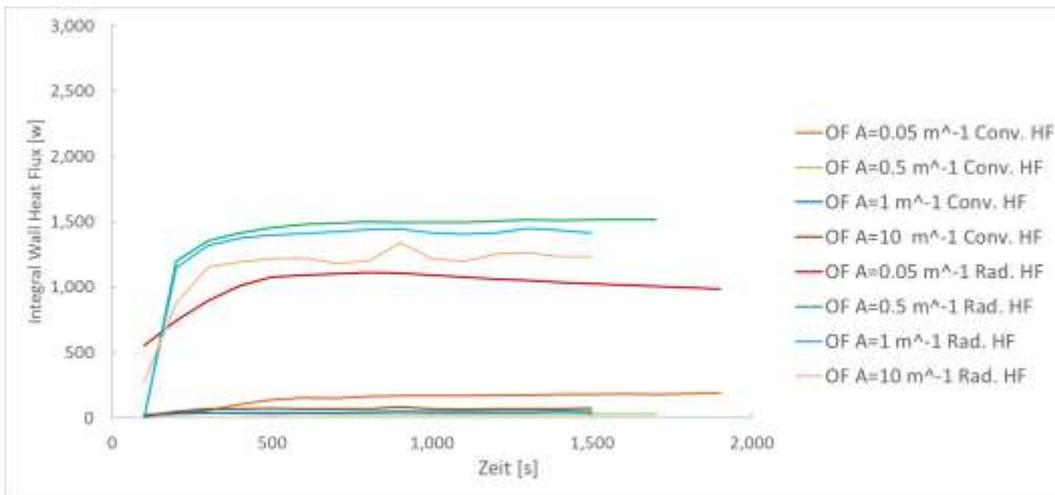


Abb. 2.96 OpenFOAM: Integraler konvektiver und radiativer Wärmeaustausch mit der Wand

In Abb. 2.97 wird der Einfluss des Absorptionskoeffizienten für unterschiedliche Strahlungsmodelle verglichen. Hier zeigt sich eine gute Übereinstimmung der Auflösungszeit bei optisch dichten Medien (10 m^{-1}). Für optisch dünne Medien zeigt das Discrete-Transfer-Modell (DT) eine schnellere Auflösung der Heliumschicht. Für diesen Fall sind die Modellannahmen für das P1-Modell nicht mehr gültig, was eine Erklärung für die Abweichungen liefert.

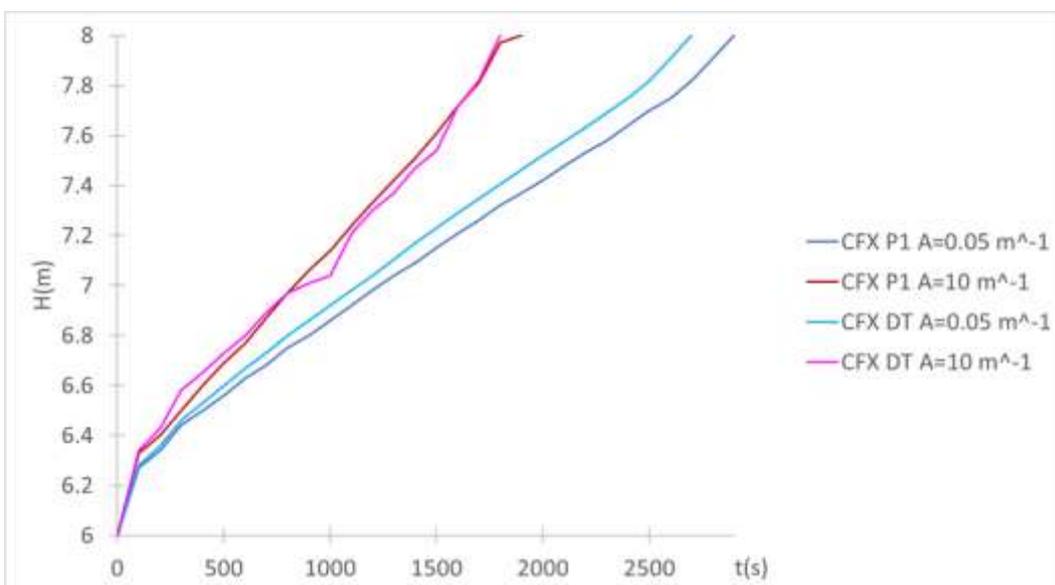


Abb. 2.97 Einfluss des Absorptionskoeffizienten auf die Auflösung der Heliumschicht bei unterschiedlichen Strahlungsmodellen

2.3.4 Simulation des H2P2-Experimentes

2.3.4.1 Einleitung

Anhand der H2P2-Versuchsserie soll die Wärmestrahlungsmodellierung in ANSYS CFX und OpenFOAM weiterentwickelt und validiert werden. Bei diesen Versuchen wurde der Einfluss von Wärmestrahlung gezielt untersucht. Die experimentelle Serie H2P2 besteht aus 5 Experimenten. Ursprünglich ist der Behälter mit unterschiedlichen Mischungen von Helium, Luft und Dampf gefüllt. Dann wird Helium mit hohem Massenstrom von oben in den THAI-Behälter injiziert, was zu einem Anstieg des Drucks und gleichzeitig auch der Gastemperatur führt. Die Höhe des Temperaturanstiegs hängt dabei von den Stoffdaten des Gases (insbesondere c_p) ab, die wiederum von der Gemischzusammensetzung abhängen. Die Dampfkonzentration im THAI-Behälter beeinflusst den Energietransport durch Wärmestrahlung und damit auch den zeitlichen Verlauf der Temperaturentwicklung, da die übrigen Gase (Helium, N_2 , O_2) bei den hier vorliegenden Temperaturen näherungsweise keine Wärmestrahlung emittieren/absorbieren. Aus diesem Grund ist die Dampfkonzentration der wichtigste Parameter, der innerhalb der H2P2-Versuchsserie variiert wird. In den Versuchsnachrechnungen werden die Versuche H2P2_1_2 (geringster Einfluss der Wärmestrahlung) und H2P2_5 (maximale Dampfkonzentration, höchste Absorption/Emission der Wärmestrahlung durch Gas) simuliert. Im Versuch wurden der Druck, die Heliumkonzentration und die Temperatur an unterschiedlichen Messpunkten gemessen.

Die Versuche wurden im Rahmen des OECD-NEA Projekts HYMERES-2 durchgeführt. Die Versuchsdaten sind nicht frei verfügbar, deshalb kann der Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Versuchsdaten nicht frei veröffentlicht werden. Eine detaillierte Beschreibung der Arbeiten ist in /SCH 22/ zu finden. Dieser Bericht kann auf Anfrage nationalen Partnern zur Verfügung gestellt werden.

2.3.4.2 OpenFOAM-Setup

In Abb. 2.98 ist das für den Versuch erstellte OpenFOAM-Gitter dargestellt. Es enthält ca. 1,92 Millionen Elemente. Dieses Gitter wird auch für die CFX-Rechnungen verwendet. Die in OpenFOAM verwendeten Berechnungsparameter finden sich in Tab. 2.13. Für diese Validierungen wird der von der GRS (weiter-)entwickelte Solver chtMultiRegionSchmidtFoam auf Basis von OpenFOAM 6 verwendet. Als Strahlungsmodelle werden das P1-Modell und das fvDOM-Modell getestet. Hierbei wird für die

Absorptionskoeffizienten die Option „greyMeanAbsorptionEmissionCoeffs“ gewählt, bei der die Absorptionskoeffizienten temperaturabhängig angegeben werden. Die verwendeten Werte für Dampf sind in Abb. 2.99 und Abb. 2.100 dargestellt. In dem im Experiment H2P2_1_2 relevanten Temperaturbereich (ca. 20 °C – 60 °C) liegen diese Absorptionskoeffizienten etwa zwischen 40 (m bar)⁻¹ und 55 (m bar)⁻¹. In dem im Experiment H2P2_5 relevanten Temperaturbereich (ca. 80 °C bis 130 °C) liegen die Absorptionskoeffizienten etwa zwischen 28 (m bar)⁻¹ und 38 (m bar)⁻¹. Weiterhin wurden Parameterstudien mit konstanten Absorptionskoeffizienten von 10 (m bar)⁻¹ und 1 (m bar)⁻¹ durchgeführt. Die anderen Modelle entsprechen dem GRS-Standard (buoyantkOmegaSST-Turbulenzmodell, GRS-Diffusionsmodell, variable Zeitschrittsteuerung). Auf das Gitter werden die jeweiligen Initialbedingungen (Helium/Luft/Dampf-Massenbruch), Temperatur und Druck aufgeprägt und eine Berechnung gestartet.

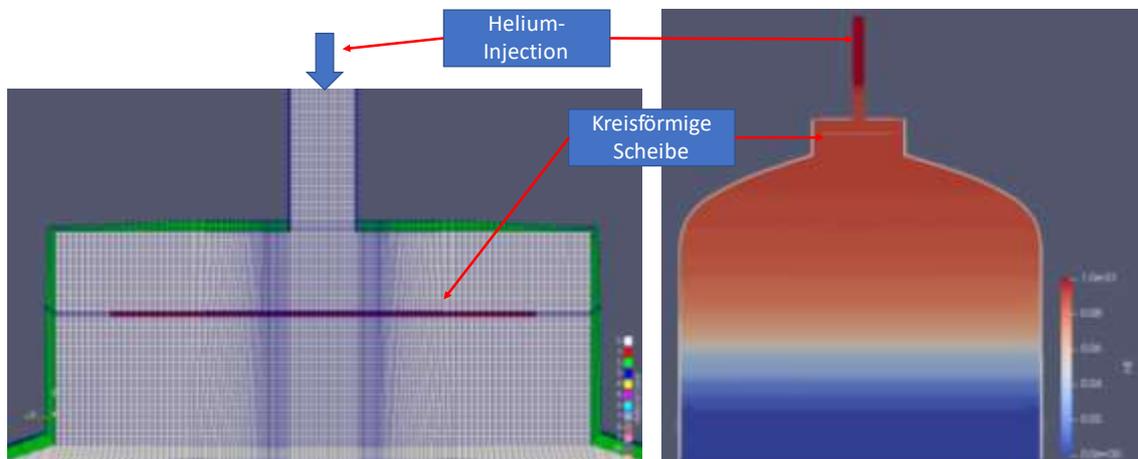


Abb. 2.98 Links: OpenFOAM-Gitter (Ausschnitt), rechts: Initialer Helium-Massenbruch ($t = 0,1$ s)

Tab. 2.13 Infobox Panda-Experiment H2P2 zur Wärmestrahlungsmodellierung

Experiment	Panda-Experimente H2P2_1_2 und H2P2_5
Phänomene	Gasverteilung / Wärmestrahlung
Materialien	Luft (Air), Helium (He) und Dampf (H2O)
Software / Version	OpenFOAM 6
Solver	chtMultiRegionSchmidtFoam
Zeitschritte	Variabel
Turbulenzmodell	buoyantkOmegaSST
Strahlungsmodell	P1 oder fvDOM
Diffusionsmodell	GRS-Modell
Gittererstellung	Pointwise
Elementzahl	1.915.456

```
H2O
{
  Tcommon      200;
  invTemp      true;
  Tlow         200;
  Thigh        2500;

  loTcoeffs
  (
    0
    0
    0
    0
    0
    0
  );
  hiTcoeffs
  (
    -0.23093
    -1.12390e3
    9.41530e6
    -2.99880e9
    0.51382e12
    -1.86840e10
  );
};
```

Abb. 2.99 Absorptionskoeffizienten für Dampf in OpenFOAM in der Datei radiation-Properties (Temperaturangaben in Kelvin)

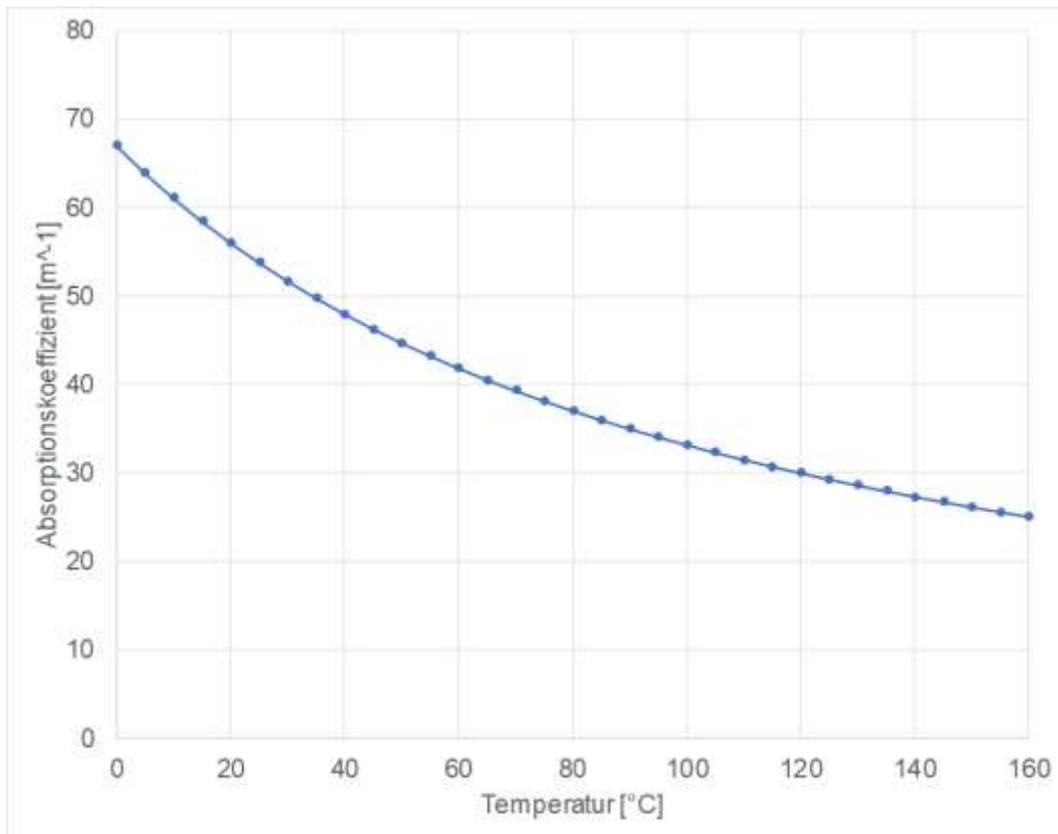


Abb. 2.100 Temperaturabhängigkeit der Absorptionskoeffizienten von Dampf bei einem Druck von 1 bar

2.3.4.3 CFX-Setup

Für das Setup der CFX-Simulation wurden die im Vorhaben standardmäßig verwendeten Modelle genutzt. Die Gasmischung wird als ideales Gas mit temperaturabhängigen Stoffwerten berechnet. Das Verhältnis Luft/Dampf ist in jedem Versuch räumlich und zeitlich konstant. Deshalb wurden Luft und Dampf zu einer Komponente zusammengefasst, die die Stoffwerte entsprechend dem Verhältnis Luft/Dampf hat.

Die Turbulenz wurde mit dem SST-Turbulenzmodell einschließlich der Terme für die Auftriebseffekte (production- and dissipation-Terme in buoyancy turbulence) simuliert. Es wurde eine unterschiedliche Wärmestrahlungsmodellierung getestet (siehe Tab. 2.14). Es wurden Simulationen mit dem P1-Modell und dem Discrete-Transfer-Modell durchgeführt. Beim Discrete-Transfer-Modell wurde die Anzahl der Strahlen auf 32 erhöht (Standard 8), um die Diskretisierungsfehler zu minimieren. Die Rechenzeit für eine Simulation mit 32 Strahlen beträgt ca. 2 Wochen. Eine weitere Erhöhung der Anzahl der Strahlen auf 64 erhöht die Rechenzeit signifikant und war deshalb nicht praktikabel.

Im Rahmen von HYMERES-2 wurde die Emissivität der Behälterwände des Panda-Veruchsstands mit 0,3 gemessen /PAL 21/.

Es hat sich gezeigt, dass bei Verwendung des Standard-Konvergenzkriteriums RMS-Residuum $<1,0e-4$ ein Fehler in der Massenbilanz auftritt, der sich im Laufe der Rechnung aufsummiert, so dass am Ende der Einspeisephase 5 % und mehr der Gesamtmasse verloren gegangen ist. Deshalb waren diese Simulationen unbrauchbar. Auch bei Verwendung des Kriteriums Max-Residuum $<1,0e-3$ konnte keine signifikante Verbesserung erzielt werden. Durch Setzen der zusätzlichen Konvergenzbedingung „conservation target 0,01“ konnte der Fehler in der Massenbilanz auf unter 1 % am Ende der Einspeisung verringert werden. Diese Einstellung führt aber zu einer deutlichen Verlangsamung der Simulation. Es musste ein kleinerer Zeitschritt gewählt werden (0,05 s – 0,06 s) und auch die Anzahl der Iteration pro Zeitschritt ist stark erhöht, oft werden mehr als 10 Iterationen benötigt.

Tab. 2.14 Parametervariationen bei den CFX-Simulationen

Name	Strahlungsmodell	Absorptionskonstante Dampf	Emissivität der Wände
P1A1E03	P1	1 (m bar) ⁻¹	0,3
P1A10E03	P1	10 (m bar) ⁻¹	0,3
P1PE03	P1	Planck (Abb. 2.100)	0,3
DTA10E03	Discrete Transfer	10 (m bar) ⁻¹	0,3
P1PE1	P1	Planck	1,0

2.3.4.4 Auswertung der CFX-Simulationen

Im Gegensatz zu den OpenFOAM-Simulationen stellt sich bei den CFX-Simulationen beim Experiment H2P2_5 hinter der Platte im Mannloch kein stationäres Strömungsprofil ein (Abb. 2.101). Das führt dazu, dass die Temperaturen und teilweise auch der Helium-Molenbruch bei Messpunkten auf der Mittelachse signifikanten Schwankungen unterworfen sind. Im Experiment werden dagegen nur sehr schwache Oszillationen beobachtet. Die Oszillationen erschweren den Vergleich der Simulationsergebnisse insbesondere, wenn mehrere CFX-Simulationen über einen größeren Zeitbereich miteinander verglichen werden. Deshalb werden der Helium-Molenbruch und die Temperaturen an den Messtellen beim Vergleich von CFX-Simulationen über einen Zeitbereich von 5 s

gemittelt. Bei H2P1_1_2 treten keine signifikanten Oszillationen auf, deshalb wird auf die Mittelung verzichtet.

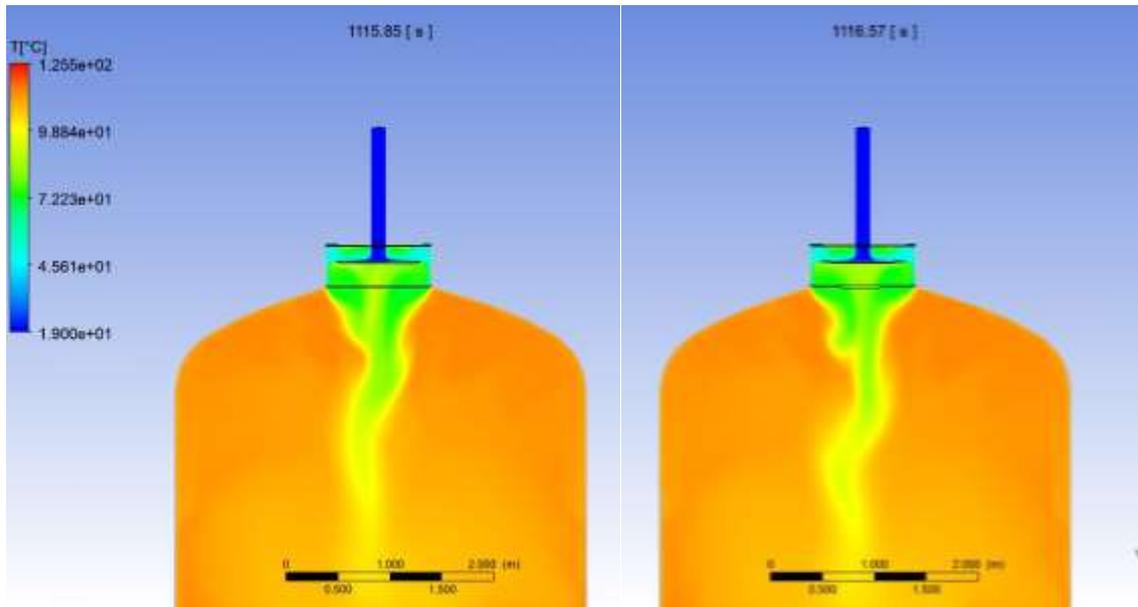


Abb. 2.101 Temperatur hinter der Anströmplatte zum Zeitpunkt 1115,9 s und 1116,6 s bei der CFX-Simulation DTA10E03 des Experiments H2P2-5

2.3.4.5 Nachrechnung mit OpenFOAM

Auch mit OpenFOAM wurden verschiedene Rechnungen durchgeführt, bei denen insbesondere die Parameter Strahlungsmodell, Absorptionskoeffizient und Wandemissivität verändert wurden. Weiterhin wurde im Rahmen einer Sensitivitätsstudie bei einer Rechnung die Einspeisemenge um 10 % reduziert. Eine Übersicht über diese Rechnungen findet sich in Tab. 2.15. und Tab. 2.16.

Tab. 2.15 Parameterstudie mit OpenFOAM zum H2P2_2 Experiment

Rechnung	Strahlungsmodell	Absorptionskoeffizient	Wandemissivität
1	P1	10 m^{-1}	0,3
2	fVDOM	10 m^{-1}	0,3
3	P1	Planck	0,3

Tab. 2.16 Parameterstudie mit OpenFOAM zum Experiment H2P2_1_5

Rechnung	Strahlungsmodell	Absorptionskoeffizient	Wandemissivität
1	P1	Planck	1,0
2	P1	10	1,0
3	P1	1	1,0
4	P1	Planck	0,3
5	fvDOM	Planck	1,0
6	fvDOM	Planck	0,3
7	fvDOM	10	0,3
8 (Einspeisemenge von 10 g/s auf 9 g/s reduziert)	fvDOM	Planck	0,3

2.3.4.6 Zusammenfassung H2P2

In der H2P2-Versuchsserie wurde der Einfluss von Wärmestrahlung gezielt untersucht. Anhand dieser Experimente soll die Wärmestrahlungsmodellierung in CFX und OpenFOAM weiterentwickelt werden. Ziel der Untersuchungen ist es, geeignete Wärmestrahlungsmodelle auszuwählen und es soll untersucht werden, wie die Absorptionskonstante von Wasserdampf in Wärmestrahlungsmodellen ohne Wellenlängenabhängigkeit gewählt werden sollte. Dazu wurden das Experiment H2P2_1_2 (trockene Luft) und H2P2_5 (hohe Dampfkonzentration) simuliert.

Bis auf moderate lokale Abweichungen zeigen die Simulationen beider Codes (CFX und OpenFOAM) bei gleichen Wärmestrahlungsmodellen sehr ähnliche Ergebnisse.

Die Heliumverteilung ist bei den beiden Versuchen nicht sensitiv auf die Wärmestrahlungsmodellierung. Bis auf die obersten Messpunkte bei H2P2_5, bei dem der Helium-Molenbruch etwas überschätzt wird, wird eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt.

Alle Simulationen berechnen einen schnelleren Druckanstieg als im Versuch gemessen und der Maximaldruck am Ende der Heliumeinspeisung wird überschätzt. Der Grund für die Abweichung zwischen Simulationen und Experiment konnte bisher nicht geklärt

werden. Im HYMERES-2 Nachfolgeprojekt PANDA sind hierzu weitere Diskussionen mit den Experimentatoren geplant. In PANDA werden auch weitere Versuche zur Wärmestrahlung durchgeführt, die die Gelegenheit bieten noch offene Fragestellungen zu klären. Da der Druckanstieg eng mit dem Temperaturanstieg durch die Gaskompression verknüpft ist, führt die Abweichung bei der Druckberechnung zu Unsicherheiten bei der Bewertung der Wärmestrahlungsmodellierung.

Die berechneten Temperaturen hängen stark von der Wahl des Absorptionskoeffizienten von Dampf ab. Bei H2P2_5 (hoher Dampfgehalt) führt ein großer Absorptionskoeffizient (Planck) zu einem höheren Temperaturanstieg durch die Gaskompression. Bei H2P2_1_2 (trockene Luft) führt ein großer Absorptionskoeffizient dagegen zu niedrigeren Temperaturen. Es zeigt sich auch eine Abhängigkeit der Gastemperatur von der Emissivität der Wände. Bei H2P2_5 hat auch die Wahl des Wärmestrahlungsmodells einen Einfluss auf die Temperaturen. Mit beiden Strahlungsmodellen konnten die Versuche mit ähnlich guter Übereinstimmung simuliert werden. Die quantitative Übereinstimmung ist dabei von der Wahl der Modellparameter abhängig. Simulationen mit dem P1-Strahlungsmodell waren in beiden Codes geringfügig schneller als Rechnungen mit dem Discrete-Transfer bzw. fvDOM-Modell. Dabei ist anzumerken, dass bei diesen beiden Modellen die Rechengeschwindigkeit stark von der Feinheit der Diskretisierung (z. B. Anzahl der Strahlen beim Discrete-Transfer-Modell) abhängt.

Die Modellierung mit der Absorptionskonstante $1,0 \text{ m}^{-1} \text{ bar}^{-1}$ für Wasserdampf hat in beiden Versuchen keine guten Ergebnisse erzielt. Auch bei einem geringeren Druckanstieg ist mit keiner Verbesserung zu rechnen. In H2P2_1_2 konnte mit dem mittleren Planck'schen Absorptionskoeffizienten die beste Übereinstimmung erzielt werden; bei H2P2_5 mit dem Absorptionskoeffizienten $10,0 \text{ m}^{-1} \text{ bar}^{-1}$. Es ist aber zu erwarten, dass bei einer Simulation mit einem niedrigeren Druckanstieg sich die Ergebnisse mit dem Planck'schen Absorptionskoeffizienten auch bei H2P2_5 dem Experiment annähern. Dies konnte durch eine OpenFOAM-Simulation mit einer um 10 % verringerten Helium-Einspeisung gezeigt werden.

2.3.5 Zusammenfassung und Fazit aus AP1.3 (Wärmestrahlungsmodellierung)

Im Rahmen dieses Arbeitspunktes hat sich die GRS an drei vom Paul-Scherrer-Institut organisierten Benchmarks zum Thema Strahlungsmodellierung beteiligt. Hierbei wurde zunächst ein Fall einer Schichtungsauflösung ohne Strahlung untersucht. Dann wurde

Strahlung berücksichtigt, aber der Absorptionskoeffizient war konstant. Im dritten Schritt wurde der Absorptionskoeffizient im Rahmen einer Parameterstudie variiert. Die wichtigen Erkenntnisse aus diesen Untersuchungen waren, dass die Berücksichtigung der Wärmestrahlung einen signifikanten Einfluss auf die Temperaturverteilung und die Geschwindigkeit der Schichtungsauflösung haben kann. Insbesondere bei CFX ist ohne Strahlungsmodellierung die Auflösung der Heliumschicht deutlich langsamer. Auch ein kleiner Absorptionskoeffizient ($0,05 \text{ m}^{-1}$) kann schon einen deutlichen Einfluss auf das Simulationsergebnis haben (insbesondere bei CFX). Bei optisch dichten Medien (Absorptionskonstante 10 m^{-1}) wird mit dem P1- und dem Discrete-Transfer-Modell eine ähnlich schnelle Schichtungsauflösung berechnet. Bei optisch dünnen Medien ($0,05 \text{ m}^{-1}$) sind die Abweichungen größer, aber auch hier liefert das P1-Modell noch ähnliche Ergebnisse (relative Abweichung $\sim 10 \%$).

Aus der Versuchsserie H2P2 wurden die Versuche 1_2 (sehr wenig Dampf) und 5 (viel Dampf) nachgerechnet. Ziel der Arbeiten war es, geeignete Wärmestrahlungsmodelle und Absorptionskoeffizienten zu ermitteln. Die Simulationen mit CFX und OpenFOAM zeigen bei gleichen Wärmestrahlungsmodellen sehr ähnliche Ergebnisse. Der Druck wird bei beiden Experimenten von den Simulationen um ca. 5 % überschätzt, die Ursache ist noch unklar. Hierzu sind weitere Diskussionen im Rahmen der Versuchsserie zur Wärmestrahlung im HYMERES-2 Nachfolger PANDA geplant. Die Helium-Molenbrüche stimmen insgesamt gut mit dem Experiment überein, sie sind kaum sensitiv auf die Wärmestrahlungsmodellierung. Bei den Temperaturen zeigt sich eine deutliche Sensitivität. Die besten Ergebnisse wurden beim Experiment 1_2 mit einem Planck'schen Absorptionskoeffizienten gefunden. Bei diesem Versuch zeigte sich kaum ein Einfluss des Strahlungsmodells. Anders war es beim Versuch 5, hier hatte das Strahlungsmodell einen deutlichen Einfluss. Hier passte ein mittlerer Absorptionskoeffizient von ca. $10 (\text{m bar})^{-1}$ am besten zum Experiment.

2.4 AP1.4 Erstellung eines PAR-Modells für OpenFOAM

2.4.1 Zielsetzung

Passive autokatalytische Rekombinatoren (PAR) werden als Gegenmaßnahme zur Begrenzung der lokalen H_2 - und CO -Konzentrationen eingesetzt. Die GRS hat in RS1181 und RS1500 ein PAR-Modell für ANSYS CFX entwickelt, das mittels Korrelationen das Verhalten von PARs für die H_2 -Abbauraten und die Effizienz modelliert. Das PAR-Modell wurde durch Nachrechnung von Versuchen aus der THAI-HR-Serie validiert. Da in

OpenFOAM gegenwärtig kein PAR-Modell vorhanden ist, soll das von der GRS entwickelte PAR-Modell von ANSYS CFX nach OpenFOAM übertragen und dort implementiert werden.

2.4.2 Implementierung in OpenFOAM

Das PAR-Modell wird in einem eigenständigen Modul mit dem Namen „recombiner“ im `.constant`-Verzeichnis des jeweiligen Rechenfalls abgelegt. Die Abbaurate und die Effizienz der PARs werden mit Korrelationen berechnet. Bei der Korrelation für die Abbaurate handelt es sich um die AREVA-Korrelation, die von der GRS modifiziert wurde. Zunächst werden die Werte am Einlass des PAR abgefragt (Druck, Temperatur, Gaszusammensetzung). Mit Hilfe dieser Werte werden die Effizienz und die Abbaurate bestimmt. Die implementierten Gleichungen finden sich in Abb. 2.102. Daraus ergeben sich dann die Werte für den PAR-Auslass (Temperaturen, Gaszusammensetzung). Bei der Temperaturberechnung ist noch der Einfluss der PAR-Wände zu berücksichtigen, die auch Wärme aufnehmen und abgeben können.

```
// Calculate efficiency
scalar eta = 63-(Av_Inlet_p-1.0)*9+Mol_Inlet_H20*0.1;
if (Mol_Inlet_H2 < 1.6)
{
    if (Mol_Inlet_H2 > 0.375)
    {
        eta=eta+(1.6-Mol_Inlet_H2)*10;
    }
    else
    {
        eta=(eta+12.25)/(0.375-0.1)*Mol_Inlet_H2-(eta+12.25)/(0.375-0.1)*0.1;
    }
}
```

```
// Calculate recombination rate with AREVA correlation
const scalar MinVal1 = min(Mol_Inlet_H2,2*Mol_Inlet_O2);
const scalar MinVal2 = min(MinVal1,xH2max);
const scalar recoRate = fox*MinVal2*(k1*Av_Inlet_p+k2)*tanh(Mol_Inlet_H2 - xH2min);
```

Abb. 2.102 Berechnung von Effizienz und Rekombinationsrate im recombiner-Modul

Das Modul kann bei der Definition von Randbedingungen mit Hilfe von `codedFixedValue`-Randbedingungen aufgerufen werden. Das geschieht über einen `include`-Befehl. Die berechneten Werte stehen nach dem `include`-Befehl zur Verfügung und können als Randbedingung genutzt werden. Diese Art des Aufrufes ist für das Beispiel der Temperaturen in Abb. 2.103 dargestellt.

```

RekoOben
{
    type          codedFixedValue;
    value         uniform 400;
    name          rekoOutTemp;

    codeOptions
    #{
        -I$(FOAM_CASE)
    #};
    code
    #{
        #include "constant/recombiner"
        operator==(T_Outlet);
    #};
}

```

Abb. 2.103 Definition des PAR-Auslasses als codedFixedValue-Randbedingung (hier nur Temperaturen)

2.4.3 Simulation eines Testbeispiels

Das fertig implementierte Modell wurde dann anhand eines einfachen Testbeispiels verifiziert und mit einer CFX-Rechnung verglichen. Die Testgeometrie ist ein kleines würfelförmiges Gasvolumen mit einem Rekombinator (siehe Abb. 2.104). Der unten liegende Einlass und der oben liegende Auslass sind in der Abbildung gekennzeichnet. Das Gitter enthält 51.658 Elemente und wurde mit Pointwise erstellt.

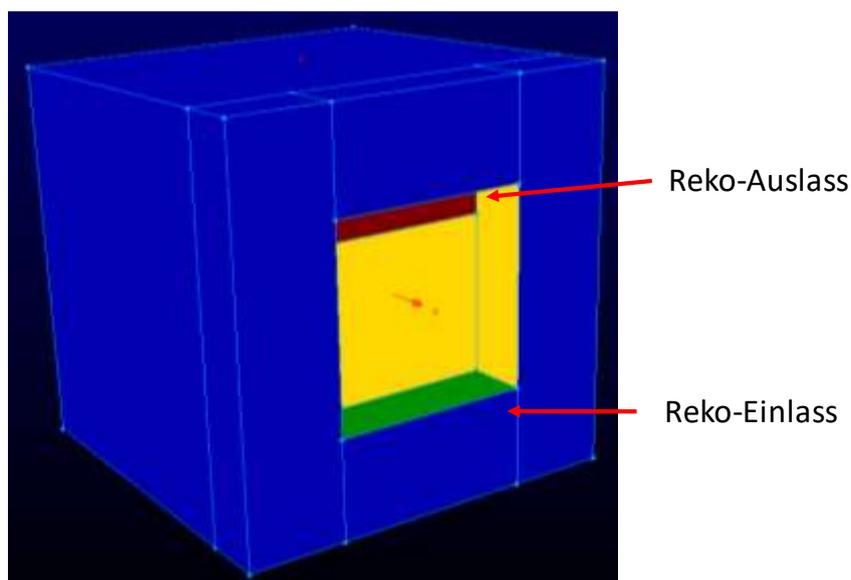


Abb. 2.104 Geometrie für das PAR-Testbeispiel

Als Solver wurde chtMultiRegionSchmidtFoam verwendet. Weiterhin wird das buoyantkOmegaSST-Turbulenzmodell genutzt. Als Diffusionsmodell sind die neu von der GRS implementierten Terme (siehe Kapitel 2.2.2) verwendet worden. Zunächst wurde eine Rechnung ohne Berücksichtigung der PAR-Wände durchgeführt. Als Startwerte wurden gewählt:

- H₂: 5,5 % (Stoffmengenanteil)
- H₂O: 0,0 % (Stoffmengenanteil)
- N₂: 72,5 % (Stoffmengenanteil)
- O₂: 22,0 % (Stoffmengenanteil)

In Abb. 2.105 bis Abb. 2.107 sind jeweils für CFX und OpenFOAM die H₂, O₂ und H₂O-Konzentrationen am PAR-Einlass und PAR-Auslass aufgetragen. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung der Gaskonzentrationen mit nur kleinen Abweichungen. Diese ist ein Hinweis darauf, dass die H₂-Abbauraten im neu entwickelten OpenFOAM-Modell korrekt berechnet werden.

Tab. 2.17 Infobox für den PAR-Test

Experiment	PAR-Testbeispiel
Phänomene	Rekombination von H ₂
Materialien	H ₂ , H ₂ O, O ₂ , N ₂
Software / Version	OpenFOAM 6
Solver	chtMultiRegionSchmidtFoam
Zeitschritte	Variabel (max. 0,1 s)
Courant-Zahl	Max. ca. 1,5
Turbulenzmodell	buoyantkOmegaSST (FZ-Jülich)
Strahlungsmodell	Ohne
Diffusionsmodell	GRS-Modell
Gittererstellung	Pointwise
Elementzahl	51.658

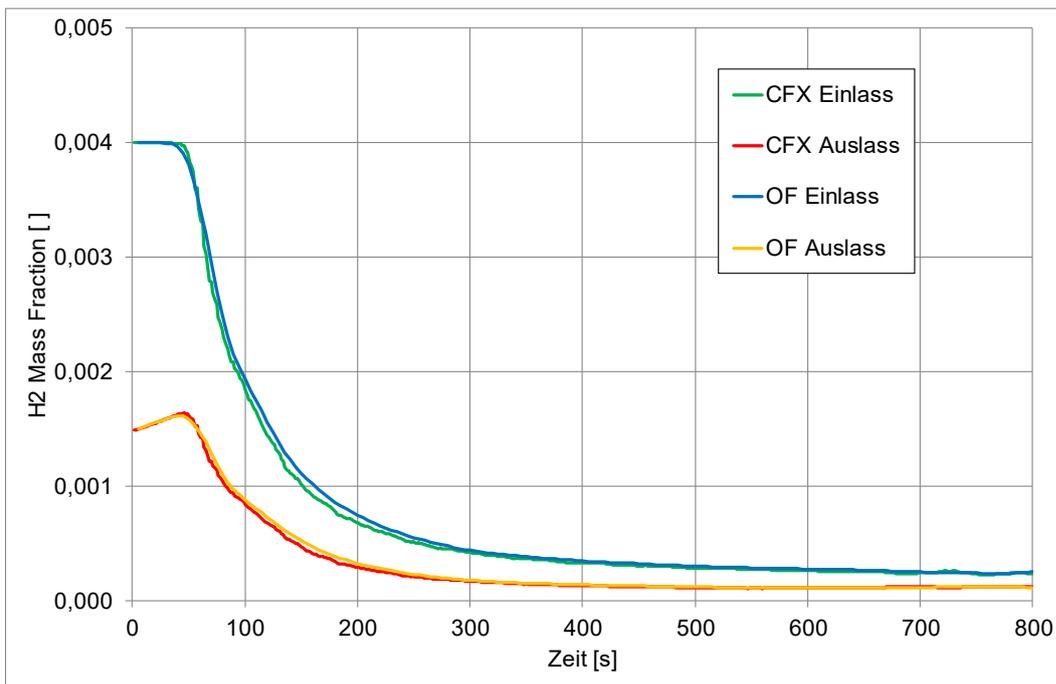


Abb. 2.105 H₂-Konzentrationen am PAR-Einlass und PAR-Auslass

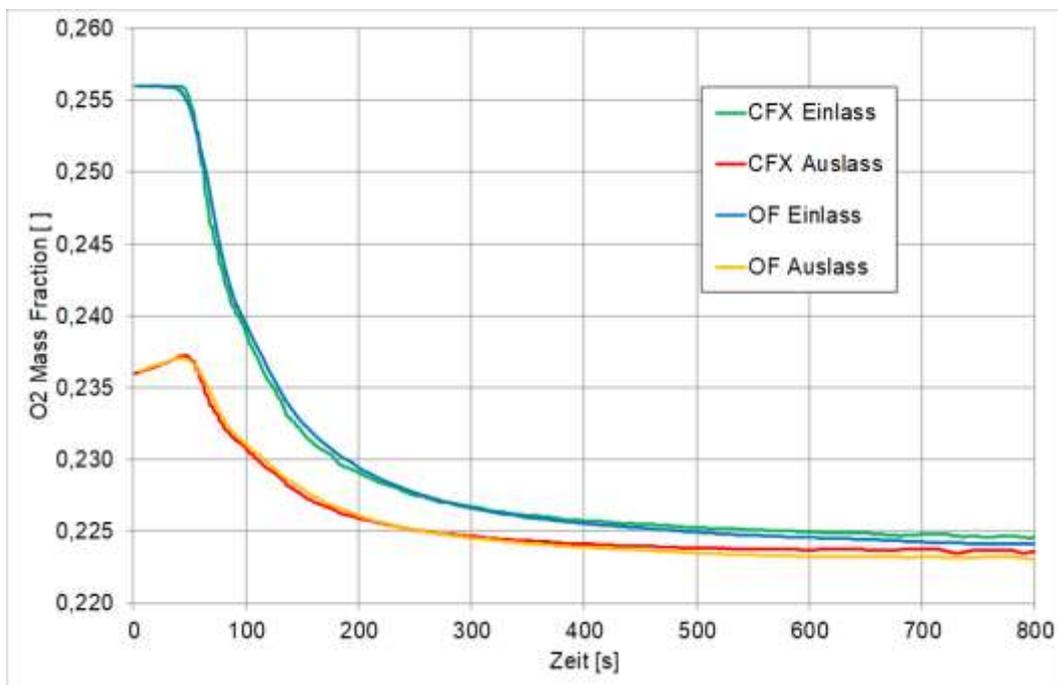


Abb. 2.106 O₂-Konzentrationen am PAR-Einlass und PAR-Auslass

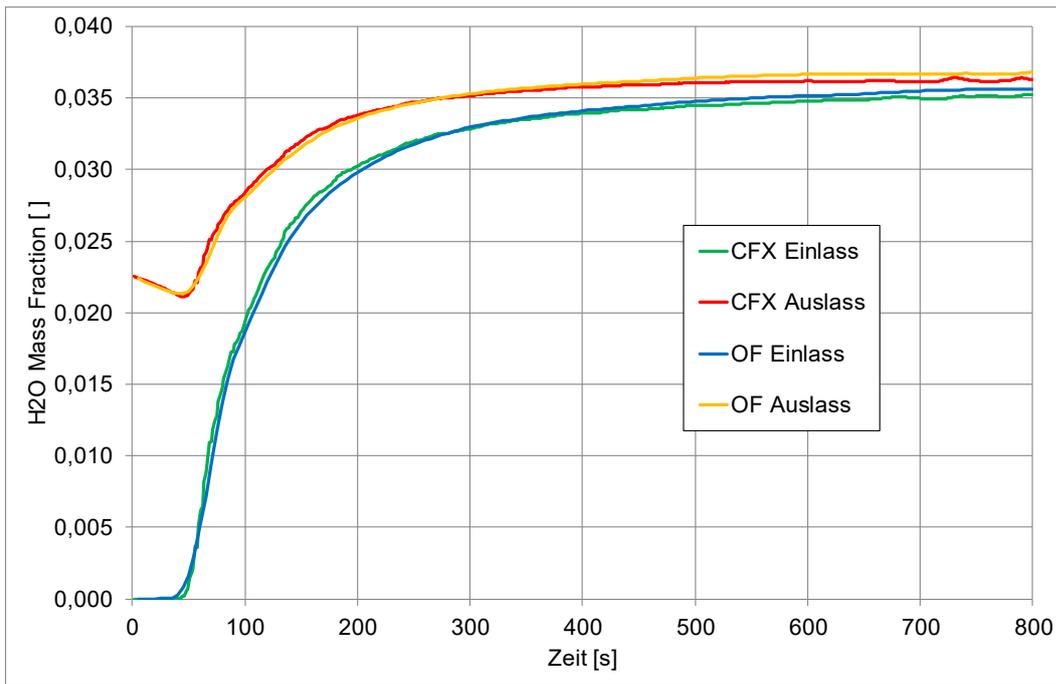


Abb. 2.107 H₂O-Konzentrationen am PAR-Einlass und PAR-Auslass

In Abb. 2.108 wird die Effizienz des PARs über der H₂-Konzentration am Einlass dargestellt. Hier findet sich eine gute Übereinstimmung zwischen OpenFOAM und CFX. Die Gleichung für die Effizienz wurde also richtig implementiert (siehe hierzu auch Abb. 2.102).

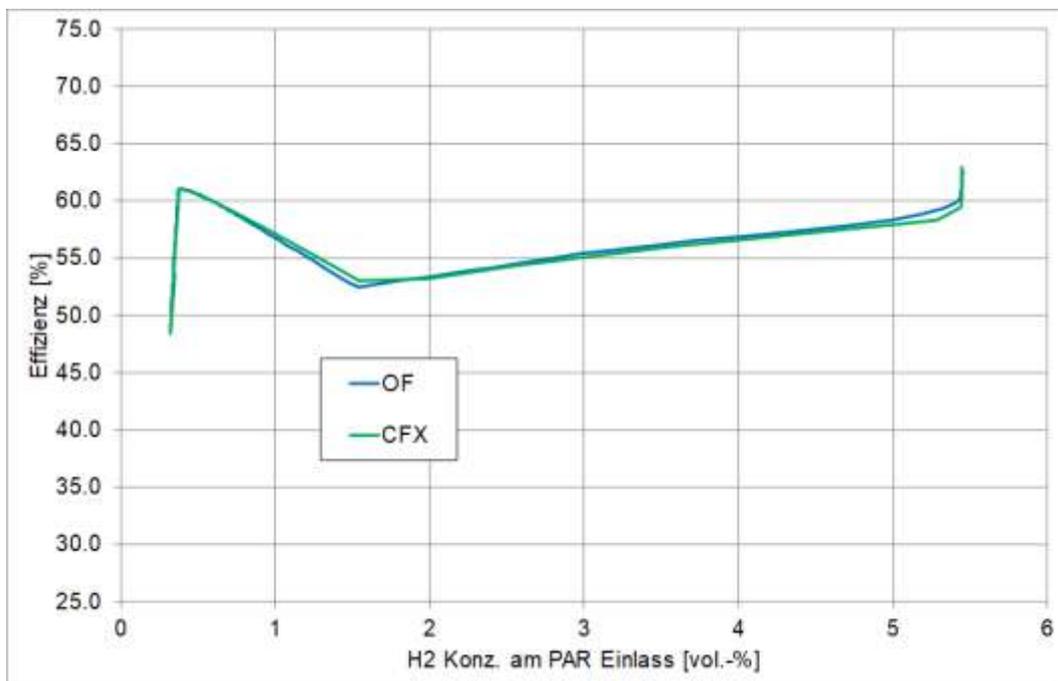


Abb. 2.108 Vergleich der PAR-Effizienz

In Abb. 2.109 werden die von CFX und von OpenFOAM berechneten Massenströme durch den PAR miteinander verglichen. Hier finden sich zwar kleinere Abweichungen, insgesamt ist die Übereinstimmung aber gut.

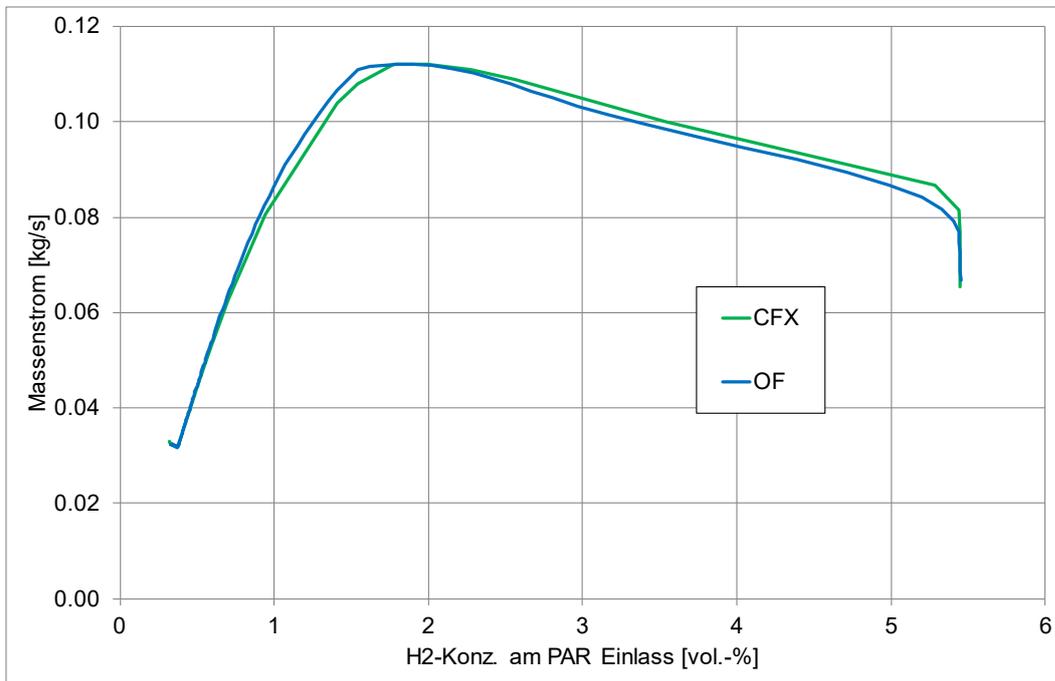


Abb. 2.109 Vergleich der Massenströme

In Abb. 2.110 werden für OpenFOAM und CFX jeweils die Temperaturen am PAR-Einlass und PAR-Auslass miteinander verglichen. Hier gibt es eine gute Übereinstimmung. Abb. 2.111 zeigt den Vergleich des Druckverlaufes. Auch hier gibt es eine gute Übereinstimmung der OpenFOAM-Werte mit der CFX-Rechnung.

Insgesamt finden sich gute Übereinstimmungen zwischen dem OpenFOAM-PAR-Modell und dem CFX-PAR-Modell. Die Implementierung der Gleichungen ist also korrekt. Unterschiede entstehen außerhalb des PARs durch unterschiedliche Numerik und Unterschiede bei den implementierten Modellen (Wandfunktionen, Turbulenz etc.) Weiterhin gibt es leichte Unterschiede beim PAR-Einlass und PAR-Auslass. In CFX wird hier jeweils ein Massenstrom spezifiziert. In OpenFOAM wird jeweils eine (aus dem Massenstrom berechnete) Geschwindigkeit spezifiziert. Dieses war notwendig, da bei den codeFixedValue-Randbedingungen nur eine Geschwindigkeit, aber kein Massenstrom angegeben werden konnte. Auch hierdurch kommen kleine Unterschiede in den Ergebnissen zustande.

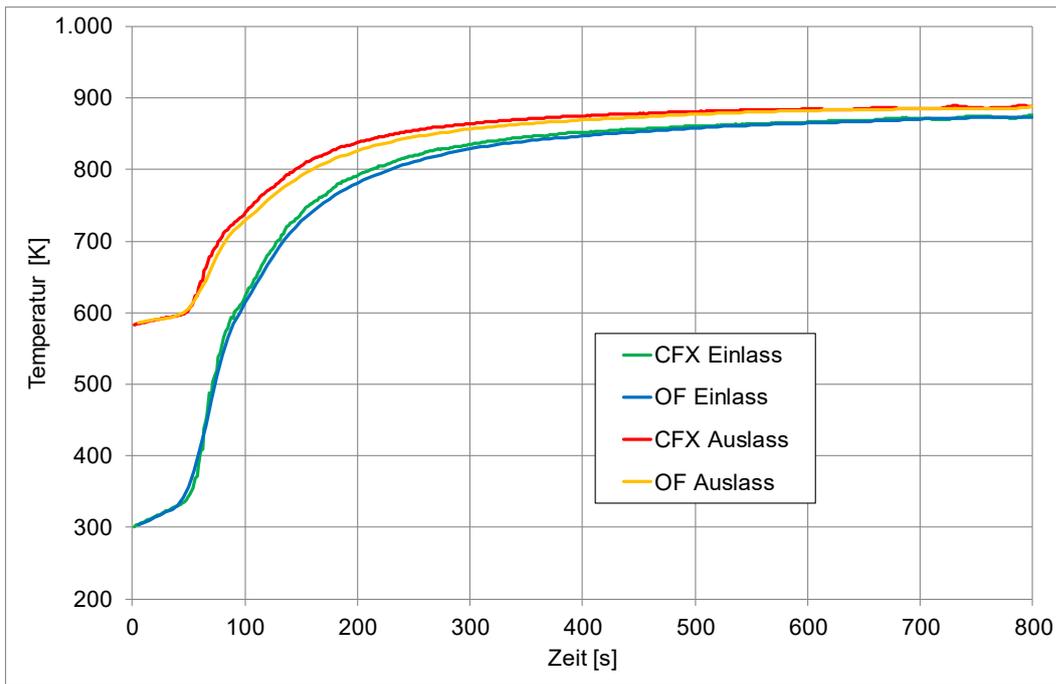


Abb. 2.110 Temperaturen am PAR-Einlass und PAR-Auslass

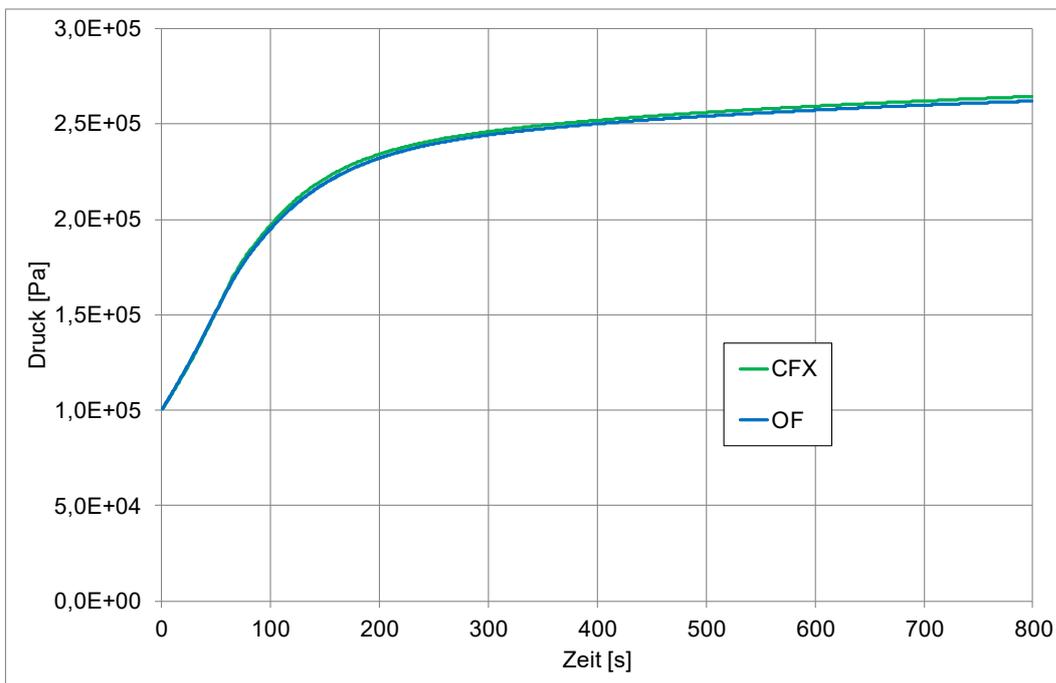


Abb. 2.111 Vergleich des Druckverlaufes

2.4.3.1 Einfluss der PAR-Wände

Bei den bisherigen Rechnungen ist der Einfluss der PAR-Wände vernachlässigt worden. Diese sind zu Beginn der Rekombination zunächst kalt. Durch die im PAR erzeugte

Wärme heizen sie sich langsam auf und entnehmen dem Gasstrom durch den PAR einen Teil der Wärme. Die Gastemperaturen am oberen PAR-Auslass werden dadurch niedriger. Im späteren Verlauf können die warmen PAR-Wände einen umgekehrten Effekt haben und das dann kältere Gas erwärmen. Das OpenFOAM-Modell wurde entsprechend dem CFX-Modell um die Wände erweitert. Dabei wurden auch die in CFX verwendeten Werte für den in den THAI-HR-Experimenten verwendeten AREVA-PAR 0,5*FR280 verwendet:

- Starttemperatur für die Wände: 300 K (entspricht der Umgebungstemperatur)
- Wärmetransferkoeffizient vom Gas zu den Wänden: 300 J / K
- Wärmekapazität der Wände: 42000 J / (kg K)

Die hiermit berechnete Aufheizung der Wände ist in Abb. 2.112 dargestellt. Die in OpenFOAM berechneten Wandtemperaturen entsprechen gut den CFX-Werten.

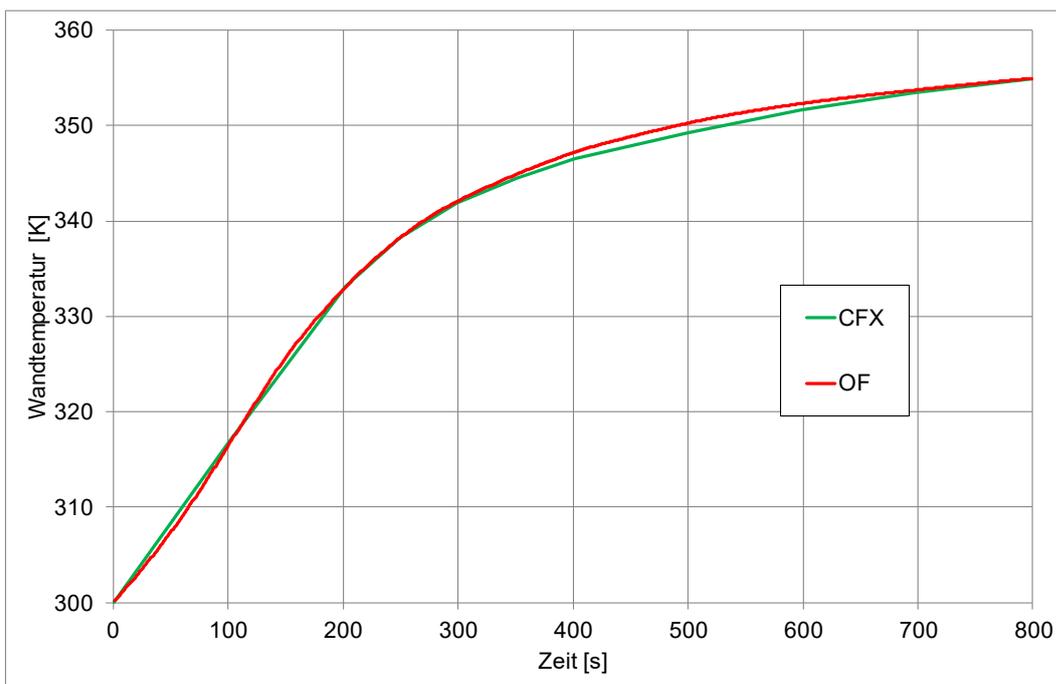


Abb. 2.112 Verlauf der PAR-Wandtemperaturen

In Abb. 2.112 ist noch nicht der Wärmeaustausch zwischen der PAR-Wand und dem Umgebungsgas berücksichtigt. Wird dieser Term ermittelt und berücksichtigt, so ergeben sich die in Abb. 2.113 dargestellten Wandtemperaturen. Aufgrund des geringen Gasvolumens in diesem Testbeispiel übersteigt die Temperatur des den PAR umgebenden Gases die Temperatur der PAR-Wand. Deshalb steigt durch Berücksichtigung des

Terms die Temperatur der PAR-Wand an. Auch hier passen die OpenFOAM-Werte gut zu den CFX-Werten.

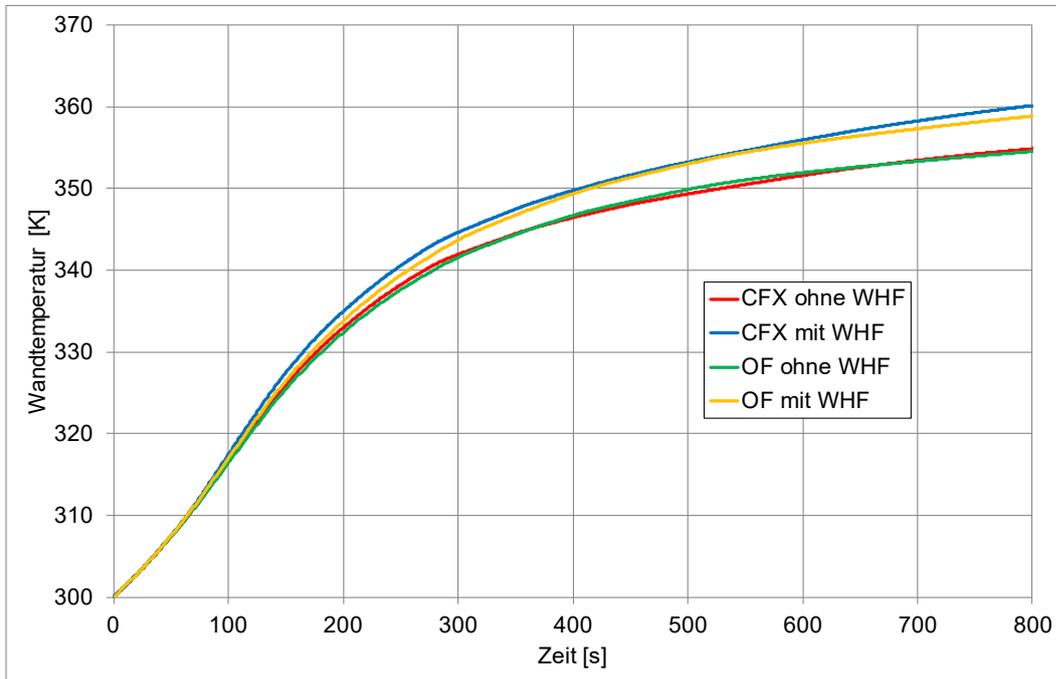


Abb. 2.113 Wandtemperaturen mit und ohne Berücksichtigung der Wärmeabgabe an das Umgebungs-Gas (WHF: WallHeatFlux)

In Abb. 2.114 wird gezeigt, dass die Berücksichtigung der PAR-Wände zu einer deutlichen Absenkung der Gastemperaturen am PAR-Auslass führt. Dieser Effekt wird sowohl vom CFX- als auch vom OpenFOAM-Modell in gleicher Weise wiedergegeben. Analog zu den Temperaturen am Auslass ändert sich auch der Druck im Testvolumen deutlich (siehe Abb. 2.115). Auch dieser Effekt wird von CFX und OpenFOAM in gleicher Weise wiedergegeben. In Abb. 2.116 werden noch (für die Rechnungen mit Wand) die Rekombinationsraten miteinander verglichen. Hier findet sich eine gute Übereinstimmung zwischen OpenFOAM und CFX.

Insgesamt kann die Implementierung der PAR-Wände in das OpenFOAM-PAR-Modell als erfolgreich bezeichnet werden. Die Effekte auf Temperaturen und Druck entsprechen den mit CFX berechneten Werten.

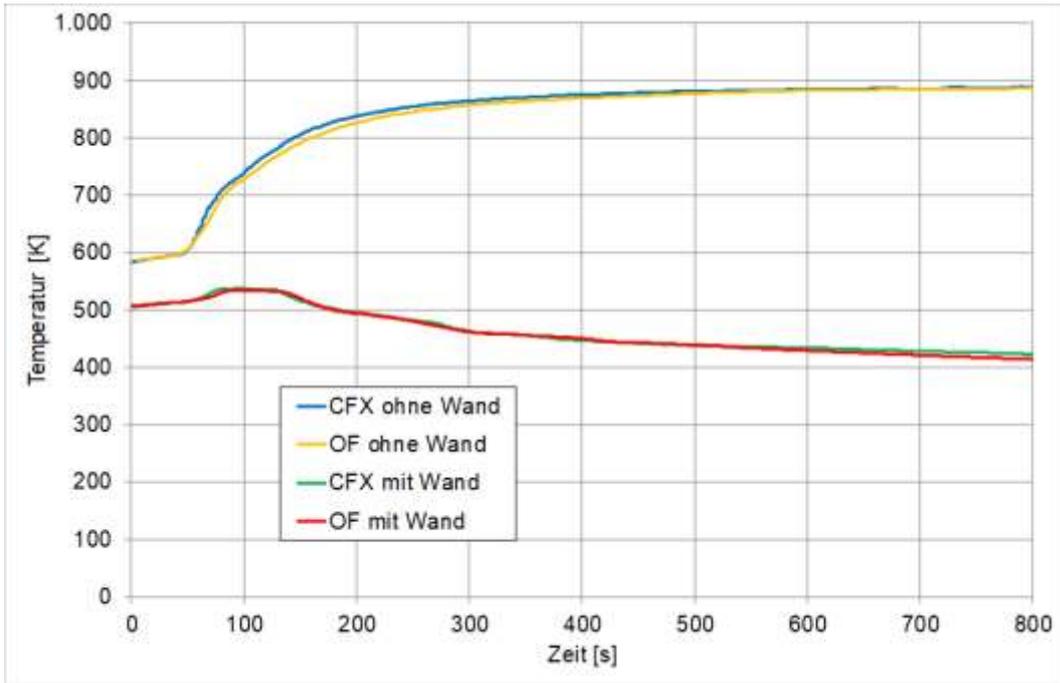


Abb. 2.114 Einfluss der PAR-Wände auf die Gastemperaturen am PAR-Auslass

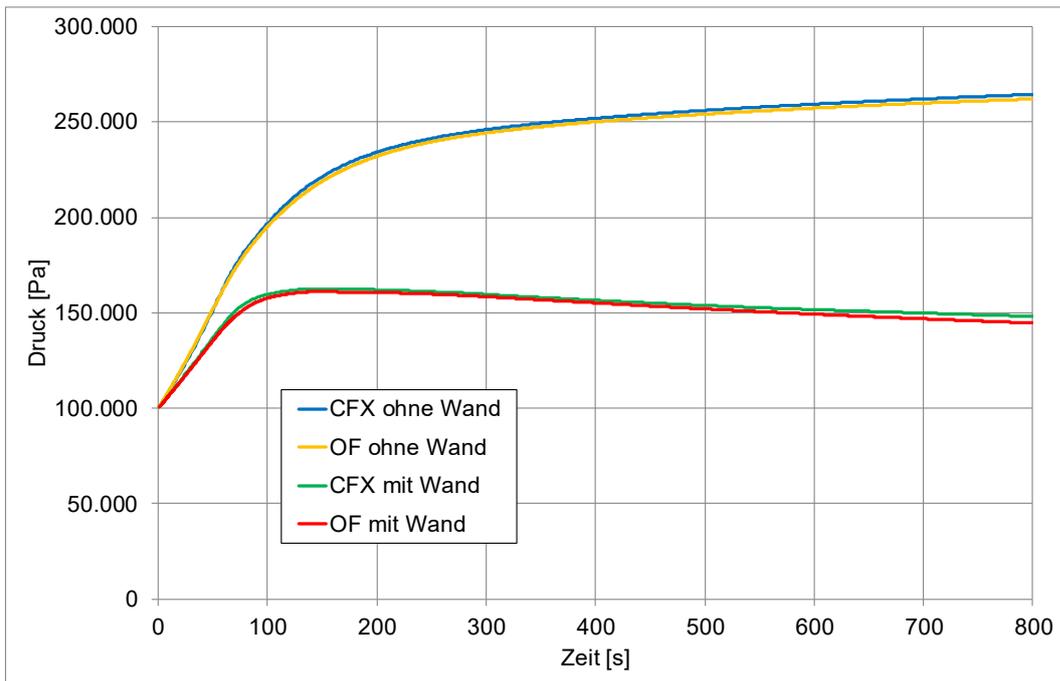


Abb. 2.115 Einfluss der PAR-Wände auf den Druck im Testvolumen

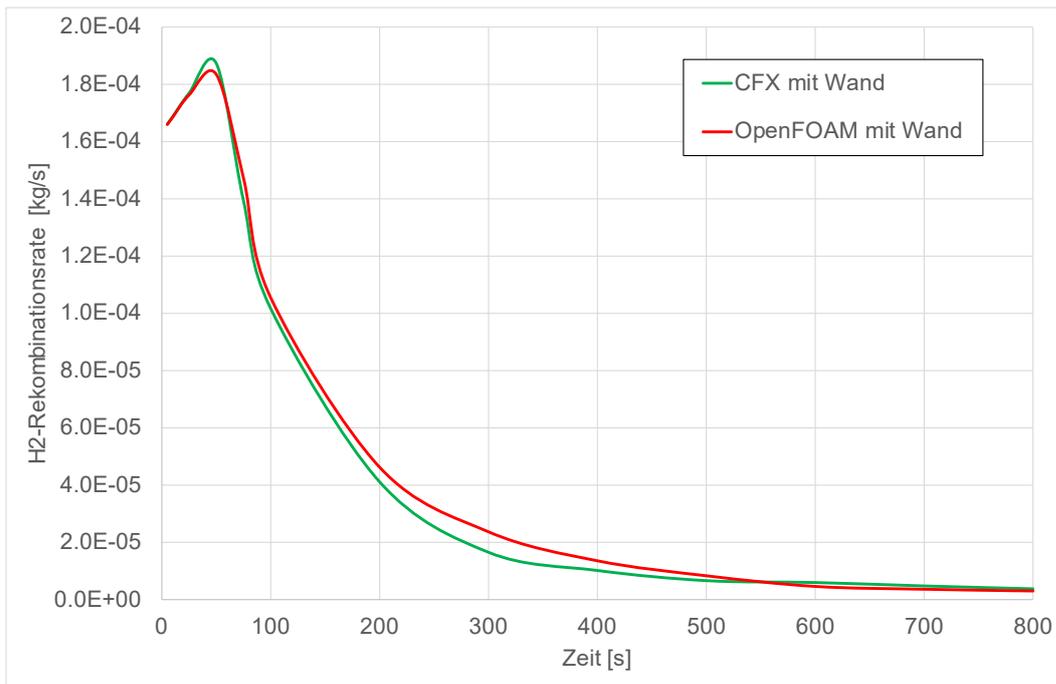


Abb. 2.116 Vergleich von Rekombinationsraten

2.4.3.2 Einfluss von Sauerstoffarmut

Unter einer Sauerstoffarmut versteht man, dass nicht genügend Sauerstoff vorhanden ist, um allen vorhandenen Wasserstoff vollständig zu rekombinieren. In diesem Fall ändert sich das Verhalten eines PAR. Die Effizienz und damit auch die Rekombinationsraten sinken. Dies hat Einfluss auf die Gaskonzentrationen und Temperaturen am PAR-Auslass. In OpenFOAM wurden Anpassungen für diesen Fall entsprechend den in CFX vorhandenen Modellen eingefügt. Im Folgenden soll ein Testfall mit Sauerstoffarmut mit OpenFOAM gerechnet und mit einer CFX-Rechnung verglichen werden. Als Startwerte wurden gewählt:

- H₂: 9,1 % (Stoffmengenanteil)
- H₂O: 27,1 % (Stoffmengenanteil)
- N₂: 60,9 % (Stoffmengenanteil)
- O₂: 2,9 % (Stoffmengenanteil)

In Abb. 2.117 bis Abb. 2.119 sind die Verläufe von der H₂-, O₂- und H₂O-Konzentrationen jeweils beim PAR-Einlass und -Auslass dargestellt. Hier zeigt sich eine gute Übereinstimmung der OpenFOAM-Rechnungen mit CFX.

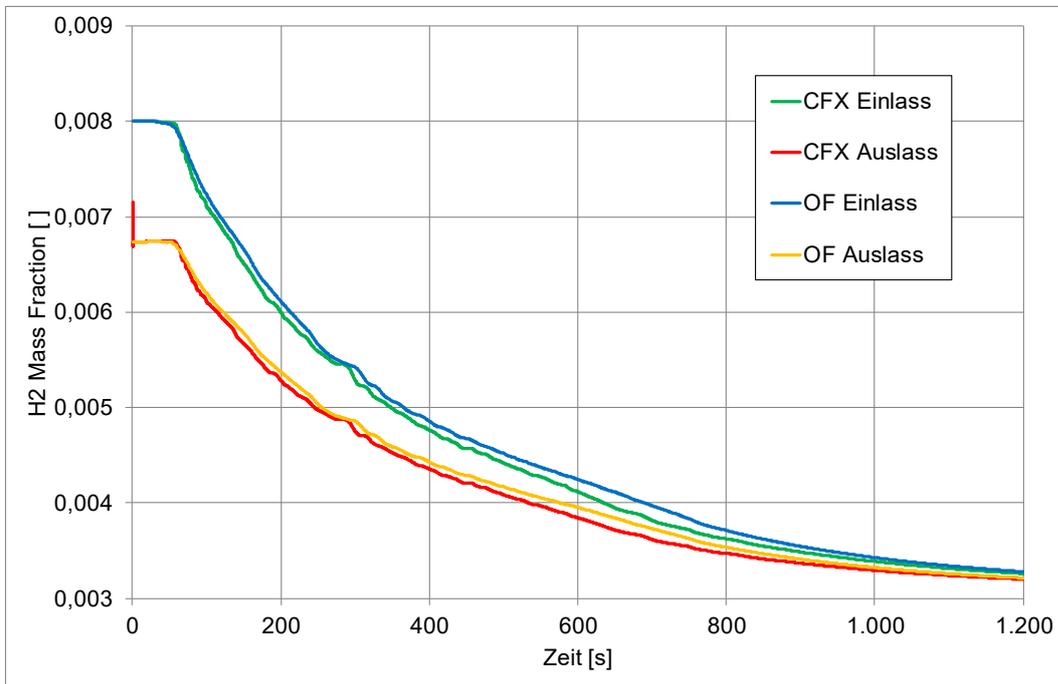


Abb. 2.117 H₂-Konzentrationen am PAR-Einlass und PAR-Auslass (bei O₂-Armut)

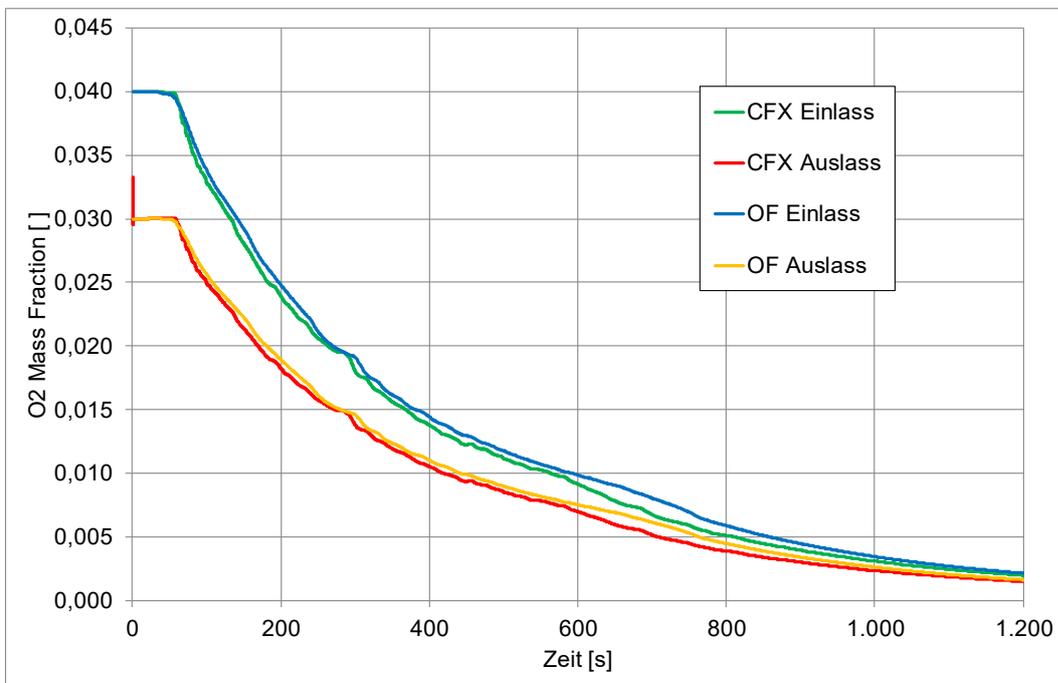


Abb. 2.118 O₂-Konzentrationen am PAR-Einlass und PAR-Auslass (bei O₂-Armut)

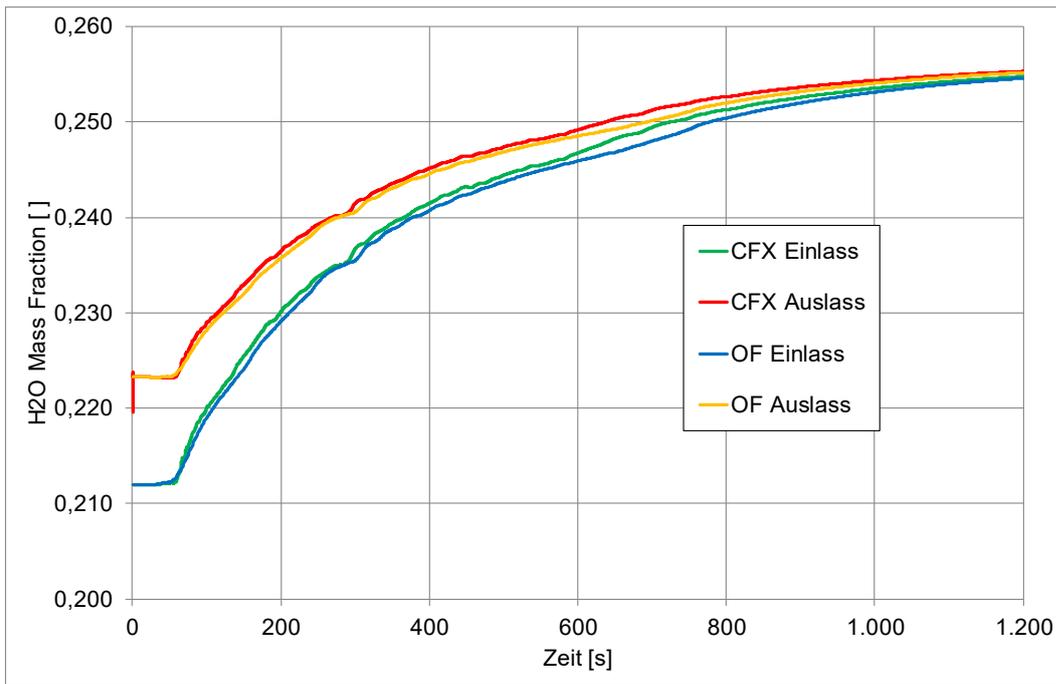


Abb. 2.119 H₂O-Konzentrationen am PAR-Einlass und PAR-Auslass (bei O₂-Armut)

Sowohl bei der PAR-Effizienz (Abb. 2.120) wie auch bei dem Massenstrom (Abb. 2.121) und den H₂-Rekombinationsraten (Abb. 2.122) finden sich nur geringe Unterschiede von OpenFOAM und CFX. Die Effizienz ist bei diesem Fall mit Sauerstoffarmut gegenüber dem Fall ohne O₂-Armut deutlich abgesunken. Weiterhin gibt es auch bei den berechneten Temperaturen (Abb. 2.123) und dem berechneten Druckverlauf (Abb. 2.124) eine gute Übereinstimmung von OpenFOAM mit CFX. Die Temperaturen sind deutlich niedriger als bei dem Fall ohne O₂-Armut. Somit wurde das Testbeispiel zur Sauerstoffarmut insgesamt erfolgreich nachgerechnet. Die Gleichungen wurden in OpenFOAM also korrekt implementiert.

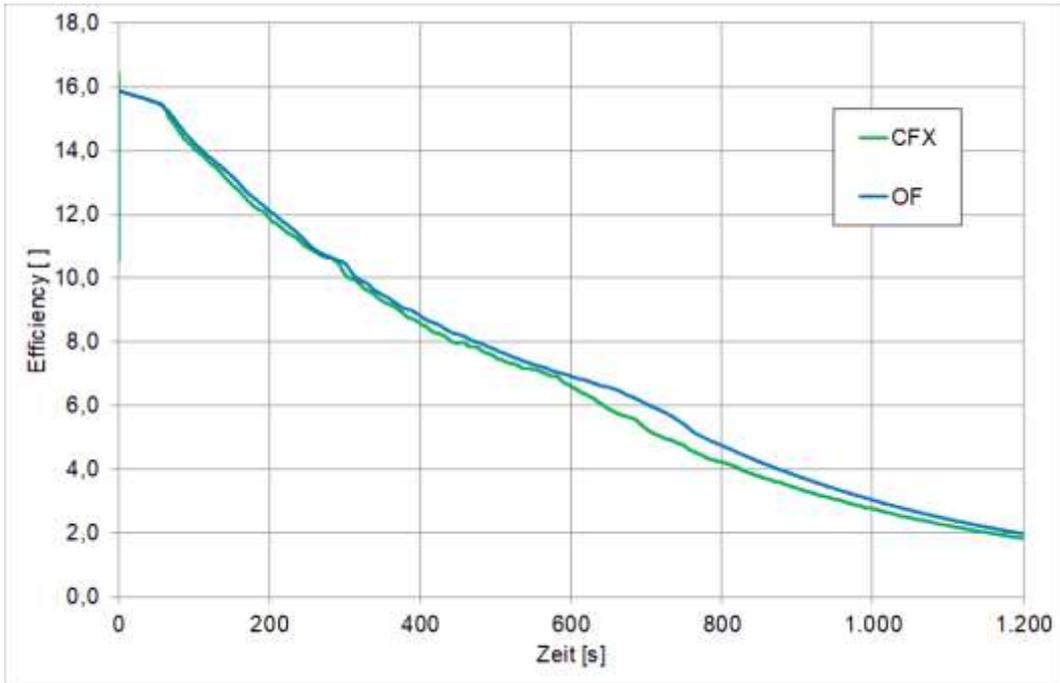


Abb. 2.120 Vergleich der PAR-Effizienz (bei O₂-Armut)

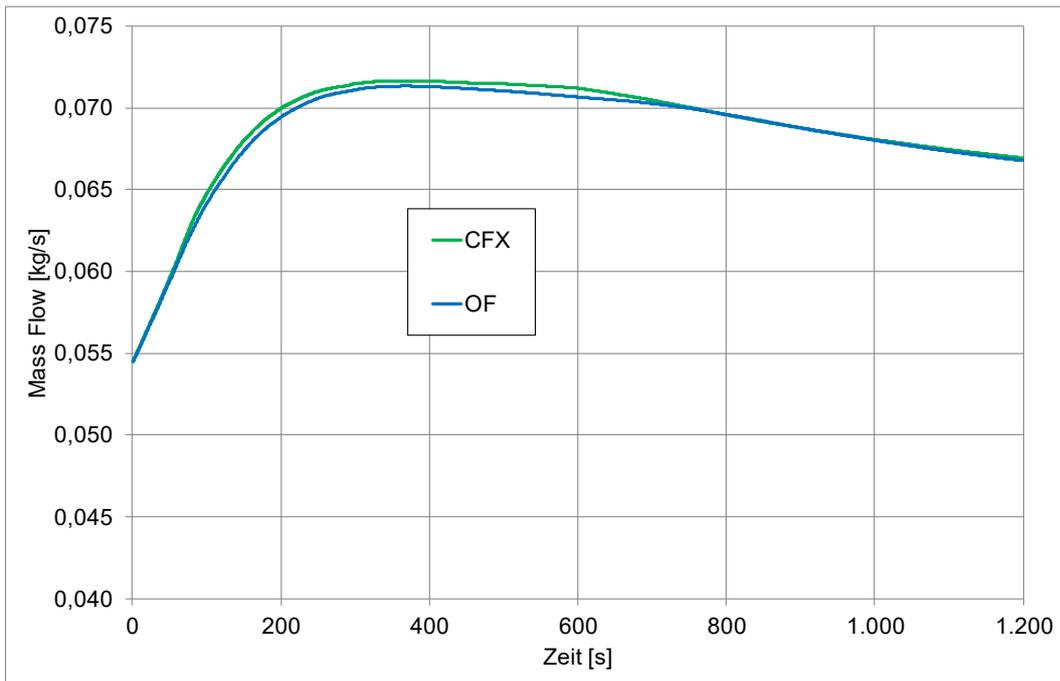


Abb. 2.121 Vergleich der Massenströme (bei O₂-Armut)

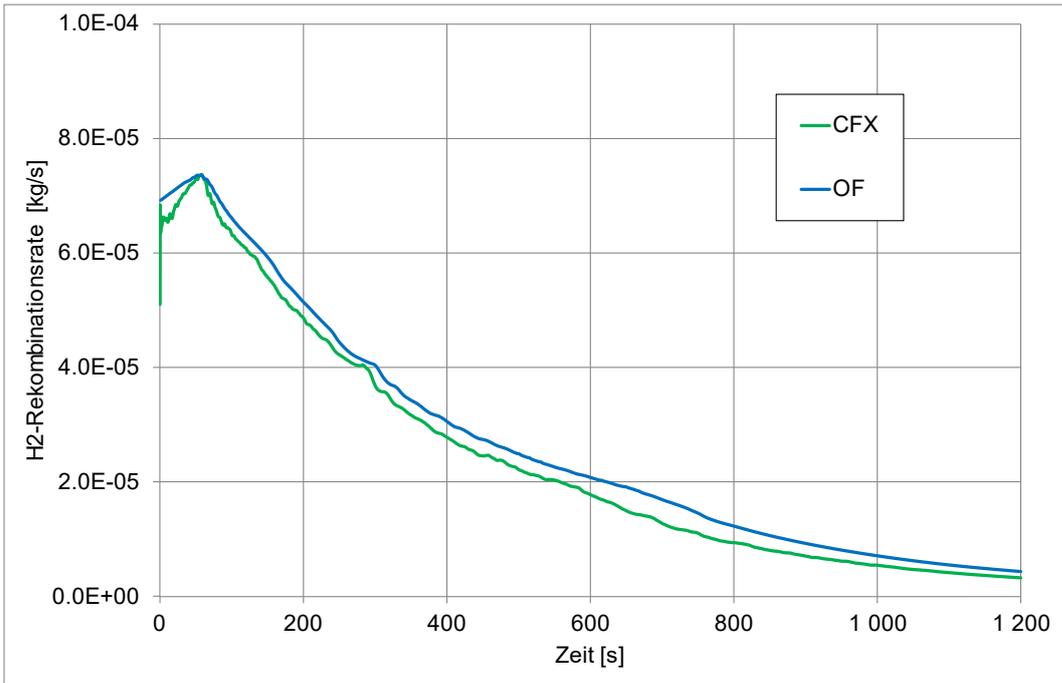


Abb. 2.122 Vergleich der H₂-Rekombinationsraten (bei O₂-Armut)

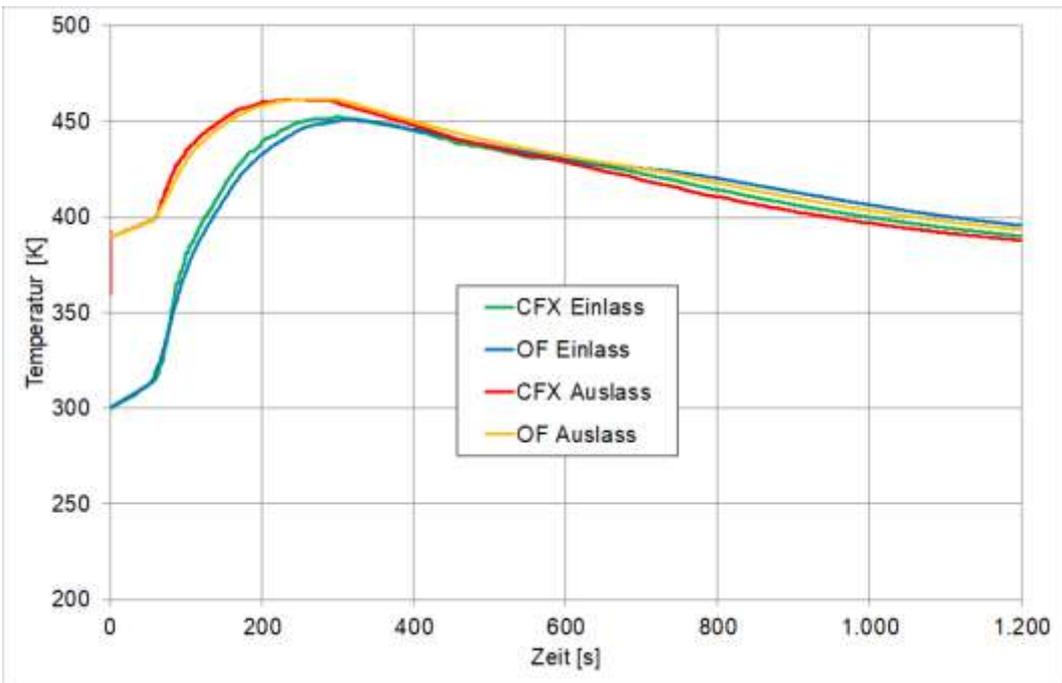


Abb. 2.123 Temperaturen am PAR-Einlass und PAR-Auslass (bei O₂-Armut)

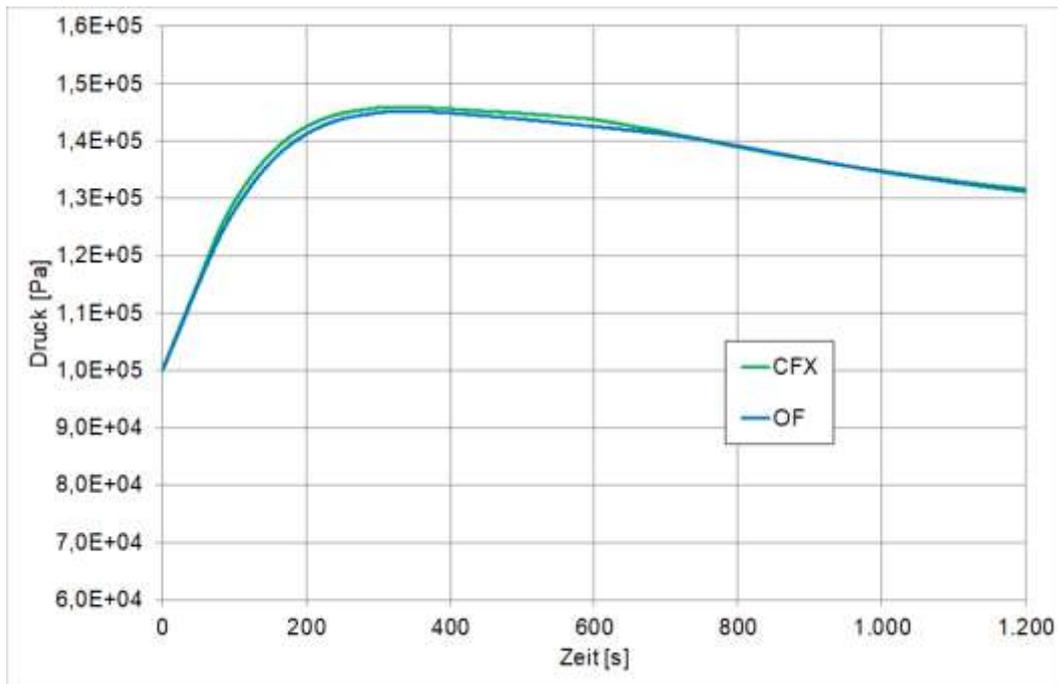


Abb. 2.124 Vergleich des Druckverlaufes (bei O₂-Armut)

2.4.3.3 Fazit Testrechnungen

Die Korrelationen für Effizienz und Rekombinationsrate (AREVA-Korrelation) wurden korrekt in OpenFOAM implementiert. Die Testbeispiele zeigen eine gute Übereinstimmung mit den entsprechenden CFX-Rechnungen. Auch die Korrelationen für PAR-Wände wurden korrekt implementiert. Hier zeigt OpenFOAM die gleichen Effekte wie CFX. Weiterhin wurden auch die Korrelationen für O₂-Armut korrekt implementiert. Zur weiteren Validierung des neu erstellten Modells soll es jetzt zur Nachrechnung von THAI-PAR-Versuchen verwendet werden.

2.4.4 Simulation des THAI-Versuches HR-5

2.4.4.1 Versuchsbeschreibung

Beim THAI-Versuch HR-5 handelt es sich um einen Rekombinatorversuch, der zur Validierung des PAR-Modells verwendet werden soll. Dabei wurde zunächst Luft injiziert, um einen Startdruck von 2,934 bar zu erreichen. Die Starttemperatur lag bei ca. 32 °C. Dann wurde über eine ringförmige Einspeise-Geometrie im unteren THAI-Behälter H₂ injiziert (0,24 – 0,48 g/s im Zeitraum 0 – 34,7 min). Die Einspeisung ist in Abb. 2.125 dargestellt. Der Innenzylinder hat bei diesem Experiment eine Höhe von 2 m und an ihm ist der PAR angebracht.

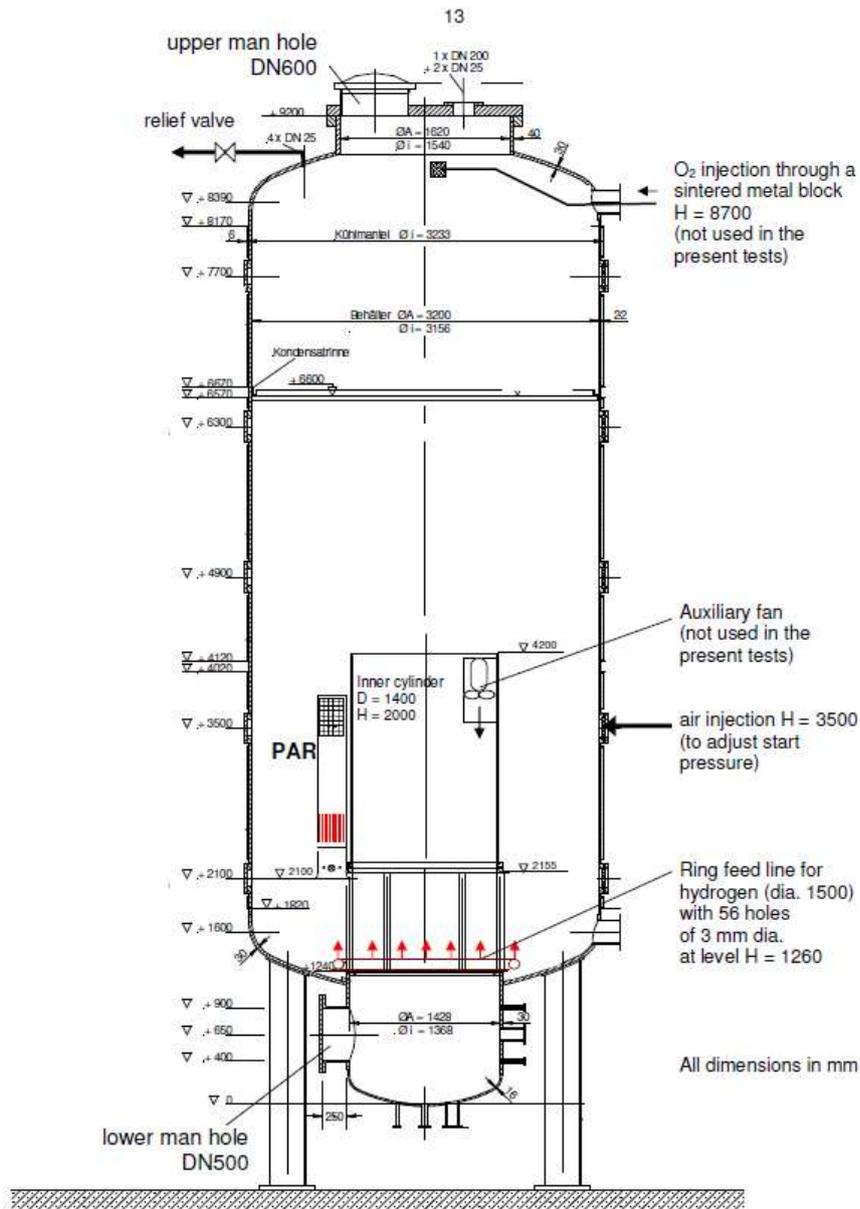


Abb. 2.125 Experimenteller Aufbau des THAI-Versuches HR-5 /KAN 09/

Der Aufbau des PARs ist in Abb. 2.126 dargestellt. Es handelt sich um einen halben PAR von AREVA Typ FR-380. Der Einlass-Kanal am unteren PAR wurde noch etwas verlängert. Der Auslass befindet sich oben vorne und seitlich. In Abb. 2.127 sind Informationen zum Experiment (H_2 -Einspeisung, Rekombinationsrate, Druck) zu finden. Weitere Informationen zum Experiment finden sich in /KAN 09/. Die Simulationen sollen sich auf die erste Phase bis ca. 100 min konzentrieren.

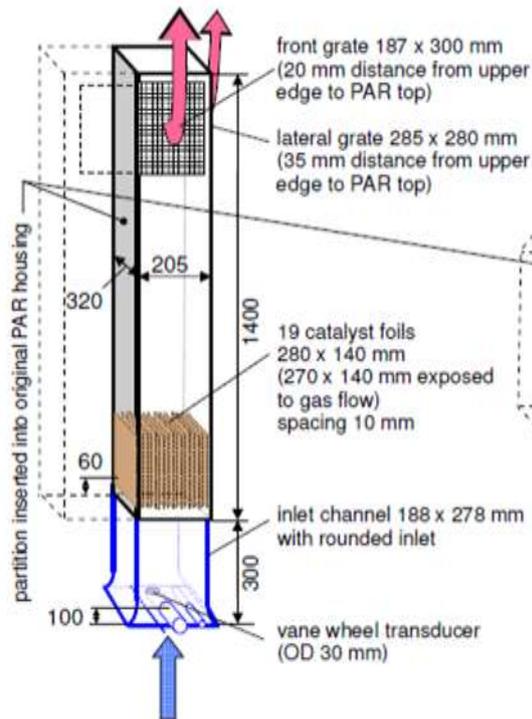


Abb. 2.126 Aufbau des PARs (Typ: Areva / Siemens: 0,5*FR-380 size /KAN 09/)

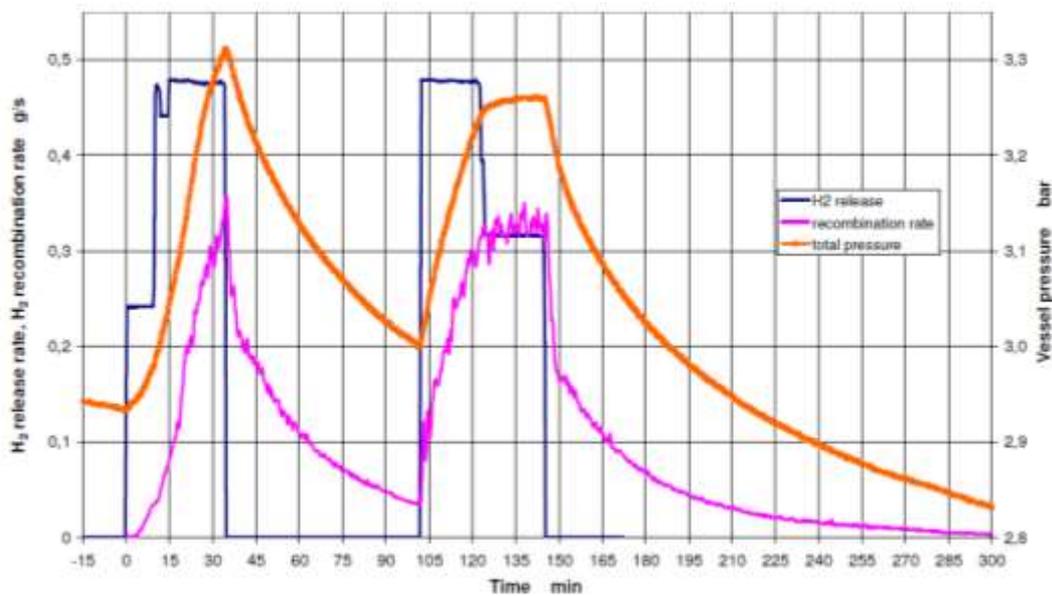


Abb. 2.127 H₂-Einspeiserate, Rekombinationsrate und Druck im Experiment /KAN 09/

2.4.4.2 OpenFOAM-Gitter und Setup

In Abb. 2.128 sind die erstellte OpenFOAM-Geometrie und das Berechnungsgitter dargestellt. Es handelt sich um ein strukturiertes Gitter mit insgesamt 423.054 Elementen.

Die Wände des THAI-Behälters sind in der Geometrie enthalten und werden mitgerechnet. Der Ring mit der H_2 -Einspeisung befindet sich im unteren Bereich und der PAR ist nur durch seinen Ein- und Auslass repräsentiert. Das eigentliche Innere ist leer. Das Gitter wurde mit Pointwise entwickelt und wird auch für die CFX-Rechnung verwendet.

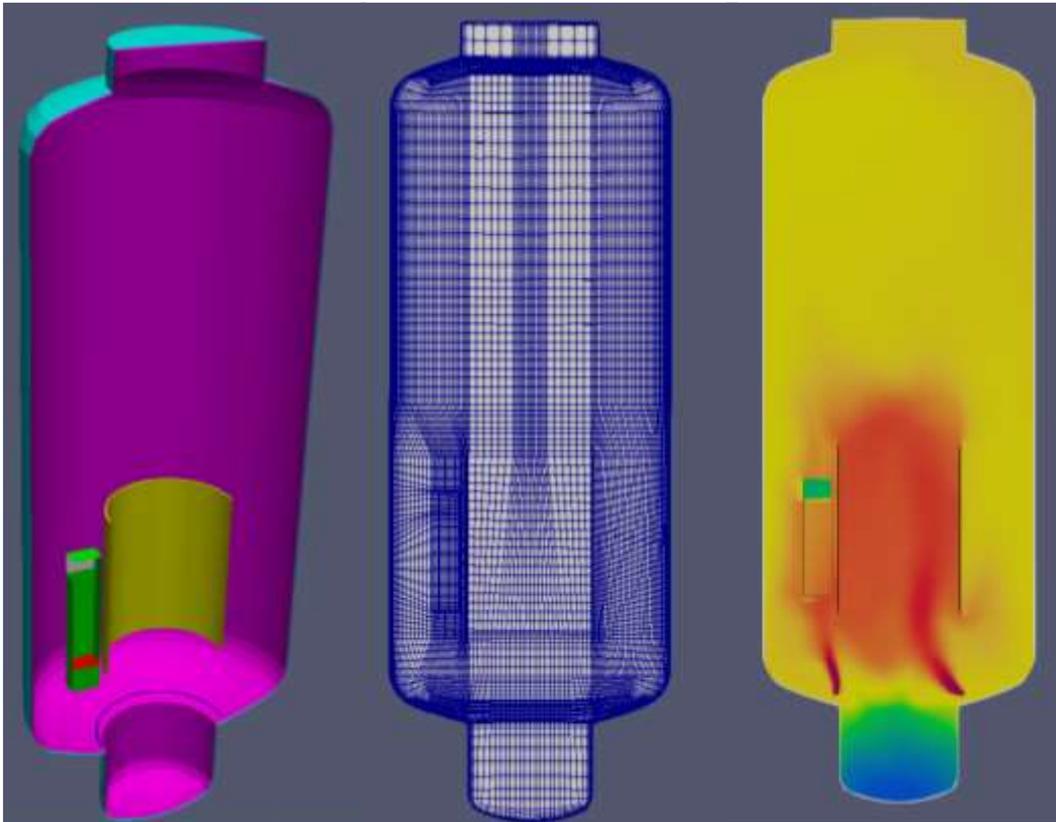


Abb. 2.128 OpenFOAM Geometrie, Gitter und Berechnungsergebnis (H_2 -Konzentration)

Beim THAI-Versuch HR-5 treten mehrere unterschiedliche Phänomene auf, die von den Simulationen abgedeckt werden müssen. Neben der Gasverteilung tritt H_2 -Rekombination im PAR und Kondensation des entstehenden Dampfs an den THAI-Wänden auf. Entsprechend müssen mehrere der neu entwickelten und validierten Modelle verwendet werden (siehe Tab. 2.18). Die Simulation wurde mit dem OpenFOAM-Solver `chtMultiRegionSchmidtFoam05` durchgeführt. Für die Gasverteilung werden das SST-Turbulenzmodell einschließlich Buoyancy-Terme sowie die Korrekturen am Diffusionsmodell benötigt. Für die H_2 -Rekombination wird das hier zu testende PAR-Modell und für die Wandkondensation das ebenfalls von der GRS entwickelte Wandkondensationsmodell verwendet.

Tab. 2.18 Infobox für den THAI-Versuch HR-5

Experiment	THAI HR-5
Phänomene	Gasverteilung / Rekombination von H ₂ / Wandkondensation
Materialien	H ₂ , H ₂ O, O ₂ , N ₂
Software / Version	OpenFOAM 6
Solver	chtMultiRegionSchmidtFoam05
Zeitschritte	Variabel (max. 0,1 s)
Courant-Zahl	Max. 15
Turbulenzmodell	buoyantkOmegaSST
Strahlungsmodell	Ohne
Diffusionsmodell	GRS-Modell
PAR-Modell	GRS-Modell
Wandkondensation	GRS-Modell
Gittererstellung	Pointwise
Elementzahl	423.054

2.4.4.3 Vergleich von OpenFOAM mit experimentellen Daten und CFX

In Abb. 2.129 ist die H₂-Konzentration am PAR-Einlass dargestellt. Es gibt zwar einige kleinere Abweichungen der OpenFOAM-Werte (ab 40 Minuten ist in OpenFOAM die H₂-Konzentration am PAR-Einlass um ca. 0,3 vol.-% höher als im Experiment und CFX), insgesamt ist die Übereinstimmung aber gut. Die Abweichungen können durch eine unterschiedliche Verteilung der Gase im THAI-Behälter bedingt sein. Die H₂-Konzentration am PAR-Auslass ist in Abb. 2.130 dargestellt. Hier zeigt sich ein ähnliches Verhalten wie am Einlass. Die Übereinstimmung ist bis auf kleinere Unterschiede gut. Die Abweichungen resultieren im Wesentlichen auf Unterschieden bei der PAR-Einlasskonzentration, was auch an der guten Übereinstimmung bei der Effizienz (siehe Abb. 2.134) zu erkennen ist.

In Abb. 2.131 findet sich die H₂-Rekombinationsrate im Zeitverlauf. Insgesamt zeigt sich eine gute Übereinstimmung der OpenFOAM-Ergebnisse mit den experimentellen Daten und den CFX-Ergebnissen. Trägt man die Rekombinationsrate über der H₂-Konzentration am Einlass auf, so zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung (siehe Abb. 2.132). Die Werte liegen fast alle auf einer Linie. Das zeigt, dass das PAR-Modell richtig

implementiert wurde, und es stellt eine positive Validierung des PAR-Modells dar. Die Unterschiede im Zeitverlauf (Abb. 2.131) sind also hauptsächlich in den (leichten) Unterschieden bei der Einlass-Konzentration begründet. Letztlich besteht aber eine wechselseitige Beziehung zwischen der Verteilung der Gase im Behälter und der Rekombinationsleistung. Somit ist also schwierig zu unterscheiden, was Ursache und was Wirkung ist.

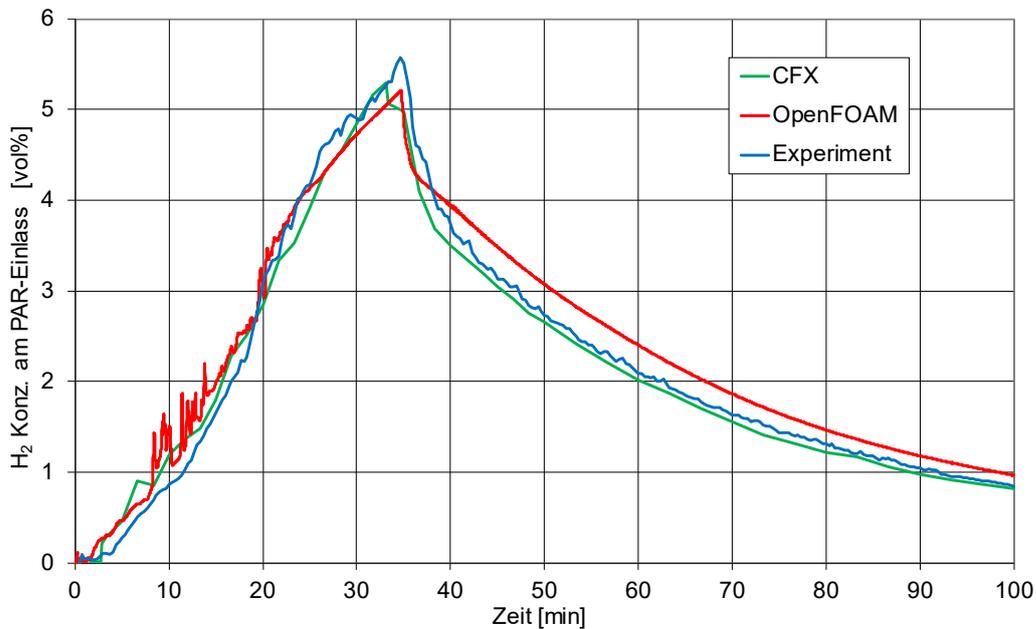


Abb. 2.129 H₂-Konzentration am PAR-Einlass

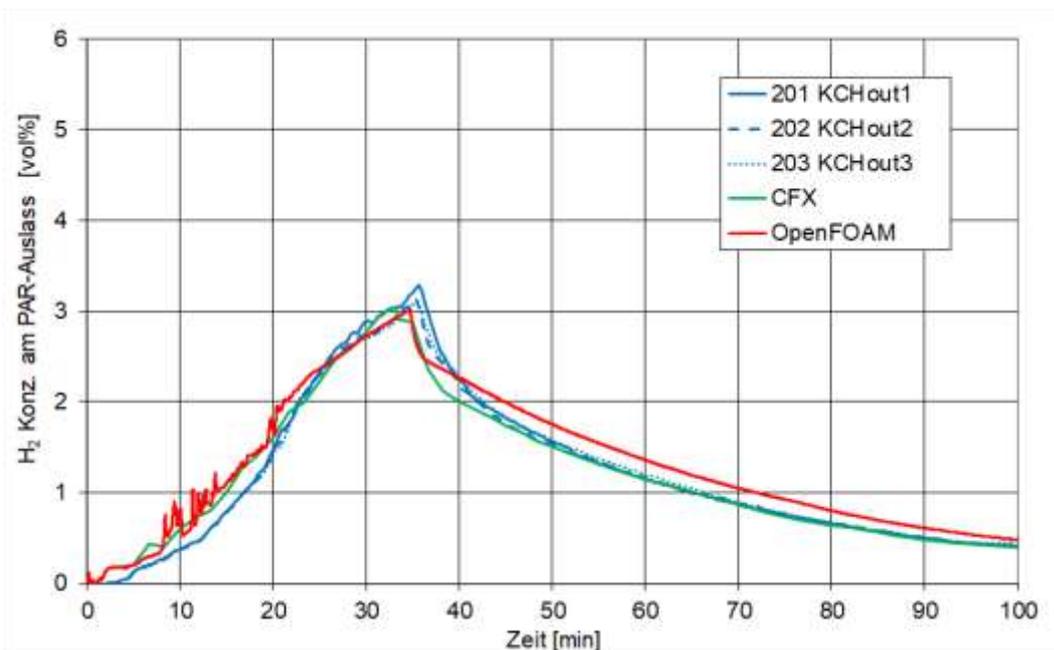


Abb. 2.130 H₂-Konzentration am PAR-Auslass

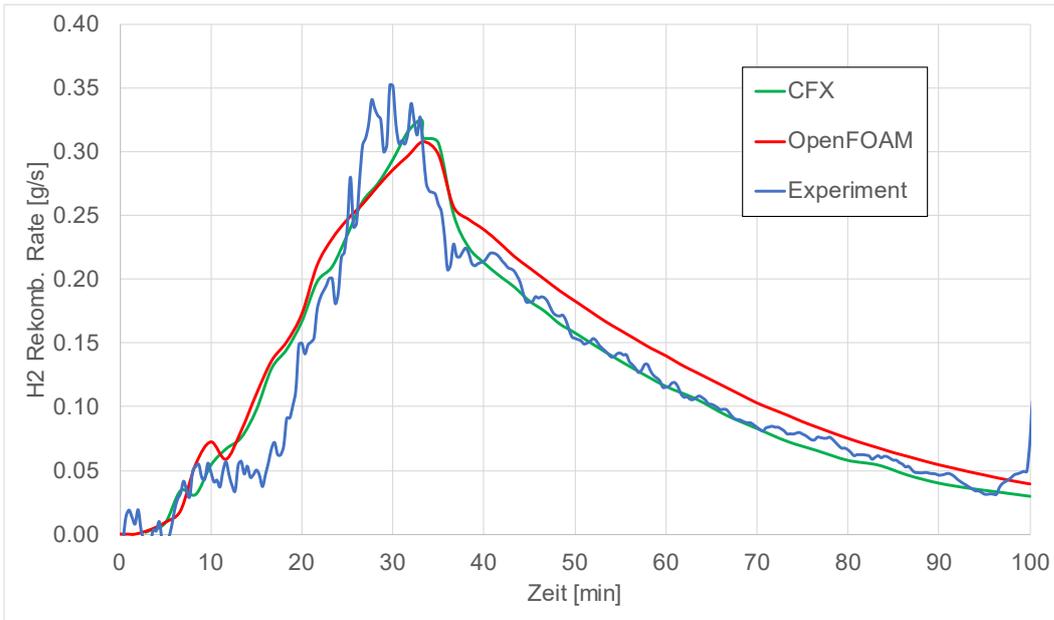


Abb. 2.131 H₂-Rekombinationsrate im Zeitverlauf

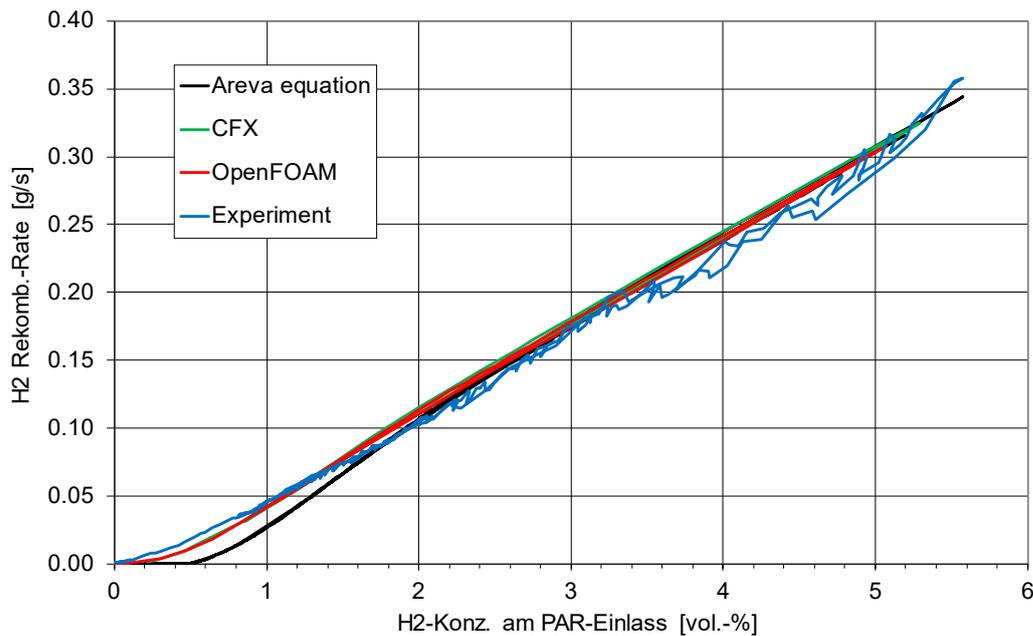


Abb. 2.132 H₂-Rekombinationsrate über H₂-Konzentration am PAR-Einlass

In Abb. 2.133 ist die PAR-Effizienz dargestellt. Diese liegt im Mittel bei etwa 40 – 50 % und der Verlauf wird gut von der OpenFOAM-Rechnung wiedergegeben. Wird die PAR-Effizienz über der H₂-Einlass-Konzentration aufgetragen (siehe Abb. 2.134), so ist das eine Prüfung der Effizienz-Berechnung im Modell. Hier zeigt sich wieder eine sehr gute

Übereinstimmung der OpenFOAM-Rechnung mit den experimentellen Daten und mit CFX.

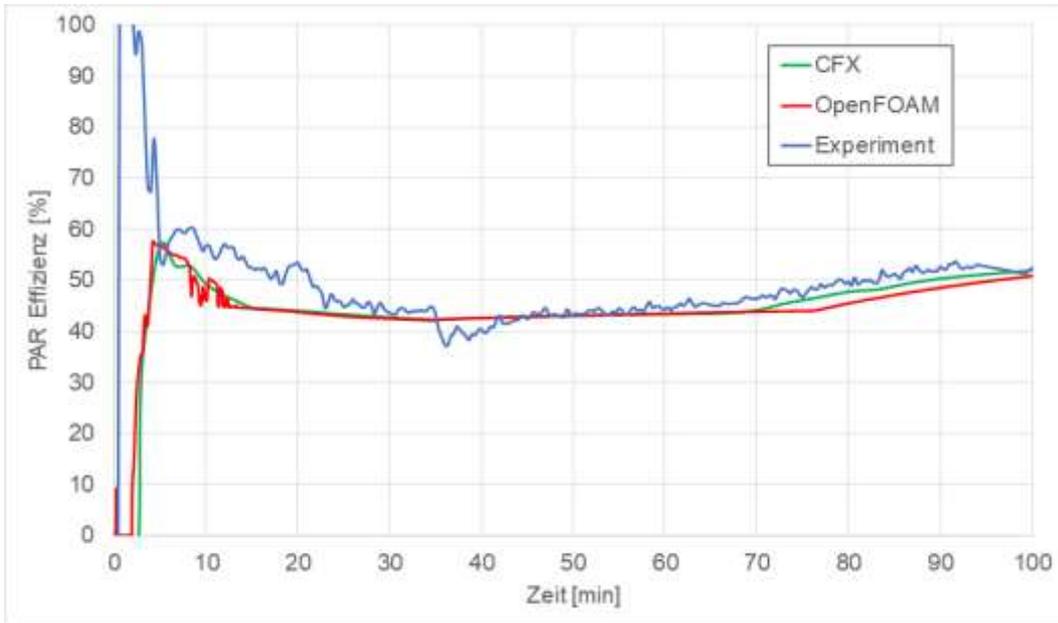


Abb. 2.133 PAR-Effizienz im Zeitverlauf

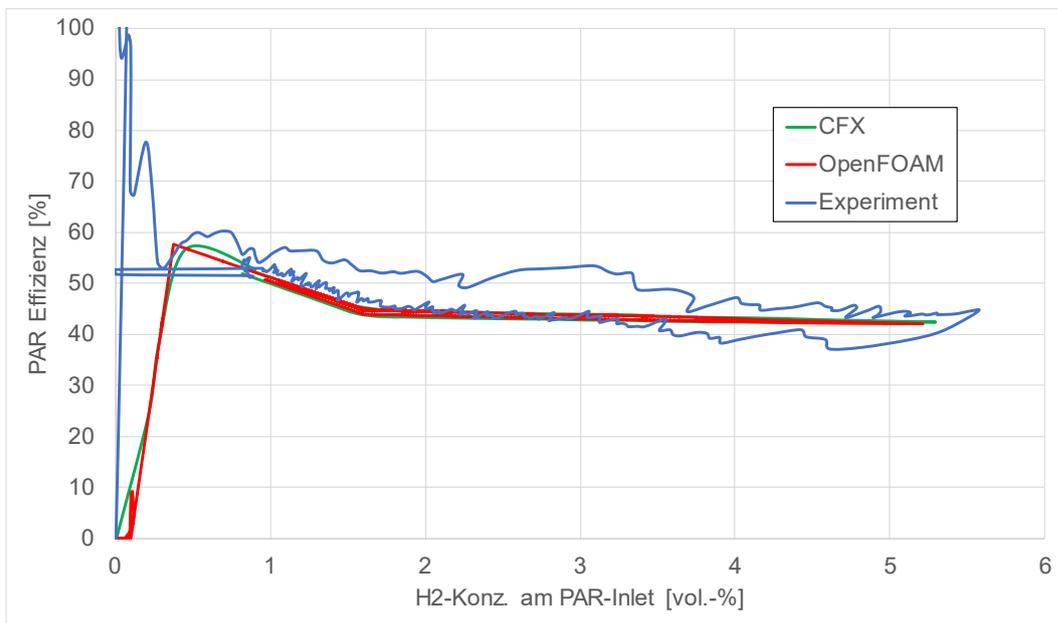


Abb. 2.134 PAR-Effizienz über H₂-Konzentration am PAR-Einlass

In den folgenden Graphiken findet sich die PAR-Einlass- und Auslass-Temperatur im Zeitverlauf (siehe Abb. 2.135 und Abb. 2.136) und über der H₂-Einlass-Konzentration (siehe Abb. 2.137). Es zeigen sich wieder im zeitlichen Verlauf leichte Unterschiede, bei der Auftragung über der Einlass-Konzentration, aber wieder eine sehr gute

Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Allerdings sind für die 2. Phase des Experiments die Temperaturen am PAR-Auslass etwas höher als in CFX. Sie stimmen gut mit dem Messwert KFTOut1 überein, während von CFX Werte vergleichbar mit KFTOut2 berechnet werden. Auch hier korrespondiert die höhere Auslasstemperatur bei OpenFOAM mit der höheren H_2 -Einlasskonzentration und der daraus resultierenden höheren Abbauleistung.

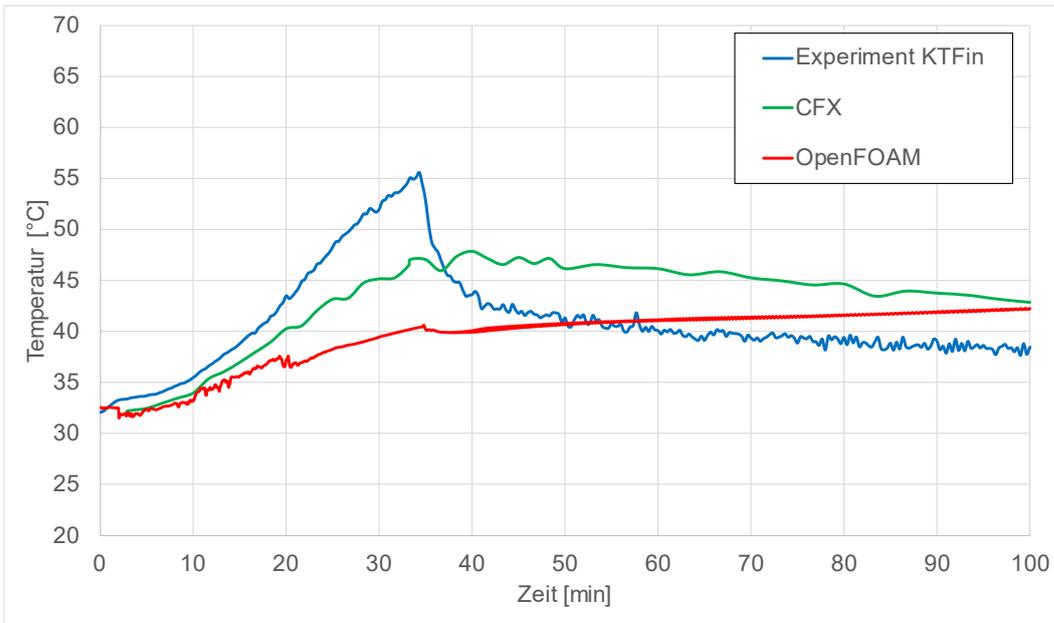


Abb. 2.135 Temperaturen am PAR Einlass

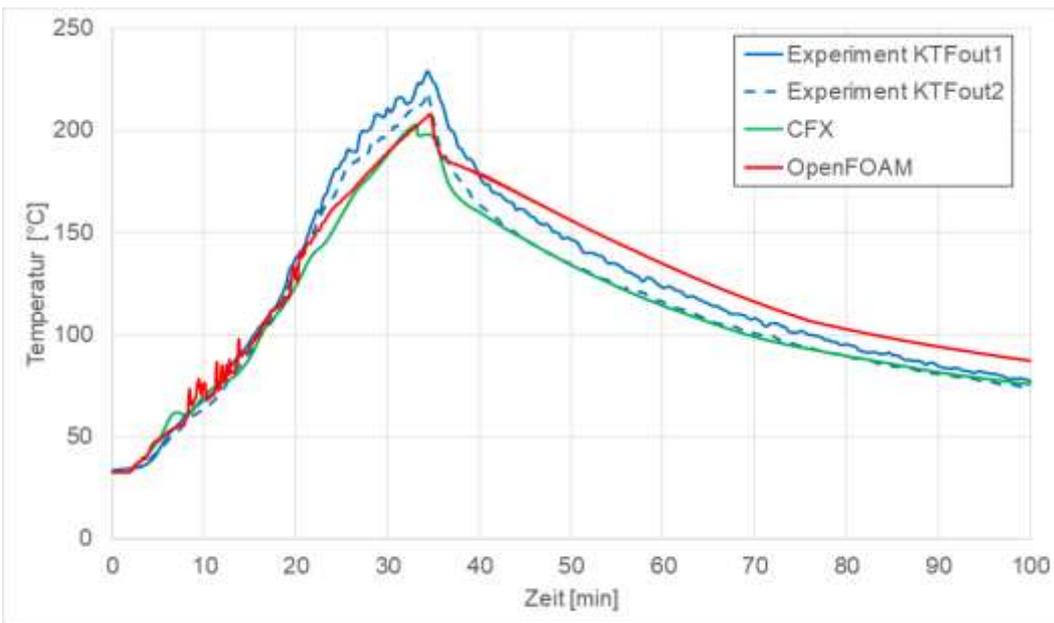


Abb. 2.136 Temperaturen am PAR-Auslass im Zeitverlauf

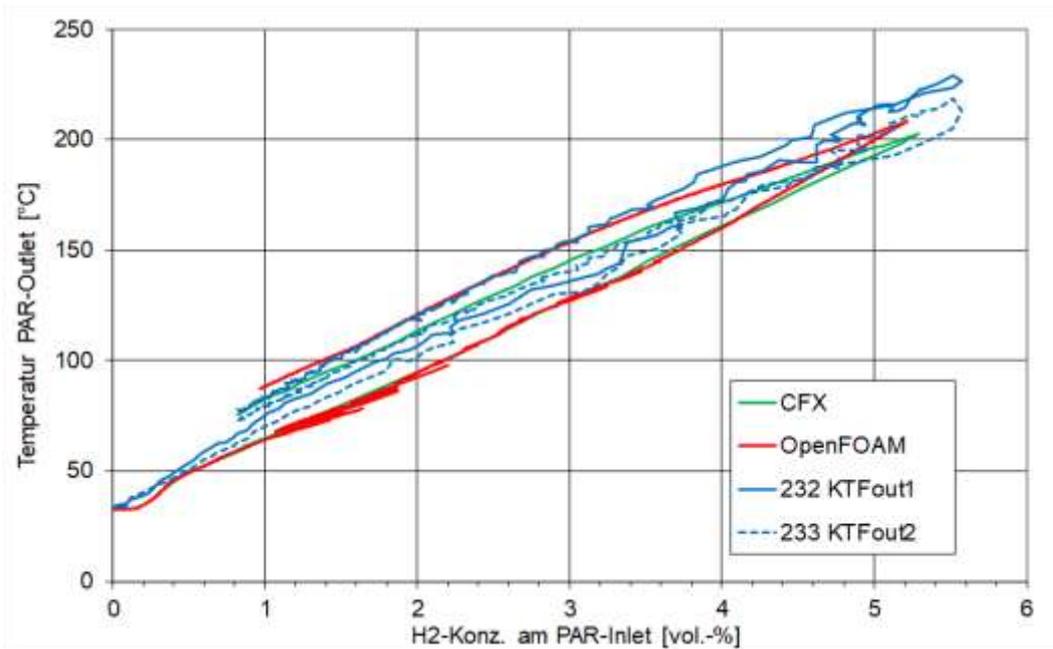


Abb. 2.137 Temperaturen am PAR-Auslass über H₂-Konzentration am PAR-Einlass

Der Massenstrom durch den PAR ist in Abb. 2.138 dargestellt. Hier findet sich eine gute Übereinstimmung von OpenFOAM und CFX. Experimentelle Daten sind auch hier nicht vorhanden.

Zur Vervollständigung des Bildes werden hier noch einige Daten aus dem THAI-Behälter aufgeführt. Der Druck ist in der OpenFOAM-Rechnung im Zeitraum von 30 – 50 min etwas zu niedrig, danach etwas zu hoch (siehe Abb. 2.139). Die Temperaturen im THAI-Behälter sind insgesamt im Vergleich zum Experiment etwas zu niedrig (siehe Abb. 2.140 und Abb. 2.141). Die mit OpenFOAM berechneten H₂-Konzentrationen sind im oberen Behälter etwas zu hoch (siehe Abb. 2.142) und im unteren Behälter etwas zu niedrig (siehe Abb. 2.143). Insgesamt ist die Übereinstimmung mit dem Experiment dennoch zufriedenstellend. Weiterhin werden in Abb. 2.144 die Wandkondensationsraten von OpenFOAM und CFX miteinander verglichen. Hier gibt es Unterschiede, aber der ungefähre Verlauf und die Größenordnung stimmen überein.

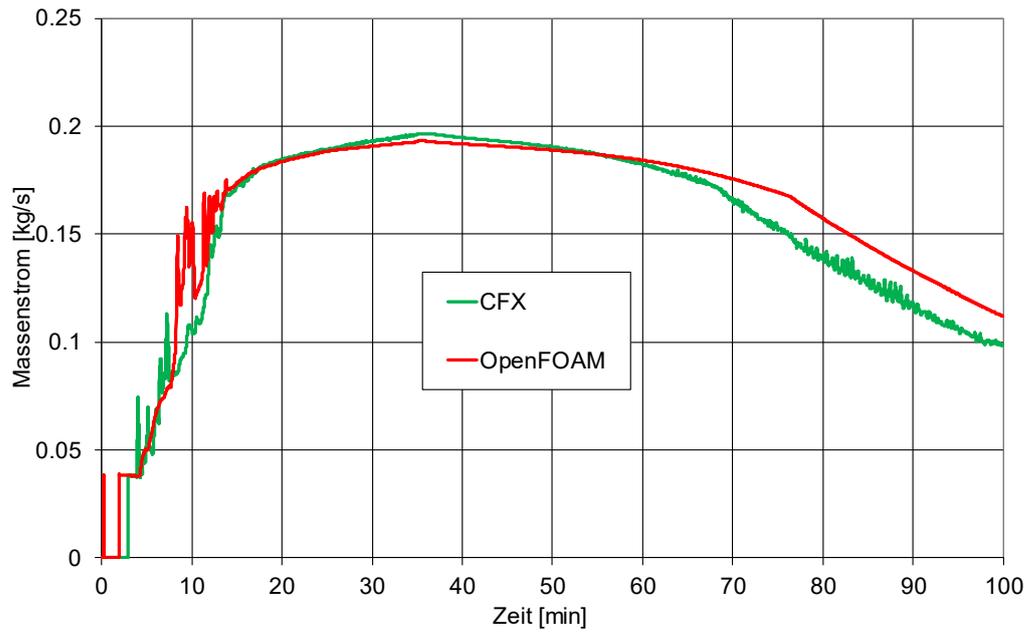


Abb. 2.138 Massenstrom durch den PAR (keine experimentellen Werte vorhanden)

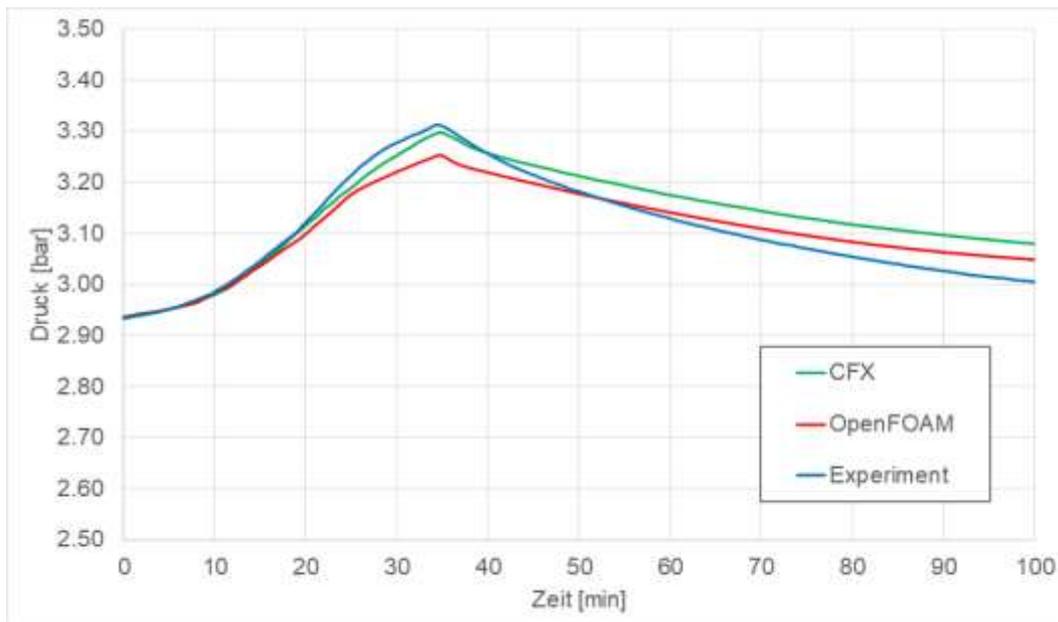


Abb. 2.139 Druckverlauf im THAI-Behälter

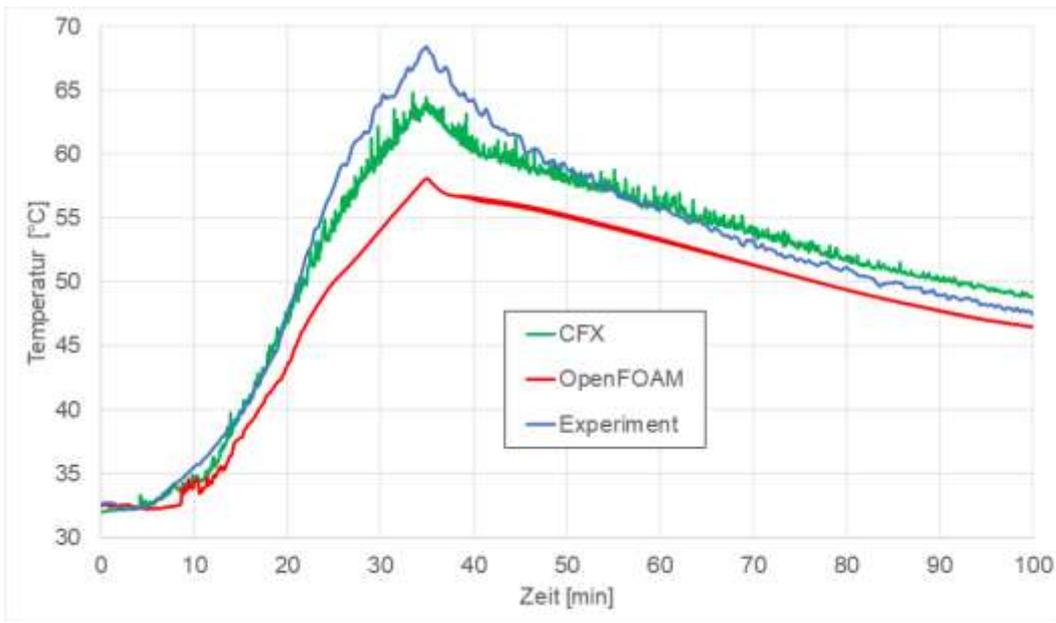


Abb. 2.140 Temperatur in 8,4 m Höhe

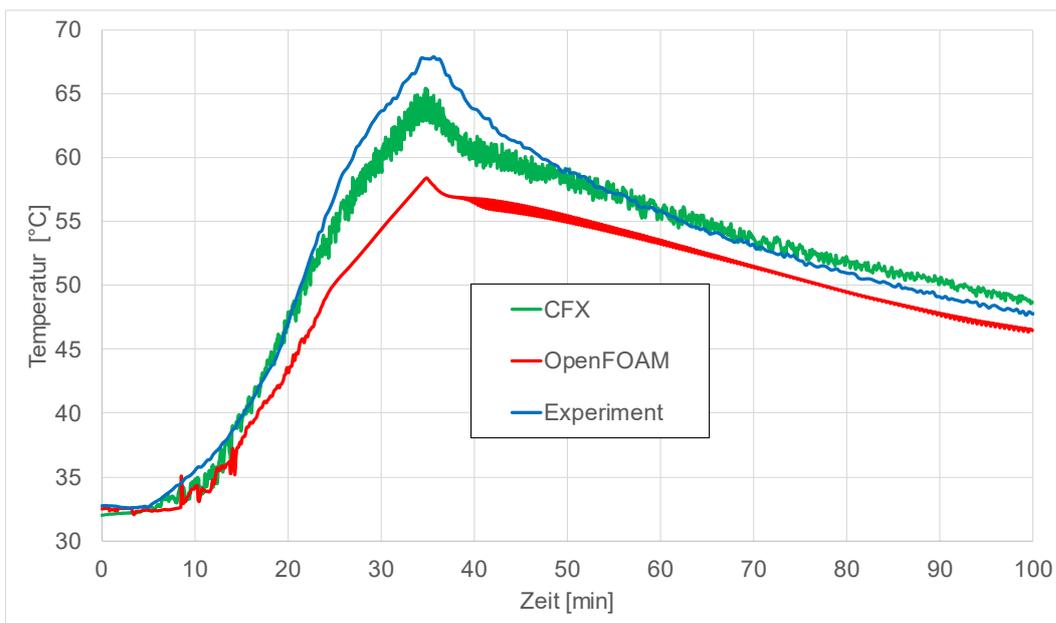


Abb. 2.141 Temperatur in 6,3 m Höhe

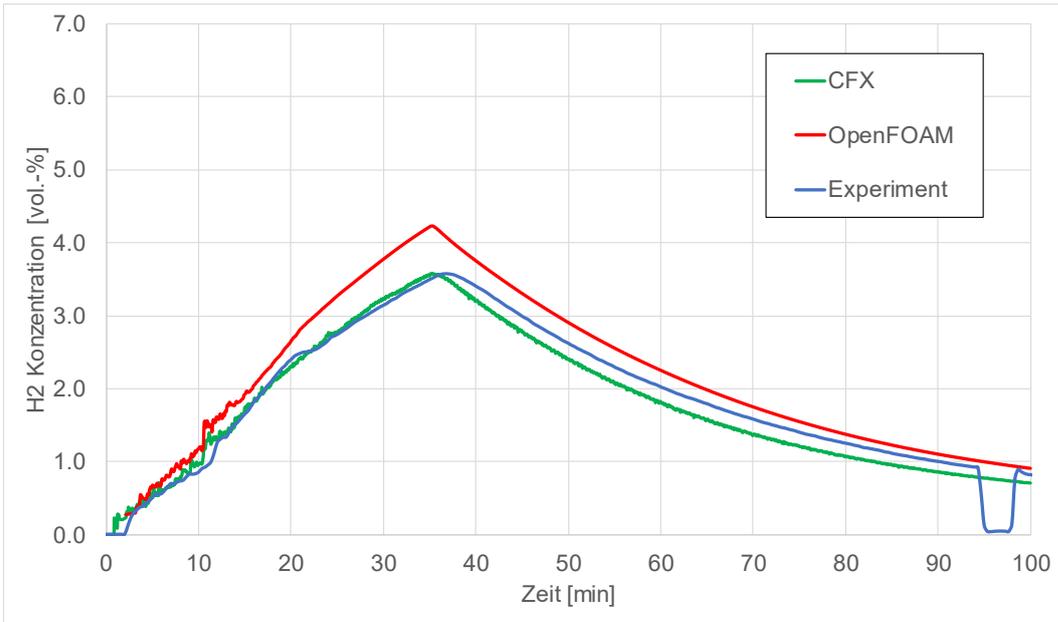


Abb. 2.142 H₂-Konzentration in 8,4 m Höhe

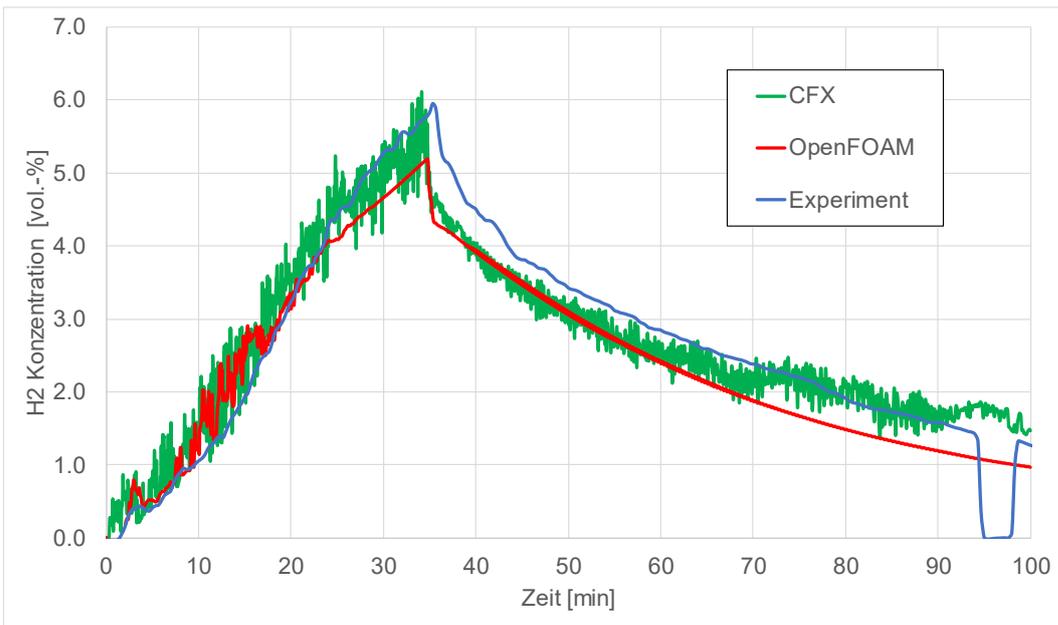


Abb. 2.143 H₂-Konzentration in 1,7 m Höhe

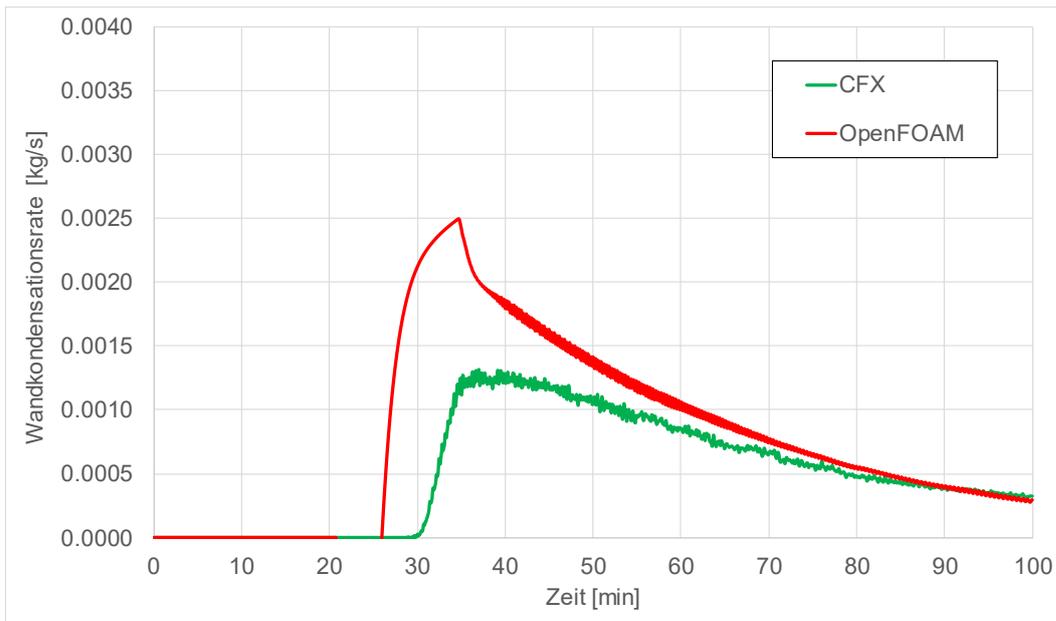


Abb. 2.144 Vergleich der Wandkondensationsraten

Als Fazit kann gesagt werden, dass der THAI-Versuch HR-5 gut mit OpenFOAM und dem neu entwickelten PAR-Modell simuliert werden konnte. Insbesondere beim Vergleich der PAR-Leistungen (Rekombinationsrate, Effizienz, Auslass-Temperaturen, ...) wurde eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt. Bei der Verteilung von Gasen im THAI-Behälter gab es noch Unterschiede zum Experiment. Grundsätzlich stellt diese Rechnung aber eine positive Validierung des neuen PAR-Modells dar.

2.4.5 Simulation des THAI-Versuches HR-43

2.4.5.1 Versuchsbeschreibung

Beim THAI-Versuch HR-43 handelt es sich um einen Rekombinatorversuch, bei dem in der etwas komplexeren THAI+-Geometrie eine Gegenströmung (relativ zur Strömungsrichtung im PAR) durch ein Gebläse erzeugt wurde. Der Versuchsaufbau ist in Abb. 2.145 dargestellt. In dem Versuch sollte insbesondere untersucht werden, wie sich ein PAR im Einfluss einer solchen Gegenströmung verhält, ob sich möglicherweise die Strömungsrichtung im PAR umdreht oder inwieweit die Abbauleistung beeinflusst wird. Dieser etwas komplexere PAR-Versuch soll hier zur weiteren Validierung des neuen GRS-PAR-Modells verwendet werden.

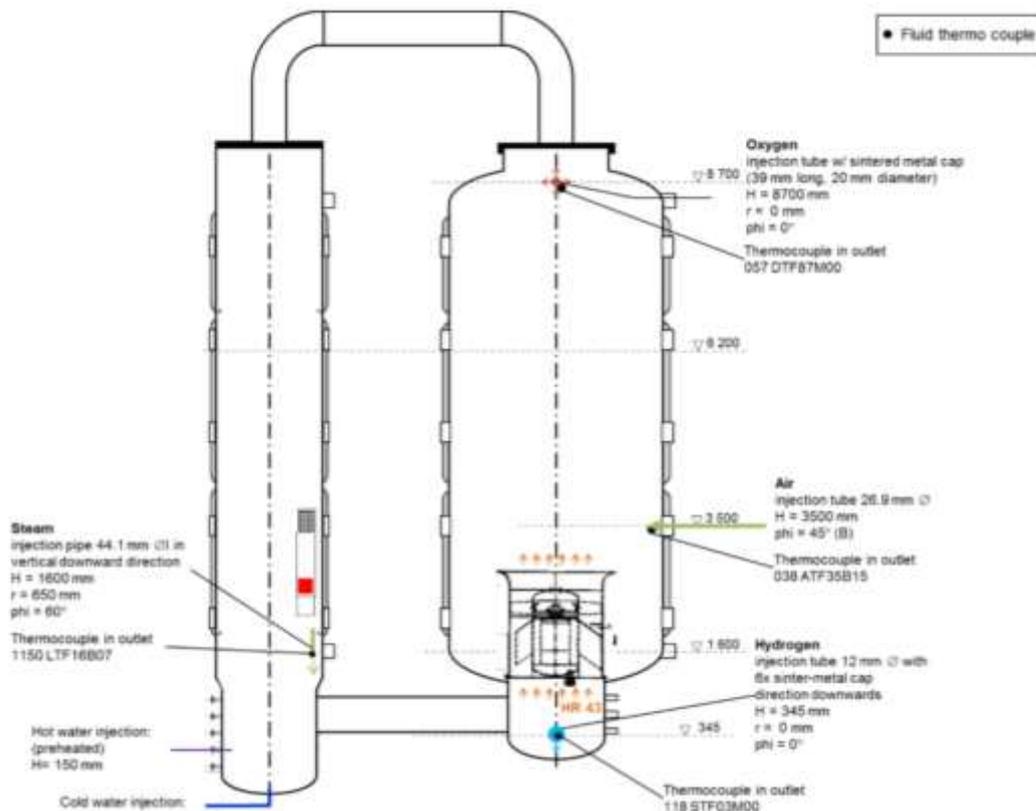


Abb. 2.145 Experimenteller Aufbau des THAI-Versuches HR-43 /FRE 16/

Das in Abbildung Abb. 2.145 dargestellte Gebläse erzeugt im Versuch HR-43 einen konstanten Volumenstrom von $0,894 \text{ m}^3/\text{s}$. In Abbildung Abb. 2.146 sind die H_2 - und Dampf-Einspeiseraten dargestellt. Die Vorkonditionierungsphase vor der eigentlichen H_2 -Einspeisung wird bei der Simulation nicht berücksichtigt. Die Simulation startet somit erst mit dem Zeitpunkt 0 s. In der Vorkonditionierungsphase wird Dampf eingespeist, bis ein Druck von ca. 1,5 bar erreicht wird. Die mittlere Temperatur bei $t = 0 \text{ s}$ liegt dann etwa bei $78 \text{ }^\circ\text{C}$ und im THAI-Behälter gibt es dann eine Dampfkonzentration von etwa 15,4 % (Massenanteil). Weiterhin ist der PAD-Sumpf mit 1077 Liter Wasser gefüllt (im Sumpfbereich). Ab $t = 0 \text{ s}$ liegen folgende Einspeiseraten vor:

- Erste H_2 -Einspeisung: $0,192 \text{ g/s}$, Zeitraum 0 s – 1050 s
- Zweite H_2 -Einspeisung: $0,373 \text{ g/s}$, Zeitraum 1410 s – 2070 s
- Kontinuierliche Dampf-Einspeisung: $4,6 \text{ g/s}$, Zeitraum 0 s – 4004 s. Danach ging die Einspeiserate wegen eines Problems beim Dampfgenerator deutlich herunter.

Weitere Details zum Experiment HR-43 finden sich in /FRE 16/. Es wird in der Simulation nur der Zeitraum von 0 s bis etwa 5000 s betrachtet. Als Initialwerte für den Zeitpunkt $t = 0$ s wird ein Druck von 1,505 bar und eine Temperatur von 78 °C verwendet.

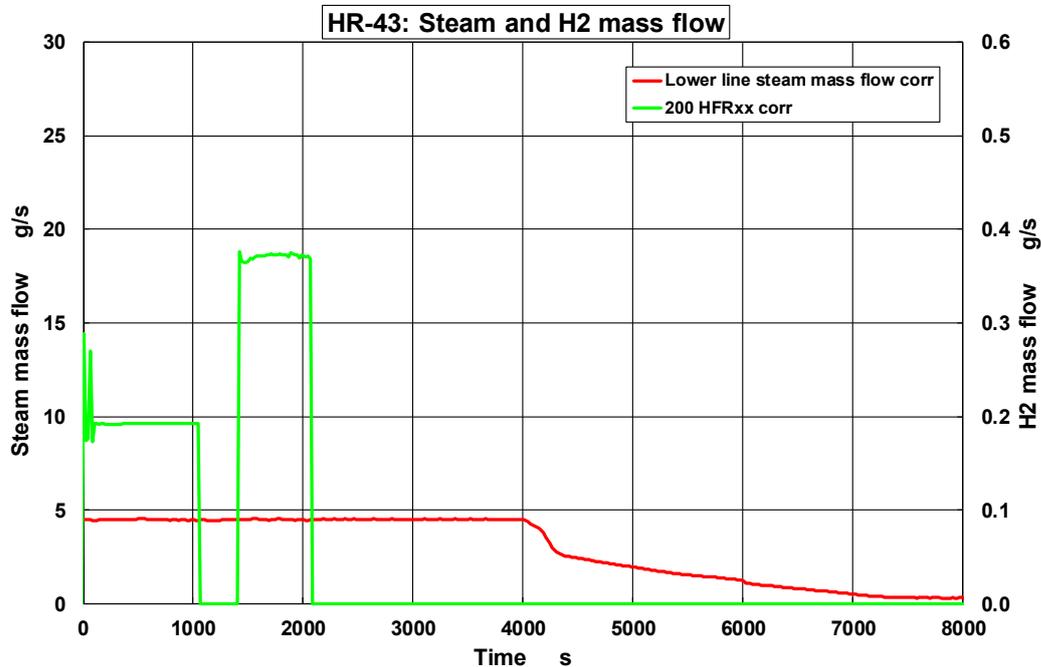


Abb. 2.146 H₂- und Dampfeinspeiseraten beim Versuch HR-43 /FRE 16/

2.4.5.2 OpenFOAM-Gitter und Setup

Das OpenFOAM-Gitter wurde mit Hilfe von Pointwise erstellt. Es ist ein strukturiertes Gitter und enthält 1.581.058 Elemente. Es ist in Abb. 2.147 und Abb. 2.148 dargestellt. Auch die Wandstrukturen des THAI+-Behälters sind im Gitter enthalten.

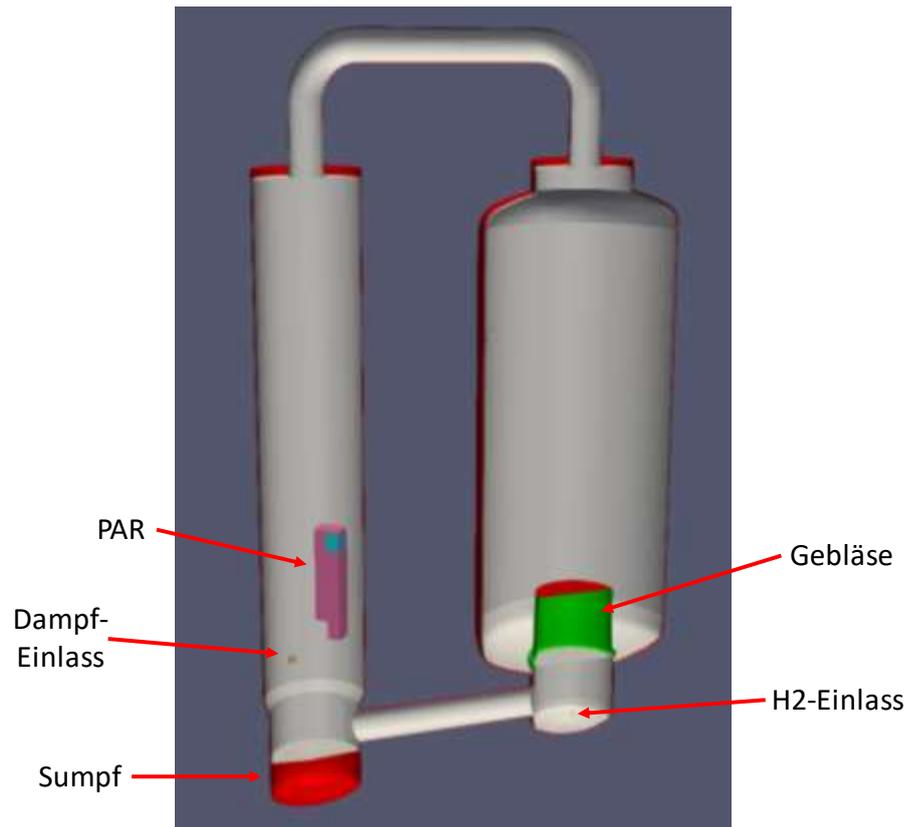


Abb. 2.147 OpenFOAM-Geometrie für Versuch HR-43

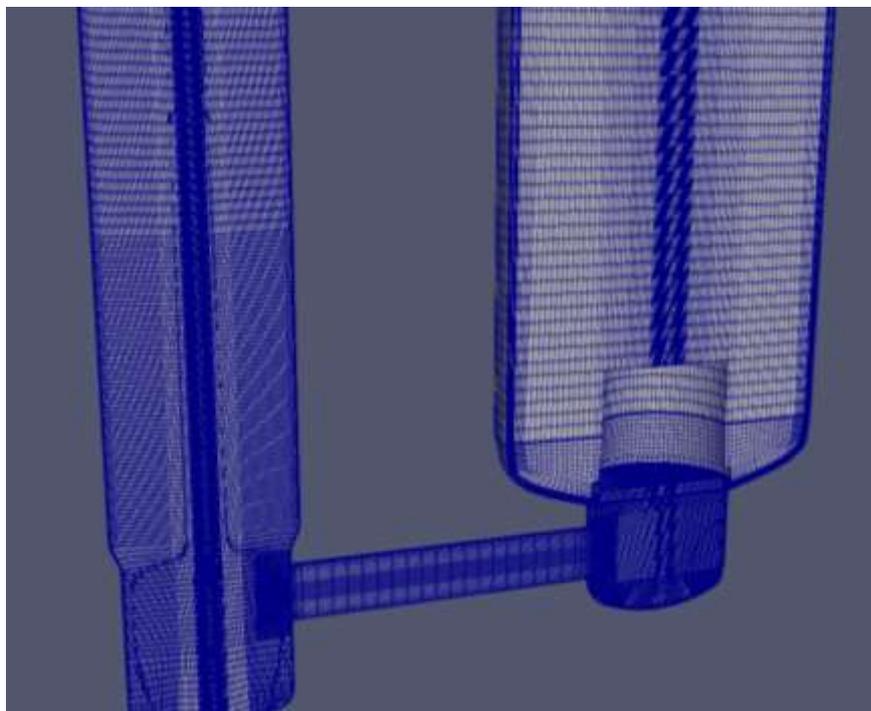


Abb. 2.148 Ausschnitt des OpenFOAM-Gitters für Versuch HR-43

Die wichtigsten Modelle und Parameter für den Versuch HR-43 sind in Tab. 2.19 dargestellt. Sie entsprechen im Wesentlichen den Einstellungen beim Versuch HR-5. Die Modellierung des Gebläses stellte sich als schwierig heraus, da das Gebläse nicht durch einen einfachen senkrechten Massenstrom dargestellt werden konnte. Es zeigte sich, dass das Gebläse eine komplexere Geschwindigkeitsverteilung/Turbulenz aufweisen muss, die für eine homogenere Vermischung der Gase oberhalb des Gebläses sorgt. Da sich der PAR im anderen THAI-Behälter befindet, spielt die Modellierung des Gebläses nur soweit eine Rolle, wie sie in der Lage sein muss, den Massenstrom durch Verbindungsrohre und damit auch die Gegenströmung im PAR richtig zu simulieren. Außerdem muss sie die homogene Gasvermischung im TTV-Behälter vorhersagen können. Erst nach Berücksichtigung einer radial nach außen gerichteten Geschwindigkeitskomponente stimmten die simulierten H_2 -Konzentrationen im TTV-Behälter mit den experimentellen Werten überein. Dies war notwendig, um die richtige H_2 -Konzentration am PAR-Einlass zu erhalten. Eine weitere Berechnung des Versuches HR-43 wurde auch mit CFX als Vergleich für die OpenFOAM-Rechnung durchgeführt (gleiches Gitter, Standard-CFX-Modelle).

Tab. 2.19 Infobox für den THAI-Versuch HR-43

Experiment	THAI HR-43
Phänomene	Gasverteilung / Rekombination von H_2 / Rekombinator in Gegenströmung / Wandkondensation
Materialien	H_2 , H_2O , O_2 , N_2
Software / Version	OpenFOAM 6
Solver	chtMultiRegionSchmidtFoam
Zeitschritte	Variabel (max. 0,1 s)
Courant-Zahl	Max. 100
Turbulenzmodell	buoyantkOmegaSST (FZ-Jülich)
Strahlungsmodell	Ohne
Diffusionsmodell	GRS-Modell
PAR-Modell	GRS-Modell
Wandkondensation	GRS-Modell
Gittererstellung	Pointwise
Elementzahl	1.581.058

2.4.5.3 Vergleich von OpenFOAM mit experimentellen Daten und CFX

Einen ersten Überblick über die sich einstellende H₂-Verteilung gibt Abb. 2.149. Hier sieht man eine ähnliche Verteilung bei CFX und OpenFOAM, wenn es auch Unterschiede in einzelnen Details gibt. Da nur ein Zeitpunkt dargestellt wird, gibt es z. B. unterschiedliche H₂-Verteilungen direkt an der Einspeisestelle. Die H₂-Konzentration an einem Monitorpunkt oberhalb des Gebläses (siehe Abb. 2.150) zeigt, dass die Vermischung durch das Gebläse in den Simulationen gut wiedergegeben wird.

In Abb. 2.151 sind die H₂-Konzentrationen am PAR-Einlass dargestellt. Sowohl OpenFOAM als auch CFX liegen nahe am Experiment, wobei die OpenFOAM-Werte etwas höher als das Experiment sind und die CFX-Werte etwas unterhalb des Experimentes liegen. In Abb. 2.152 und Abb. 2.153 ist die H₂-Konzentration am Auslass des PAR dargestellt. Insgesamt passt der mit OpenFOAM und CFX berechnete Konzentrationsverlauf recht gut zu den experimentellen Werten. Etwa ab 1500 s liegen beide H₂-Konzentrationen am Auslass etwas höher als im Experiment. Ursache hierfür ist die in OpenFOAM und CFX etwas geringer berechnete PAR-Effizienz. Diese ist in Abb. 2.154 und Abb. 2.155 dargestellt. Die Effizienz des PARs scheint bei diesem Experiment etwas höher zu liegen als in den bisherigen Experimenten, die zur Erstellung der Effizienzkorrelation verwendet wurden (/SCH 10/, /SCH 14/). Die Ursache hierfür ist unklar, vermutlich beeinflusst die Gegenströmung in dem vorliegenden Experiment die Strömungsvorgänge im PAR etwas. In Abb. 2.156 ist die Rekombinationsrate im Zeitverlauf dargestellt. Die von OpenFOAM berechneten Werte liegen etwas oberhalb der experimentellen Werte, die CFX-Werte passen hier besser zum Experiment. Ursache ist aber die unterschiedliche H₂-Konzentration am PAR-Einlass. Wird die Rekombinationsrate über der H₂-Einlass-Konzentration aufgetragen, so passen beide Werte gut zu der AREAVA-Korrelation (siehe Abb. 2.157). Die Werte dieser Korrelation scheinen etwas höher als die experimentellen Werte zu liegen. Insgesamt wird der Verlauf aber gut wiedergegeben. Abb. 2.158 und Abb. 2.159 zeigen, dass auch die Temperaturen am PAR-Auslass insgesamt gut mit den experimentellen Werten übereinstimmen.

Die erfolgreiche Simulation des Versuchs mit ANSYS CFX und OpenFOAM zeigt, dass das PAR-Modell mit den implementierten Korrelationen auch für einen Rekombinator in Gegenströmung ohne signifikante Abweichungen angewendet werden kann. Des Weiteren zeigt auch diese OpenFOAM-Validierungsrechnung durch die gute Übereinstimmung mit ANSYS CFX die korrekte Implementation des PAR-Modells in OpenFOAM.



Abb. 2.149 H₂-Verteilung beim Versuch HR-43 zum Zeitpunkt t = 1500 s (links: CFX, rechts: OpenFOAM)

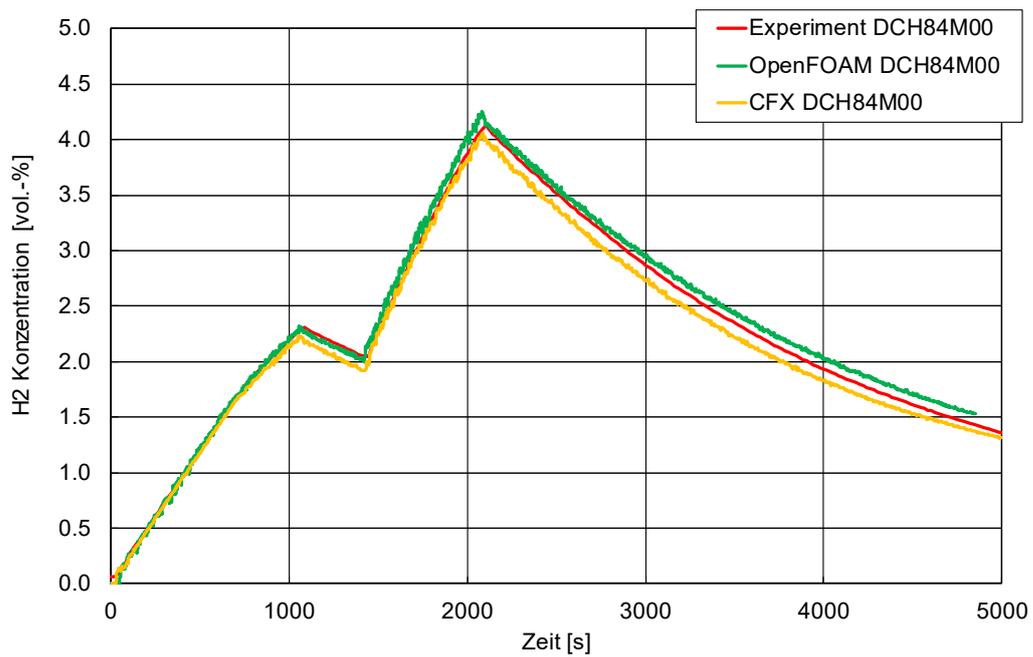


Abb. 2.150 H₂-Konzentration an einem Monitorpunkt im THAI-Behälter (TTV, Höhe 8,4 m)

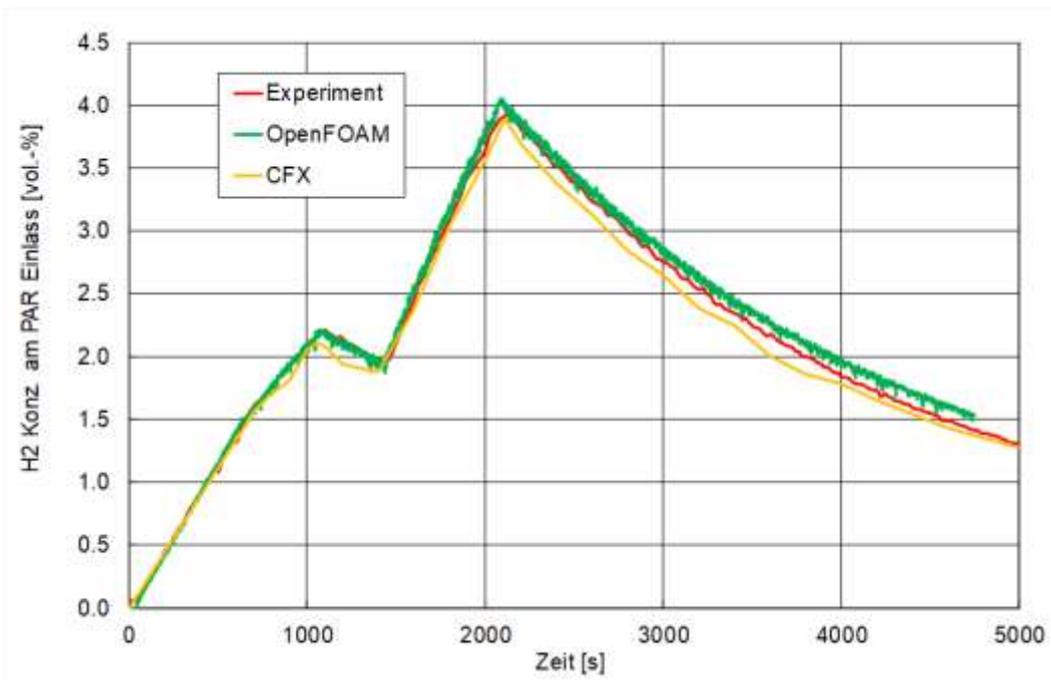


Abb. 2.151 H₂-Konzentration am PAR-Einlass

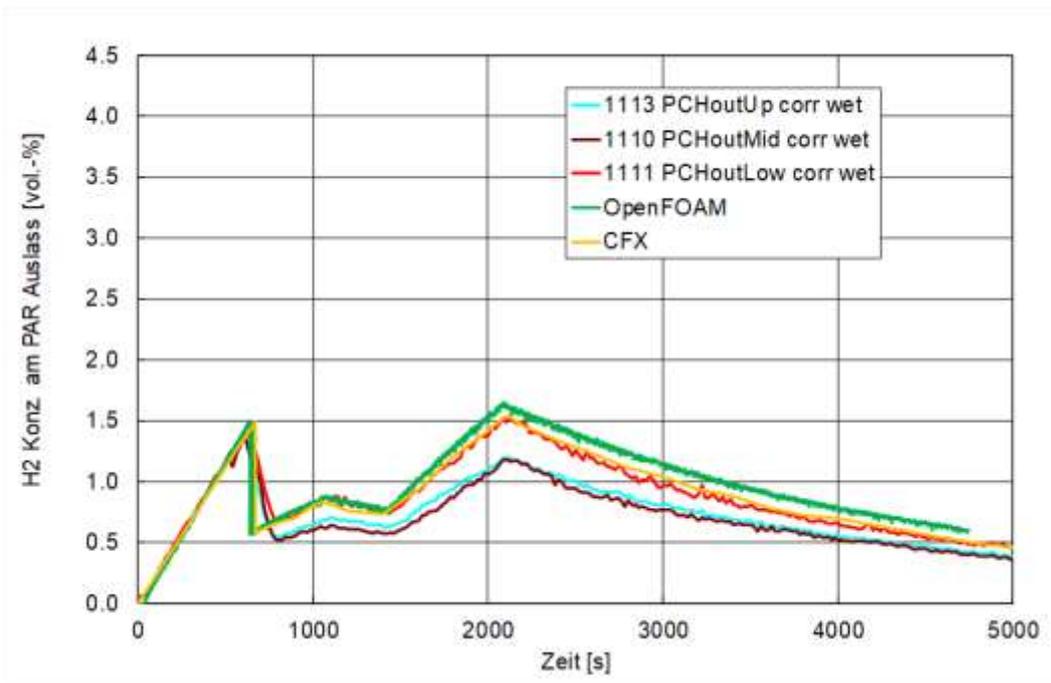


Abb. 2.152 H₂-Konzentration am PAR-Auslass

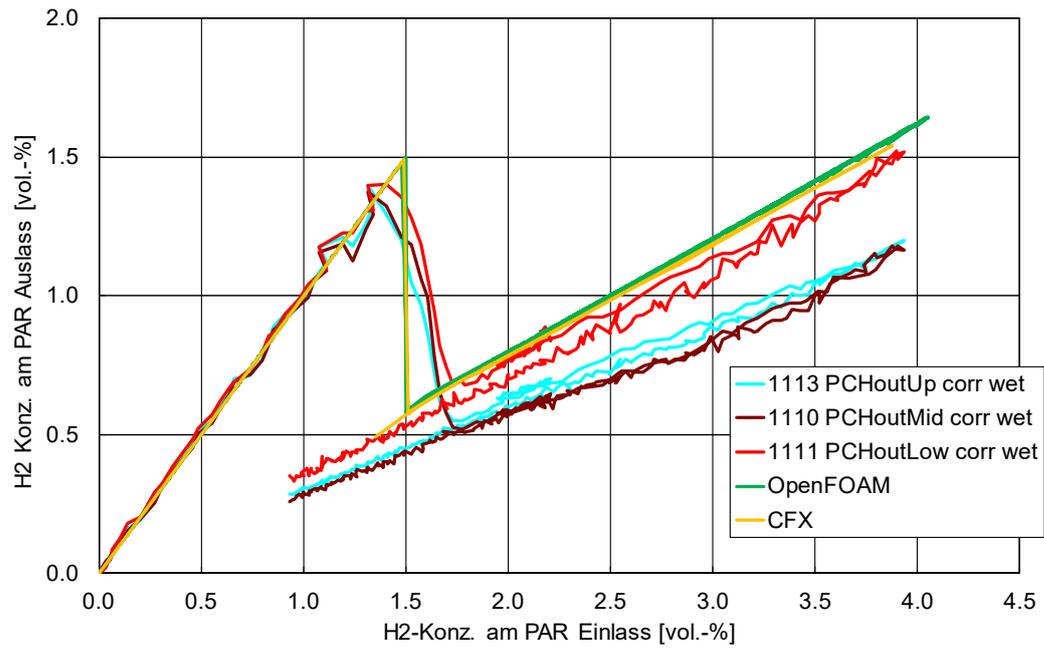


Abb. 2.153 H₂-Konzentration am Auslass über H₂-Konzentration am Einlass

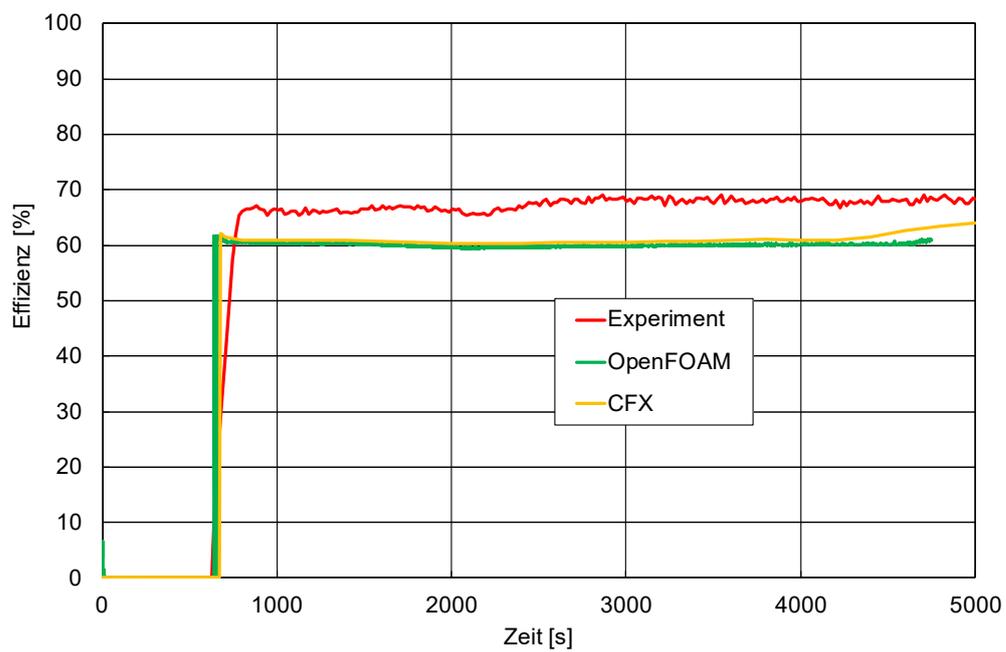


Abb. 2.154 PAR-Effizienz im Zeitverlauf

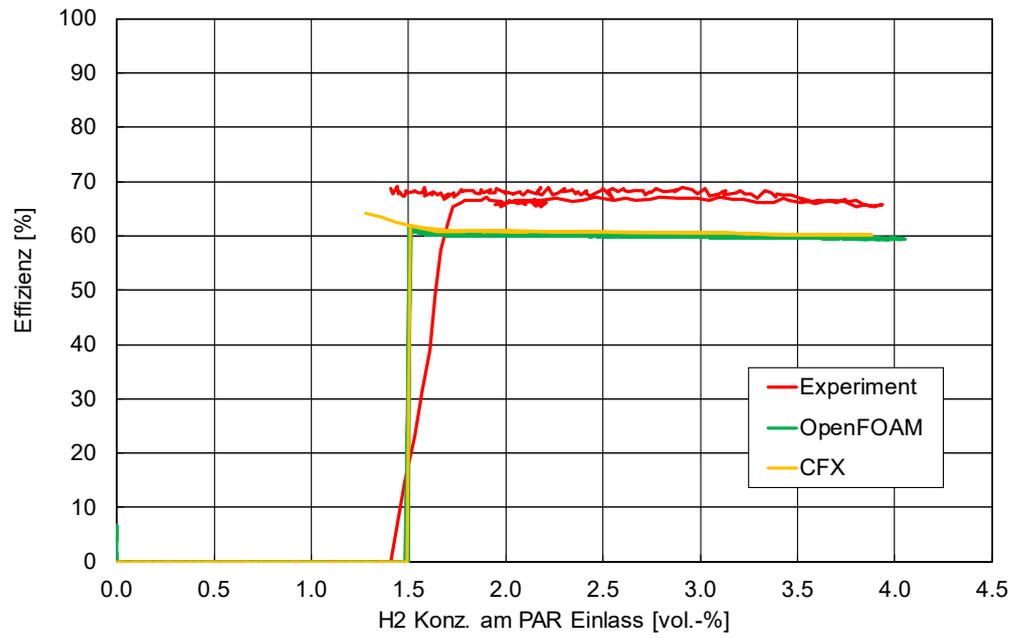


Abb. 2.155 PAR-Effizienz über H₂-Konzentration am PAR-Einlass

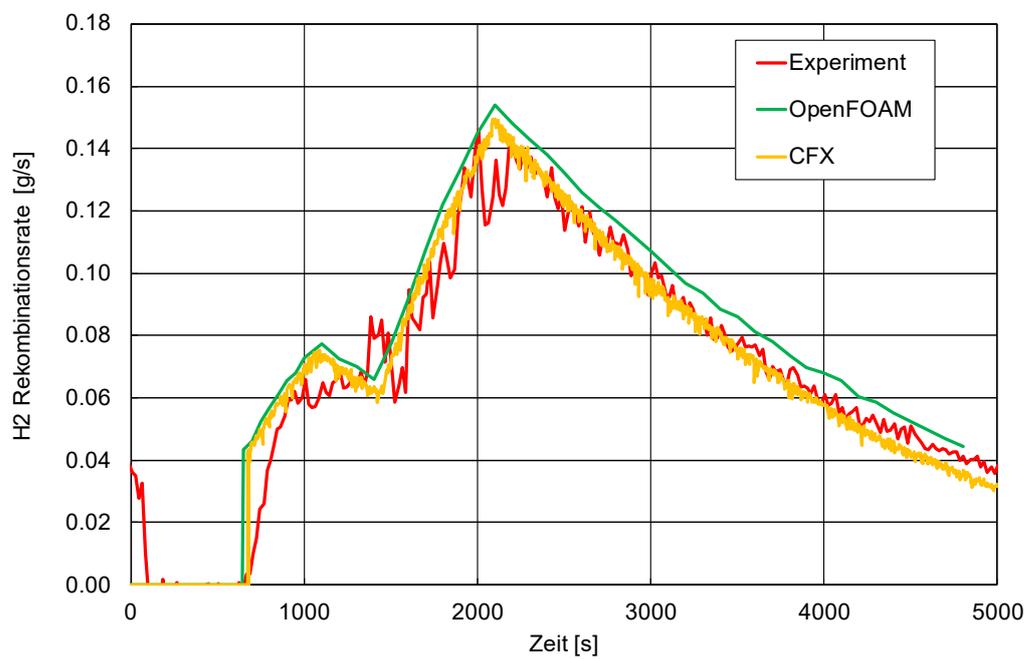


Abb. 2.156 H₂-Rekombinationsrate im Zeitverlauf

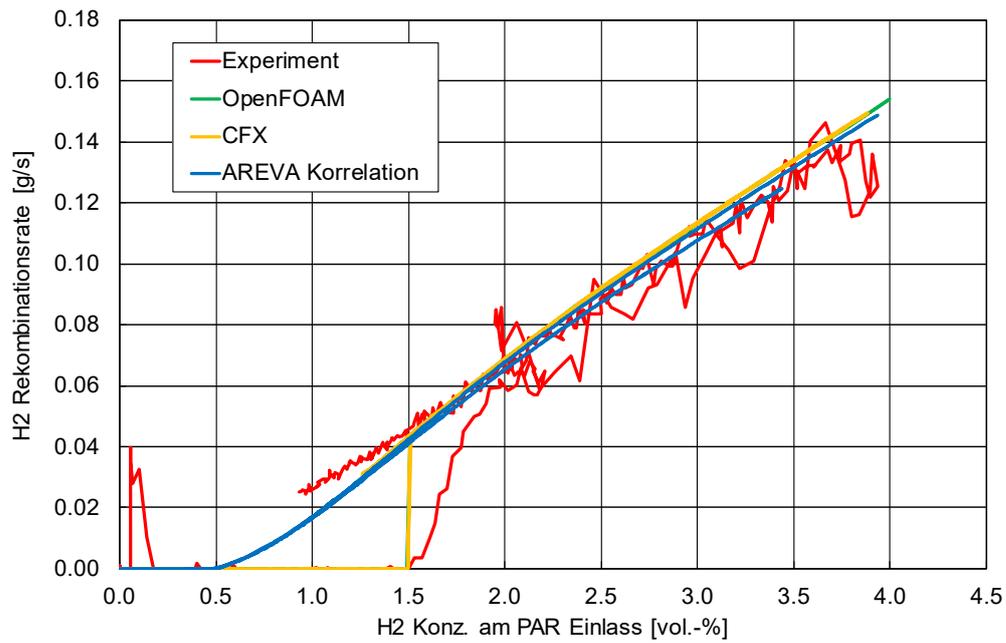


Abb. 2.157 H₂-Rekombinationsrate über H₂-Konzentration am PAR-Einlass

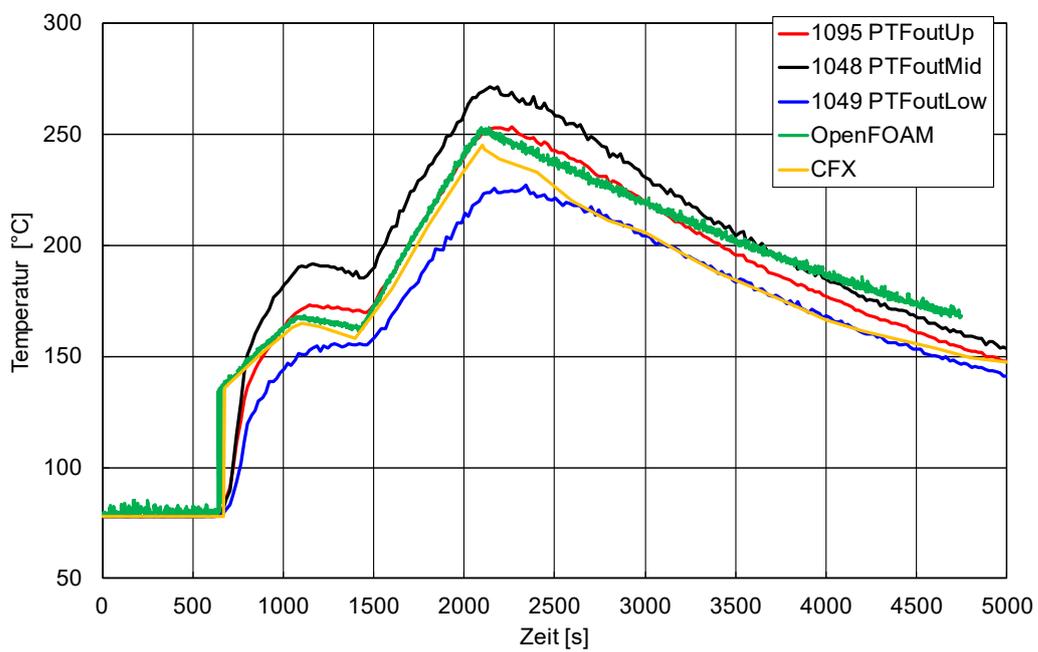


Abb. 2.158 Temperaturen am PAR-Auslass im Zeitverlauf

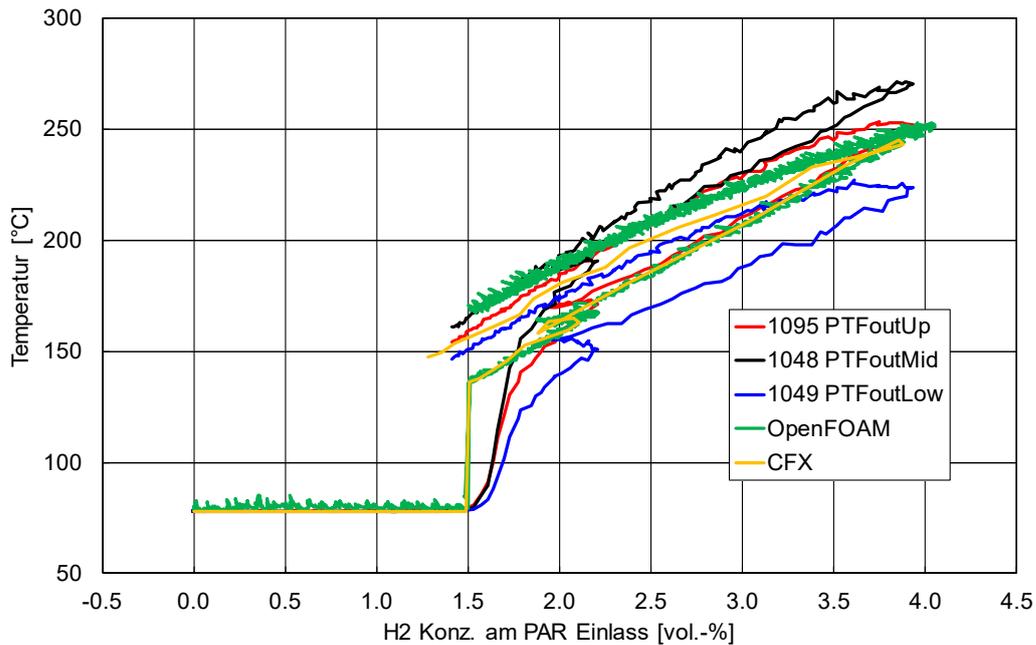


Abb. 2.159 Temperaturen am PAR-Auslass über H₂-Konzentration am PAR-Einlass

2.4.6 Zusammenfassung

Im vorliegenden Arbeitspaket wurde ein PAR-Modell für OpenFOAM entwickelt und anhand mehrerer Testfälle und zweier Experimente (THAI HR-5 und HR-43) validiert. Das PAR-Modell wurde als getrenntes „recombiner“-Modul entwickelt, das mit Hilfe von code-dFixedValue-Randbedingungen eingebunden werden kann.

Die Testfälle zeigen, dass die unterschiedlichen Korrelationen (Effizienz, Rekombinationsrate, PAR-Wände, Sauerstoffarmut) korrekt implementiert wurden. Bei der Nachrechnung der zwei THAI-Experimente zeigt sich insgesamt eine gute Übereinstimmung, sowohl mit den experimentellen Daten als auch mit den CFX-Ergebnissen. Die erfolgreiche Simulation von HR-43 zeigt, dass das PAR-Modell auch für einen PAR in Gegenströmung erfolgreich angewendet werden kann.

Im späteren Unfallverlauf kann durch Schmelze/Beton-Wechselwirkung neben H₂ auch CO gebildet werden. Die hier modellierten passiven autokatalytischen Rekombinatoren sind auch in der Lage, CO mit O₂ zu CO₂ zu rekombinieren. Daher sollte das implementierte PAR-Modell in Zukunft entsprechend erweitert werden. Je nach Anwendungsfall können noch zusätzliche Erweiterungen (z. B. um den Einfluss von Aerosolen oder Wassertropfchen /SCH 17/) notwendig werden.

3 AP2 Koordinierung der Zusammenarbeit mit Partnern des CFD-Verbundes zu OpenFOAM

3.1 Nicht-technische Randbedingungen und andere Entwicklungen

Zum Zeitpunkt der Angebotserstellung für dieses Projekt wurde davon ausgegangen, dass die auf OpenFOAM basierenden Entwicklungen der verschiedenen im Rahmen der Reaktorsicherheitsforschung in Deutschland öffentlich geförderten Institutionen auf Basis der Bedingungen der GNU GPL Version 3 /FSF 07/ untereinander ausgetauscht werden können. Der Austausch enthält zum einen den unter GPL stehenden Quellcode der Entwicklungen von beteiligten Institutionen. Zum anderen sollte der Austausch auch weitere Informationen wie Datensätze für Verifizierungs- und Validierungsrechnungen und experimentelle wie numerische Vergleichsdaten umfassen. Diese Informationen sind notwendig, um den Code perspektivisch in kerntechnischen Genehmigungsverfahren nutzen zu können (siehe Anforderungen in SiAnf /SIA 15/ und IAEA SSG-2, Rev. 1 /IAEA 19/). Diese zusätzlichen Eingabedatensätze und Vergleichsdaten fallen nicht unter die GPL, so dass für den Austausch Vereinbarungen zwischen den Kooperationspartnern angestrebt wurden.

Da verschiedene Institutionen entsprechende Modelle und Solver entwickelt haben und auch aktuell entwickeln, wurde die GRS im Rahmen dieses Projekts beauftragt, diese Entwicklungen, soweit sie Fragestellungen zu Strömungen in Sicherheitsbehältern von Kernkraftwerken betreffen, zu sammeln und zusammen mit ihren eigenen Entwicklungen den Partnern des sogenannten CFD-Verbunds zur Verfügung zu stellen.

Im Arbeitspaket 2 dieses Projekts waren verschiedene Arbeiten zur Koordinierung der Zusammenarbeit mit den Partnern vorgesehen.

Leider stellte es sich im Laufe der Projektbearbeitung heraus, dass die mit diesem Arbeitspunkt verbundenen rechtlichen Probleme schwer zu lösen waren. Ein erster Versuch, eine bilaterale Vereinbarung zwischen der GRS und dem Forschungszentrum Jülich zur Kooperation abzuschließen, wurde seit 2018 zwischen beiden Organisationen diskutiert. Hintergrund waren die Fortschritte des FZJ bei der Erstellung des containmentFOAM Pakets /KEL 20/. Es stellte sich dann jedoch Anfang 2020 heraus, dass auf Grundlage der für die GRS geltenden Randbedingungen ein Abschluss der bilateralen Vereinbarung unwahrscheinlich wurde. Eine weitere Bewertung der rechtlichen Rahmenbedingungen durch die GRS hat dann dazu geführt, dass die GRS den Auftraggeber

BMW i in 2020 offiziell um eine Ausnahme von den für dieses Vorhaben geltenden Nebenbedingungen zum Rahmenvertrag zwischen BMW i und GRS gebeten hat, um eine Weitergabe von OpenFOAM-Entwicklungen durch die GRS unter den Bedingungen der GPL zu erlauben. Nach Projektende hat der Auftraggeber gegenüber der GRS erklärt, dass dieser Weitergabe seitens des BMW i keine Bedenken entgegenstehen. Die konkrete vertragsrechtliche Umsetzung erfolgte erst nach Ende des Projekts. Verzögerungen bei der Klärung dieser Randbedingungen sind auch auf Einschränkungen durch die SARS-CoV-2-Pandemie zurückzuführen.

Vor diesem Hintergrund konnten die in diesem Arbeitspunkt vorgesehenen Arbeiten, die über die regulären Verbundtreffen, den dort üblichen Präsentationen und Diskussionen sowie Veröffentlichungen auf Konferenzen und Zeitschriften hinausgingen, nicht wie geplant durchgeführt werden. Dies betraf insbesondere den Austausch von Quellcode für die von den Partnern und der GRS entwickelten neuen oder erweiterten Modelle und Solver sowie die Freischaltung des vorhandenen externen GitLab-Servers der GRS als Kooperationsplattform für die Partner.

Nachdem absehbar war, dass trotz der Verlängerung der Projektlaufzeit eine Umsetzung der Aktivitäten zum Austausch von Quellcode und zum Aufbau einer Kooperationsplattform nicht wie vorgesehen durchgeführt werden konnten, erfolgte ab September 2020 eine Neuausrichtung der Arbeiten in AP2 hin zu der Erstellung von Strategiepapieren für die Weiterentwicklung von OpenFOAM für das Containment und den Kühlkreislauf. Diese Papiere wurden auf Basis des aktuellen deutschen kerntechnischen Regelwerks /SIA 15/ erstellt und enthalten eine Priorisierung der zu implementierenden Modelle, die möglicherweise in zukünftigen Projekten im Rahmen der Reaktorsicherheitsforschung entwickelt werden könnten /SCH 21a/, /PAP 21/.

Im folgenden Abschnitt werden die Arbeiten beschrieben, die unter diesen Randbedingungen im Rahmen von AP2 des Projekts RS1562 durchgeführt wurden.

3.2 Durchgeführte Arbeiten

3.2.1 Pflege einer OpenFOAM-Version für Modelle zur Simulation containmentrelevanter Fragestellungen und regelmäßige Umstellung auf eine ausgewählte neue Basisversion

OpenFOAM /THE 20/, /OPE 21/ ist kein einzelnes Programm oder Solver für Strömungssimulationen, sondern eine Sammlung verschiedenster Bibliotheken, in denen Modelle z. B. zum Verhalten von Strömungen bei unterschiedlichen Bedingungen implementiert sind. Es enthält auch weitere Bibliotheken wie z. B. zur Behandlung unstrukturierter Gitter oder zur Durchführung von Parallelrechnungen. Außerdem sind Solver enthalten, die für ausgewählte Strömungsbedingungen die zur Simulation notwendigen Bibliotheken einbinden und entsprechende Rechnungen ermöglichen.

Sind nun Modelle für bestimmte Fragestellungen in OpenFOAM nicht vorhanden, so können diese selbst als neue Bibliotheken implementiert werden. Je nach Umfang und Tiefe der Änderungen ist es dann möglich, diese Bibliotheken entweder mit vorhandenen Solvern zu verwenden oder gegebenenfalls angepasste Solver zu entwickeln und diese zu verwenden. Eine solche Erweiterung der Eigenschaften von OpenFOAM bedeutet aber, dass sie auf einer bestimmten Version einer bestimmten Entwicklungslinie von OpenFOAM basiert. Eine Übernahme der Erweiterung für andere Versionen und insbesondere andere Entwicklungslinien kann mit einem erheblichen Aufwand verbunden sein. Um die Zusammenarbeit und den geplanten Austausch von Implementierungen zwischen den Partnern des CFD-Verbunds zu erleichtern, wurde deshalb gefordert, in diesem Projekt eine OpenFOAM-Basisversion zu definieren und zu pflegen.

Die GRS hat deshalb nach Rücksprache mit den Partnern im CFD-Verbund festgelegt, dass die Entwicklungen zur Simulation des Strömungsverhaltens im Sicherheitsbehälter auf Basis der Entwicklungslinie der OpenFOAM-Foundation durchgeführt werden sollen. Diese Entscheidung beruhte auf verschiedenen Gründen: Diese Entwicklungslinie wurde bei der GRS bereits für Simulationen von Strömungen des Kühlkreislaufes eingesetzt. Soweit bekannt, nutzten auch andere Mitglieder des CFD-Verbunds diese Entwicklungslinie. Außerdem war sie zum Zeitpunkt des Projektbeginns die am längsten aktive gepflegte Entwicklungslinie.

Die OpenFOAM-Foundation stellt sowohl den Source-Code wie auch den für verschiedene Linux-Distributionen kompilierten Code zum Download bereit. Deshalb war es nicht

notwendig, dass die GRS selbst eine Basisversion von OpenFOAM verteilt. Es reichte, die entsprechende Version der OpenFOAM-Foundation zu bestimmen.

Die laut Projektbeschreibung zu verteilende OpenFOAM-Version bestünde somit aus dem Source-Code, einer Sammlung von Modellen und gegebenenfalls Solvern oder anderen Werkzeugen, die nicht in der von der OpenFOAM-Foundation bereitgestellten Version enthalten wären und die von der GRS oder anderen Mitgliedern des CFD-Verbunds entwickelt worden wären.

Die OpenFOAM-Foundation veröffentlicht jedes Jahr, meist im Juli, eine neue Version ihrer Entwicklungslinie. Deshalb wurde die den Entwicklungen der GRS zugrundeliegende Version regelmäßig angepasst, insbesondere dann, wenn Modelle betroffen waren, die für Strömungen im Sicherheitsbehälter relevant sind. Die derzeitige Referenzversion ist OpenFOAM Version 9 /OPE 21/.

Für den Code-Austausch im Nachfolgervorhaben müssen die Codes zum Zeitpunkt des Austausches, also z. B. durch Einbringen auf den von der GRS betriebenen GitLab-Server, mit der jeweilig als Basisversion spezifizierten Version der Foundation-Entwicklungslinie kompatibel sein. Nach Übernahme der Entwicklungen durch die GRS wären die Entwicklungen bei einem Versionswechsel, ihrer Priorität folgend, entsprechend anzupassen. Im aktuellen Vorhaben wurden diese Anpassungen nur an den von der GRS selbst entwickelten Modellen und Solvern vorgenommen.

Zu Beginn des Projekts wurde auf der damals aktuellen Version von OpenFOAM aufgesetzt: OpenFOAM 5.0 /OPE 17/. Während der ersten Entwicklungen wurde die nächste Version von OpenFOAM (6) veröffentlicht, die insbesondere Änderungen bzw. Erweiterungen für Simulationen des Wärmetransports zu und in Wänden enthielt /OPE 17/, /AUN 19/, /OPE 18/. Deshalb wurde direkt nach Erscheinen der Version 6 diese als Basisversion ausgewählt. Eine weitere Aktualisierung bzw. Anpassungen des von der GRS entwickelten Codes wurde kurz vor Erscheinen der Version OpenFOAM 9 /OPE 21/ am Ende des Projekts durchgeführt.

Die Nutzung und Integration der Arbeiten aus Forschungsvorhaben anderer CFD-Verbundteilnehmer konnte somit auch nur durch die Neuimplementierung der in entsprechenden Veröffentlichungen bekanntgemachten Korrelationen oder Algorithmen erfolgen. Ein Beispiel dafür ist die Korrektur der Energiegleichung um Beiträge durch die

Diffusion von Gaskomponenten, die vom FZJ auf dem OpenFOAM-Workshop 2019 veröffentlicht wurde /KUM 19/

3.2.2 Bereitstellung einer Plattform zum Austausch von Code und Daten sowie zur Kommunikation

Seit Jahrzehnten ist es Standard in der Softwareentwicklung, den Source-Code mit Hilfe von Versionsverwaltungssystemen zu bearbeiten. Diese Systeme ermöglichen es z. B., jede beliebige ältere Version einer Source-Code-Datei aufzufinden und mit der aktuellen oder einer anderen älteren Version zu vergleichen. Auch wird dokumentiert, welcher Entwickler welche Änderungen vorgenommen hat. Da eine Version innerhalb des Systems immer einen bestimmten Zustand für alle enthaltenen Dateien enthält, ist es damit auch möglich, einen konsistenten Zustand aus der Vergangenheit wiederherzustellen. Außerdem ermöglicht es das parallele Arbeiten von mehreren Entwicklern am selben Projekt, da Konflikte beim Zusammenführen der Arbeiten automatisch erkannt werden.

Seit den ersten Entwicklungen mit Hilfe von OpenFOAM innerhalb der GRS, damals ausschließlich für Strömungen im Kühlkreislauf, vor ca. 10 Jahren wurde deshalb ein Versionsverwaltungssystem für die Arbeiten eingesetzt. Zunächst wurde dazu die Plattform „TeamForge“, die von allen GRS-Softwareprojekten eingesetzt werden sollte, verwendet. Als Werkzeug für die Versionsverwaltung wurde dabei Subversion verwendet. Als sich abzeichnete, dass ein Austausch von Source-Code mit anderen Organisationen durchgeführt werden sollte, wurde zur Versionsverwaltung auf das Werkzeug git /GIT 21a/ gewechselt.

Zur Jahresmitte 2020 ersetzte die GRS die Plattform „TeamForge“ durch „GitLab“ /GIT 21b/. In diesem Zusammenhang wurden zwei GitLab-Server eingerichtet: einer für die Softwareentwicklung innerhalb der GRS und ein zweiter für den Austausch von Code mit externen Partnern. Die im Abschnitt 3.2.1 beschriebene OpenFOAM-Version, bestehend aus den von der GRS implementierten Modellen für Strömungen im Sicherheitsbehälter, wird nun auf beiden Servern vorgehalten. Sobald neue oder fortgeführte interne Entwicklungen einen qualitätsgesicherten Stand erreichen, werden sie auf den externen Server gespiegelt. Sobald die in Abschnitt 3.1 dargestellten rechtlichen Randbedingungen hergestellt sind, können diese entwickelten Modelle interessierten Partnern des CFD-Verbundes zur Verfügung gestellt werden. Es müssen dazu nur die entsprechenden Nutzerkonten auf dem externen Server für die Projektpartner erstellt und das OpenFOAM-Projekt für diese freigeschaltet werden.

Die Kommunikation zwischen verschiedenen Softwareentwicklern eines Projekts wird seit Einführung der Plattform GitLab über dessen „Issue“-System abgewickelt. Dieses erlaubt nicht nur die Bearbeitung von Programmierfehlern, sondern auch die Planung von Weiterentwicklungen und ähnliches. Es unterstützt damit die Entwicklungsprozesse für Softwaretools, die in kerntechnischen Genehmigungsverfahren eingesetzt werden sollen, entsprechend den von der GRS definierten Qualitätsanforderungen /GRS 21/, indem es geeignete Hilfsmittel nicht nur für die Entwicklung, sondern auch für die Dokumentation von Verifikation und Validierung (vgl. auch SiAnf §5 /SIA 15/ und IAEA SSG-2, Rev. 1 /IAEA 19/) zur Verfügung stellt. Seit Mitte 2021 kann über den GitLab-Server der GRS zusätzliche Rechenkapazität für Verifikationstests (wie z. B. Kompilierbarkeit, Unit-Tests, Regressionstests gegen einfache Testbeispiele) angesprochen werden. Entsprechend steht mit dem externen GitLab-Server auch ein effektives Kommunikations-tool für eine potenzielle Zusammenarbeit mit den Partnern des CFD-Verbunds zur Verfügung.

Über diesen Server können auch externe Partner Code und/oder Daten der GRS zur Übernahme in zentral gepflegte Version übergeben. Über diesen Server ist dann auch nachvollziehbar, welche Beiträge wann von wem zur Verfügung gestellt wurden. Es kann über diesen Server auch der Austausch organisiert werden, z. B. wenn bestimmte Qualitätsanforderungen durch eine erste Version des übergebenen Codes noch nicht erfüllt wurden und Ergänzungen/Änderungen notwendig werden. Damit sind wichtige Einzelziele dieses Arbeitspunkts erreicht, konnten den Kooperationspartnern jedoch im Rahmen der Projektlaufzeit noch nicht verfügbar gemacht werden.

3.2.3 Regelmäßige Regressionstest, Verifikation und Validierung

Im Rahmen des ATHLET-Entwicklungsprojekts /HER 18/ wurde die Plattform „Jenkins“ in der GRS eingeführt. Diese erlaubt es, regelmäßig den aktuellen Stand einer Software aus ihrem Source-Code zu bauen und damit dann Tests durchzuführen. Im Rahmen dieses Projekts wurden solche automatischen Builds und Tests auch für die Sicherheitsbehälter-relevanten Modelle auf Basis von OpenFOAM eingeführt.

Basis für die regelmäßigen Builds und Tests ist die zugrunde liegende Version der von der OpenFOAM-Foundation veröffentlichten Entwicklungslinie. Da diese auch regelmäßige Bugfixes erhält, ist es notwendig, immer die aktuelle Version inklusiver dieser Bugfixes vorzuhalten. Dazu wird in regelmäßigen Abständen der aktuelle Source-Code von den Servern der Foundation heruntergeladen und gebaut. Zusätzlich wird auch

regelmäßig die aktuelle Entwicklungsversion der OpenFOAM-Foundation (OpenFOAM-dev) gebaut. Damit kann schon vorab geklärt werden, ob in der nächsten Release von OpenFOAM Änderungen enthalten sein werden, die zu Inkompatibilitäten führen.

Die von der GRS implementierten Modelle und Solver werden je nach Konfiguration des Jenkins-Servers entweder automatisch in regelmäßigen Abständen oder beim Hochladen von Änderungen in das Versionsverwaltungssystem neu gebaut und es werden dann automatisierte Tests durchgeführt. Es können auch unterschiedliche Entwicklungszweige gebaut werden, in denen z. B. verschiedene Entwickler gleichzeitig an unterschiedlichen Modellen arbeiten.

Die erste Aufgabe ist es dabei sicherzustellen, dass die Entwicklungen der GRS noch mit der aktuellen Version von OpenFOAM (inklusive Bugfixes) kompiliert werden können. Insbesondere bei Versionssprüngen der Foundation-Version kann es zu Inkompatibilitäten kommen.

In zweiten Schritt werden verschiedene Simulationen durchgeführt, bei denen die von der GRS implementierten Modelle verwendet werden.

Die erste Simulation ist ein Versuch aus der Conan-Versuchsreihe (siehe AP1, 2.2.7), bei dem das Wandkondensationsmodell zum Einsatz kommt. Für diesen Versuch werden wichtige Ergebnisse durch ein automatisches Postprocessing übersichtlich aufbereitet (siehe z. B. Abb. 3.1) und können auf dem Jenkins-Server von den Entwicklern betrachtet bzw. von dort heruntergeladen werden.

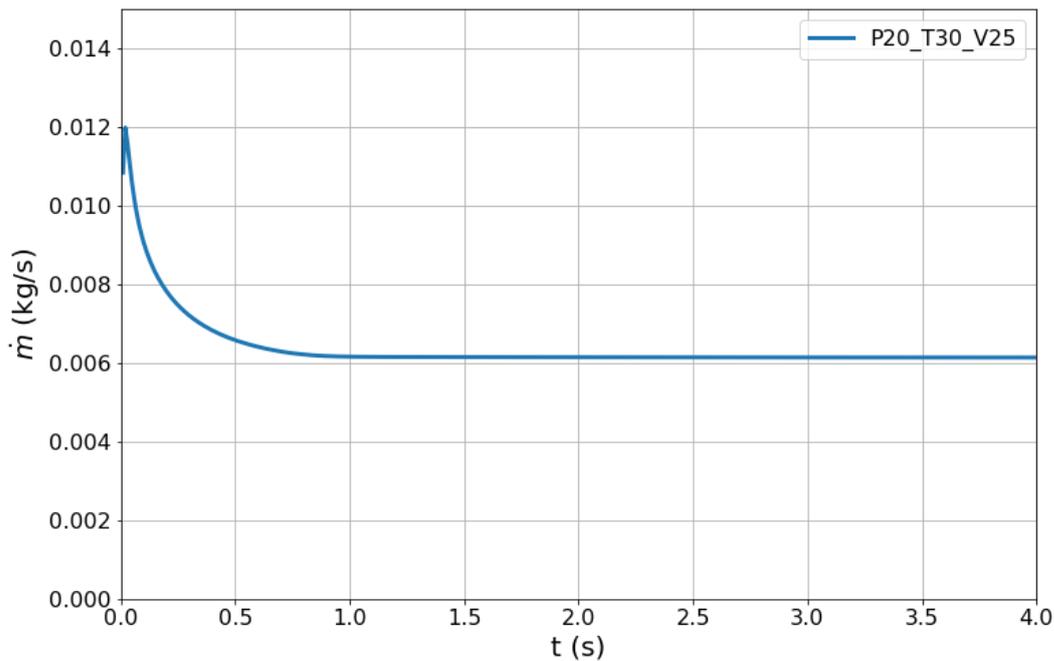


Abb. 3.1 Automatisch generiertes Postprocessing-Bild für die Simulation eines Conan-Versuchs (integrale Kondensationsrate auf der Wand über die Zeit)

Technisch wurde dies umgesetzt, indem die für das Postprocessing notwendigen Daten schon während der Laufzeit der Simulation durch sogenannte „Function Objects“ ermittelt und abgespeichert werden. Diese Daten werden dann in einem Python-Notebook eingelesen und visualisiert. Wie in Abb. 3.2 demonstriert, können damit Grafiken erstellt werden, in denen eine Bewertung der Ergebnisse gegenüber Grenzkurven enthalten ist.

In einer zweiten Simulation wird die Diffusion von zwei Gaskomponenten ineinander berechnet, ausgehend von einem Volumen, in dem die beiden Gase zu Beginn der Simulation räumlich getrennt sind. Dieses System hat eine analytische Lösung, mit der die Simulationsergebnisse verglichen werden können.

Für dieses Beispiel wurden auch automatisierte Tests implementiert. Dazu werden wieder Daten während der Simulation abgespeichert, z. B. die Konzentration der einzelnen Gaskomponenten an ausgewählten Orten. Die vorhandenen Python-Testskripte für ATHLET /HER 18/ wurden als Basis verwendet, um auch die Ergebnisdateien von OpenFOAM automatisch zu verarbeiten und mit vorgegebenen Grenzkurven zu vergleichen.

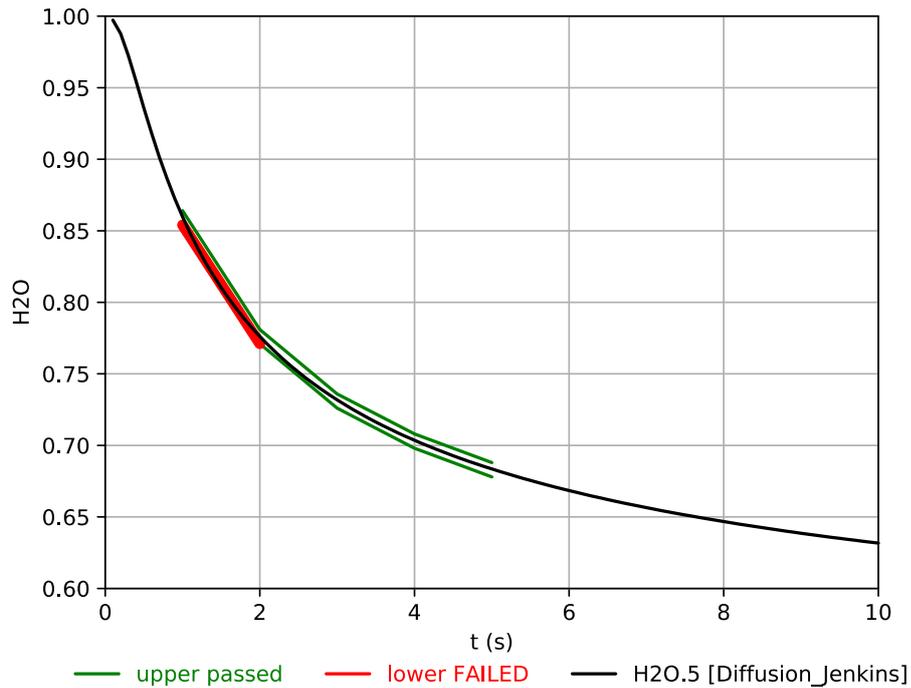


Abb. 3.2 Beispiel für automatisierten Vergleich eines OpenFOAM-Ergebnisses mit vorgegebenen Grenzkurven (Konzentration von Wasserdampf über die Zeit an einem vorgegebenen Ort)

In Abb. 3.2 wird die Wasserdampfkonzentration an einem vorgegebenen Ort über die Zeit mit einer oberen und unteren Grenzkurve verglichen. Die Grenzkurven wurden mit Hilfe der analytischen Lösung für 5 Zeitpunkte ermittelt. Zwischen diesen Zeitpunkten werden die Grenzkurven linear approximiert. Wie in Abb. 3.2 zu sehen ist, verlaufen die Ergebnisse von OpenFOAM immer unterhalb der oberen Grenzkurve. Die untere Grenzkurve wird aber zwischen den ersten beiden Stützstellen verletzt. Dies ist bedingt durch eine zu niedrige zeitliche Auflösung der Grenzkurve. Die Verletzung der Grenzkurve könnte vermieden werden, indem die zeitliche Auflösung für die Stützstellen der Grenzkurve erhöht würden. Das Beispiel ist hier aber abgebildet, um zu demonstrieren, welche Information die Entwickler im Falle von Grenzkurvenverletzungen erhalten. In der Grafik werden automatisch alle Segmente einer Grenzkurve markiert, für die eine Verletzung detektiert wurde. Außerdem werden am Ende aller Testläufe die Ergebnisse der Tests zusammengefasst. Tritt mindestens ein Testfehler auf, so wird der gesamte Jenkinslauf als instabil bewertet. Ziel der Entwicklung muss es deshalb sein, dass alle Testfehler beseitigt werden und sich die Builds in einem „stabilen“ Zustand befinden.

Im Rahmen dieses Projekts wurde Infrastruktur geschaffen, um automatisiert regelmäßige Regressionstests sowie Verifikation- und Validierungsrechnungen durchzuführen.

Es wird zukünftig Aufgabe der Modellentwickler sein, zusammen mit dem Source-Code ihrer Implementierung Datensätze für diese Rechnungen sowie Vergleichswerte für Grenzkurven zu liefern. Dadurch wird es möglich sein, z. B. schnell Inkompatibilitäten mit neuen Versionen von OpenFOAM oder beim Zusammenspiel verschiedener Modelle zu detektieren.

3.2.4 Ergänzung der Codeversion je nach Entwicklungs- und Validierungsfortschritt um relevante Modelle

Wie in 3.2.2 beschrieben, erfolgt die Implementierung der Modelle mit Hilfe des Versionsverwaltungssystems git. Die Aufnahme von neuen oder erweiterten Modellen in die offiziell qualitätsgesicherte Version erfolgt durch eine Übernahme dieser Modelle aus den jeweiligen Entwicklungszweigen in einen speziellen Releasebranch. Dies ist im Rahmen dieses Projekts mehrfach, z. B. nach Abschluss der Implementierung des Wand- und des Volumenkonversionsmodells geschehen.

3.2.5 Anwendungssupport sowie Bearbeitung von Service Requests von den Partnern des CFD-Verbundes

In den Jahren 2018/2019 fand ein Austausch zwischen dem FZJ und der GRS statt, in dessen Rahmen die Modellierung und Implementierung der Diffusion von Gaskomponenten und den dadurch notwendigen Korrekturen der Energiegleichung diskutiert wurden (siehe Kapitel 2.2.2). Infolge der zuvor angesprochenen Verzögerungen bei der Herstellung der rechtlichen Rahmenbedingungen konnte der Anwendungssupport nur in einem sehr begrenzten Umfang durchgeführt werden.

3.2.6 Organisation von (halb)jährlichen CFD-Verbundmeetings, Organisation des Erfahrungsrückflusses

In allen Jahren, während das Projekt lief, fanden die CFD-Verbundmeetings entweder in Garching bzw. wegen der Beschränkungen während der COVID-19-Pandemie online statt. Die GRS präsentierte dabei den jeweils aktuellen Stand der Koordinierungsarbeiten, die im Rahmen dieses Projekts durchgeführt wurden /ALE 20/, /HER 18/, /HER 19/, /WIE 20/, /SCH 21b/. Dort wurden auch zwischen Mitarbeitern der verschiedenen Institutionen die Erfahrungen mit der Implementierung und Anwendung von verschiedenen Modellen ausgetauscht.

3.2.7 Pläne und Richtlinien

Aufgrund des im Verhältnis zu anderen Softwareprojekten der GRS sehr kleinen Umfangs der Softwareentwicklungsarbeiten auf Basis von OpenFOAM, des nicht absehbaren Einsatzes der Entwicklungen in Aufsichts- oder Genehmigungsverfahren und des während des Projekts absehbar nicht stattfindenden Austauschs von Source-Code zwischen den Partnern des CFD-Verbunds wurde die Erstellung der verschiedenen geplanten Pläne und Richtlinien, z. B. Programmierrichtlinie, QS-Plan usw. nicht durchgeführt.

Die OpenFOAM-Foundation stellt auf ihrer Website selbst Richtlinien /OPE 16/ für den Source-Code zur Verfügung, der von ihr in die Hauptentwicklungsversion übernommen werden soll. Diese enthalten nicht nur Hinweise zum „Schreibstil“ des Source-Codes, sondern auch Regeln für die Implementierung von Methoden und Klassen sowie zur erstellenden Dokumentation. Diese dienen der GRS für die eigenen Implementierungen während dieses Projekts. Weiterhin wurden die internen Qualitätsstandards der GRS /GRS 21/ angewendet.

3.3 Vorschläge für die Weiterentwicklung von OpenFOAM im CFD-Verbund

Die Koordination der Arbeiten des CFD-Verbunds umfasst auch die Identifikation und Priorisierung von Weiterentwicklungsbedarf an OpenFOAM für eine Anwendung als Simulationswerkzeug in kerntechnischen Verfahren. Nachdem die vorgesehene Kooperation über den Austausch von Quellcode und weiteren Daten mit externen Partnern nicht wie vorgesehen möglich war, hat die GRS dazu einen technischen Bericht für das Containment erstellt und mit den Partnern im CFD-Verbund diskutiert und abgestimmt /SCH 21a/. Dieser wird durch einen analogen technischen Bericht für den Reaktorkühlkreislauf ergänzt /PAP 21/.

Für beide Berichte hat die GRS die Ereignislisten für DWR und SWR aus dem deutschen kerntechnischen Regelwerk /SIA 15/ dahingehend ausgewertet, für welche Störfallsequenzen CFD-Methoden in einem Nachweisfahren sinnvoll eingesetzt werden können. Stellungnahmen der RSK zu Containment-relevanten Fragestellungen wurden berücksichtigt. Dies wurde ergänzt um weitergehende Überlegungen vor dem Hintergrund moderner Reaktorkonzepte mit passiven Sicherheitssystemen sowie um relevante Fragestellungen für Unfallszenarien. Daraus wurden von der GRS Themen, relevante Phänomene und Priorisierungen für das Containment und den Kühlkreislauf abgeleitet.

Details können /SCH 21a/ und /PAP 21/ entnommen werden. Im folgenden Abschnitt wird kurz die tabellarische Darstellung der Ergebnisse aus den beiden technischen Berichten präsentiert.

3.3.1 Priorisierung für das Containment

Die folgende Tabelle zeigt eine Priorisierung von Themen und Phänomenen, für die aus Sicht der GRS OpenFOAM im Rahmen der nuklearen Sicherheitsforschung für den Containmentbereich von Leichtwasserreaktoren qualifiziert werden sollte. Für andere Anlagentypen müsste die Priorisierung entsprechend angepasst werden.

Tab. 3.1 Priorisierung von Themen und relevanten Phänomenen für das Containment

Themen und relevante Phänomene	Sicherheitstechnische Relevanz	Bedarf für Modellentwicklung und Validierung	Anmerkung
Turbulenter Wärme- und Stofftransport	Hoch		
Erzwungene Konvektion		Niedrig	Bereits in vielen CFD-Anwendungsgebieten umfangreich erforscht
Misch- und freie Konvektion		Hoch	Dominante Strömungsform nach Blowdown, eng mit Turbulenzmodellierung verknüpft, Interaktion mit passiven Sicherheitssystemen
Mehrkomponentengasgemische / Stoffdaten		Niedrig	Weitgehend seit OpenFOAM-8 gelöst, Modellverbesserungen von unterschiedlichen Nutzern (FZJ, GRS) implementiert
Turbulenzmodellierung		Hoch	Bislang überwiegend standard-SST, Einschränkung aufgrund isotroper Modellierung, Modellverbesserung insbesondere zur besseren Abbildung freier und Mischkonvektion notwendig
Auftriebsturbulenz		Hoch	Bislang überwiegend auf Basis der Simple Gradient Diffusion Hypothesis, Modellverbesserung notwendig
Wandfunktionen		Hoch	Modellverbesserung insbesondere im Hinblick auf Misch- und freie Konvektion notwendig

Themen und relevante Phänomene	Sicherheitstechnische Relevanz	Bedarf für Modellentwicklung und Validierung	Anmerkung
Bildung und Auflösung von Leichtgasschichten		Hoch	Relevant bzgl. H ₂ -Risiko, Effizienz von passiven Sicherheitssystemen, Rückkopplung mit Turbulenzmodellierung, Mehrkomponentengemische, Wärmestrahlung, Kondensation, kontinuierliche Validierung erforderlich
Thermische Wärmestrahlung	Hoch	Hoch	In OpenFOAM-8 implementierte Modelle benötigen Modellverbesserungen, umfangreiche Arbeiten hierzu am FZ Jülich (containmentFOAM)
Wärmeaustausch Gas / Strukturen (CHT)	Hoch	Niedrig	multiRegionFramework vorhanden, Validierung hinsichtlich nicht-konformer Interfaces erforderlich, Modellverbesserung erfolgt über Wandfunktionen (siehe oben)
Wärmetransport innerhalb von Strukturen	Hoch	Niedrig	Vernetzungsrichtlinien für Strukturen erforderlich
Wandkondensation	Hoch		
Berechnung Kondensationsrate und des Wiederverdampfens von Kondensat		Hoch	In OpenFOAM-8 kein für Containment-Anwendungen geeignetes Modell vorhanden, Modellentwicklungen hierzu in verschiedenen Instituten (containmentFOAM (FZJ), GRS) die auf Transportansatz beruhen, Weiterentwicklung und Validierung notwendig, diese ist eng mit Weiterentwicklung der Wandfunktionen verknüpft
Bildung eines Wasserfilms, Abfließen des Kondensats		Mittel	containmentFOAM (FZJ): surfaceFilm Framework vorhanden, Test & Validierung, Modellverbesserung in Hinblick auf Rückkopplung mit anderen Modellen UniBW: Modellentwicklung zur Beschreibung des Ablaufverhaltens von Flüssigkeiten und zum Ablaufverhalten von Aerosolen (OpenFOAM 2.x)
Abwaschen von Spaltprodukten		Mittel	containmentFOAM: Kopplung mit Aerosolmodell mit surfaceFilm Framework erforderlich UniBW: Modellentwicklung vorhanden (siehe oben)

Themen und relevante Phänomene	Sicherheitstechnische Relevanz	Bedarf für Modellentwicklung und Validierung	Anmerkung
Volumenkondensation	Mittel / Niedrig		
Berechnung der Kondensationsrate und des Verdampfens von Tröpfchen		Mittel	Modellentwicklung in OpenFOAM am FZJ (containmentFOAM) und GRS Umfangreiche Arbeiten hierzu auch am IKE Stuttgart (Implementation in CFX)
Transport der Tröpfchen		Hoch	containmentFOAM: einphasiges Drift-Fluss-Modell vorhanden Diverse Modellerweiterungen geplant / in Entwicklung Interaktion mit anderen Modellen (Aerosol, PAR, Wärmestrahlung)
Ablagerung der Tröpfchen		Mittel	containmentFOAM: Kopplung mit surfaceFilm-Framework, Validierung erforderlich
Aerosole und Spaltprodukte	Mittel		
Transport, Ablagerung, Resuspension		Hoch	Modellierung und Validierung erforderlich Umfangreiche Arbeiten laufen hierzu am FZJ (containmentFOAM)
Modellierung der Nachzerfallswärme		Hoch	Modellierung und Validierung erforderlich
Behandlung von Edelgasen		Niedrig	Flexible Abbildung über Transportgleichung für passive Skalare Validierung erforderlich Modellierung der Nachzerfallsleistung notwendig
Pool Scrubbing (z. B. bei Abblasen in die KOKA)		Hoch	Kein Modell vorhanden
Technische Systeme			
PARs	Hoch	Mittel	Modellverbesserung / -erweiterung abhängig von PAR-Modell REKODIREKT(FZJ): Interaktion Nebel / Aerosoltransport GRS-Modell: zusätzlich Erweiterung auf Rekombination von H ₂ /CO-Gemische notwendig

Themen und relevante Phänomene	Sicherheitstechnische Relevanz	Bedarf für Modellentwicklung und Validierung	Anmerkung
Öffnen und Schließen von Strömungspfaden (z. B: Türen und Berstscheiben)	Hoch	Niedrig	containmentFOAM: Modell vorhanden, Validierung erforderlich
Berechnung von Widerstandsbeiwerten in Türen und Öffnungen	Mittel	Niedrig	Grundanwendung von CFD, reine Anwendungsaufgabe
Sprühsysteme	Mittel	Hoch	Kein Modell vorhanden, Modellentwicklung und Validierung erforderlich
Gebäudekondensatoren	Mittel	Hoch	Modellentwicklung und Validierung erforderlich, Arbeiten hierzu am FZJ und der GRS
Passive Kühlung bei SMR Konzepten	Mittel / Niedrig	Mittel / Niedrig	Siehe Kondensationsmodellierung / Gebäudekondensator, Anwendungsspezifische Validierung erforderlich
Modellierung der Strömung am Leck	Mittel / Niedrig	Hoch	Zweiphasig, Flashverdampfung, Wechselwirkung mit Kühlkreislauf erforderlich
Modellierung von Reaktionskräften	Mittel	Hoch	Modellentwicklung und Validierung erforderlich, Kopplung CSM notwendig
Modellierung der dynamischen Aspekte bei Bruchstücken und schlagenden Leitungen	Mittel	Hoch	Modellentwicklung und Validierung erforderlich, Kopplung CSM notwendig
Modellierung der Isoliermaterialfreisetzung	Mittel	Mittel	Modellentwicklung und Vergleich mit vereinfachten Verfahren, Modellübertrag nach OpenFOAM notwendig und Validierung
Partikeltransport im Sumpf (Sump Clogging)	Mittel	Mittel	Modellentwicklung und Validierung (bereits umfangreiche Arbeiten hierzu am FZ Dresden-Rossendorf) Modellübertrag nach OpenFOAM und Validierung notwendig

Themen und relevante Phänomene	Sicherheitstechnische Relevanz	Bedarf für Modellentwicklung und Validierung	Anmerkung
Wasserpools			
Strömung und Temperaturverteilung in Wasserpools (passive Wärmeabfuhr, Containmentsumpf)	Mittel	Hoch	Simulation der Strömung und Temperaturverteilung in Wasserpools „Stand-Alone“ mit OpenFOAM-RCS möglich Kopplung mit „Referenzsolver Containment“ notwendig zur Simulation von z. B. Containmentsumpf während Gasverteilungssimulation Bei komplexen Geometrien / langen Transienten vermutlich Modellvereinfachungen notwendig, um Rechenzeit praktikabel zu halten
Berechnung der zeitabhängigen Wasserstandshöhe	Mittel / Niedrig	Hoch	Modellierung und Validierung erforderlich (siehe oben)
Verdampfung, Sieden in Pools und Sümpfen	Mittel	Hoch	Modellierung und Validierung erforderlich (siehe oben)
H₂-Verbrennung			
Langsame und schnelle Flammenausbreitung, DDT, Detonation	Hoch	Hoch	Modellierung und Validierung erforderlich TU München entwickelt hierzu ddtHyCoCentralFoam als Analysewerkzeug für reaktorsicherheitsrelevante Verbrennungsphänomene, Zusammenarbeit mit UniBW
H ₂ /CO-Verbrennung	Mittel	Hoch	Modellerweiterung und Validierung erforderlich, hierzu Arbeiten im Rahmen von ddtHyCoCentralFoam-Entwicklung
Kopplung CFD / CSM (Integrität von Strukturen bei schneller Verbrennung / Detonation)	Mittel	Hoch	Modellentwicklung und Validierung erforderlich Arbeiten hierzu bei der GRS
Brand	Mittel	Mittel	Arbeiten hierzu an der Universität Magdeburg, Validierung und möglicherweise auch Modellentwicklung notwendig, Kabelbrandprodukte relevant zur Bewertung der PAR-Wirksamkeit, Aerosoltransport bzw. Verbrennungslasten

Themen und relevante Phänomene	Sicherheitstechnische Relevanz	Bedarf für Modellentwicklung und Validierung	Anmerkung
Modellierung Schmelze	Mittel / Niedrig		Kein Modell vorhanden, grundlegende Modellentwicklung und Validierung erforderlich
RDB Außenkühlung		Hoch	Detaillierte Abbildung von Siedevorgängen erforderlich → Wechselwirkung mit OpenFOAM-RCS
Schmelzeeinwirkung auf Containmentstrukturen		Hoch	Kein Modell vorhanden, grundlegende Modellentwicklung und Validierung erforderlich
Modellierung Schmelzeausbreitung		Hoch	Kein Modell vorhanden, grundlegende Modellentwicklung und Validierung erforderlich
Dampfexplosion / Fuel-Coolant-Interaction		Mittel / Hoch	Umfangreiche Arbeiten hierzu an der Universität Stuttgart vorhanden, evtl. Anbindung / Übertrag an OpenFOAM (Abstimmung mit IKE empfohlen)
Wärmeabfuhr aus Zwischenlagern und Castor-Behältern	Niedrig	Niedrig	Validierung erforderlich, evtl. Wechselwirkung mit Turbulenzmodellierung / Schichtenbildung
Leck am Transportbehälter	Mittel / Niedrig	Mittel	Validierung notwendig, geeignete Versuche benötigt. Gegebenenfalls Modellanpassung / -erweiterung notwendig
Modellierung Gasphase (siehe Turbulenter Gastransport)			Modellentwicklung analog zu Strömung / Aerosoltransport im SB, anwendungsorientierte Validierung / Erprobung erforderlich
Partikeltransport, Wechselwirkung Gasphase / Partikel			Modellentwicklung analog zu Strömung / Aerosoltransport im SB, anwendungsorientierte Validierung / Erprobung erforderlich Gegebenenfalls ergibt sich aufgrund der hohen Partikelbeladung zusätzlicher Entwicklungsbedarf
Wechselwirkung Partikel / Partikel (Stöße, Änderung der Partikelklasse)			Modellentwicklung analog zu Strömung / Aerosoltransport im SB, anwendungsorientierte Validierung / Erprobung erforderlich Gegebenenfalls ergibt sich aufgrund der hohen Partikelbeladung zusätzlicher Entwicklungsbedarf

Themen und relevante Phänomene	Sicherheitstechnische Relevanz	Bedarf für Modellentwicklung und Validierung	Anmerkung
Bestimmung geeigneter Start und Randbedingungen (Temperatur, Anzahl und Größe der Partikel, ...)			Validierung notwendig, geeignete Versuche benötigt
Siedewasserreaktoren	Hoch	Hoch	Modellentwicklung analog zu Strömung / Aerosoltransport im SB Anwendungsorientierte Validierung / Erprobung erforderlich Modellierung von für SWR typischen Systemen (KOKA) notwendig
KOKA: Modellierung von Chugging		Hoch	Modellentwicklung und Validierung erforderlich, evtl. Modellierung mit OpenFOAM-RCS
KOKA: Modellierung von Direct-Contact-Condensation		Hoch	Modellentwicklung und Validierung erforderlich, evtl. Modellierung mit OpenFOAM-RCS
LP-CFD Kopplung	Hoch		
Rückschlüsse Nodalisierung für LP		Hoch	Erste Ansätze aus C2C-Projekt (COCOSYS-CFX) bzw. an der TUM vorhanden
Absicherung empirische Parameter (Skalierbarkeit, Druckverluste, ...)			
Framework			
Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse	Hoch	Hoch	Grundlegende Arbeiten in UQ4CFD-Projekt Generalisierung, Integration in Validierungsarbeiten und weitere Entwicklung hinsichtlich Rechenzeiteffizienz erforderlich
Pre-Processing	Mittel	Hoch	Erforderlich zur Vermeidung / Minimierung von Nutzerfehlern bzw. zur effizienten Nutzung des Programms containmentFOAM: Java-basiertes Framework in Entwicklung

Themen und relevante Phänomene	Sicherheitstechnische Relevanz	Bedarf für Modellentwicklung und Validierung	Anmerkung
Solverüberwachung	Hoch	Hoch	Erforderlich zur frühzeitigen Identifikation von potenziellen Fehlern in der Simulation bzw. Bewertung der Konvergenz der Simulation containmentFOAM: Java-basierter Monitor in Entwicklung
Post-Processing	Hoch	Niedrig	Umfangreiche Möglichkeiten mit paraView gegeben Zusammenstellen von gängigen FunctionObjects (z. B. Wandwärmebilanz) oder Auswertungsskripten (z. B. Massenbilanz, Zündfähigkeit etc.) sinnvoll

3.3.2 Priorisierung für den Kühlkreislauf

Tab. 3.2 zeigt eine Priorisierung einphasiger und zweiphasiger Themen und Phänomene, für die aus Perspektive der GRS OpenFOAM im Rahmen der nuklearen Sicherheitsforschung qualifiziert werden soll. Tab. 3.3 stellt die notwendigen CFD-Modelle/-Methoden zu den relevanten Phänomenen sowie ihre Priorisierung dar. Die Simulation einiger davon erfordert die Kopplung von OpenFOAM mit weiteren Rechenprogrammen, wie z. B. System-, Neutronenkinetik oder CSM-Codes. Tab. 3.4 zeigt ihre Einsatzbereiche sowie eine Priorisierung der Kopplungsarten.

Tab. 3.2 Themen und Phänomene, für die im Rahmen der nuklearen Sicherheitsforschung OpenFOAM qualifiziert werden soll, und ihre Priorisierung für den Kühlkreislauf

Thema und relevante Phänomene	Priorität	Bemerkung
Ein- und Zweiphasenströmung im RDB		
<u>Dichte-getriebene Strömungen – Vermischung (Borvermischung, Zuschalten ausgekühlter Stränge)</u>	H	Entwicklungs- und Validierungsbedarf, hohe Relevanz der Phänomene (Naturumlauf)

Thema und relevante Phänomene	Priorität	Bemerkung
Turbulenzmodelle		Implementierung von neuen Modellen (wünschenswert ist das Reynoldsspannungsmodell (RSM), dabei Implementierung der Transportgleichungen mit Diskretisierung 2. Ordnung, anspruchsvolle Aufgabe), + Implementierung von „automatischen“ Wandfunktionen), Validierung
Einfluss variabler Stoffwerte (Dichte) auf die Turbulenz		Aktualisierung und Validierung, Buoyancy-Production- und Dissipation-Terme
<u>Ein- und Zweiphasenströmung im Reaktorkern</u>	H	
Komplexe 3D-Strömungen (Abstandhalter, Queraustausch, Engungen durch Aufquellen von Pellets, Blockierungen, Ablagerungen)		Validierungsbedarf, leider ist bei Wirbelviskositätsmodellen kein Modell (K-eps, K-om, SST usw.) deutlich besser als die anderen, aber alle nicht zuverlässig genug, daher langfristig: RSM
Blasenströmungen bei hoher Turbulenz und Scherung		Entwicklungs- und Validierungsbedarf
Wandsieden – kritischer Wärmestrom; CHF & CHT		Entwicklungs- und Validierungsbedarf
Dryout – Wandfilm + Tröpfchen Post-Dryout (PDO) Wärmeübertragung und Wiederbenetzung		Entwicklungs- und Validierungsbedarf. PDO-Wärmeübergang tritt bei einigen Transienten wie LOCA auf. Die Beschreibung des Hüllrohr-Temperaturverlaufs während des PDO-Vorgangs ist wichtig für die Beurteilung des Schädigungsgrads des Hüllrohres.
Kondensation Wärmeübergang unter Kondensation mit nicht-kondensierbaren (NC) Gasen		Hohe Relevanz bei Zweiphasenströmungen, Entwicklung und Validierung. CFD könnte einen großen Parameterbereich abdecken, das Verständnis des Wärmeübergangsprozesses mit Phasenübergang verbessert und numerische Datenbasis für die Weiterentwicklung von Modellen liefert.
FSI: BE-Biegung		Eher niedrige Priorität, PreCICE für die Kopplung mit CSM
FSI: Strömungsinduzierte Schwingungen		Gehört zu FSI, Grid-to-Rod-Fretting wichtig für die RS, PreCICE für die Kopplung mit CSM

Thema und relevante Phänomene	Priorität	Bemerkung
<u>Ein- und Zweiphasenströmung im unteren und oberen Plenum</u>	H	Strömungsverteilung am Kerneinlass wichtig für die NK
Kühlmittelvermischung		Strömungsverteilung am Kerneinlass wichtig für die NK
<u>Reflooding</u>	M	
Phasenübergang		
Dampffilm an der Wand		
<u>Isoliermaterialmaterialtransport und -ablagerung (im Not- und Nachkühlsystem sowie dem Kern)</u>	N	
Transport von Partikeln (Fasern)		Ablagerung der Fasern im Sumpf, Laplace-Framework in OpenFOAM
Ein- und Zweiphasenströmung im Primärkreis		
<u>Thermoshock-Phänomene bei Notkühlwassereinspeisung</u>	H	Relevanz: Die kalte Einspeisung kann zu Materialspannungen und -beschädigungen führen ist ähnlich wie: Vermischung im T-Stück, dazu umfangreiche Validierungen mit wandaufgelöster, wärmeleitungs-gekoppelter LES bei Uni-Stuttgart mit OF vorhanden (darauf aufbauen!), erfordert Hochleistungsrechner, ist auf niedrige Reynoldszahlen (ca. 50.000) begrenzt
Schichtung und Vermischung		
Direkte Kontakt-Kondensation		Simulationsversuche zu Druckstößen und DKK mit OpenFOAM vorhanden
Temperaturschichtung		
<u>Gegenstrombegrenzung im heißen Strang</u>	M	Kernkühlung-Beeinträchtigung (durch CCFL) im Störfall
Stratifizierte Strömungen/Strömungen mit Morphologieübergang		CFX-Modell Winterle vorhanden, Validierung mit COLLIDER-Experiment (TU-München) siehe Studienarbeit Eydner (Uni-Sutt), kann als Ausgangspunkt für Weiterentwicklung verwendet werden (Modellentwicklung nicht komplett neu anfangen!)
<u>Strömungen durch Risse (z. B. Dampferzeugerrohre) und Lecks</u>	M	

Thema und relevante Phänomene	Priorität	Bemerkung
Kritische Ausströmung (ein- und zwei-phasig)		Komplexes Thema, wichtig auch für System-Codes zweiphasig: sehr schwierig, geringe Erfolgsaussichten mit CFD (zweiphasig, kompressibel, instationär, Keimbildung, dünne Grenzschichten evtl. mit Ablöseblase im Einlaufbereich, hängt von unbekannter Detailgeometrie und von Wandrauigkeit ab, wie validieren ohne detaillierte Messungen innerhalb des Spalts?)
<u>Flashing im Primärkreislauf</u>	M	Entwicklungsbedarf
<u>Dampfeinspeisung in die Kondensationskammer</u>	N	Entwicklungsbedarf
Strömungen mit Morphologieübergang		
Direkte Kontaktkondensation		
<u>Druckhalter</u>	N	Komplexe Prozesse, für uns aber eher uninteressant
Verdampfung/Kondensation		
Blasen/Tropfenströmungen		
Druck/Füllstandänderung		Genauere Vorhersage des DH-Füllstands wichtig, da dieser als Eingangssignal für bestimmte Systeme ist
Direkte Kontaktkondensation		
Passive Sicherheitssysteme		Zukunftsorientiert (Gen III+, Gen IV, SMR)
<u>Große und innovative Wärmetauscher inkl. Dampferzeuger, Notkondensator primärseitig</u>	H	
Kondensation an der Wand und direkte Kontaktkondensation		
Strömungen mit Morphologieübergang		
Direkte Kontaktkondensation		
Sieden in komplexen Geometrien (z. B. helikale Dampferzeuger)	M-H	
Einfluss der NC-Gase auf den Stofftransport		
<u>Wasserpools als Wärmesenke (z. B. Notkondensator sekundärseitig)</u>	H	

Thema und relevante Phänomene	Priorität	Bemerkung
Thermische Stratifizierung im Pool		Turbulenz bei stabiler Schichtung stark nichtisotrop, ähnliches Problem im Containment: Auflösung oberliegender Dichteschichtung, Empfehlung: Turbulent Scalar-Flux (TSF)-Modell
Einphasige und zweiphasige Naturkonvektion		Berechnung der treibenden Kräfte; diese sind oft klein, die Turbulenz spielt eine Rolle, sowohl großräumige Strukturen als auch dünne Grenzschichten vorhanden: eher Forschungsthema, Methode einphasig: Detached-Eddy-Simulation (DES), Hochleistungsrechner erforderlich
Direkte Kontaktkondensation		Abbildung von WT-Bündeln, Zweiphasenströmung, erfolgversprechendes Forschungsthema, detaillierte Datenbasis zur Validierung erforderlich
Brennelement-Lagerbecken	M	Große Geometrien, poröses Medium, nichtisotrop!, Coarse-Mesh-CFD, Vorsicht: bei groben Gittern ist die Lösung immer gitterabhängig (für CFD nicht zu empfehlen)
Strömungen mit Morphologieübergang		
Ein- und Zweiphasenströmungen in Brennelementen / Lagergestellen		

Tab. 3.3 Phänomene, für die im Rahmen der nuklearen Sicherheitsforschung Open-FOAM qualifiziert werden soll, und ihre Priorisierung für den Kühlkreislauf

Strömungs- und Wärmeübergangsphänomene im Reaktorkühlkreislauf	Modelle/Ansätze	Entwicklung/Validierung	Priorität	Bemerkung
<u>Dichte-getriebene Strömungen</u> Einphasige und zweiphasige Naturkonvektion	Turbulenzmodell, Auftriebsmodell	E/V	H	Turbulenzmodellierung, skalenauflösende CFD-Simulationen Reflux-Condenser-Betrieb, Deborierung, PTS, alle Transienten mit Naturumlauf, siehe auch Tabelle 1 Wichtig auch zur Absicherung von System-Codes

Strömungs- und Wärmeübergangsphänomene im Reaktorkühlkreislauf	Modelle/Ansätze	Entwicklung/Validierung	Priorität	Bemerkung	
Kühlmittelvermischung und -schichtung	Turbulenzmodell, Auftriebsmodell	E/V	H	Deborierung, FD-Leitungsbruch, PTS, Transienten mit Asymmetrie, HKMP-Ausfall, s. Tabelle 1 Für System Codes im Detail nicht zugänglich	
Impinging Jets	Turbulenzmodell, Kopplung CFD-CSM	E/V	M	Erfordert fortschrittliche und skalenauflösende Turbulenzmodelle, Baffle Jetting, SGTR, Transienten mit einer Einspeisung Abdeckende Bewertung meist ausreichend, Stand der Technik für Turbulenzmodell: v2-f, Neuentwicklung muss zeigen, dass sie besser ist, dazu v2-f-Implementierung notwendig	
<u>Zweiphasenströmung</u>	Modelle zur Beschreibung der Zwischenphasenkräfte, neue Zweiphasenlöser, Simulationsverfahren (VOF usw.), Zweiphasenturbulenzmodell, Kavitationsmodell, Zwischenphasen-Wärmeübergangsmodell, CHF-Modelle und -Kriterien, Mehrphasenströmung mit NC-Gasen	E/V	Kondensation	H	Reflux-Condenser-Betrieb, Deborierung, Mitte-Loop-Betrieb, Lecks, Reflooding, RIA, ATWS, Strömungsinstabilität im SWR, s. Tabelle 1 Strömungsinstabilität beim Sieden in Behältern (Geysir-Effekt) im Ansatz modelliert und validiert (Uni-Stuttgart), Keimbildungsmodell erforderlich, nur qualitativ (Mechanismen), weit von praktischer Anwendung entfernt
Verdampfung			H		
Kavitation			N		
Flashing			N		
DNB und CHF			H		
Dryout			H		
NC-Gase			M-H		

Strömungs- und Wärmeübergangsphänomene im Reaktorkühlkreislauf	Modelle/Ansätze	Entwicklung/Validierung	Priorität	Bemerkung
Strömungsinduzierte Schwingungen (ein- und zweiphasig)	Methoden zur Kopplung von CFD- mit CSM-Codes	E/V	H	Baffle Jetting, Schwingungen im Reaktorkern und DE, Schwingungen in axialer und Querströmung, PreCICE-Schnittstelle,
Sloshing in Behältern (Erdbeben)	Methoden zur Kopplung von CFD- mit CSM-Codes	E/V	M	Schwingungen in Behältern, z. B. beim Erdbeben, höhere Relevanz für HLM-Reaktoren aufgrund der höheren Kühlmitteleichte, PreCICE-Schnittstelle

Tab. 3.4 Priorisierung verschiedener Kopplungsarten, die im Bereich der Reaktorsicherheit eingesetzt werden

Kopplungsart	Datenaustausch	Einsatzbereich	Kommentare	Priorität
System Code - CFD	1D-3D	Simulation von Anlagentransienten mit ausgeprägten, lokalen 3D-Strömungsphänomenen	ATHLET-OpenFOAM – Kopplung bereits für einphasige und mehrphasige Strömungen von der GRS realisiert. Weiterentwicklungsbedarf für Zweiphasenströmungen; Validierung notwendig	H
Neutronenkinetik - CFD	3D-3D	Detaillierte Simulation des Kernverhaltens unter Berücksichtigung von 3D-Strömungs- und Neutronenkinetikphänomenen	Wichtig für Transienten mit mehrdimensionalen Strömungen und Rückkopplung von der NK. HZDR hat Interesse an der Entwicklung der Kopplung OpenFOAM - DYN-3D bekundet	H
CFD - CSM	3D-3D	Detaillierte Simulation von Fluid-Struktur-Wechselwirkung	Uni-Stuttgart realisiert den ersten Schritt mit Kopplung nur mit Wärmeleitung in der festen Struktur, auch mit wand aufgelöster LES. Arbeiten auf EU-Ebene (NRG) bereits durchgeführt, s. auch Pressure Fluctuation-Model von NRG zur Berücksichtigung von Fluktuationen in FSI mit URANS-Simulationen, Entwicklungslinie Extend sollte FSI-Möglichkeiten haben, jedoch funktionieren hauptsächlich die Tutorials, RUB führt	H

Kopplungsart	Datenaustausch	Einsatzbereich	Kommentare	Priorität
			FSI-Simulationen mit OF- Foundation und Calculix: beide Rechenprogramme mit Pre- CICE-Schnittstelle gekoppelt, numerische Schwierigkeiten vorhanden.	

3.4 Zusammenfassung, Ausblick und Empfehlungen

Die Verzögerungen bei der Herstellung der rechtlichen Rahmenbedingungen für eine Kooperation mit externen Partnern zur Entwicklung der open source software OpenFOAM verdeutlichen, dass für solche Vorgänge eine gründliche Abklärung mit dem Auftraggeber und den möglichen Projektpartnern schon vor Antragsstellung notwendig ist. Die in diesem Vorhaben erreichten Fortschritte bilden eine belastbare Grundlage dafür, dass in zukünftigen Vorhaben eine Kooperation mit deutschen Partnern umgesetzt werden kann. Neben dem Quellcode-Austausch, der durch die Bedingungen der GPL umfassend geregelt ist, müssen jedoch für die praktische Arbeit weitere rechtliche Fragen geklärt werden, unter anderem zu Haftungsabgrenzung, Verwertungsrechten und Informationspflichten. Dies betrifft u. a. Simulationsmodelle, Berichte oder Experimentaldaten. Die derzeitigen Diskussionen mit den Partnern der GRS, auch zu den von HZDR koordinierten Arbeiten zum Kühlkreislauf, werden daher weitergeführt und abgeschlossen.

Andererseits wurden erfolgreich Erfahrungen und Hinweise zu Implementierungen von OpenFOAM-Modellen zwischen Experten der GRS und Experten von CFD-Verbundpartnern ausgetauscht, ohne dass dafür der Austausch des eigentlichen Source-Codes notwendig war (siehe Abschnitt 3.2.5). Dies illustriert das Potenzial, das mit einer engeren Kooperation erschlossen werden kann.

Insgesamt sind in RS1562 die folgenden wichtigen Fortschritte bezüglich der Koordination von OpenFOAM-Arbeiten zum Containment erreicht worden:

- Absicherung der vertraglichen Grundlagen für eine Kooperation von GRS und Partnern des deutschen CFD-Verbundes durch Quellcode-Austausch unter der GPL v3 mit dem BMWi
- Bereitstellung eines GitLab-Servers für die Kooperation mit externen Partnern

- Portierung bestehender OpenFOAM-Solver der GRS auf neue OpenFOAM-Versionen
- Aufsetzen erster Validierungs- und Verifikationsfälle
- Erarbeitung von Vorschlägen für die Weiterentwicklung von OpenFOAM für das Containment und auch für den Kühlkreislauf und Abstimmung dieser Positionspapiere mit den Partnern im CFD-Verbund.

Die im Nachfolgeprojekt geplante Etablierung der Zusammenarbeit über eine gemeinsame Entwicklungsplattform sollte daher in Zukunft ergänzt werden durch den Erfahrungsaustausch bei der Implementierung von Modellen. Werden dabei die Basisklassen der Implementierung, die exakten implementierten Formeln in vollständiger Form, mögliche Erweiterungen oder Abweichungen von den bereits in OpenFOAM vorhandenen Algorithmen und die Ergebnisse möglichst einfacher Beispielrechnungen veröffentlicht, ist es mit relativ wenig Aufwand möglich, diese selbst zu implementieren. Die Weitergabe von entsprechenden Erfahrungen im Verbund wird allen Partnern zugutekommen. Darüber hinaus sollte die Ableitung von Entwicklungs- und Validierungsprioritäten auf sonstige Leichtwasserreaktorkonzepte, insbesondere SMR-Konzepte, deren Bau in der EU als mittelfristig realistische Option erscheint, erweitert werden. Weiterhin sollten diese Berichte regelmäßig an die nationalen und internationalen Fortschritte zu OpenFOAM (und CFD-Methoden im Allgemeinen) angepasst und Erfahrungen der Kooperationspartner reflektiert werden.

4 AP3 Modellentwicklung und Validierung von CFD-Codes für die Simulation unfalltypischer Phänomene an Experimenten

4.1 AP3.1 Gasverteilung und Schichtungsauflösung

4.1.1 Einleitung

Für den Nachweis der Beherrschung von Wasserstoff im Sicherheitsbehälter eines DWR ist u. a. aufzuzeigen, dass die Ansammlung großräumiger brennbarer Gasgemische mit höheren H₂-Konzentrationen, die bei schneller Deflagration mit Flammbeschleunigung die Integrität des Sicherheitsbehälter gefährden können, vermieden wird. Von H₂-Leichtgasschichtungen geht eine deutlich höhere Gefährdung durch Verbrennungen aus als von homogen verteiltem H₂ (der gleichen Masse). Die Zielsetzung der Arbeiten in AP3.1 ist die Validierung des OpenFOAM-Solvers und von ANSYS CFX zu dieser Fragestellung.

Hierbei sollte ein Fokus auf die Simulation von Leichtgasschichtungen gelegt werden, die durch einen Strahl aufgelöst werden, der vorher auf komplexe Containment-typische Hindernisse trifft. Dazu wurden die Panda-Experimente H2P1_3 und H2P1_10 nachgerechnet. Beim THAI-Experiment TH-32 erfolgte die Schichtungsauflösung durch freie Konvektion, die durch Heizen bzw. Kühlen der Behälterwände erzeugt wurde. Weiterhin wurde noch der Vorversuch H2P1_0 zur Modelloptimierung genutzt. Die Ergebnisse der GRS-Arbeiten zu diesen Experimenten werden im Folgenden erläutert.

4.1.2 Untersuchung zur Modellierung des Einlassrohres anhand des Versuchs H2P1_0

4.1.2.1 Einleitung

Der Versuch HP1-6 aus dem HYMERES-Versuchsprogramm wurde im Rahmen des Projekts RS1526 /SCH 17/ simuliert. Dabei hat sich gezeigt, dass die Simulationsergebnisse sensitiv auf die Simulation des Einlassrohres sind. Insbesondere die Berücksichtigung der Rohrkrümmung hatte einen nicht zu vernachlässigenden Einfluss auf die Simulationsergebnisse, z. B. auf die Geschwindigkeitsverteilung am Rohrauslass und hinter dem Hindernis, und auch die Erosionsgeschwindigkeit der Heliumschichtung. Da bei HP1-6 die Strömungsgeschwindigkeit am Rohrende nicht gemessen wurde, konnte

nicht abschließend geklärt werden, ob die Annahme eines symmetrischen Geschwindigkeitsprofils gerechtfertigt ist und wie weit die berechneten Strömungsgeschwindigkeiten mit denen im Experiment übereinstimmen. Im Versuch H2P1_3 wird dieselbe Einspeisegeometrie wie in HP1-6 verwendet. In einem Vorversuch H2P1_0 /PAR 18a/ wurde die Geschwindigkeit am Rohraustritt gemessen. Anhand eines Einspeisemassenstroms von ca. 30 g/s soll die Modellierung der Dampfeinspeisung untersucht werden, da dieser Massenstrom dem beim Versuch H2P1_3 entspricht (Abb. 4.1). Sowohl bei H2P1_0 als auch bei H2P1_3 wurde die Verbindung zum 2. Behälter abgesperrt, so dass nur der Behälter DW1 am Versuch teilnimmt.

4.1.2.2 Simulationsparameter und verwendete Modelle

In den hier vorgestellten Simulationen werden Wasserdampf und Helium als ideale Gase simuliert. Der Diffusionskoeffizient für Helium wird mit der Fuller-Korrelation berechnet. Da der Fokus der Simulationen auf dem Strömungsprofil am Ende des Einspeiserohres lag (4,1 m Höhe, 10 cm über Rohrende), wurden die Behälterwände nicht als Festkörper simuliert, sondern es wurden adiabate Randbedingungen angenommen, da die Behälterwände zu Beginn der Messungen schon aufgeheizt sind. Wärmestrahlung wird mit dem Discrete-Transfer-Modell simuliert. Es wurden transiente Simulationen durchgeführt. Da die Einspeisebedingungen im betrachteten Zeitabschnitt ($t > 5000$ s) konstant waren (30 g/s, 142 °C), stellt sich nach wenigen Sekunden ein zeitlich nahezu konstantes Geschwindigkeitsprofil in 4,041 m Höhe ein. In einigen Fällen wurde die transiente Simulation über mehrere 100 s fortgeführt, die in etwa dem Zeitabschnitt im Experiment entsprechen. Ein Vergleich der Strömungsgeschwindigkeiten für unterschiedliche Zeitpunkte zeigt keine signifikanten Unterschiede. Lediglich in den Randbereichen des Jets sind kleine Unterschiede zu erkennen (Abb. 4.2). Deshalb wurden rechenzeitintensive Simulationen (insbesondere bei der Wahl kleiner Zeitschritte), nur für einen kurzen Zeitabschnitt durchgeführt. Standardmäßig wird das SST-Turbulenzmodell verwendet, die beiden Terme zur Simulation der auftriebsbedingten Turbulenz (Production and Dissipation) werden berücksichtigt. In Abschnitt 4.1.2.5 werden andere Turbulenzmodelle (BSL- und SSG-Reynolds-Stress-Modell) getestet. Abhängig von der Konvergenz wird ein adaptiver Zeitschritt verwendet. Nachdem sich das quasistationäre Strömungsmuster eingestellt hat, beträgt der Zeitschritt bei Verwendung der Standardmodelle (SST, Standardgitter, RMS-Residuum) etwa 0,1 s was zu einer maximalen Courant-Zahl von 86 führt. Soweit nichts anderes angegeben, wird als Konvergenzkriterium RMS-Residuum $< 1,0e-4$ verwendet (Standardwert in CFX).



Abb. 4.1 Geometrie beim H2P1_TE-Experiment bei Annahme eines geraden (links) und eines gekrümmten Einlassrohres (rechts)

Blau: Prallplatte ($d = 40$ cm); rot: Einlassrandbedingung; grün: Auslassrandbedingung. Gelbe Linie: Position, an der Vertikalgeschwindigkeit verglichen wird.

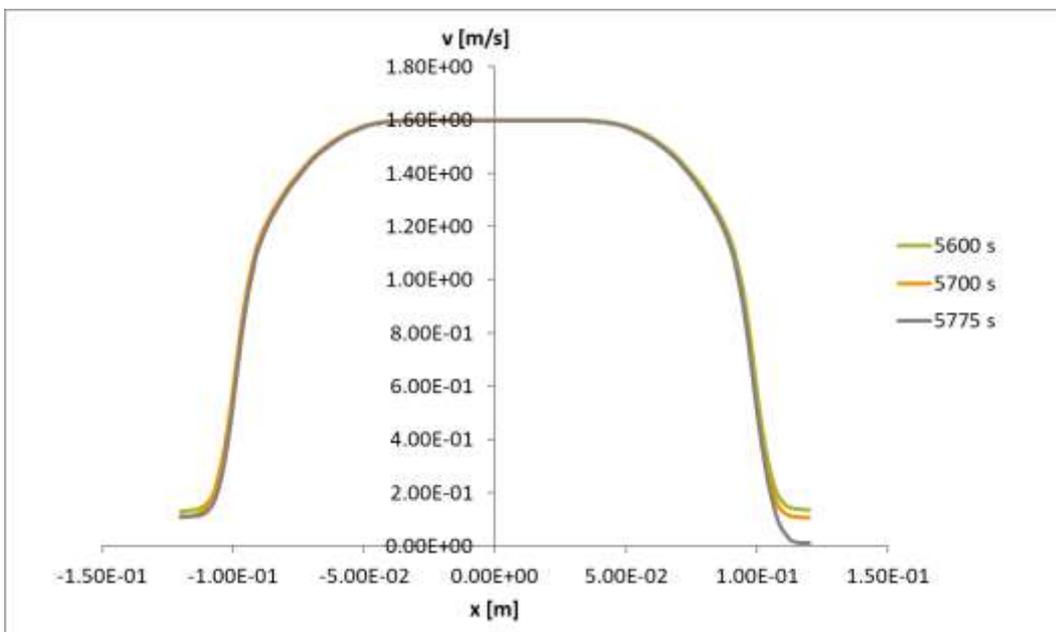


Abb. 4.2 Geschwindigkeitsprofil bei geradem Rohr zu unterschiedlichen Zeitpunkten

4.1.2.3 CFD-Gitter und Studie zum Einfluss der Gitterfeinheit

Da der Fokus bei diesen Simulationen auf dem oberen Bereich des Behälters liegt, wurde die Geometrie des Auslasses modifiziert. Er wurde auf die Mitte des Behälterbodens verschoben und die Größe der Öffnung wurde erhöht, um die Strömungsgeschwindigkeit (maximale Courantzahl) zu verringern. Die Simulationen des Versuch HP1_6 haben gezeigt, dass bei diesem Experiment die Modellierung des Einspeiserohrs (nur gerader Teil, einschließlich Rohrkrümmung) einen signifikanten Einfluss hat. Deshalb werden für beide Geometrien Simulationen durchgeführt – einschließlich einer Studie zum Gittereinfluss. Bei der Simulation mit einem geraden Einlassrohr wird ein komplett strukturiertes Gitter verwendet (Abb. 4.3). Beim Gitter mit dem gekrümmten Einlassrohr wird um die Rohrkrümmung herum ein unstrukturiertes Gitter genutzt, im Inneren des Rohres und in den übrigen Raumbereichen wird aber auch hier ein strukturiertes Netz verwendet (Abb. 4.3). Bei den hier durchgeführten Rechnungen ist es das Ziel, die Gasströmung am Rohrauslass möglichst genau zu berechnen. Deshalb wird bei der Gitterverfeinerung der Fokus auf das Innere des Einlassrohres und auf den Bereich zwischen Ende des Einlassrohres ($h = 4 \text{ m}$) und der Prallplatte ($h = 5 \text{ m}$) gesetzt. In diesem Bereich wird das Gitter systematisch verfeinert, die Verfeinerung in den übrigen Raumbereichen erfolgt nur soweit wie sich dies durch die Topologie des strukturierten Gitters ergibt und soweit dies die Gitterqualität notwendig macht. (Insbesondere sollen zu starke Sprünge in der Gitterfeinheit vermieden werden). In Tab. 4.1 sind Einzelheiten zu den verwendeten CFD-Gittern zu finden.

Tab. 4.1 Informationen zu den verwendeten Gittern

Einlassrohr gerade, Standard	39 Mio. Zellen, alle strukturiert
Einlassrohr gerade, fein	8,5 Mio. Zellen, alle strukturiert
Einlassrohr gekrümmt, Standard	5 Mio. Zellen, davon 4,2 Mio. strukturiert
Einlassrohr gekrümmt, fein	11,4 Mio. Zellen davon 10,1 Mio. strukturiert

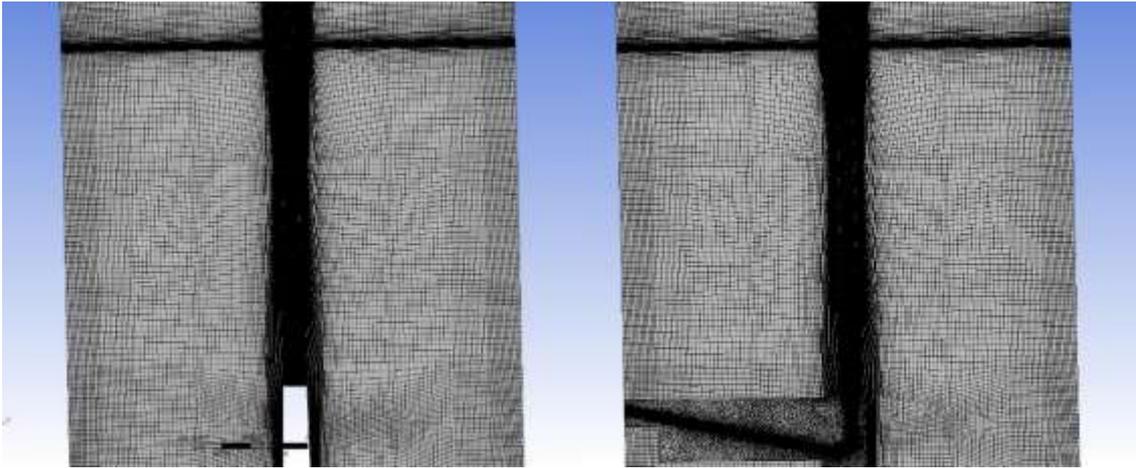


Abb. 4.3 Ausschnitt aus CFD-Gitter bei geradem Einlassrohr (links) und gekrümmten Einlassrohr rechts

Es wurden drei unterschiedliche Gitterstudien durchgeführt. Zum einen wurde zwischen der Geometrie „gerades Rohr“ und „Rohr einschließlich Krümmung“ unterschieden. Für die Geometrie „Rohr einschließlich Krümmung“ wurde neben dem SST-Turbulenzmodell auch für das BSL-Reynolds-Stress-Turbulenzmodell eine Gitterstudie durchgeführt. Für die Geometrie des „geraden“ Rohrs ergibt sich eine gute Übereinstimmung (Abb. 4.4). Nur ganz am Rand des Dampfstrahls gibt es Abweichungen. In diesem Bereich sind aber auch noch zeitliche Fluktuationen zu beobachten (Abb. 4.2). Für die Geometrie „Rohr einschließlich Krümmung“ gibt es für beide Turbulenzmodelle noch kleine Abweichungen im Innern des Strahls. (Abb. 4.5, Abb. 4.6). Die Abweichungen sind aber klein und deutlich geringer als die der anderen Parameter (z. B. Turbulenzmodell). Auch wenn keine exakt gitterunabhängige Lösung gefunden werden konnte, erscheint eine weitere Gitterverfeinerung als nicht notwendig.

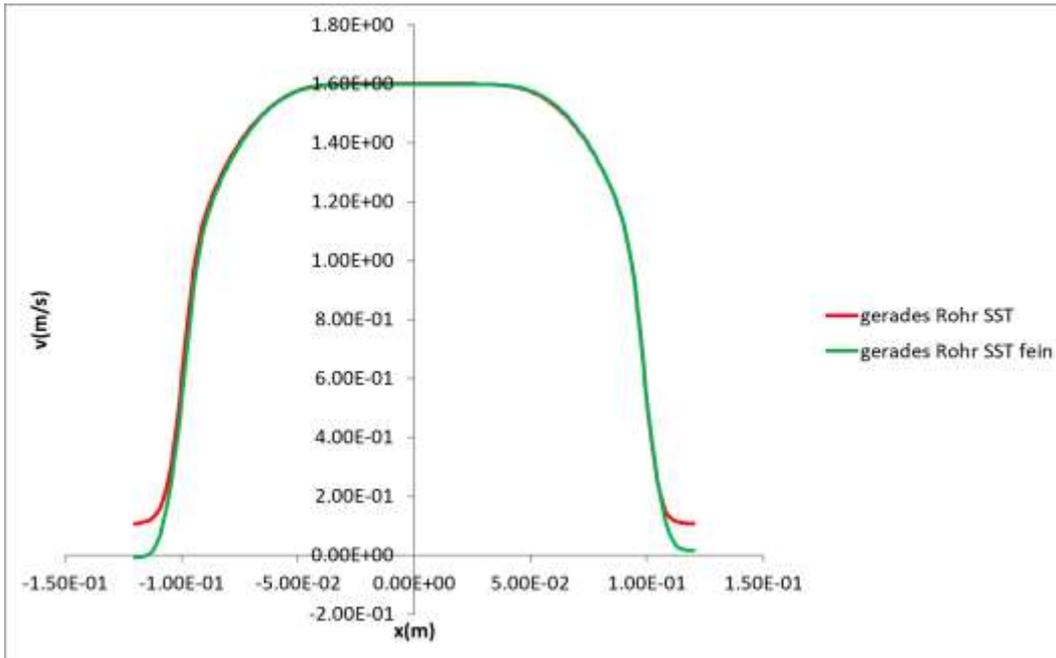


Abb. 4.4 Einfluss des CFD-Gitters für die Geometrie „gerades Rohr“, SST-Turbulenzmodell

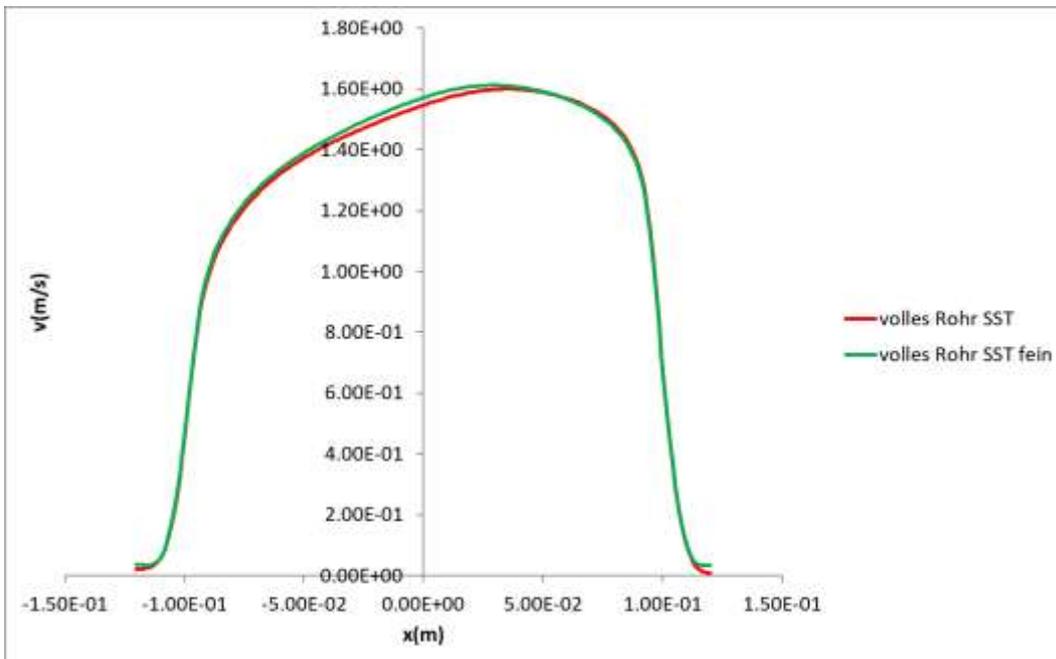


Abb. 4.5 Einfluss des CFD-Gitters für die Geometrie: Rohr einschließlich der Krümmung

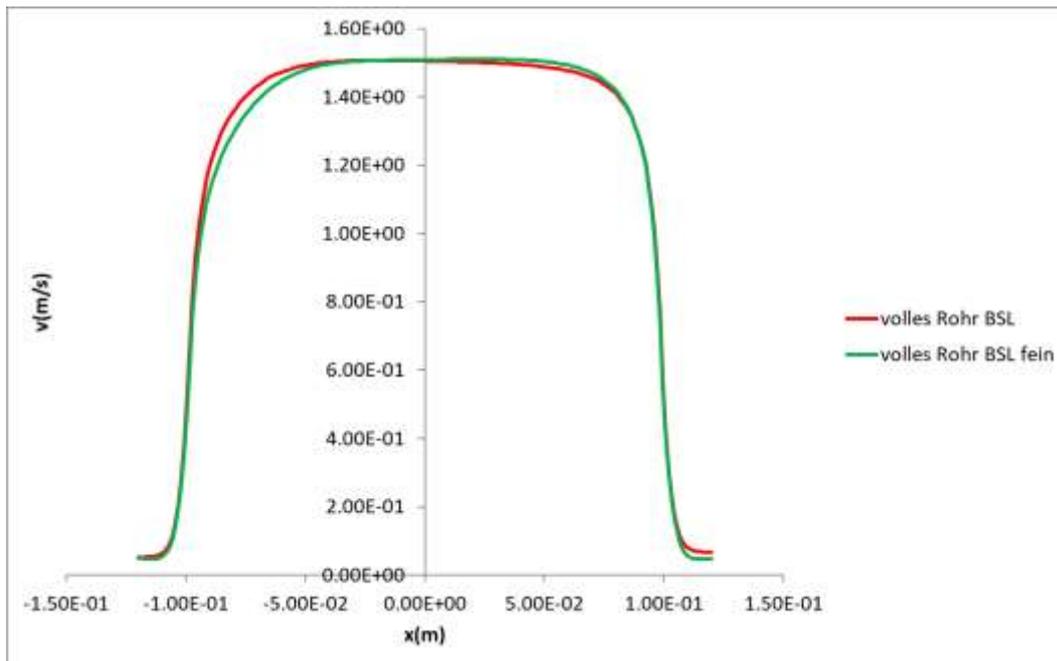


Abb. 4.6 Einfluss des Turbulenzmodells für die Geometrie: Rohr einschließlich der Krümmung

4.1.2.4 Einfluss des Zeitschritts bzw. des Konvergenzkriteriums

Für beide Geometrien wurde der Einfluss des Zeitschritts- bzw. des Konvergenzkriteriums auf das Simulationsergebnis untersucht. Bei den Simulationen wird ein adaptiver Zeitschritt verwendet. Die Größe des Zeitschritts richtet sich nach der Konvergenz der Lösung. Zudem wurden Simulationen durchgeführt, bei denen ein maximaler Zeitschritt von 2 ms bzw. 0,1 ms festgelegt wurde.

Für die Simulation mit dem Einlassrohr einschließlich Krümmung ergibt sich für das Konvergenzkriterium RMS-Residuum $< 1,0e-4$ ein Zeitschritt von 0,1 s, sobald sich das Strömungsfeld eingestellt hat. Dies entspricht einer RMS-Courant-Zahl von ca. 54. Falls das schärfere Konvergenzkriterium MAX-Residuum $< 5,0e-4$ verwendet wird, liegt der Zeitschritt am Ende der Simulation bei 0,025 s – 0,03 s und die RMS-Courant-Zahl bei 15 – 16.

Beim Vergleich der Ergebnisse (Abb. 4.7) dieser beiden Simulationen zeigt sich, dass bei Verringerung des Zeitschritts / Wahl eines schärferen Konvergenzkriteriums noch eine signifikante Abweichung beim Strömungsprofil auftritt. Deshalb wurde der maximale Zeitschritt noch weiter auf 2,0e-3 s bzw. 1,0e-4 s verringert. Dies entspricht einer RMS-Courant-Zahl von ca. 1 bzw. 0,05 und einer MAX-Courant-Zahl von 10 bzw. 0,5. Diese

beiden Rechnungen waren wegen der Vielzahl der benötigten Zeitschritte sehr rechenzeitintensiv. Deshalb war die Simulationszeit nur wenige Sekunden (2,5 s bzw. 8 s), wobei die Simulation mit dem kleinsten Zeitschritt über 2 Wochen auf 36 CPUs benötigt hat. Um trotzdem schon ein stationäres Strömungsfeld zu erhalten, wurde bei der Simulation ein bereits stationäres Strömungsfeld aus der Simulation mit einem größeren Zeitschritt verwendet. Es zeigt sich in beiden Simulationen keine weitere Zeitschrittabhängigkeit mehr.

Für die Simulation mit „geradem“ Einlassrohr ergibt sich beim Konvergenzkriterium MAX-Residuum $\leq 5.0e-4$ nach Einstellen des Strömungsprofils ein Zeitschritt von 0,064 s, was einer RMS-Courant-Zahl von ca. 5 und einer MAX-Courant-Zahl von 58,5 entspricht. Beim Konvergenzkriterium RMS-Residuum $\leq 1,0e-4$ wurde am Ende der Simulation ein Zeitschritt von 0,1 s genutzt, was den Courant-Zahlen 8 bzw. 93 entspricht. Für den Fall eines geraden Einlassrohres wurde keine signifikante Abhängigkeit vom verwendeten Zeitschritt/Konvergenzkriterium festgestellt (Abb. 4.8). Lediglich am äußersten Rand des Strahls sind Abweichungen zu erkennen. In diesem Bereich gibt es aber auch noch zeitliche Fluktuationen (Abb. 4.2).

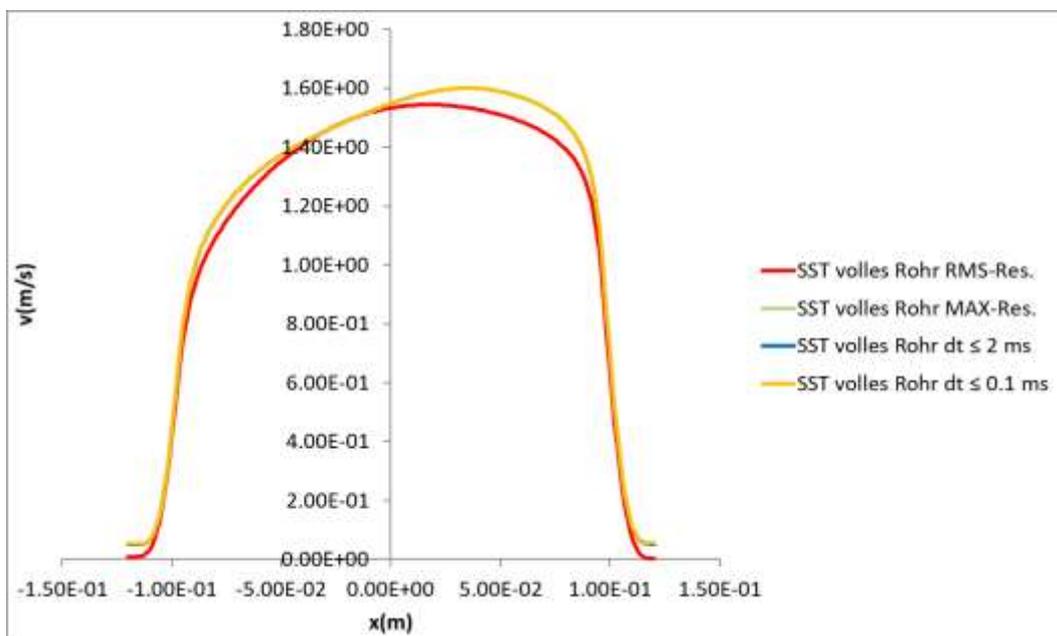


Abb. 4.7 Einfluss des Konvergenzkriteriums/Zeitschritts auf das Strömungsprofil am Rohrauslass bei gekrümmtem Rohr

Die Geschwindigkeiten der Simulation mit den kleineren Zeitschritten (MAX-Residuum entspricht $dt \sim 0,25$ s-, $dt \leq 2$ ms und $dt \leq 0,1$ ms) sind nahezu identisch.

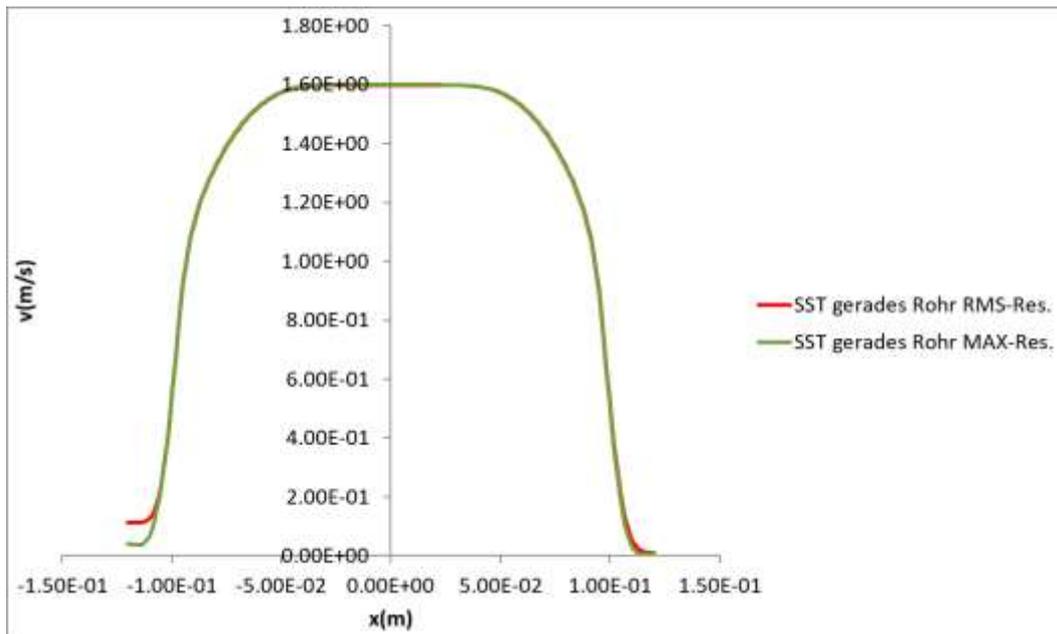


Abb. 4.8 Einfluss des Konvergenzkriteriums/Zeitschritts auf das Strömungsprofil am Rohrauslass

4.1.2.5 Vergleich mit experimentellen Daten

Die Versuche wurden im Rahmen des OECD-NEA Projekts HYMERES-2 durchgeführt. Die Versuchsdaten sind nicht frei verfügbar, deshalb kann der Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Versuchsdaten nicht frei veröffentlicht werden. Eine detaillierte Beschreibung der Arbeiten ist in /SCH 22/ zu finden. Dieser Bericht kann auf Anfrage nationalen Partnern zur Verfügung gestellt werden.

4.1.2.6 Zusammenfassung

Das Strömungsprofil am Rohrauslass wurde beim Vorversuch H2P1_0 mit einer PIV-Messung untersucht. Für eine Einspeiserate von 30 g/s wurden CFX-Simulationen durchgeführt. Ziel der Simulationen war ein Vergleich der Strömungsgeschwindigkeiten am Rohrauslass. Deshalb war es ausreichend, einen kurzen Zeitabschnitt zu simulieren, bis sich im Einlassrohr ein quasistationäres Strömungsprofil eingestellt hatte. In Parameterstudien wurde der Einfluss der Rohrgeometrie (Rohr einschließlich Krümmung oder nur gerader Teil) und der Einfluss des Turbulenzmodells (SST-2-Gleichungsmodell oder BSL-Reynolds-Stress Modell) untersucht. Es zeigt sich, dass bei keiner Simulation das Strömungsprofil exakt getroffen werden konnte. Die geringste Abweichung ergab sich beim BSL-Modell bei Berücksichtigung der vollen Rohrgeometrie. Bei dieser Kombination konnte eine insgesamt gute Übereinstimmung erzielt werden. Bei voller

Rohrgeometrie berechnet das SST-Modell dagegen ein deutlich zu asymmetrisches Rohrprofil. Bei Verwendung der geraden Rohrgeometrie wird das Strömungsprofil näherungsweise getroffen. Die maximale Strömungsgeschwindigkeit im Zentrum des Strahls wird etwas überschätzt. Bei dieser Geometrie liefern beide Turbulenzmodelle sehr ähnliche Modelle. Bei Verwendung des SST-Modells sollte deshalb zukünftig nur der gerade Teil des Rohres simuliert werden. Soll die Rohrkrümmung berücksichtigt werden, wird zukünftig vorzugsweise das BSL-Reynolds-Stress-Modell verwendet. Das SSG-Reynolds-Stress-Modell scheint für die hier vorliegenden Problemstellungen deutlich instabiler und wird deshalb bis auf Weiteres nicht mehr verwendet.

4.1.3 Panda-Test H2P1_3 CFD-Simulation mit OpenFOAM und Vergleich mit CFX-Ergebnissen

4.1.3.1 Einleitung

Das H2P1_3-Experiment wurde an der Panda-Versuchsanlage durchgeführt. Es untersucht die Erosion einer stabilen Heliumschicht durch einen vertikalen Dampfstrahl /PAR 18b/. Dieser trifft auf eine horizontale Platte, bevor er die Heliumschicht erreicht. Der Versuch wurde im Rahmen des OECD-NEA Projekts HYMERES-2 durchgeführt dessen Versuchsdaten vertraulich sind. Deshalb kann der detaillierte Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Versuchsdaten nicht frei veröffentlicht werden. Eine detaillierte Beschreibung der Arbeiten ist in /SCH 22/ zu finden. Dieser Bericht kann auf Anfrage nationalen Partnern zur Verfügung gestellt werden.

4.1.3.2 Zusammenfassung der Ergebnisse

Der Versuch H2P1_3 wurde mit CFX und mit OpenFOAM nachgerechnet. Dabei wurde die Wärmestrahlungsmodellierung (Strahlungsmodell, Absorptionskonstante von Dampf) variiert. Es zeigt sich ein signifikanter Einfluss des Wärmestrahlungsmodells und auch der Absorptionskonstante von Dampf sowohl auf die Temperaturverteilung als auch auf die Erosionsgeschwindigkeit der Heliumschicht.

Unabhängig von der Strahlungsmodellierung und auch anderer getesteter Modelle wird die Schichtungsauflösung von allen Simulationen signifikant zu schnell berechnet. Bei Berechnung der Dampfabsorptionskonstante über den mittleren Planckchen Absorptionskoeffizienten wird eine langsamere Schichtungsauflösung berechnet, was besser mit

dem Experiment übereinstimmt. CFX berechnet eine etwas langsamere Schichtungsauflösung als OpenFOAM.

Das Temperaturniveau und der qualitative Verlauf wird an den meisten Messpunkten mit moderaten Abweichungen berechnet, es gibt aber Messtellen in denen im Experiment ein qualitativ anderer Verlauf beobachtet wird. Grund sind unter anderem unzureichend bekannte Start- und Randbedingungen (z. B. niedrige Temperaturen bei C24, starke Kondensation nach Initialisierung mit Startbedingungen). Da unklar ist, inwieweit dies einen Einfluss auf die Erosionsgeschwindigkeit und die Gasströmung hat, ist dieser Versuch nur bedingt zur Validierung/Auswahl von Modellen geeignet.

Aufgrund des hohen Rechenzeitbedarfs und der Unsicherheiten bei den experimentellen Start- und Randbedingungen wurde von der Wiederholung der OpenFOAM-Simulationen mit dem verbesserten OpenFOAM-Solver chtMultiRegionSchmidtfoam und den optimierten numerischen Einstellungen abgesehen.

4.1.4 Panda H2P1_10_2

4.1.4.1 Versuchsbeschreibung

Die GRS hat sich mit CFX- und OpenFOAM-Simulationen an der blinden und offenen Phase des HYMERES-2-Benchmarks H2P1_10_2 /PAR 19/ beteiligt. Ziel dieser Arbeiten war die Validierung der Gasverteilungsberechnung – insbesondere die Auflösung von stabilen Leichtgasschichtungen – unter komplexen Strömungsbedingungen.

In diesem Versuch wurde im oberen Bereich des Behälters DW1 der Panda-Versuchsanlage eine stabile Heliumschichtung mit 24 vol.-% erzeugt (Abb. 4.9, Abb. 4.10). Der restliche Behälter wurde mit Dampf gefüllt. Die initiale Temperatur lag bei ca. 108 °C. Das Verbindungsrohr IP war blockiert, aber es fand ein Druckausgleich durch ein schmales Verbindungsrohr (1,813 m Höhe) in den Behälter DW2 statt. Im oberen Bereich von DW2 befand sich ein Ventingventil, durch das der Druck bei ca. 1,3 bar konstant gehalten wurde. Durch einen vertikalen Dampfstrahl mit einem Massenstrom von etwa 30 g/s wurde die Heliumschicht erodiert. Der Erosionsprozess dauerte im Experiment ca. 1300 s. Als Strömungshindernis wurde in 5,138 m Höhe ein Gitterrost eingebracht. Es war gegenüber der Horizontalen um 17° gekippt. Der Gitterrost bewirkte unter anderem eine Ablenkung des Dampfstrahls (Abb. 4.10). An zahlreichen Positionen wurden die

lokale Gaszusammenstellung und die Temperatur gemessen. Die in der Diskussion der Ergebnisse verwendeten Messpunkte sind in Abb. 4.13 zu finden.

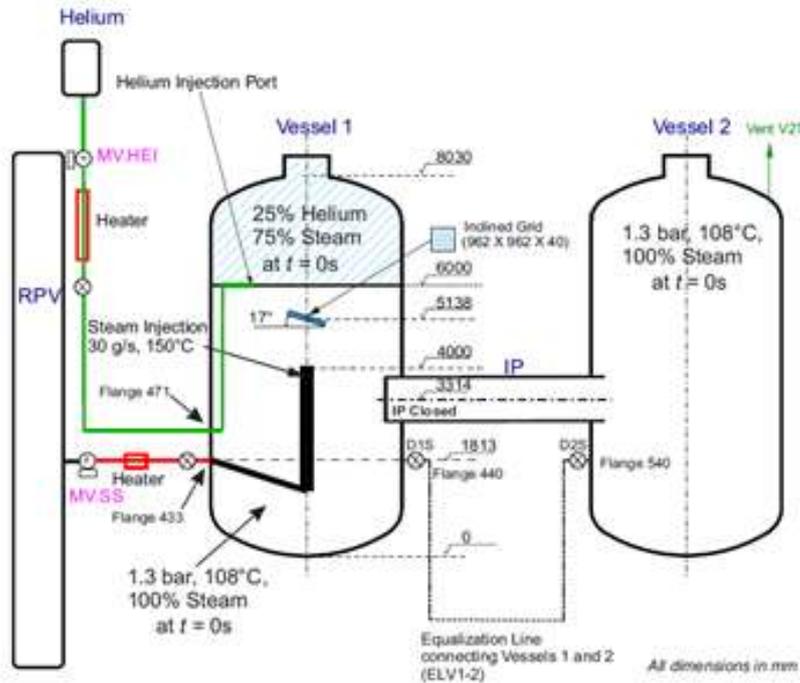


Abb. 4.9 Versuchsaufbau und nominale Anfangs- und Randbedingungen /PAR 19/

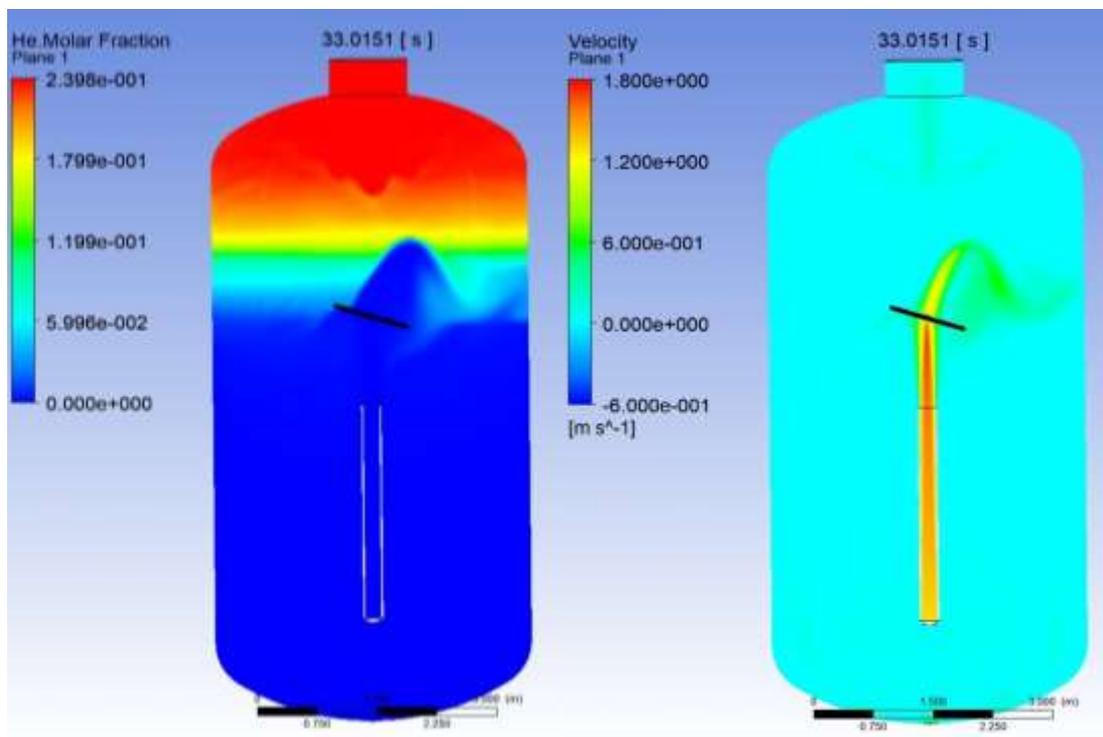


Abb. 4.10 Heliumkonzentration (links) und Geschwindigkeit (rechts) in der CFX Simulation nach $t = 33$ s

4.1.4.2 CFD-Gitter

Den Benchmarkteilnehmern wurde ein vom FZ Jülich /KEL 19/ erstelltes CFD-Gitter zur Verfügung gestellt. Es besteht aus 3,28 Millionen strukturierten Zellen für den Gasraum. Der Gitterrost wird im CFD-Gitter detailliert abgebildet, er wird als Solidblock mit 161.000 Elementen berücksichtigt. Die Außenwände werden im Gitter nicht berücksichtigt, sondern mit Randbedingungen modelliert. Im Bereich des Dampfstrahles und des Gitterrosts wurde das Gitter stark verfeinert (siehe Abb. 4.11). Um den Aufwand für die Gittererzeugung in Grenzen zu halten und die Anzahl an Zellen zu verringern, wurde der Auslass von der Seite nach unten verlegt (siehe Abb. 4.12). Durch die Vergrößerung der Austrittsfläche werden sehr hohe Strömungsgeschwindigkeiten vermieden. Beim Versuch H2P1_3 (siehe Abschnitt 4.1.3.1) wurde gezeigt, dass diese Vereinfachung keinen signifikanten Einfluss auf die Schichtungsauflösung hat. Beim Einlassrohr wurde nur der gerade Teil berücksichtigt. Da das CFD-Gitter vorgegeben wurde, wurde auf eine Studie zum Einfluss des CFD-Gitters verzichtet.

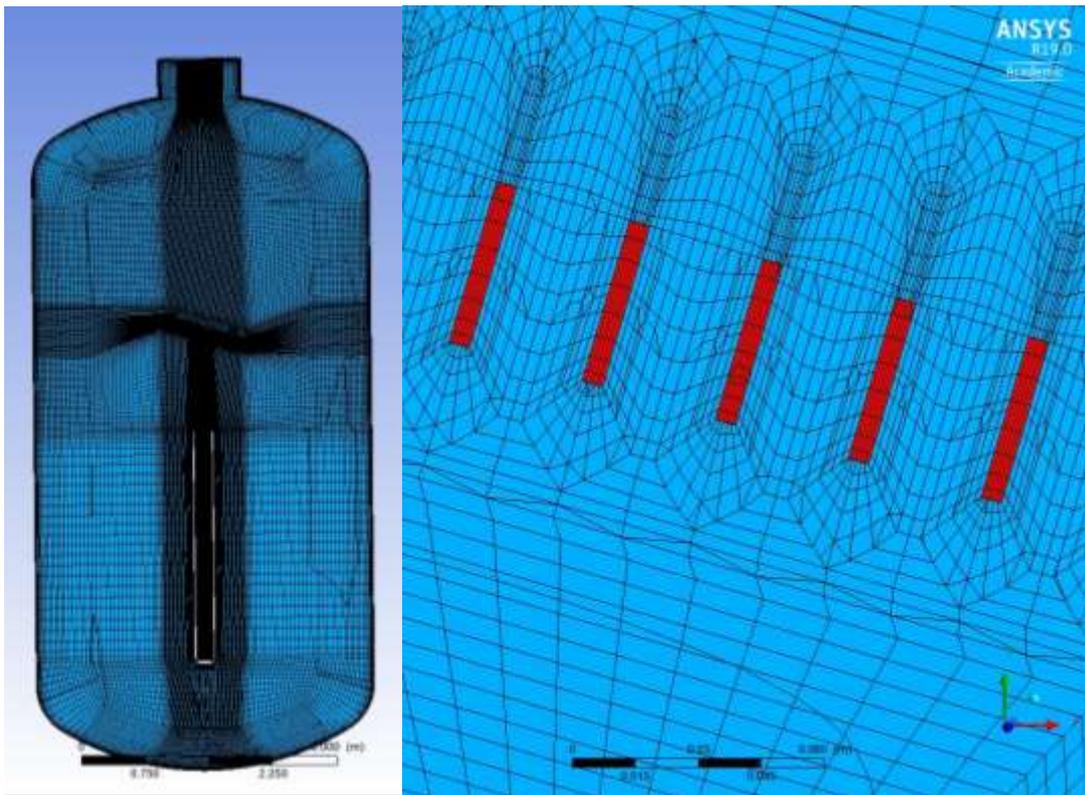


Abb. 4.11 Verwendetes CFD-Gitter. Links: Längsschnitt, rechts: Bereich des Gitterrosts (rot)

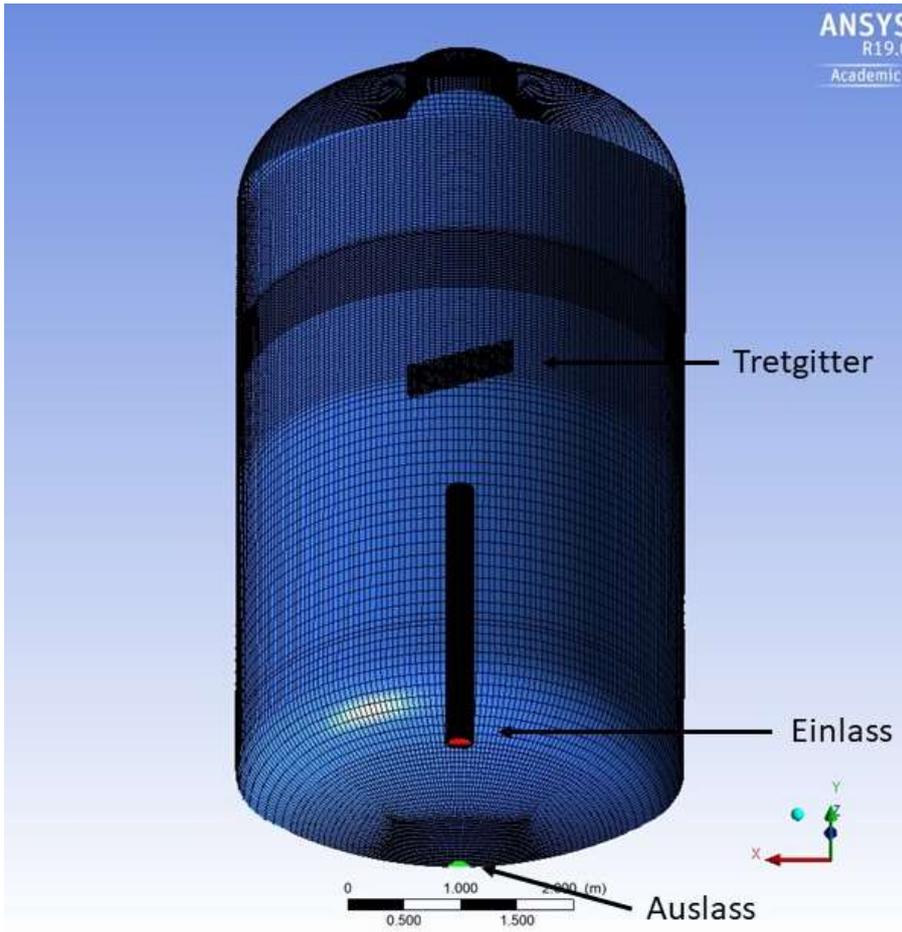


Abb. 4.12 Geometrie und verwendetes CFD-Gitter

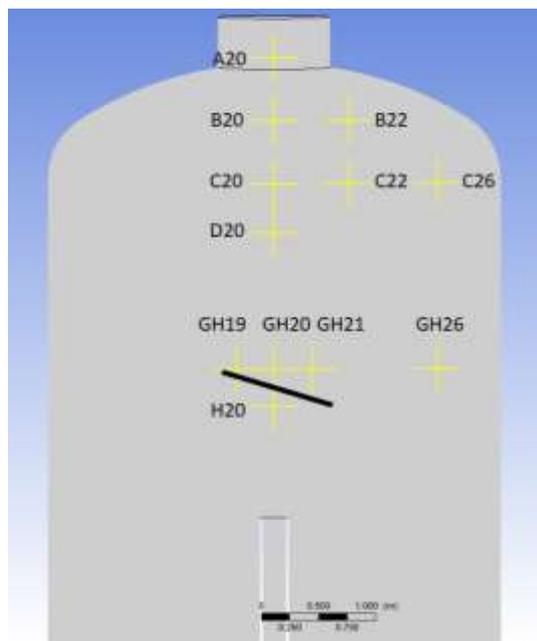


Abb. 4.13 Position der im Bericht verglichenen Temperatur- und Konzentrationsmessstellen

4.1.4.3 In CFX verwendete Modelle und Randbedingungen

Bei der CFX-Simulation wurden folgende Modelle verwendet. Helium und Dampf wurden als ideale Gase modelliert. Die Turbulenz wurde mit dem SST-Modell einschließlich der Bouyancy-Terme verwendet. Die Wärmestrahlung wurde mit dem P1-Modell simuliert. Die Absorptionskonstante von Dampf wurde $1 \text{ [m}^{-1}\text{bar}^{-1}\text{]}\cdot\text{Druck}$ gewählt.

Bei der Auswahl der Modelle wurde den Empfehlungen der Benchmarkorganisatoren gefolgt. Bis auf die Wahl des Wärmestrahlungsmodells entsprechen sie den üblicherweise in der GRS verwendeten Modellen. An den Behälterwänden wurden die im Versuch gemessenen Temperaturen als Randbedingung vorgegeben. Am Einlass wurden der Massenstrom und die Temperatur zeitabhängig entsprechend den experimentellen Werten vorgegeben. Am Auslass wurde der zeitabhängige Druck vorgegeben.

4.1.4.4 In OpenFOAM verwendete Modelle und Randbedingungen

Die bei den OpenFOAM-Simulationen verwendeten Modelle entsprechen im Wesentlichen denen der CFX-Simulation. Die Turbulenz wurde ebenfalls mit dem SST-Modell einschließlich der implementierten Terme für die Bouyancy-Terme modelliert. Es wurde ebenfalls das P1-Strahlungsmodell mit der Absorptionskonstante von Dampf $1,0 \text{ [m}^{-1}\text{bar}^{-1}\text{]}$ gewählt. Die Start- und Randbedingungen entsprechen der Versuchsspezifikation und damit auch der CFX-Simulation. Die „blinde“ Vorausrechnung des Versuchs erfolgte mit dem von der GRS erstellten Solver chtMultiRegionSchmidtFoam05. Bei diesem Solver wird ein „Work-Around“ bei der Simulation der Diffusion verwendet (siehe Kapitel 2.2.2) bei den numerischen Verfahren wurde der Schwerpunkt auf Stabilität gelegt. Deshalb wurden oft Verfahren 1. Ordnung verwendet, was zu Lasten der Genauigkeit geht. In der Nachrechnung des Versuchs wurde der Solver chtMultiRegionSchmidtFoam verwendet. Bei ihm wird die Diffusion nach dem Fick'schen Diffusionsgesetz berechnet. Es wurden überwiegend numerische Verfahren 2. Ordnung verwendet, was die numerische Genauigkeit gegenüber der blinden Rechnung erhöht.

4.1.4.5 Diskussion des Strömungsfeldes

Das Strömungsfeld in der CFX- und den OpenFOAM-Simulationen ist sowohl während des Erosionsprozesses (Abb. 4.14) als auch nach Schichtungsauflösung (Abb. 4.15) sehr ähnlich. Der vertikale Dampfstrahl wird durch den gekippten Gitterrost abgelenkt. In den Simulationen wird zu Beginn ein kleiner Teil des Dampfstrahls am Gitterrost nach

unten abgelenkt. Mit fortschreitender Erosion der Schichtung wird dieser Effekt schwächer und ist nach Auflösung der Schichtung nicht mehr vorhanden (siehe Abb. 4.15). Der abgelenkte Dampfstrahl trifft weiter oben auf die Heliumschicht, an der er nach unten abgelenkt wird. Dabei wird die Heliumschichtung langsam erodiert.

Die Geschwindigkeit des Dampfstrahls und die Ablenkung durch den Gitterrost zeigen in den Simulationen nur kleine Unterschiede. Lediglich die abwärts gerichtete Strömung nach Auftreffen des Dampfstrahls auf die Heliumschicht ist bei CFX und OpenFOAM unterschiedlich. Nach Schichtungsauflösung ist der Ort, an dem der abgelenkte Dampfstrahl auf die Behälterwand trifft, bei beiden Simulationen fast gleich. Da er aber im Bereich einer Kante (Deckelbereich) auftrifft, machen sich auch sehr kleine Unterschiede signifikant bei der Strahlablenkung bemerkbar, so dass sich hier Unterschiede ergeben.

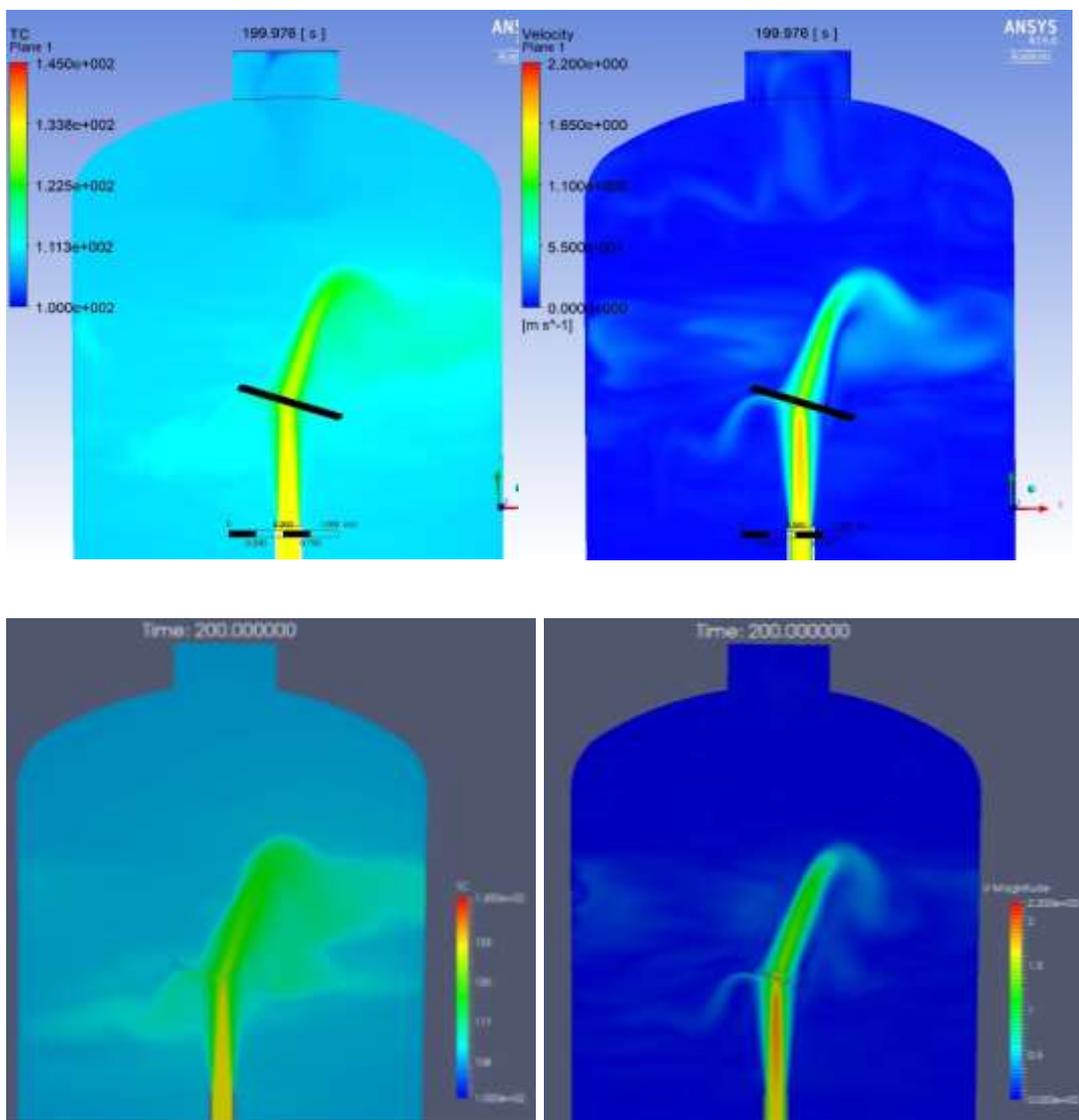


Abb. 4.14 Temperatur in °C (links) und Geschwindigkeit nach 200 s in der CFX- (oben) und in der offenen OpenFOAM-Simulation (unten)

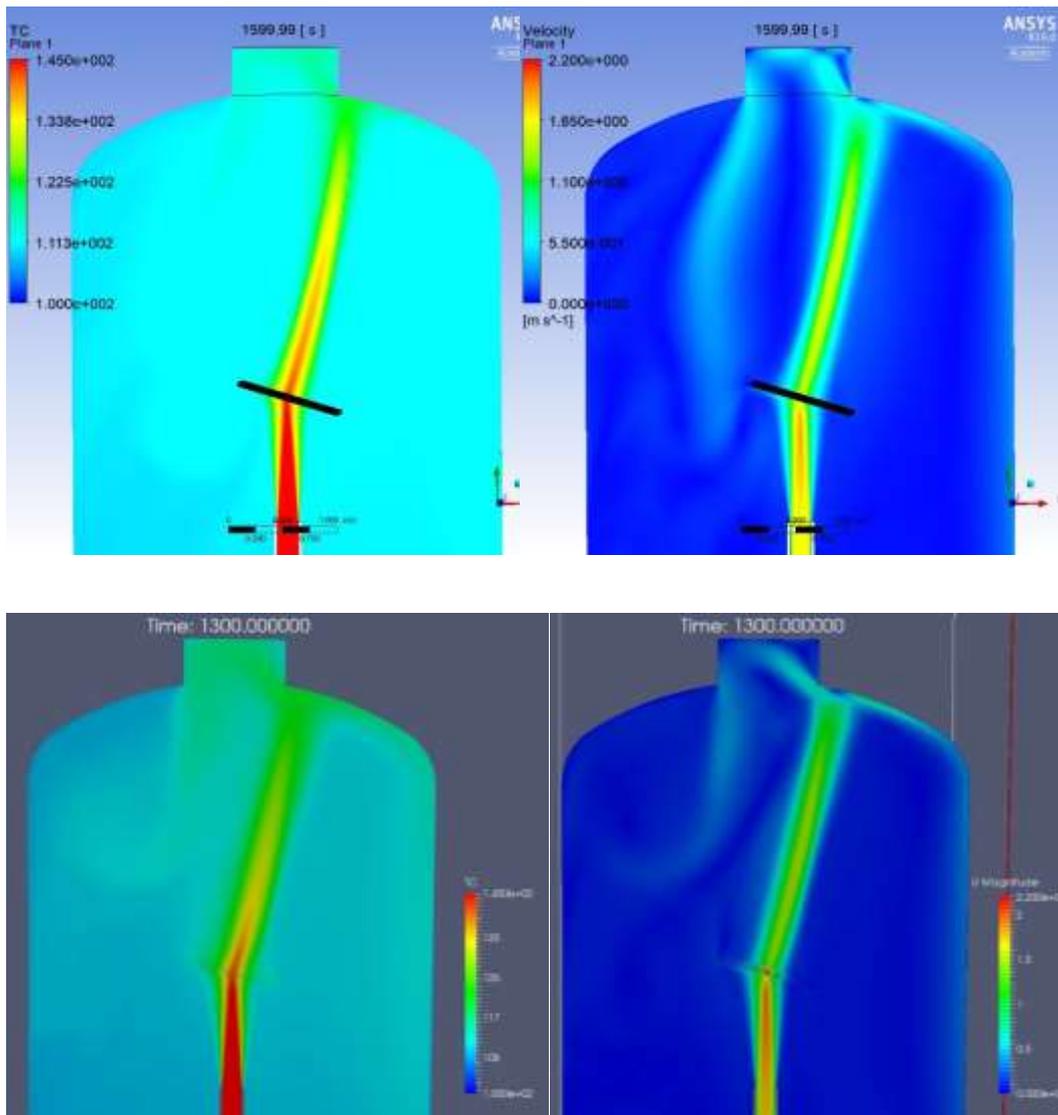


Abb. 4.15 Temperatur in °C (links) und Geschwindigkeit nach Schichtungsauflösung (1600 s bzw. 1300 s) in der CFX- (oben) und in der offenen OpenFOAM-Simulation (unten)

4.1.4.6 Vergleich mit experimentellen Daten

4.1.4.6.1 Helium Konzentration

Die Schichtungsauflösung wird von beiden Programmen in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet (Abb. 4.16, Abb. 4.17). Am obersten Messpunkt A20 erfolgt die Schichtungsauflösung im Zeitraum 1150 s – 1330 s, eine genauere Aussage ist aufgrund der niedrigen Messfrequenz nicht möglich. Allerdings geht die Schichtungsauflösung mit einem schnellen Temperaturanstieg einher. Der Zeitpunkt des Temperaturanstiegs passt zu einem Auflösungszeitpunkt von etwa 1300 s (Abb. 4.20). In CFX erfolgt

die Schichtungsauflösung nach ca. 1400 s, in der „blinden“ OpenFOAM-Vorausrechnung schon nach etwa 1070 s. Bei der offenen Nachrechnung nach etwa 1130 s. Der Verlauf der Heliumkonzentration an den beiden obersten Messpunkten A20, B20 unterscheidet sich zwischen Simulationen und Experiment etwas. Sowohl OpenFOAM als auch CFX sagen an den Messstellen eine nahezu konstante Heliumkonzentration bis zum Zeitpunkt der Schichtungsauflösung voraus. Im Experiment dagegen findet eine kontinuierliche, geringfügige Verringerung der Heliumkonzentration statt. Die Ursache hierfür sind vermutlich Strömungsvorgänge in der Heliumschicht. Diese können verschiedene Ursachen haben:

- Wärmetransport durch Wärmestrahlung in die Heliumschicht, was zu Dichteunterschieden führt.
- Lokal unterschiedliche Temperaturen an den Wänden aufgrund unterschiedlich guter Isolierung.
- Durch den turbulenten Dampfjet, der auf die Heliumschichtung trifft, wird Strömung/Turbulenz in der Schichtung induziert.

Für die tieferen Messstellen in der Heliumschicht C20 und D20 wird eine gute Übereinstimmung zwischen Simulationen und Experiment erzielt, wobei OpenFOAM bei C20 auch schon eine geringfügig zu schnelle Schichtungsauflösung berechnet (siehe Abb. 4.17). Die Simulationsergebnisse zwischen „blinder“ und „offener“ Simulationen unterscheiden sich hier nur unwesentlich.

Der Punkt H20 liegt unmittelbar unterhalb des Gitterrosts. Bei den Simulationen ist die Heliumkonzentration an diesem Punkt ungefähr gleich Null, während im Experiment eine Heliumkonzentration von um die 2 vol.-% gemessen wird (siehe auch 4.1.4.6.2).

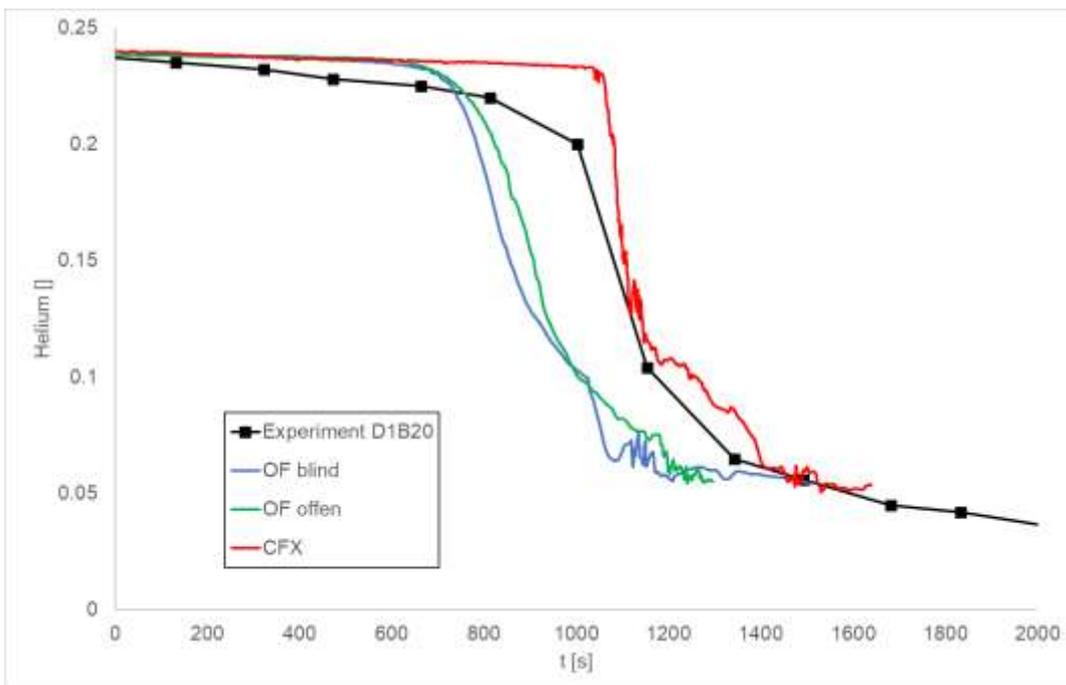
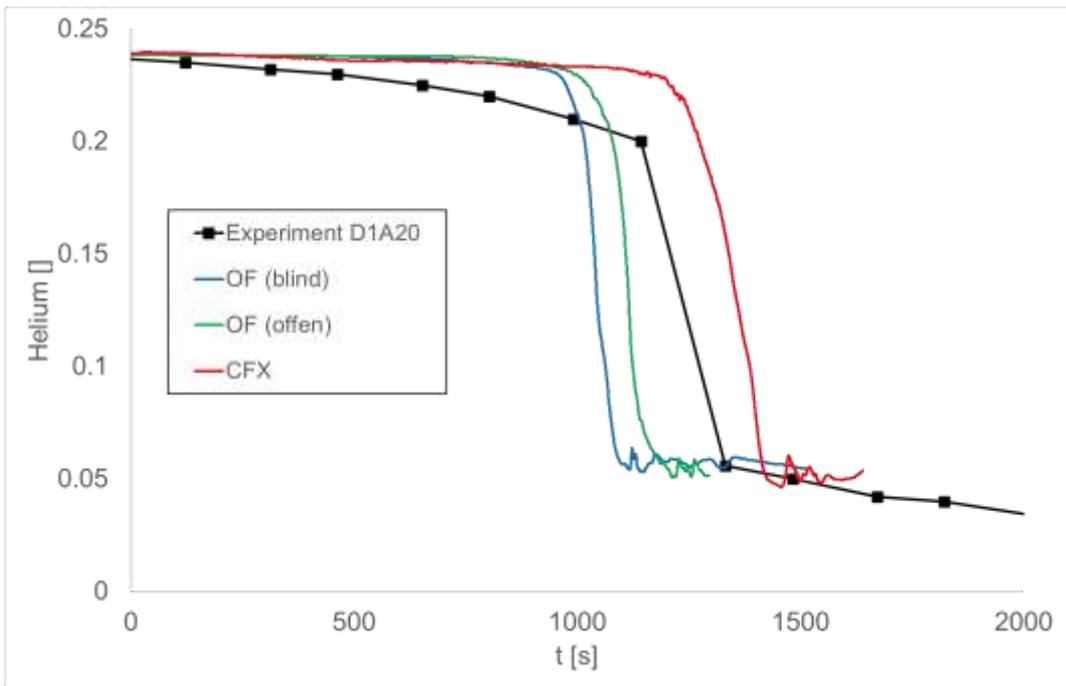


Abb. 4.16 Heliumkonzentration an den Messpunkten A20, B20

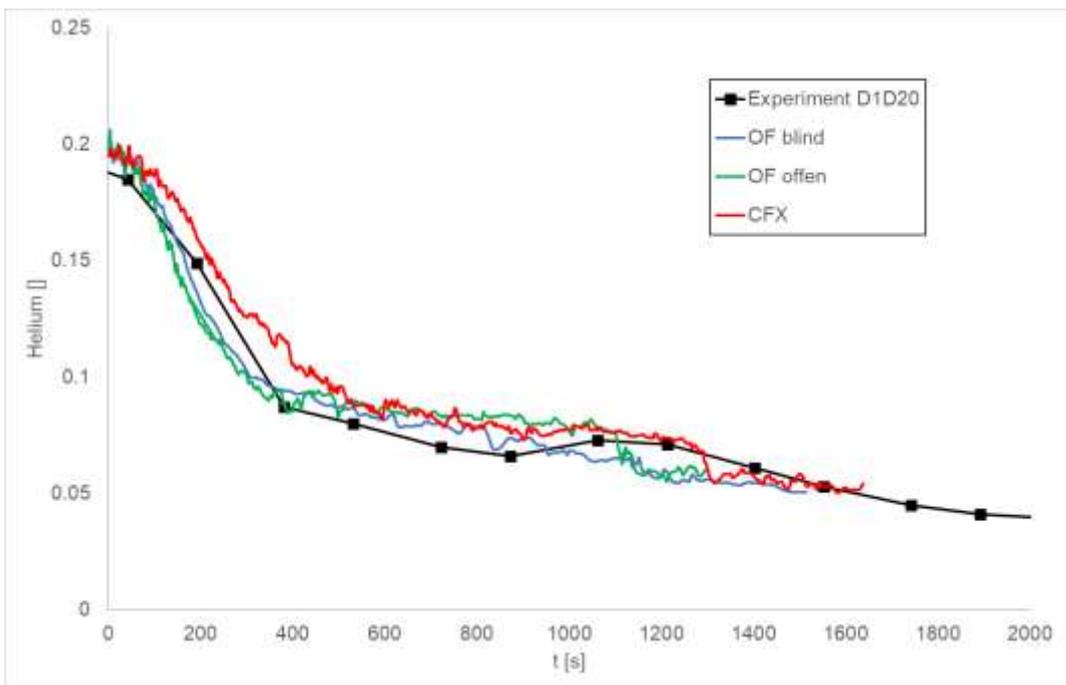
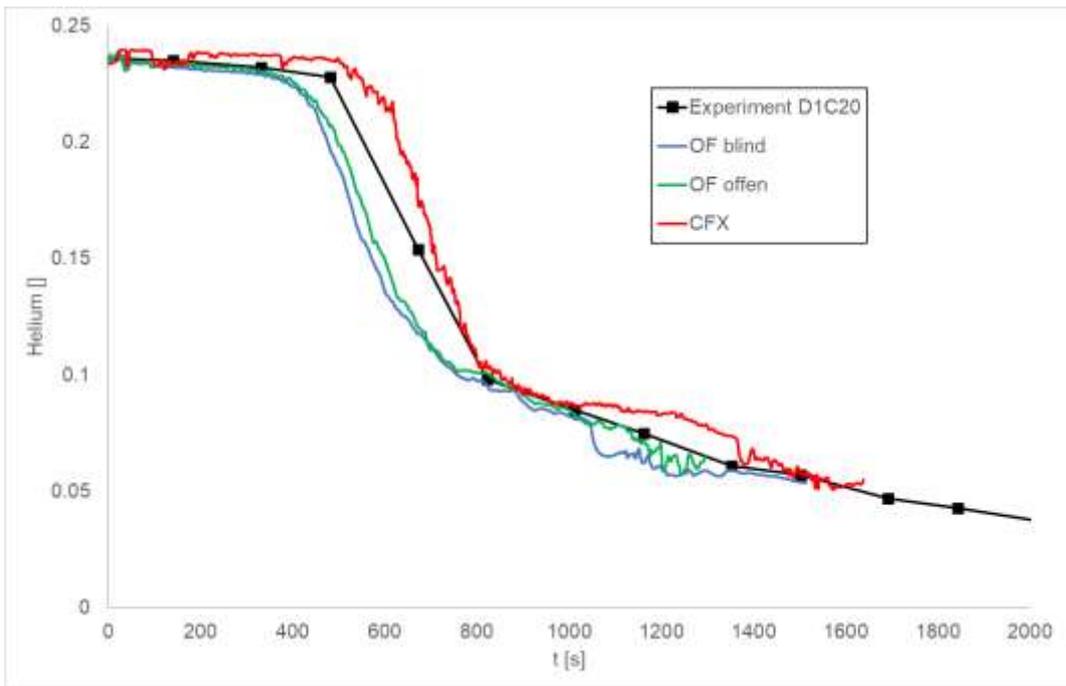


Abb. 4.17 Heliumkonzentration an den Messpunkten C20 und D20

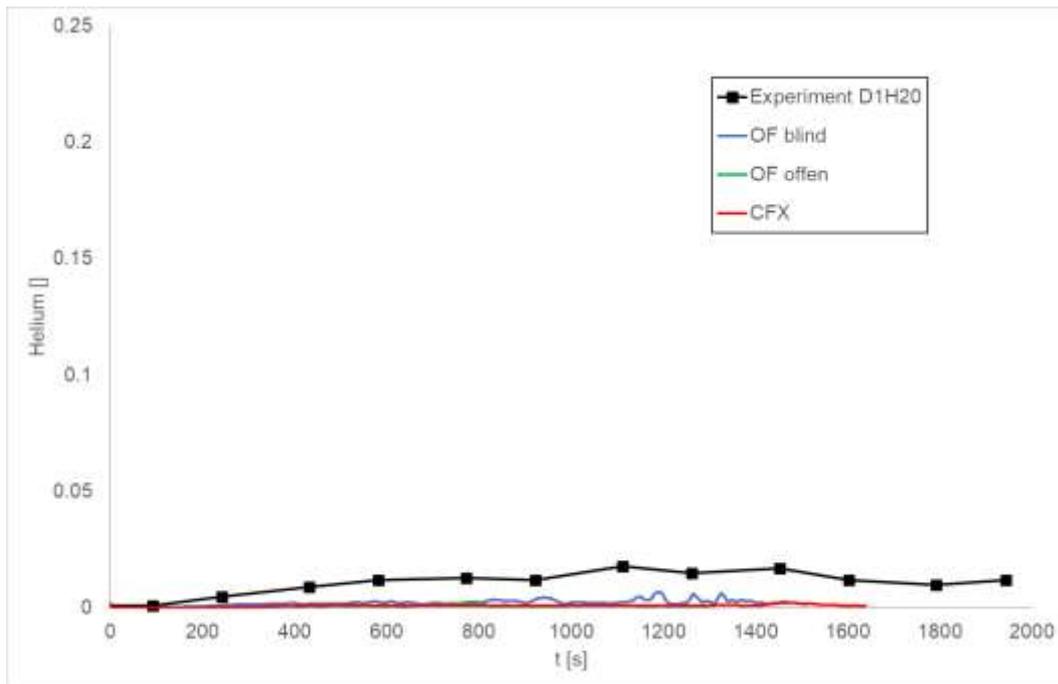


Abb. 4.18 Heliumkonzentration am Messpunkt H20

4.1.4.6.2 Temperatur

Generell wird eine gute Übereinstimmung für die Temperatur bei den Simulationen erzielt. Lokal treten aber moderate Abweichungen auf. An den oberen Messtellen (A20, B22) (siehe Abb. 4.19 und Abb. 4.20) geht im Bereich des Dampfstrahls die Auflösung der Heliumschicht mit einem schnellen Temperaturanstieg einher, da der Messpunkt dann in Kontakt mit dem heißen Dampfstrahl kommt. Dieser Temperaturanstieg kann zur näheren Bestimmung des Erosionszeitpunkts genutzt werden und er gibt auch Informationen über die Position des Dampfstrahls. Die Temperatur in der Heliumschichtung vor der Erosion wird von CFX und OpenFOAM richtig vorhergesagt (A20, B20, B22, C20 in Abb. 4.19, Abb. 4.20). Entsprechend den unterschiedlichen Zeitpunkten der Schichtungsauflösung wird von den Simulationen der Temperaturanstieg nach Schichtungsauflösung etwas unterschiedlich vorhergesagt. Bei der CFX-Simulation und der offenen OpenFOAM-Simulation ist an den Punkten A20 und B22 die maximale Temperatur um 2 – 3 K höher als im Experiment. Bei B20 wird von der offenen OpenFOAM-Simulation wie im Experiment ein kontinuierlicher Temperaturanstieg berechnet, während bei den beiden anderen Simulationen ein steiler Temperaturanstieg vorhergesagt wird.

Bei C20, C22, C26 (Abb. 4.20, Abb. 4.21) wird die Temperatur vor Schichtungsauflösung ($t = 400$ s bis 600 s) in der CFX-Simulation und der blinden OpenFOAM-Simulation geringfügig überschätzt. Die offene OpenFOAM-Simulation zeigt eine sehr gute

Übereinstimmung. Sie sagt auch als einzige einen leichten Temperaturanstieg bei C20 im Verlauf der Schichtungserosion vorher. Bei C22 und C26 wird ebenfalls der Verlauf der Temperatur von dieser Rechnung richtig vorhergesagt, allerdings ist die maximale Temperatur etwas höher als im Experiment (2 K – 3 K). Bei C22 und C26 zeigt die CFX-Simulation dagegen die beste Übereinstimmung.

An den Messstellen unmittelbar hinter dem Gitter (Abb. 4.22, Abb. 4.23) wird an den seitlichen Messpunkten (GH19, GH21, GH26) die Höhe der Temperatur mit geringfügigen Abweichungen zum Experiment simuliert. Es fällt allerdings auf, dass im Experiment die Temperatur zu Beginn konstant bleibt bzw. leicht abfällt, in den Simulationen dagegen steigt sie leicht an. Die Tatsache, dass die Temperatur im Experiment zu Beginn oberhalb des Gitters sich etwas anders verhält, kann als Indiz gewertet werden, dass im Bereich des Gitters Abweichungen zur Strömung zum Experiment vorliegen. Hier spielt sicherlich auch die relativ grobe Gitterauflösung des CFD-Gitters im Bereich des Gitterrosts eine Rolle (Abb. 4.11). Diese zeigt sich auch bei detaillierter Betrachtung der Geschwindigkeit in diesem Bereich (Abb. 4.25). Eine weitere Gitterverfeinerung wäre sicherlich wünschenswert, war aufgrund des Rechenzeitbedarfs (CFX: ca. 3 Wochen auf 40 CPUs) nicht praktikabel.

In der Behältermitte (GH20) sagen CFX und die offene OpenFOAM-Simulation eine etwas zu hohe Temperatur vorher (siehe Abb. 4.22). Die blinde OpenFOAM-Simulation zeigt hier eine bessere Übereinstimmung, ist aber tendenziell etwas zu tief.

Am Messpunkt H20 unterhalb des Gitters (siehe Abb. 4.24) wird von allen Simulationen die Temperatur um 8 K – 9 K überschätzt. Hier werden von allen Messstellen die größten Abweichungen beobachtet. In den Simulationen liegen die Temperaturen nur geringfügig unterhalb der Einspeisetemperatur (T_{inj}). Der Messpunkt liegt in den Simulationen im Zentrum des Dampfstrahls. Die Heliumkonzentration ist in allen Simulationen ~ 0 vol.-%. Im Experiment dagegen liegt eine etwas höhere Heliumkonzentration von 2 vol.-% vor. Eine mögliche Erklärung für die Abweichung wäre, dass im Experiment die Position des Dampfstrahls leicht verschoben wäre. Eine Abweichung von wenigen Zentimetern würde ausreichen, damit der Messpunkt nicht mehr im Zentrum des Strahls mit den maximalen Temperaturen liegt.

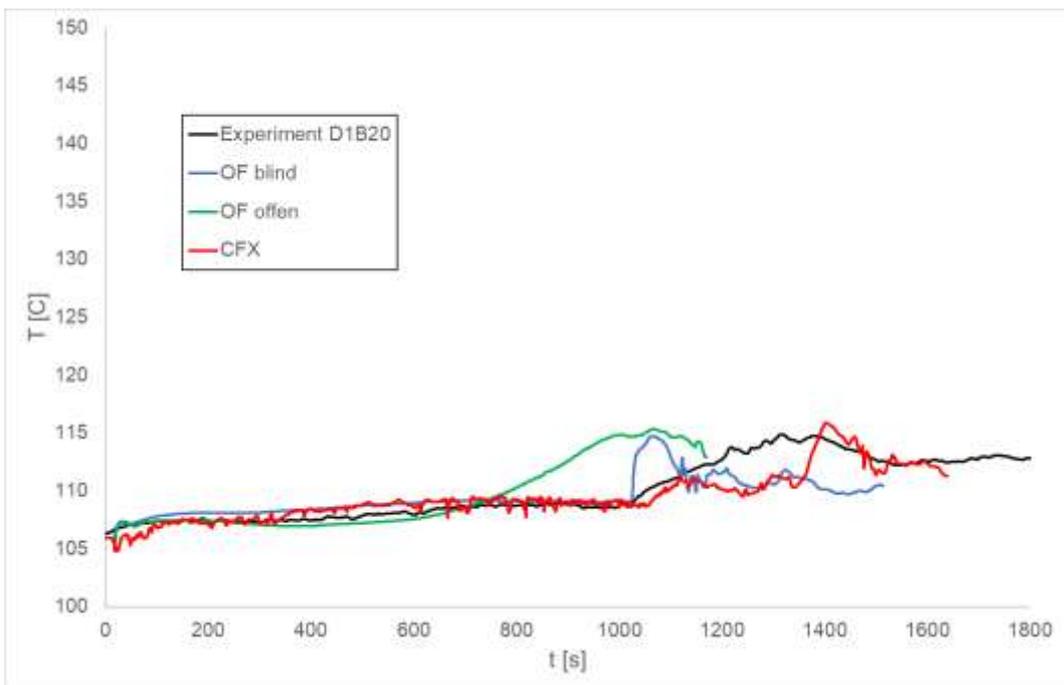
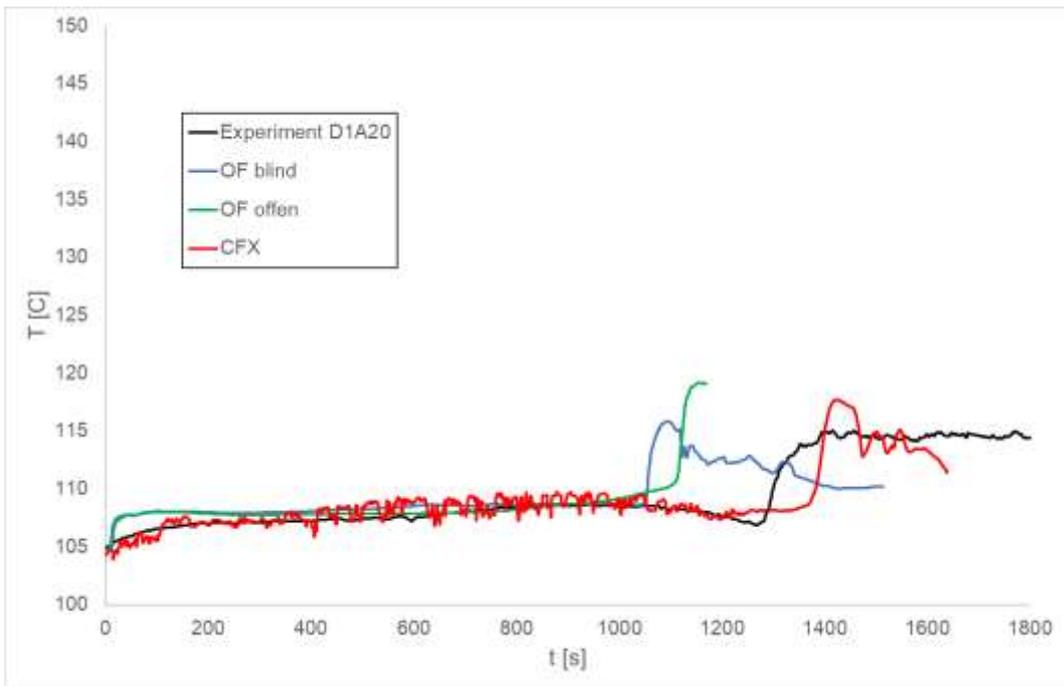


Abb. 4.19 Temperatur an den Messpunkten A20, B20

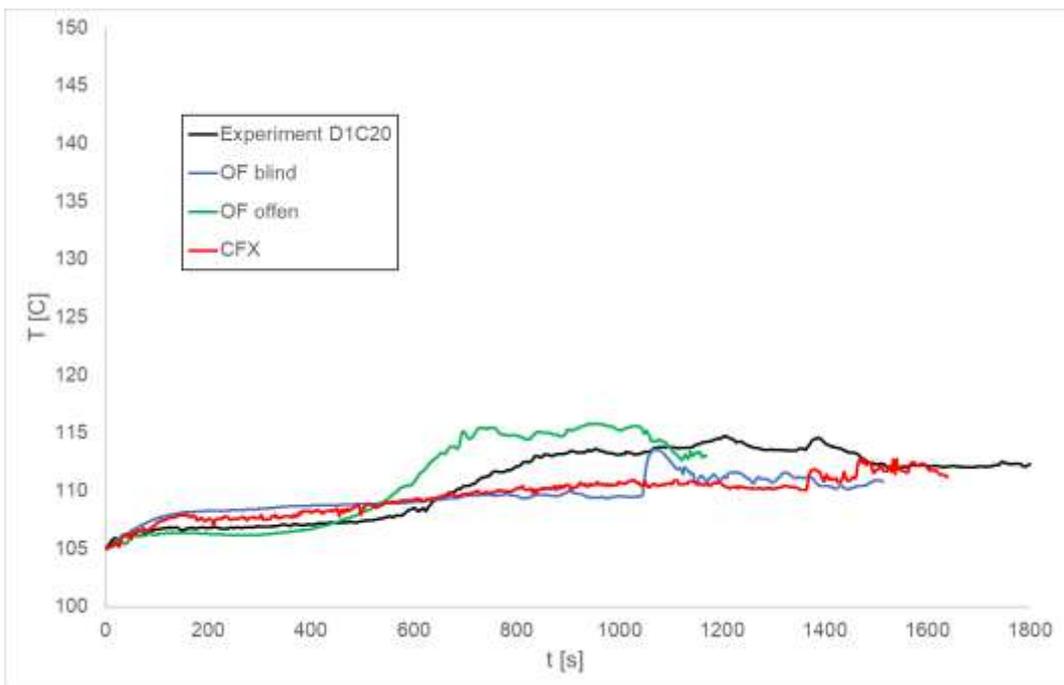
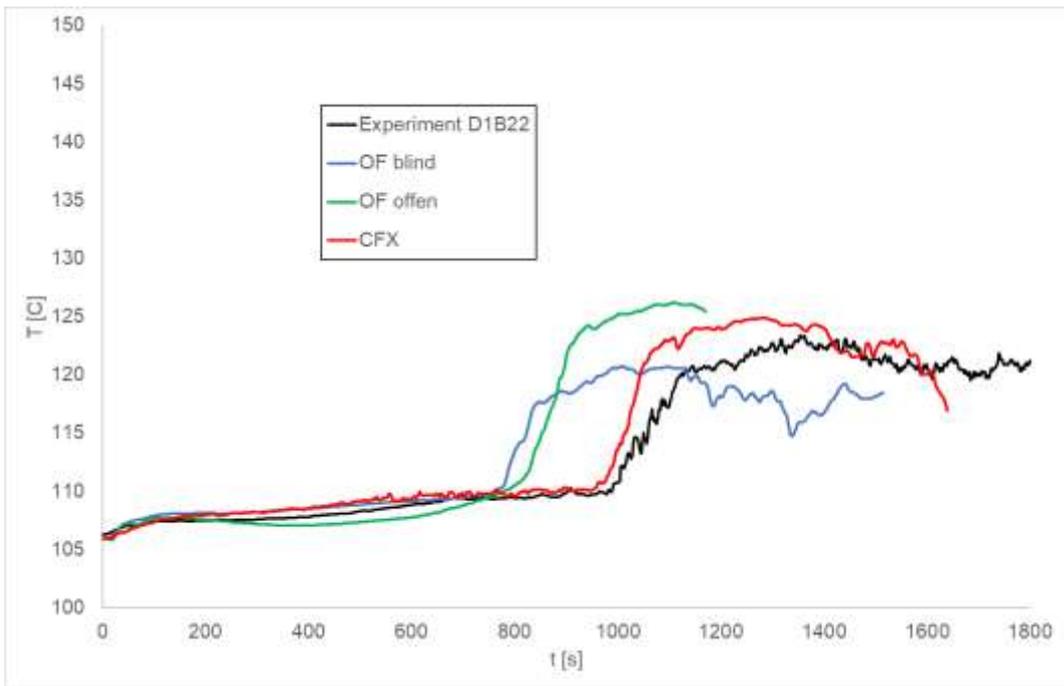


Abb. 4.20 Temperatur an den Messpunkten B22 und C20

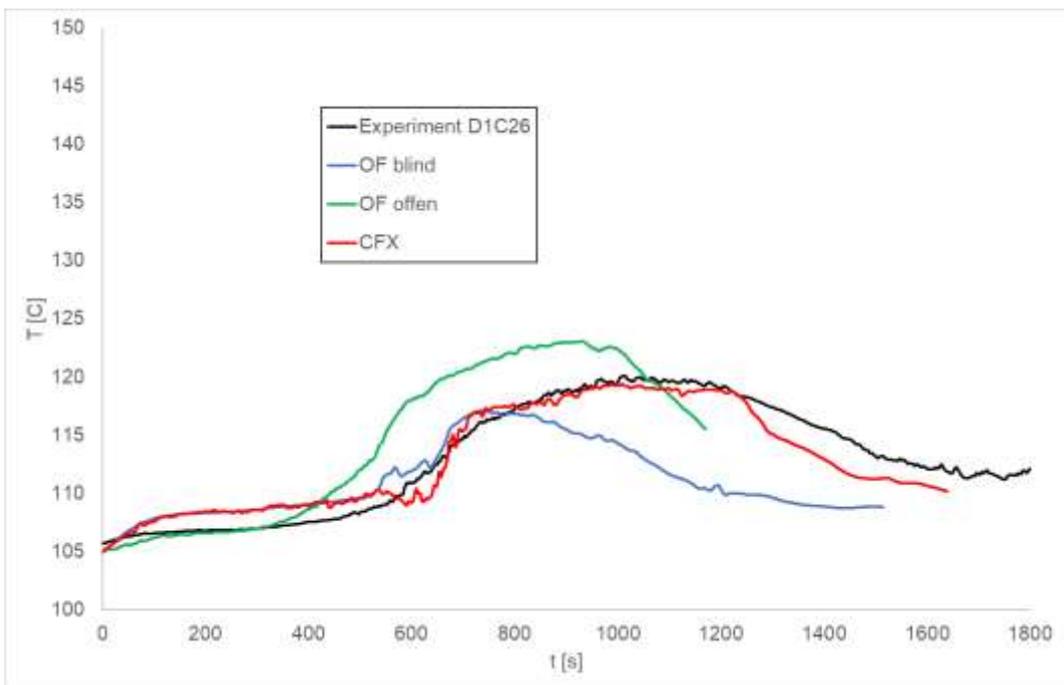
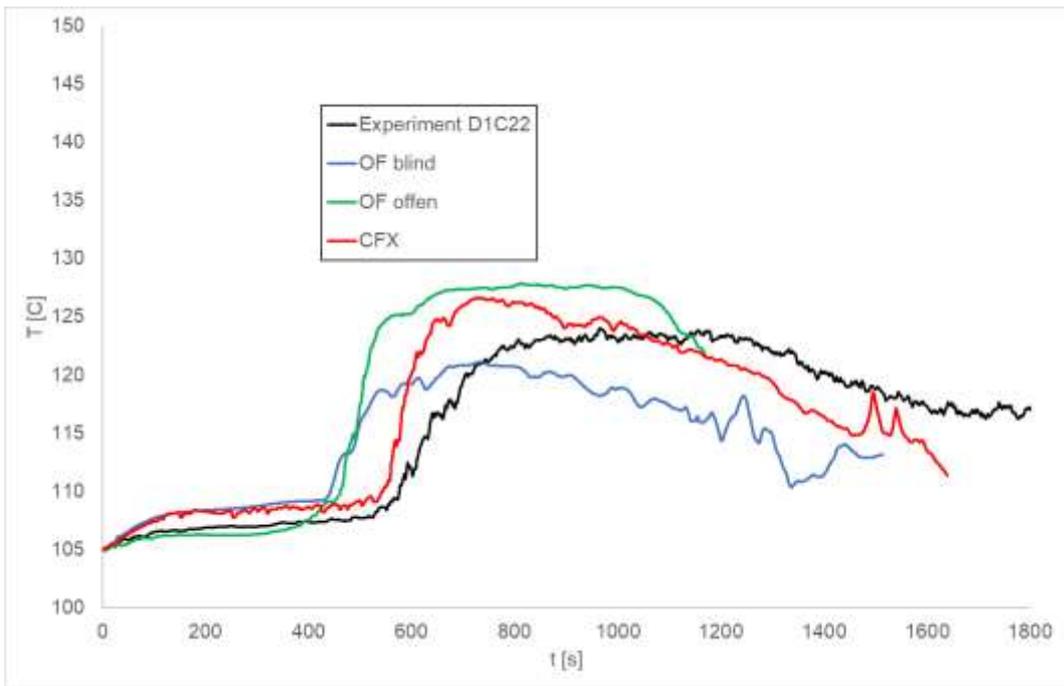


Abb. 4.21 Temperatur an den Messpunkten C22, C26

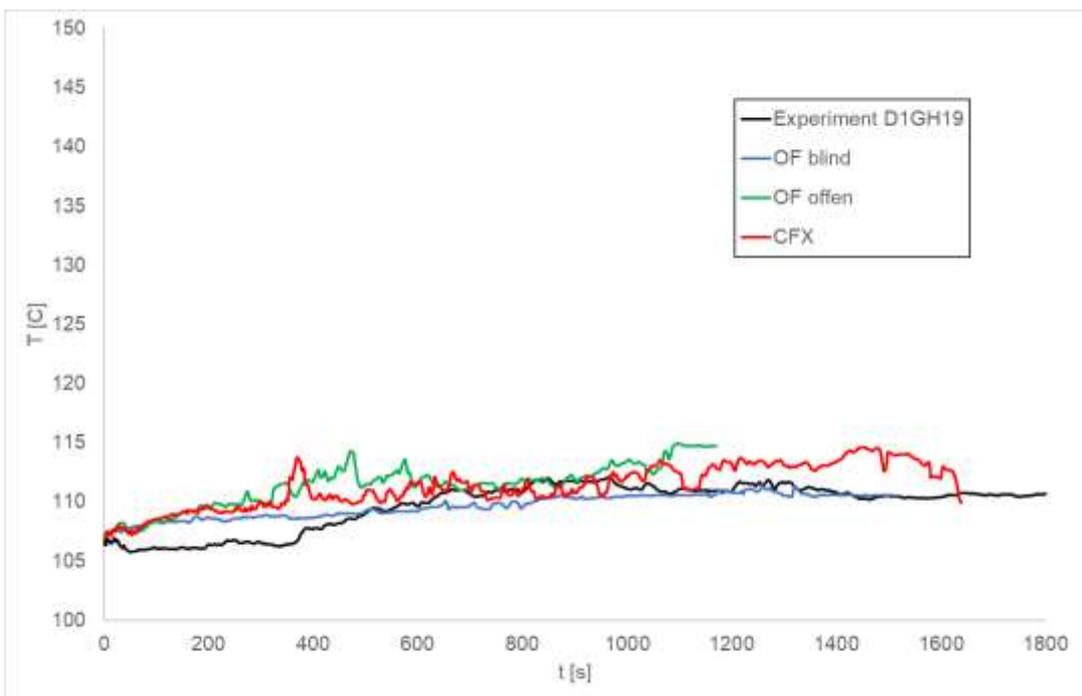
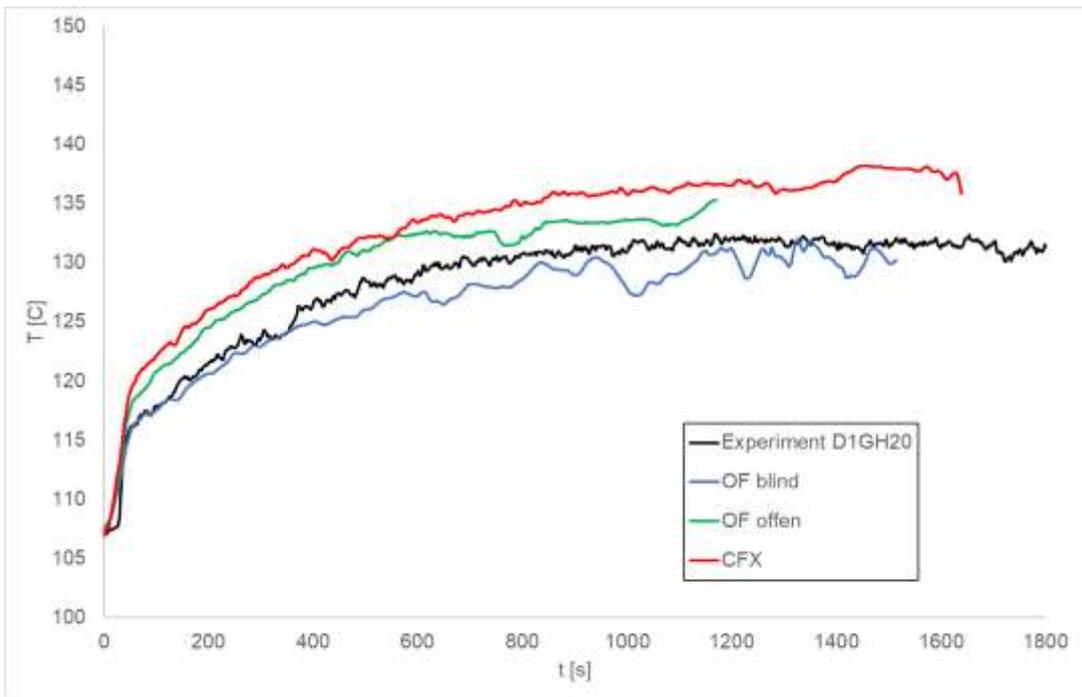


Abb. 4.22 Temperatur an den Messpunkten GH20, GH19

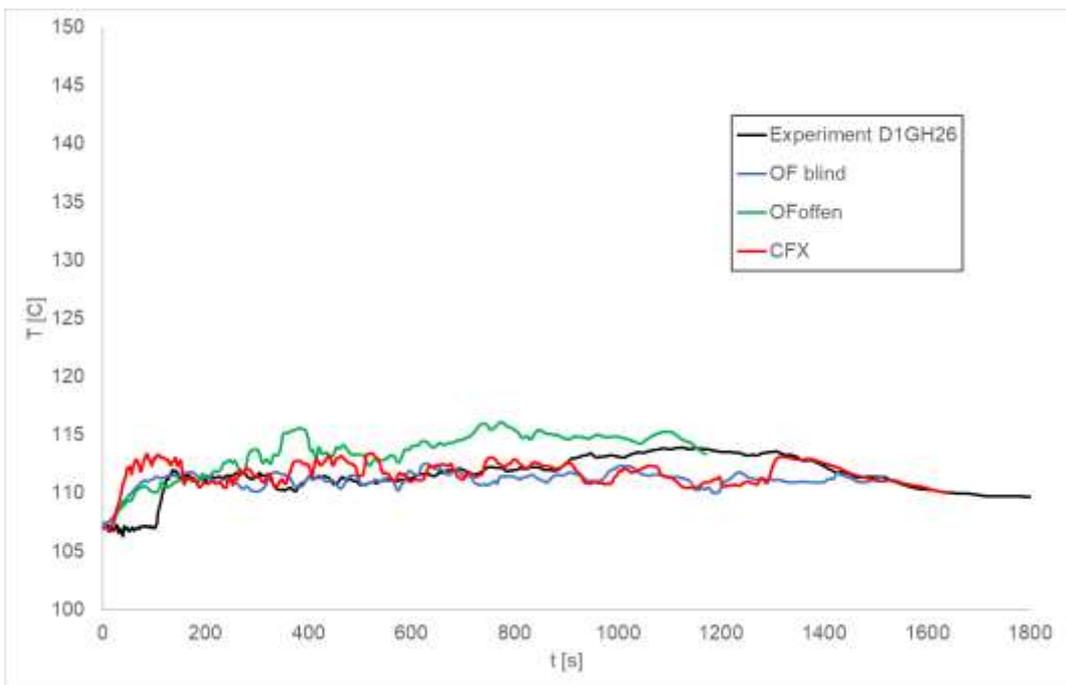
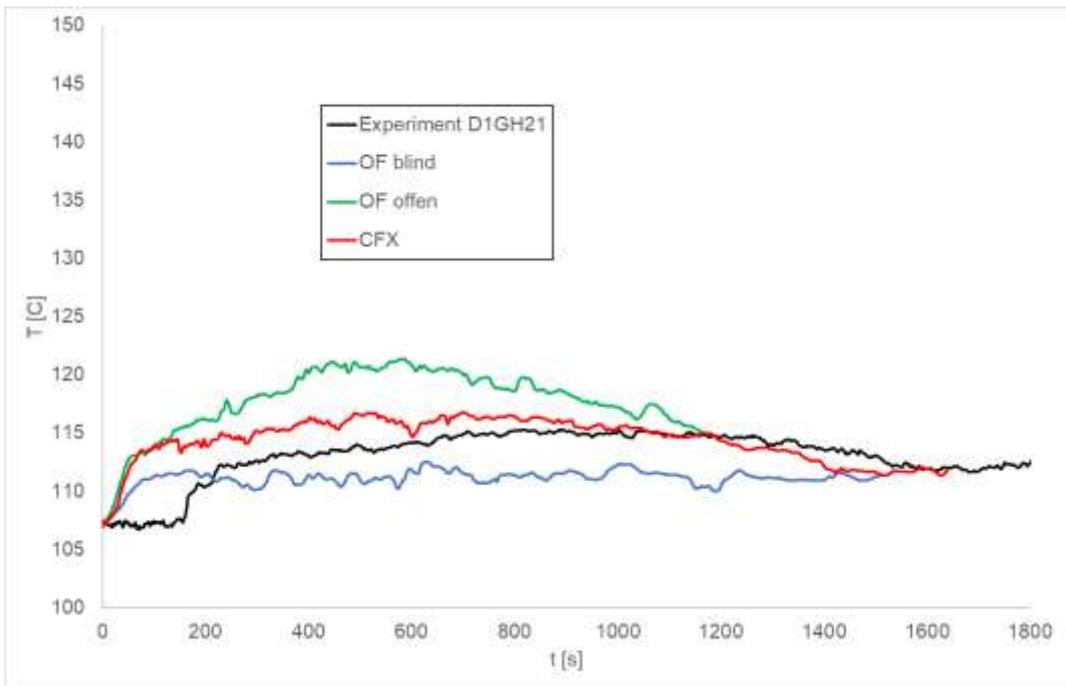


Abb. 4.23 Temperatur an den Messpunkten GH21 und GH26

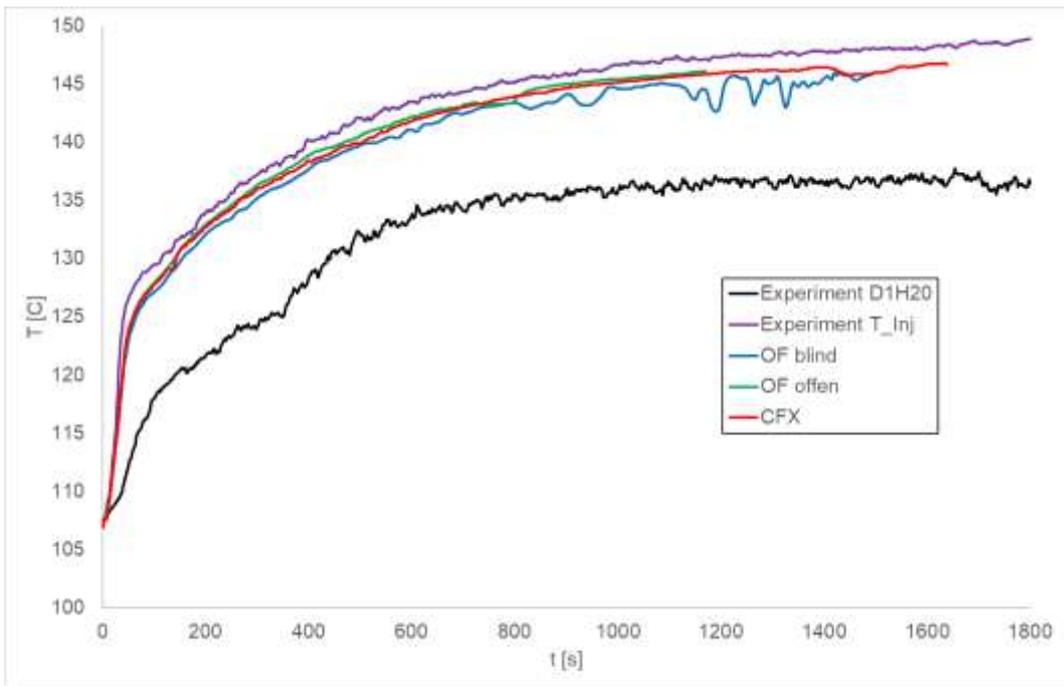


Abb. 4.24 Temperatur an der Messstelle H20

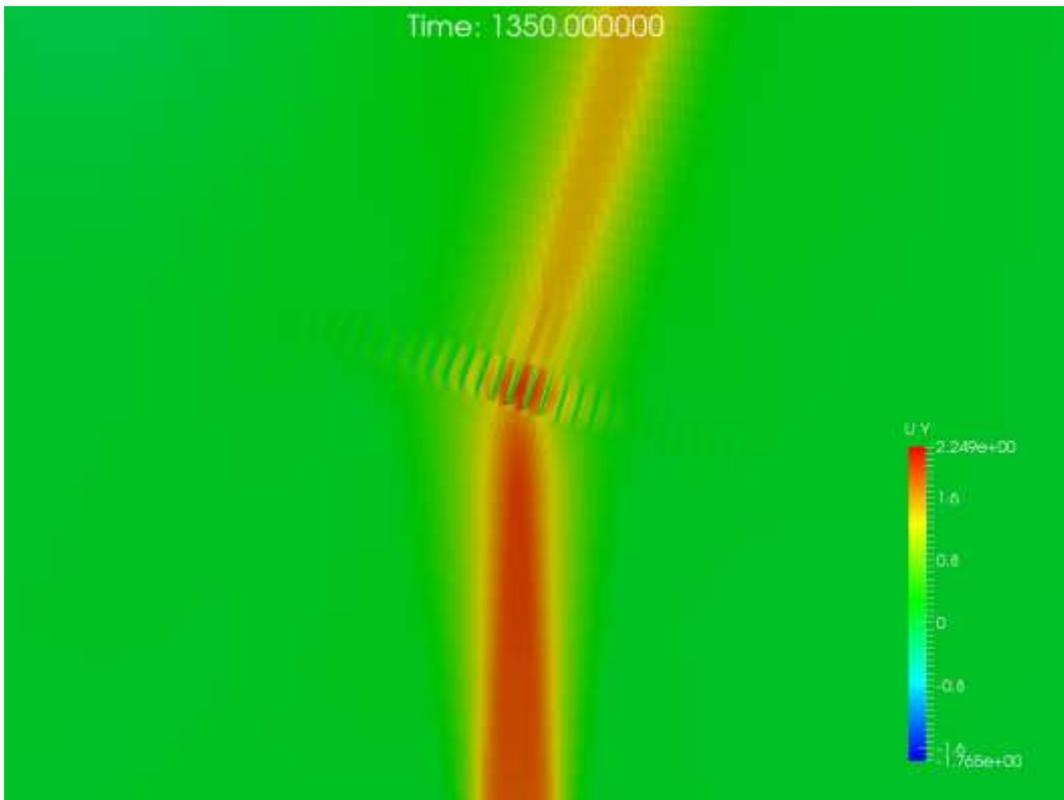


Abb. 4.25 Vertikalgeschwindigkeit im Bereich des Gitterrosts bei der offenen OpenFOAM Simulation nach 1350 s

4.1.4.6.3 Temperatur Gitterrost

In der Mitte des Gitterrosts G3 trifft der heie Dampfstrahl auf das Gitter und erwrmt es (Temperaturmessstellen siehe Abb. 4.26). Durch die hohe Strmungsgeschwindigkeit und den Temperaturunterschied kommt es zu einem starken Wrmetransfer vom Gas in den Festkrper. Die CFX-Simulation zeigt eine gute bereinstimmung mit dem Experiment am mittleren Messpunkt GR3 (siehe Abb. 4.17). Die offene OpenFOAM-Rechnung berechnet an diesem Punkt zu Beginn einen zu schnellen Temperaturanstieg. Allerdings flacht der Anstieg strker als im Experiment ab, so dass am Ende der Simulation die Abweichung zum Experiment nur noch 0,5 K betrgt. Die blinde OpenFOAM-Simulation unterschtzt dagegen den Temperaturanstieg ab 300 s deutlich und am Ende der Simulation ist die Temperatur des Gitterrosts um etwa 6 K niedriger.

Fr die Messtellen am Rand des Gitterrosts GR1 und GR5 ergeben sich qualitative Unterschiede zwischen Simulationen und Experiment (Abb. 4.28). Im Experiment sinkt die Temperatur des Gitters bis zum Zeitpunkt $t = 800$ s um knapp 2 K ab und steigt erst nach 1200 s wieder leicht an. Die Ursache fr den Temperaturabfall ist noch nicht im Detail geklrt. Laut Experimentatoren sind Wrmeverluste durch die Befestigung des Gitters als Ursache unwahrscheinlich. Denkbar ist, dass kaltes Gas in diesem Bereich durch den Gitterrost strmt und dabei die Struktur abkhlt. Allerdings sind die in diesem Bereich gemessenen Gastemperaturen nicht kleiner als 106 °C (wobei allerdings nicht sicher gestellt wird, dass die minimale Temperatur messtechnisch erfasst wurde, siehe Abb. 4.29). Ob dieser kleine Temperaturunterschied zur gemessenen Abkhlung ausreicht, ist unklar. Zudem liegen bereits nach weniger als 400 s alle gemessenen Gastemperaturen im Bereich des Gitters oberhalb der Gitterrosttemperatur bei GR1 bzw. GR5. Trotzdem fllt die gemessene Temperatur in der Struktur weiter ab.

In den CFX- und OpenFOAM-Simulationen steigt die Temperatur bei GR1 und GR5 an. Dies entspricht dem berechneten Strmungs- und Temperaturfeld. Grund fr den Temperaturanstieg im Gitter ist der Kontakt mit warmem Gas. So wird insbesondere in der Anfangsphase ein kleiner Teil des heien Dampfstrahls seitlich am Gitter abgelenkt und kann dabei auch die seitlichen Bereiche des Gitters erwrmen. Auch die brigen umgebenden Gastemperaturen sind schon nach kurzer Zeit grer als die initiale Gitterrosttemperatur (Abb. 4.29). Auerdem kommt es zustzlich zur Wrmeleitung innerhalb der Struktur von der heieren Mitte hin zu den klteren Rndern.

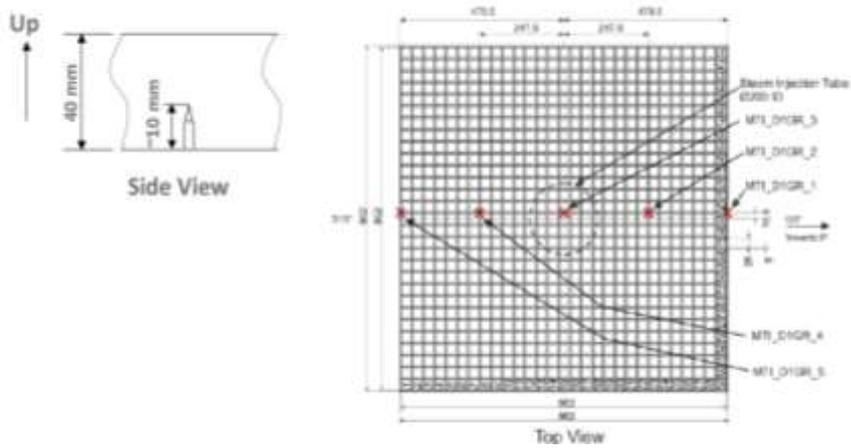


Abb. 4.26 Position der Temperaturmessstellen im Gitterrost /PAR 19/

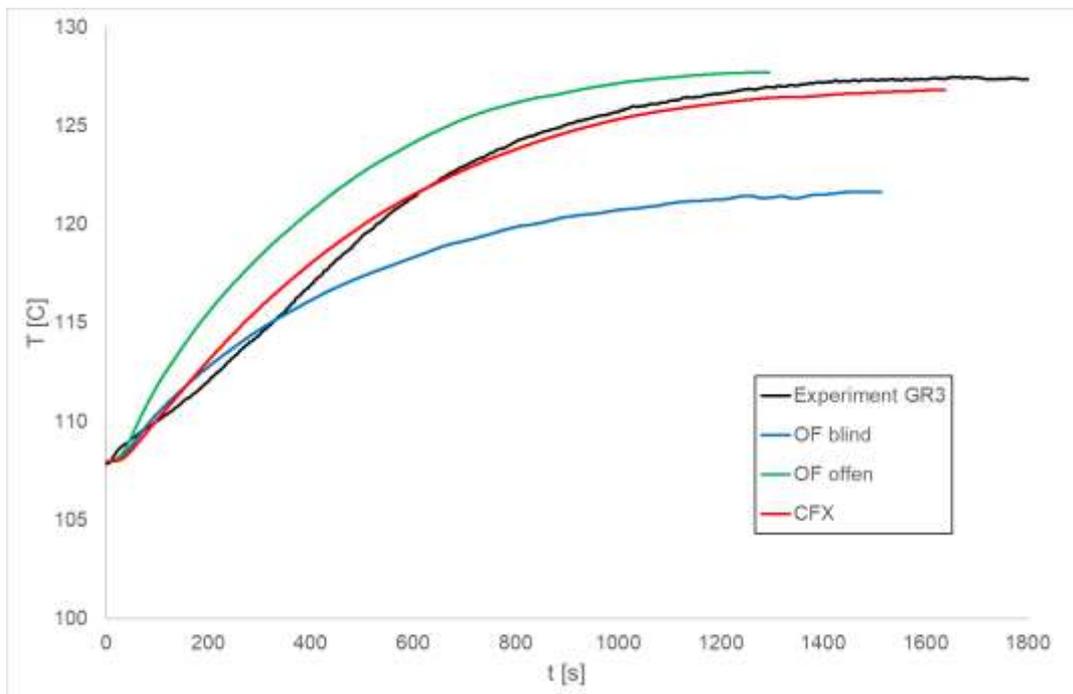


Abb. 4.27 Vergleich der Temperaturen des Gitterrosts an der mittleren Messstelle G3

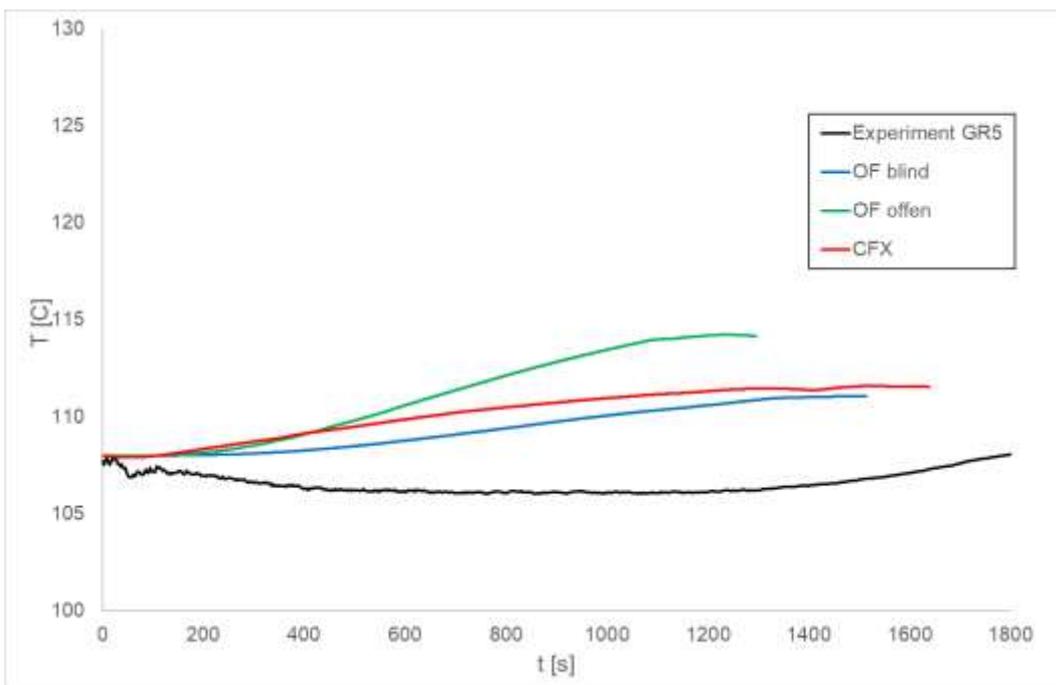
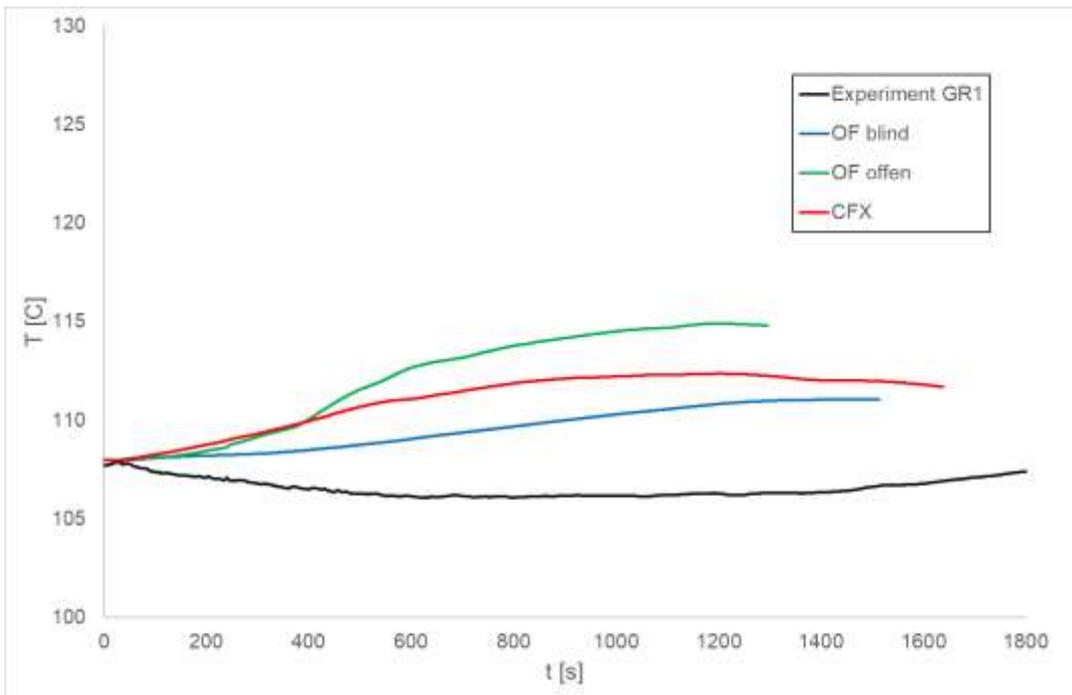


Abb. 4.28 Vergleich der Temperaturen des Gitterrosts an den Messstellen GR1 und GR5

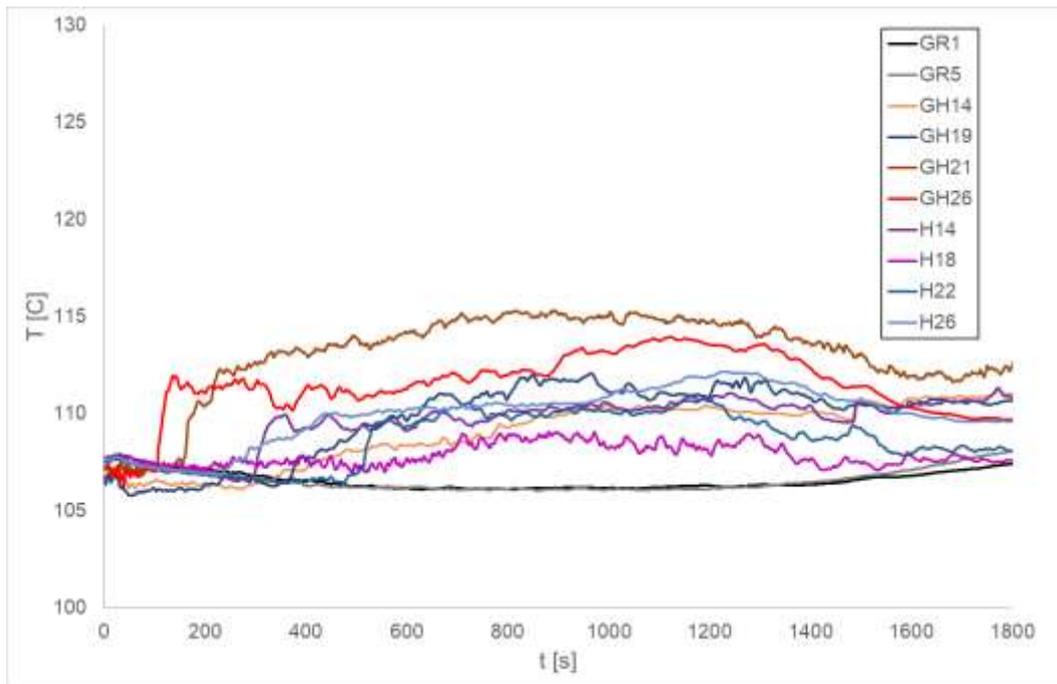


Abb. 4.29 Temperatur des Gitterrosts am Rand (GR1 und GR5) und Gastemperaturen in der Nähe (GHx, Hx) im Experiment

4.1.4.7 Zusammenfassung

Beim HYMERES2-Versuch H2P1_10_2 wird eine stabile Heliumschicht durch einen vertikalen Dampfstrahl erodiert. Zwischen Einlassrohr und Heliumschicht ist ein schräggestellter Gitterrost eingebracht, der den Dampfstrahl ablenkt. Der Versuch wurde mit CFX und OpenFOAM simuliert. Mit beiden Programmen konnte die Schichtungsauflösung in guter Übereinstimmung mit dem Experiment simuliert werden, wobei OpenFOAM eine etwas zu schnelle und CFX eine geringfügig zu langsame Erosion vorhersagt. Die im Versuch vorliegenden Temperaturen konnten bis auf einige lokale Abweichungen ebenfalls gut approximiert werden. Insbesondere im Bereich des Gitters sind bei der Gasströmung und der Temperatur Abweichungen zu sehen. Diese können zumindest teilweise durch die relativ grobe Vernetzung in diesem Bereich erklärt werden. Beim Vergleich der Temperaturen innerhalb des Gitterrosts ergibt sich für die Messstellen am Rand (GR1 und GR5) eine qualitative Abweichung. Hier ist noch nicht abschließend geklärt, warum die Temperatur im Experiment in den ersten 800 s absinkt, während sie in allen Simulationen ansteigt.

Als Fazit kann gezogen werden, dass die Strömung durch einen Gitterrost und die anschließende Erosion einer stabilen Leichtgasschichtung mit moderaten Abweichungen bei Gaskonzentration und Temperatur berechnet werden kann. Allerdings muss bei der

Berücksichtigung von Gitterrosten in komplexen Geometrien – wie in einem Containment – eine vereinfachte Modellierung entwickelt werden, da die detaillierte Abbildung der Gitterroste im CFD-Gitter nicht praktikabel ist. Ein Ansatz hierzu wäre die Modellierung des Gitters als poröses Medium.

4.1.5 Simulation des Versuchs TH32

4.1.5.1 Einleitung

Auch der THAI-Versuch TH-32 soll im Rahmen des Arbeitspunktes AP3.1 zur Validierung von OpenFOAM-Modellen zur Gasverteilung und Schichtungsauflösung genutzt werden. Der TH-32-Versuch besteht im Wesentlichen aus drei Phasen:

1. In der **ersten Phase** wird der THAI-Behälter unter Umgebungsbedingungen ($\sim 23\text{ °C}$, 1 bar) abgeschlossen. Die beiden unteren Ölmäntel werden beheizt, der obere Ölmantel gekühlt (Geometrie siehe Abb. 4.30). Dies erfolgt so lange, bis ein stationärer Zustand erreicht wird. Die Wandtemperaturen betragen für die Heizmäntel 119 °C bzw. 120 °C , der Kühlmantel hat eine Temperatur von ca. 42 °C . Das Gas im Inneren des Behälters wird dabei aufgeheizt und der Druck erhöht sich auf etwa 1,21 bar. Es kommt zur Ausbildung von Naturkonvektionsschleifen.
2. Nach Ausbildung des Gleichgewichtszustands wird in der **zweiten Phase** Helium (insgesamt 1,65 kg) durch ein Einspeiserrohr in 6,7 m Höhe eingespeist. Die Einspeisung dauert 234 s und führt zu einer Ausbildung einer stabilen Heliumschicht mit einer maximalen Konzentration von ca. 50 vol.-%.
3. In der **dritten Phase** führt die Naturkonvektion zu einer langsamen Erosion der Heliumschichtung. Diese ist nach ca. 3650 s vollständig aufgelöst. Im Behälter werden an unterschiedlichen Punkten die Temperaturen und die Heliumkonzentration gemessen. Die in diesem Bericht relevanten Punkte sind in Abb. 4.30 zu finden. Mit der Konzentrationsmessung ist ein Massenstrom von 680 l/h verbunden. Dieser durch die Messung bedingte Massenverlust wird in den Simulationen nicht berücksichtigt.

Weitere Informationen zum Versuch finden sich in /FRE 20/. Die GRS hat sich mit CFX- und OpenFOAM-Simulationen and der „blinden“ und „offenen“ Phase des von Becker Technologies organisierten TH-32-Benchmarks beteiligt. Die durchgeführten Rechnungen werden im Folgenden diskutiert.

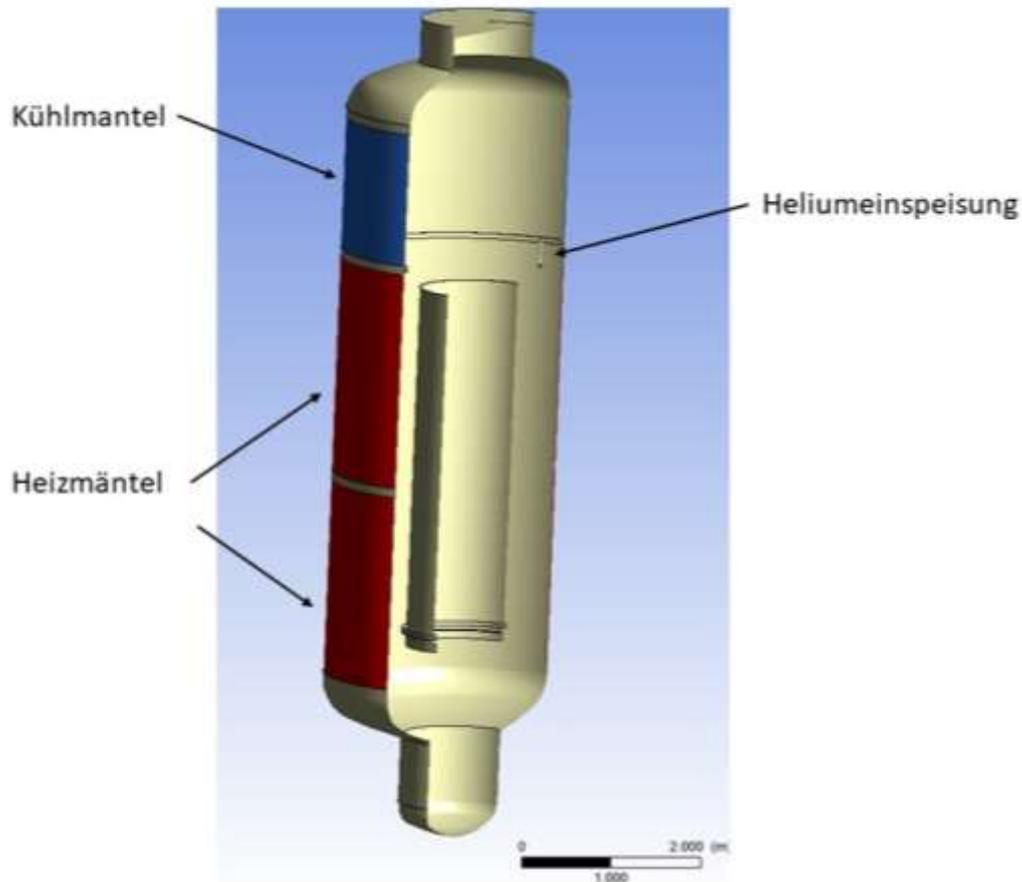


Abb. 4.30 Geometrie des THAI-Experimentes TH-32

4.1.5.2 In den Simulationen verwendetes CFD-Gitter

Die CFX- und die OpenFOAM-Simulationen wurden mit dem gleichen CFD-Gitter durchgeführt. Das standardmäßig verwendete CFD-Gitter besteht für die Gasdomäne aus 1,475 Millionen strukturierten Zellen (Hexaedern). In sensiblen Bereichen wurde das Gitter gezielt verfeinert. So wurde in Wandnähe das Gitter verfeinert, um den Wärmetransfer zwischen Wänden und Gas hinreichend genau abbilden zu können. Während der Phase der Schichtungsauflösung liegt der dimensionslose Wandabstand y^+ (CFX-Sim.) unter 20 (siehe Abb. 4.33). Der maximale y^+ -Wert liegt unter 150 (CFX-Sim.). Es tritt während der Heliumeinspeisung am Mannloch und oberhalb der Heliumeinspeisung auf. Damit liegt der y^+ -Wert immer im Gültigkeitsbereich der Wandfunktionen des SST-Models in CFX.

Die Behälterwände und die Wände wichtiger Strukturen (Innenzylinder, obere Kondensatorrinne) werden als Solid-Blöcke ins Gitter integriert. Im standardmäßig verwendeten

Gitter besteht die Solid-Domäne aus 137.000 Elementen. Die Kühl-/Heizmäntel und die Isolierung werden nicht simuliert, sondern ihr Effekt wird durch Randbedingungen modelliert.

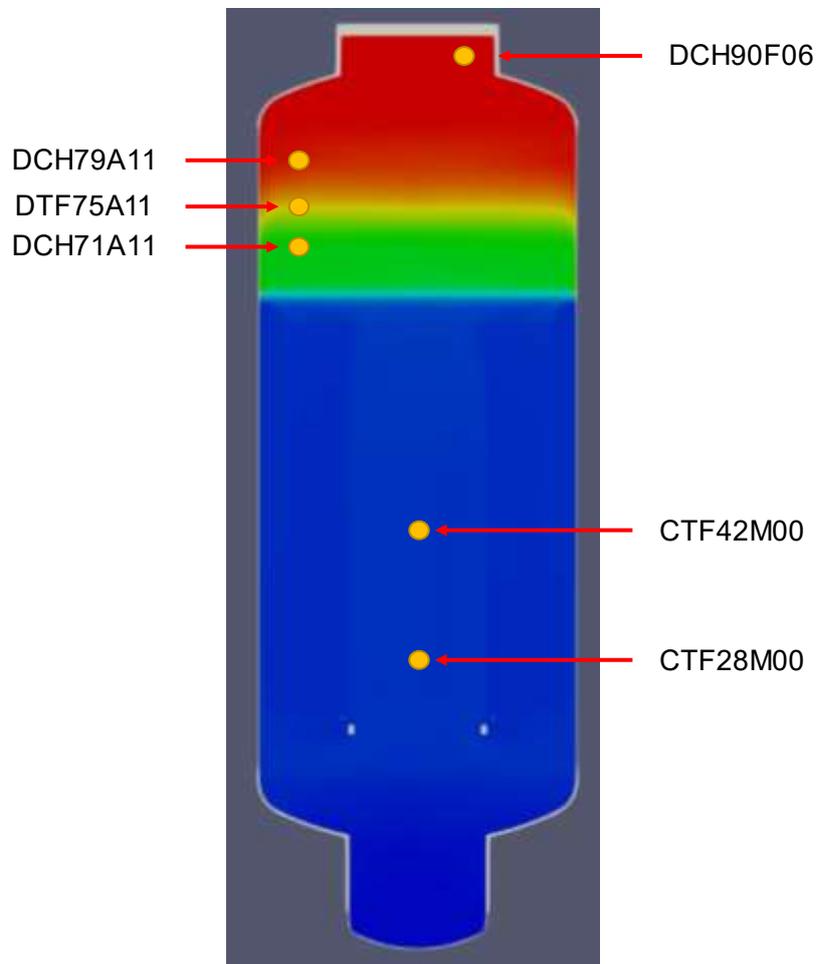


Abb. 4.31 Position ausgewählter Messstellen

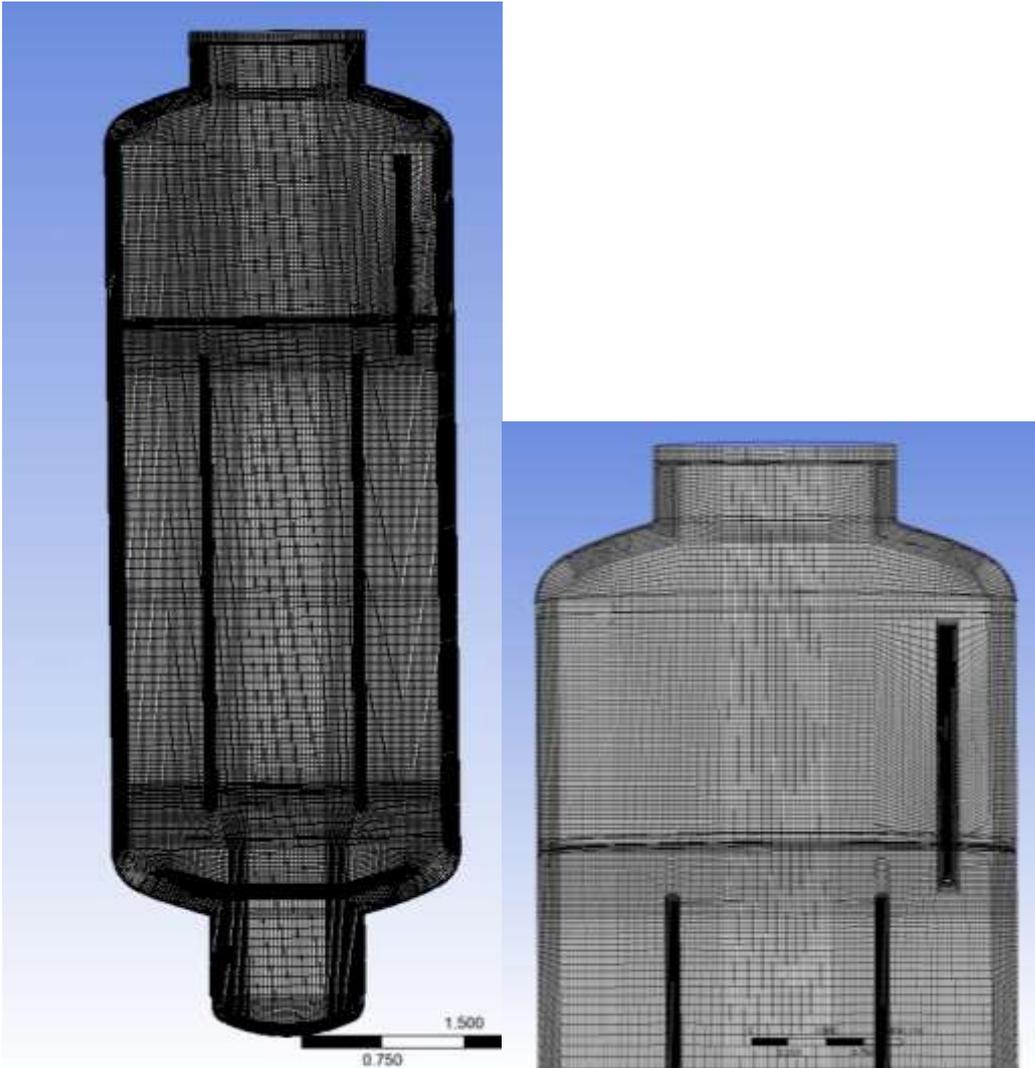


Abb. 4.32 In den Simulationen verwendetes CFD-Gitter

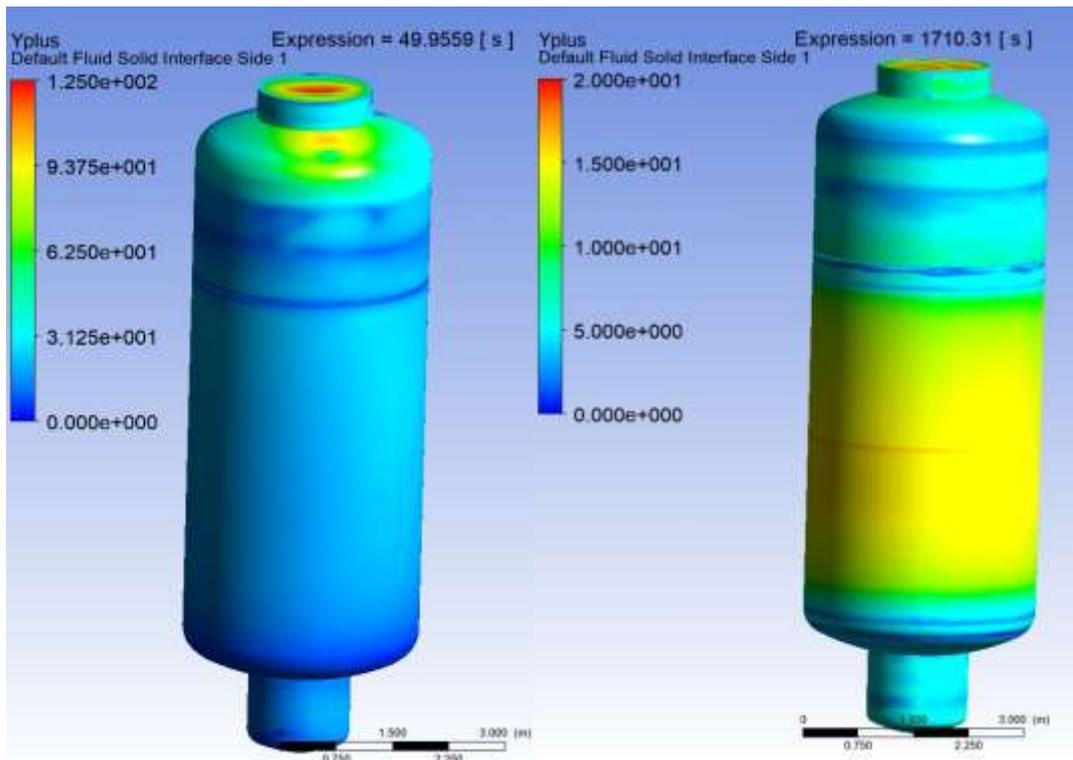


Abb. 4.33 y^+ (CFX-Sim.) an den Außenwänden während Heliumeinspeisung ($t = 50$ s, links) und während der Auslösung der Heliumschicht ($t = 1710$ s, rechts)

4.1.5.3 Modellierung in CFX

Der Versuch wurde mit CFX-19 simuliert. Helium und Luft wurden als ideale Gase modelliert. Die Turbulenz wurde mit dem SST-Modell einschließlich der Buoyancy-Terme (Production, Dissipation) berechnet. Wärmestrahlung wird mit dem Discrete-Transfer-Modell berücksichtigt, wobei für Luft ein kleiner Absorptionskoeffizient von $0,01 \text{ [m}^{-1}/\text{bar]} \cdot \text{Druck}$ angenommen wird. Dies berücksichtigt den kleinen Anteil von absorbierenden Gasen (insbesondere Dampf wegen Luftfeuchtigkeit). Die Diffusionskonstante D_{He} von Helium wurde mit der Fuller-Korrelation berechnet ($6.2e-5 \text{ m}^2/\text{s} \leq D_{\text{He}} \leq 7.2e-5 \text{ m}^2/\text{s}$).

Zentraler Punkt bei der Simulation des TH-32-Experiments ist die Wahl geeigneter Randbedingungen für die Heizmäntel, den Kühlmantel und die unbeheizten Bereiche, bei denen eine ca. 12 cm dicke Isolation aus Mineralwolle und einer 1 mm dicken Aluminiumfolie Wärmeverluste ins Gebäude verringert. Die Aufwärmphase wurde mit unterschiedlichen Ansätzen für Modellierung der Randbedingungen simuliert.

Es wurden folgende zwei Ansätze verfolgt:

- Vorgabe der mittleren im Versuch gemessenen Manteltemperatur bzw. Wandtemperatur als Temperaturrandbedingung.
- Vorgabe eines Wärmeübergangskoeffizienten und einer Außentemperatur, die die experimentell bestimmte Manteltemperatur bzw. die Temperatur im Gebäude ist ($\sim 23.5\text{ °C}$).

Mit folgenden Randbedingungen konnten bei den CFX-Simulationen die im Experiment gemessene Temperaturverteilung und die Wärmeströme in die Behälterwände am besten simuliert werden (siehe Tab. 4.2).

Tab. 4.2 Temperaturrandbedingungen in CFX-Simulation

Fläche	Temperatur	Wärmeübergangskoeffizient
	[°C]	[W / m ² K]
Heizmantel (Unten)	119,5	120
Heizmantel (Mitte)	119,8	120
Kühlmantel (Oben)	42,0	20
Isolierte unbeheizte Wände	Vorgabe der gemessenen Wandtemperatur	

4.1.5.4 Modellierung in OpenFOAM

Für die OpenFOAM-Rechnung wurde das Standardgitter verwendet, das auch für die CFX-Rechnung genutzt wurde (1,6 Mio. Zellen, siehe Abb. 4.30). Das Experiment wurde mit OpenFOAM 6 berechnet. Dabei wurden Helium und Luft als ideale Gase simuliert. Die Turbulenz wurde mit dem SST-Turbulenzmodell (inklusive Buoyancy-Terme) berechnet. Thermische Strahlung wurde vernachlässigt (anders als bei CFX). Für die Diffusion wurde ein konstanter Diffusionskoeffizient von $7.5e-5\text{ m}^2/\text{s}$ verwendet. Weitere Details zur OpenFOAM-Rechnung finden sich in Tab. 4.3.

Die in den OpenFOAM-Rechnungen verwendeten Randbedingungen sind in Tab. 4.4 dargestellt. Für die Wärme- und Kühlmäntel wurde jeweils eine Außentemperatur und ein Wärmeübergangskoeffizient von $100\text{ W / m}^2\text{ K}$ spezifiziert. Für die unbeheizten isolierten Wände wurde eine andere Außentemperatur und ein Wärmeübergangskoeffizient von $2\text{ W / m}^2\text{ K}$ verwendet. Die initiale Temperatur- und Geschwindigkeitsverteilung

beim Start der Heliumeinspeisung wurde mit Hilfe einer transienten Rechnung bestimmt. Dabei wurde aber nicht die komplette Phase 1 berechnet, sondern nur ein kürzerer Einschwing-Zeitraum (2000 s).

Mit OpenFOAM gab es sowohl eine blinde wie auch eine offene Nachrechnung des TH-32-Experimentes. Diese beiden Rechnungen unterscheiden sich hinsichtlich der Diffusionsmodellierung (blinde Sim. „Work-Around“, offene Sim. „Fick’sches Diffusionsgesetz“) und auch hinsichtlich verschiedener numerischer Parameter. Die offene Simulation nutzt genauere Verfahren höherer Ordnung. Mehr Details dazu finden sich in Tab. 4.5. Die Start- und Randbedingungen sind aber in blinder und offener OpenFOAM-Simulation gleich.

Tab. 4.3 Infobox für den THAI-Versuch TH-32

Experiment	THAI TH-32
Phänomene	Gasverteilung / Naturkonvektion / Schichtungsbildung und -auflösung
Materialien	Helium, Air
Software / Version	OpenFOAM 6
Solver	chtMultiRegionSchmidtFoam(05)
Zeitschritte	Variabel
Turbulenzmodell	buoyantkOmegaSST einschließlich Buoyancy-Terme
Strahlungsmodell	Ohne
Diffusionsmodell	Diff.-Koeff.: $7.5e-5 \text{ m}^2/\text{s}$
Gittererstellung	Pointwise
Elementzahl	1.601.324 (Gas: 1.475.000, Wand: 126.324)

Tab. 4.4 Randbedingungen für die OpenFOAM-Rechnungen (blind und offen)

Fläche	Temperatur	Wärmeübergangskoeffizient
	[°C]	[W / m ² K]
Heizmantel (Unten)	119,5	100
Heizmantel (Mitte)	119,8	100
Kühlmantel (Oben)	42,0	100
Isolierte unbeheizte Wände	23,0	2

Tab. 4.5 Vergleich von Parametern bei blinder und offener OpenFOAM-Rechnung

	Blind	Offen
Solver	chtMultiRegionSchmidt-Foam05	chtMultiRegionSchmidtFoam
Diffusion	“Work-Around”	Fick’sches Diffusionsgesetz
maxCo	20	5
momentumPredictor	No	Yes
nOuterCorrectors	15	25
nCorrectors	2	3
nNonOrthogonalCorrectors	1	3
ddtSchemes	Euler	CrankNicolson 0,33
gradSchemes	Gauss linear	cellLimited Gauss linear 0,5
divSchemes	Überwiegend 1. Ordnung	1. und 2. Ordnung
laplacianSchemes	Gauss linear uncorrected	Gauss linear limited 1
snGradSchemes	uncorrected	limited 1

4.1.5.5 Simulation der ersten Phase (Aufheizen)

Die Aufwärmphase wurde nicht explizit mit CFX und OpenFOAM nachgerechnet. Vielmehr wurden die experimentellen Mittelwerte (Druck, Temperaturen) als Startwerte für eine transiente Simulation ohne Heliumeinspeisung verwendet. So konnten sich nach einer gewissen Einschwingzeit die Temperaturprofile in den Wänden und die Geschwindigkeits- und Temperaturverteilung im Gas herausbilden.

Abb. 4.34 zeigt die Temperaturverteilung der Behälteratmosphäre am Ende der Aufwärmphase, aufgetragen über der Höhe im Behälter. Die Werte der OpenFOAM-Simulationen wurden jeweils über den Zeitbereich von -20 s bis 0 s gemittelt, um Schwankungen auszugleichen. Alle Simulationen berechnen in dem Übergangsbereich von Heiz- und Kühlmänteln ausgeprägte Peaks, die in den experimentellen Werten nur schwach zu finden sind. Die beiden OpenFOAM-Simulationen unterschätzen die Temperaturen im oberen Behälter um einige Grad. Im unteren Bereich passt die offene OpenFOAM-Simulation am besten zu den experimentellen Ergebnissen. Die Temperaturwerte sollten aber nicht überbewertet werden, da sie (trotz zeitlicher Mittelung) immer noch gewisse Schwankungen aufweisen.

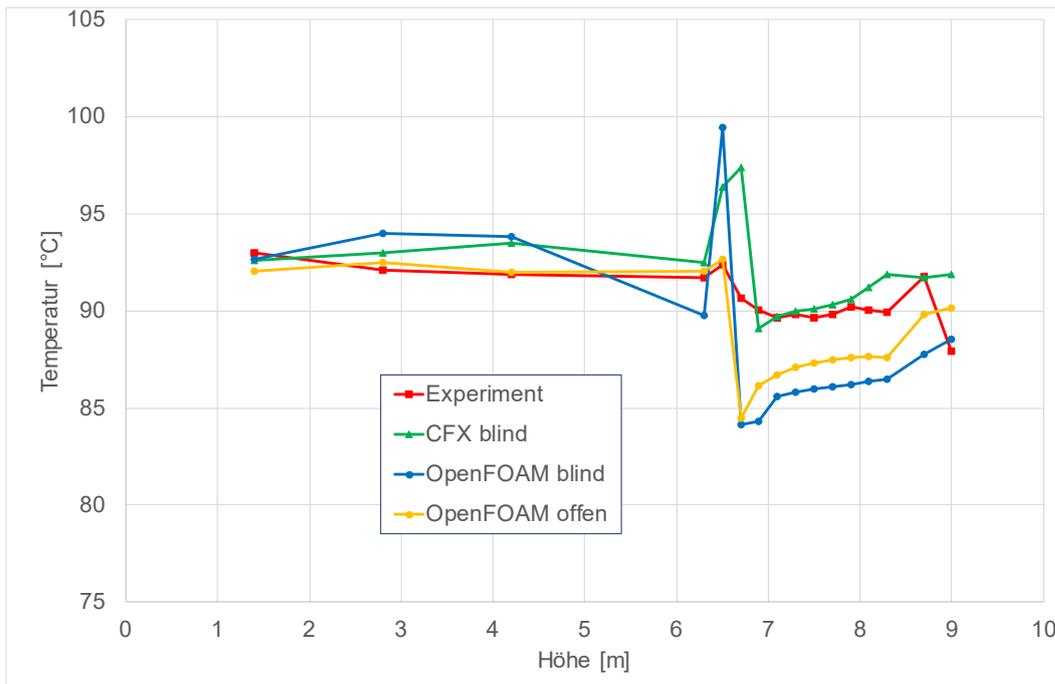


Abb. 4.34 Temperaturverteilung am Ende der Aufwärmphase

4.1.5.6 Simulation der zweiten Phase (Heliumeinspeisung)

Abb. 4.35 zeigt einen Vergleich des Heliumprofils am Ende der Einspeisung bei $t = 237$ s. Die Simulationen sind jeweils über den Zeitbereich 230 – 245 s gemittelt, um Schwankungen auszugleichen. Es zeigt sich, dass bei der blinden CFX-Rechnung und bei der offenen OpenFOAM-Rechnung die Heliumkonzentration im oberen Behälter geringfügig überschätzt wird. Dafür wird bei den beiden Rechnungen in den unteren Bereich nahezu kein Helium transportiert. Im Experiment wird dagegen eine Heliumkonzentration von 1 – 2 vol.-% gemessen. Die Stärke der Schichtung wird also bei diesen beiden Simulationen etwas überschätzt. Dies führt zu einer tendenziell längeren Erosionszeit als im Experiment gemessen wurde. Bei der blinden OpenFOAM-Rechnung wurde die Heliumkonzentration im unteren Behälter besser getroffen. Dafür wurde die maximale Heliumkonzentration im oberen Behälter etwas (ca. 3 vol.-%) unterschätzt. Dies führt zu einer etwas weniger stabilen Schichtung als im Experiment und in den beiden anderen Simulationen.

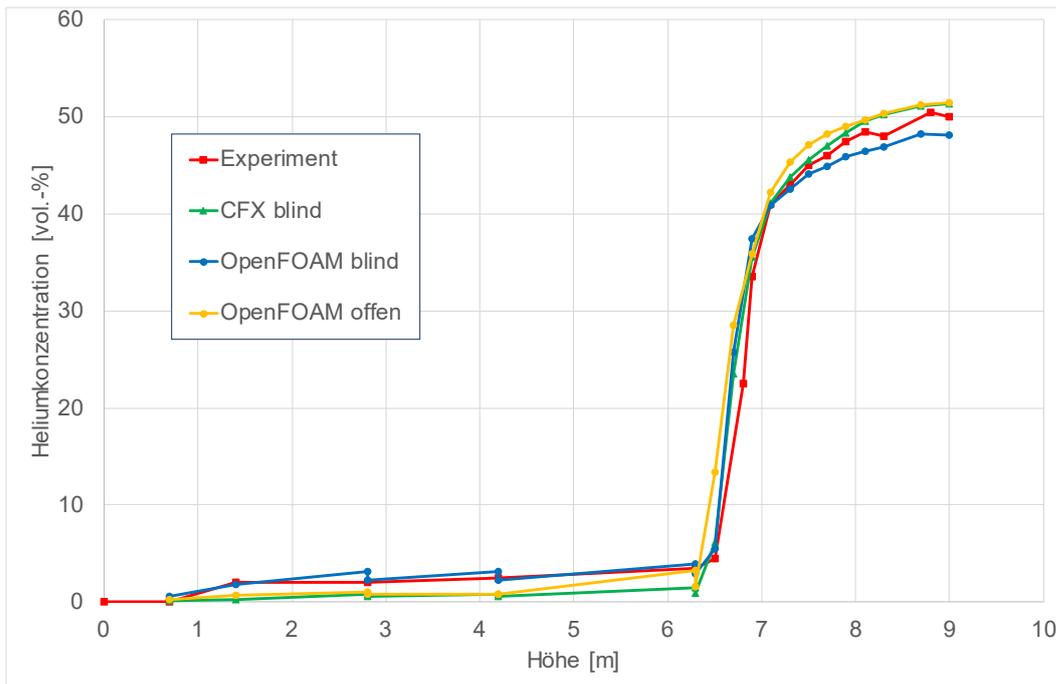


Abb. 4.35 Vergleich des Heliumprofils am Ende der Einspeisung bei $t = 237$ s

4.1.5.7 Simulation der dritten Phase (Schichtungserosion)

In Abb. 4.36 bis Abb. 4.38 ist die Heliumkonzentration in unterschiedlichen Höhen dargestellt. Grundsätzlich passt die berechnete Auflösungszeit der blinden OpenFOAM-Rechnung (ca. 3250 s) am besten zu der experimentellen Auflösungszeit (ca. 3650 s). Die blinde CFX-Rechnung überschätzt die Auflösungszeit mit berechneten 7600 s deutlich. Die offene OpenFOAM-Rechnung hat prinzipiell eine genauere Diffusions-Berechnung, kleinere Zeitschritte und genauere numerische Ansätze, liegt jedoch trotzdem weiter vom Experiment entfernt als die blinde OpenFOAM-Rechnung (Auflösungszeit ca. 5900 s). Dafür hat sich die offene OpenFOAM-Rechnung an die CFX-Rechnung angelehert.

Ein Grund für den langsameren Schichtungsabbau ist, dass die offene OpenFOAM-Rechnung und die CFX-Rechnung schon in der Aufbau-Phase eine stärkere Schichtung mit höheren Helium-Konzentrationen in der oberen Schichtung und niedrigeren Heliumkonzentrationen im unteren Teil des Behälters berechnet haben (siehe Abb. 4.35). Weiterhin verringern die genaueren numerischen Verfahren in der offenen OpenFOAM-Rechnung numerische Diffusion. Die unterschiedliche Behandlung der Diffusion und dem damit verbundenen Energietransport in den beiden OpenFOAM-Solvern (siehe Abschnitt 2.2.2.1) kann ebenfalls die Erosionsgeschwindigkeit beeinflussen.

Weiterhin sind die genauen Randbedingungen (z. B. lokale Temperaturverteilung und Wärmeübergangskoeffizienten and den Heiz-/Kühlmänteln) experimentell nur teilweise bekannt und mit Unsicherheiten behaftet. Sie wurden teilweise nur vereinfacht in den Rechnungen simuliert (z. B. mittlere Manteltemperatur). Testrechnungen in der blinden Benchmarkphase mit CFX haben gezeigt, dass der Schichtungsabbau sehr sensitiv auf diese Randbedingungen reagiert. Die Abweichungen können deshalb teilweise auch auf Wahl von ungenauen Start- und Randbedingungen zurückzuführen sein.

Neben diesen experimentell bedingten Unsicherheiten ist aber davon auszugehen, dass auch auf Modellierungsseite noch Verbesserungsbedarf besteht. Im Gegensatz zur Simulation erzwungener Konvektion (z. B. H2P1_10) scheint bei der hier vorliegenden Berechnung der Schichtungsauflösung durch freie Konvektion noch Weiterentwicklungsbedarf insbesondere bei der Turbulenzmodellierung zu bestehen. Arbeiten am FZ Jülich haben gezeigt, dass mit dem Wilke-Mischungsmodell, das in containmentFOAM implementiert wurde, eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt werden kann.

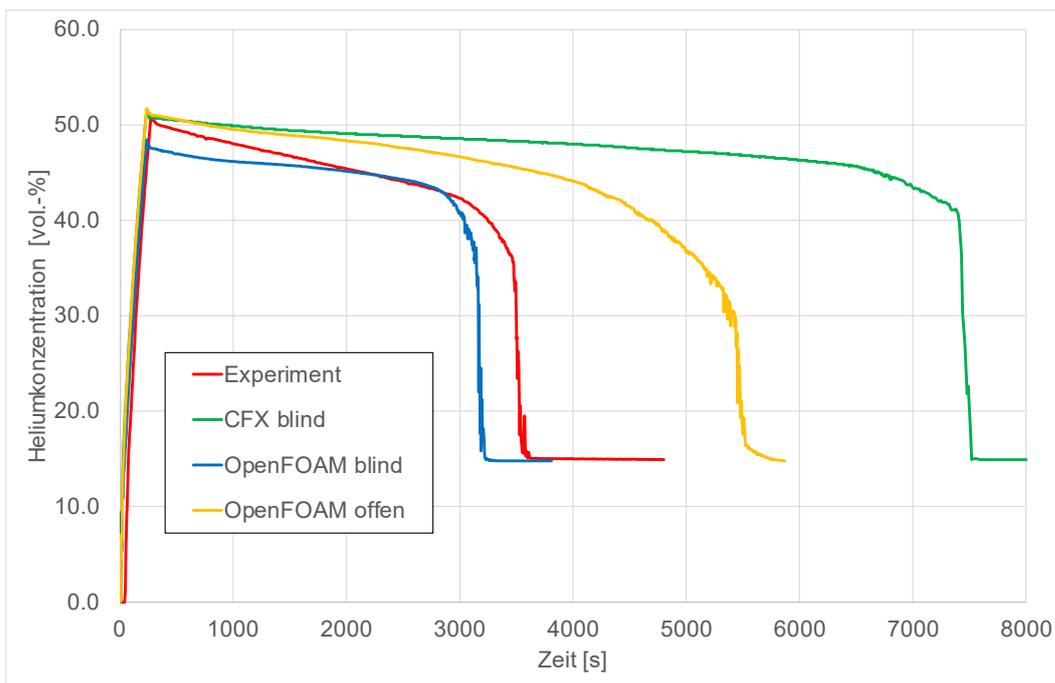


Abb. 4.36 Vergleich der Heliumkonzentrationen in 9,0 m Höhe (Messpunkt DCH90F06)

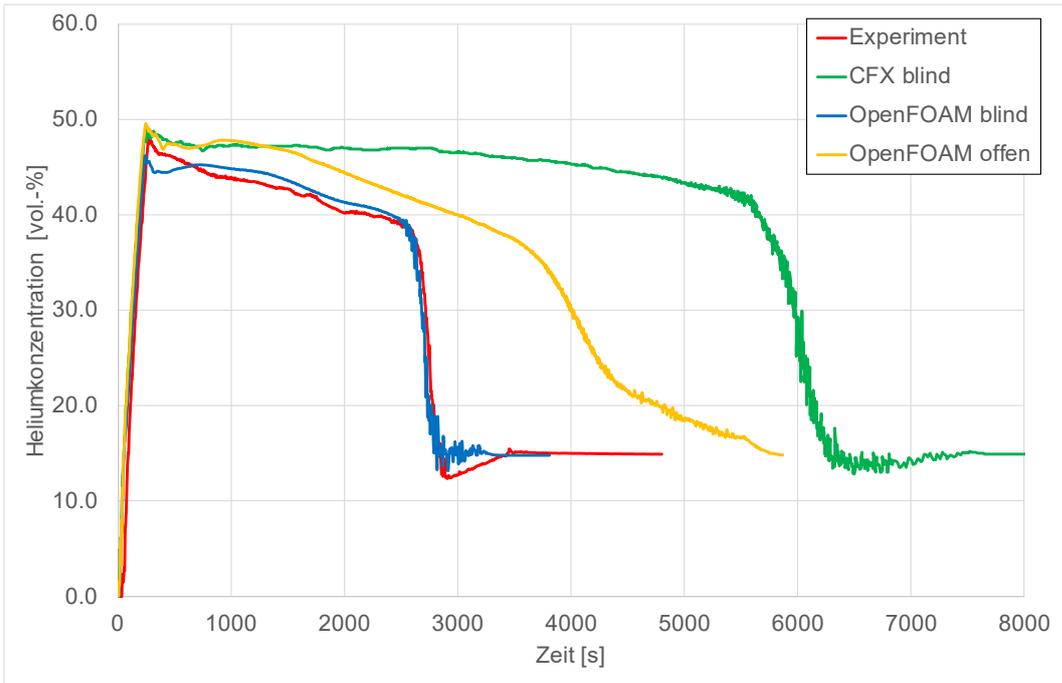


Abb. 4.37 Vergleich der Heliumkonzentrationen in 7,9 m Höhe (Messpunkt DCH79A11)

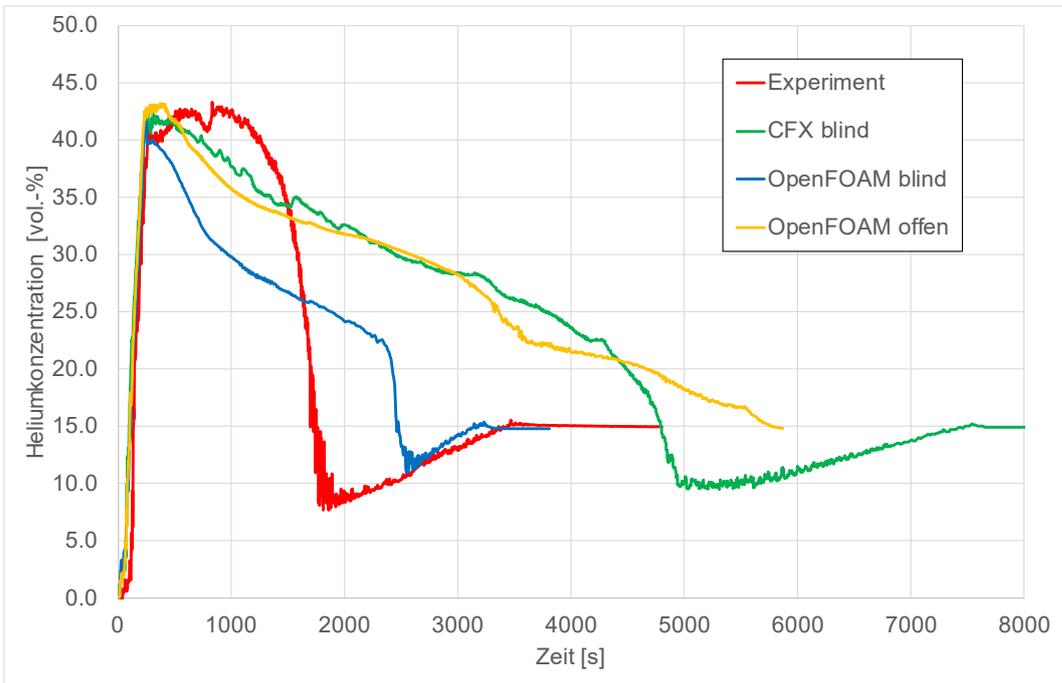


Abb. 4.38 Vergleich der Heliumkonzentrationen in 7,1 m Höhe (Messpunkt DCH71A11)

In Abb. 4.39 und Abb. 4.40 ist der Temperaturverlauf im oberen Teil des Behälters dargestellt. Grundsätzlich sinken die Temperaturen nach der Heliumeinspeisung im Bereich

der Schichtung zunächst ab. Wenn sich die Schichtung wieder auflöst, steigen die Temperaturen dann wieder sprunghaft an. Die Höhe der Temperaturen wird von den Simulationen gut getroffen. Allerdings unterscheidet sich der Zeitpunkt der Schichtungsauflösung deutlich. Hier passt die blinde OpenFOAM-Rechnung wieder am besten zum Experiment, während die CFX-Rechnung mit der langen Auflösungszeit wieder den größten Unterschied zum Experiment aufweist. In Abb. 4.41 und Abb. 4.42 sind die Temperaturverläufe im mittleren und unteren Bereich dargestellt. Die beiden OpenFOAM-Rechnungen passen ganz gut zu den experimentellen Werten. Die CFX-Rechnung überschätzt die experimentellen Werte hingegen leicht, allerdings wird bei dieser Simulation die Schichtungserosion deutlich langsamer berechnet als im Versuch. Vergleicht man die Temperaturen nach Schichtungsauflösung miteinander, so erhält man eine gute Übereinstimmung von Experiment und CFX-Simulation.

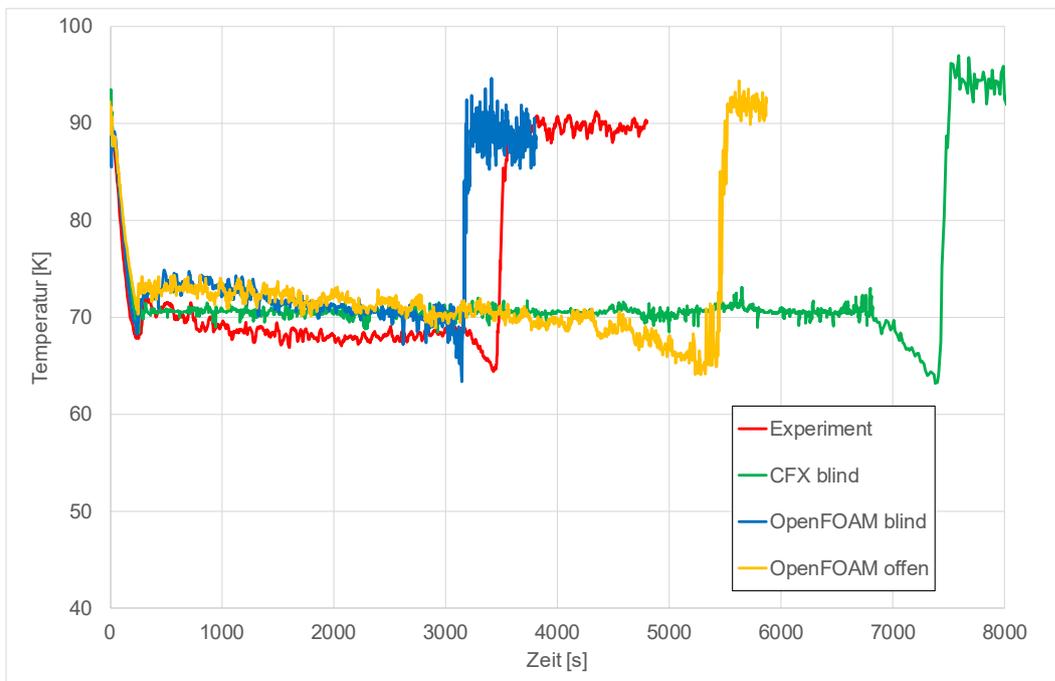


Abb. 4.39 Vergleich der Temperaturen in 9,0 m Höhe (Messpunkt DTF90F06)

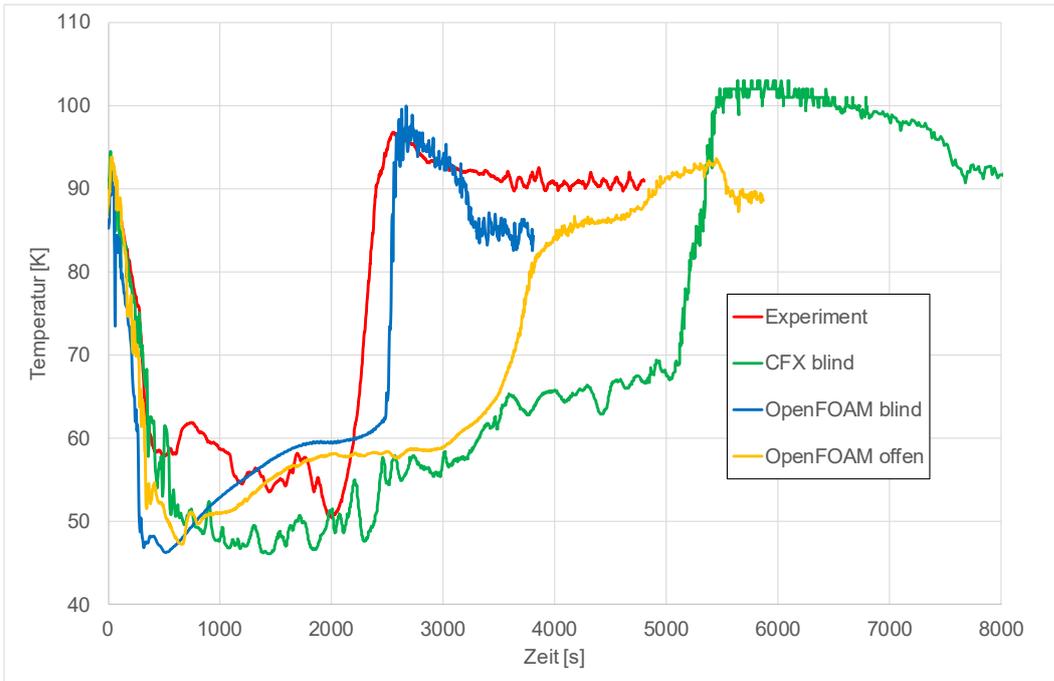


Abb. 4.40 Vergleich der Temperaturen in 7,5 m Höhe (Messpunkt DTF75A11)

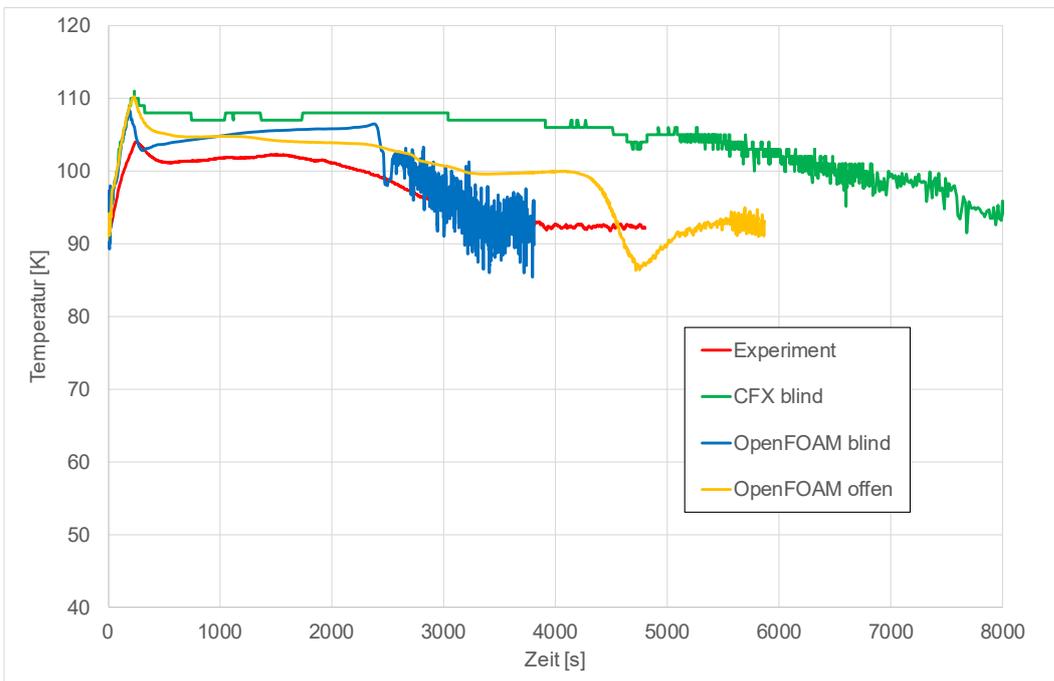


Abb. 4.41 Vergleich der Temperaturen in 4,2 m Höhe (Messpunkt CTF42M00)

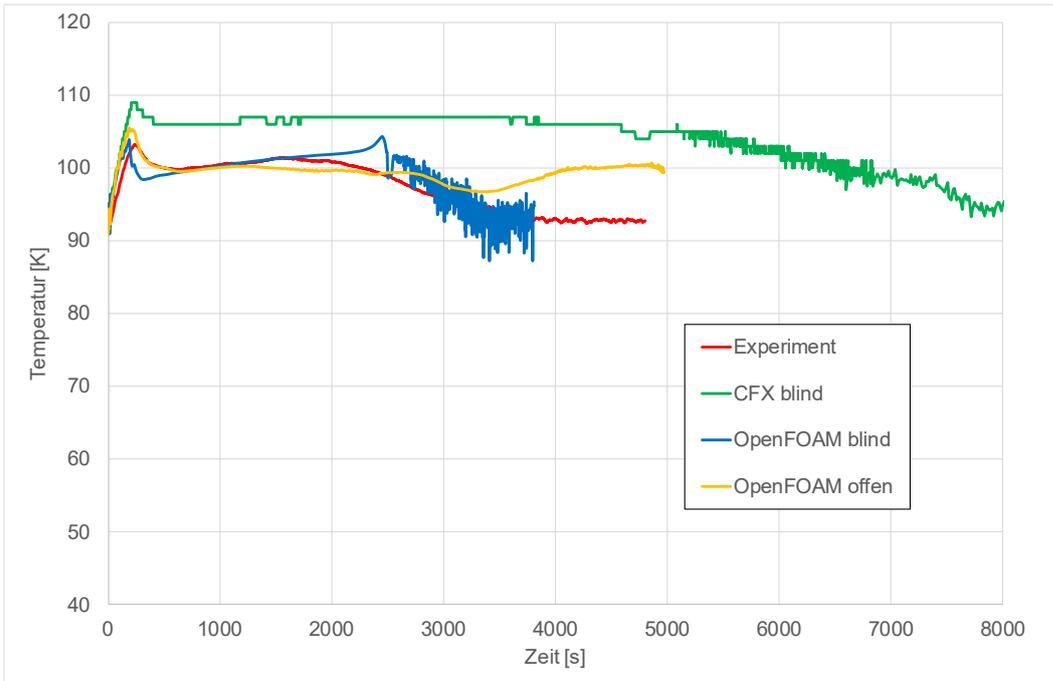


Abb. 4.42 Vergleich der Temperaturen in 2,8 m Höhe (Messpunkt CTF28M00)

4.1.5.8 Zusammenfassung TH-32

Das THAI-Experiment TH-32 beinhaltet den Aufbau und die Erosion einer Heliumschicht durch eine Naturkonvektion. Diese wird durch unterschiedliches Beheizen und Kühlen des THAI-Behälters erzeugt. Die GRS hat sich mit CFX- und OpenFOAM-Rechnungen sowohl an der blinden als auch an der offenen Phase des durch Becker Technologies organisierten Benchmarks beteiligt.

Grundsätzlich zeigt sich eine starke Sensitivität auf die Wahl geeigneter Randbedingungen für die Heizmäntel, den Kühlmantel und die unbeheizten Bereiche. Es wurden unterschiedliche Ansätze für die Modellierung der Randbedingungen getestet. Es hat sich gezeigt, dass die Wahl der Randbedingungen nicht nur einen signifikanten Einfluss auf die Temperaturen und Wärmeströme hat, sondern dass sie auch die Schichtungsauflösung deutlich beeinflussen. Aufgrund der beobachteten Sensitivität wäre es wichtig, zukünftige Experimente so zu gestalten, dass eine solche Sensitivität ausgeschlossen wird oder aber die Randbedingungen (Temperaturen / Wärmeströme) experimentell genauer bestimmt werden.

Bei der Simulation der Aufheizphase passen die berechneten Temperaturen im unteren Bereich des Behälters gut zum Experiment. Sowohl die blinde als auch die offene

OpenFOAM-Rechnung unterschätzen die Temperaturen im oberen Behälter jedoch um einige Grad. Die CFX-Rechnung liegt hier näher am Experiment.

Die in der Einspeisephase erzeugte Heliumschicht wird sowohl von CFX als auch von der offenen OpenFOAM-Rechnung im oberen Bereich etwas überschätzt. Die blinde OpenFOAM-Rechnung hat die Schichtung im oberen Bereich etwas unterschätzt.

In der Phase der Schichtungserosion liegt die blinde OpenFOAM-Rechnung am nächsten am Experiment bzgl. der Auflösungszeit für die Schichtung. Die CFX-Rechnung überschätzt die Auflösungszeit deutlich. Die offene OpenFOAM-Rechnung liegt weiter vom Experiment entfernt, dafür aber näher an der CFX-Rechnung. Trotz der schlechteren Übereinstimmung mit dem Experiment nutzt die offene OpenFOAM-Simulation Modellverbesserungen (Diffusionsmodell) und eine genauere Numerik. Es ist davon auszugehen, dass die gute Übereinstimmung der berechneten Erosionszeit bei der blinden OpenFOAM-Simulation auf unterschiedliche Ungenauigkeiten zurückzuführen ist, deren Auswirkungen sich hinsichtlich der Erosionsgeschwindigkeit teilweise eliminieren.

Berücksichtigt man durch die unterschiedlich schnelle Erosion bedingte Abweichungen, so wird von allen Simulationen der Temperaturverlauf an den Messstellen mit in der Regel nur geringfügigen Abweichungen berechnet.

Neben experimentell bedingten Unsicherheiten ist aber davon auszugehen, dass auch auf Modellierungsseite noch Verbesserungsbedarf besteht. Bei der Simulation der Schichtungsauflösung durch freie Konvektion besteht noch Weiterentwicklungsbedarf, insbesondere bei der Turbulenzmodellierung. Arbeiten am FZ Jülich haben gezeigt, dass mit dem Wilke-Mischungsmodell eine Verbesserung der Simulationsergebnisse erzielt werden kann.

4.1.6 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen aus den in AP3.1 erzielten Ergebnissen

Im AP3.1 wurde die Validierung der Simulation der Gasverteilung und Schichtungsauflösung weitergeführt. Dazu wurden die Panda-Experimente H2P1_3 und H2P1_10 sowie das THAI-Experiment TH-32 nachgerechnet.

Anhand des Versuchs H2P1_0 wurde die Simulation der Dampfeinspeisung bei Panda-Experimenten aus dem HYMERES-2-Versuchsprogramm vertieft untersucht. Es wurde

der Einfluss von geometrischen Vereinfachungen und der Einfluss des Turbulenzmodells getestet.

Die Simulation des geraden Teils des Einspeiserohrs mit dem SST-Modell liefert bereits eine gute Übereinstimmung der Strömungsgeschwindigkeit am Rohrende. Bei der (aufwändigeren) Berücksichtigung des Einspeiserohres einschließlich der Rohrkrümmung kann mit dem BSL-Reynolds-Stress-Modell die beste Übereinstimmung erzielt werden. Bei dieser Geometrie sollte das SST-Modell nicht zur Anwendung kommen, da ein zu asymmetrisches Strömungsprofil am Rohrende berechnet wird.

Das Panda-H2P1_3-Experiment untersucht die Erosion einer stabilen Heliumschicht durch einen vertikalen Dampfstrahl /PAR 18b/. Dieser trifft auf eine horizontale Platte, bevor er die Heliumschicht erreicht. Der Versuch wurde mit CFX und mit OpenFOAM nachgerechnet. Dabei wurde die Wärmestrahlungsmodellierung (Strahlungsmodell, Absorptionskonstante von Dampf) variiert. Es zeigt sich ein signifikanter Einfluss des Wärmestrahlungsmodells und auch der Absorptionskonstante von Dampf sowohl auf die Temperaturverteilung als auch auf die Erosionsgeschwindigkeit der Heliumschicht. Unabhängig von der Strahlungsmodellierung und auch anderer getesteter Modelle wird die Schichtungsauflösung von allen Simulationen signifikant zu schnell berechnet. Das Temperaturniveau und der qualitative Verlauf werden an den meisten Messpunkten mit moderaten Abweichungen berechnet, es gibt aber Messtellen, in denen im Experiment ein qualitativ anderer Verlauf beobachtet wird. Grund sind unter anderem unzureichend bekannte Start- und Randbedingungen. Es wurden im Gas temporär so niedrige Temperaturen gemessen, dass dies im Widerspruch zu den gemessenen Randbedingungen steht. Vermutliche Ursache ist eine lokal unzureichende Isolierung im Deckelbereich. Da unklar ist, inwieweit dies einen Einfluss auf die Erosionsgeschwindigkeit und die Temperaturverteilung hat, ist dieser Versuch nur bedingt zur Validierung und Auswahl von Modellen geeignet.

Beim HYMERES2-Versuch H2P1_10_2 wird eine stabile Heliumschicht durch einen vertikalen Dampfstrahl erodiert. Zwischen Einlassrohr und Heliumschicht ist ein schräggestellter Gitterrost eingebracht, das den Dampfstrahl ablenkt. Der Versuch wurde mit CFX und OpenFOAM simuliert. Mit beiden Programmen konnte die Schichtungsauflösung in guter Übereinstimmung mit dem Experiment simuliert werden, wobei OpenFOAM eine etwas zu schnelle und CFX eine geringfügig zu langsame Erosion vorhersagt. Die im Versuch vorliegenden Temperaturen konnten bis auf einige lokale Abweichungen ebenfalls richtig berechnet werden. Insbesondere im Bereich des Gitters sind bei der

Gasströmung und der Temperatur Abweichungen zu sehen. Diese können zumindest teilweise durch die grobe Vernetzung in diesem Bereich erklärt werden. Bei Vergleich der Temperaturen innerhalb des Gitterrosts ergibt sich für die Messtellen am Rand (GR1 und GR5) eine qualitative Abweichung. Hier ist noch nicht abschließend geklärt, warum die Temperatur im Experiment in den ersten 800 s absinkt, während sie in allen Simulationen ansteigt. Als Fazit kann gezogen werden, dass die Strömung durch einen Gitterrost und die anschließende Erosion einer stabilen Leichtgasschichtung mit moderaten Abweichungen bei Gaskonzentration und Temperatur berechnet werden kann. Allerdings muss bei der Berücksichtigung von Gitterrosten in komplexen Geometrien – wie in einem Containment – eine vereinfachte Modellierung entwickelt werden, da die detaillierte Abbildung der Gitterroste im CFD-Gitter nicht praktikabel ist. Ein Ansatz hierzu wäre die Modellierung des Gitters als poröses Medium.

Das THAI-Experiment TH-32 beinhaltet den Aufbau und die Erosion einer Heliumschicht durch eine Naturkonvektion. Diese wird durch unterschiedliches Beheizen und Kühlen der Wände des THAI-Behälters erzeugt. Die GRS hat sich mit CFX- und OpenFOAM-Rechnungen sowohl an der blinden als auch an der offenen Phase der durch Becker Technologies organisierten Benchmarks beteiligt. Grundsätzlich zeigt sich eine starke Sensitivität der Temperaturen und auch der Schichtungsauflösung auf die Wahl geeigneter Randbedingungen für die Heizmäntel, den Kühlmantel und die unbeheizten Bereiche. Es wurden unterschiedliche Ansätze für die Modellierung der Randbedingungen getestet. Es hat sich gezeigt, dass die Wahl der Randbedingungen nicht nur einen signifikanten Einfluss auf die Temperaturen und Wärmeströme hat, sondern dass sie auch die Schichtungsauflösung deutlich beeinflussen. Aufgrund der beobachteten Sensitivität wäre es wichtig, zukünftige Experimente so zu gestalten, dass eine solche Sensitivität ausgeschlossen wird oder aber die Randbedingungen (Temperaturen / Wärmeströme) experimentell genauer bestimmt werden. Bei der Simulation der Aufheizphase passen die berechneten Temperaturen im unteren Bereich des Behälters gut zum Experiment. Sowohl die blinde als auch die offene OpenFOAM-Rechnung unterschätzen die Temperaturen im oberen Behälter jedoch um einige Grad. Die CFX-Rechnung liegt hier näher am Experiment. Die in der Einspeisephase erzeugte Heliumschicht wird sowohl von CFX als auch von der offenen OpenFOAM-Rechnung, in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet, dabei wird sie im oberen Bereich geringfügig überschätzt. Die blinde OpenFOAM-Rechnung hat die Schichtung im oberen Bereich dagegen etwas unterschätzt. In der Phase der Schichtungserosion liegt die blinde OpenFOAM-Rechnung am nächsten am Experiment bzgl. die Auflösungszeit für die Schichtung. Die CFX-Rechnung überschätzt die Auflösungszeit deutlich. Die offene OpenFOAM-Rechnung

(verbesserte Diffusion und Numerik) berechnet eine langsamere Erosion und liegt damit weiter vom Experiment entfernt, dafür aber näher an der CFX-Rechnung.

Die durchgeführten Validierungsrechnungen zeigen, dass bei der Berechnung der Auflösung von stabilen Leichtgasschichtungen erhebliche Fortschritte erzielt wurden. Die mit dem OpenFOAM-Referenzsolver erzielten Ergebnisse zeigen eine ähnliche Prognosequalität wie CFX (bzw. andere kommerzielle CFD-Codes). Es sind aber weitere Entwicklungs-/Validierungsarbeiten erforderlich, insbesondere bei der Simulation von freier Konvektion (z. B. TH-32).

4.2 AP3.2 H₂-Verbrennung

Einleitung

Nachweisziel bzgl. H₂ (und CO) im Sicherheitsbehälter ist die Häufigkeit für das Containmentversagen durch Verbrennungsprozesse infolge von Kernschmelzunfällen deutlich zu verringern. Zum einen muss der AICC-Druck unterhalb des Versagensdrucks des Sicherheitsbehälters liegen. Weiterhin ist zu zeigen, dass keine Gasgemische, bei denen großräumig schnelle Deflagration mit Flammenbeschleunigung oder gar Detonation auftreten können, da in diesen Fällen kurzzeitige Druckpeaks auftreten können, die um ein Vielfaches oberhalb des AICC-Drucks liegen. Falls bei Gasverteilungsrechnungen Gemische vorliegen, bei denen Kriterien zur Flammenbeschleunigung (z. B. Sigma-Kriterium) eine mögliche Flammenbeschleunigung nicht ausschließen können, ist die weitere Untersuchung durch eine H₂-Verbrennungssimulation sinnvoll, um zu prüfen, ob es tatsächlich zu einer Flammenbeschleunigung kommen kann und mit welchen Druckpeaks zu rechnen ist. In früheren Arbeiten /SCH 14/, /SCH 17/ wurde das Burning-Velocity-Modell als geeignetes Verbrennungsmodell zur Simulation von langsamen und schnellen turbulent beschleunigten Deflagrationen identifiziert. Hinsichtlich der Modellierung z. B. der turbulenten Flammengeschwindigkeit wurde aber noch Weiterentwicklungsbedarf identifiziert. Im Rahmen des Projekts „Entwicklung und Validierung eines effizienten Konzeptes für die Wasserstoffverbrennung mit hohem Luftüberschuss“ BMWi 1501485 wurde an der TU München die Verbrennungsmodellierung speziell für magere H₂/Luft-Gemische weiterentwickelt. Die von der TUM gefundenen Korrelation(en) sollen einer entwicklerunabhängigen Validierung unterzogen werden. Neben dieser neuen Korrelation der TUM wurden auch andere Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit durch Nachrechnung unterschiedlicher Versuche getestet.

4.2.1 Erstellung einer neuen Flamelet-Tabelle für die Verbrennung von H₂/Luft/Dampfgemischen

4.2.1.1 Motivation für die Modifikation der Flamelet-Tabelle

In der Standardversion von CFX ist nur eine Flamelet-Tabelle für die Verbrennung von H₂/Luft-Gemischen enthalten. Im Rahmen eines BMWi-Projekts hat ANSYS für CFX-14 das Inert-Gas-Modell entwickelt /ZSC 15/. Bei diesem Modell wird die Zusammensetzung des unverbrannten Gases durch einen Mischungsbruch und ein vom Nutzer zu definierendes Inertgas (z. B. Wasserdampf) beschrieben. Die Zusammensetzung des verbrannten Gases wird aus einer Flamelet-Tabelle für die H₂/Luft-Verbrennung eingelesen und um das Inertgas ergänzt, von dem ausgegangen wird, dass es nicht an der chemischen Reaktion teilnimmt. Dieses Modell hat allerdings einige Schwächen:

- Das Modell ist nicht abdeckend für alle Containmentanwendungen. Bei diesem Modell wird die Gaszusammensetzung des unverbrannten Gemisches durch zwei unabhängige Variablen (Mischungsbruchs, Inertgaskonzentration) beschrieben. Es gibt aber Fälle, in denen mehr Dimensionen benötigt werden. In einem Containment sind zum Beispiel passive autokatalytische Rekombinatoren (PAR) installiert. Dadurch ändert sich schon vor der Verbrennung das Verhältnis O₂/N₂. Ein weiteres Beispiel ist, wenn im späteren Störfallverlauf sich neben H₂ noch CO als ein weiterer Brennstoff im Verbrennungsraum befindet.
- Das Inertgas-Modell benötigt einen speziellen Solver und die Modelldefinition kann nicht über den CFX-PreProzessor vorgenommen werden. Dieser Solver muss für jede CFX-Version neu von ANSYS erstellt werden. Dies erfolgt nur auf Nachfrage. Da für dieses Modell nicht die graphische Eingabemaske genutzt werden kann, sondern das Modell über eine Textdatei (.ccl) angefügt werden muss, ist die Anwendung des Modells umständlich und fehleranfällig.

In CFX-19 besteht die Möglichkeit, beim Burning-Velocity-Modell den Massenbruch des Gases mit „User Defined FORTRAN Routines“ zu setzen. Dies ermöglicht dem Nutzer, eigene Flamelet-Tabellen zu nutzen und über eigene Einleseroutinen anzubinden. Diese können andere/mehr Tabellendimensionen enthalten, so dass auch andere Abhängigkeiten (z. B. variables N₂/O₂-Verhältnis, Temperatur des unverbrannten Gases) berücksichtigt werden können.

4.2.1.2 Beschreibung der Flamelet-Tabelle und der zugehörigen Ausleseroutinen

Mit der von ANSYS mitgelieferten Chemiesoftware CHEMKIN wird ausgehend von einem detaillierten Mechanismus für die Verbrennung von Synthesegas (H_2/CO) eine Datei erstellt, in der die Gaszusammensetzung des verbrannten Gases und andere Größen abgespeichert werden. Die tabellierten Gleichgewichtszusammensetzungen sind abhängig von den Molenbrüchen von H_2 , und H_2O g (Dampf) und der Temperatur des unverbrannten Gases. Es wurde über den Molenbruch von H_2 und H_2O tabelliert, da bei Verwendung von Massenbrüchen der für die meisten Simulationen relevante Bereich $x_{H_2, \text{unverbr.}} < 0,2$ nur einen sehr kleinen Bereich ($z_{H_2, \text{unverbr.}} < 0,0171$) des zu tabellierenden Bereichs (0 – 1,0) ausmacht. Details zu der für die Verbrennungssimulationen verwendeten Tabelle sind in Tab. 4.6 zu finden. Einige Bereiche der Tabelle enthalten keine physikalisch sinnvollen Zustände (z. B. weil $x_{H_2} + x_{H_2O} > 1$). Die Bereiche sind durch ein Flag (flag = 0) gekennzeichnet.

Im detaillierten Mechanismus sind auch Radikale enthalten (OH, HO_2 , O, H_2O_2 , H). Auch wenn die Radikalkonzentrationen sehr klein sind, so können aufgrund der hohen spezifischen Enthalpie die Radikale zu einer Absenkung der Gleichgewichtstemperatur von über 100 K führen (siehe Abschnitt 4.2.1.4). Für die geplante Anwendung ist die genaue Menge der einzelnen Radikale nur soweit wichtig, wie sie andere wichtige Größen (insbesondere die Temperatur des unverbrannten Gases) beeinflusst. Um Rechenzeit zu sparen, wurden die 5 verschiedenen Radikalmassenbrüche zu einer Größe („Radikale“) zusammengefasst. Der Wert dieser Größe wurde so berechnet, dass die Temperatur des verbrannten Gases dem von CHEMKIN berechneten Wert entspricht.

Tab. 4.6 In den Simulationen verwendete Flamelet-Tabelle zur H_2/H_2O /Luft-Verbrennung

Variable	Tabellierungsbereich	Schrittweite
X_{H_2}	0 – 1	0,001
X_{H_2O}	0 – 1	0,25
T_u	293 K – 593 K	50 K

In CFX-19 ergibt sich das Problem, dass bei Verwendung der selbsterstellten Flamelet-Bibliothek CFX die Werte für das unverbrannte Gas (Dichte, Temperatur, Wärmekapazität, Wärmeleitfähigkeit) nicht mehr korrekt berechnet. Diese Größen sind wichtig, da sie bei der Berechnung der laminaren und auch turbulenten Brenngeschwindigkeit in

den Korrelationen verwendet werden. Deshalb ist ihre korrekte Berechnung insbesondere im Bereich der Flammenfront wichtig. Es mussten für diese Größen benutzerdefinierte Funktionen definiert werden, die diese Größen berechnen. Die Temperatur des unverbrannten Gases T_u ist von zentraler Bedeutung, da sie auch bei der Berechnung der anderen Größen benötigt wird.

Bei der Berechnung von T_u wird von einer adiabatischen, isochoren Verbrennung ausgegangen. Die Enthalpie des Gases in der CFX-Simulation wird berechnet. Dann wird die Temperatur bestimmt, bei der das unverbrannte Gemisch dieselbe Enthalpie besitzt. Dabei kann aufgrund von Wärmeverlusten die Temperatur des unverbrannten Gases auch unter die initiale Temperatur fallen. Ohne Begrenzung der minimalen Temperatur des unverbrannten Gases können für diese Größe bei starken Wärmeverlusten sehr tiefe Temperaturen berechnet werden. Für solch tiefe Temperaturen sind die verwendeten Korrelationen für die Materialparameter (c_p , Enthalpie, Wärmeleitung etc.) nicht mehr gültig. Diese niedrigen Temperaturen des unverbrannten Gases treten vor allem im Bereich des verbrannten Gases auf, das sich aufgrund von Wärmeleitung/Wärmestrahlung und durch den Kontakt mit kalten Strukturen schon abgekühlt hat. Für diesen Bereich ist die Größe von T_u unerheblich, da hier schon die Verbrennung abgeschlossen ist. Insbesondere am Anfang der Simulation kann nicht ausgeschlossen werden, dass T_u im teilweise verbrannten Gas unter den initialen Wert fällt, weil Wärmeverluste zu einer Absenkung der Enthalpie und damit auch von T_u führen. Um diese Probleme zu vermeiden, wurde ein minimales T_u eingeführt. T_u darf nicht unter die Starttemperatur fallen. Bei allen untersuchten Testfällen hat die Einführung dieser Begrenzung keinen Einfluss auf den Ablauf der Verbrennung gehabt (Abb. 4.43). Die Größe des minimalen T_u kann der Nutzer als Variable in die CFX-Definitionsdatei setzen. Die Eingabe erfolgt in Kelvin:

&replace USER:

MinTunburnt= 300

END

Die übrigen zu berechnenden Größen ergeben sich aus der Temperatur des unverbrannten Gases und Materialkonstanten. Die fehlerhafte Berechnung der Dichte des unverbrannten Gases ρ_u bringt zusätzlich das Problem mit sich, dass diese Größe in die Berechnung der turbulenten Flammengeschwindigkeit eingeht. Deshalb muss ein zusätzlicher Korrekturterm ($\rho_{u,user} / \rho_{u,ANSYS}$) eingefügt werden.

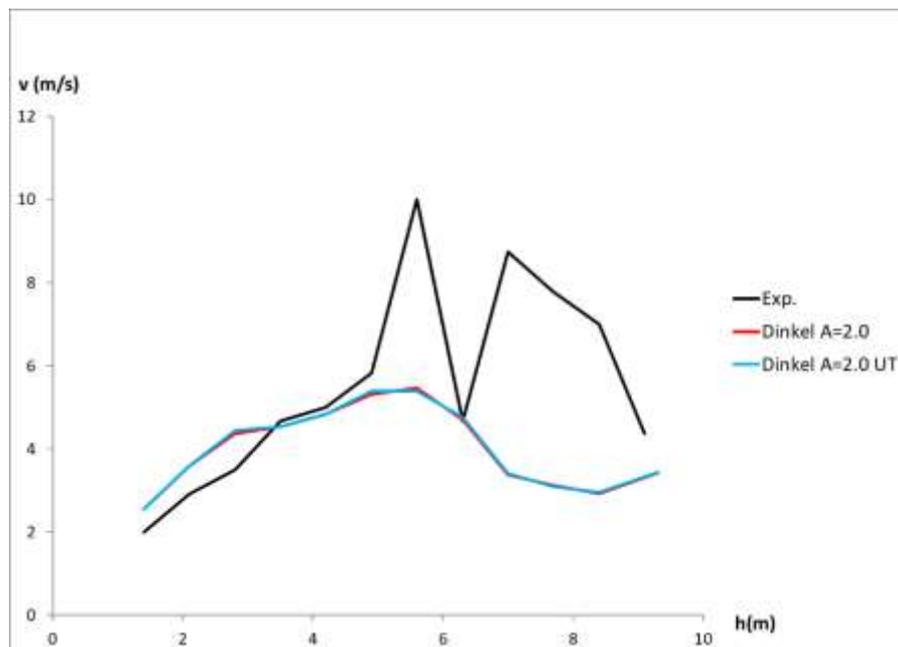
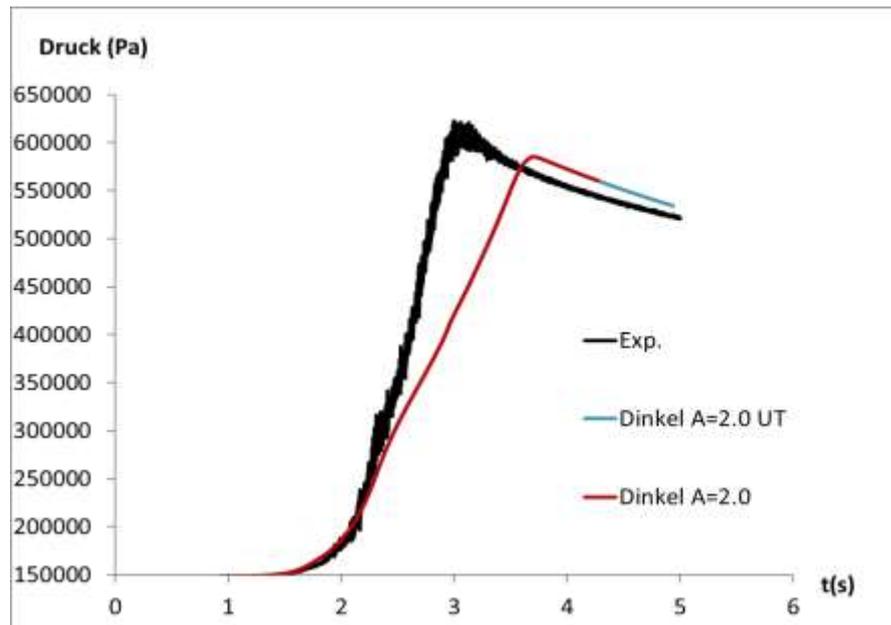


Abb. 4.43 Druck und Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei Simulation des Versuchs HD-7 ohne (rot) und mit (blau) einem unteren Limit für T_u

4.2.1.3 Vereinfachte Berechnung der Gaszusammensetzung

Für magere Wasserstoff/Luft-Gemische mit H_2 -Konzentrationen unterhalb von 20 vol-% kann auf die Berücksichtigung der Radikale ganz verzichtet werden, ohne dass ein signifikanter Fehler bei der Berechnung der Gleichgewichtstemperatur auftritt (siehe Abschnitt 4.2.1.4). In diesem Fall kann ganz auf die Verwendung einer Flamelet-Bibliothek

verzichtet werden. Die Zusammensetzung des verbrannten Gases ergibt sich aus der Reaktionsgleichung: $2 \text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{H}_2\text{O}$. Es gilt je: höher die Temperatur des verbrannten Gemisches ist, desto wichtiger ist die Berücksichtigung von Radikalen. Deshalb ist der Fehler bei Vernachlässigung der Radikale bei hohen Dampfkonzentrationen gering (Abb. 4.48). Diese Erkenntnis kann genutzt werden, wenn Gasgemische verbrannt werden sollen, für die keine Flamelet-Bibliothek vorhanden ist, z. B. wenn aufgrund von passiven katalytischen Rekombinatoren das Verhältnis N_2 zu O_2 zu Beginn der Verbrennung nicht mehr dem von Luft entspricht.

4.2.1.4 Diskussion des Einflusses der Radikalkonzentrationen

In Abb. 4.44 ist die Radikalkonzentration bei trockener Luft über dem H_2 -Molenbruch aufgetragen. Unterhalb von 15 vol-% H_2 kann die Radikalkonzentration nahezu vernachlässigt werden, das Maximum wird bei stöchiometrischer Gaszusammensetzung 296 vol-% erreicht. Für H_2 -Konzentrationen oberhalb von 60 vol-% kann die Radikalkonzentration ebenfalls vernachlässigt werden. Mit zunehmender Temperatur des unverbrannten Gases – und damit auch der des verbrannten Gases – nimmt die Radikalkonzentration signifikant zu. Der qualitative Verlauf ist allerdings gleich. Liegt zu Beginn der Verbrennung Dampf vor, so sinkt die Temperatur des verbrannten Gases und die Radikalkonzentration ist entsprechend deutlich geringer (Abb. 4.45). Für Containmentanwendungen ist die Radikalkonzentration im Hinblick auf die Temperatur des verbrannten Gases wichtig. In Abb. 4.46 ist die Temperatur des verbrannten Gases (bei adiabaten Bedingungen) sowohl bei Vernachlässigung der Radikale als auch bei ihrer Berücksichtigung aufgetragen. Im stöchiometrischen Bereich führt die Vernachlässigung der Radikale zu einer deutlichen Überschätzung der Temperatur des verbrannten Gases T_v (137 K bei $T_u = 293$ K, bzw. 237 K bei $T_u = 593$ K). Liegt zu Beginn der Verbrennung Dampf vor, so wird der Fehler bei Vernachlässigung der Radikale deutlich verringert (39 K anstatt 237 K bei 25 vol-% Wasserdampf). Zusammenfassend kann geschlussfolgert werden, dass für die meisten Verbrennungssimulationen zu Containmentfragestellungen die Vernachlässigung der Radikale zu keinem signifikanten Fehler führen wird. Deshalb kann in vielen Fällen sogar ein noch einfacherer Ansatz verfolgt werden. Statt die Gaszusammensetzung aus einer Flamelet-Tabelle einzulesen, kann die Gaszusammensetzung direkt aus der Reaktionsgleichung $2 \text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{H}_2\text{O}$ berechnet werden. Der Vorteil dieses Ansatzes ist, dass er deutlich schneller ist, da eine aufwendige Interpolation entfällt. Diese wird umso aufwendiger, je mehr Dimensionen die Flamelet-Tabelle hat. Zudem entfällt der Aufwand, der für das Erzeugen neuer Tabellen notwendig wird, wenn z. B. ein variables O_2/N_2 -Verhältnis berücksichtigt werden soll.

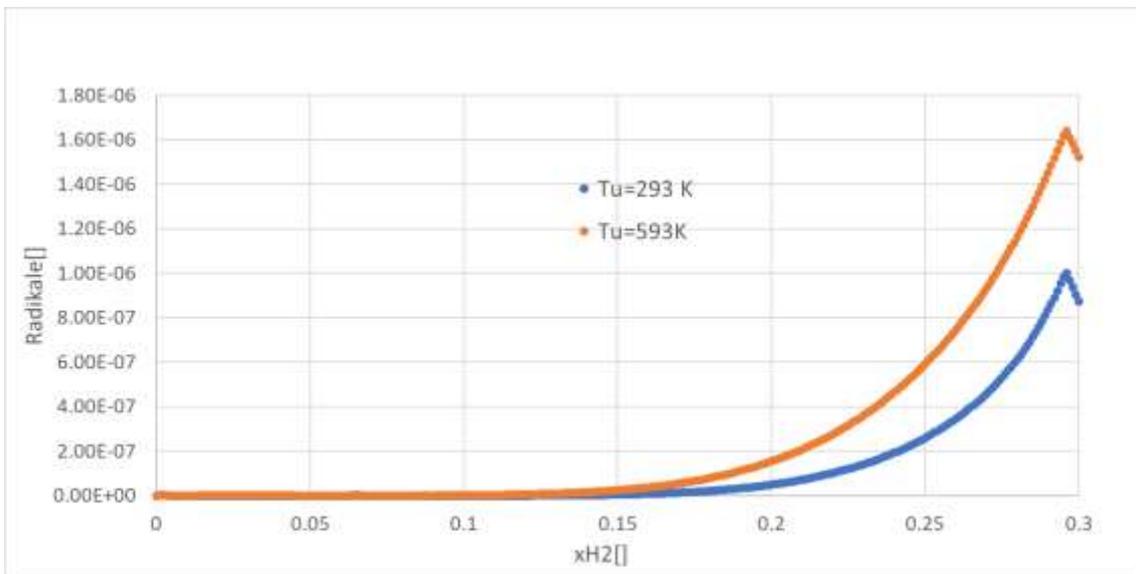
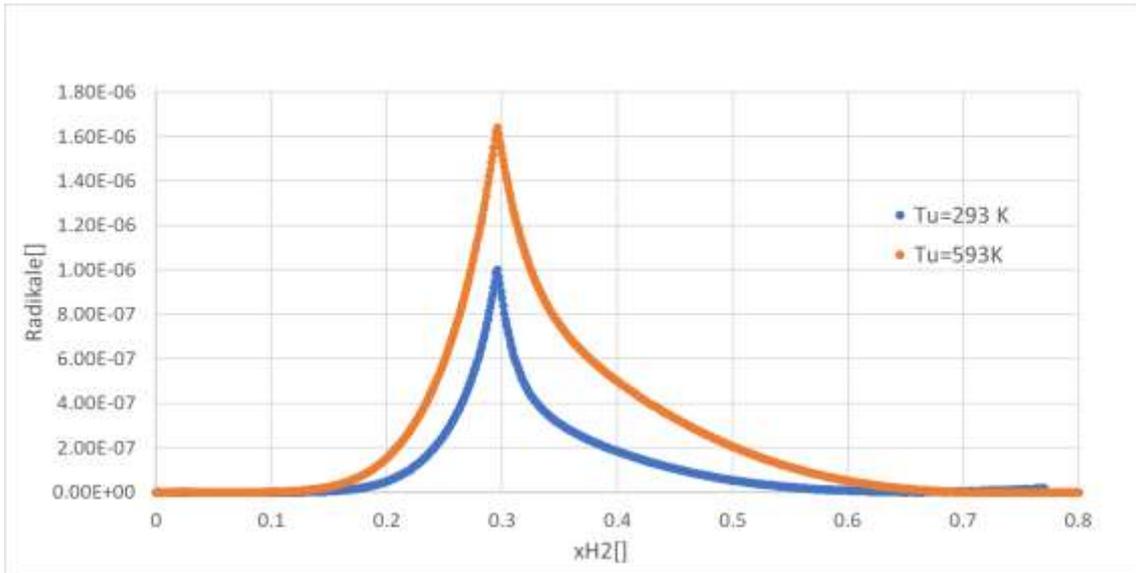


Abb. 4.44 Radikalkonzentration bei trockener Luft und einer Temperatur von 293 K bzw. 593 K des unverbrannten Gases

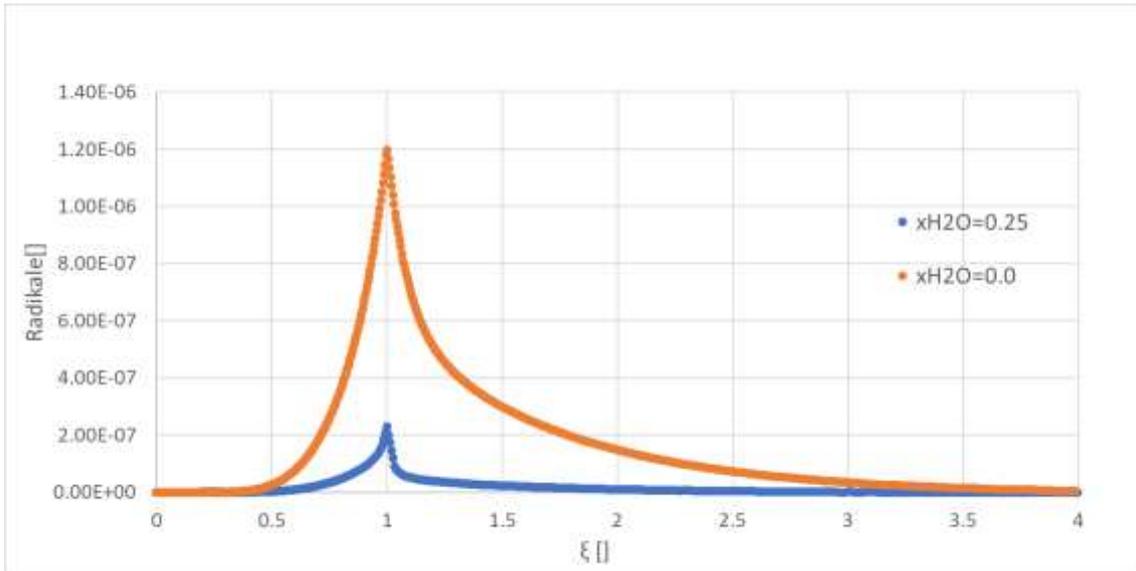


Abb. 4.45 Radikalkonzentration über dem Äquivalenzverhältnis bei $T_u = 293$ K bei unterschiedlicher initialer Dampfkonzentration

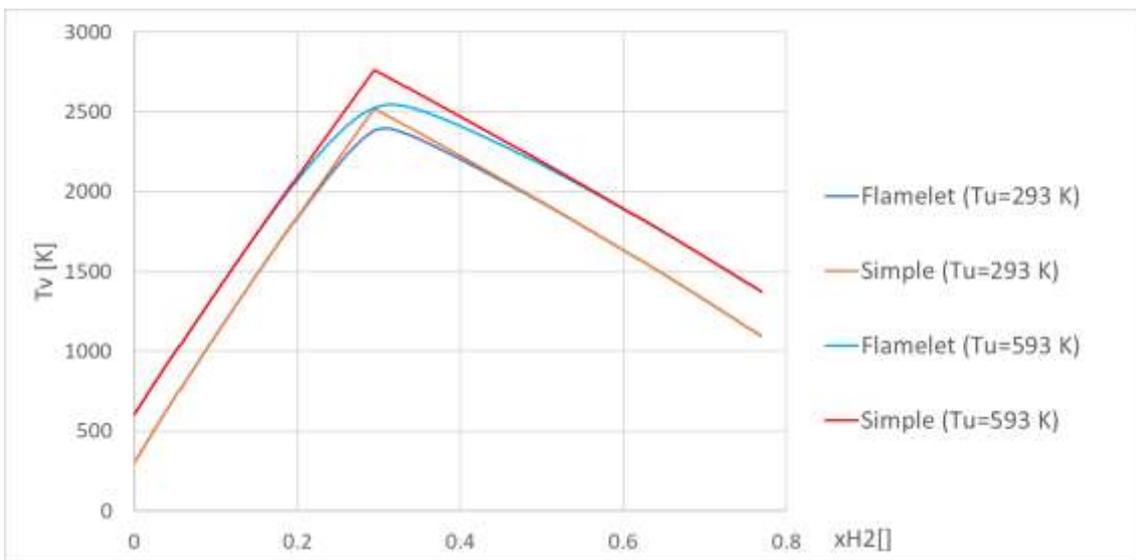


Abb. 4.46 Temperatur des verbrannten Gases bei Verwendung der Flamelet-Bibliothek und bei Berechnung mit dem vereinfachten Mechanismus

Es wird von einer Temperatur des unverbrannten Gases von 293 K bzw. 593 K und trockener Luft ausgegangen

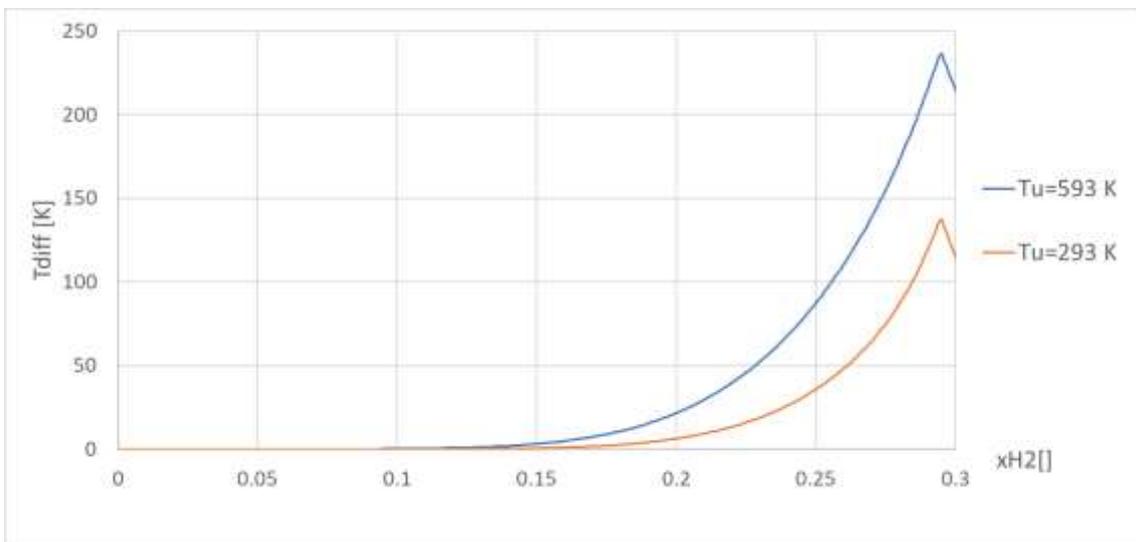
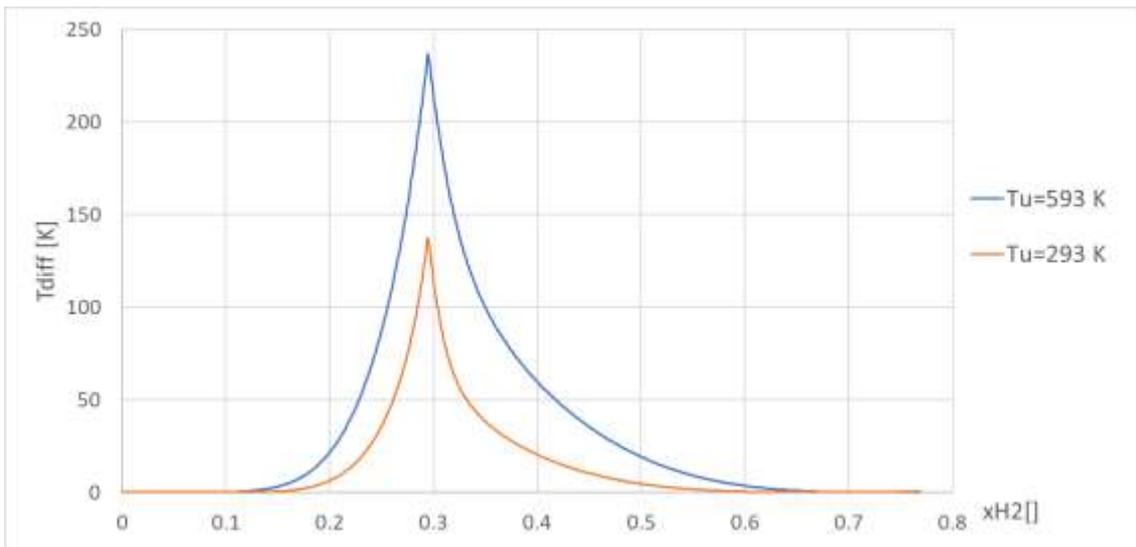


Abb. 4.47 Abweichung zwischen simplen Reaktionsmechanismus und Flamelet-Bibliothek bei trockener Luft einer Temperatur des unverbrannten Gases von 293 K bzw. 593 K

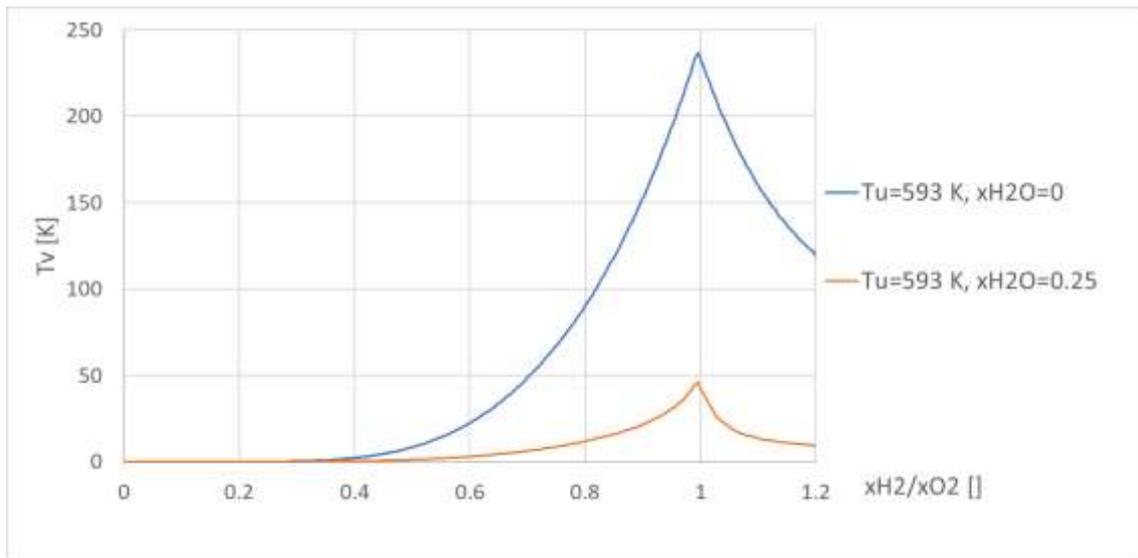


Abb. 4.48 Abweichung zwischen simplen Reaktionsmechanismus und Flamelet-Bibliothek bei trockener Luft, $T_u = 593$ K ohne initialen Dampf (blau) und bei einer initialen Dampfkonzentration von 25 vol-%

4.2.1.5 Validierung der neuen Flamelet-Tabelle anhand der Versuche HD-7 und HD-10

Ziel der Untersuchung ist zu prüfen, ob sich die Simulationsergebnisse bei Verwendung der selbsterstellten Flamelet-Tabelle mit denen bei Nutzung der von ANSYS erstellten übereinstimmen. Bei den Versuchen HD-7 und HD-10 ist die H_2 -Konzentration so niedrig (9,9 vol-% bzw. 11,8 vol-%), dass auch für höhere Temperaturen des unverbrannten Gemischs Radikale keinen Einfluss auf die Temperatur des verbrannten Gases haben. Allerdings muss bei Nutzung der neuen Tabelle für alle Variablen, die sich auf die Eigenschaften des unverbrannten bzw. verbrannten Gases beziehen, auf neu erstellte Fortran-Routinen zugegriffen werden (siehe Abschnitt 4.2.1.2.). Hier ist insbesondere die Berechnung der Temperatur des unverbrannten Gases T_u eine kritische Größe. Der genaue von ANSYS genutzte Algorithmus zur Berechnung dieser Größen war nicht bekannt, deshalb sind Abweichungen möglich. Beim Vergleich einer Simulation des HD-10-Versuchs mit der CFX Flamelet-Tabelle und der neu erstellten Flamelet-Tabelle fällt auf, dass im vollständig verbrannten Bereich (Reaction Progress Variable = 1) bei der Simulation mit der CFX Flamelet-Tabelle T_u deutlich höher ist (Abb. 4.49, Abb. 4.50). Im Bereich der Flammenfront ist T_u aber für beide Simulationen sehr ähnlich. Das führt dazu, dass der Ablauf der Verbrennung in beiden Simulationen sehr ähnlich ist. Die Flammenfront ist in etwa gleich weit nach unten propagiert und auch die Form ist sehr ähnlich. Da

nur im Bereich der Reaktion T_u einen Einfluss auf den Ablauf der Verbrennung hat, sind die Abweichungen nach Ablauf der Verbrennung bei dieser Größe unerheblich.

In Abb. 4.51 bis Abb. 4.53 werden die Simulationsergebnisse für die Versuche HD-7 und HD-10 mit der CFX-Flamelet-Tabelle und der neu erstellten Tabelle verglichen. Die Simulationen nutzen das in RS1526 erstellte CFD-Gitter und die dort verwendeten Modelle (/SCH 17/). Eine verbesserte Nachrechnung der Experimente ist in den folgenden Abschnitten (siehe 4.2.2.5 und folgende) zu finden.

Bei den Simulationen kamen unterschiedliche Korrelationen zur Beschreibung der turbulenten Brenngeschwindigkeit zum Einsatz. Für beide Versuche zeigt sich eine gute Übereinstimmung der beiden Simulationen mit unterschiedlicher Flamelet-Tabelle. Dies zeigt, dass die Implementation der neuen Flamelet-Bibliothek und die neu erstellten Routinen zur Berechnung der Größen für das unverbrannte Gas erfolgreich waren. Erfolgreich ist hier, wenn die beiden Simulationen gleich/ähnlich sind, auch wenn teilweise deutliche Abweichungen vom Experiment auftreten.

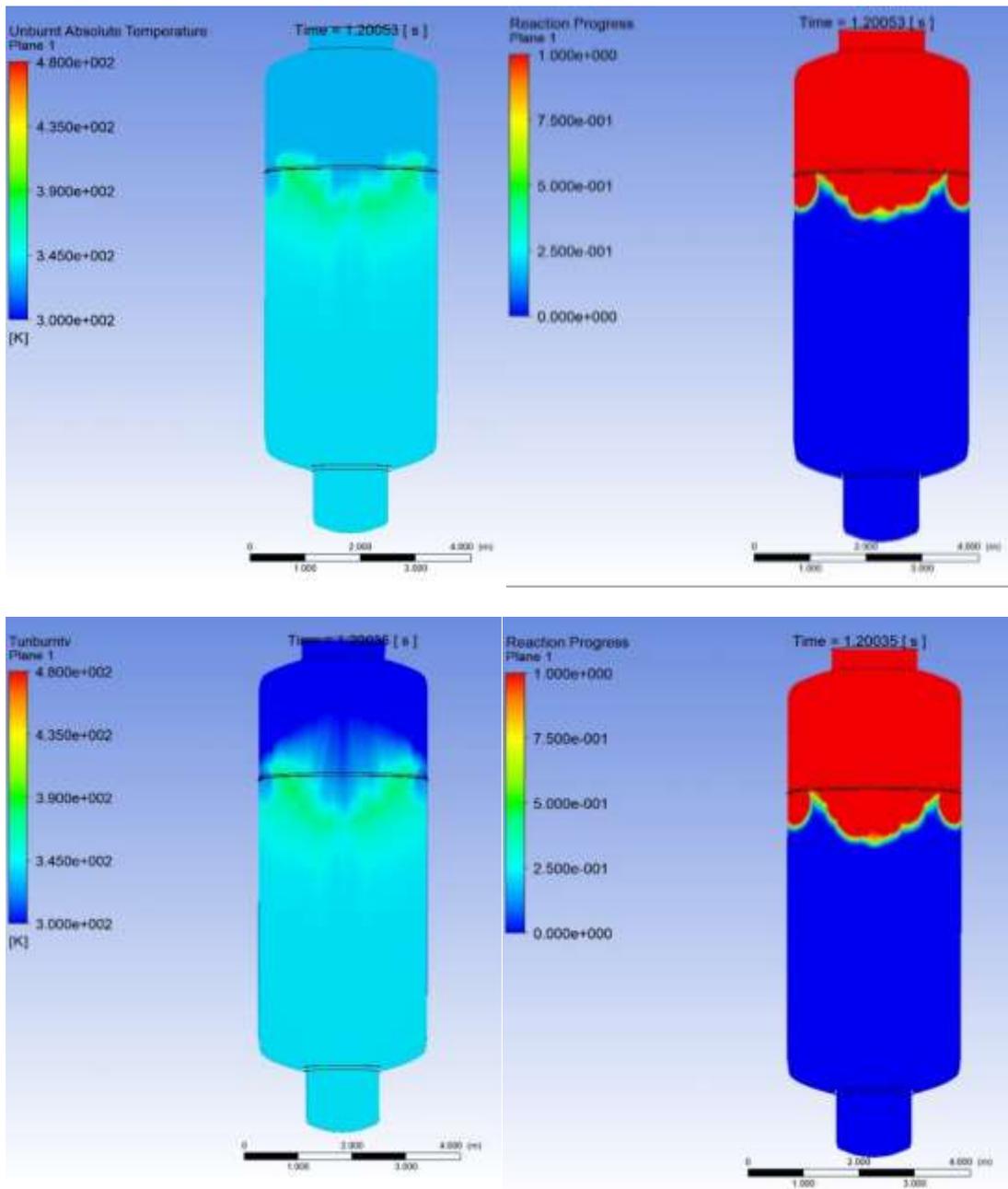


Abb. 4.49 T_u (links) und Reaktionsfortschrittsvariable (rechts) nach 1,2 s bei Simulation von HD-10 mit der CFX Flamelet-Library (oben) und der neu erstellten Flamelet-Library (unten)

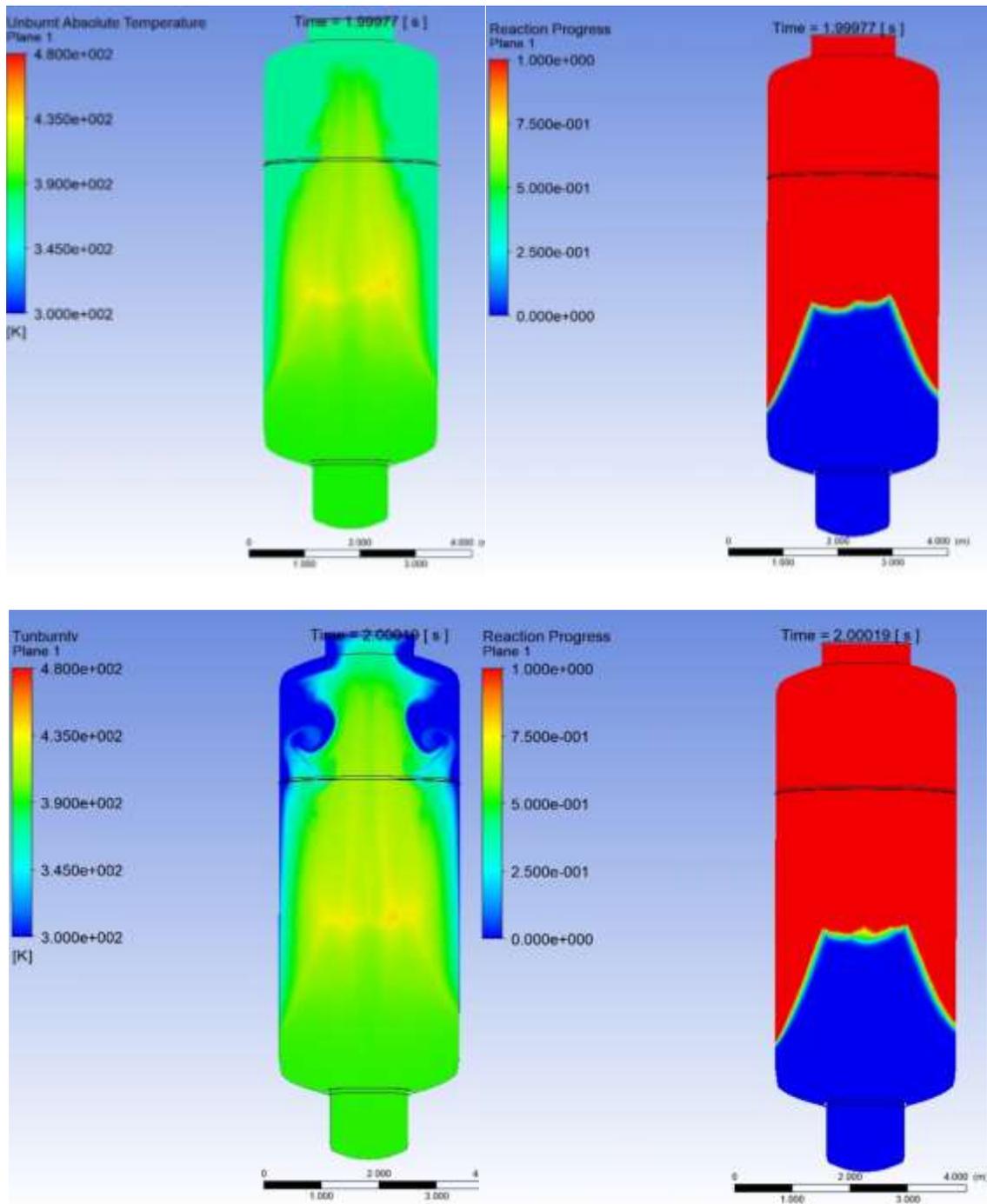


Abb. 4.50 T_u (links) und Reaktionsfortschrittsvariable (rechts) nach 2 s bei Simulation von HD-10 mit der CFX-Flamelet-Library (oben) und der neu erstellten Flamelet-Library (unten)

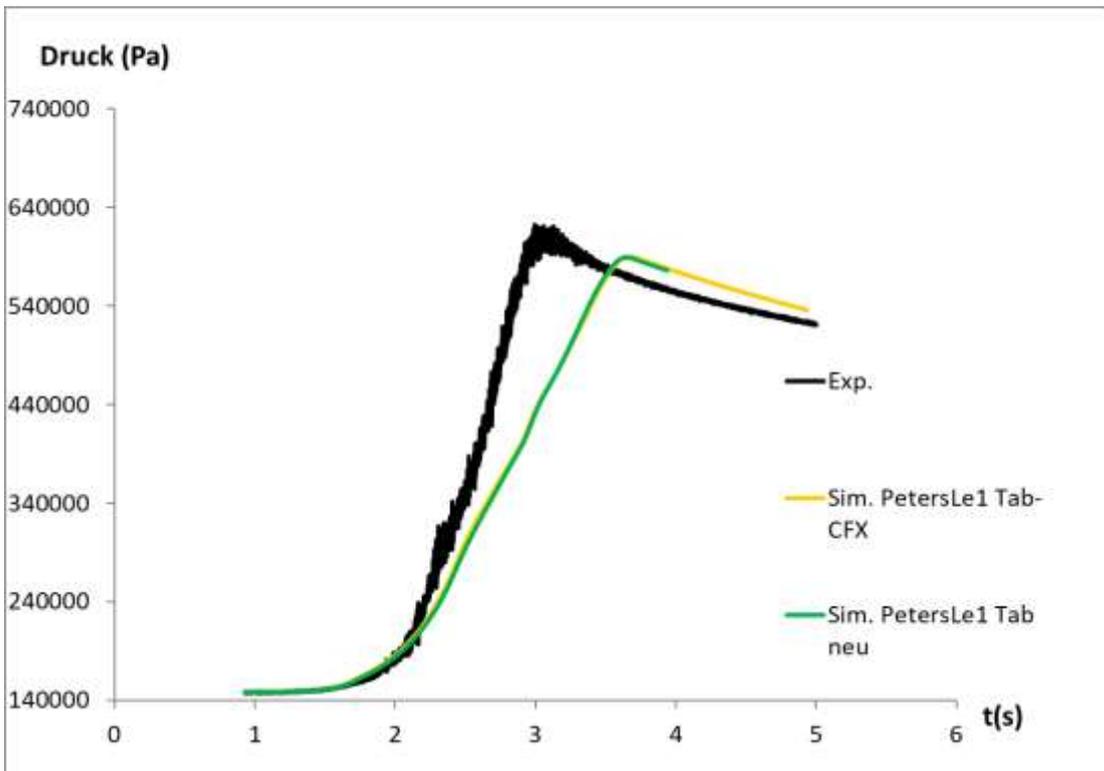
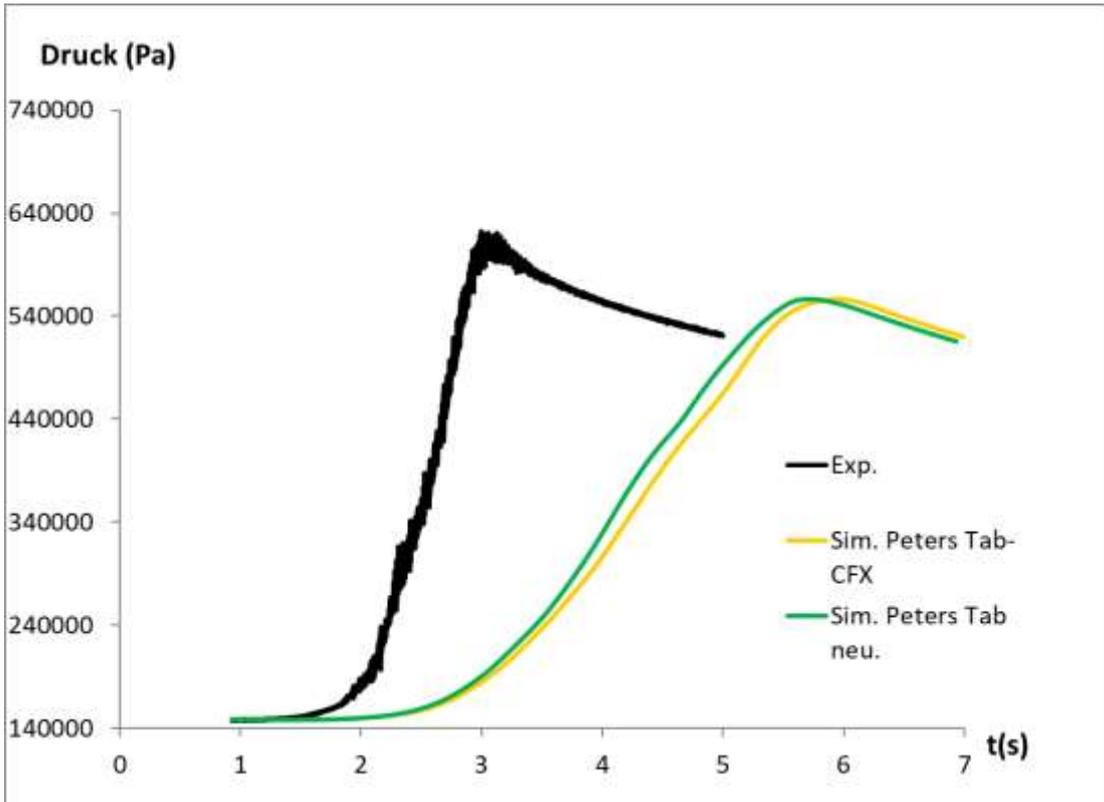


Abb. 4.51 Druck bei Simulation von HD-7 mit der CFX Flamelet-Library (grün) und der neu erstellten Flamelet-Library (gelb). Oben Simulation mit der Peters-Korrelation unten mit der modifizierten Peters-Korrelation

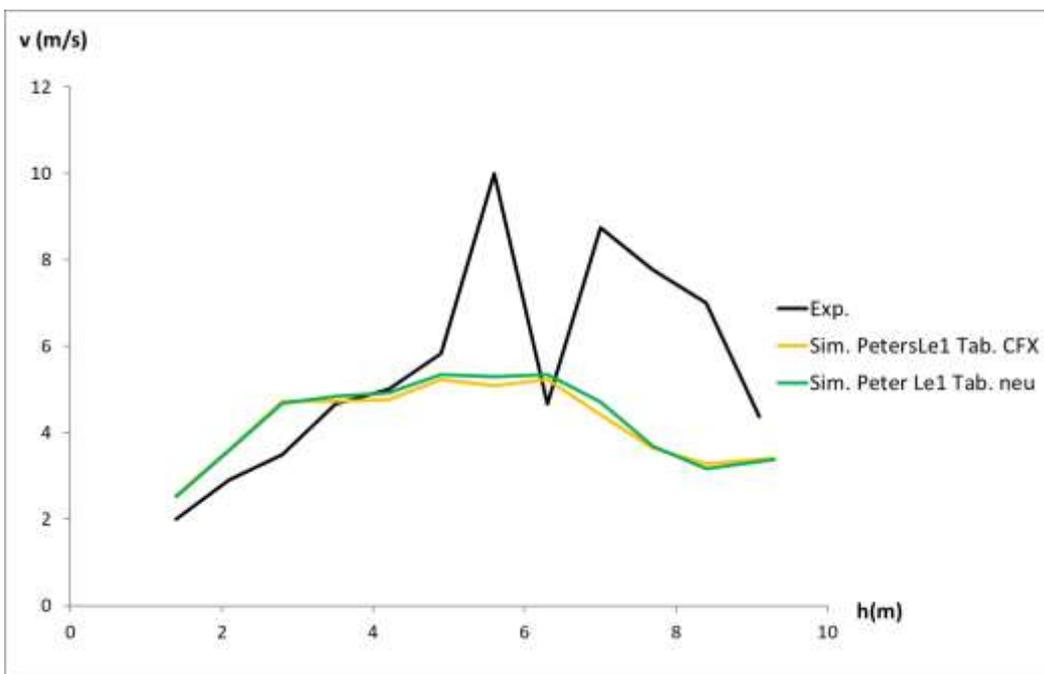
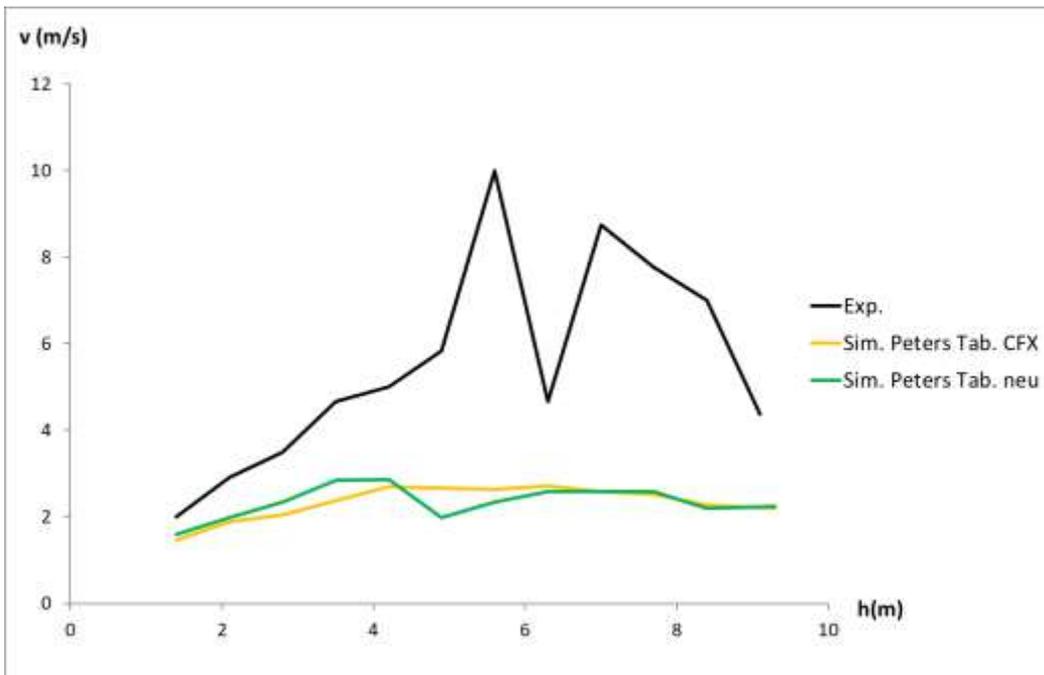


Abb. 4.52 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse bei Simulation von HD-7 mit der CFX Flamelet-Library (grün) und der neu erstellten Flamelet-Library (gelb). Oben Simulation mit der Peters-Korrelation unten mit der modifizierten Peters-Korrelation

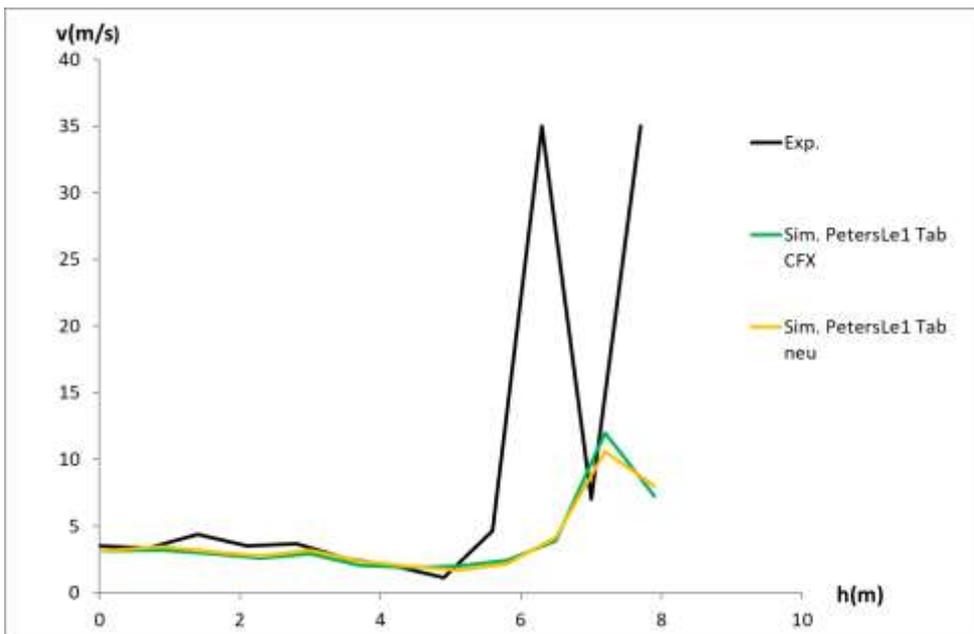
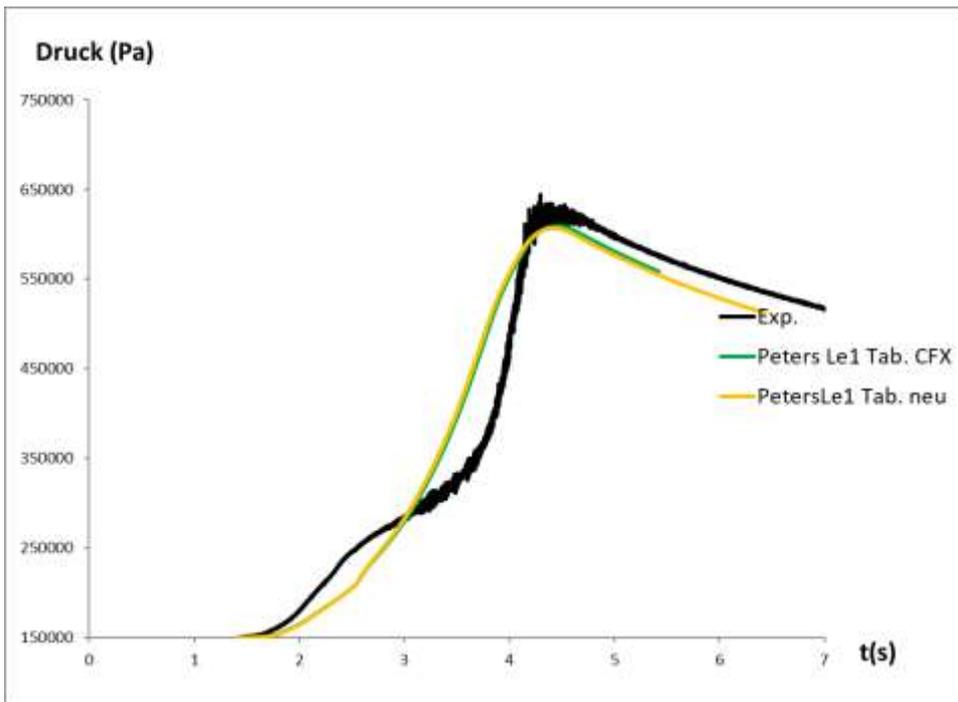


Abb. 4.53 Druck (oben) und Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse bei Simulation von HD-10 mit der CFX-Flamelet-Library (grün) und der neu erstellten Flamelet-Library (gelb)

4.2.2 Validierung der H₂-Verbrennungssimulation mit CFX

4.2.2.1 Einleitung

Ziel der im Folgenden vorgestellten Arbeiten ist die Validierung der H₂-Verbrennungssimulation mit CFX. Dabei sollen die Verbrennungsregime von der laminaren Verbrennung bis hin zur turbulent beschleunigten Verbrennung simuliert werden. DDT oder Detonationen werden nicht betrachtet, da sie andere Verbrennungsmodelle benötigen. Als Modell zur Simulation der Verbrennung wurde wie schon in früheren Projekten /SCH 17/ das Burning-Velocity-Modell ausgewählt /ANS 11/. In diesem Modell wird die turbulente Flammengeschwindigkeit durch Korrelationen beschrieben, die in der Regel u. a. von der laminaren Flammengeschwindigkeit abhängig sind. Im Folgenden werden Versuchsnachrechnungen mit unterschiedlichen Korrelationen für die laminare Flammengeschwindigkeit durchgeführt. Insbesondere soll dabei die von der TUM (Herr Katzy / Prof. Sattelmayer) im Rahmen des Projekts „Entwicklung und Validierung eines effizienten Konzeptes für die Wasserstoffverbrennung mit hohem Luftüberschuss“ BMWi 1501485 /KAT 18/ neu entwickelte Korrelation einer entwicklerunabhängigen Validierung unterzogen werden. Um einen Überblick über die Anwendbarkeit der einzelnen Korrelationen zu erhalten, werden Versuche mit unterschiedlich schneller Flammenausbreitungsgeschwindigkeit untersucht. Neben der relativ langsamen Verbrennung in verschiedenen THAI- und THAI+-Experimenten (HD-7, HD-10, HD-39) soll auch die schnelle Verbrennung im ENACCEF-Versuch mit 13 vol-% initialer H₂-Konzentration simuliert werden.

4.2.2.2 Verwendete Modelle bei der Simulation von H₂-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. Die Gaszusammensetzung des verbrannten Gases wird aus einer Flamelet-Tabelle eingelesen. Bei den Simulationen kam die in Abschnitt 4.2.1 beschriebene neue Flamelet-Tabelle zum Einsatz. Der Reaktionsfortschritt wird durch eine Reaktionsfortschrittsvariable c beschrieben, für die eine Erhaltungsgleichung gelöst wird.

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 RS1526 /SCH 14/ wurden bereits zahlreiche Korrelationen getestet, allerdings konnte mit keinem Ansatz für alle betrachteten Verbrennungsregimes (langsame Verbrennung HD-10 und auch für schnelle turbulente Verbrennung (ENACCEF)) eine gute Übereinstimmung erzielt werden. Im Folgenden soll diese Untersuchung fortgeführt werden. Insbesondere soll auch die von der TUM neu erstellte Korrelation für magere H_2 -Verbrennung getestet werden.

Im Folgenden werden die in diesem Projekt verwendeten Korrelationen aufgeführt:

- Peters-Korrelation /PET 00/, /ANS 11/:

$$s_T^{Peters} = v_{lam}(1 + \sigma_t)$$

$$\sigma_t = -A \frac{l}{l_F} + \sqrt{\left(A \frac{l}{l_F}\right)^2 + B \frac{u'l}{v_{lam}l_F}}$$

$$A = \frac{a_4 b_3^2}{2b_a} \quad B = a_4 b_3^2$$

$$l = a_1 \frac{u'^3}{\varepsilon} \quad l_F = \frac{(\lambda_u / c_{p,u})}{\rho_u v_{lam}}$$

$c_{p,u}$ Wärmekapazität des unverbrannten Gases

ρ_u Dichte des unverbrannten Gases

λ_u Wärmeleitfähigkeit des unverbrannten Gases

Die Konstanten sind dabei standardmäßig wie folgt gesetzt:

$$a_1 = 0,37 \quad a_4 = 0,78 \quad b_1 = 2 \quad b_3 = 1$$

Peters Le1: (aus RS1526 /SCH 17/)

$$s_T^{Le1} = v_{lam}(1 + \sigma_t) Le^{-1}$$

$$Le \quad \text{Lewiszahl } Le = \frac{\left(\frac{\lambda_u}{\rho_u c_{p,u}}\right)}{D_{H_2}}$$

- Modifizierte Dinkelacker-Korrelation /DIN 10/:

$$S_T^{Din} = v_{lam} \left(A + B \frac{0,46}{Le} Re_t^{0,25} \left(\frac{u'}{v_{lam}} \right)^{0,3} \left(\frac{P}{P_0} \right)^{0,2} \right)$$

D_{H_2} Diffusionskonstante H_2

Re_t turbulente Reynolds Zahl $Re_t = \frac{u' l_t}{\gamma}$

γ kinematische Viskosität

l_t integrales turbulentes Längenmaß $l_t = \frac{k^2}{\varepsilon}$

$c_{p,u}$ Wärmekapazität des unverbrannten Gases

ρ_u Dichte des unverbrannten Gases

λ_u Wärmeleitfähigkeit des unverbrannten Gases

u' turb. Geschwindigkeitsfluktuation

P Druck

P_0 Referenzdruck (hier 1 bar)

A, B Faktoren, in Originalkorrelation von Dinkelacker $A = B = 1$

Im Gegensatz zur Originalkorrelation von Dinkelacker und den Arbeiten in RS1526 werden zwei zusätzliche Modellkonstanten A und B eingeführt, die von 1 bis 3 variiert wurden. In den bisherigen Untersuchungen hatte die Dinkelacker-Korrelation ($A = 1,0$) sowohl für die langsame Verbrennung in THAI (HD-7, HD-10) als auch für die schnelle Verbrennung (ENACCEF) eine zu langsame Verbrennung vorhergesagt. Daher ist es naheliegend, dass mit zusätzlichen Faktoren A, $B > 1$ eine Verbesserung erzielt werden kann. Der Faktor $(P/P_0)^{0,2}$ kompensiert die Druckabhängigkeit in v_{lam} . Dies steht im Einklang mit Untersuchungen an der TUM, in denen gezeigt wurde, dass im Gegensatz zur Korrelation für die laminare Flammgeschwindigkeit bei der Korrelation für die turbulente Flammgeschwindigkeit ein höherer Druck zu einer schnelleren Verbrennung führt. Bei den Versuchen HD-7, HD-10 und ENACEF2 wurde dieser Term in einer Parametervariation weggelassen, um seinen Einfluss zu untersuchen.

- Korrelation der TUM (P. Katzy, T. Sattlemayer) /KAT 18/:

Der Einfluss einzelner Effekte wird durch unterschiedliche Einflussfaktoren simuliert:

$$s_T^{TUM} = v_{lam} F_{wink} F_{press} F_s F_{turb} F_z B$$

F_{wrink} Modellierung der kleinskaligen Flammenfaltung

$$F_{wrink} = Le_{eff}^{-0,8}$$

Le_{eff} effektive Lewiszahl

$$Le_{eff} = 1 + \frac{Le_E - 1 + H(Le_D - 1)}{1 + H}$$

$$Le_E = 2,32 \quad Le_D = 0,33$$

$$H = 1 + Ze \left(\frac{1}{\varphi} - 1 \right)$$

φ Äquivalenzverhältnis ($\varphi < 1$)

Ze Zeldovichzahl

$$Ze = \frac{E(T_b - T_u)}{RT_b^2}$$

E Aktivierungsenergie $E = 30 \text{ kcal/mol}$ /KAT 18/

T_b Temperatur des verbrannten Gases (adiabate Verbrennung)

T_u Temperatur des unverbrannten Gases

R Gaskonstante

F_{press} Druckeinfluss auf Flammenfaltung

$$F_{press} = \left(\frac{P}{P_{ref}} \right)^{0,14}$$

P_{ref} 1 bar

F_S Modellierung des Streckungseinflusses

$$F_S = (1 + Mk)^{-1}$$

Die Korrelation für die Marksteinlänge und die Krümmung wurden entsprechend einer E-Mail von Herrn Katzy modifiziert /KAT 20a/.

M Marksteinlänge

$$M [m^{-1}] = -0,0007159 \varphi^2 + 0,001753\varphi - 0,001044$$

k Krümmung

$$k = \frac{\pi}{2} 500 [m^{-1}] \left(\frac{P^*}{P_{ref}} \right)^{0,55}$$

Bei der Berechnung von F_s ergibt sich das Problem, dass M für die hier betrachteten niedrigen H_2 -Konzentrationen negativ ist. Bei der hier verwendeten Gleichung für k wird es mit steigendem Druck immer größer. Deshalb kommt es ohne eine Begrenzung von k bei Validierungsrechnungen (HD-7, HD-10 etc.) zu Programmabstürzen, da F_s und damit auch v_{turb} sehr groß werden (gehen gegen ∞). Den Modellentwicklern ist dieses Problem bekannt und in den Validierungsrechnungen der TUM wurde „eine geeignete Grenzfallbetrachtung implementiert, die unphysikalisch hohe Krümmungswerte verhindert“ /KAT 18/. Diese Grenzfallbetrachtung wurde allerdings im Abschlussbericht nicht dokumentiert. Laut /KAT 18/, /KAT 20a/, /KAT 20b/ sollte der Druck P auf die Hälfte des AICC-Drucks begrenzt werden.

$$P^* = \min(P, 0,5 P_{AICC})$$

F_{turb} Einfluss der Turbulenz wird mit der Korrelation von Peters s_T^{Pet} modelliert, wobei $\alpha_1 = 0,39$ gewählt wird, statt 0,37 in ANSYS CFX und s_T^{Pet}

F_Z Modellierung der Gittersensitivität

Es wird berücksichtigt, dass bei Verwendung eines feineren CFD-Gitters mehr kleinskalige Flammenfaltungen aufgelöst werden.

$$F_Z = \left(\frac{\Delta}{\Delta_{ref}} \right)^{0,16}$$

$$\Delta = (\text{Zellvolumen})^{1/3}$$

$$\Delta_{ref} = 7,5 \text{ mm}$$

Die Auswertung der Zellgröße erfolgt lokal an allen Zellen im CFD-Gitter. Bei ANSYS CFX-19 gibt es das Problem, dass während der Simulation CFX nicht in der Lage ist, die lokale Zellgröße dem Nutzer zur Verfügung zu stellen. Als „Work Around“ hat der

ANSYS-Support vorgeschlagen, eine zusätzliche Transportvariable zu definieren, die mit der lokalen Zellgröße initialisiert wird. Durch einen Unterrelaxationsfaktor von 0,0 soll sichergestellt werden, dass sich diese Größe während der Simulation nicht ändert. Prinzipiell ist dieser „Work Around“ erfolgreich, allerdings kommt es im Laufe der CFX-Simulationen häufig dazu, dass die Gleichung für die „Additional variable“ Zellvolumen aufgrund des Unterrelaxationsfaktors 0 nicht mehr konvergiert. Dies führt dazu, dass immer die maximale Anzahl der Iterationen pro Zeitschritt durchlaufen wird und die Zeitschrittsteuerung, die auf der Anzahl der benötigten Iterationen beruht, nicht mehr funktioniert. Dies führt zu einem drastischen Anstieg der Rechenzeit. Bei den hier durchgeführten Versuchsnachrechnungen werden meist sehr feine CFD-Gitter verwendet, so dass der Faktor F_z nur einen geringen Einfluss hat. Sofern nicht anders spezifiziert, wird in den Testrechnungen der Faktor F_z vernachlässigt. Bei den hier durchgeführten Simulationen war der hierdurch entstandene Fehler bei Berechnung des Terms F_z gegenüber anderen Unsicherheiten (z. B. F_{Kruem}) gering.

B Einfluss des Flammeneinschlusses

In diesen Faktor geht die Form des Verbrennungskanals ein. Bei der GraVent erfolgt die Flammenausbreitung ähnlich der in einem langen Rohr, während in THAI auch eine seitliche Flammenausbreitung erfolgt. Bei GraVent wurde $B = 0,5 \frac{\rho_u}{\rho_b}$ gewählt, beim Versuch THAI HD-7 $B = 1$.

Bei den hier durchgeführten Validierungsrechnungen wurde bei den THAI-Simulationen (HD-7, HD-10, HD-39) ebenfalls $B = 1$ gewählt. Zusätzlich wurde $B = 0,5$ getestet, da bei einigen Versuchen mit $B = 1$ die Verbrennungsgeschwindigkeit überschätzt wird. Ziel der Validierungsrechnungen ist es, einen Faktor B zu identifizieren, der für alle Versuche gute Ergebnisse liefert. Für komplexe Geometrien wie sie in einem Containment vorliegen, ist die Wahl eines geometrieabhängigen Faktors nicht praktikabel.

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 berechnet.

Die Approximation nach Ettner (Dissertation Ettner, TUM /ETT 13/), lautet:

$$v_{lam,0}^E = \begin{cases} (-488,9x_{H_2}^4 + 285,0x_{H_2}^3 - 21,92x_{H_2}^2 + 1,351x_{H_2} - 0,040) \frac{m}{s}, & x_{H_2} \leq 0,35 \\ (-160,2x_{H_2}^4 + 377,7x_{H_2}^3 - 348,7x_{H_2}^2 + 140,0x_{H_2} - 17,45) \frac{m}{s}, & x_{H_2} > 0,35 \end{cases}$$

$$v_{lam}^E = v_{lam,0}^E \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\alpha^E} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\beta^E}$$

$$\alpha^E = 1,75$$

$$\beta^E = -0,2$$

Für die Validierung der neuen Korrelation der TUM wird folgende Approximation für die laminare Flammgeschwindigkeit in mageren H₂-Luft-Gemischen vorgeschlagen:

$$v_{lam,0}^K = 4,248\varphi^5 - 13,6\varphi^4 + 12,34\varphi^3 - 0,833\varphi^2 - 0,02239\varphi - 0,003956$$

Ein Vergleich der beiden Korrelationen zeigt eine gute Übereinstimmung (Abb. 4.54) der beiden Korrelationen für den relevanten Bereich.

Bei der Modellierung des Temperatur- und Druckeinflusses wird der gleiche Ansatz verfolgt:

$$v_{lam}^K = v_{lam,0}^K \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\alpha^K} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\beta^K}$$

Allerdings werden die Koeffizienten durch Polynome angenähert (β^K gemäß /KAT 20a/ gegenüber Abschlussbericht /KAT 18/ modifiziert):

$$\alpha^K = 3,791\varphi^2 - 8,443\varphi + 6,35$$

$$\beta^K = -2,7\varphi^2 - 4,586\varphi - 2,1$$

Daraus ergibt sich ein deutlich stärkerer Einfluss der Temperatur und des Druckes (Abb. 4.55, Abb. 4.56).

Bei der Druckabhängigkeit ist allerdings zu berücksichtigen, dass in der neuen Korrelation der TUM in F_{press} ($\beta = 0,14$) und in F_s eine Druckabhängigkeit implementiert ist, die

einen gegenteiligen Effekt zeigt, so dass die effektive Druckabhängigkeit der turbulenten Flammgeschwindigkeit geringer ist.

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.

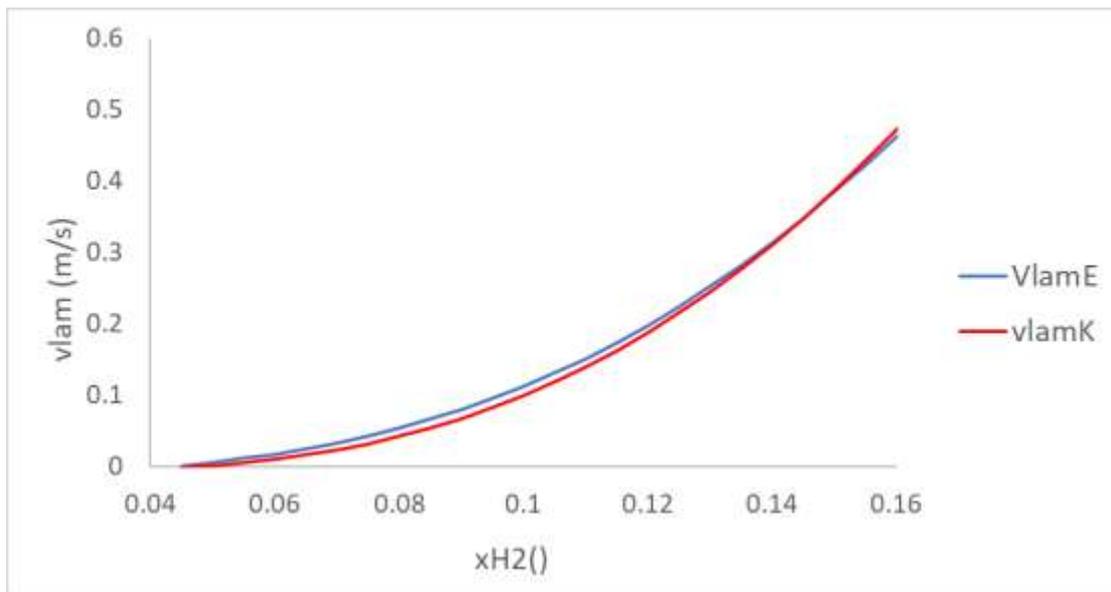


Abb. 4.54 Laminare Brenngeschwindigkeit nach Etnner (blau) und Katzy (rot). Approximation über dem H₂-Molenbruch bei Standardbedingungen

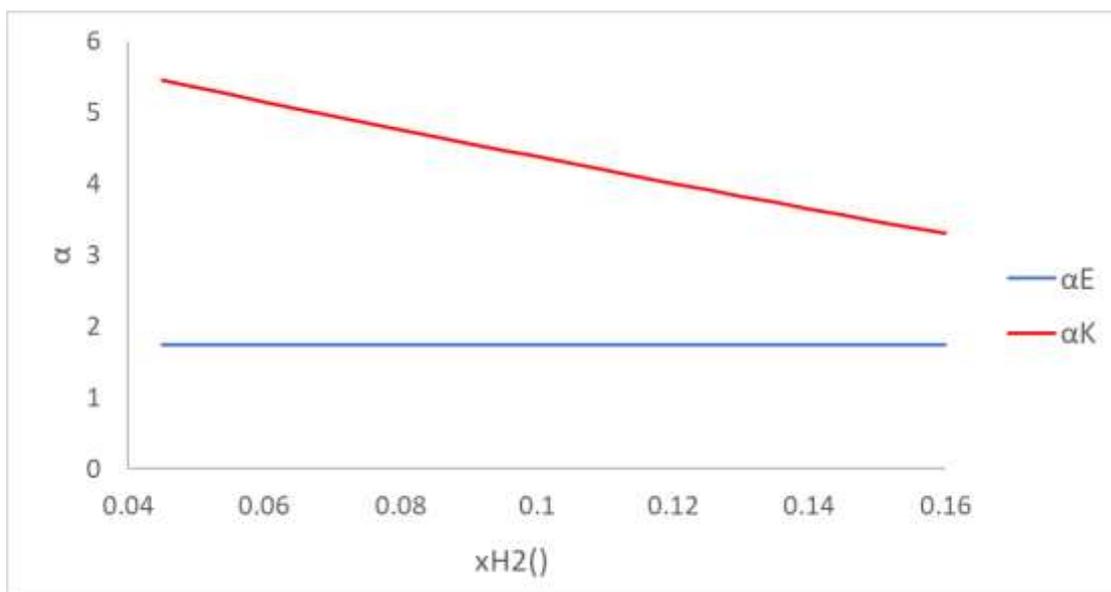


Abb. 4.55 Druckexponent β nach Etnner (blau) und Katzy (rot). Approximation über dem H₂-Molenbruch

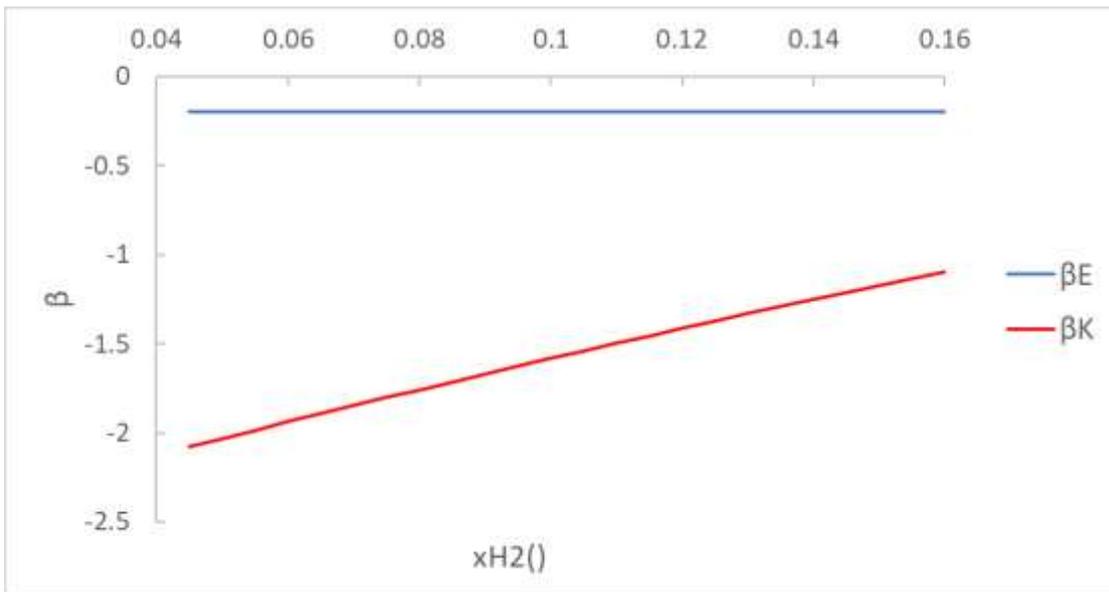


Abb. 4.56 Druckexponent β nach Ettner (blau) und Katzy (rot). Approximation über dem H₂-Molenbruch

4.2.2.3 CFD-Modelle bei Verbrennungssimulationen

Das Ziel der Arbeiten ist es, einen Satz von Modellen/Parametern zu identifizieren, mit dem möglichst alle Verbrennungsvorgänge von langsamer quasi laminarer Verbrennung ($v_{\text{flamme}} \sim 1 \text{ m/s}$) bis hin zur turbulent beschleunigten Verbrennung (mehrere 100 m/s) zufriedenstellend simuliert werden können. Dies ist wichtig, da in komplexen Geometrien wie in einem Containment, in einzelnen Raumbereichen, unterschiedlich schnelle Verbrennungen ablaufen können. Außerdem ist es auch schwierig, vorab sicher vorherzusagen, inwieweit es zu Flammenbeschleunigungen kommt. Dies sollte stattdessen das Ergebnis der Verbrennungssimulation sein. Dies ist eine anspruchsvolle Anforderung, da verschiedene Verbrennungsregime im Borghi-Diagramm abgedeckt werden, bei denen unterschiedliche physikalische/chemische Vorgänge eine dominante Rolle spielen. In RS1526 ist dies noch nicht gelungen; für die einzelnen Verbrennungsbereiche mussten unterschiedliche Korrelationen zur Beschreibung der turbulenten Flammengeschwindigkeit verwendet werden, um die Verbrennung richtig zu beschreiben /SCH 17/.

Alle Simulationen werden mit dem Burning-Velocity-Modell durchgeführt. Es werden verschiedene Korrelationen für die turbulente Brenngeschwindigkeit und die laminare Flammengeschwindigkeit verwendet (siehe Abschnitt 4.2.2.2). Bis auf Simulationen mit der neu entwickelten Korrelation der TUM wird immer die in Kapitel 4.2.1 beschriebene neue Flamlet-Bibliothek verwendet. Die Turbulenz wird mit dem SST-Modell einschließlich der Terme für „Bouyancy Turbulence“ simuliert. Die Wärmestrahlung wird mit dem Discrete-

Transfer-Modell modelliert. An den Wänden wird eine Wandtemperatur fest vorgegeben, da davon ausgegangen wird, dass sich die Wände in dem kurzen betrachteten Zeitraum nur wenig aufheizen, so dass auch eine feste Wandtemperatur zu einem geringen Fehler bei der Temperaturdifferenz Gas-Wand führt.

4.2.2.4 Vorbemerkung

Um die Auswahl der gewählten Koeffizienten besser verstehen zu können, müssen die Ergebnisse der Validierungsrechnungen als Ganzes betrachtet werden. Ziel ist es, eine Korrelation zu finden, mit der sich alle Versuche zumindest zufriedenstellend simulieren lassen. Mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation und den Koeffizienten $A = 1$ (oder auch $A = 2$) und $B = 3$ ist dies der Fall. Deshalb werden die Simulationsergebnisse dieser Korrelation als Referenz z. B. für den Vergleich mit der Korrelation der TUM herangezogen.

Bei den Simulationen mit der Korrelation der TUM wurden die Formfaktoren $B = 1$ und $B = 0,5$ getestet. Mit $B = 1$ lassen sich die langsamen Verbrennungsexperimente HD-7 und HD-10 in guter Übereinstimmung mit dem Experiment simulieren. Allerdings kommt es bei Simulation des Experiments HD-39 und noch stärker bei den ENACCEF2-Experimenten zu einer signifikanten Überschätzung der Verbrennungsgeschwindigkeit. Mit $B = 0,5$ kann der Versuch HD-39 in relativ guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden, bei den ENACCEF2-Experimenten wird dagegen auch mit dem niedrigeren Faktor noch eine zu schnelle Simulation berechnet.

Zu Beginn des Projekts lagen noch keine Erfahrungen mit der Wahl der Koeffizienten für die modifizierte Dinkelacker-Korrelation vor. Da einige Parameterstudien (insbesondere zur Gitterabhängigkeit) am Anfang der Arbeiten durchgeführt wurden, wurden bei diesen Studien andere Parameter als $A = 2$ und $B = 3$ in der modifizierten Dinkelacker-Korrelation verwendet. Die Simulationen wurden nur dann wiederholt, wenn mit den geänderten Koeffizienten ein qualitativ anderes Ergebnis zu erwarten ist.

4.2.2.5 Nachrechnung des THAI-Versuches HD-7

4.2.2.5.1 Versuchsbeschreibung HD-7

Bei allen Verbrennungsversuchen der HD-Serie wurden aus dem THAI-Behälter die Einbauten (Innenzylinder, Kondensatplatten) entfernt (Abb. 4.57). Es liegen also keine

größeren Hindernisse vor, die Turbulenz erzeugen könnten. Beim Experiment HD-7 /KAN 08/ liegt eine initiale Wasserstoffkonzentration von 9,93 vol.-% vor; der Anfangsdruck liegt bei 1,48 bar und die initiale Temperatur bei 18 °C. Die Zündung erfolgt im Sumpfbereich auf einer Höhe von 0,5 m. Neben dem Druck wird auch die Temperatur an unterschiedlichen Positionen im Behälter gemessen (Abb. 4.57). Der Beginn des schnellen Temperaturanstiegs korrespondiert mit der Ankunft der Flammenfront an dieser Messstelle.

Im Experiment findet eine vollständige Verbrennung des Wasserstoffs statt. Aufgrund von Wärmeverlusten an den Wänden liegt der maximale Druck mit etwa 5,9 bar ca. 0,5 bar unterhalb des AICC Drucks (Abb. 4.58, Abb. 4.60).

Aus den Flammenankunftszeiten haben die Experimentatoren den Verlauf der Flammenfront extrapoliert (Abb. 4.59), /KAN 08/. Bei 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 (Abb. 4.59). Bis zu diesem Zeitpunkt ist die Flammenfront näherungsweise auch achsensymmetrisch. Danach wird zuerst die Messstelle auf der Linie E erreicht. 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. Eine weitergehende Diskussion der Messergebnisse ist im Abschlussbericht von RS1526 /SCH 17/ zu finden.

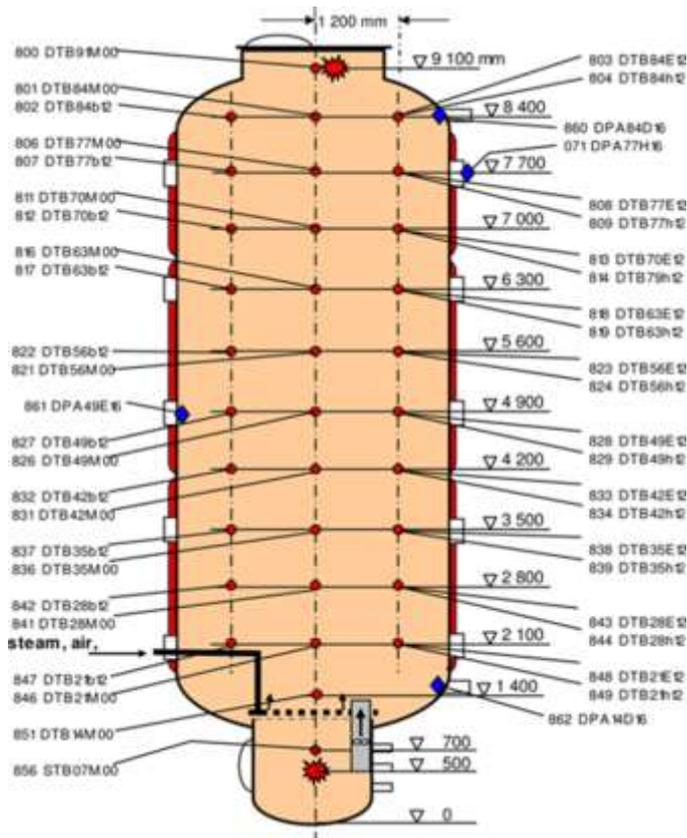


Abb. 4.57 Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus bei den THAI-HD-Versuchen. Die roten Punkte zeigen die Positionen der Temperaturmessstellen, die blauen Rauten die Position der Druckmessungen /KAN 08/

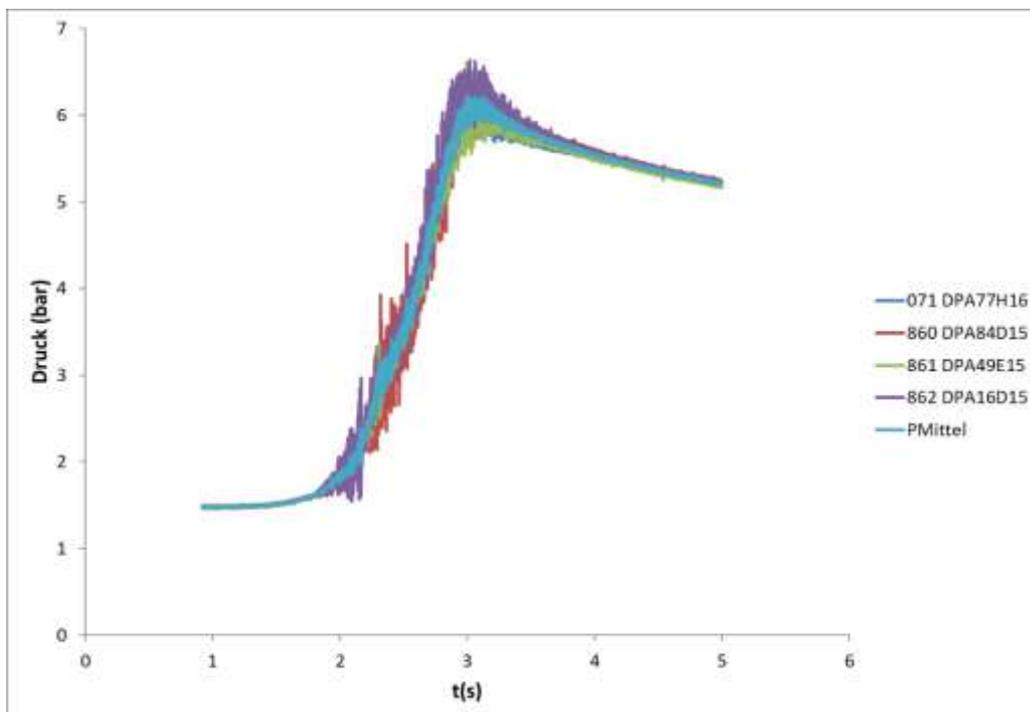


Abb. 4.58 Experimenteller Druckverlauf an unterschiedlichen Messstellen

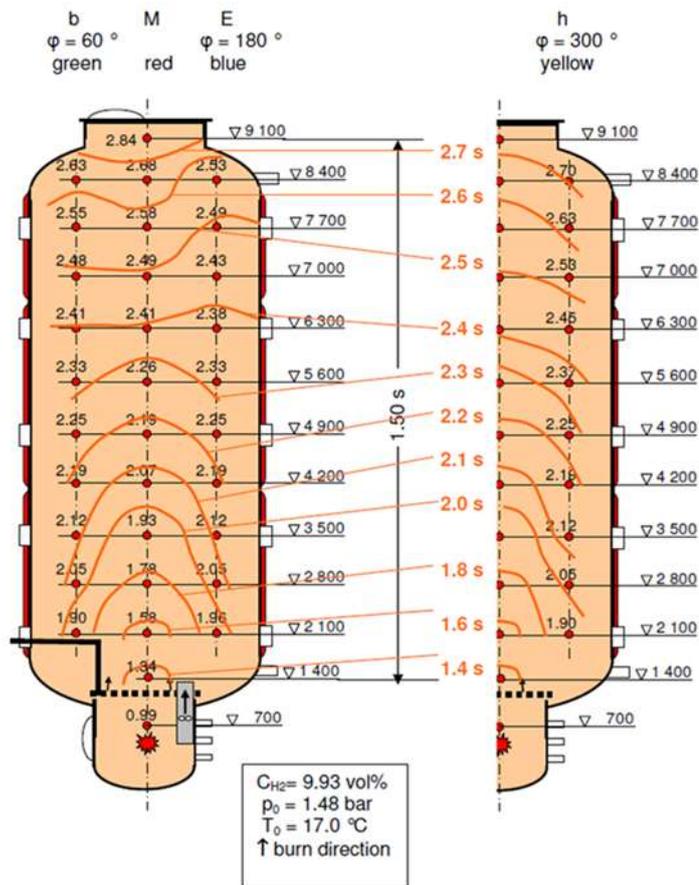


Abb. 4.59 Experimentelle Flammenankunftszeiten

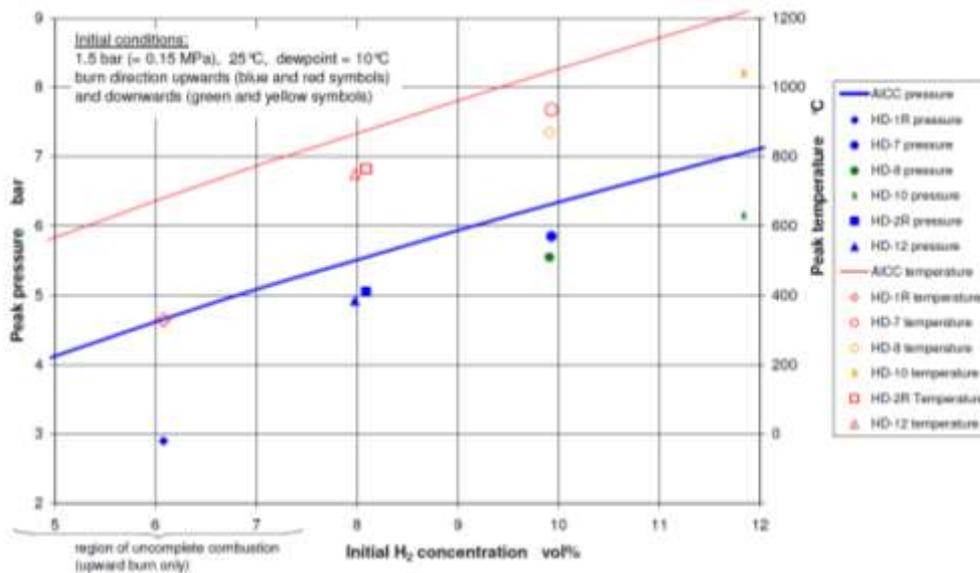


Abb. 4.60 Maximaler Druck und maximale Temperatur verglichen mit dem AICC-Druck und der AICC-Temperatur /KAN 08/

4.2.2.5.2 Studie zur Gitterabhängigkeit

Allen in diesem Projekt simulierten THAI/THAI+-Verbrennungsexperimenten liegt das gleiche THAI+-CFD-Gitter zugrunde. Ausgehend von einem von Becker Technologies zur Verfügung gestellten CAD-File der THAI+-Anlage wurde ein strukturiertes CFD-Gitter mit Pointwise erstellt. Bei der Simulation von THAI-Experimenten (HD-7, HD-10) wird nur der THAI-Teil des Gitters verwendet. In RS1526 /SCH 17/ hat sich gezeigt, dass Sprünge in der Gittergröße die berechnete Verbrennungsgeschwindigkeit insbesondere bei einer abwärts gerichteten Verbrennung verfälschen können. Deshalb wurde bei der Gittererstellung darauf geachtet, dass keine Sprünge in der Gittergröße auftreten und sich die Zellgröße im gesamten Raumbereich nicht zu stark unterscheidet. Es werden zwei Simulationen miteinander verglichen: Eine Simulation mit 3,7 Millionen Zellen und eine mit 1,2 Millionen Zellen. Für diese Studie wurde die Dinkelacker-Korrelation mit dem Faktor $A = 2,0$ verwendet. Der Vergleich des Druckverlaufs ist bei beiden Simulationen nahezu identisch (Abb. 4.61). Dies lässt auf eine gleich große integrale Reaktionsgeschwindigkeit schließen. Der Maximaldruck und der Druckabfall sind ebenfalls gleich. Dies zeigt, dass die Wärmeverluste an die kalten Wände in beiden Simulationen gleich sind. Die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Behälterachse unterscheidet sich ebenfalls nur wenig (siehe Abb. 4.62). Zusammenfassend kann gefolgert werden, dass – wenn überhaupt – nur noch eine schwache Gitterabhängigkeit vorhanden ist.

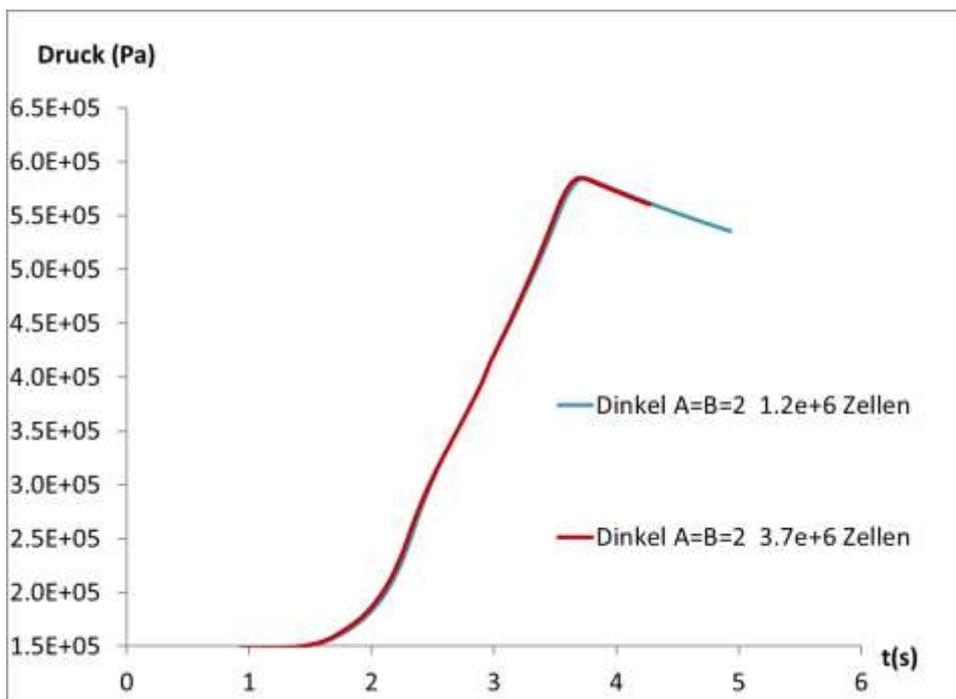


Abb. 4.61 Untersuchung der Gitterabhängigkeit bei HD-7: Druckverlauf

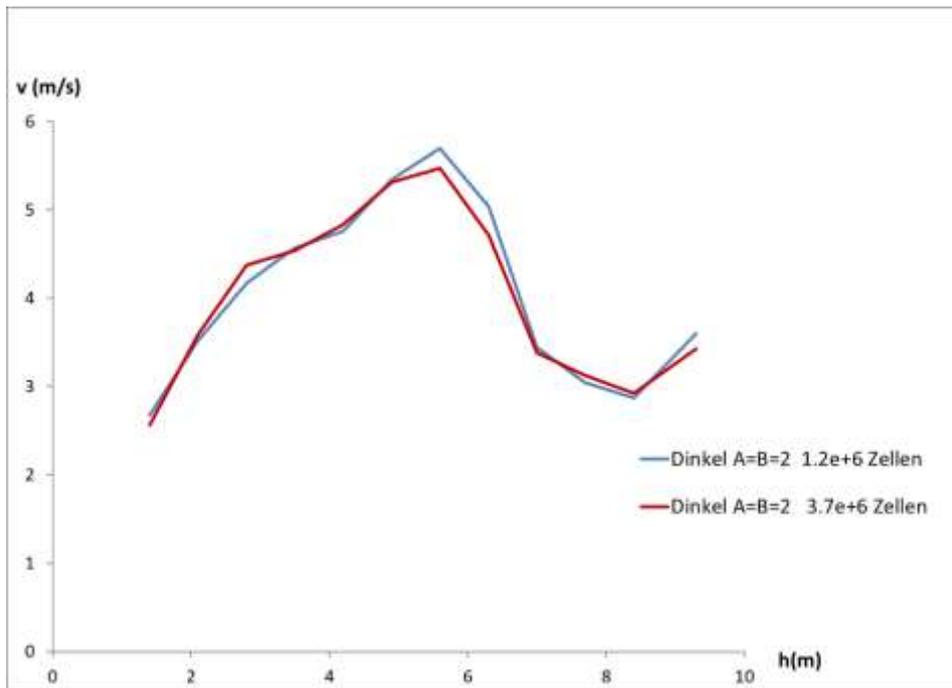


Abb. 4.62 Untersuchung der Gitterabhängigkeit bei HD-7: Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse

4.2.2.5.3 Studie zum Einfluss der initialen Turbulenz

In den Experimenten wurde die Turbulenz zum Zeitpunkt der Zündung nicht gemessen. Es ist lediglich bekannt, dass vor Zündung ein Ventilator in Betrieb war, der für eine gute Durchmischung des zündfähigen Gemischs sorgen soll. Nachdem die Durchmischung erreicht wurde, wurde der Ventilator ausgeschaltet und 10 – 15 Minuten gewartet, um das Abklingen der Gasströmung im THAI-Behälter zu gewährleisten. Es kann davon ausgegangen werden, dass bei der Zündung die Strömung im Wesentlichen abgeklungen ist. Bei den Simulationen wird die Annahme getroffen, dass keine gerichtete Strömung mehr vorliegt und dass nur noch eine (sehr) kleine Anfangsturbulenz vorliegt. Allerdings bleibt unklar, welcher Wert für die turbulente kinetische Energie k und die Dissipationsrate ε zu wählen ist. Im Folgenden soll untersucht werden, wie sich die Wahl der Anfangsturbulenz auf die Strömung auswirkt. Die Anfangsturbulenz wurde im Bereich $k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2 - 1,0e-8 \text{ m}^2/\text{s}^2$ variiert. Für das Eddy-Viscosity-Ratio μ_T/μ_{dyn} wurden die Werte 10 bzw. 0,1 angenommen (siehe Tab 4.7). Der Vergleich der Simulationen zeigt, dass sowohl der Druckverlauf (Abb. 4.63) als auch die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit (Abb. 4.64) sensitiv im Hinblick auf die Anfangsturbulenz sind. Insbesondere die beiden Simulationen mit der höchsten initialen turbulenten kinetischen Energie k zeigen deutliche Abweichungen zu den anderen Simulationen. Ein Grund für die Sensitivität ist, dass k und ε nicht nur die Strömung beeinflussen, sondern dass beide

Größen auch in die Berechnung der turbulenten Brenngeschwindigkeit eingehen. Dabei führt ein höheres k und ein kleineres ϵ zu einer Erhöhung der turbulenten Flammengeschwindigkeit. Die exakte Abhängigkeit ist von der Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit abhängig (siehe Abschnitt 4.2.2.2). In den Simulationen 1 – 5 wurde in der modifizierten Dinkelacker-Korrelation der Faktor = 2 gewählt. In den Simulationen 6 und 7 ist $A = 3$. Auch bei der höheren turbulenten Flammengeschwindigkeit ergibt sich eine ähnliche Abhängigkeit der Simulationsergebnisse von der Anfangsturbulenz. Es zeigt sich, dass die Simulationsergebnisse der Simulationen 1 ($A = 2$, $k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$) und 6 ($A = 3$, $k = 1,0e-6 \text{ m}^2/\text{s}^2$) ähnlich sind. Das bedeutet, dass eine höhere Anfangsturbulenz eine ähnliche Wirkung hat wie eine höhere Konstante in der Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit.

Im Folgenden wird der Einfluss der initialen Turbulenz auf das Simulationsergebnis anhand der Simulationen 1 ($k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $vr = 10$) und der Simulation 5 ($k = 1,0e-6 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $vr = 0,1$) näher untersucht. In der Simulation 1 erfolgt die Flammenausbreitung etwas schneller als in Simulation 5, deshalb erreicht die Flamme die Höhe 7 m im ersten Fall nach ca. 1,8 s, bei der Simulation mit niedrigerer Anfangsturbulenz erst nach 2 s. In beiden Simulationen ist die turbulente kinetische Energie und die turbulente Dissipation hinter der Flammenfront ähnlich hoch. Sie liegen um Größenordnungen höher als die Anfangswerte. Vor der Flamme wird in diesem Versuch allerdings nur relativ wenig Turbulenz erzeugt. Die Turbulenz liegt deshalb in beiden Rechnungen noch in der Größenordnung der Anfangswerte und darum in Simulation 1 um ca. 2 Größenordnungen höher als in Rechnung 5. Dies führt dazu, dass vor der Flammenfront in Simulation 5 die Korrelation für die turbulente Brenngeschwindigkeit einen Wert berechnet, der nur geringfügig oberhalb der laminaren Brenngeschwindigkeit liegt. In Simulation 1 ist dieser Wert dagegen um einen Faktor 2 – 3 größer (Abb. 4.66). Im Bereich der Flammenfront sind die Unterschiede zwischen den beiden Simulationen zwar deutlich geringer, in Simulation 1 ist der Quellterm der Reaktionsvorschrittsvariablen aufgrund der chemischen Reaktion allerdings etwas höher als in Rechnung 5. Die Unterschiede führen dazu, dass die Flamme bei Simulation 1 die Höhe 7 m etwas früher erreicht. Die Form der Flammenfront unterscheidet sich ebenfalls zwischen den beiden Berechnungen. Bei Nr. 1 erreicht die Flamme die Seitenwand des Behälters früher und es findet eine etwas stärkere Flammenausbreitung nach unten statt. Dies kann damit erklärt werden, dass bei der Flammenausbreitung nach oben der Auftrieb des heißen Gases eine zentrale Rolle spielt, während die seitliche Ausbreitung stärker von der Größe der turbulenten Brenngeschwindigkeit abhängt. Es sei angemerkt, dass auch Transportvorgänge eine wichtige Rolle spielen. Insbesondere in der Anfangsphase, solange die Flamme die

seitlichen Behälterwände noch nicht erreicht hat, wird kaltes unverbranntes Gas seitlich nach unten transportiert, da es vom heißen verbrannten aufsteigenden Gas verdrängt wird.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass unabhängig von der gewählten Anfangsturbulenz die Verbrennung ähnlich schnell abläuft. Betrachtet man dagegen Details, wie die exakte Form des Druckanstiegs, so ist eine Abhängigkeit von der Anfangsturbulenz festzustellen. Die Unterschiede sind dabei ähnlich groß wie die bei Verwendung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammgeschwindigkeit. Ohne Information über die Anfangsturbulenz ist eine Aussage über die Eignung der verschiedenen Korrelationen / Modellparameter für die turbulente Flammgeschwindigkeit nur mit Unsicherheiten möglich.

Tab 4.7 Anfangsturbulenz bei der Parameterstudie

Simulation Nr.	A = B	Turb. Kinetische Energie k [m ² /s ²]	Eddy-Viscosity-Ratio $\nu_r = \mu_{\text{turb}}/\mu_{\text{dyn}}$ []	Turb. Eddy-Dissipation ϵ [m ² /s ³]
1	2	1e-4	10	8e-6
2	2	1e-6	10	8e-10
3	2	1e-8	10	8e-14
4	2	1e-4	0,1	8e-4
5	2	1e-6	0,1	8e-8
6	3	1e-4	10	8e-6
7	3	1e-6	0,1	8e-8

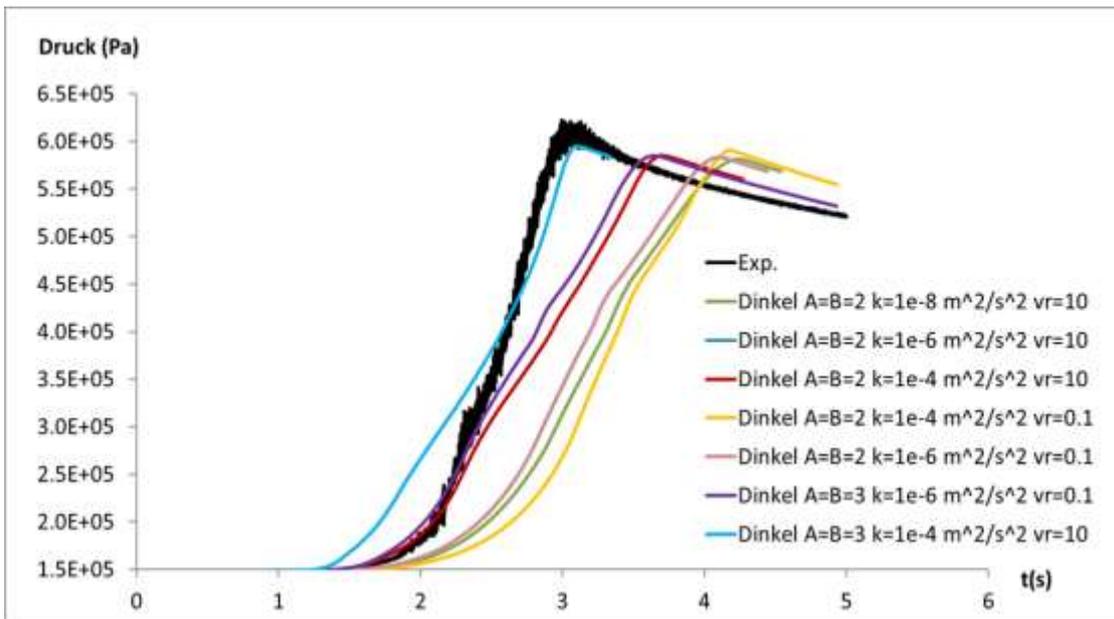


Abb. 4.63 Druck in Abhängigkeit von der initialen turbulenten kinetischen Energie. Die Simulationen mit $A = B = 2$ und $k = 1,0e-6 \text{ m}^2/\text{s}^2$ liefern einen nahezu gleichen Druckverlauf

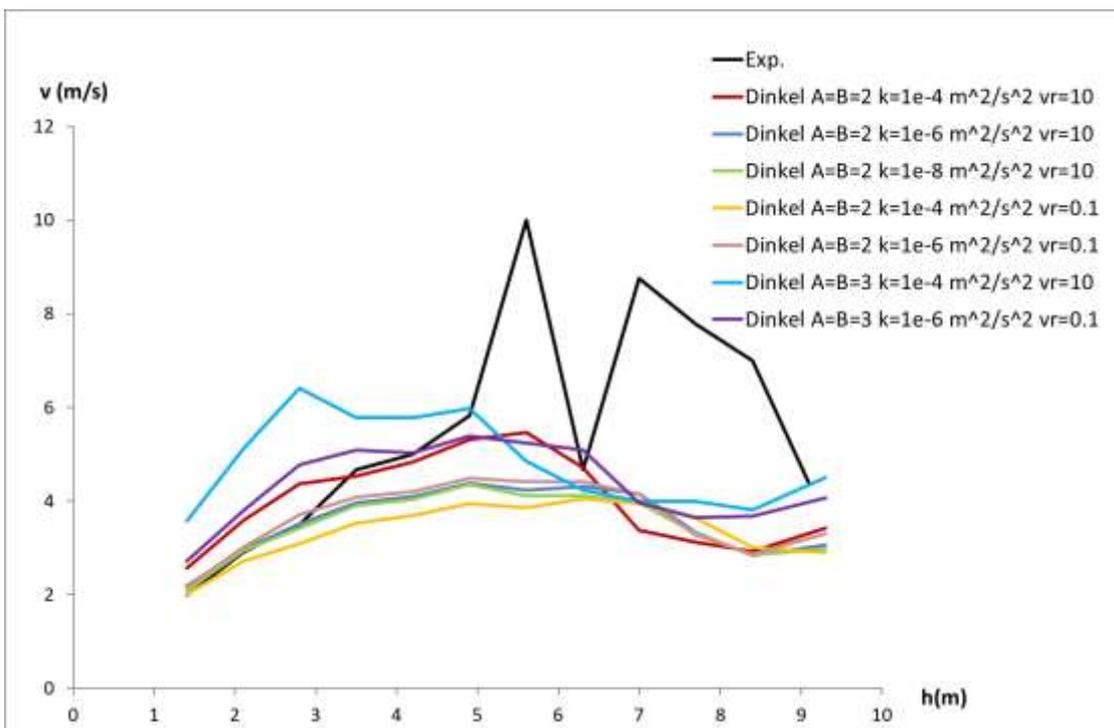


Abb. 4.64 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse in Abhängigkeit von der initialen Turbulenz

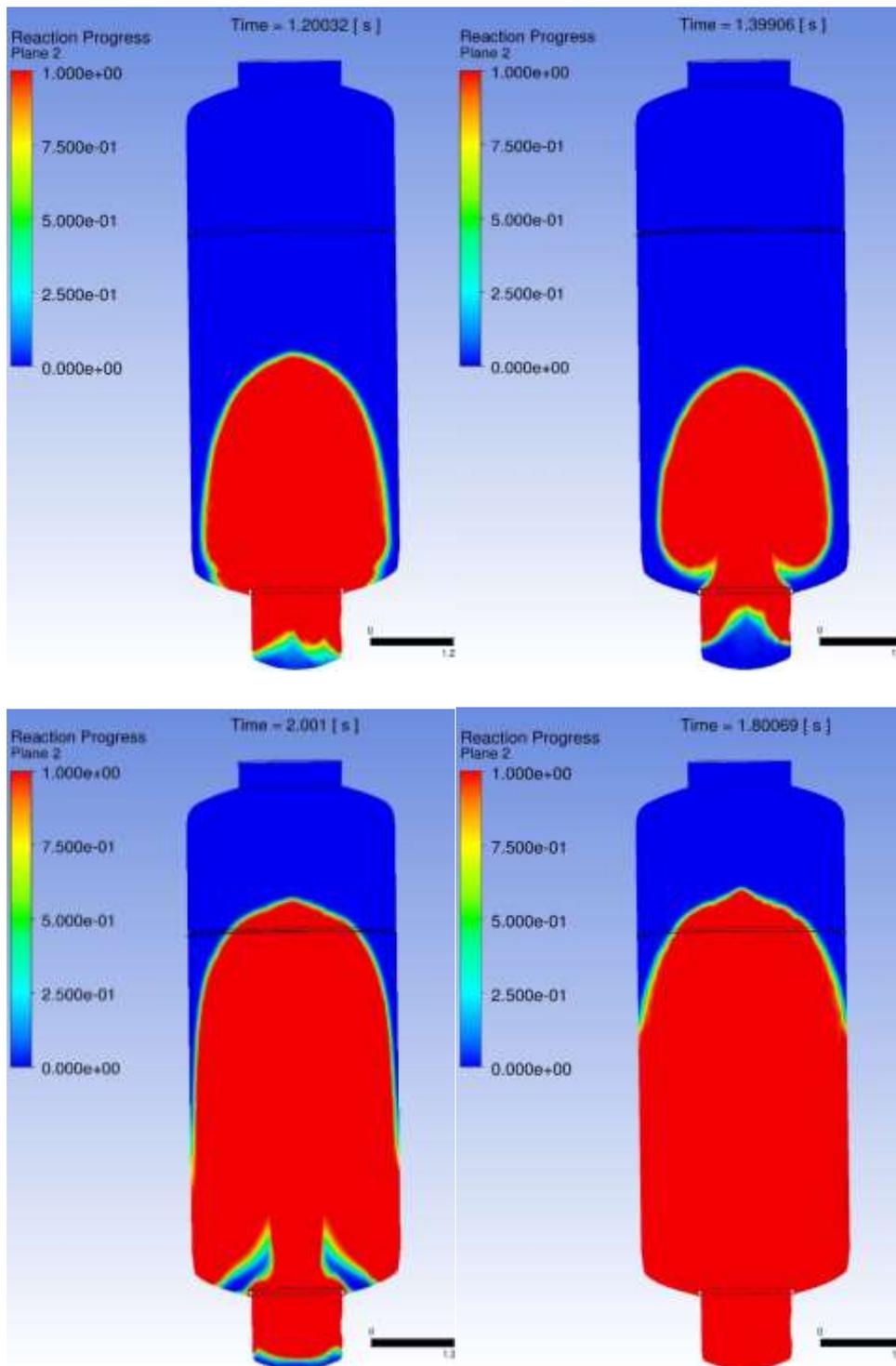


Abb. 4.65 Reaktionsfortschritt bei Simulation Nr.1 ($k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 10$) links und Nr. 5 ($k = 1,0e-6 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 0,1$) rechts

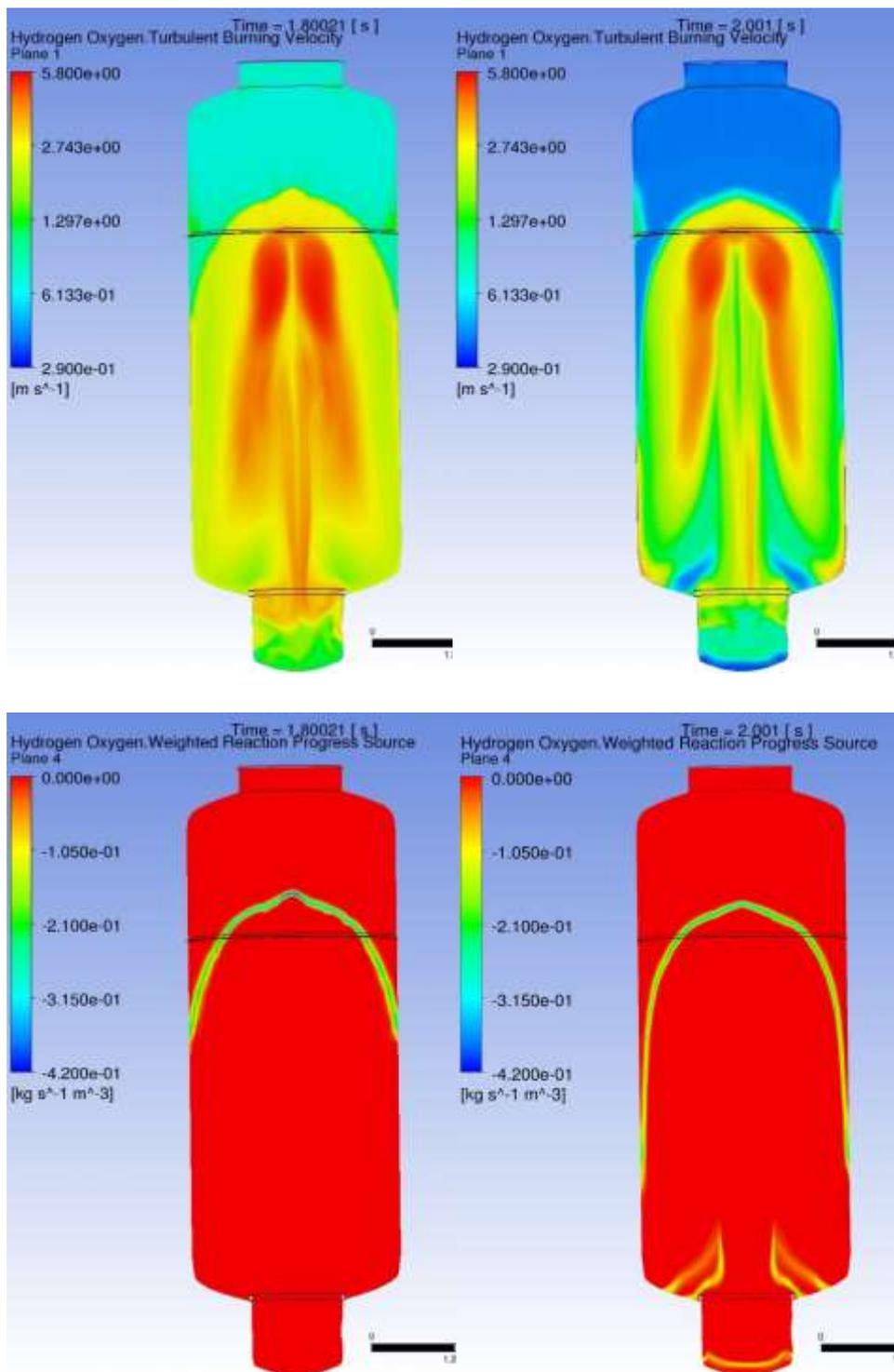


Abb. 4.66 Turbulente Brenngeschwindigkeit (oben) und chemischer Quellterm für die Reaktionsfortschrittsvariable (unten) bei Simulation Nr.1 ($k = 1,0e-4\ m^2/s^2$, $\nu_r = 10$) links und Nr. 5 ($k = 1,0e-6\ m^2/s^2$, $\nu_r = 0,1$) rechts

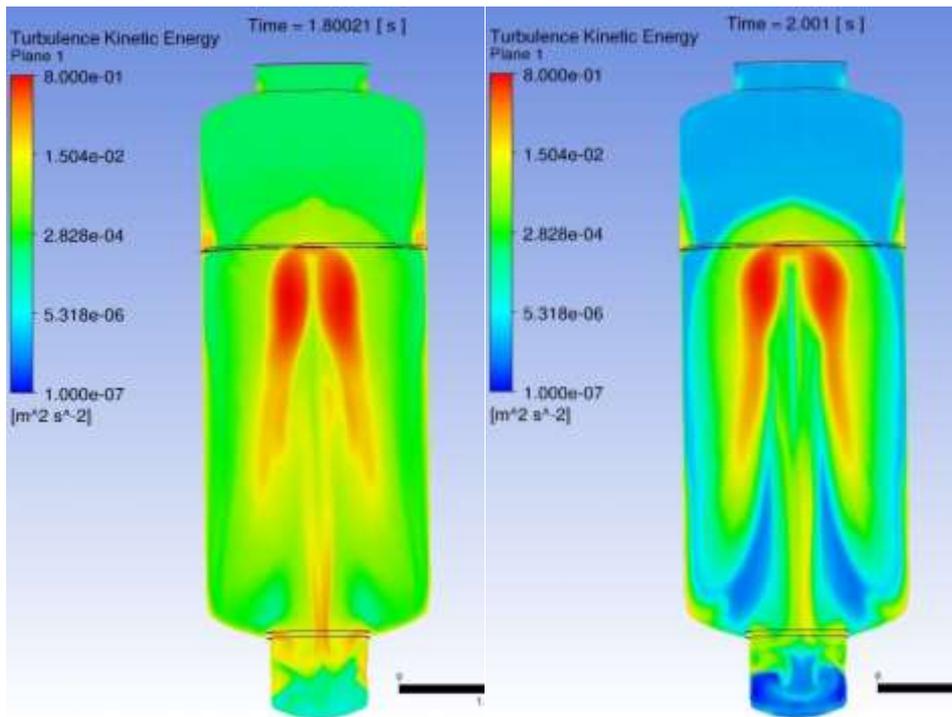


Abb. 4.67 Turbulente kinetische Energie bei Simulation Nr.1 ($k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 10$) links und Nr. 5 ($k = 1,0e-6 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 0,1$) rechts

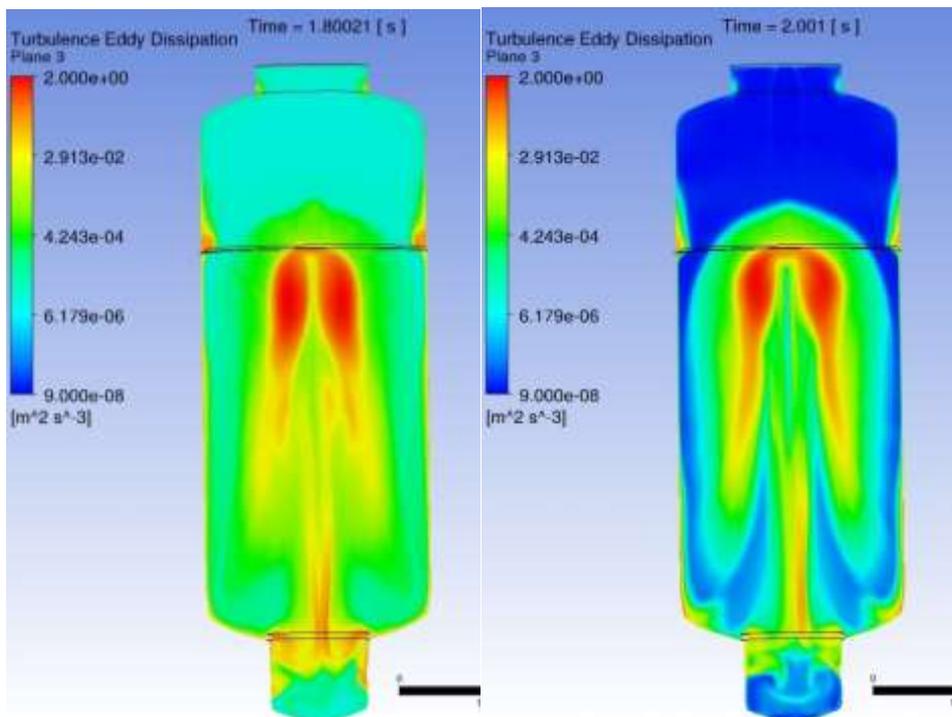


Abb. 4.68 Turbulente Dissipation bei Simulation Nr.1 ($k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 10$) links und Nr. 5 ($k = 1,0e-6 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 0,1$) rechts

4.2.2.5.4 Vergleich der Simulationsergebnisse bei Verwendung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammgeschwindigkeit

Ziel dieses Arbeitspunktes ist es, eine geeignete Korrelation für die turbulente Flammgeschwindigkeit zu identifizieren und diese an Versuchsnachrechnungen zu validieren. Deshalb wurde der Versuch mit unterschiedlichen Korrelationen nachgerechnet und die Ergebnisse wurden mit dem Experiment verglichen. In der Studie wird von einer Anfangsturbulenz von $1,0 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $v_r = 10$ ausgegangen.

Bei allen Simulationen wird der Wasserstoff komplett verbrannt. Unterschiedliche Maximaldrücke sind darauf zurückzuführen, dass bei langsam ablaufenden Verbrennungen der Maximaldruck später erreicht wird. Deshalb wurde bereits mehr Energie an die kalten Wände abgegeben, was zu einem geringfügig niedrigeren Maximaldruck führt (Abb. 4.69). Insbesondere die Simulationen, bei denen der Maximaldruck zu einem ähnlichen Zeitpunkt wie im Experiment erreicht wird, zeigen eine gute Übereinstimmung im Hinblick auf das Druckmaximum.

Die Simulationen mit den Korrelationen von Peters und Dinkelacker berechnen eine deutlich zu langsame Verbrennung. Statt nach 3 s wird das Druckmaximum erst nach 4,8 s (Dinkelacker) bzw. 5,7 s (Peters) erreicht. Die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse wird von beiden Simulationen ebenfalls unterschätzt (Abb. 4.70). Die Rechnungen unterstellen eine relativ hohe Anfangsturbulenz. Bei einer niedrigeren Anfangsturbulenz würde sich die Abweichung Experiment-Simulation eher noch vergrößern. Die anderen untersuchten Korrelationen liefern eine bessere Übereinstimmung mit dem experimentellen Druckverlauf. Je größer die Vorfaktoren bei der Dinkelacker-Korrelation gewählt wird, desto schneller erfolgt der Druckanstieg. Der Faktor A ist vor allem in der Anfangsphase für den Beginn des Druckanstiegs wichtig, der Faktor B ist für den weiteren Druckanstieg entscheidend. Für $A = B = 2,0$ wird der Druckanstieg bis zu $P \sim 3$ bar in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Der weitere Anstieg erfolgt allerdings langsamer als im Versuch. Die gewählte Anfangsturbulenz ist relativ hoch, bei niedrigeren, auch realistischen Initialwerten wird sich die Abweichung noch weiter vergrößern (Abb. 4.63).

Bei Wahl von $A = B = 2,5$ bzw. 3 wird der Druckanstieg in der Anfangsphase des Experiments überschätzt, im späteren Verlauf ist der Druckanstieg aber steiler und passt damit besser zum experimentellen Verlauf. Aber auch noch mit $A = B = 3$ ist der Druckanstieg noch etwas langsamer als im Versuch. Die Simulation mit $A = 2$ und $B = 3$

überschätzt in der Anfangsphase den Druckanstieg ähnlich wie die mit $A = B = 2,5$. Die Übereinstimmung des Druckanstiegs ist aber im späteren Verlauf besser und entspricht der mit $A = B = 3$. Deshalb ist die Übereinstimmung beim Druckverlauf am besten.

Bei $A = 1$ und $B = 3$ zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung des Druckanstiegs in der Anfangsphase ($p < 3$ bar). Danach ist der Druckanstieg etwas schwächer als im Experiment und bei den Koeffizienten $A = 2$ bzw. $A = 3$ und $B = 3$.

Alle Simulationen sagen ähnliche Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten entlang der Mittelachse voraus (Abb. 4.70). Sie liegen im Bereich (2 m/s – 7 m/s), was in etwa den im Experiment gemessenen Werten (2 m/s – 10 m/s) entspricht. Ein genauerer quantitativer Vergleich zeigt aber auch Abweichungen.

Bei einer der hier unterstellten hohen Anfangsturbulenz ($k = 1,0e-4$ m²/s², $vr = 10$) überschätzen bis zu einer Höhe von 3,5 m alle Simulationen – bis auf die Simulationen mit den unmodifizierten Korrelationen von Peters und Dinkelacker – die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse. Im späteren Verlauf dagegen unterschätzen die Simulationen die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse. Bei $A = 2$, $B = 3$ tritt in der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse bis zu einer Höhe von 5 m immer eine größere Überschätzung auf als bei $A = 1$, $B = 3$. Mit diesem Koeffizienten wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit im relevanten Bereich deutlich besser vorhergesagt.

Die ähnlichen Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten in der Behältermitte können darauf zurückgeführt werden, dass neben der Flammenausbreitung durch die turbulente Flammengeschwindigkeit der Auftrieb des heißen verbrannten Gases zu einer Flammenausbreitung nach oben führt.

Die beiden Maxima im Experiment bei 5,65 m und 7 m Höhe werden von keiner Simulation vorhergesagt. Ab ca. 6 m Höhe erfolgt die Flammenausbreitung im Experiment nicht mehr entlang der Mittelachse, sondern die Flamme erreicht zuerst seitliche Sensoren (E-Linie). Dieses Verhalten wird von keiner Simulation so vorhergesagt. Aufgrund der Symmetrie des Behälters und den verwendeten Modellen (Turbulenz, Verbrennung) kann nicht erwartet werden, dass diese asymmetrische Flammenausbreitung abgebildet wird.

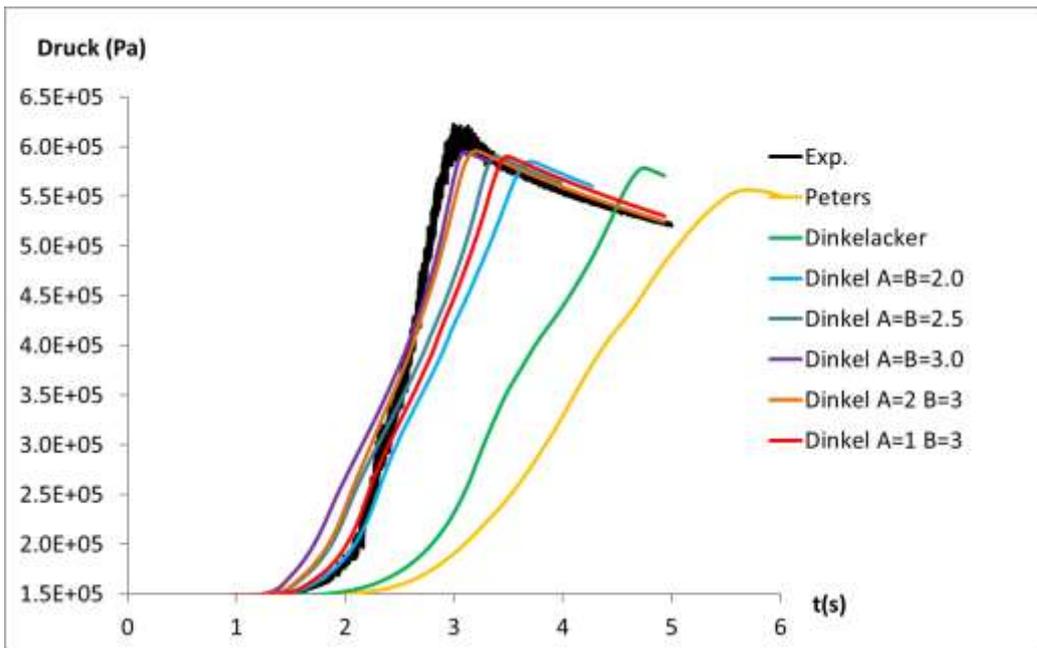


Abb. 4.69 Druck bei Verwendung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit bei einer Anfangsturbulenz von $k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $vr = 10$

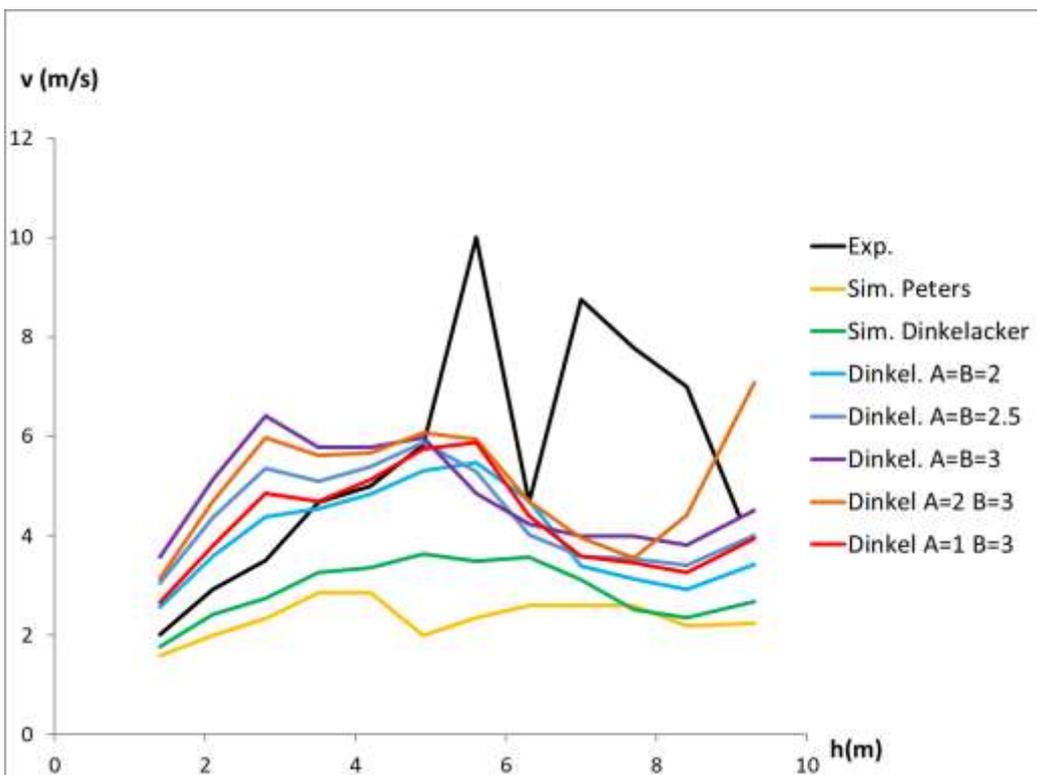


Abb. 4.70 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse bei Verwendung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit bei einer Anfangsturbulenz von $k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $vr = 10$

4.2.2.5.5 Simulation mit der von der TUM neu entwickelten Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit

Der Versuch HD-7 wurde mit den neu entwickelten Korrelationen für die laminare und turbulente Flammengeschwindigkeit der TUM berechnet /KAT 18/. Ohne Begrenzung der Flammenkrümmung im Term F_s bricht die Simulation bei $P \sim 2,5$ bar ab, da der Term unphysikalisch hohe Werte annimmt. Da die Marksteinlänge L für die hier vorliegenden mageren Gemische negativ ist, gibt es beim Term $1 / (1 + M k)$ eine Singularität bei $M k = -1$. Diese liegt bei HD-7 bei etwa 2,6 bar. Deshalb erfolgte in den Simulationen eine Begrenzung des Drucks gemäß /KAT 20b/, /KAT 20a/ auf 0,5 des AICC-Drucks im Term F_s .

In der Korrelation ist ein Term enthalten, der den Einfluss der Zellgröße des CFD-Gitters auf die Flammengeschwindigkeit modelliert. $F_Z = \left(\frac{\Delta}{\Delta_{ref}} \right)^{0,16}$ mit $\Delta = (\text{Zellvolumen})^{1/3}$ und $\Delta_{ref} = 7,5 \text{ mm}$. In CFX-19 kann aber nicht während der Simulation auf die lokale Zellgröße zugegriffen werden. Der von ANSYS vorgeschlagene Workaround (zusätzliche Transportvariable mit Unterrelaxationsfaktor 0, siehe Abschnitt 4.2.2.2) führt dazu, dass nach mehreren hundert Zeitschritten die Gleichung für diese zusätzliche Variable nicht mehr konvergiert. CFX geht dann davon aus, dass die Lösung nicht konvergiert ist. Dies führt zu einer Vervielfachung des Rechenaufwandes, da die Steuerung der Iterationsschleifen pro Zeitschritt und die adaptive Zeitschrittweitensteuerung nicht mehr wie beabsichtigt funktionieren. Bei dem für die Simulationen verwendeten Gitter ist der Einfluss dieses Terms auf die Größe der lokalen turbulenten Flammengeschwindigkeit klein $0,879 \leq F_{zell} \leq 1,276$ (Abb. 4.71) verglichen mit dem anderer Terme. Deshalb wurde dieser Term bei den Validierungssimulationen vernachlässigt.

Die Simulation mit der TUM-Korrelation und dem Formfaktor $B = 1$ zeigt insgesamt die beste Übereinstimmung im Hinblick auf den Druckverlauf (Abb. 4.72). Der Druckanstieg beginnt etwas früher und stärker als im Experiment, was aber an der gewählten Anfangsturbulenz liegen kann. Bis zu einem Druck von 4 bar ist der Druckanstieg ähnlich hoch wie bei der modifizierten Dinkelacker-Korrelation ($A = 1, B = 3$) und damit etwas schwächer als im Experiment. Danach steigt der Druck stärker an, was besser zu den Messwerten passt. Die Simulation mit $B = 0,5$ berechnet in allen Phasen einen zu schwachen Druckanstieg. In der Anfangsphase ist der Druckanstieg trotz hoher initialer Turbulenz deutlich langsamer als im Experiment. Im späteren Verlauf ist die Übereinstimmung mit dem Experiment besser. Der Druckanstieg ist ähnlich stark wie bei der modifizierten

Dinkelacker-Korrelation ($A = 1$, $B = 3$). Der Maximaldruck ist trotz der deutlich längeren Dauer des Verbrennungsvorgangs nur unwesentlich niedriger als bei der Simulation mit $B = 1$. Der Grund hierfür ist die unterschiedliche Form der Flammenfronten. Bei der Simulation mit $B = 0,5$ erreicht die Flamme erst spät die Seitenwände (Abb. 4.75). Dies verringert die Wärmeverluste an die Wände.

Auch mit der TUM-Korrelation werden die beiden Maxima ($h = 5,6$ m und $h = 7$ m) bei der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse nicht berechnet (Abb. 4.73). Mit $B = 1$ wird bis 5 m Höhe die Ausbreitungsgeschwindigkeit überschätzt. Mit $B = 0,5$ wird bis 2,5 m eine sehr gute Übereinstimmung erzielt, danach unterschätzt die Simulation die Messwerte bis zur Höhe 6 m. Ab 6 m liegt die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit sogar über der Simulation mit $B = 1$.

Der Koeffizient B bei der TUM-Korrelation hat auch einen signifikanten Einfluss auf die Form der Flammenfronten (Abb. 4.75). Bei der Simulation $B = 1$ werden die Seitenwände des Behälters relativ früh erreicht, während bei $B = 0,5$ die Flamme die Seitenwände erst viel später erreicht. Ebenso wird bei $B = 1$ das Gas im Sumpf viel früher komplett verbrannt. Die Simulation mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation $A = 1$ und $B = 3$ zeigt Ähnlichkeiten bei der Flammenausbreitung mit der Simulation TUM $B = 1$.

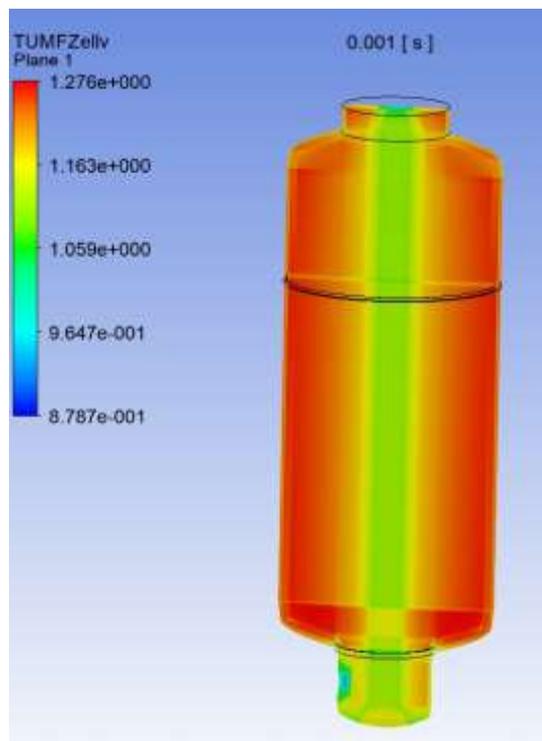


Abb. 4.71 Faktor F_{zell} bei Simulation von HD-7 mit der TUM-Korrelation

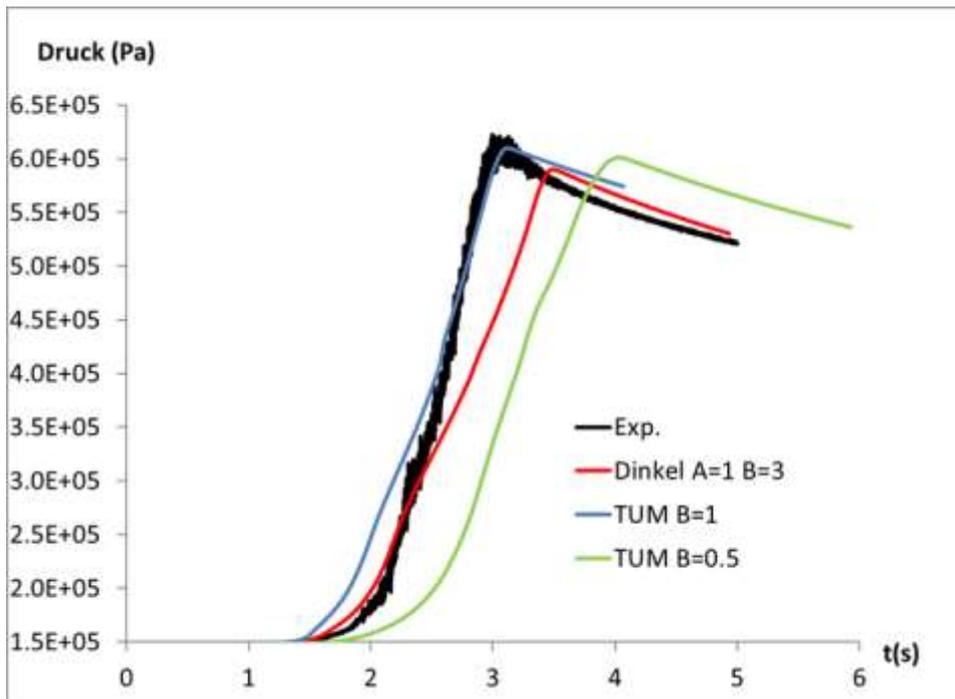


Abb. 4.72 Druckverlauf bei Simulation mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit

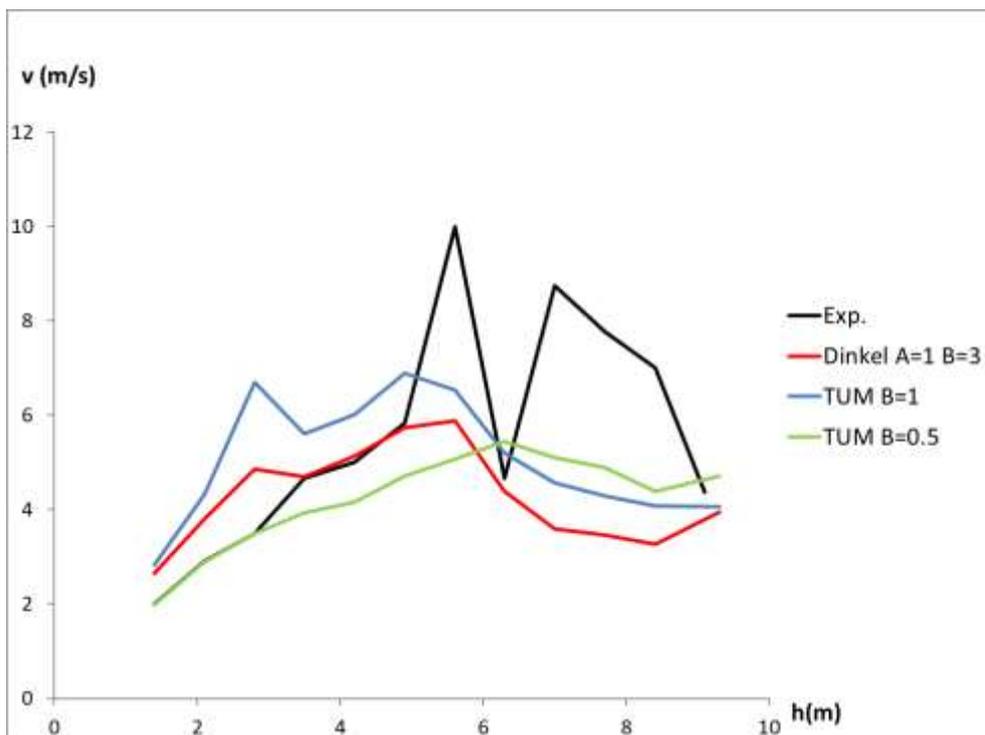


Abb. 4.73 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei Simulation bei unterschiedlicher Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit

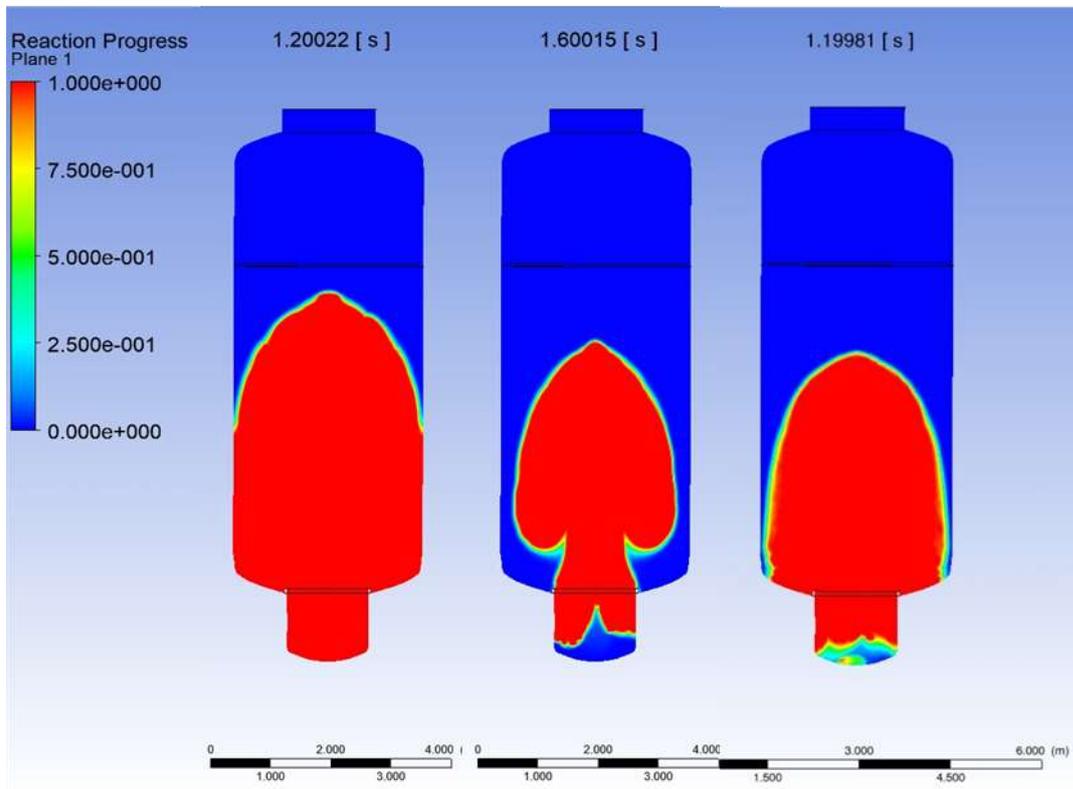
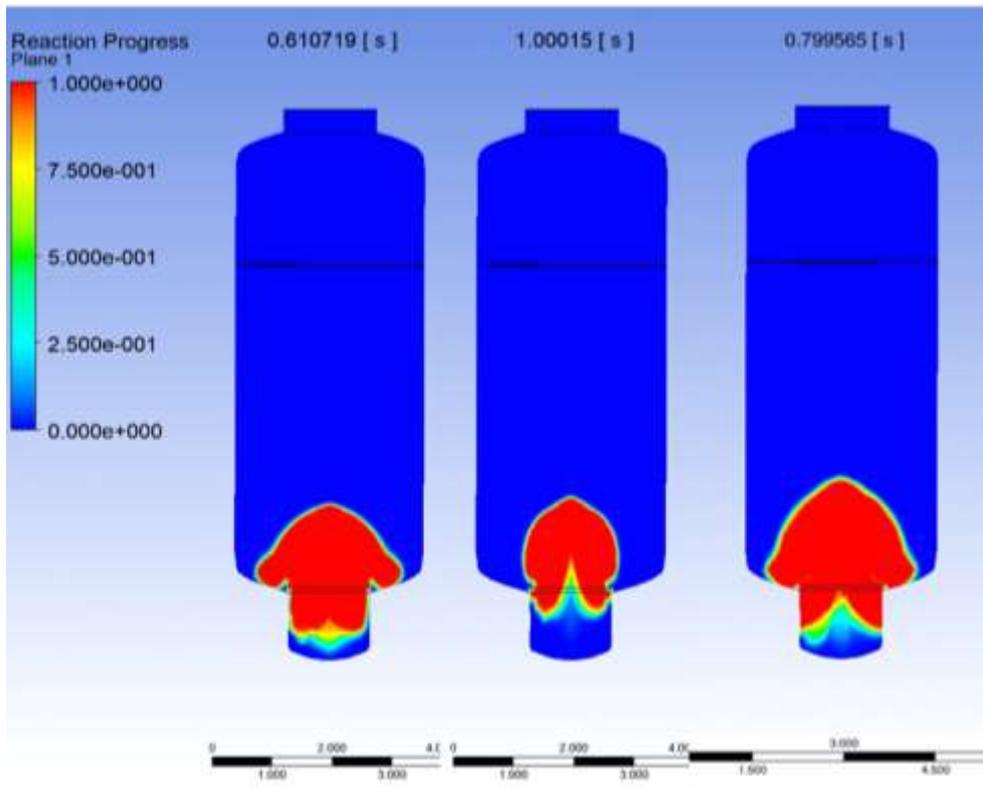


Abb. 4.74 Reaktionsfortschrittsvariable bei Simulation mit der TUM-Korrelation $B = 1$ (links), TUM-Korrelation mit $B = 0,5$ (Mitte), modifizierte Dinkelacker-Korrelation mit $A = 1$, $B = 3$ (rechts)

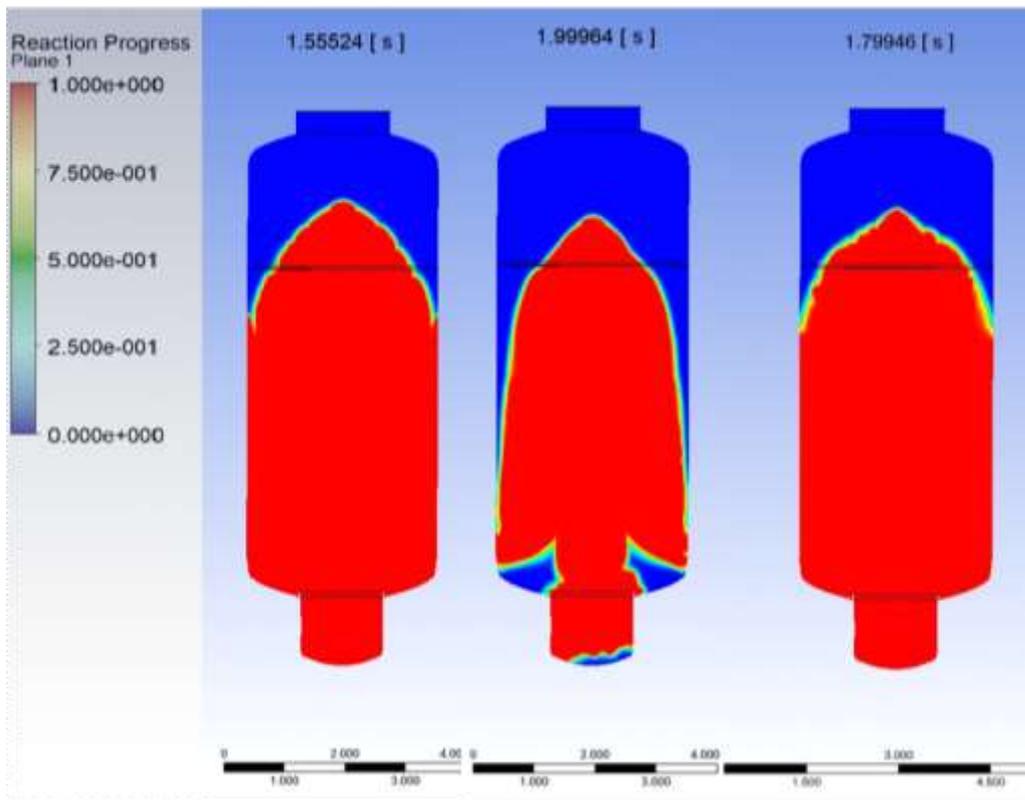


Abb. 4.75 Reaktionsfortschrittsvariable bei Simulation mit der TUM-Korrelation $B = 1$ (links), TUM-Korrelation mit $B = 0,5$ (Mitte), modifizierte Dinkelacker-Korrelation mit $A = 1, B = 3$ (rechts)

4.2.2.5.6 Zusammenfassung Nachrechnung HD-7

Der Versuch HD-7 wurde mit dem Burning-Velocity-Modell und der neu erstellten Flamelet-Tabelle nachgerechnet. Eine Gitterstudie zeigt, dass das verwendete Gitter mit 3,7 Millionen Zellen ausreichend fein ist. Im Experiment wurde die Anfangsturbulenz nicht gemessen. Eine Parameterstudie zeigt, dass die Wahl der turbulenten kinetischen Energie und auch die Wahl des Eddy-Viscosity-Ratios bzw. der Turbulent-Eddy-Dissipation einen signifikanten Einfluss auf den simulierten Druck und die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit hat. Im Hinblick auf die Wahl einer geeigneten Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit kann geschlussfolgert werden, dass mit den unmodifizierten Korrelationen von Peters und Dinkelacker die Verbrennung zu langsam abläuft. Die modifizierte Dinkelacker-Korrelation mit $2,5 \leq B \leq 3$ zeigt eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit dem Experiment. Bei der hier unterstellten Anfangsturbulenz wurde mit $A = 1$ und $B = 3$ die beste Übereinstimmung in der Anfangsphase erzeugt. Aufgrund der unbekanntenen Anfangsströmung/Turbulenz gibt es eine signifikante Unsicherheit, da je nach unterstellten initialen k und ν_r unterschiedliche

Simulationsergebnisse erzielt werden. Bei $A = B = 2,5$ bzw. $A = 2$, $B = 3$ und noch stärker bei $A = B = 3$ wird ein zu schneller Druckanstieg in der Anfangsphase vorausgesagt. Diese Abweichung ist aber bei einer geringeren Anfangsturbulenz schwächer / nicht mehr gegeben. Der Versuch kann mit den Korrelationen der TUM in guter Übereinstimmung mit dem Experiment nachgerechnet werden, sofern der Formfaktor $B = 1$ gewählt wird. Insbesondere in der späteren Phase des Experiments ist für diese Korrelation die Übereinstimmung beim Druckanstieg am besten. Mit $B = 0,5$ wird in allen Phasen der Druckanstieg unterschätzt.

4.2.2.6 Nachrechnung THAI HD-10

4.2.2.6.1 Versuchsbeschreibung THAI HD-10

Beim THAI-Experiment HD-10 werden 11,84 vol-% H_2 in Luft verbrannt /KAN 08/. Der Anfangsdruck ist 1,5 bar, die initiale Temperatur 30 °C. Bei diesem Experiment findet eine Zündung zum Zeitpunkt $t = 1,42$ s im oberen Bereich des Behälters statt (Höhe 9,1 m, mittig), was zu einer abwärts gerichteten Verbrennung führt. Die Geometrie und die Position der Messstellen ist mit der vom THAI-Experiment HD-7 identisch (Abb. 4.57). 3,1 s nach Zündung wird ein Maximaldruck von etwa 6,2 bar erreicht (Abb. 4.76), was 0,8 bar unterhalb des AICC-Drucks liegt. Von 3,3 s bis 5,5 s treten Druckoszillationen auf. Beim Vergleich mit den Simulationen wird ein gemittelter Wert verwendet. Die Auswertung der Flammenankunftszeiten (Abb. 4.77) zeigt folgende Flammenausbreitung. Bis zur Höhe von 4,2 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. Danach ändert sich der Verlauf der Flammenfront. Der Messpunkt auf der Mittelachse wird nicht mehr als erstes erreicht, und die Achsensymmetrie geht vollständig verloren. Da unterhalb von 4,2 m Höhe die Flammenausbreitung nicht mehr entlang der Behältermitte erfolgt, ist beim Vergleich der Ausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Behälterachse Vorsicht geboten. Eine ausführlichere Diskussion der Messergebnisse ist im Abschlussbericht RS1526 /SCH 17/ zu finden.

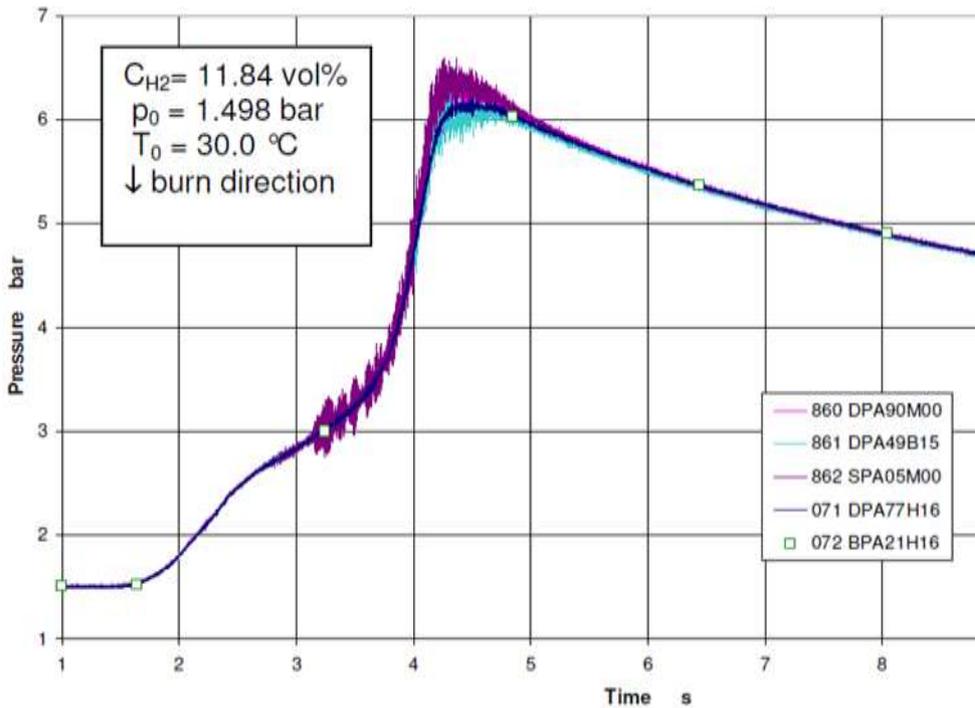


Abb. 4.76 Experimenteller Druckverlauf an unterschiedlichen Messstellen /KAN 08/

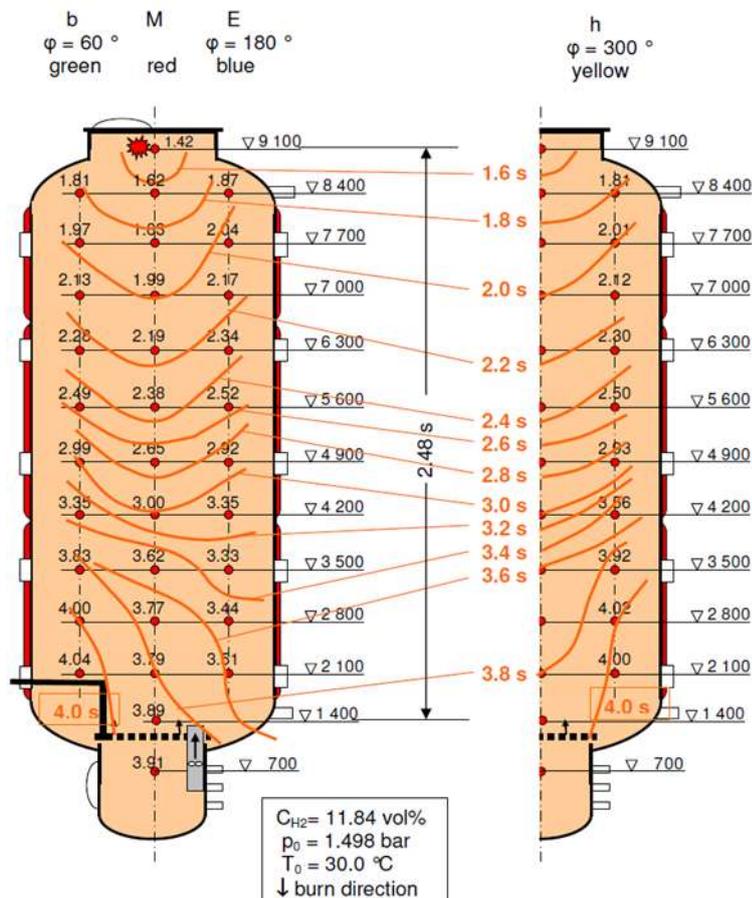


Abb. 4.77 Aus den Flammenankunftszeiten berechneter Verlauf der Flamme bei HD-10

4.2.2.6.2 Studie zur Gitterabhängigkeit

Der Versuch HD-10 wird mit denselben Gittern wie der Versuch HD-7 nachgerechnet (siehe Abschnitt 4.2.2.5.2). Zur Untersuchung der Gitterabhängigkeit wird eine Simulation mit einem CFD-Gitter bestehend aus 1,2 Millionen Zellen mit einer mit 3,7 Millionen Zellen verglichen. Beim Druckverlauf ergibt sich bis 3 s kein signifikanter Unterschied zwischen den beiden Simulationen (Abb. 4.78), danach erfolgt bei der Simulation mit dem gröberem Gitter ein geringfügig schnellerer Druckanstieg. Der Druckabfall erfolgt in beiden Simulationen wieder gleich schnell. Der Wärmetransfer in die Wände ist in beiden Simulationen gleich stark. Die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse ist bis ca. 4,9 m Abstand von der Zündposition gleich (dies entspricht einer Höhe von 4,2 m) (Abb. 4.79). Danach kommt es zu größeren Abweichungen. Ab dieser Höhe erfolgt auch keine Ausbreitung mehr entlang der Mittelachse. Der ähnlich schnelle Druckanstieg in dieser Phase legt aber nahe, dass integral in beiden Simulationen ähnlich schnell H_2 verbrannt wird, es aber Abweichungen in der Form der Flammenausbreitung gibt. Der Vergleich der Flammenausbreitung (Abb. 4.80, Abb. 4.81) zeigt, dass bis zu $t = 2,6$ s die Flammenausbreitung bei beiden Simulationen sehr ähnlich ist. Auch danach ist die Flammenausbreitung ähnlich, allerdings unterscheidet sich die Form / Größe der Krümmung etwas. Da sich die Flamme im unteren Drittel im Wesentlichen von der Seite zur Mittelachse ausbreitet, unterscheidet sich die Flammenankunft an den einzelnen Positionen im unteren Drittel des Behälters aufgrund geringfügiger Formunterschiede der Flammenfront. Abb. 4.81 (unten) belegt, dass die Betrachtung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit für eine Höhe kleiner als 4 m wenig aussagekräftig ist. Die Flammenausbreitung in der Simulation findet in der letzten Phase der Verbrennung von der Seite zu Mitte hin statt.

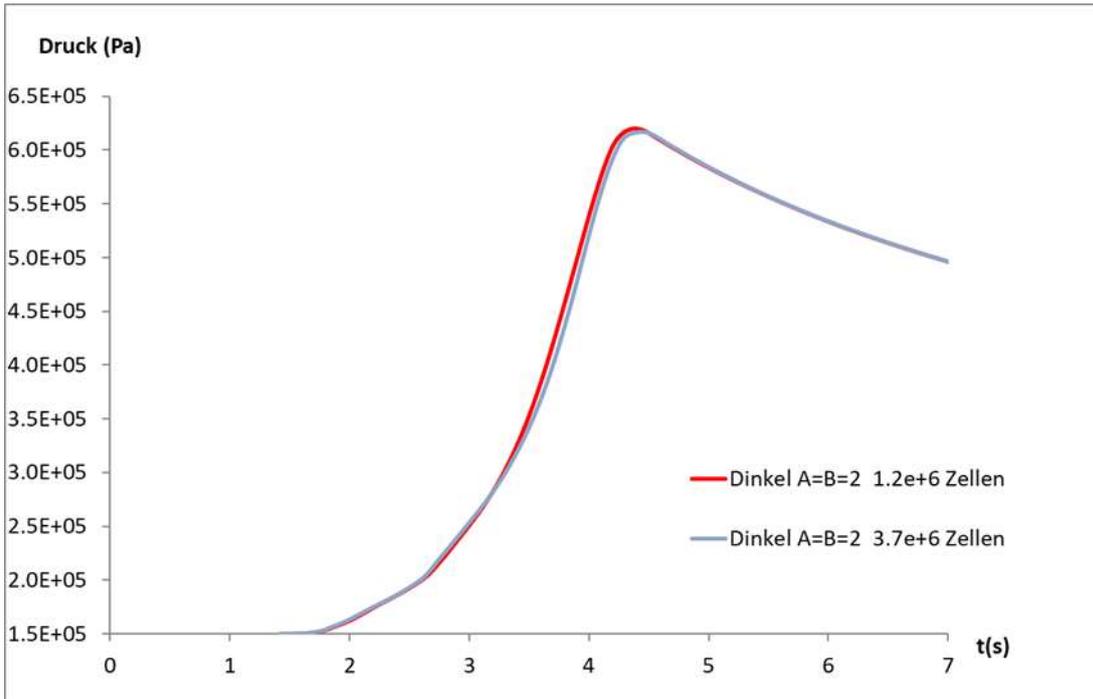


Abb. 4.78 Untersuchung der Gitterabhängigkeit bei HD-10: Druckverlauf

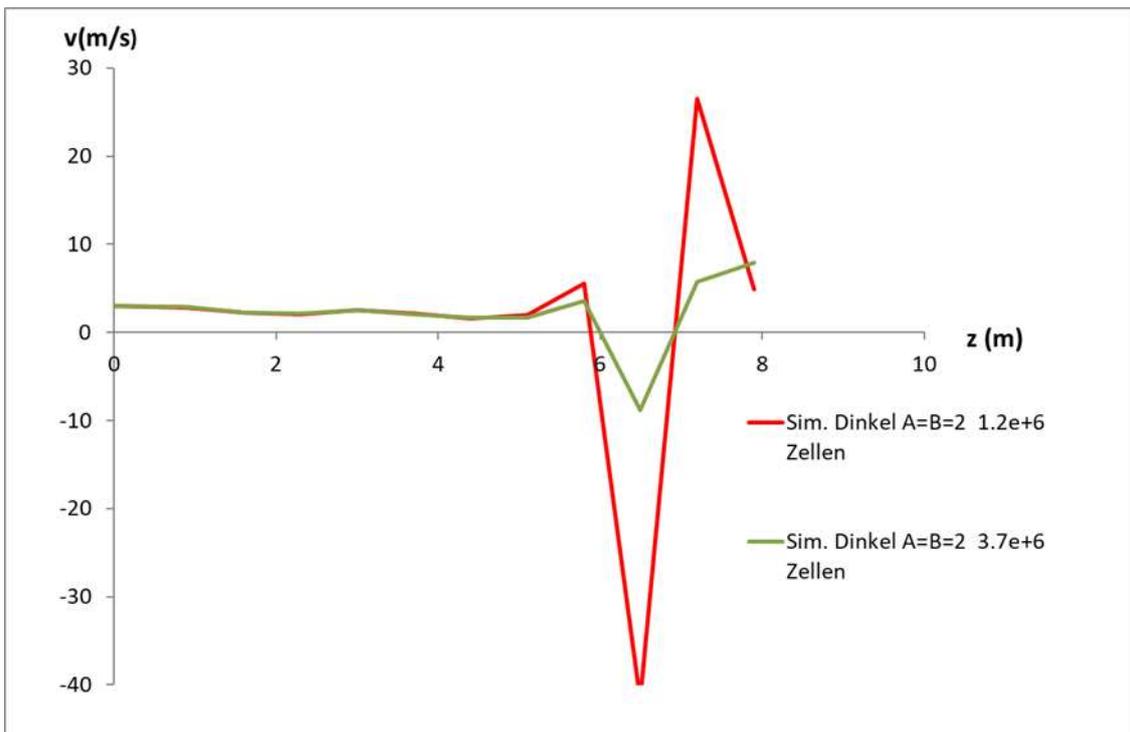


Abb. 4.79 Untersuchung der Gitterabhängigkeit bei HD-10: Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse aufgetragen über dem Abstand von der Zündposition

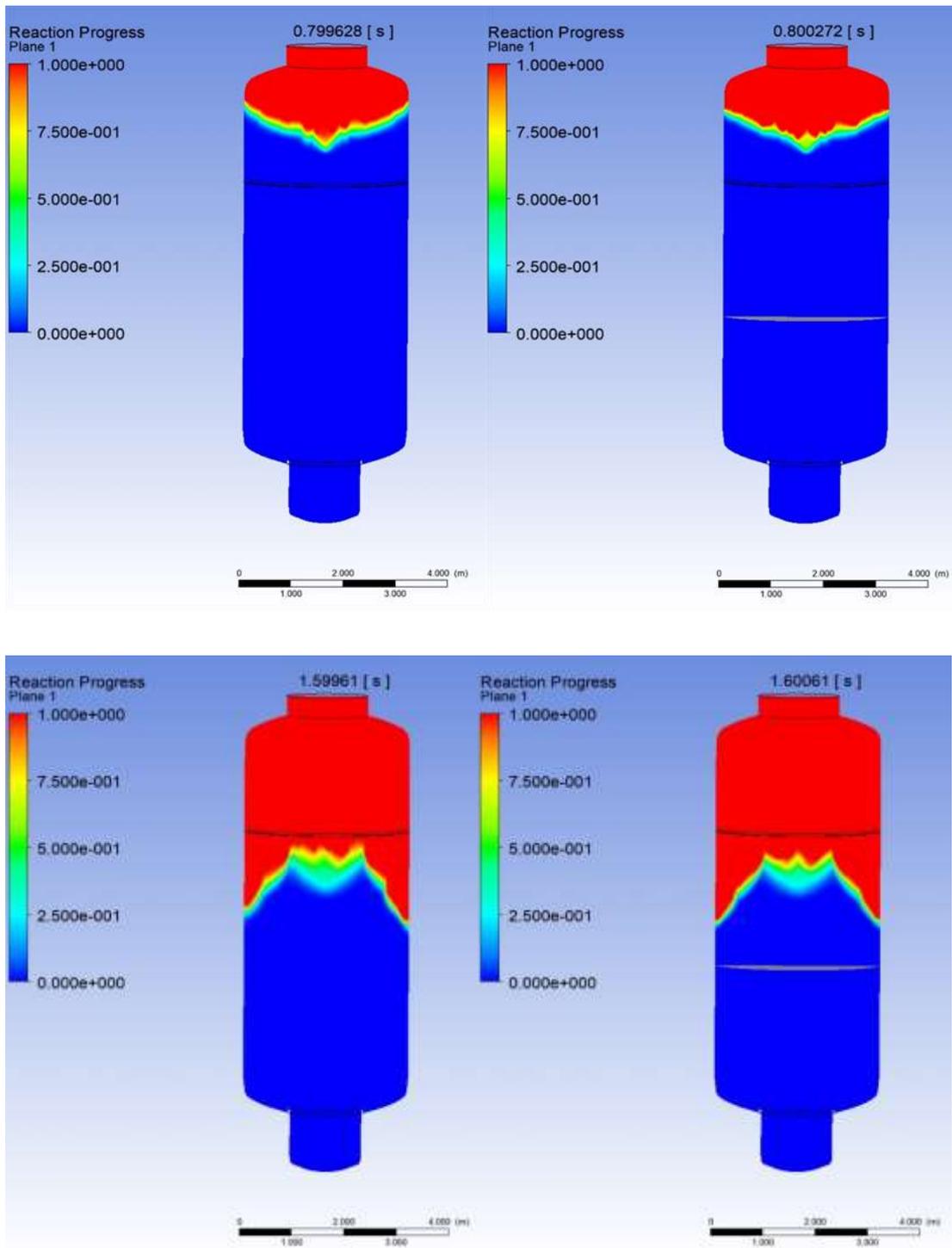


Abb. 4.80 Reaktionsfortschrittsvariable bei $t = 0,8$ s (oben) und $t = 1,6$ s (unten); links: grobes Gitter; rechts: feines Gitter

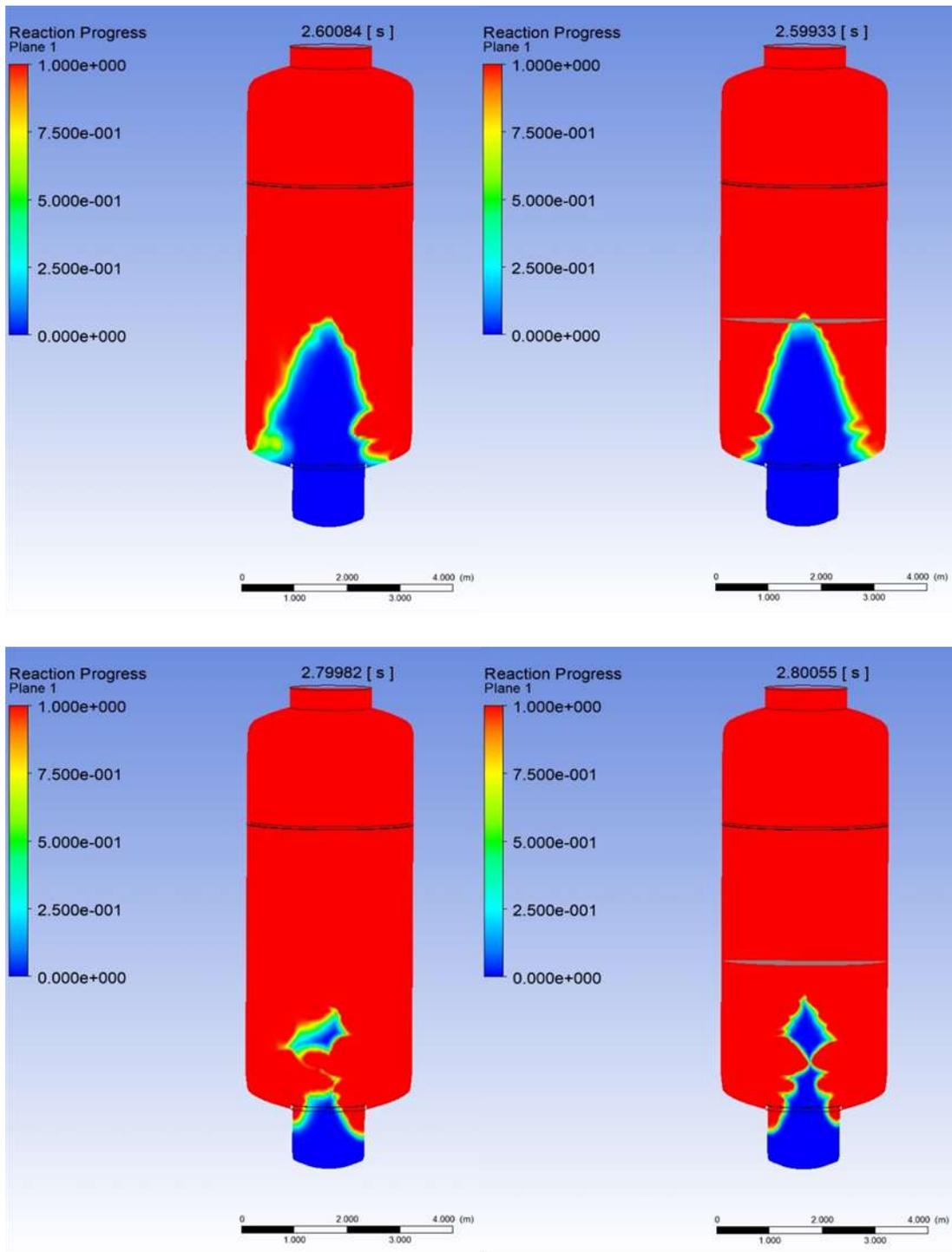


Abb. 4.81 Reaktionsfortschrittsvariable bei $t = 2,6$ s (oben) und $t = 2,8$ s (unten); links: grobes Gitter; rechts: feines Gitter

4.2.2.6.3 Parameterstudie Turbulenz HD-10

Die Versuchsdurchführung von HD-10 ist ähnlich der bei HD-7. Auch bei diesem Versuch wird eine Gasdurchmischung durch einen Ventilator sichergestellt. Danach wird 10 min – 15 min abgewartet, bis die Strömungsgeschwindigkeit / Turbulenz abgeklungen ist. Es

wird davon ausgegangen, dass dieser Zeitraum ausreichend lang ist, so dass keine gerichtete Strömung mehr berücksichtigt zu werden braucht und nur noch eine kleine Anfangsturbulenz vorhanden ist, die aber unbekannt ist. Wie schon für den Versuch HD-7 (siehe 4.2.2.5.3) wird auch für den Versuch HD-10 der Einfluss der unbekanntes Anfangsturbulenz untersucht. Es wird wieder sowohl die initiale turbulente kinetische Energie k als auch das Eddy-Viscosity-Ratio variiert (Tab. 4.8). Neben dem Faktor $A = B = 2,0$ in der Gleichung für die turbulente Flammengeschwindigkeit (Nr. 1 – Nr. 6) werden auch zwei Simulationen mit $A = B = 3,0$ (Nr. 7 und Nr. 8) untersucht.

Es zeigt sich, dass die initiale turbulente kinetische Energie einen signifikanten Einfluss auf den Druckverlauf hat (Abb. 4.82). Je höher der Anfangswert von k ist, desto schneller erfolgt der Druckanstieg. Im Gegensatz zu HD-7 unterscheidet sich der Druckverlauf selbst für die beiden niedrigsten Anfangsturbulenzen $k = 1,0e-6/1,0e-8 \text{ m}^2/\text{s}^2$ noch deutlich. Derselbe Zusammenhang gilt auch für die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse (siehe Abb. 4.83). Eine Erklärung hierfür ist, dass das aufsteigende heiße verbrannte Gas in HD-7 eine stärkere Turbulenz generiert als die abwärts gerichtete Verbrennung in HD-10 (Vergleich Abb. 4.67 und Abb. 4.87). Dies gilt insbesondere, da keine Einbauten im Versuch vorhanden sind und die Messinstrumentierung in der Simulation vernachlässigt wird. Zudem machen sich bei der abwärts gerichteten Verbrennung Abweichungen bei der turbulenten Flammengeschwindigkeit stärker bemerkbar als bei der aufwärtsgerichteten Verbrennung, da sich die Flamme durch den Auftrieb des heißen Gases nach oben ausbreitet.

Für ein höheres k ($1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$) ist auch ein deutlicher Einfluss des anfänglichen v_r festzustellen. Für ein kleineres k ($1,0e-6 \text{ m}^2/\text{s}^2$) ist der Einfluss dieser Größe nur noch schwach vorhanden. Dies entspricht dem Ergebnis bei HR-7. Die in Abschnitt 4.2.2.5.3 diskutierten Zusammenhänge zwischen Anfangsturbulenz, turbulenter Flammengeschwindigkeit und Quellterm der Reaktionsfortschrittsvariable gelten auch hier. Die höhere initiale turbulente kinetische Energie führt zu einer höheren turbulenten Flammengeschwindigkeit und zu einem höheren Absolutbetrag des Quellterms in der Gleichung für die Reaktionsfortschrittsvariable. (Abb. 4.84 – Abb. 4.88).

Für $A = B = 3$ ergibt sich ebenfalls eine starke Abhängigkeit von der Anfangsturbulenz. Es zeigt sich, dass eine Simulation mit $A = B = 2$ und einer höheren Anfangsturbulenz (Nr. 2) eine sehr ähnliche Verbrennung vorhersagt wie eine Simulation mit $A = B = 3$ und niedrigerer Anfangsturbulenz (Nr. 8). Deshalb ist es anhand eines einzelnen Versuchs ohne Kenntnis der Anfangsturbulenz nicht möglich, die Faktoren A bzw. B anzupassen.

Aus diesem Grund muss bei der Bestimmung von A und B eine Reihe von – möglichst unterschiedlichen – Versuchen berücksichtigt werden.

Tab. 4.8 Anfangsturbulenz bei der Parameterstudie

Simulation Nr.	A = B	Turb. Kinetische Energie k [m ² /s ²]	Eddy-Viscosity-Ratio $\nu_r = \mu_{\text{turb}}/\mu_{\text{dyn}}$ []	Turb. Eddy-Dissipation ϵ [m ² /s ³]
1	2	1e-3	10	4,8e-3
2	2	1e-4	10	8e-6
3	2	1e-6	10	8e-10
4	2	1e-8	10	8e-14
5	2	1e-4	0,1	8e-4
6	2	1e-6	0,1	8e-8
7	3	1e-4	10	8e-6
8	3	1e-6	0,1	8e-8

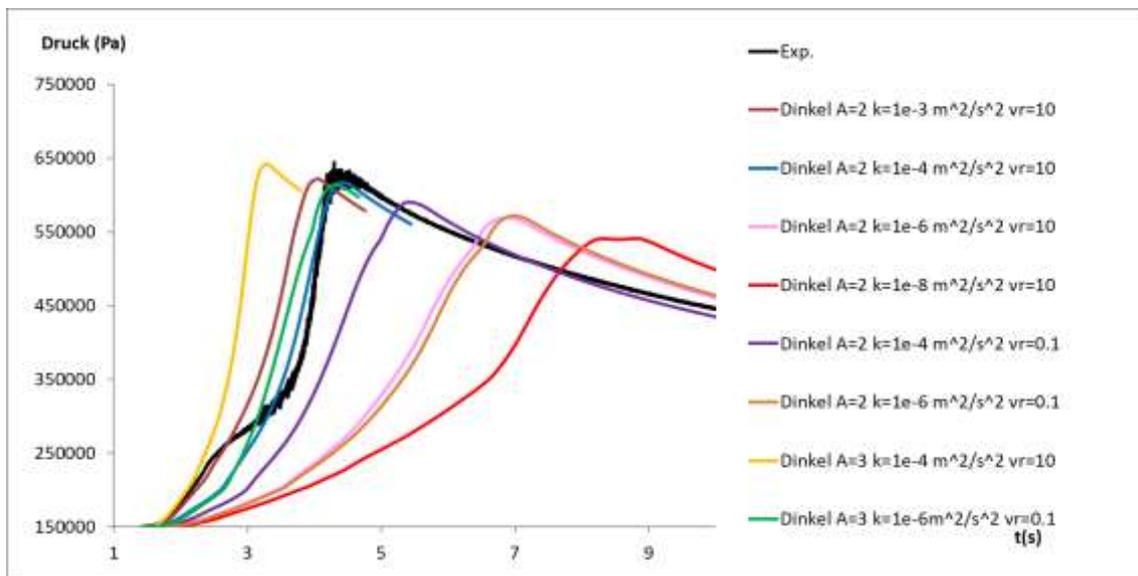


Abb. 4.82 Druckverlauf bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz

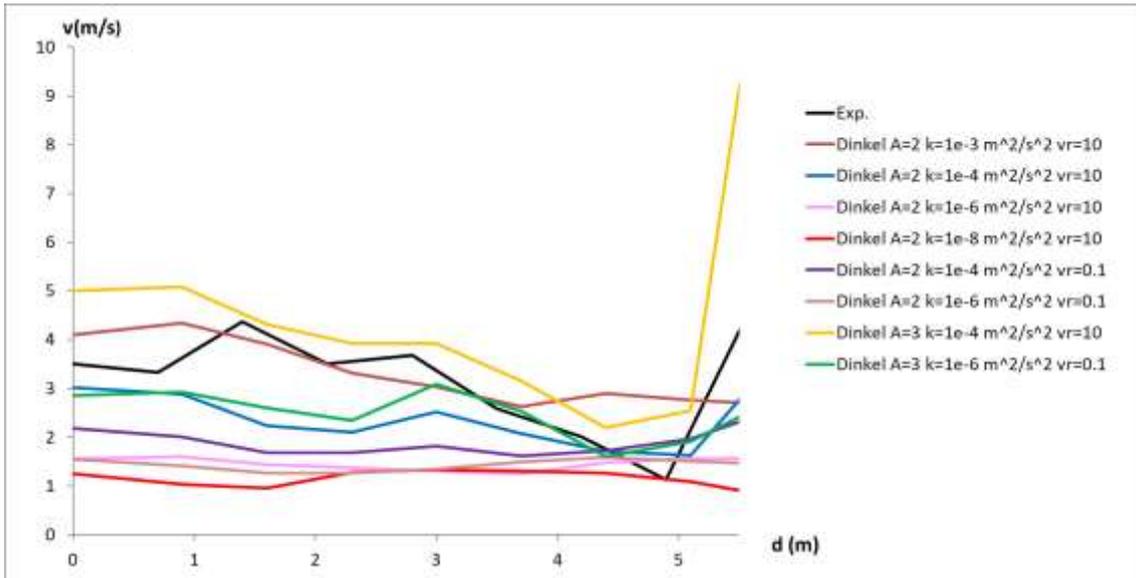


Abb. 4.83 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz aufgetragen über dem Abstand vom Zündort (d)

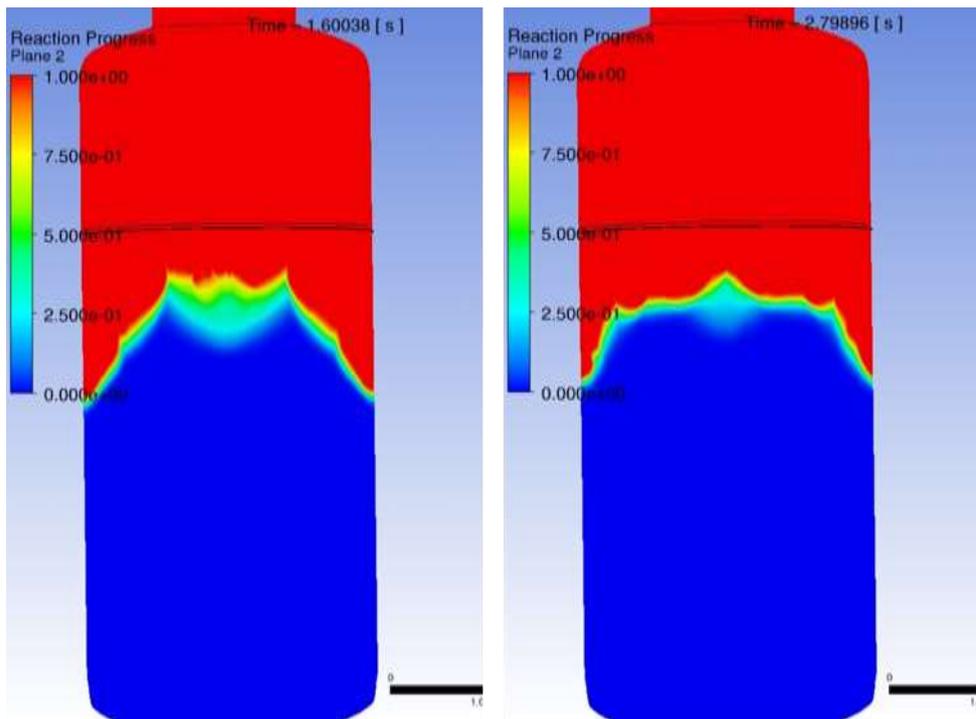


Abb. 4.84 Reaktionsfortschritt bei Simulation Nr. 2 ($k = 1,0e-4$ m²/s², $\nu_r = 10$) links und Nr. 6 ($k = 1,0e-6$ m²/s², $\nu_r = 0,1$) rechts

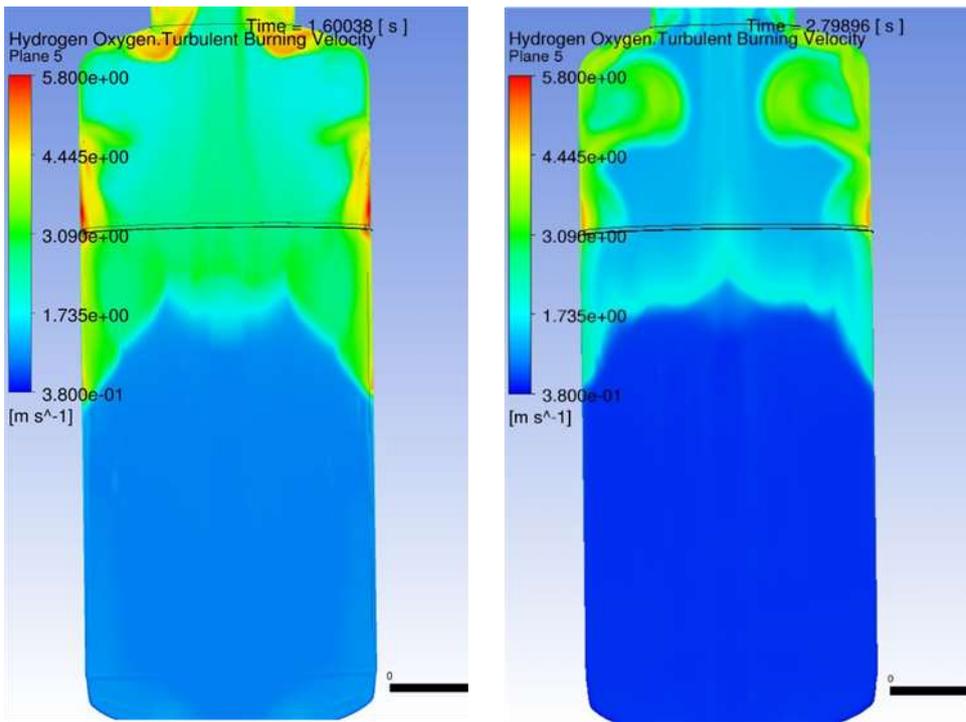


Abb. 4.85 Turbulente Brenngeschwindigkeit bei Simulation Nr. 2 ($k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 10$) links und Nr. 6 ($k = 1,0e-6 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 0,1$) rechts

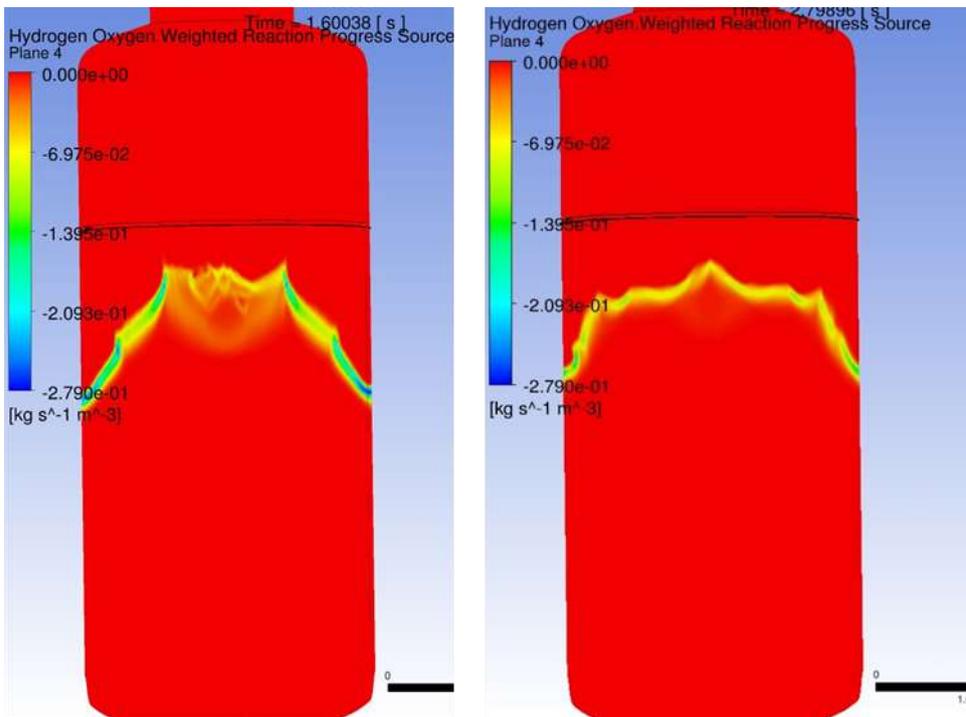


Abb. 4.86 Chemischer Quellterm für die Reaktionsfortschrittvariable bei Simulation Nr. 2 ($k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 10$) links und Nr. 6 ($k = 1,0e-6 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 0,1$) rechts

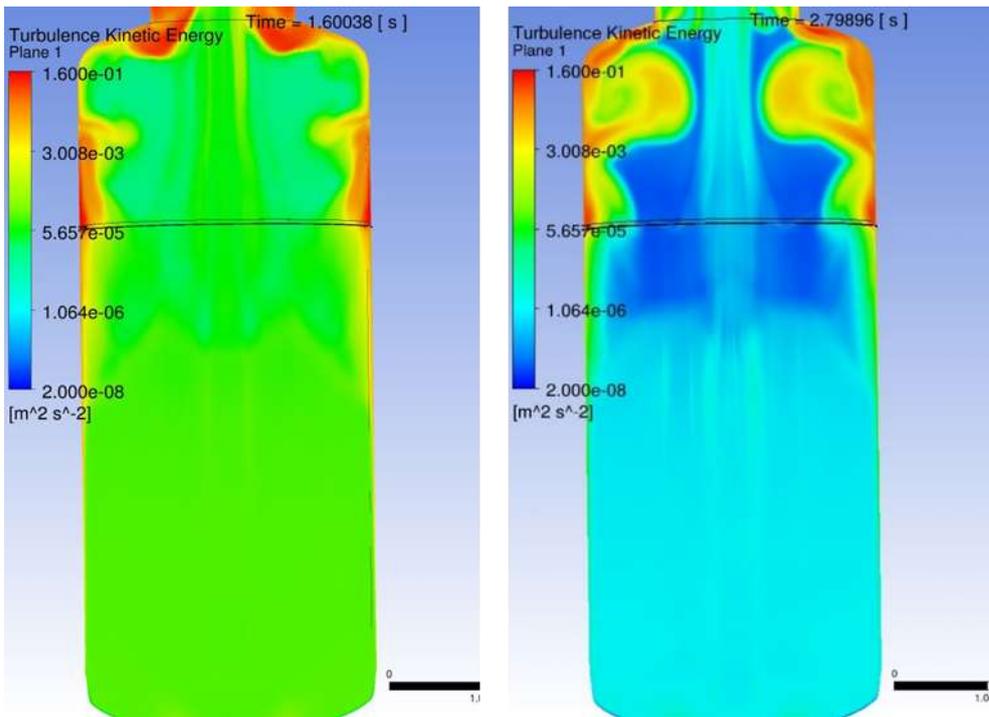


Abb. 4.87 Turbulente kinetische Energie bei Simulation Nr. 2 ($k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 10$) links und Nr. 6 ($k = 1,0e-6 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 0,1$) rechts

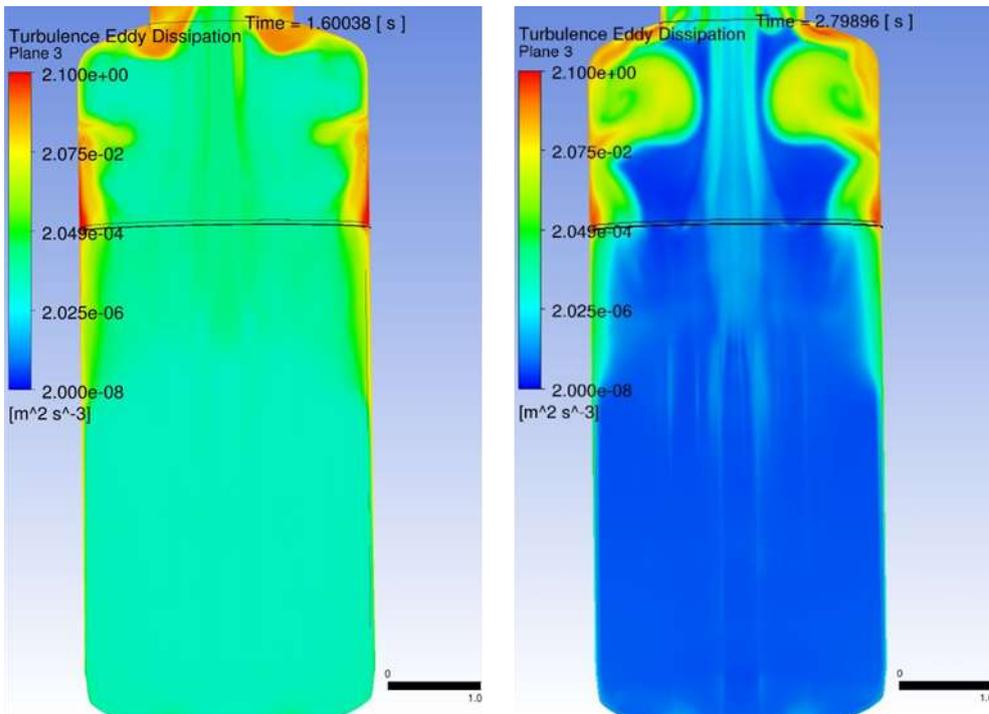


Abb. 4.88 Turbulente Dissipation bei Simulation Nr. 2 ($k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 10$) links und Nr. 6 ($k = 1,0e-6 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 0,1$) rechts

4.2.2.6.4 Test unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammgeschwindigkeit

Im Folgenden werden wie schon in HD-7 die Ergebnisse von Simulationen mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammgeschwindigkeit verglichen. Es wird von einer Anfangsturbulenz von $1,0 \text{ e-4 m}^2/\text{s}^2$ und $v_r = 10$ ausgegangen.

Bei allen Simulationen findet eine vollständige Verbrennung statt. Dies ergibt sich daraus, dass überall im unverbrannten Gas eine H_2 -Konzentration oberhalb der Zündgrenze von 4 vol.-% vorliegt und dass kein Modell verwendet wird, bei dem das Quenching aufgrund von Wärmeverlusten (kalte Wände) oder aufgrund von Turbulenz simuliert wird. Dies stimmt mit der vollständigen H_2 -Verbrennung im Experiment überein.

Deshalb ergibt sich der unterschiedliche Maximaldruck in den Simulationen aus unterschiedlichen integralen Wärmeverlusten an den Wänden. Simulationen, die die Verbrennungsgeschwindigkeit deutlich unterschätzen, sagen auch einen signifikant zu niedrigen Maximaldruck voraus. Sofern der zeitliche Verlauf des Druckanstiegs in etwa der im Experiment entspricht, wird der Maximaldruck in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet (Abb. 4.89). Ab ca. 2 s beginnen starke Druckoszillationen im Experiment, die von den Simulationen so nicht vorhergesagt werden. Das Fehlen von Oszillationen in der Simulation ist plausibel, da die Geschwindigkeit der Flamme um mehr als eine Größenordnung kleiner als die Schallgeschwindigkeit ist. Es ist denkbar, dass akustische Wellen im Experiment für die Oszillationen verantwortlich sind. Diese werden aber in den Simulationen nicht richtig modelliert.

Die Korrelation von Peters und die unmodifizierte Dinkelacker-Korrelation berechnen einen deutlich zu langsamen Druckverlauf in der ersten Phase der Verbrennung (bis zu einem Druck von 3,5 bar – 4 bar). Danach erfolgt ein schnellerer Druckanstieg, der aber immer noch langsamer als der im Experiment ist. Der Grund für den schnelleren Druckanstieg ist, dass in der unteren Hälfte des THAI-Behälters sich die Form der Flammenfront ändert. Die Flammenausbreitung erfolgt seitlich schneller als in der Mitte. Dadurch vergrößert sich die Fläche der Flammenfront und es findet in weiten Bereichen eine seitwärts gerichtete Verbrennung statt. Dies entspricht qualitativ dem Experiment, in dem in diesem Bereich auch die Verbrennung entlang der E- und h-Linie (siehe Abb. 4.77) deutlich schneller erfolgt als entlang der Mittelachse (und auch der b-Linie). Im Experiment liegt im Gegensatz zu den Simulationen eine starke Asymmetrie vor. Vermutlich handelt es sich hierbei um ein stochastisches Verhalten, da keine Einbauten oder

Messinstrumentierungen bekannt sind, die diese Unterschiede erklären können. Da kein Wiederholungsexperiment durchgeführt wurde, kann dies nicht abschließend entschieden werden. Bei den hier durchgeführten RANS-Simulationen ist deshalb – bis auf numerische Ungenauigkeiten – eine symmetrische Flammenfront zu erwarten. Der deutlich zu langsame Druckanstieg korrespondiert mit einer zu langsamen Flammenausbreitung entlang der Mittelachse im Bereich 9 m bis 4,5 m Höhe (Abb. 4.90). In Anbetracht der relativ hohen Anfangsturbulenz kann geschlossen werden, dass die Peters- und die Dinkelacker-Korrelation die Verbrennungsgeschwindigkeit deutlich unterschätzen.

Die Simulationen mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation ($B \geq 2$) zeigen eine deutlich bessere Übereinstimmung mit dem Experiment. Sie sind in der Lage, die Position des Druckmaximums zufriedenstellend zu berechnen. Im Experiment verlangsamt sich der Druckanstieg im Zeitbereich 2,5 s – 3,5 s deutlich; dies wird aber von keiner Simulation vorhergesagt. Dies ist auch der Zeitbereich, in dem sich im Experiment die Form der Flammenfront ändert. Diese systematische Abweichung erschwert die Bewertung der Simulationen, da zu entscheiden ist, ob es wünschenswert ist, dass die Simulationen wenigstens in den übrigen Bereichen den richtigen Druckanstieg berechnen, oder es besser ist, die Position des Druckmaximums richtig zu bestimmen. Die Simulationen mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation ($A = B = 2$) berechnen sowohl in der Anfangsphase als auch nach 3,5 s einen zu langsamen Druckanstieg, dadurch sagen sie aber die Position des Maximums richtig voraus. Die modifizierten Dinkelacker-Korrelationen mit $A = B = 2,5$ und mit $A = 2, B = 3$ berechnen einen etwas zu langsamen Druckanstieg in der Anfangsphase; für Drücke oberhalb von 3,5 bar wird der Druckanstieg in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Bei der modifizierten Dinkelacker-Korrelation mit $A = B = 3$ stimmt der Druckanstieg in der Anfangsphase und auch der Druckanstieg ab einem Druck von 3,5 bar gut mit dem Experiment überein. Bei $A = 1, B = 3$ wird der Druckanstieg in der Anfangsphase unterschätzt. Bei der modifizierten Dinkelacker-Korrelation ist der Einfluss von A in der Anfangsphase stärker als von B . Der Druckanstieg entspricht in etwa dem des Plateaubereichs 2,5 bar – 3,5 bar im Experiment.

Die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse (bis 4,2 m Höhe) wird bei der modifizierten Dinkelacker-Korrelation mit $A = B = 2$ leicht unterschätzt, mit $A = B = 3$ wird eine leicht zu hohe Geschwindigkeit berechnet. Mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation $A = B = 2,5$ bzw. $A = 2$ und $B = 3$ wird dagegen eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt. Bei $A = 1, B = 3$ wird in der Anfangsphase eine zu

langsame Ausbreitungsgeschwindigkeit berechnet. Mit zunehmendem Abstand vom Zündort nimmt die Unterschätzung der Ausbreitungsgeschwindigkeit ab.

Bei der Bewertung der Korrelationen muss aber berücksichtigt werden, dass die Abweichungen aufgrund der unbekanntenen Anfangsturbulenz deutlich größer sind als die Abweichungen zwischen modifizierten Dinkelacker-Korrelationen mit $B \geq 2$.

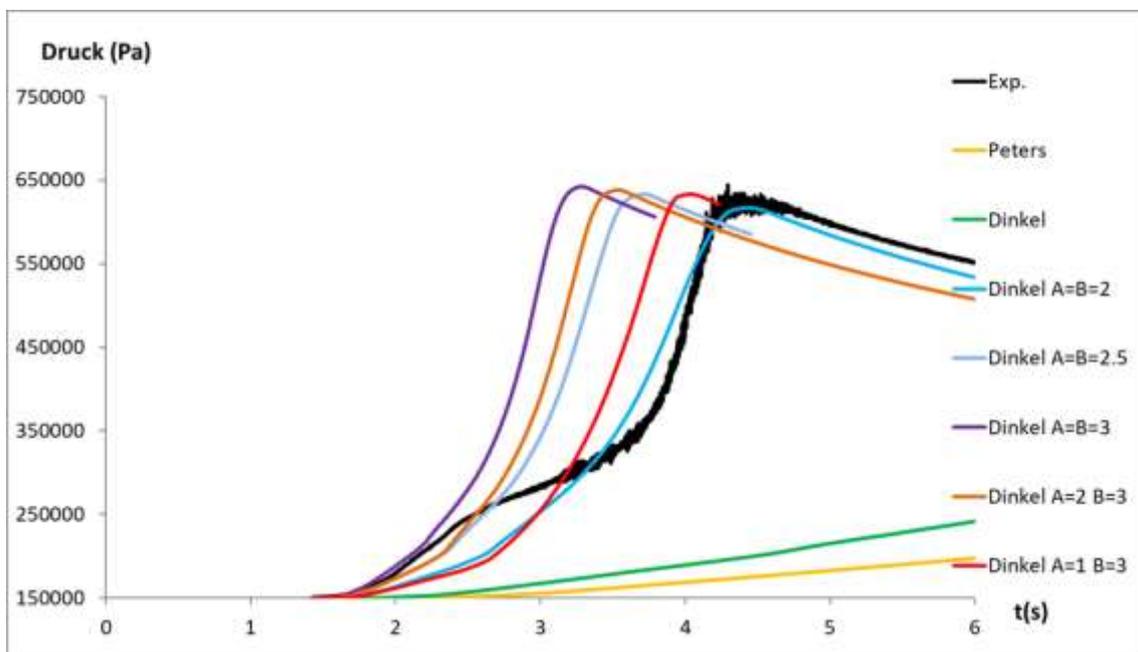
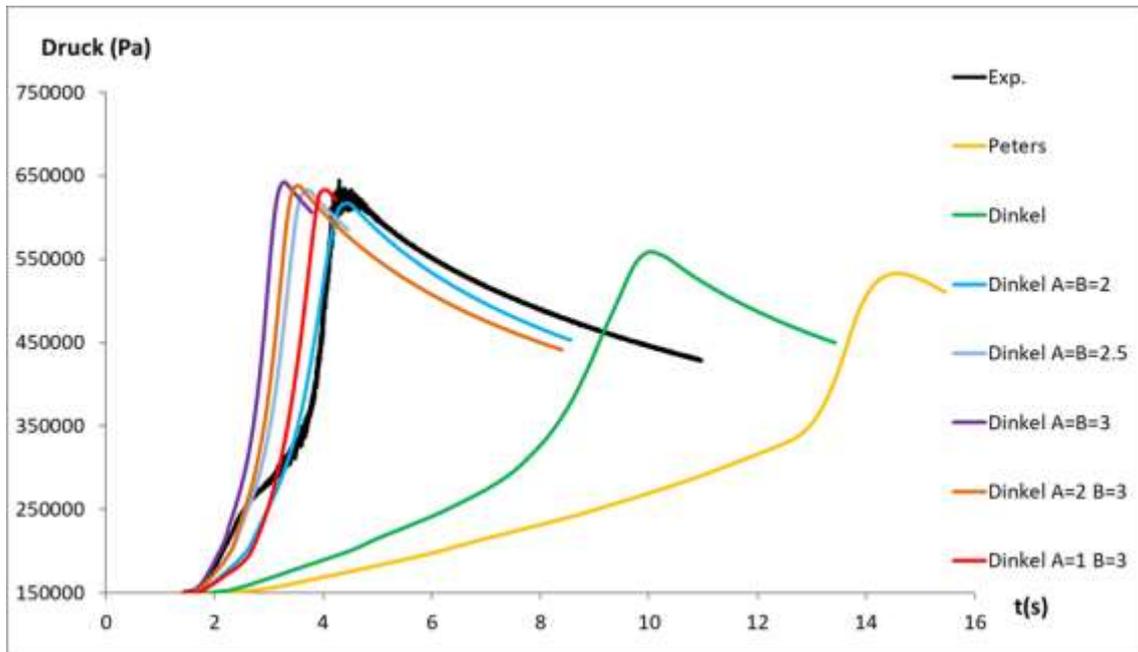


Abb. 4.89 Druck bei Verwendung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit

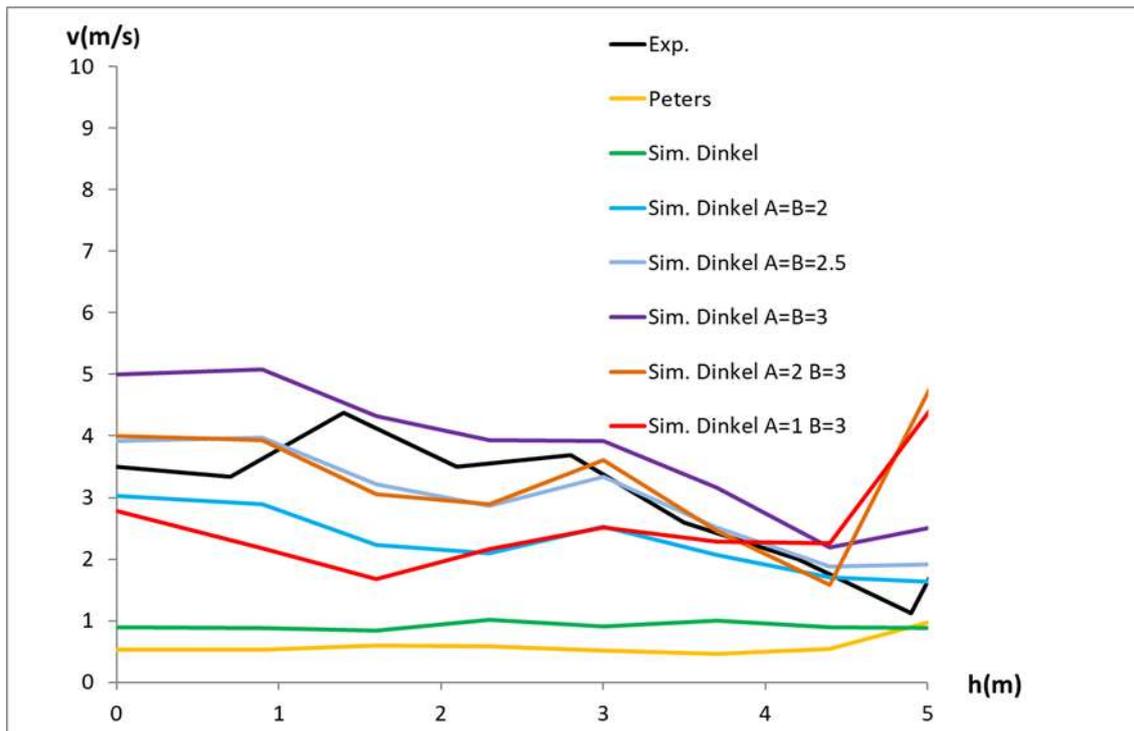


Abb. 4.90 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse bei Verwendung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit. Die Geschwindigkeit ist aufgetragen über dem Abstand vom Zündort

4.2.2.6.5 Simulation von HD-10 mit der TUM-Korrelation

Die Korrelation der TUM für die turbulente Flammengeschwindigkeit wurde auch für den Versuch HD-10 getestet. Wie bei den anderen Simulationen wird als Anfangsturbulenz $k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $vr = 10$ angenommen.

Mit $B = 1$ kann das Experiment relativ gut berechnet werden. In der Anfangsphase wird der Druckanstieg nur leicht unterschätzt (Abb. 4.93). Der langsamere Druckanstieg im Experiment zwischen 2,5 bar und 3,5 bar kann auch mit der TUM-Korrelation nicht reproduziert werden. Der Druckanstieg im späteren Verlauf wird dagegen sehr gut berechnet. Insgesamt wird das Druckmaximum mehr als 1 s früher als im Experiment erreicht, was den etwas höheren Wert in der Simulation erklärt. Der Vergleich der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit den Messwerten (Abb. 4.94). Wie schon bei HD-7 wird mit $B = 0,5$ eine deutlich zu langsame Verbrennung simuliert. Dies gilt sowohl für den Druckanstieg als auch für die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit.

Beim Vergleich der Flammenausbreitung (Abb. 4.91 und Abb. 4.92) zeigt sich, dass alle drei Simulationen (TUM $B = 1$, TUM $B = 0,5$ und modifizierte Dinkelacker $A = 1$ $B = 3$) sich im Detail unterscheiden, es aber auch Gemeinsamkeiten gibt. Sowohl die TUM-Korrelation mit $B = 1$ als auch die modifizierte Dinkelacker-Korrelation – mit Einschränkungen auch TUM mit $B = 0,5$ – führen zu dem Ergebnis, dass die Flamme zu Beginn zuerst die Messpunkte entlang der Mittelachse erreicht. In der Auswertung wird davon ausgegangen, dass die Flamme den Messpunkt erreicht hat, sobald die Reaktionsfortschrittsvariable $> 0,05$ ist. In der unteren Hälfte erfolgt in allen Simulationen eine schnellere Verbrennung in der Nähe der Behälterwände. Ein ähnliches Verhalten wird auch im Experiment beobachtet. Allerdings erfolgt im Experiment die Flammenausbreitung stark asymmetrisch und es scheint, dass die seitliche Flammenausbreitung in den Simulationen stärker als im Experiment ist. Beim Vergleich der Flammenfronten Experiment / Simulation ist zu berücksichtigen, dass die seitlichen Messtellen einen deutlichen Abstand von der Behälterwand haben (Abb. 4.77). Einen schnellere Flammenausbreitung näher an der Wand würde messtechnisch nicht erfasst.

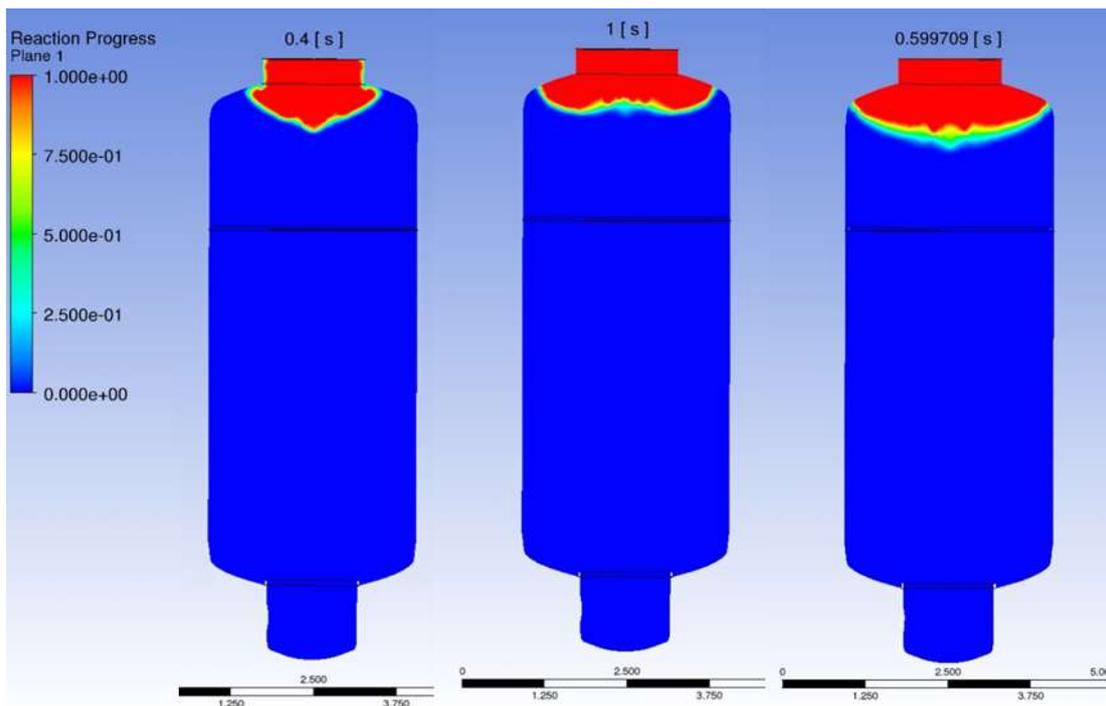


Abb. 4.91 Reaktionsfortschritt bei Simulation mit der TUM-Korrelation $B = 1$ links und $B = 0,5$ (Mitte), modifizierte Dinkelacker-Korrelation mit $A = 1$ und $B = 3$ rechts

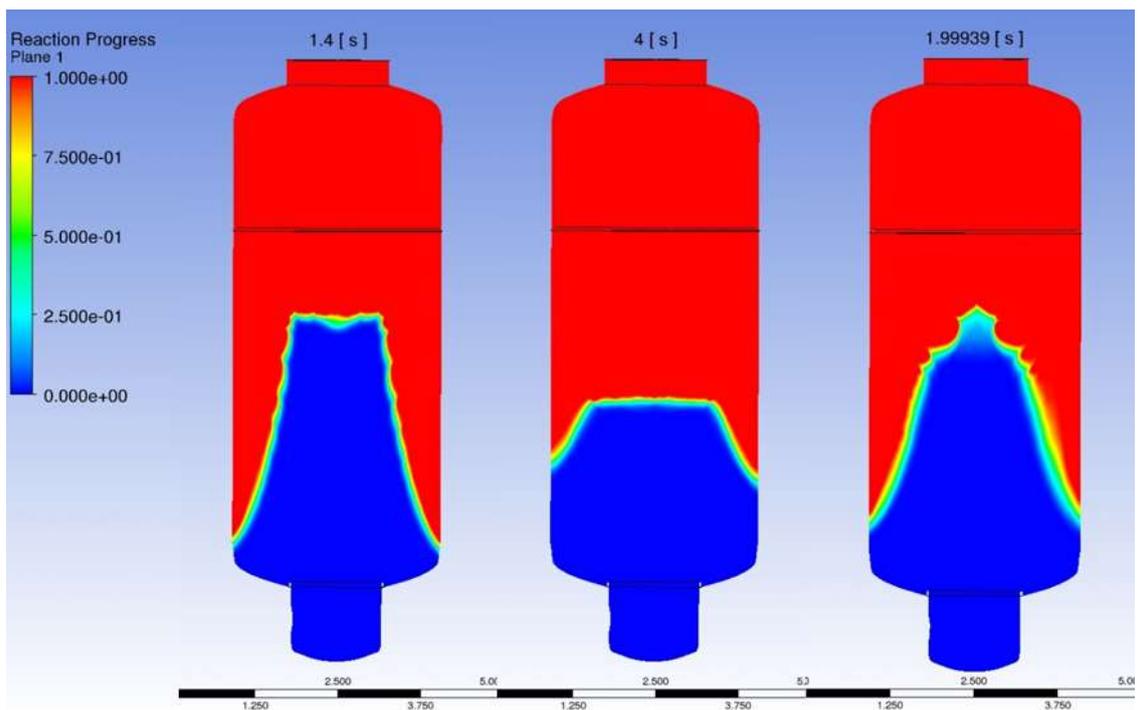
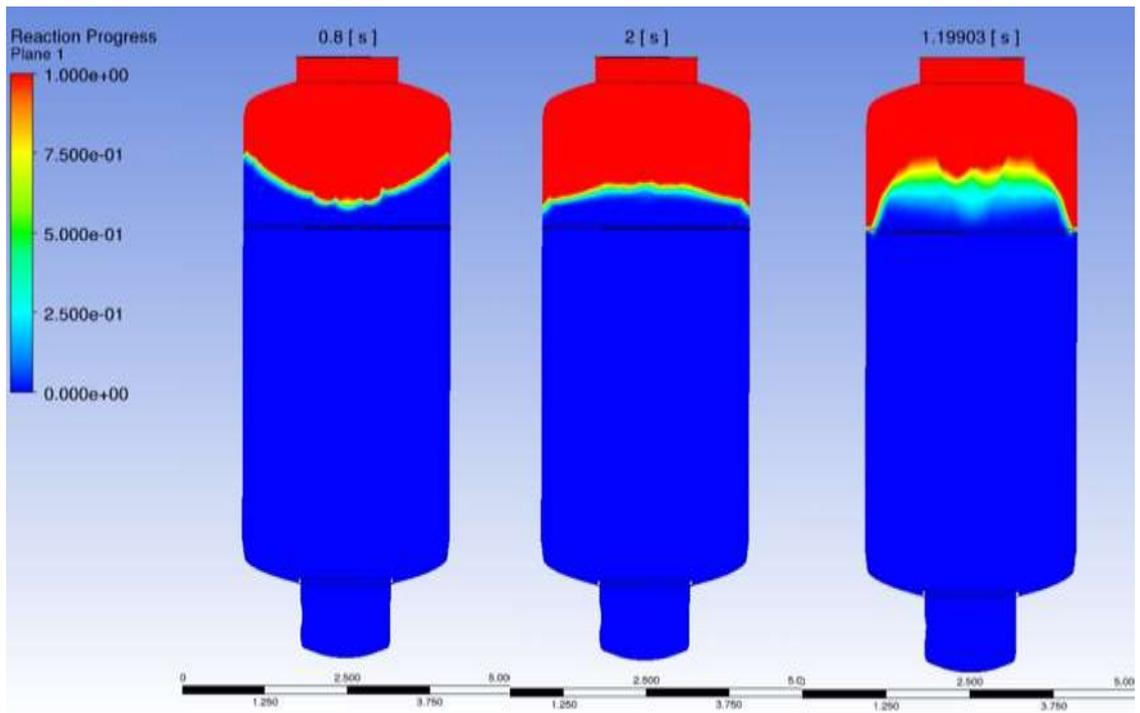


Abb. 4.92 Reaktionsfortschritt bei Simulation mit der TUM-Korrelation $B = 1$ links und $B = 0,5$ (Mitte), modifizierte Dinkelacker-Korrelation mit $A = 1$ und $B = 3$ rechts

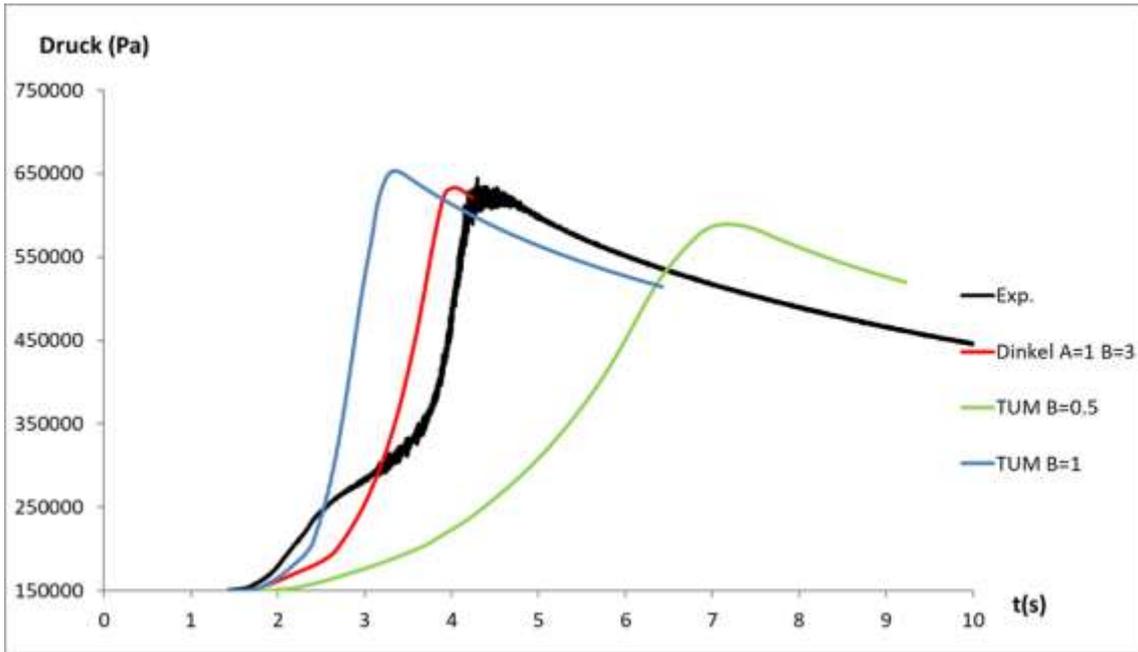


Abb. 4.93 Druck bei Verwendung der TUM-Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit

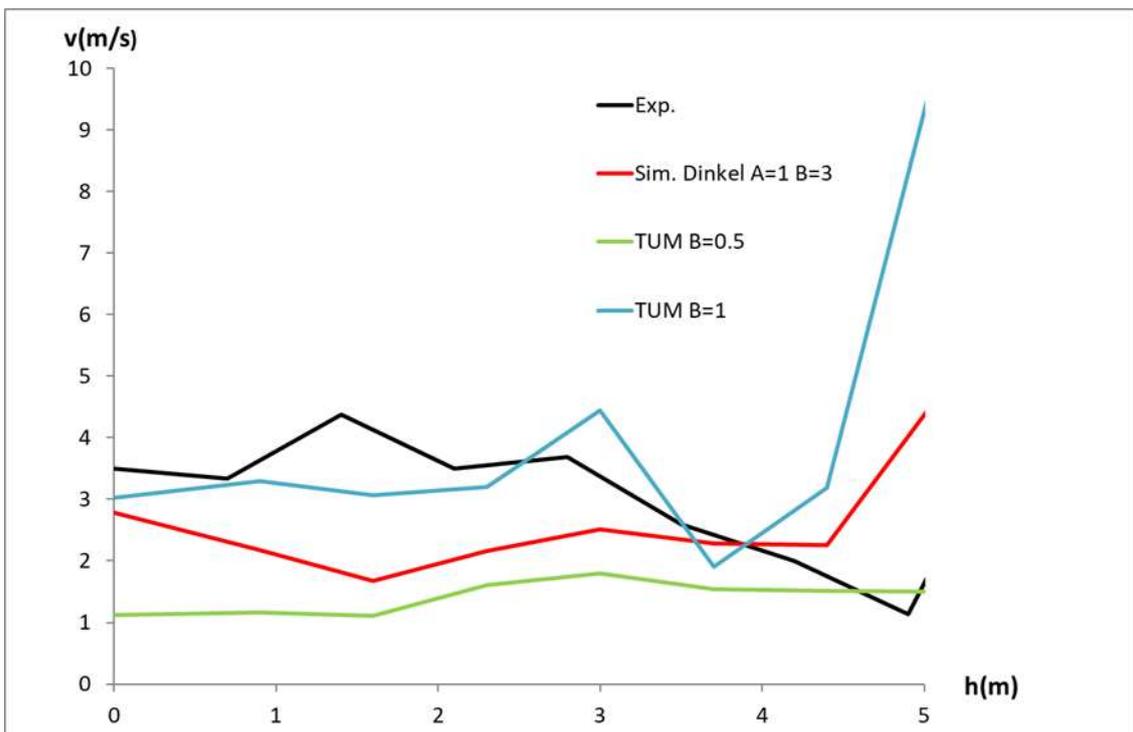


Abb. 4.94 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse bei Verwendung TUM-Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit

4.2.2.6 Zusammenfassung HD-10

Der Versuch HD-10 wurde mit dem Burning-Velocity-Modell und der neu erstellten Flamelet-Tabelle und unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit nachgerechnet. Für diesen Versuch wurde das gleiche CFD-Gitter wie für den Versuch HD-7 verwendet. Eine Gitterstudie zeigt nur noch eine sehr schwache Abhängigkeit der Simulationsergebnisse (Druck, Flammenausbreitungsgeschwindigkeit) von der räumlichen Diskretisierung.

Es wurden unterschiedliche Korrelationen für die Berechnung der turbulenten Flammengeschwindigkeit getestet. Die Simulationen mit der Peters- und der Dinkelacker-Korrelation sagen eine signifikant zu langsame Verbrennung vorher. Die Berechnungen mit den übrigen Korrelationen zeigen eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment. Aber mit keiner Korrelation konnte die Verlangsamung des Druckanstiegs im Experiment zwischen 2,5 s und 3,5 s simuliert werden. Die modifizierte Dinkelacker-Korrelation mit $A = B = 2$ sagt eine tendenziell zu langsame Verbrennung voraus. Die übrigen getesteten Dinkelacker-Korrelationen ($B \geq 2,5$) zeigen eine zufriedenstellende Übereinstimmung. Da keine der Simulationen die Verlangsamung des Druckanstiegs bei 2,5 bar vorhersagt, kann nicht geschlussfolgert werden, welche Parameter das Experiment besser treffen. Je nach Wahl von A und B werden einzelne Größen besser oder etwas weniger gut getroffen, aber kein Parametersatz kann alle Phasen des Experiments exakt beschreiben. Die Simulation mit der Korrelation der TUM und Formfaktor $B = 1$ zeigt eine insgesamt gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Allerdings kann auch bei dieser Rechnung die Verlangsamung des Druckaufbaus bei 2,5 bar nicht reproduziert werden. Bei Wahl des Formfaktor $B = 0,5$ wird eine deutlich zu langsame Verbrennung berechnet.

Eine Parameterstudie zum Einfluss der Anfangsturbulenz zeigt einen sehr starken Einfluss sowohl von k als auch von v_r auf das Simulationsergebnis bei der modifizierten Dinkelacker-Korrelation.

4.2.2.7 Nachrechnung HD-39

Der Versuch HD-39 wurde an der THAI+-Anlage durchgeführt. Die THAI+-Anlage ist eine Erweiterung von THAI (TTV) um einen weiteren Behälter (PAD) (Abb. 4.96). In HD-39 sind die beiden Behälter durch zwei Verbindungsrohre verbunden. Wie in HD-7 und HD-10 befinden sich keine Einbauten in den Behältern. Im TTV-Behälter beträgt die mittlere

H₂-Konzentration 9,73 vol-% im PAD 6,6 vol-%. Dies entspricht einer mittleren H₂-Konzentration von 9,0 vol-%. Bis auf den Sumpf des TTV (T ~29,8 °C) liegt überall eine Temperatur von etwa 23 °C vor. Im oberen Verbindungsrohr wurde eine Berstscheibe mit einem maximalen Berstdruck von 10 mbar eingebracht, um ein Propagieren des in TTV eingebrachten Wasserstoffs in den PAD-Behälter zu verhindern. Im oberen und unteren Verbindungsrohr befinden sich Ausgleichselemente. In den Simulationen wurden sie nicht berücksichtigt. Die Ausgleichselemente können prinzipiell Turbulenz generieren. Die Modellierung der Verbindungsrohre als komplett glatte Rohre wird daher die Turbulenz und damit auch die lokale Flammgeschwindigkeit unterschätzen.

Der Anfangsdruck beim Versuch HD-39 beträgt ca. 1,5 bar. Der Druckverlauf wurde an mehreren Messtellen gemessen (Abb. 4.95). Der mittlere Maximaldruck beträgt ca. 5,11 bar. Im Maximum sind hochfrequente (150 Hz) und niedrigfrequente (6,9 Hz) Druckschwankungen überlagert. Die Amplitude der hochfrequenten Druckschwankungen ist im VTT-Behälter deutlich höher als im PAD. Es wurden akustische Wellen nachgewiesen.

Im Experiment wurde mit Hilfe von Thermoelementen die Flammenankunftszeit an verschiedenen Orten gemessen (siehe Abb. 4.96). In HD-39 erfolgt die Flammenausbreitung entlang zweier unterschiedlicher Wege. Der erste ist eine aufwärtsgerichtete Verbrennung im Behälter TTV. Über das obere Verbindungsrohr erfolgt eine Ausbreitung in den oberen Bereich des PAD (blaue Linie, L1). Dort wird eine sehr schnelle abwärtsgerichtete Verbrennung (Jet Ignition) beobachtet.

Der zweite Pfad der Flammenausbreitung ist eine Ausbreitung der Flamme vom Zündort im TTV durch das untere Verbindungsrohr in den PAD. Dort erfolgt dann eine aufwärtsgerichtete Verbrennung. Die beiden Flammenfronten treffen im PAD auf einer Höhe von 5,5 m – 6,5 m aufeinander. Dieser zweite Weg wurde in der Auswertung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit nicht berücksichtigt. Im unteren Bereich des PAD liegen die Messtellen nicht auf der Ausbreitungsrichtung der Flamme und die Form der Flamme nach Eintritt in dem PAD ist sehr sensitiv (siehe z. B. Abb. 4.108).

Nach Abschluss der Verbrennung wurde die verbliebene H₂-Konzentration gemessen. Sie betrug ca. 1,1 vol-%. Um Gegensatz zu früheren THAI-Experimenten (z. B. HD-7) mit ähnlich hohen mittleren H₂-Konzentrationen fand bei HD-39 keine vollständige Verbrennung statt. Entsprechend niedriger ist der Maximaldruck. Eine wichtige Rolle spielt hierbei auch das größere Verhältnis Oberfläche zu Volumen bei der THAI+-Anlage

verglichen mit der ursprünglichen THAI-Anlage. Im Verbrennungsmodell ist lediglich eine Verlöschung der Flamme aufgrund von niedrigen H_2 -Konzentrationen ($H_{2,u} < 4$ vol-%) implementiert. Ein Verlöschen der Flamme aufgrund von Wärmeverlusten an kalten Wänden wird nicht simuliert, ebenso nicht die Flammenverlöschung aufgrund von hoher Turbulenz. Da im Experiment zu Beginn überall eine Wasserstoffkonzentration $H_{2,u} > 6$ vol-% vorliegt, wird in den Simulationen immer eine vollständige Verbrennung berechnet. Deshalb ist davon auszugehen, dass bei richtiger Berechnung der Wärmeverluste an die Behälterwände der Maximaldruck etwas überschätzt wird. Für eine ausführliche Diskussion des Experiments wird auf den Bericht von Becker Technologies /FUN 15/, /FRE 17/ verwiesen.

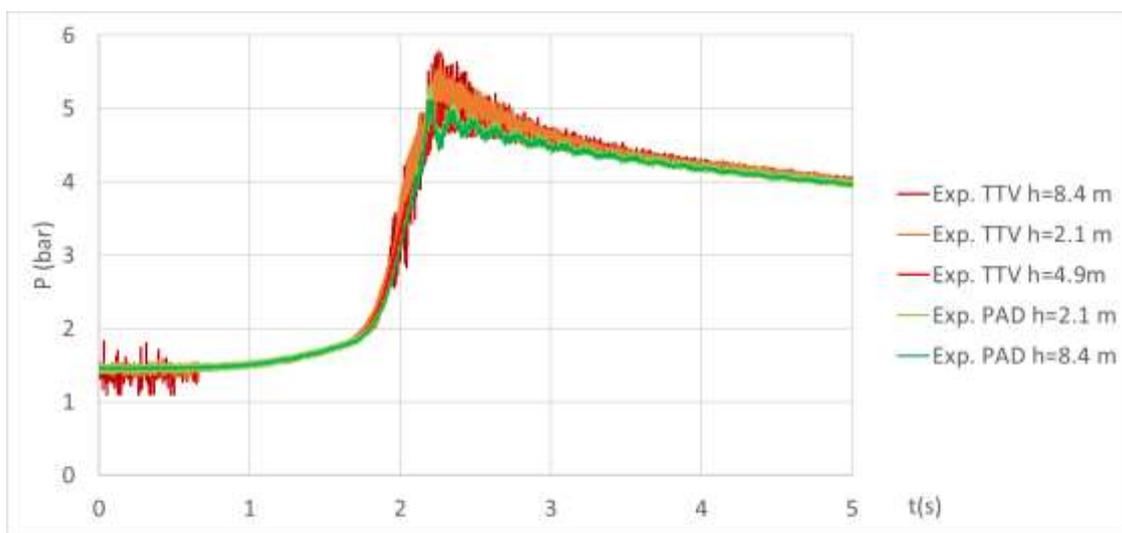


Abb. 4.95 Druckverlauf an unterschiedlichen Messstellen

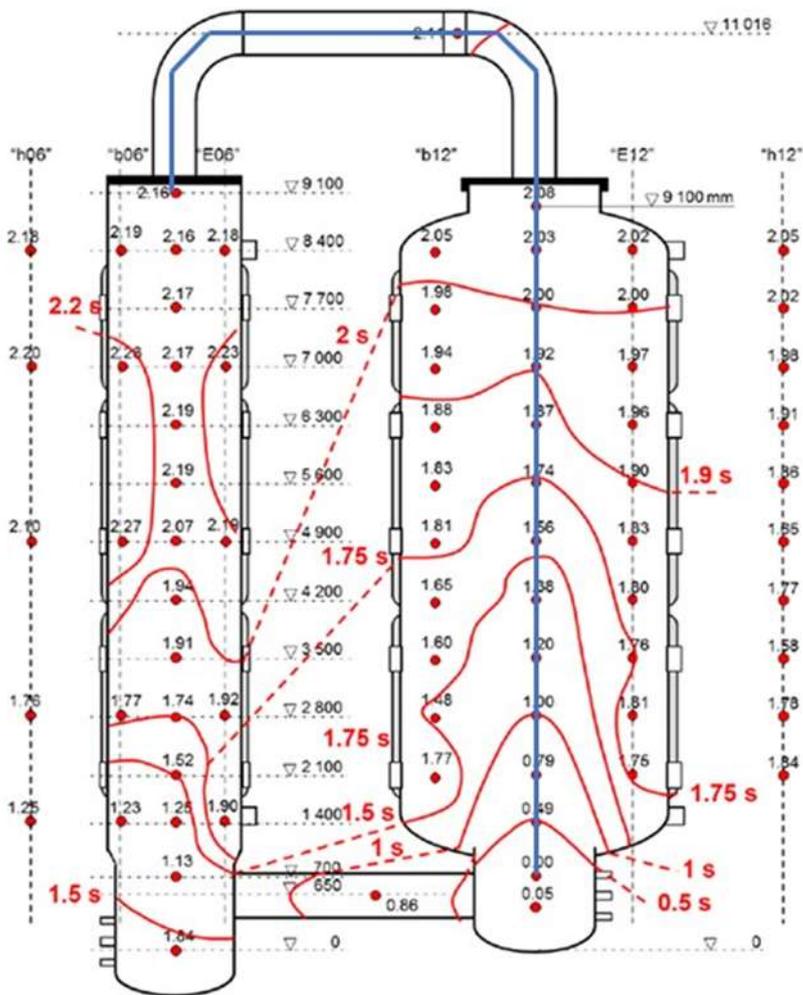


Abb. 4.96 Aus den Flammenankunftszeiten berechneter Verlauf der Flamme bei HD-39 /FRE 17/. Die blaue Linie kennzeichnet den bei der Auswertung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit betrachteten Weg L1

4.2.2.7.1 Start- und Randbedingungen der CFX-Simulation

Die H_2 -Konzentration in den Simulationen wird in Abhängigkeit vom Ort und von der Höhe entsprechend dem Versuchsbericht /FRE 17/ gewählt. Allerdings ergibt sich für den Bereich des VTT-Sumpfs ein Problem, da hier keine ausreichende Konzentrationsmessung vorliegt. Im Bereich des VTT-Sumpfes liegt die unterste Messtelle bei 0,7 m. Dort wurden 8,95 vol-% H_2 gemessen. Im unteren Verbindungsrohr (Höhe 0,65 m) wurden dagegen nur 6,81 vol-% gemessen. Diese Messtelle ist allerdings über 2 m vom VTT-Sumpf entfernt. Deshalb wurde der Wert von 8,95 vol-% für den gesamten VTT-Sumpf angenommen (Abb. 4.97, links) und das gesamte untere Verbindungsrohr wurde

mit 6,81 vol-% H₂ initialisiert. Im gesamten Behälter wird eine Temperatur von 23 °C angenommen. Da auch bei HD-39 keine Messwerte zu der Anfangsturbulenz vorliegen, muss sie abgeschätzt werden. Als Anfangsturbulenz wird $k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $vr = 10$ gewählt. In Abschnitt 4.2.2.7.3 wird der Einfluss dieser Annahme untersucht.

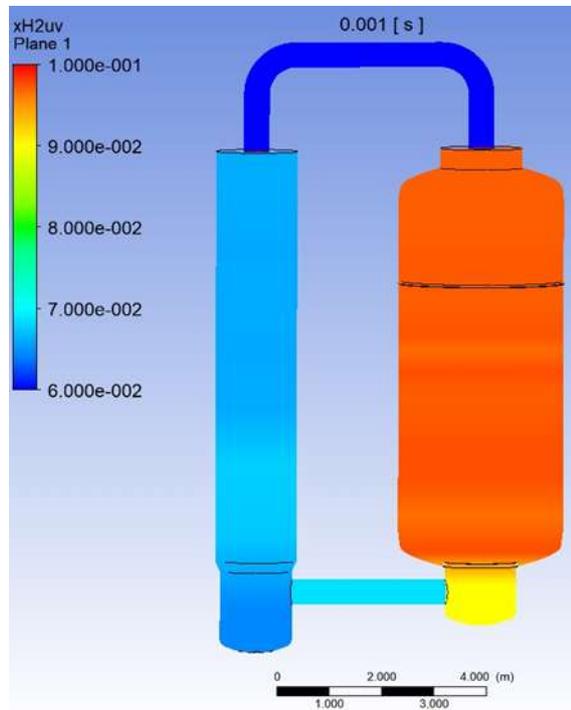


Abb. 4.97 Initiale H₂-Konzentrationsstudie zur Gitterabhängigkeit

Um zu prüfen, inwieweit eine Abhängigkeit des Simulationsergebnisses vom verwendeten CFD-Gitter vorliegt, wurden zwei Simulationen mit unterschiedlich feiner Diskretisierung miteinander verglichen. Eine Simulation wurde mit einem Gitter bestehend aus 2,53 Millionen Zellen durchgeführt, das feinere Gitter bestand aus 7,98 Millionen Zellen. Beide Gittern bestehen ausschließlich aus strukturierten Zellen (Hexaeder). Der TTV-Teil des Gitters ist bis auf geringfügige Anpassungen identisch mit dem Gitter, das bei den Versuchen HD-7 und HD-10 zum Einsatz kam. Die Gitterstudie wurde mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation und den Faktoren $A = B = 2,0$ und einer initialen Turbulenz von $k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $vr = 10$ durchgeführt.

Der Vergleich des Druckverlaufs der beiden Simulationen zeigt eine sehr gute Übereinstimmung der beiden Ergebnisse (Abb. 4.98). Lediglich im Bereich des Druckmaximums zeigen sich kleine Abweichungen. Zeitpunkt und Geschwindigkeit des Druckanstiegs sind dagegen nahezu identisch. Auch die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Strecke L1 ist im TTV-Behälter bei beiden Simulationen nahezu identisch

(Abb. 4.100). Es zeigt sich bei den Simulationen ein qualitativer Unterschied zum Experiment. Die Flammenfront, die entlang der Linie L1 läuft, und die Flammenfront, die aufwärts gerichtet durch den PAD läuft, treffen sich nicht wie im Experiment im oberen PAD-Behälter, sondern im oberen Verbindungsrohr. Deshalb wird beim Vergleich die Linie L1 nur bis zu einem Abstand von 8,6 m vom Zündort betrachtet.

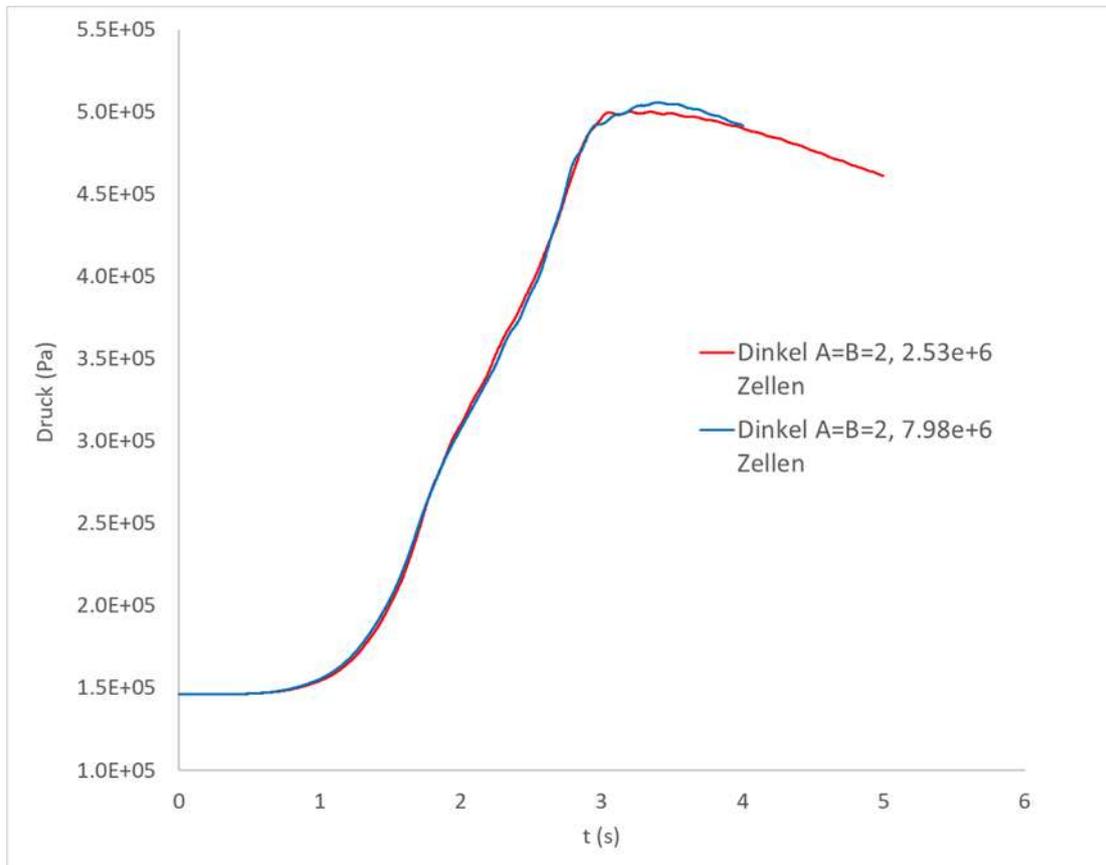


Abb. 4.98 Druckverlauf bei unterschiedlich feiner Diskretisierung

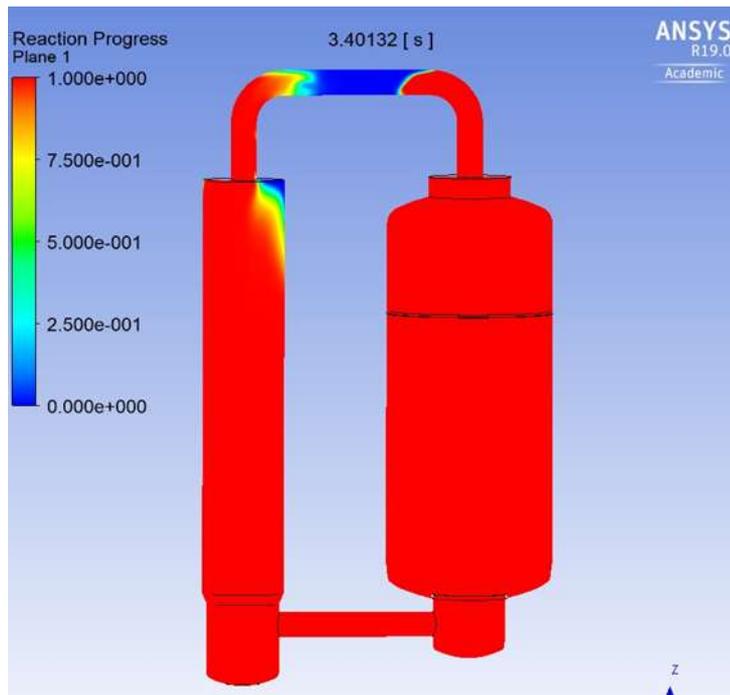


Abb. 4.99 Reaktionsfortschrittsvariable nach 3,4 s bei der Simulation mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation mit $A = B = 2$

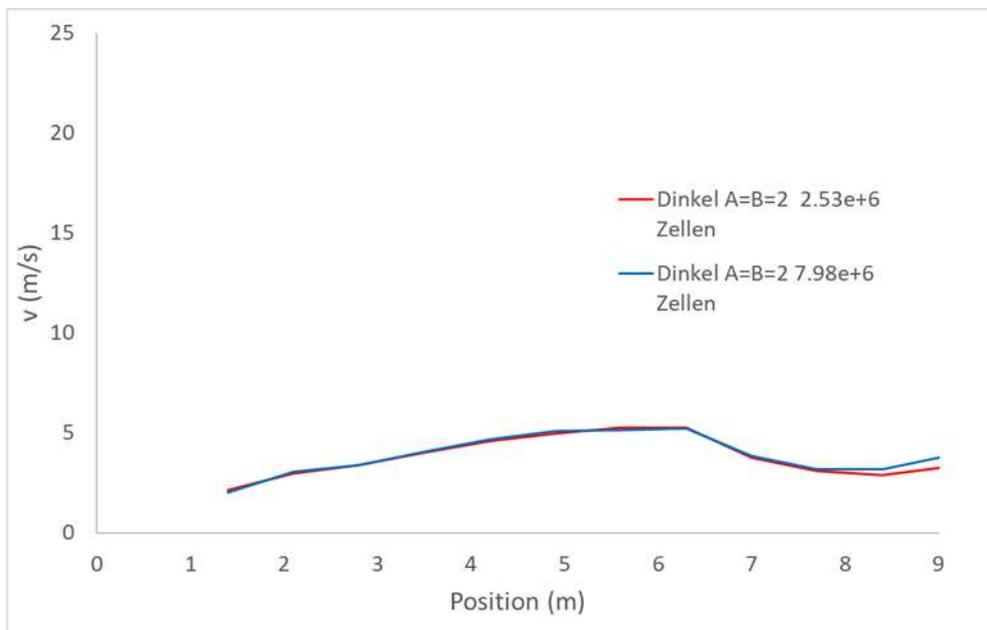


Abb. 4.100 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Strecke L1

4.2.2.7.2 Einfluss unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammgeschwindigkeit

Bei der Nachrechnung von HD-39 wurden unterschiedliche Korrelationen für die turbulente Flammgeschwindigkeit getestet. Als Anfangsturbulenz wurde für den Vergleich $k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $vr = 10$ gewählt.

Unabhängig von der verwendeten Korrelation findet bei allen Simulationen eine vollständige Verbrennung statt, da überall im Brennraum die $H_{2,u} >$ als die Zündgrenze (4 vol-%) ist und keine Flammenverlöschungsmodelle implementiert sind. Deshalb ist bei allen Simulationen der Maximaldruck etwas höher als der im Experiment.

Bei den Simulationen mit den (modifizierten) Dinkelacker-Korrelationen ($1 \leq A$, $B \leq 3$) und der Peters-Korrelation verläuft die Verbrennung überall so langsam, dass keine lokalen Druckspitzen auftreten und der Druck überall im THAI+-Behälter in etwa gleich hoch ist (siehe Abb. 4.101). Es wird deshalb nur ein Druckwert für den Vergleich mit dem Experiment herangezogen.

Die Peters- und die Dinkelacker-Korrelation ($A = 1$, $B = 1$) simulieren für den gesamten Versuch einen zu langsamen Druckanstieg (Abb. 4.102). Das Druckmaximum wird deshalb erst nach 4,5 s bzw. 4 s erreicht, während es im Experiment bei ca. 2,3 s liegt. Die Simulationen mit einer modifizierten Dinkelacker-Korrelation ($B \geq 2$) zeigen alle ein qualitativ ähnliches Verhalten. Der Druckanstieg erfolgt früher und stärker als im Experiment. Der Koeffizient A in der Korrelation hat in der Anfangsphase den stärkeren Einfluss. Je größer A gewählt wird, desto stärker und früher erfolgt der Druckanstieg. Beim Vergleich mit dem Experiment ist zu berücksichtigen, dass in der Anfangsphase die unbekanntere Anfangsturbulenz einen starken Einfluss hat. Bei einer niedrigeren (auch realistischeren) Anfangsturbulenz kann mit ($A = 1$ und $B = 3$) die Anfangsphase in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden (Abb. 4.106). Ab einem Druck von ca. 2 bar erfolgt im Experiment ein deutlich schnellerer Druckanstieg. Bei allen hier durchgeführten Simulationen mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation wird ein zu langsamer Druckanstieg berechnet. Für die Geschwindigkeit des Druckanstiegs ist die Größe des Koeffizienten B entscheidend. Die Unterschiede zwischen $B = 1$ (unmodifizierte Dinkelacker-Korrelation) und $B = 3$ sind aber moderat. Auch mit $B = 3$ ist der Druckanstieg noch deutlich zu schwach. Die Übereinstimmung ist aber etwas besser als bei Wahl eines kleineren Koeffizienten B.

Die Flammenausbreitung entlang der Mittelachse des VTT erfolgt bis zu einem Abstand von 6,5 m vom Zündort (7,2 m Höhe VTT) im Experiment mit 3 m/s – 4 m/s, danach steigt sie deutlich auf bis zu 24 m/s an. Die Anfangsphase bis zur Beschleunigung wird von allen Simulationen in guter Übereinstimmung berechnet (Abb. 4.103). Bei der hier gewählten Anfangsturbulenz wird die Geschwindigkeit bei den modifizierten Dinkelacker-Korrelationen etwas überschätzt. Bei einer niedrigeren Anfangsturbulenz wäre die Übereinstimmung dagegen noch besser (Abb. 4.107). Der deutliche Anstieg der Ausbreitungsgeschwindigkeit wird von keiner Simulation mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation vorhergesagt. Bei allen Rechnungen verbleibt die Ausbreitungsgeschwindigkeit auf ihrem niedrigen Niveau. Im Gegensatz zum Experiment erreicht die aufwärts propagierende Flamme aus dem PAD zuerst die obersten Messtellen im PAD während im Experiment die Flamme aus dem VTT-Behälter über das obere Verbindungsrohr den oberen PAD erreicht. Die beiden Flammenfronten treffen im Experiment im PAD auf einer Höhe von 5 m – 6,5 m aufeinander (Abb. 4.96), während in den Simulationen die beiden Flammenfronten im oberen Verbindungsrohr aufeinandertreffen (Abb. 4.108).

Es wurden zwei Simulationen mit der Korrelation der TUM (ohne Term für F_{zell}) für die turbulente Flammengeschwindigkeit durchgeführt. Bei einer Rechnung wurde der Formfaktor $B = 1$ und bei einer $B = 0,5$ gewählt. Bei $B = 1$ erfolgt nach 0,7 s der signifikante Druckanstieg (Abb. 4.104). Er ist schneller als im Experiment. Nach Erreichen eines Drucks von 2,5 bar kommt es zu einer sehr starken Beschleunigung der Verbrennung und zu starken Druckpeaks. Diese sind deutlich höher als im Experiment. Es fällt auf, dass bei der Simulation im PAD-Behälter die stärksten Druckspitzen auftreten, während im Experiment im VTT stärkere Druckoszillationen gemessen werden. Dass bei Verwendung der TUM-Korrelation mit $B = 1$ eine deutlich zu schnelle Verbrennung berechnet wird, ist unabhängig von der Anfangsturbulenz (Abb. 4.106). Bei der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse von VTT zeigt sich bis zu einer Höhe von 5,6 m eine relativ gute Übereinstimmung, danach erfolgt ein starker Anstieg auf über 100 m/s (Abb. 4.105).

Wird ein niedrigerer Koeffizient von $B = 0,5$ gewählt, so kann eine deutlich bessere Übereinstimmung erzielt werden. Nach 1,37 s beschleunigt sich bei dieser Simulation der Druckanstieg. Dies ist etwas früher als im Experiment, was aber stark mit der gewählten Anfangsturbulenz zusammenhängt. Bis zum Erreichen eines Drucks von 3,6 bar entspricht der Druckanstieg in etwa dem der modifizierten Dinkelacker-Korrelation mit $A = 1$ und $B = 3$ und ist damit schwächer als im Experiment. Nach 2,3 s ($P \sim 3,6$ bar)

beschleunigt sich der Druckanstieg erneut. Danach ist er sogar etwas stärker als im Experiment. Die Flammengeschwindigkeit entlang der Mittelachse des VTT zeigt einen entsprechenden Verlauf. Bei $B = 0,5$ ist die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit zu Beginn etwa genauso groß wie bei der modifizierte Dinkelacker-Korrelation ($A = 1$ $B = 3$). Bis zu einer Höhe von 6,3 m im THAI-Behälter gibt es eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment, danach erfolgt im Experiment eine Beschleunigung der Flammenausbreitung entlang der Mittelachse. Dies wird mit der TUM-Korrelation und $B = 0,5$ nicht simuliert. Die erneute Beschleunigung beim Druckanstieg ist bei der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit nicht erkennbar, da der oberste Punkt auf der Mittelachse des VTT-Behälters zum Zeitpunkt der erneuten Beschleunigung schon fast erreicht wurde.

Keine der hier durchgeführten Simulationen kann den Druckverlauf und die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit genau abbilden. Neben Modellschwächen bei der Modellierung der turbulenten Flammengeschwindigkeit und der Turbulenz spielt bei diesem Experiment noch eine Rolle, dass die Flammenverlöschung nicht simuliert werden kann. Dies hat vermutlich nicht nur einen Einfluss auf den Maximaldruck, sondern auch auf die Dynamik des Verbrennungsvorgangs. Es kann davon ausgegangen werden, dass die Flammenverlöschung hauptsächlich im PAD mit der niedrigeren H_2 -Konzentration aufgetreten ist. Eine abgeschwächte Verbrennung im PAD hat auch auf die Flammenausbreitung im VTT einen Einfluss, da die beiden Flammenfronten über die Expansion des heißen verbrannten Gases einhergehend mit dem Druckaufbau wechselwirken. Eine weitere mögliche Ursache für die Abweichungen ist die Vernachlässigung geometrischer Details, wie die der Ausgleichselemente in den Verbindungsrohren oder gegebenenfalls Reste der Berstmembran. Kleine Strömungshindernisse können zusätzliche Turbulenz generieren, die zu einer lokalen Flammenbeschleunigung führt.

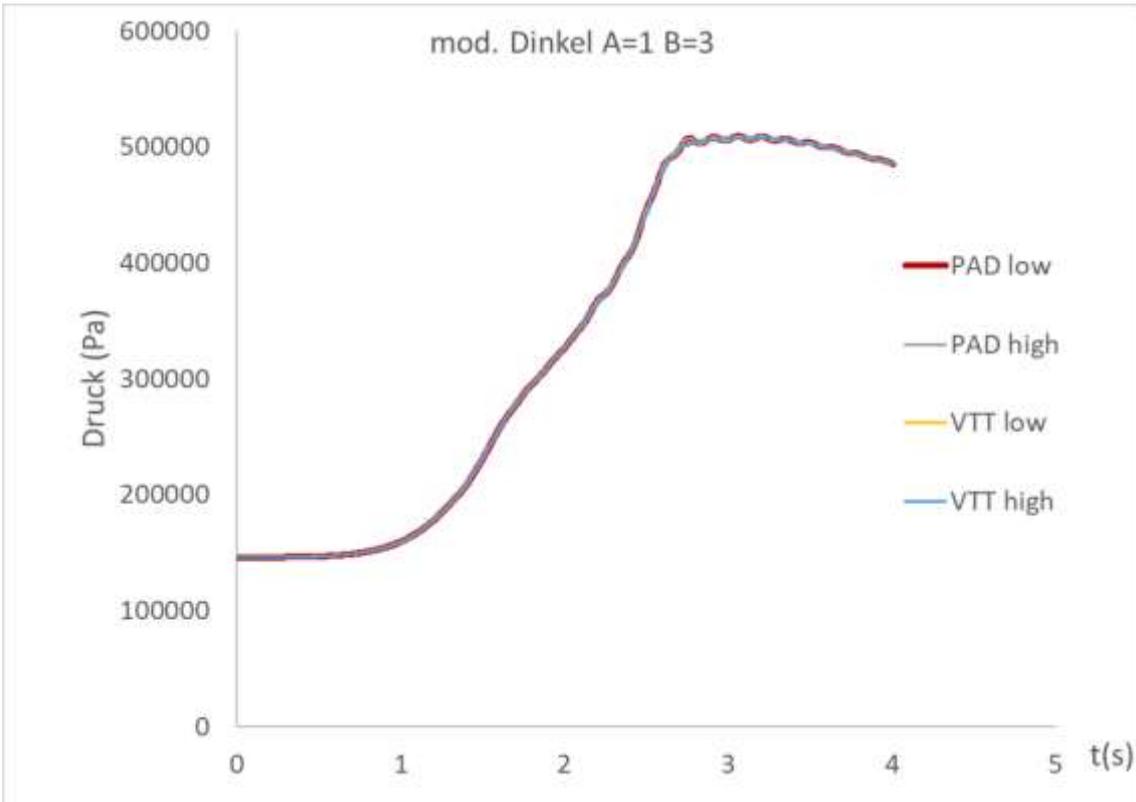


Abb. 4.101 Druck an unterschiedlichen Messtellen bei der Simulation mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation ($A = 1$ $B = 3$)

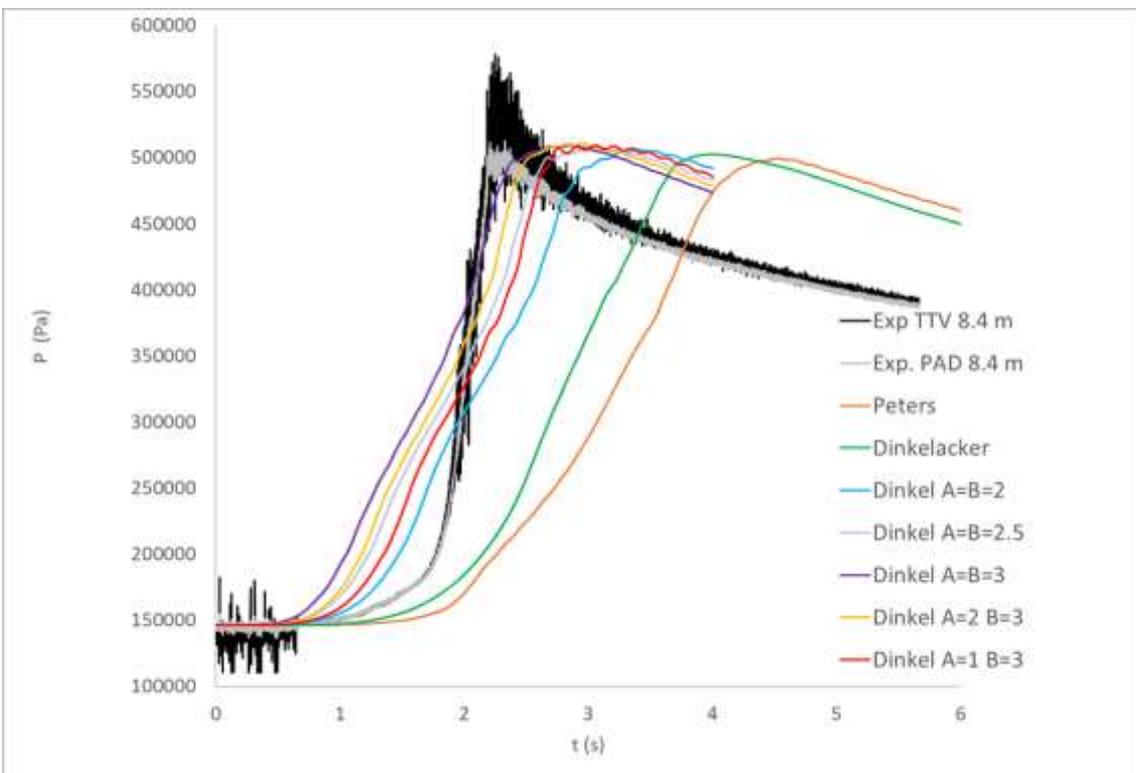


Abb. 4.102 Druckverlauf bei Simulation mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit

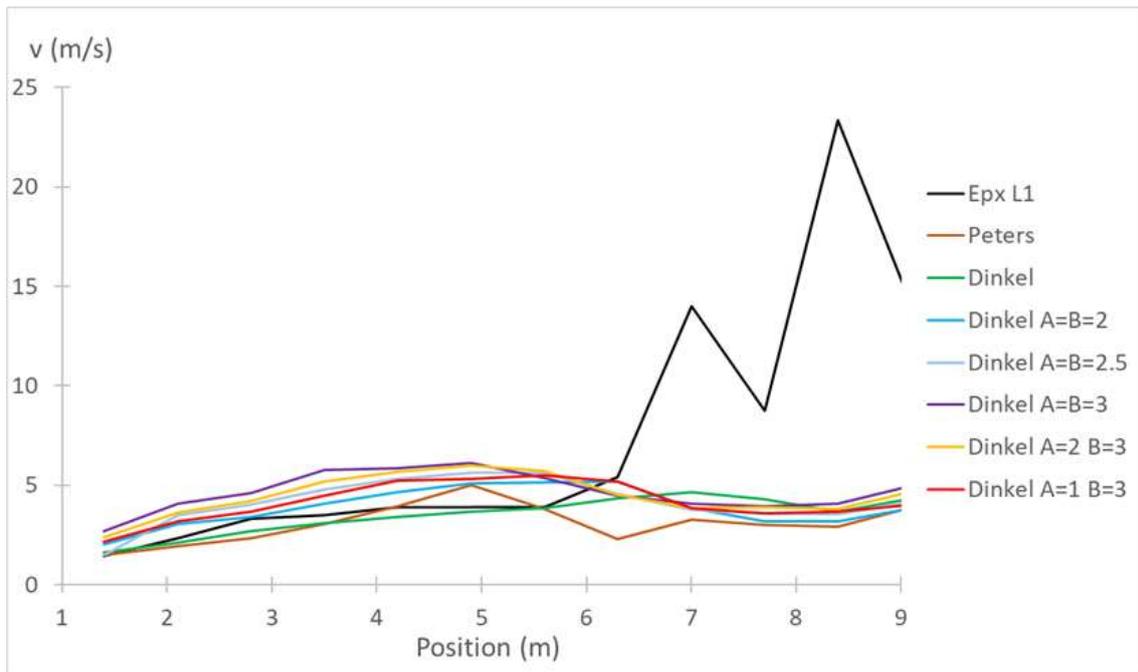


Abb. 4.103 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Linie L1

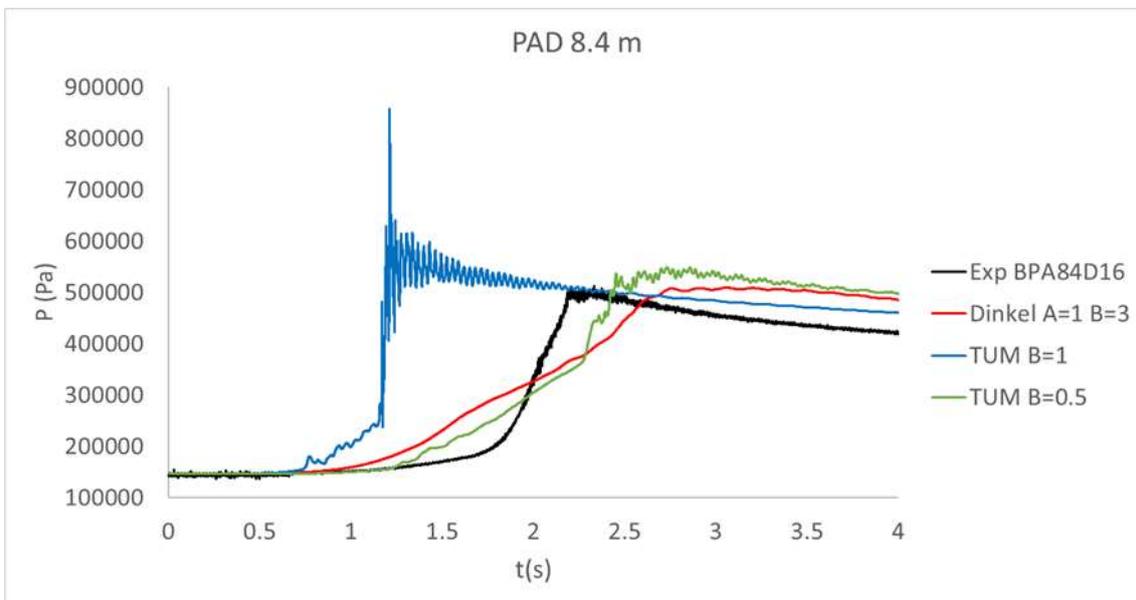
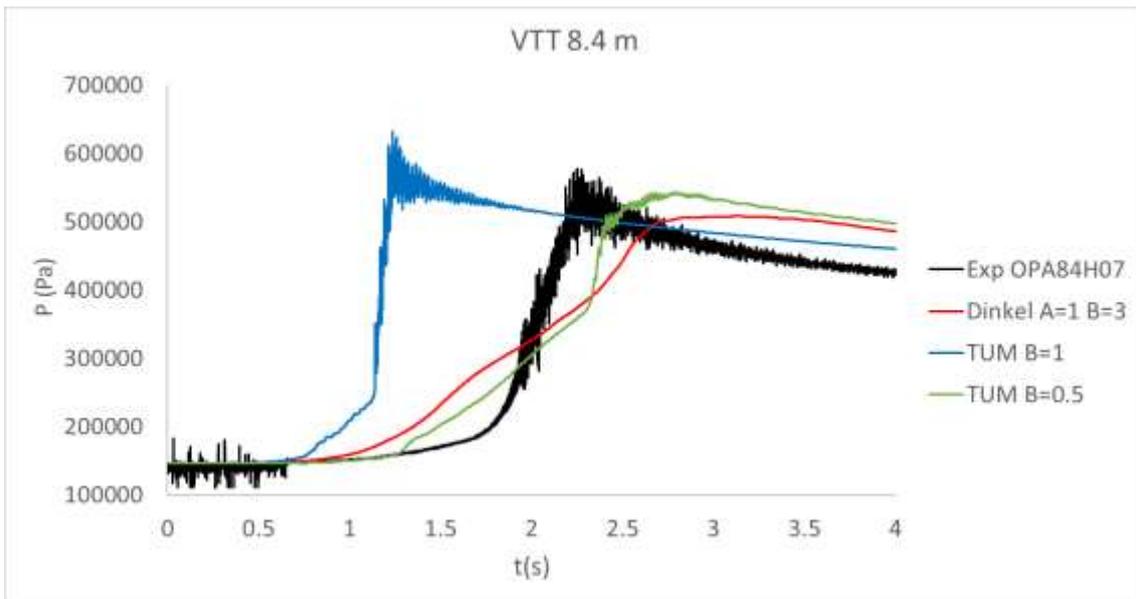


Abb. 4.104 Druckverlauf bei unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammgeschwindigkeit

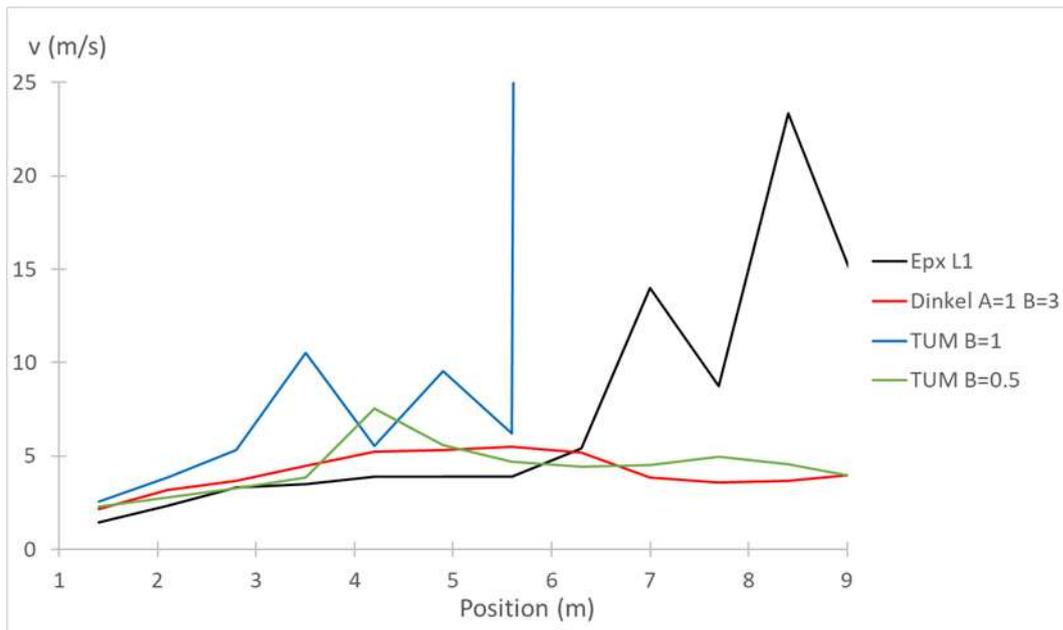


Abb. 4.105 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang Linie L1

4.2.2.7.3 Einfluss der Anfangsturbulenz

Auch beim HD-39-Experiment wurde die initiale Turbulenz nicht gemessen. Soweit nicht anders spezifiziert, wird die initiale Turbulenz mit $k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $vr = 10$ abgeschätzt. Um den Einfluss dieser Annahme zu untersuchen, wurde eine Simulation mit einer deutlich geringeren Anfangsturbulenz von $k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $vr = 0,1$ durchgeführt. Als Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit wurde die modifizierte Dinkelacker-Korrelation mit $A = 1$ und $B = 3$ gewählt. Es zeigt sich, dass eine höhere Anfangsturbulenz in der Anfangsphase zu einem schnelleren Druckaufbau (Abb. 4.106) und auch zu einer schnelleren Flammenausbreitung entlang der Mittelachse des VTT (Linie L1) führt (Abb. 4.107). Sobald ein Druck von etwa 2 bar erreicht wird, ist der mittlere Druckanstieg nicht mehr signifikant von der Anfangsturbulenz abhängig. Auch wenn der Druckanstieg in beiden Simulationen im späteren Verlauf ähnlich ist, so führen die Unterschiede in der Anfangsphase zu Abweichungen bei den Flammenfronten (Abb. 4.108). So verbleibt bei einer niedrigen Anfangsturbulenz lange unverbranntes Gas im unteren VTT (2,8 s, Flammenfront hat oberes Verbindungsrohr erreicht), während bei einer hohen Anfangsturbulenz frühzeitig das gesamte Gas im Sumpf des VTT verbrennt (1,4 s, Flammenfront hat ca. 4,5 m im VTT erreicht).

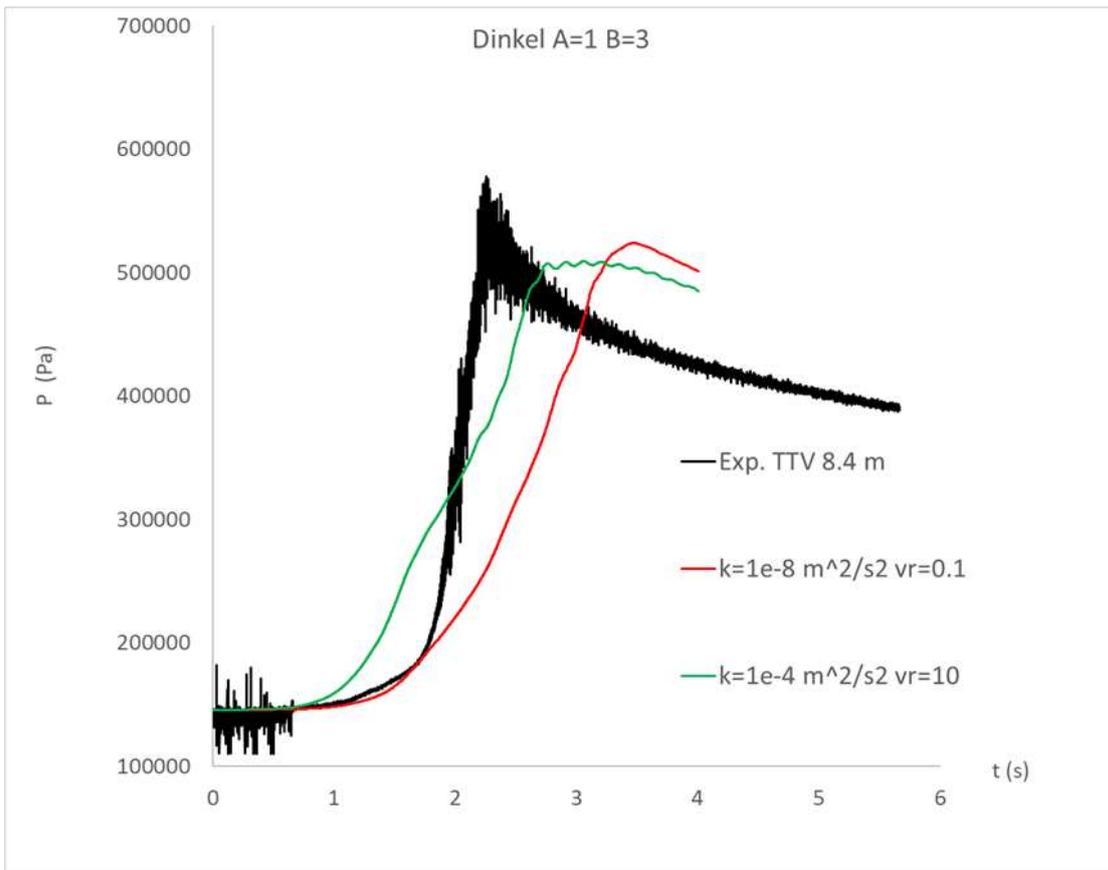


Abb. 4.106 Druckverlauf bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz

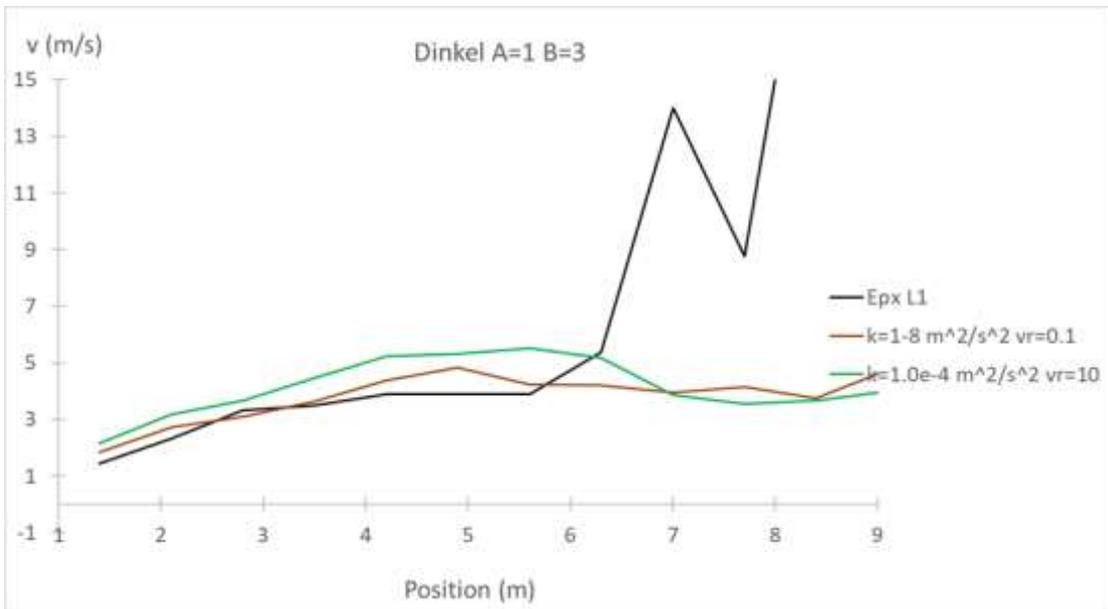
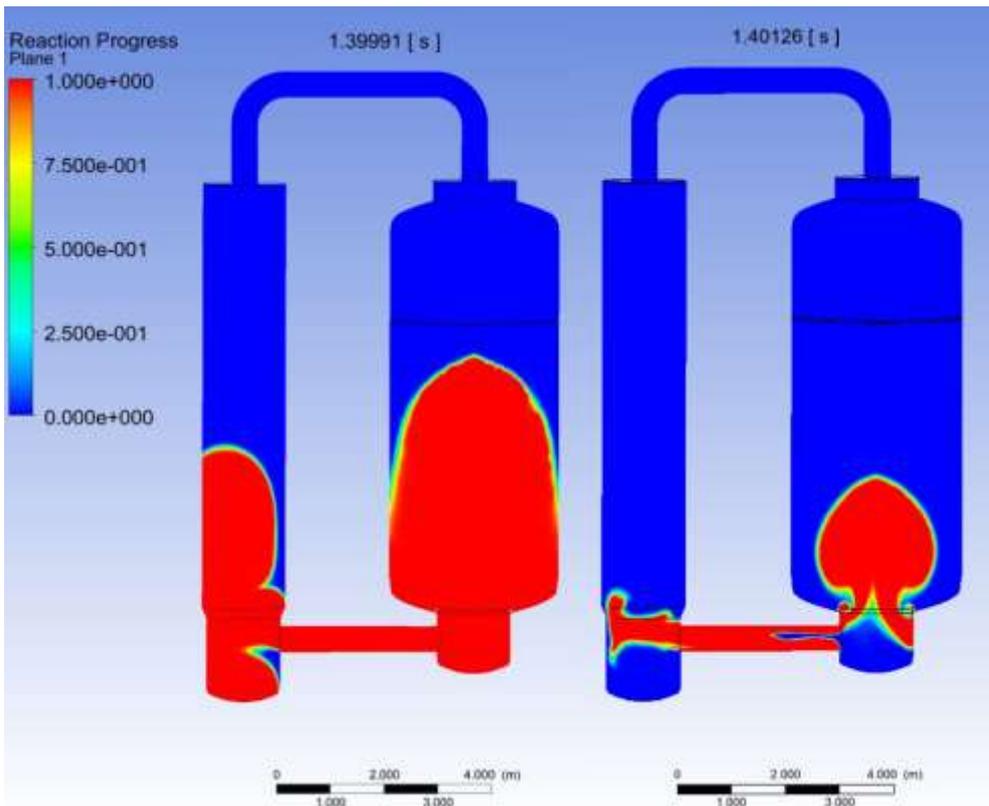
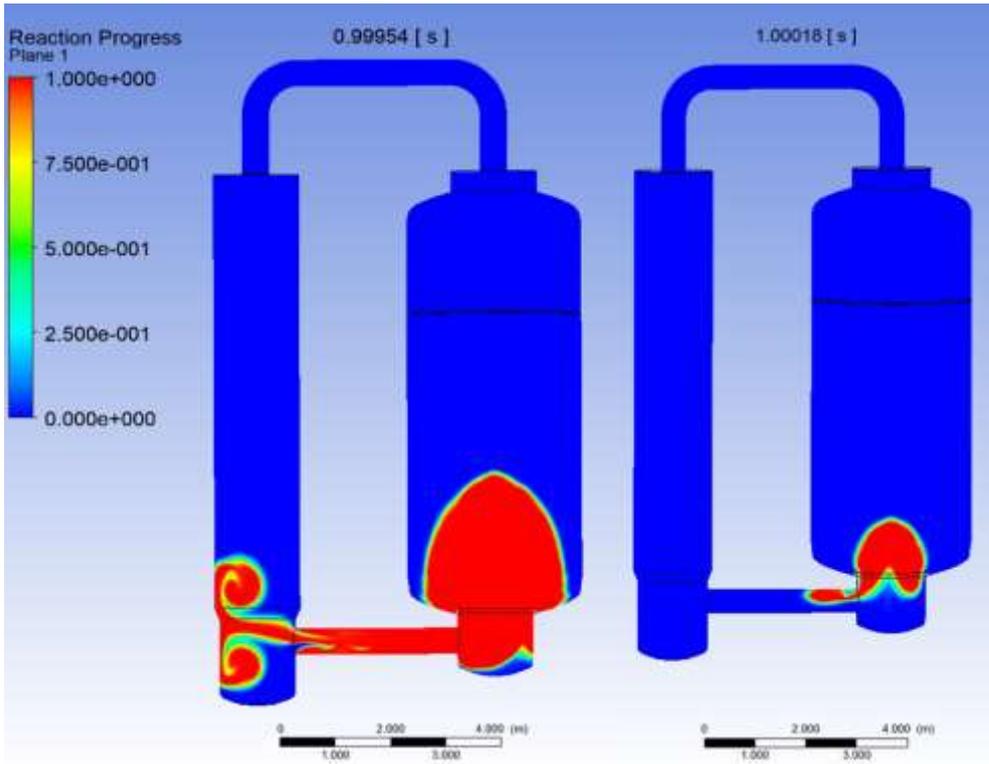


Abb. 4.107 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse des VTT (Linie L1) bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz



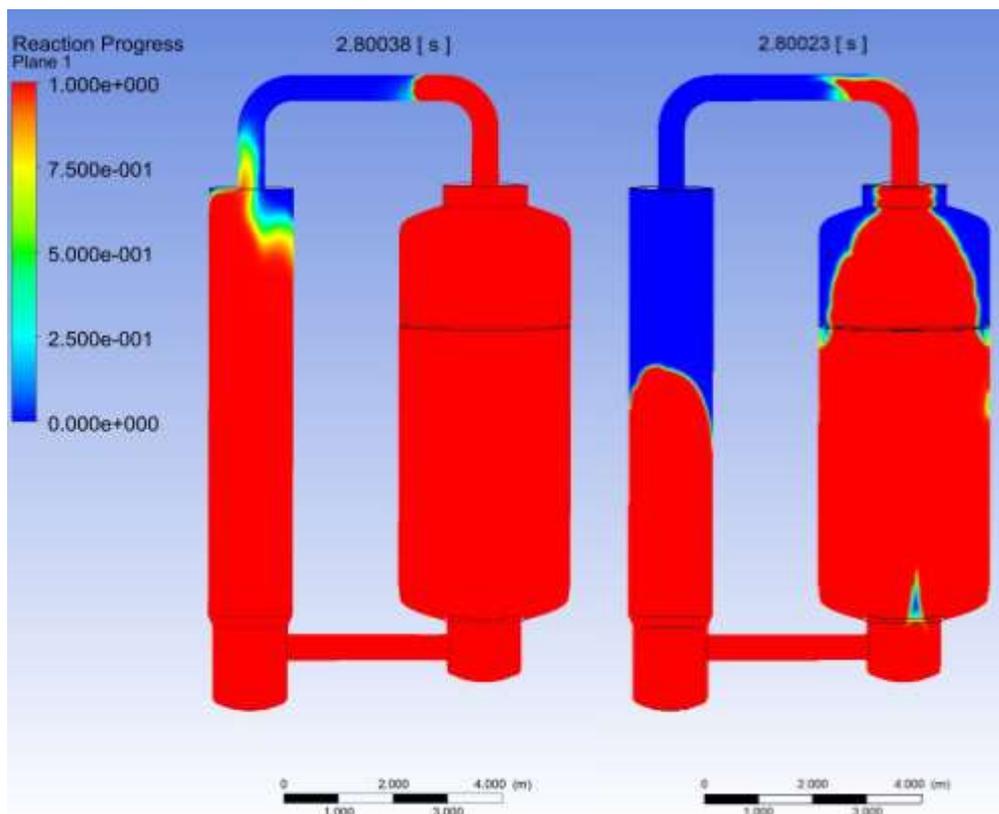
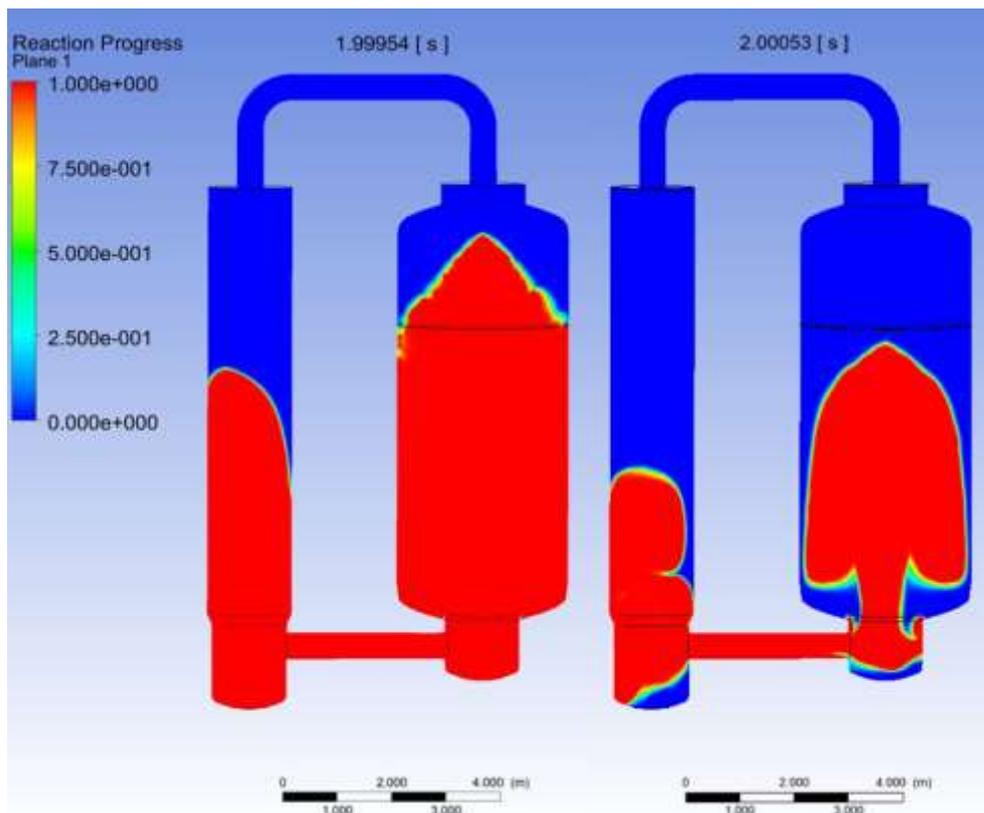


Abb. 4.108 Flammenfortschritt bei der modifizierten Dinkelacker-Korrelation ($A = 2$ und $B = 3$) bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz. Links: $k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ $\nu_r = 10$, rechts $k = 1,0e-8 \text{ m}^2/\text{s}^2$ $\nu_r = 0,1$

4.2.2.7.4 Einfluss der Berstmembran

Beim HD-39 befindet sich oberhalb des VTT-Behälters im Verbindungsrohr eine Berstmembran. Der maximale Öffnungsdruck beträgt 10 mbar. Es wurde eine Simulation durchgeführt, bei der diese Berstmembran in CFX modelliert wurde. Dabei kam das von ANSYS entwickelte Modell für Berstscheiben und Türen zum Einsatz. Als Öffnungsdruck wurde der Maximalwert 10 mbar angenommen. Bei diesem Modell wird unterstellt, dass sobald der Öffnungsdruck überschritten wird, kein Strömungshindernis mehr vorhanden ist, das z. B. Turbulenz generieren kann. Bei dieser Simulation wurde die Dinkelacker-Korrelation mit $A = B = 2,5$ und die Anfangsturbulenz $k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ $\nu = 10$ gewählt.

In der Simulation öffnet sich die Berstmembran nach 0,882 s. Es zeigt sich, dass die Modellierung der Berstmembran keinen signifikanten Einfluss auf den Druckverlauf hat (Abb. 4.109). Die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Linie L1 (Mittelachse VTT-Behälter) ist ebenfalls sehr ähnlich (Abb. 4.110).

Diese Untersuchung zeigt, dass die Vernachlässigung der Berstmembran nur einen geringen Einfluss auf das Simulationsergebnis hat, selbst wenn unterstellt wird, dass sie erst bei der maximalen Druckdifferenz öffnet. Diese Aussage gilt nur, wenn die Annahme gerechtfertigt ist, dass die Berstmembran nach Öffnen keinen Einfluss mehr auf die Strömung hat. Sollte auch die geöffnete Membran noch ein turbulenzgenerierendes Strömungshindernis darstellen, so wäre mit einer stärkeren Beschleunigung der Verbrennung im oberen Verbindungsrohr zu rechnen.

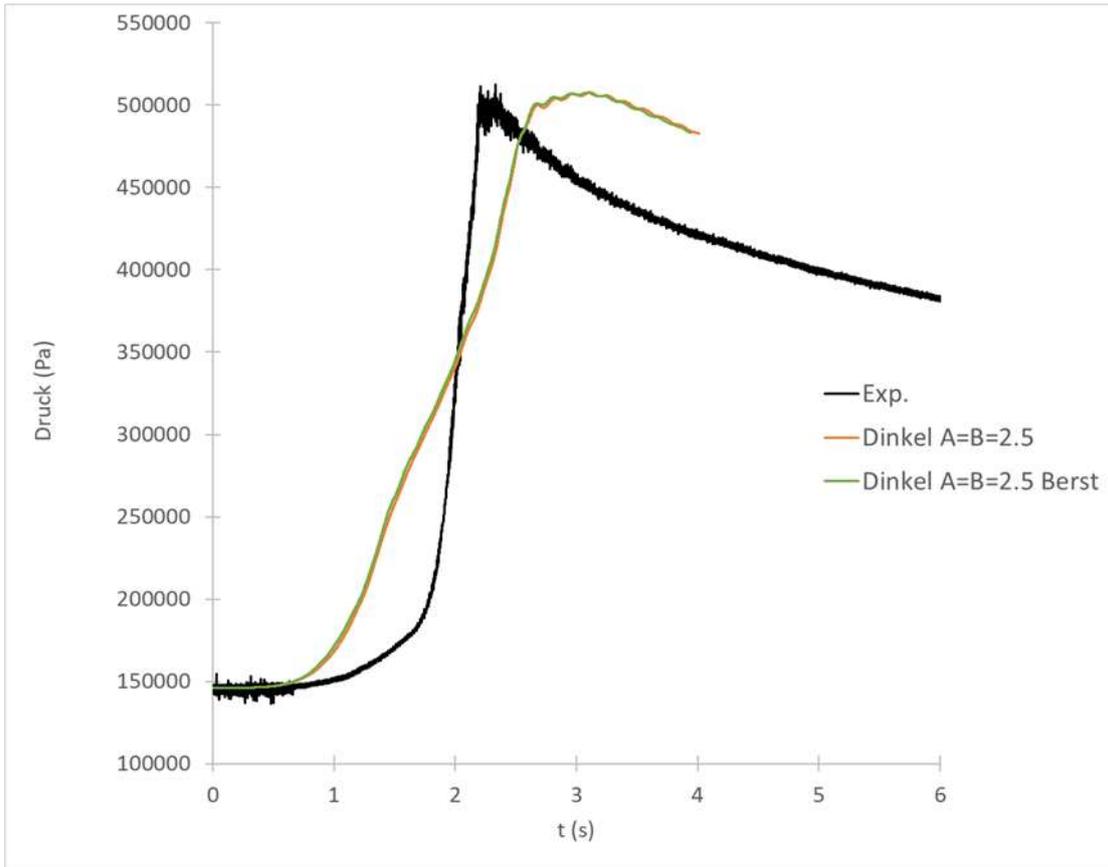


Abb. 4.109 Druckverlauf (VTT-Behälter unten) in Abhängigkeit von der Modellierung der Berstmembran

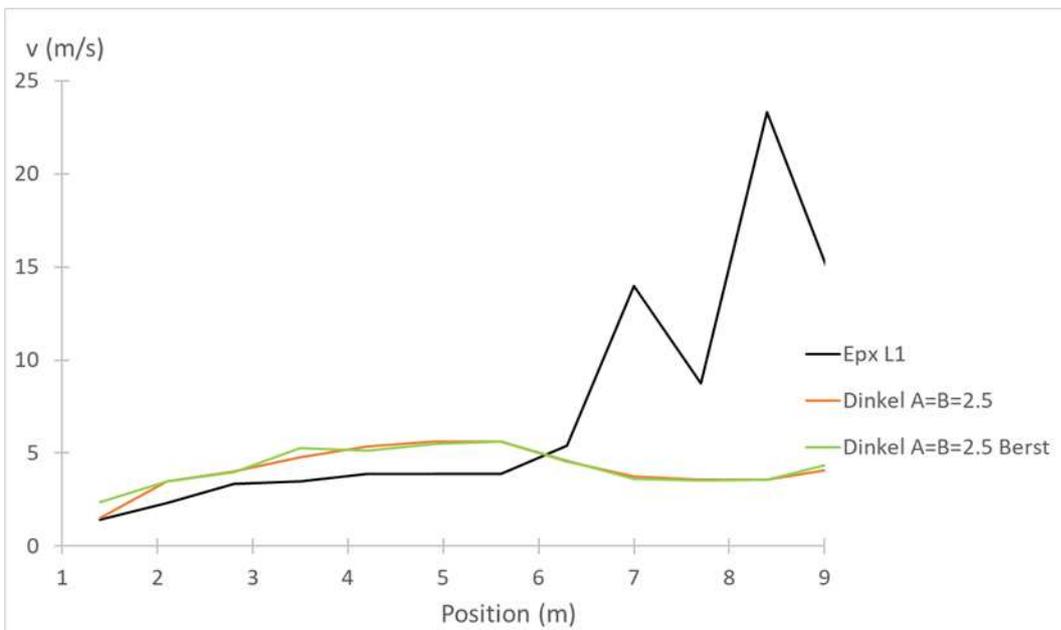


Abb. 4.110 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Linie L1 mit und ohne Modellierung der Berstmembran

4.2.2.7.5 Zusammenfassung HD-39

Der Versuch HD-39 wurde mit unterschiedlichen Korrelationen (Peters, modifizierte Dinkelacker, TUM) für die turbulente Flammengeschwindigkeit nachgerechnet. Mit keiner der getesteten Korrelationen konnte der Versuch vollständig richtig nachgerechnet werden. Da die Flammenverlöschung aufgrund von Wärmeverlusten an die Wände oder aufgrund von Turbulenz nicht modelliert werden konnte, wird für alle Versuche eine vollständige H_2 -Verbrennung im Gegensatz zum Experiment berechnet. Dies beeinflusst nicht nur den Maximaldruck, sondern auch den Ablauf des Verbrennungsvorgangs, da sich die Flammenausbreitung durch den VTT- und den PAD-Behälter über den Druckaufbau und die resultierenden Gasströmungen gegenseitig beeinflussen.

Die Peters- und die Dinkelacker-Korrelation berechnen eine zu langsame Verbrennung. Mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation ($B = 3$) konnte eine zufriedenstellende Übereinstimmung erzielt werden, der Druckanstieg erfolgt aber noch zu langsam. Der Koeffizient A in der modifizierten Dinkelacker-Korrelation spielt nur in der Anfangsphase eine signifikante Rolle. Eine Parameterstudie zeigt, dass die unbekannte Anfangsturbulenz in der Anfangsphase entscheidend ist für den Beginn des signifikanten Druckanstiegs. Deshalb ist das Experiment zur Anpassung dieses Koeffizienten A nur bedingt geeignet. Mit $A = 1$ und einer unterstellten Anfangsturbulenz $1,0e-8 \text{ m}^2/\text{s}^2$ $v_r = 0,1$ kann die Anfangsphase des Experiments in guter Übereinstimmung simuliert werden.

Mit der TUM-Korrelation und $B = 0,5$ konnte die beste Übereinstimmung erzielt werden.

Bis zum Erreichen eines Drucks von 3,6 bar entspricht der Druckanstiegsverlauf in etwa dem der modifizierten Dinkelacker-Korrelation mit $A = 1$ und $B = 3$ und ist damit schwächer als im Experiment. Danach beschleunigt sich der Druckanstieg und er ist sogar etwas schneller als im Versuch. Die Simulation mit der TUM-Korrelation mit $B = 1$ führt zu einer signifikanten Überschätzung der Verbrennungsgeschwindigkeit. Der Druckanstieg ist viel schneller als im Experiment und es kommt zur Ausbildung von Druckspitzen insbesondere im PAD-Behälter.

4.2.2.8 ENACCEF2 Versuche

4.2.2.8.1 Versuchaufbau

Die ENACCEF2-Versuchsanlage /BEN 19/ besteht aus einem 7,65 m langen Beschleunigungsrohr mit einem Innendurchmesser von 23 cm (Abb. 4.111). In das Beschleunigungsrohr wurden im Höhenbereich 0,64 m – 2,48 m 9 ringförmige Hindernisse eingebracht. Das Blockadeverhältnis der Hindernisse (BR) beträgt bei allen hier untersuchten Versuchen 0,63. Das Blockadeverhältnis 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. Im Gegensatz zur ENACCEF-Anlage besteht bei ENACCEF2 die Möglichkeit, die Außenwände des Beschleunigungsrohres aufzuwärmen. Dies ermöglicht es, den Einfluss der Anfangstemperatur auf die Verbrennung zu untersuchen und es ist möglich, Versuche mit höheren initialen Dampfkonzentrationen durchzuführen. An 27 Messstellen wurde mit Photomultipliern die Flammenankunftszeit gemessen. Aus den Flammenankunftszeiten lässt sich die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bestimmen, die im Folgenden zum Vergleich Experiment / Simulation herangezogen wird. Es gibt auf unterschiedlichen Höhen Druckmessungen (1,28 m, 5,53 m, 6,38 m, 7,65 m), die ebenfalls für den Vergleich mit Simulationen herangezogen werden. Für den Versuch der Verbrennung von 13 vol-% H_2 in Luft bei $T_{ini} = 20\text{ °C}$ wurden vier Wiederholungsexperimente durchgeführt (Abb. 4.112).

Der qualitative Verlauf mit der Beschleunigung an den Hindernissen und der anschließenden Verlangsamung der Flammenausbreitung stimmt in allen 4 Experimenten überein. In allen 4 Experimenten wird eine maximale Geschwindigkeit von etwas mehr als 500 m/s beobachtet. Der exakte Verlauf unterscheidet sich allerdings in den Experimenten. Dies ist beim Vergleich Experiment / Simulation zu berücksichtigen. Bei den Experimenten zeigt sich, dass bis zum Ende des Experiments der Druck sich an den unterschiedlichen Messstellen nicht angleicht (Abb. 4.113). Dies erscheint nicht physikalisch, es handelt sich hierbei vermutlich um Messfehler, die sich aufgrund der Erhitzung der Drucksensoren einstellen /GRO 17/. Bei den Simulationen ist der Druck am Ende der Simulation an allen Messstellen bis auf schwache Oszillationen gleich (Abb. 4.114).

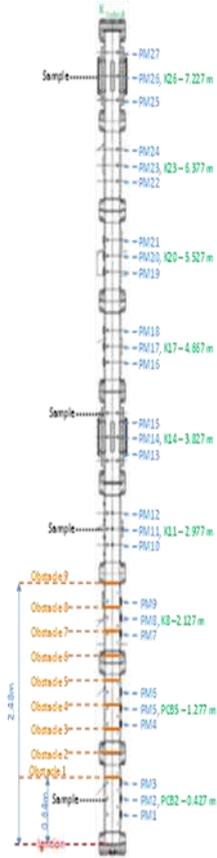


Abb. 4.111 Links: ENACCEF2-Versuchsanlage Mitte: schematischer Aufbau, rechts: in den Verbrennungskanal eingebrachte Hindernisse /BEN 19/

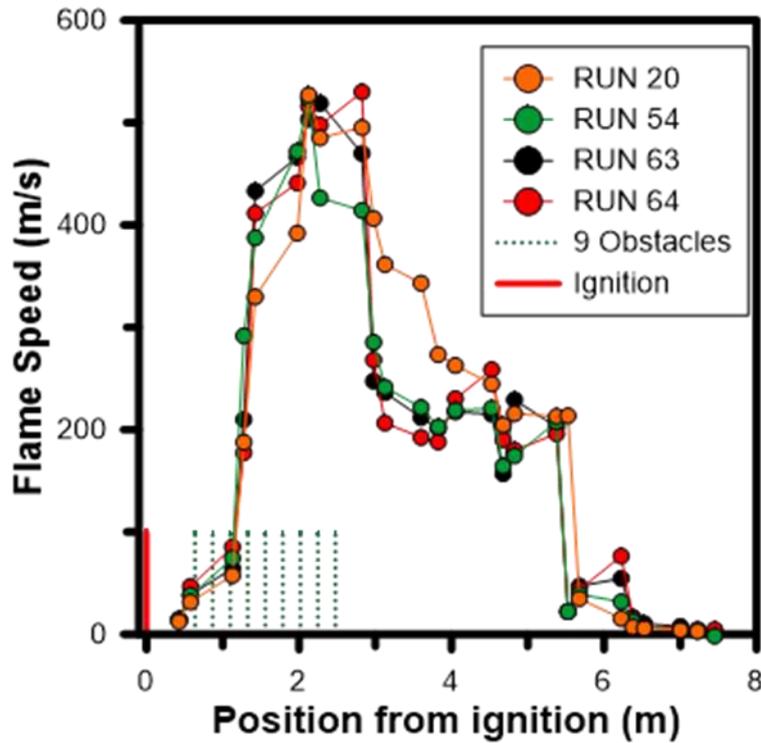


Abb. 4.112 ENACCEF2-Wiederholungsexperimente für die Verbrennung von 13 vol-% H₂ in Luft mit $T_{ini} = 20\text{ °C}$, /STU 20/, /BEN 18/

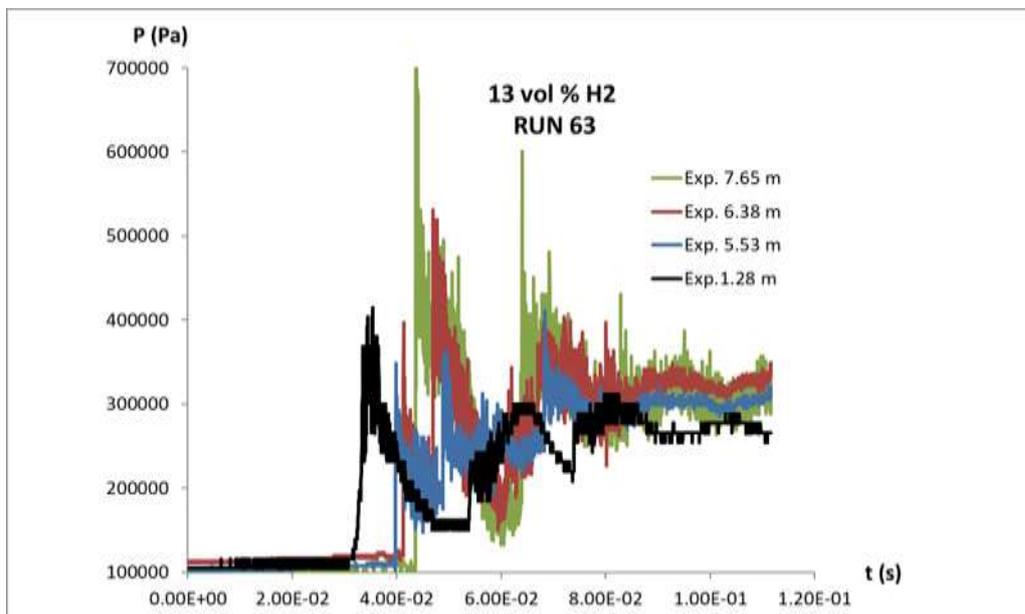


Abb. 4.113 Druck an unterschiedlichen Messstellen beim Experiment RUN 63

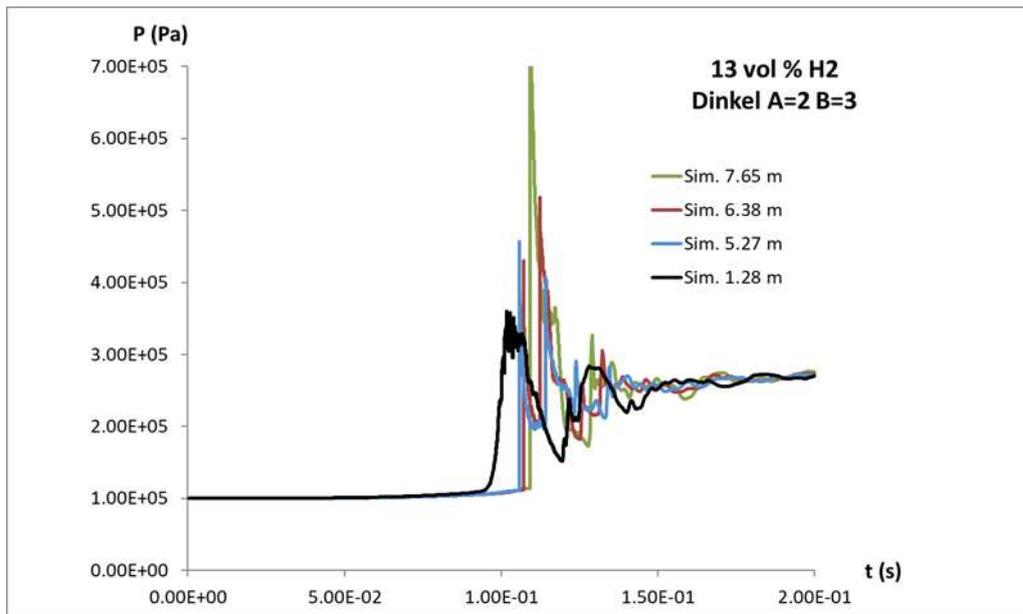


Abb. 4.114 Druck an unterschiedlichen Messstellen bei der Simulation mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation ($A = 2$ $B = 3$)

4.2.2.8.2 Studie zur Gitterabhängigkeit der Lösung

Für die ENACCEF2-Versuche wurde eine Studie durchgeführt, um den Einfluss des CFD-Gitters auf die Lösung zu untersuchen. Für diese Untersuchung wurde der Versuch 13 vol-% H_2 in Luft bei $T_{ini} = 20$ °C ausgesucht. Als Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit wurde die modifizierte Dinkelacker-Korrelation mit $A = 2$ $B = 3$ ausgewählt. Es wurden drei strukturierte CFD-Gitter ausgewählt, bei denen der gesamte 3-dimensionale (im Folgenden 3D abgekürzt) Brennraum im Gitter abgebildet wird. Das feinste Gitter enthält ca. 18 Millionen Zellen, das mittlere Gitter 2,3 Millionen Zellen und das größte ca. 0,287 Millionen Zellen. Bei allen Gittern wurde im Bereich der Hindernisse verfeinert. Es wurden auch Simulationen mit einem quasi 2-dimensionalen (im Folgenden 2D abgekürzt) Gitter durchgeführt. Bei diesem Gitter wird eine Rotationssymmetrie des Gitters unterstellt. Die Feinheit dieses 2D-Gitters entspricht in den beiden aufgelösten Raumrichtungen bis auf geringe Abweichungen dem feinsten 3D-Gitter. Es besteht aus etwa 0,3 Millionen Zellen.

Die beiden feinsten 3D-Gitter führen zu sehr ähnlichen Simulationsergebnissen. Die Flammenbeschleunigung und auch die Verlangsamung werden sehr ähnlich berechnet (Abb. 4.115). Der Druckverlauf an den Messstellen ist ebenfalls sehr ähnlich (Abb. 4.116). Sowohl die Höhe wie auch die Form der Druckpeaks sind sehr ähnlich. Die einzige signifikante Abweichung ergibt sich in der Position der Peaks. Im Fall des

feinsten CFD-Gitters werden die Druckmaxima etwas früher erreicht. Ein Vergleich der Flammenankunftszeiten zeigt, dass sich diese Verschiebung im Wesentlichen zu Beginn der Simulation einstellt (Vergleich der Flammenankunftszeit bei $h = 0,27$ m: $0,0583$ s / $0,0539$ s). Die Simulation mit dem größten 3D-Gitter führt dagegen zu deutlich anderen Ergebnissen. Die maximale Flammenausbreitungsgeschwindigkeit wird signifikant unterschätzt. Entsprechend unterscheidet sich auch der Druckverlauf dieser beiden Simulationen deutlich. Die Simulationen mit dem 2D-Gitter führen zu sehr ähnlichen Ergebnissen wie die beiden 3D-Simulationen mit feinem Gitter. Deshalb wurden Parameterstudien z. B. zum Einfluss der Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit in der Regel mit dem 2D-Gitter durchgeführt. Dies führte zu einer großen Rechenzeiterparnis.

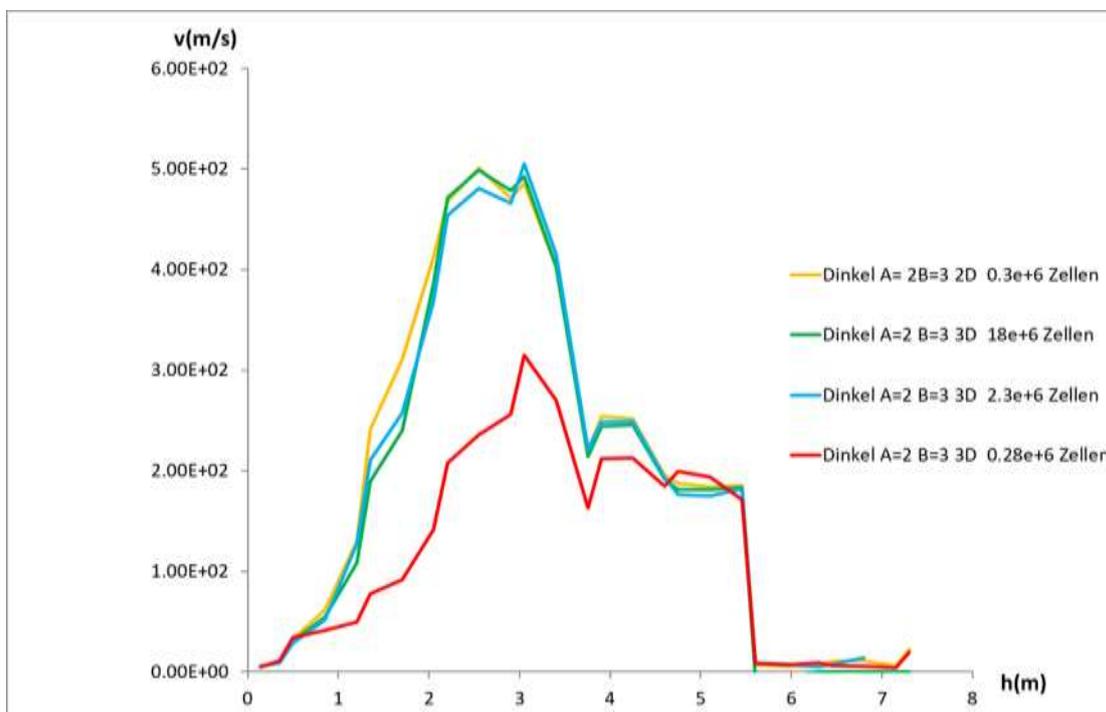


Abb. 4.115 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei Verwendung unterschiedlicher CFD-Gitter

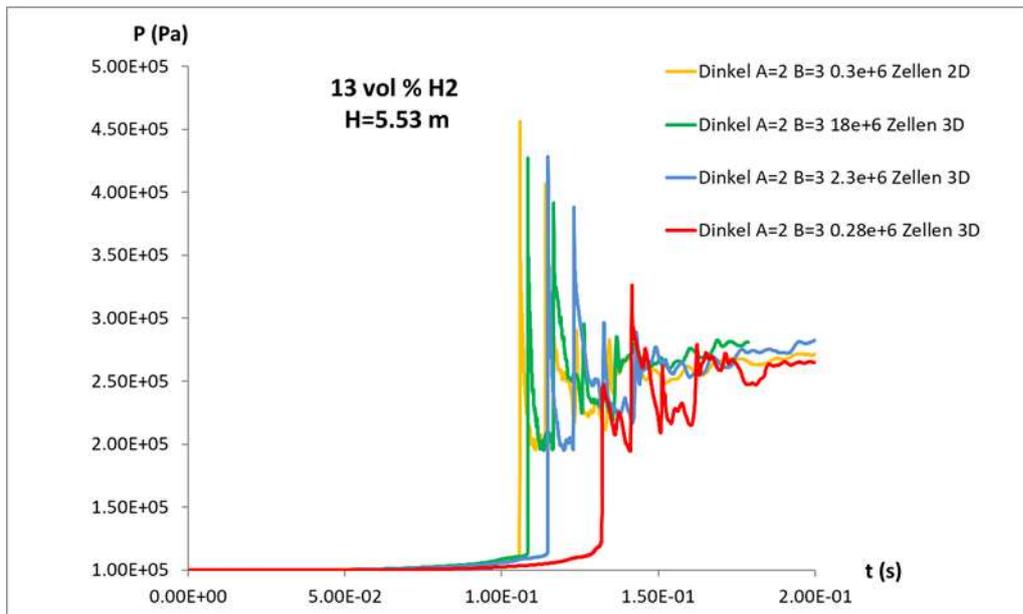


Abb. 4.116 Druck in 5,53 m Höhe bei unterschiedlichen CFD-Gittern

4.2.2.8.3 Allgemeine Anmerkungen zum Vergleich zwischen Simulation und Experiment

Eine zentrale Größe beim Vergleich von Experiment und Simulation ist die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit. Bei den ENACCEF2-Experimenten wird mittels Temperaturmessung an 27 Positionen die Ankunft der Flammenfront bestimmt. In den Simulationen wird an denselben Positionen die Ankunft der Flamme durch den Anstieg der Reaktionsfortschrittsvariable bestimmt. Üblicherweise kommt es – sobald die Flammenfront den Monitorpunkt erreicht hat – zu einem schnellen Anstieg der Reaktionsfortschrittsvariable (RPV) von 0 auf 1 (Abb. 4.117: PM01, PM08 und PM27). Sobald sie den Wert 0,05 überschritten hat, wird davon ausgegangen, dass die Flammenfront den Punkt erreicht hat. Bei den hier simulierten ENACCEF2-Versuchen kommt es zu einer sehr schnellen Verbrennung mit Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten von mehreren 100 m/s. Diese schnelle Verbrennung führt zu Druckwellen, die sich durch das Beschleunigungsrohr bewegen und an den Enden reflektiert werden. Die Druckwellen führen zu einer zusätzlichen Bewegung der Flammenfront. Sie können dazu führen, dass die Flamme sich kurzzeitig nach unten bewegt. Dies ist in Abb. 4.118 erkennbar. Nach 0,112 s hat die Flamme die Höhe von 5,6 m erreicht, 5 ms später befindet sie sich 40 cm tiefer auf einer Höhe von 5,2 m. Die Reaktionsfortschrittsvariable nimmt in einem solchen Fall wieder ab, um dann zu einem späteren Zeitpunkt wieder anzusteigen. Dieser Effekt wird bei der Auswertung der Flammenankunftszeiten nicht berücksichtigt. Es wird als Flammenankunftszeit der Zeitpunkt verwendet, an dem zum ersten Mal der

Schwellenwert überschritten wird. Üblicherweise hat die Wahl des Schwellenwerts keinen signifikanten Einfluss, da der Anstieg der Reaktionsfortschrittsvariablen von 0 auf 1 sehr schnell erfolgt (Abb. 4.117, z. B. PM01). Beim Auftreten von Druckwellen kann es aber vorkommen, dass der Wert 1 beim ersten Anstieg nicht erreicht wird (Abb. 4.117, z. B. PM21 (erster Peak (RPV~0,1) bei 0,18 s, 2. Anstieg bei 0,235 s bis auf RPV = 1)). In einem solchen Fall kann sich je nach Wahl des Grenzwertes eine deutlich unterschiedliche Flammenankunftszeit ergeben (hier ~0,18 s bzw. ~ 0,235 s).

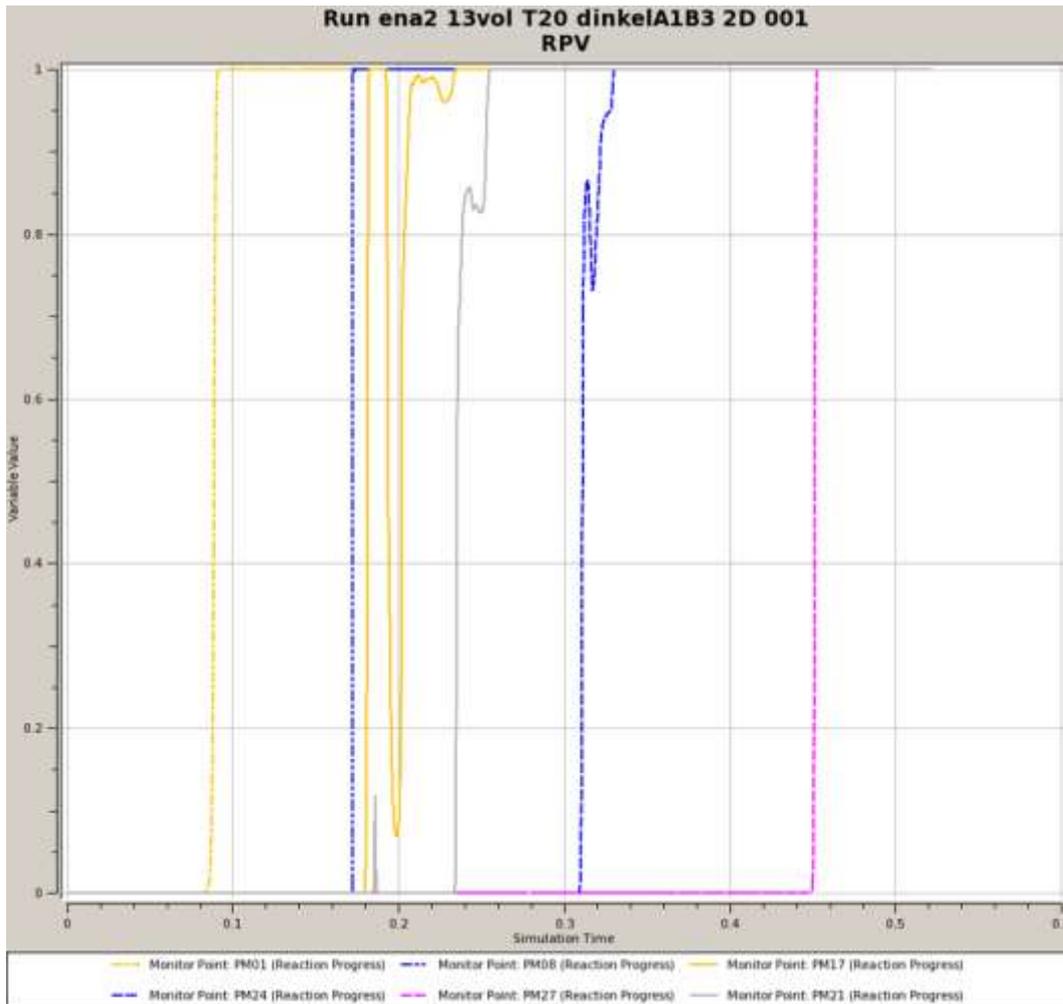


Abb. 4.117 Zeitlicher Verlauf der Reaktionsfortschrittsvariablen an Monitorpunkten auf unterschiedlicher Höhe (PM01 = 0,28 m, PM08 = 2,13 m, PM17 = 4,68 m, PM21 = 5,68 m, PM27 = 7,45 m)

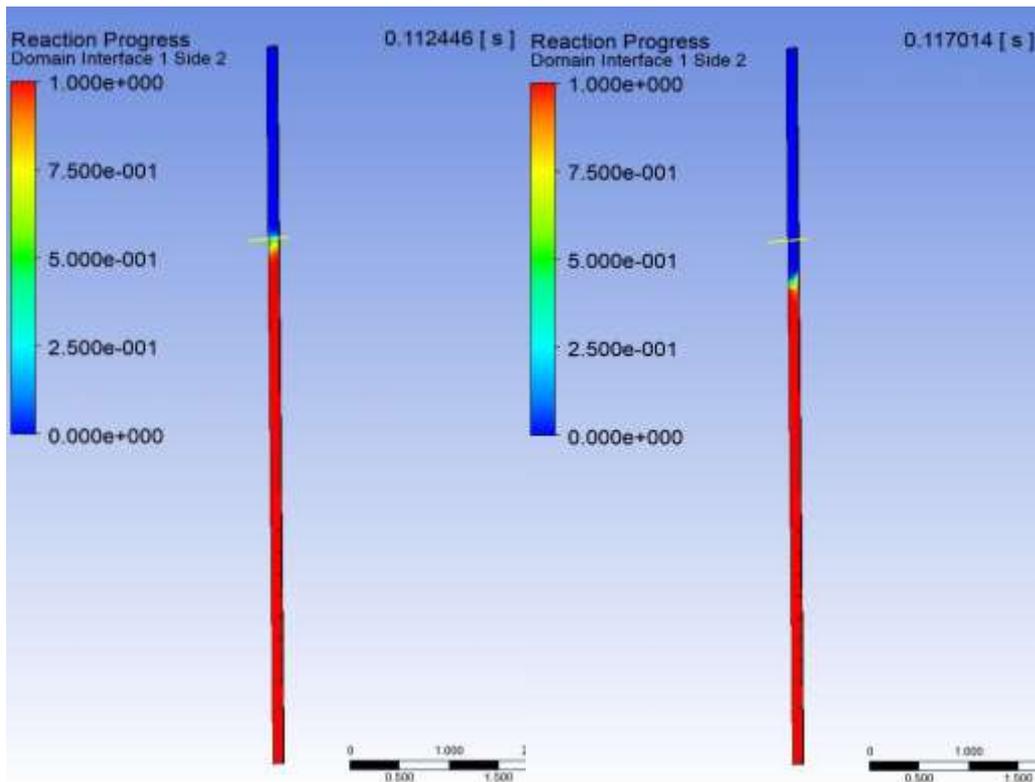


Abb. 4.118 Reaktionsfortschrittsvariable in der Simulation des Versuchs mit 13 vol-% H_2 in Luft mit $T_{ini} = 20\text{ °C}$

4.2.2.8.4 Parameterstudie zum Einfluss der Anfangsturbulenz

Auch für die ENACCEF2-Experimente wird im Folgenden untersucht, wie sich die unbekannte Anfangsturbulenz auf das Simulationsergebnis auswirkt. Die Annahme einer initialen Turbulenz von $k = 1,0e-4\text{ m}^2/\text{s}^2$ erscheint unrealistisch hoch, da dies einer turbulenten Schwankung in der Größenordnung von 1 cm/s entspricht. Bei einem Rohr mit einem Druckmesser von 23 cm ohne erkennbare Turbulenzquelle und ruhender Strömung ist dies ein zu hoher Wert. Es wurden zwei Simulationen mit unterschiedlicher Anfangsturbulenz durchgeführt; eine mit der CFX-Einstellung „Low Intensity = 1 %“ und eine mit der Einstellung „High Intensity = 10 %“. Dies entspricht $k = 1,5e-8\text{ m}^2/\text{s}^2$ $\epsilon = 1,2e-12\text{ m}^2/\text{s}^3$ und $k = 1,5e-6\text{ m}^2/\text{s}^2$ $\epsilon = 1,2e-10\text{ m}^2/\text{s}^3$.

Es zeigt sich eine nur schwache Abhängigkeit der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von der Anfangsturbulenz (Abb. 4.119). Im Falle einer hohen Anfangsturbulenz wird eine um etwa 20 m/s höhere maximale Flammenausbreitungsgeschwindigkeit gemessen, was einer relativen Abweichung um $\sim 4\%$ entspricht. Die Höhe der Druckpeaks ist ebenfalls kaum von der Anfangsturbulenz abhängig (Abb. 4.120). Allerdings erfolgen die Druckspitzen bei der Simulation mit der niedrigen Anfangsturbulenz etwas später. Der

Grund ist, dass zu Beginn, bevor die Flamme die Hindernisse erreicht hat, die Anfangsturbulenz die Verbrennung deutlich beeinflusst. Die Flamme erreicht den Messpunkt in 0,277 m Höhe im Fall einer niedrigen Anfangsturbulenz nach 0,0544 s, bei hoher Anfangsturbulenz dagegen schon nach 0,044 s.

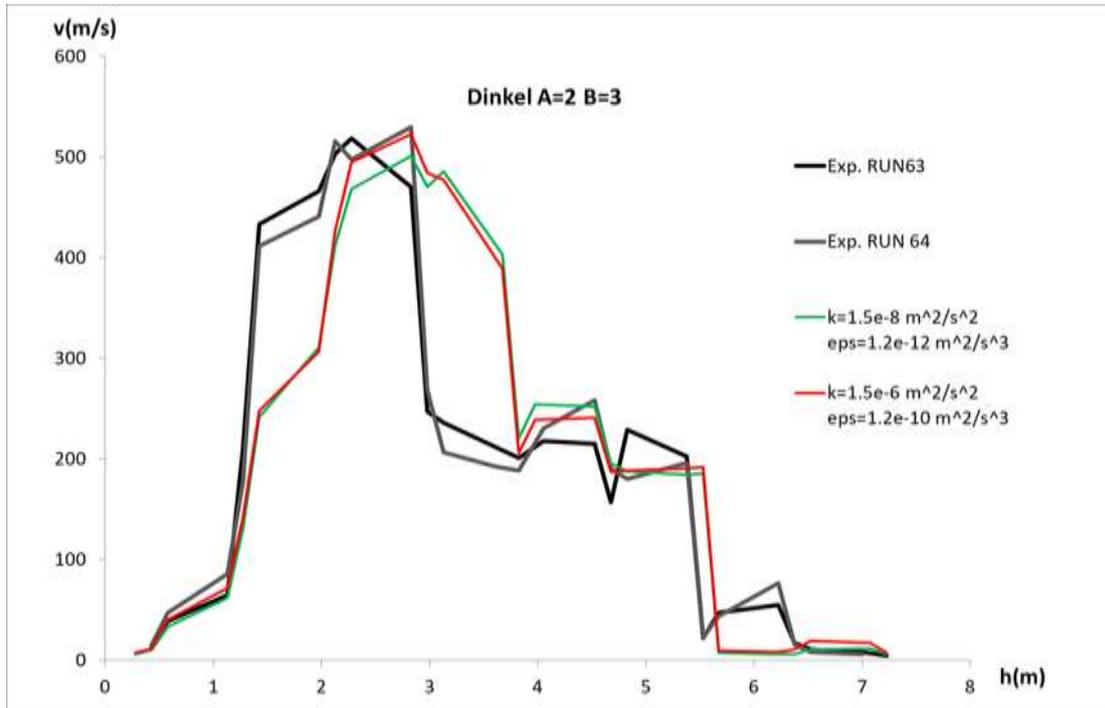


Abb. 4.119 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz bei Simulation mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation A = 2, B = 3

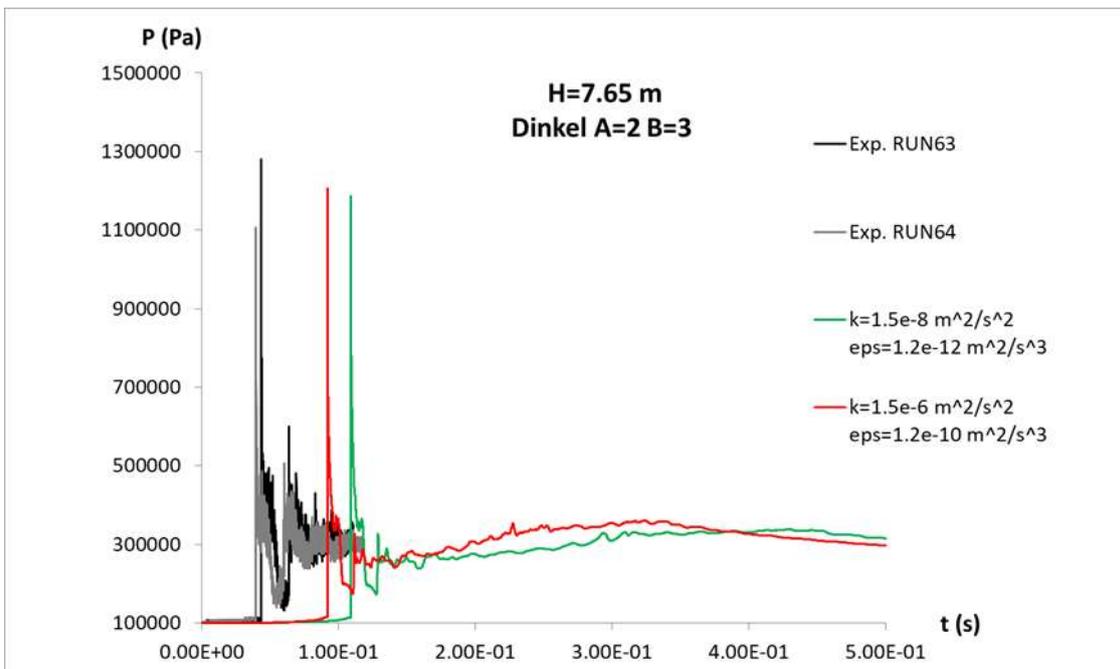
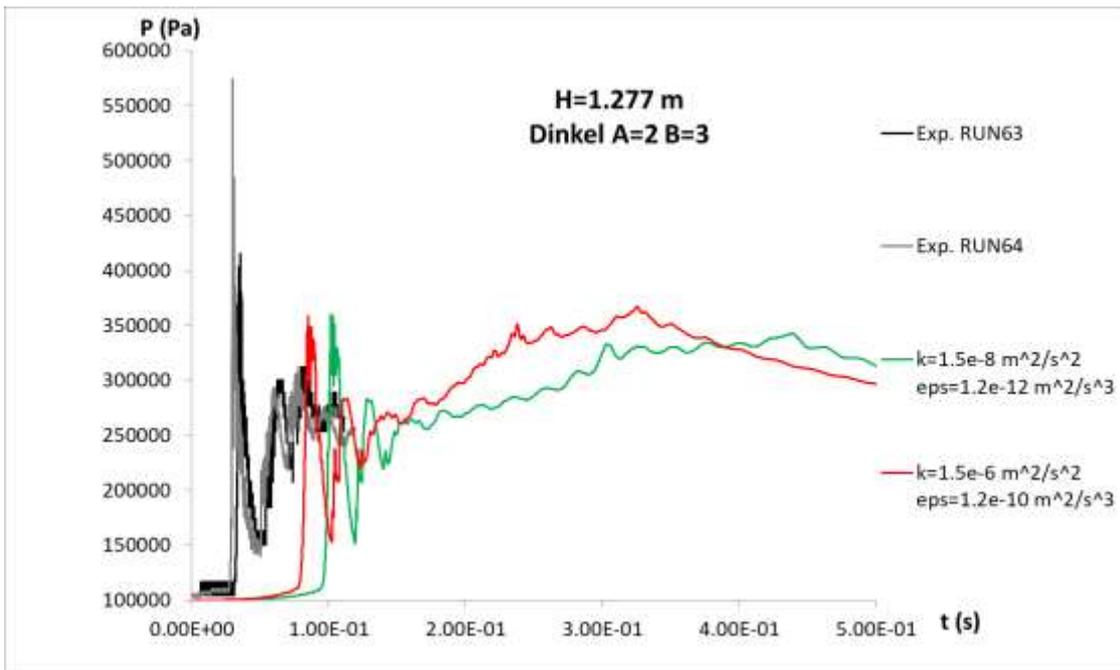


Abb. 4.120 Druck bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz bei Simulation mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation $A = 2$, $B = 3$

4.2.2.9 Verbrennung von 13 vol-% H_2 in Luft bei $T_{ini} = 20 \text{ }^\circ\text{C}$ in ENACCEF2

4.2.2.9.1 Vergleich der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit

Die Versuche mit der Verbrennung von 13 vol-% H_2 in Luft, $T_{ini} = 20 \text{ }^\circ\text{C}$ wurden mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit nach-

gerechnet. Bei den Nachrechnungen wurde eine niedrige Anfangsturbulenz ($k = 1,5e-8 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\varepsilon = 1,2e-12 \text{ m}^2/\text{s}^3$) unterstellt. Der GRS liegen nur die experimentellen Messwerte der Experimente RUN63 und RUN64 in elektronischer Form vor. Deshalb werden nur sie in dem Vergleich Experiment / Simulation dargestellt.

Die Simulation mit der Dinkelacker-Korrelation berechnet eine deutlich zu langsame Verbrennung (Abb. 4.121). Die Peters-Korrelation und die modifizierten Dinkelacker-Korrelationen mit $2 \leq A$, $B \leq 3$ sind in der Lage, das Experiment in guter Übereinstimmung nachzurechnen.

In der Anfangsphase (bis zu 0,85 m Höhe) berechnet die Simulation mit der Peters-Korrelation und der modifizierten Dinkelacker-Korrelation ($A = 1$, $B = 3$) eine langsamere Flammenausbreitung als im Experiment. Mit $A \geq 2$ wird am Anfang dagegen eine gute Übereinstimmung erzielt. Wie schon bei den THAI-Experimenten wird die Geschwindigkeit der Flammenausbreitung unmittelbar nach Zündung insbesondere von der Wahl der Konstante A in der modifizierten Dinkelacker-Korrelation beeinflusst.

Mit der Peters-Korrelation wird die Maximalgeschwindigkeit etwas überschätzt. Die Simulation mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation und $A = B = 2$ berechnet eine etwas zu langsame Flammenausbreitungsgeschwindigkeit und deren Maximum ist leicht zu einer höheren Position im Beschleunigungsrohr verschoben. Die Simulationen mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation $B \geq 2,5$ berechnen alle eine sehr ähnliche Flammenbeschleunigung. Sowohl die maximale Geschwindigkeit als auch deren Position wird in sehr guter Übereinstimmung mit den Experimenten simuliert. Die Unterschiede liegen in der Größenordnung der Abweichungen, die sich aus der unbekanntem Anfangsturbulenz ergeben.

Alle Simulationen berechnen einen langsameren Geschwindigkeitsabfall als er bei RUN63 und RUN64 gemessen wird. Lediglich das Experiment RUN20 zeigt einen ähnlich langsamen Abfall wie die Simulationen. Für die Höhe 4 m – 5,5 m berechnen alle Simulationen Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten in der Größenordnung von 200 m/s. In Anbetracht der Unsicherheiten bei der Bestimmung der Flammenankunftszeit aufgrund der durch das Beschleunigungsrohr propagierenden Druckwellen (siehe Abschnitt 4.2.2.8.3) und der Unterschiede bei den Wiederholungsexperimenten ist die Übereinstimmung mit dem Experiment auch für diesen Bereich gut.

Bei den Experimenten RUN63 und RUN64 wird bei einer Höhe von 5,5 m bis 6,5 m eine Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von 40 m/s – 75 m/s gemessen. Bei den anderen beiden Wiederholungsexperimenten werden dagegen deutlich geringere Geschwindigkeiten gemessen, was eher mit den Simulationsergebnissen übereinstimmt.

4.2.2.9.2 Vergleich der Flammenankunftszeiten

Aus den vorliegenden Unterlagen kann der Zündzeitpunkt im Experiment nicht eindeutig bestimmt werden. Laut experimentellen Flammenankunftszeiten ist $t = 0$ s, sobald der erste Temperatursensor auf der Höhe 0,277 m die Ankunft der Flamme registriert. Bei Vergleich der Flammenankunftszeiten wird die Zeit t^* verwendet. t^* ist so gegenüber t bei den Simulationsergebnissen genauso verschoben, wie in den experimentellen Daten. $t^* = 0$ s entspricht dem Zeitpunkt, an dem der erste Messpunkt die Flammenankunft gemessen hat. Der Vergleich der Flammenankunftszeiten (Abb. 4.127) zeigt einen deutlichen Einfluss der verwendeten Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit. Korrelationen, die bei fehlender Turbulenz eine Ausbreitung mit laminare Flammengeschwindigkeit vorhersagen (Peters, (modifizierte) Dinkelacker mit $A = 1$), sagen eine viel langsamere Verbrennung in der Anfangsphase vorher, was dazu führt, dass der Messpunkt auf der Höhe $h = 1,13$ m deutlich später erreicht wird. Die Simulationen mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation $A \geq 2,5$ zeigen eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten, der Faktor B hat in dieser Phase keinen starken Einfluss. Es ist aber zu berücksichtigen, dass in der Anfangsphase auch Effekte eine Rolle spielen, die nicht hinreichend bekannt sind. Insbesondere die initiale Turbulenz und die Zündung spielen eine Rolle. In 4.2.2.8.4 wurde gezeigt, dass eine höhere initiale Turbulenz zu einer deutlichen Beschleunigung der Verbrennung in der Anfangsphase führt. Das einfache Zündmodell ist zudem kaum in der Lage den Zündvorgang exakt zu simulieren. Nach Erreichen der Höhe 1,13 m verlaufen die Flammenankunftszeiten – abgesehen von der unmodifizierten Dinkelacker-Korrelation – im Wesentlichen parallel. Dies entspricht der Übereinstimmung bei den Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten im Bereich des Maximums (Abb. 4.121).

4.2.2.9.3 Vergleich des Drucks

Die zu langsame Flammenausbreitung bei der Dinkelacker-Korrelation zeigt sich auch bei Vergleich des Drucks an den 4 Messstellen (Abb. 4.122 – Abb. 4.126). Bei allen Positionen werden bei dieser Simulation die Druckpeaks deutlich unterschätzt, am deutlichsten ist die Abweichung bei der obersten Messstelle auf 7,65 m Höhe. Bei den

übrigen Simulationen wird dagegen eine insgesamt gute Übereinstimmung erzielt. Am untersten Messpunkt (1,2 m) wird bei RUN64 ein deutlich höherer Druckpeak als bei RUN63 gemessen. Nimmt man RUN63 als Reverenz, so stimmen die übrigen Simulationen gut im Hinblick auf das Druckmaximum überein. Bis auf die modifizierte Dinkelacker-Korrelation mit $A = B = 3$ wird von allen Simulationen der Druckpeak tendenziell unterschätzt. Die Druckoszillationen im späteren Verlauf stammen von Druckwellen, die durch das Beschleunigungsrohr laufen und an den Enden reflektiert werden. Der Zeitpunkt, an dem der erste Druckpeak gemessen wird, hängt stark von der Anfangsphase der Verbrennung ab. Dies entspricht den Unterschieden bei den Flammenankunftszeiten bei den ersten Messstellen. Es sei angemerkt, dass bei Verwendung von t^* die Druckpeaks deutlich näher beieinander liegen. Bei der modifizierten Dinkelacker-Korrelation mit $A = B = 3$ stimmt auch dann die Position des Druckpeaks auf der Zeitachse gut mit dem Experiment überein (Abb. 4.123). Auch die Höhe und der Zeitpunkt des zweiten Druckpeaks werden sehr gut getroffen. Der dritte Peak wird dagegen unterschätzt.

An der Messtelle bei 5,53 m Höhe stimmt der Druck bei den modifizierten Dinkelacker-Korrelationen mit $B \geq 2$ und der Peters-Korrelation ebenfalls gut überein. Es werden zwei in etwa gleich hohe Druckpeaks simuliert, allerdings ist nur bei der Peters-Korrelation der zweite Peak etwas höher als der Erste. Bei den Rechnungen mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation ist dies umgekehrt.

Bei der Messtelle auf der Höhe 6,38 m wird ebenfalls eine sehr gute Übereinstimmung erzielt. Sowohl die Höhe des ersten als auch des zweiten Druckpeaks wird von allen Simulationen bis auch die Dinkelacker-Korrelation in guter Übereinstimmung mit den Versuchen vorhergesagt.

Bei der Messtelle auf 7,65 m Höhe werden die höchsten Druckpeaks simuliert. Auch hier wird bis auf die Simulation mit der Dinkelacker-Korrelation ein gutes Ergebnis erzielt. Die Rechnung mit der Peters-Korrelation zeigt eine leichte Unterschätzung des Maximaldrucks, während die Simulationen mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation noch im Rahmen der experimentellen Unsicherheiten liegen.

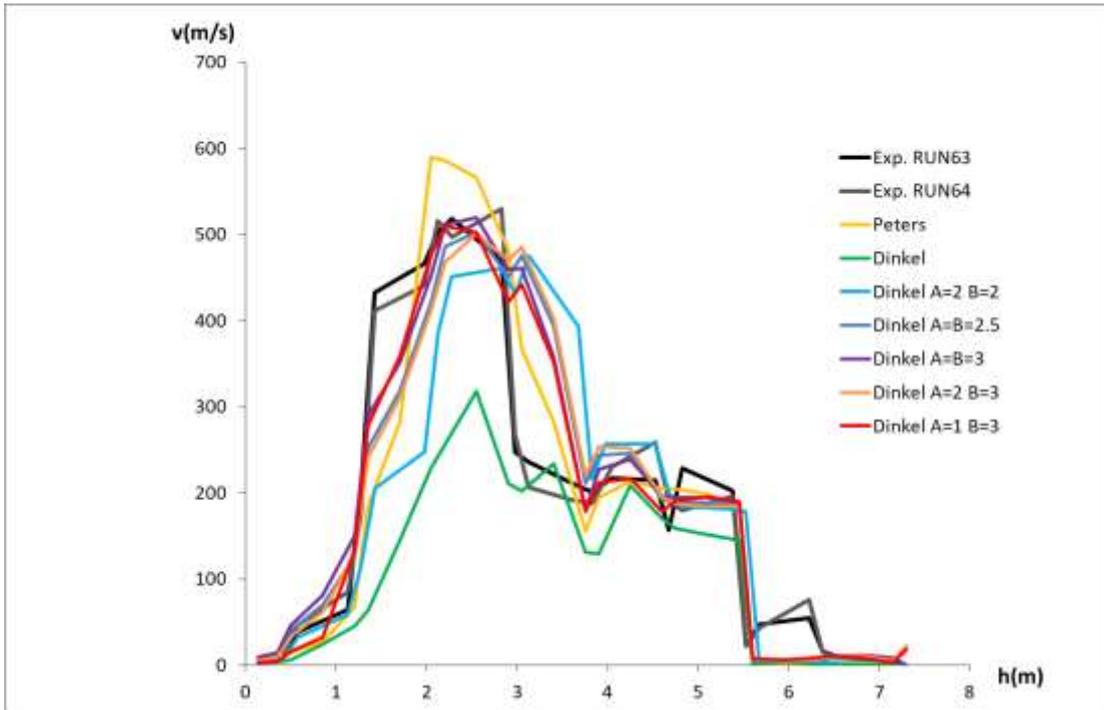


Abb. 4.121 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei 13 vol-% H₂ in Luft, $T_{ini} = 20\text{ °C}$

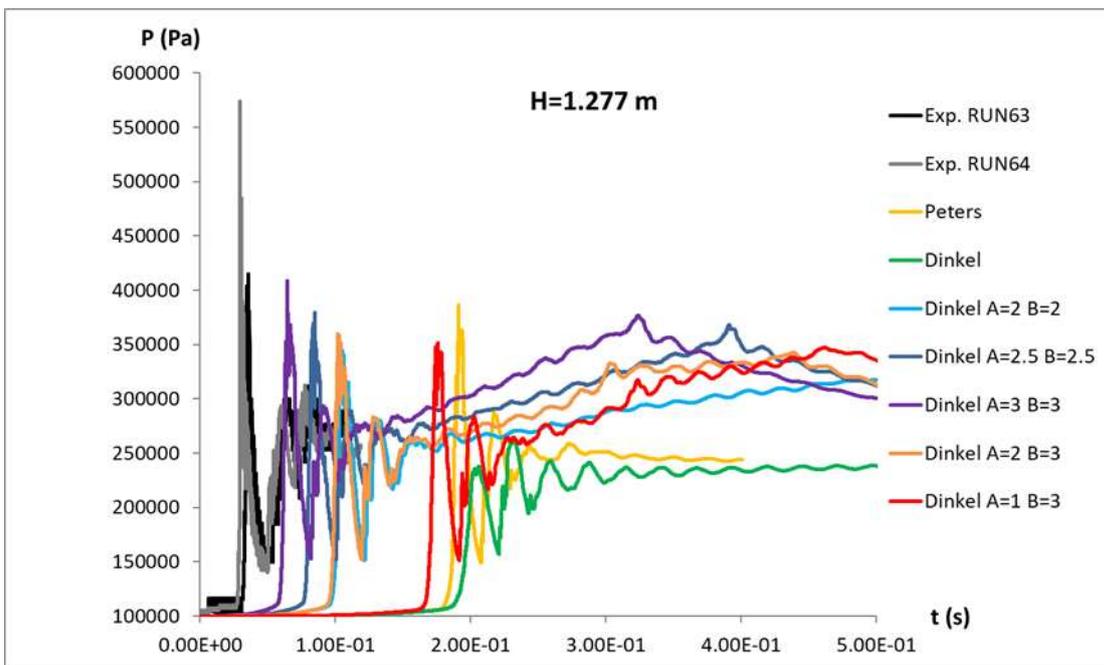


Abb. 4.122 Druck bei 13 vol-% H₂ in Luft, $T_{ini} = 20\text{ °C}$ an der Messstelle in 1,28 m Höhe

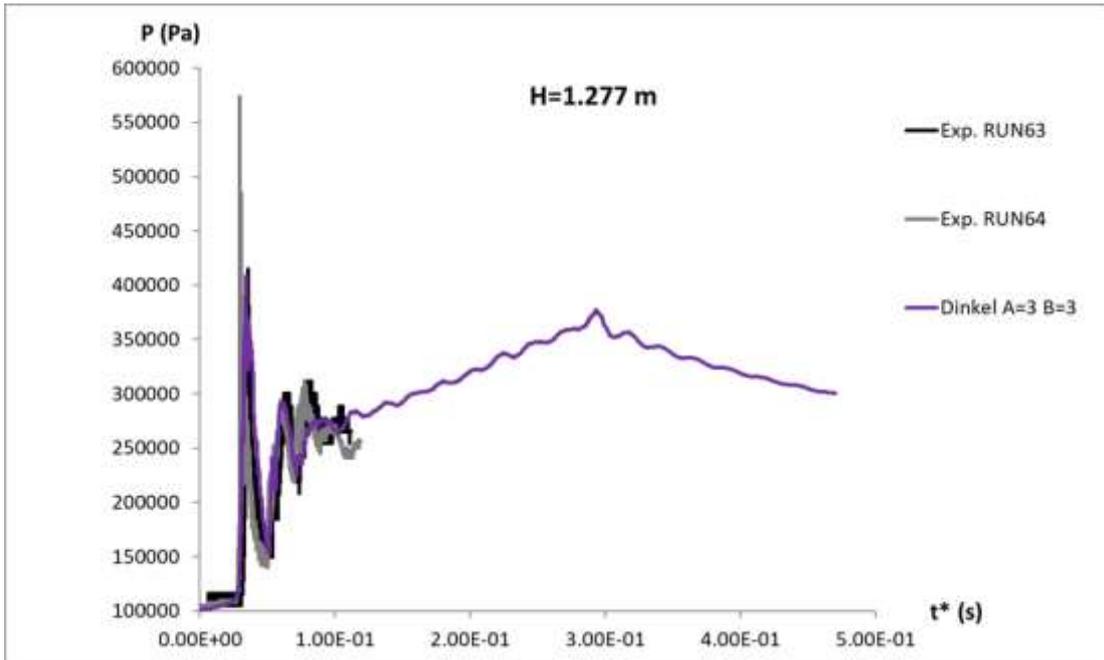


Abb. 4.123 Druck aufgetragen über t^* bei 13 vol-% H_2 in Luft, $T_{ini} = 20$ °C an der Messstelle in 1,28 m Höhe

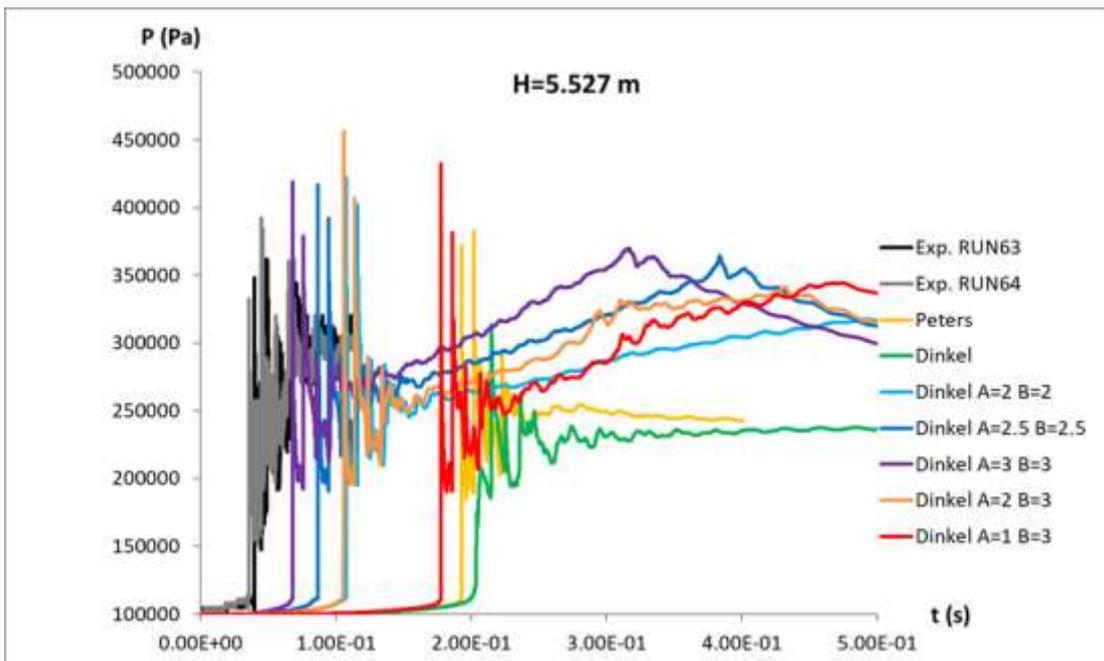


Abb. 4.124 Druck bei 13 vol-% H_2 in Luft, $T_{ini} = 20$ °C an der Messstelle in 5,53 m Höhe

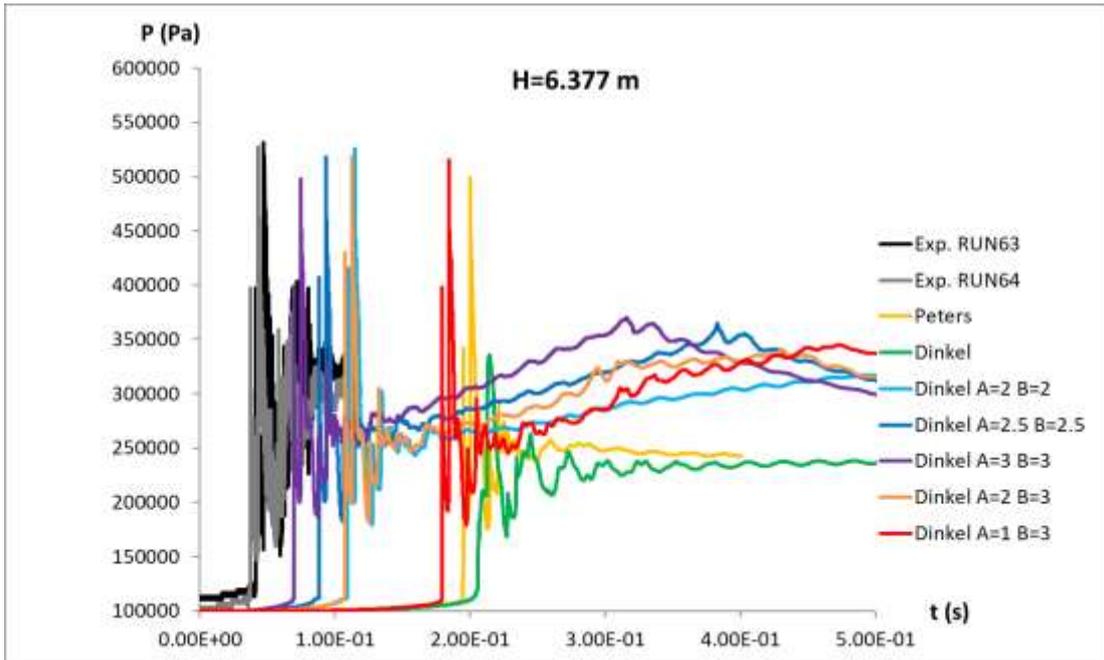


Abb. 4.125 Druck bei 13 vol-% H₂ in Luft, T_{ini} = 20 °C an der Messstelle in 6,38 m Höhe

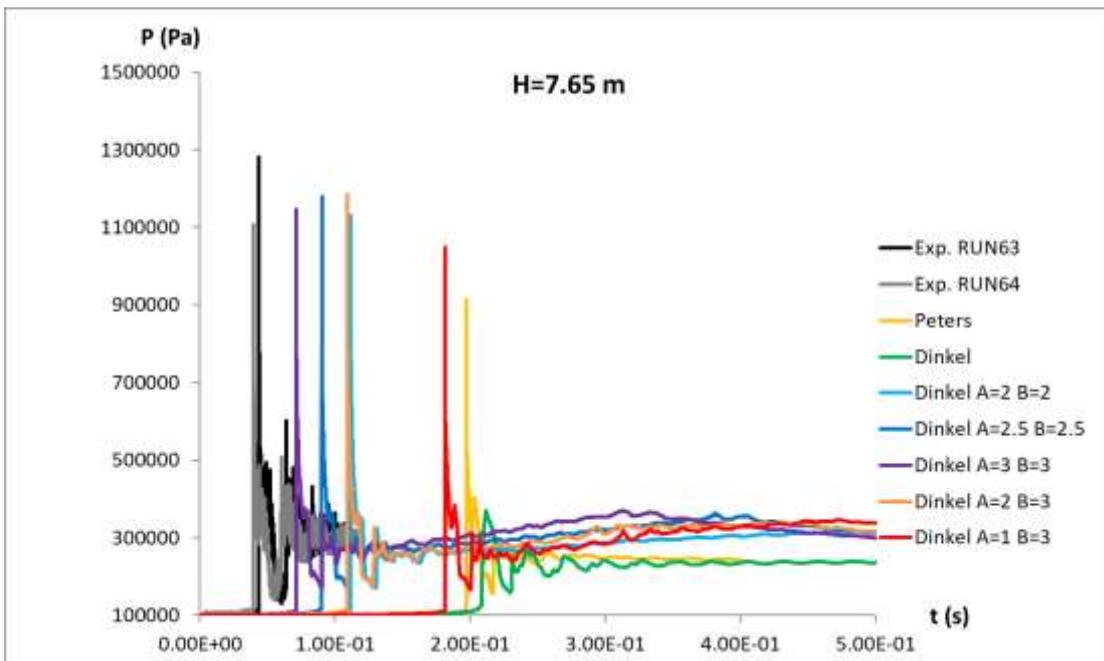


Abb. 4.126 Druck bei 13 vol-% H₂ in Luft, T_{ini} = 20 °C an der Messstelle in 7,65 m Höhe

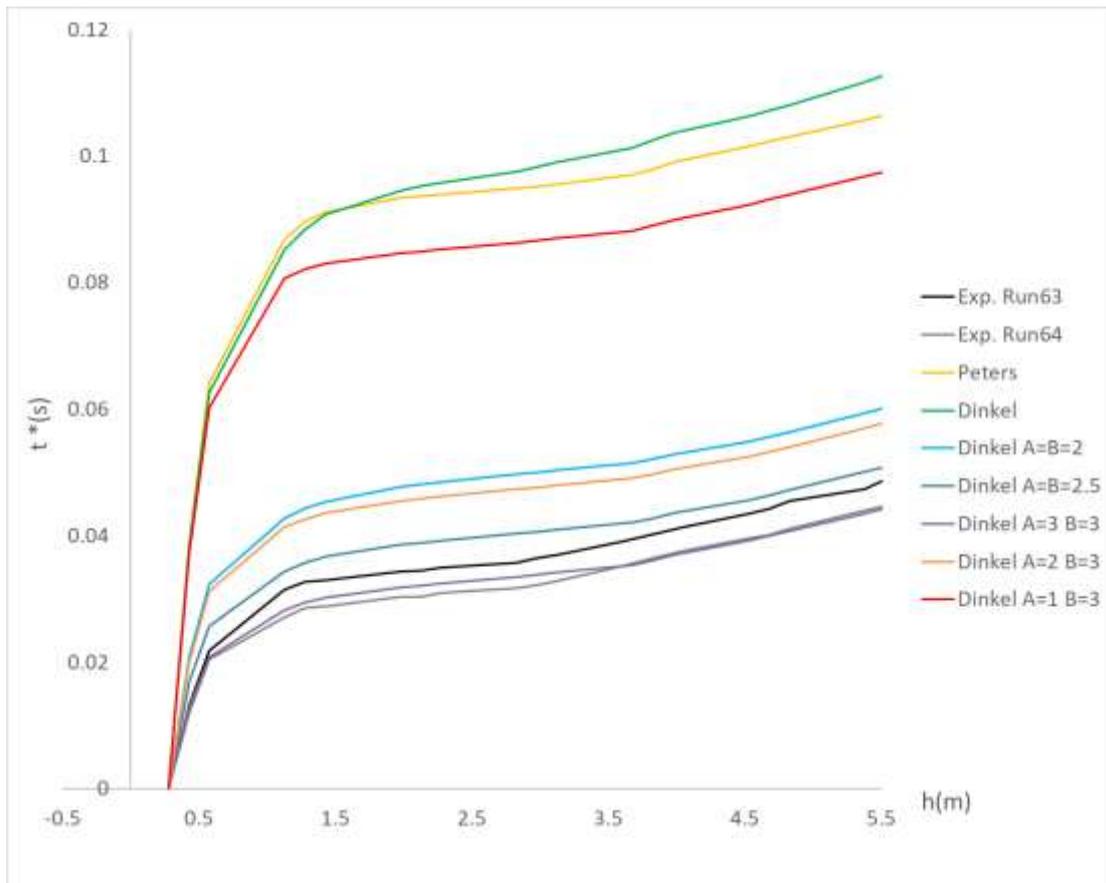


Abb. 4.127 Flammenankunftszeiten bei 13 vol-% H₂ in Luft, T_{ini} = 20 °C

4.2.2.9.4 Test der Korrelation der TUM

Es wurden drei Simulationen mit der von der TUM entwickelten Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit durchgeführt. Wie bei den THAI-Experimenten wurde der Formfaktor B = 1 und B = 0,5 getestet. Bei den ENACCEF2-Experimenten kann die Rotationssymmetrie genutzt und eine quasi 2-dimensionale Simulation durchgeführt werden. Dies reduziert den Rechenaufwand stark. Deshalb ist es mit vertretbarem Aufwand möglich, eine Simulation einschließlich des Faktors F_{zell} in der Korrelation der TUM durchzuführen („TUM B = 1 Zell“ in den Abbildungen). Da ein sehr feines Gitter insbesondere im Bereich der Hindernisse verwendet wurde, ist der Faktor F_{zell} bei dieser Simulation überall kleiner als 1 (Abb. 4.133). Er wird also zu einer Verlangsamung der Verbrennung führen.

Alle durchgeführten Simulationen mit der Korrelation der TUM überschätzen die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme um einen Faktor größer als 2 (Abb. 4.128). Hinsichtlich der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit kann keine einheitliche Aussage zum Einfluss von B und F_{zell} getroffen werden. Alle Simulationen berechnen ein deutlich

zu hohes Geschwindigkeitsmaximum im Bereich 1,5 m – 2,5 m, danach fällt die Geschwindigkeit wie im Experiment ab. Die hohen Peaks bei 6 m bei den beiden Simulationen mit $B = 1$ korrespondieren mit den deutlich zu hohen Druckpeaks insbesondere bei den oberen Messpositionen (Abb. 4.131, Abb. 4.132). Die Flammenfront koppelt an die Druckwellen und wird von ihnen verschoben. Dies führt zu einer schnellen Bewegung der Flammenfront (siehe Abschnitt 4.2.2.8.3).

Beim Druck wird der Einfluss der beiden Faktoren (B , F_{zell}) deutlicher. An der untersten Messstelle $h = 1,2$ m wird mit $B = 0,5$ eine höhere Druckspitze als mit der Peters-Korrelation berechnet, die Höhe liegt aber noch im Bereich der experimentellen Schwankung. Mit $B = 1$ wird dagegen der Maximaldruck deutlich überschätzt. Die Berücksichtigung des Faktors F_{zell} führt zwar zu einer Absenkung der Druckpeaks, was eine geringfügige Verbesserung des Ergebnisses bewirkt. Allerdings ist der Einfluss dieses Faktors deutlich zu schwach, um eine signifikante Verbesserung zu erreichen. Bei den anderen Druckmessstellen ergibt sich ein ähnliches Bild. Bei Verwendung des Formfaktors $B = 0,5$ liegen die Druckpeaks teilweise im Bereich der Messwerte, teils etwas darüber; bei $B = 1$ werden die Drücke deutlich überschätzt, wobei die Abweichung bei Berücksichtigung des Faktors F_{zell} etwas geringer ist.

Die Simulationsergebnisse mit der TUM-Korrelation (Flammenausbreitungsgeschwindigkeit, Druckpeaks) – insbesondere bei Wahl $B = 1$ – legen eigentlich nahe, dass es in der Simulation zu DDT kommen würde. Aufgrund des Fehlens eines entsprechenden Modells kann DDT aber in den Simulationen noch nicht simuliert werden. Man liegt also außerhalb der Gültigkeit der Modellierung.

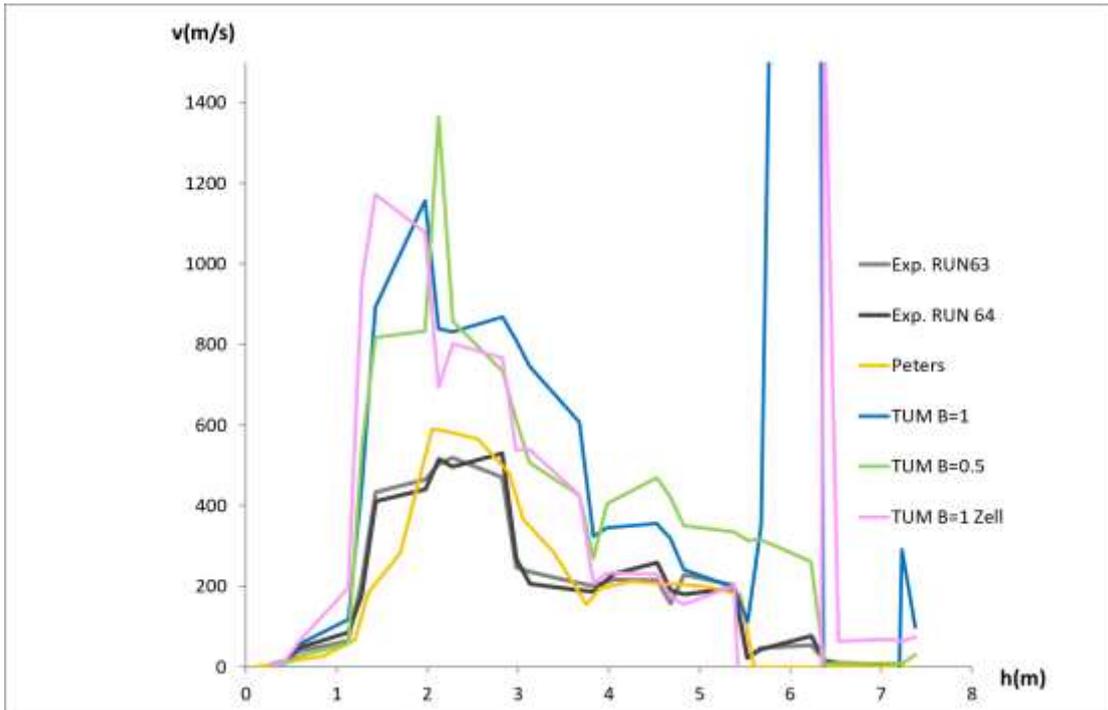


Abb. 4.128 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei 13 vol-% H₂ in Luft, $T_{ini} = 20\text{ °C}$

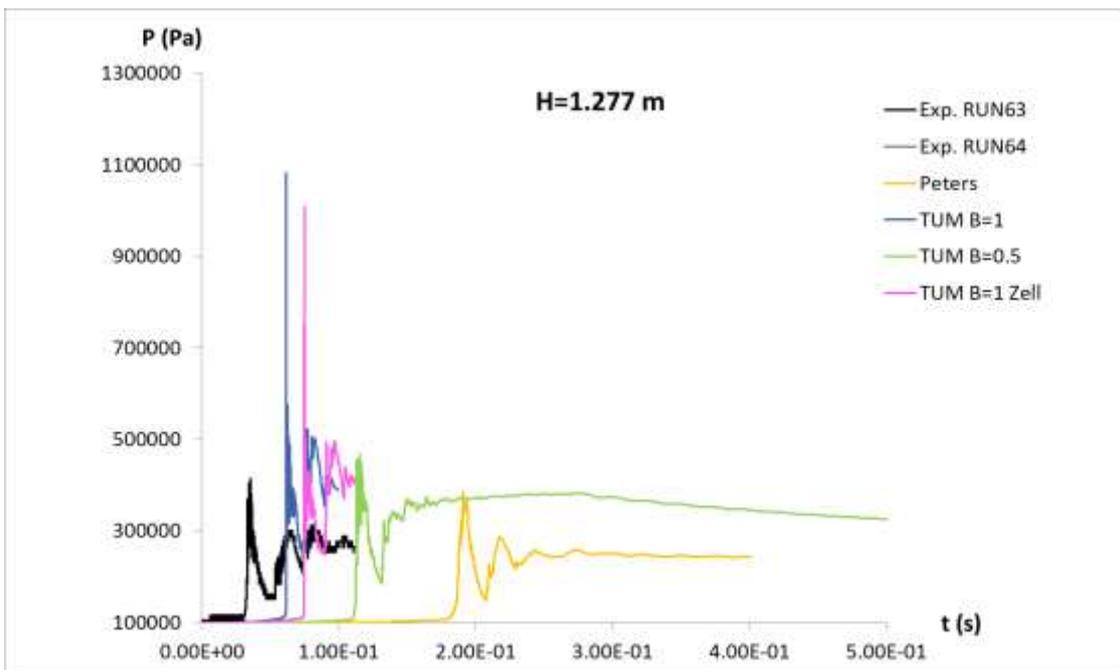


Abb. 4.129 Druck bei 13 vol-% H₂ in Luft, $T_{ini} = 20\text{ °C}$ an der Messstelle in 1,277 m Höhe

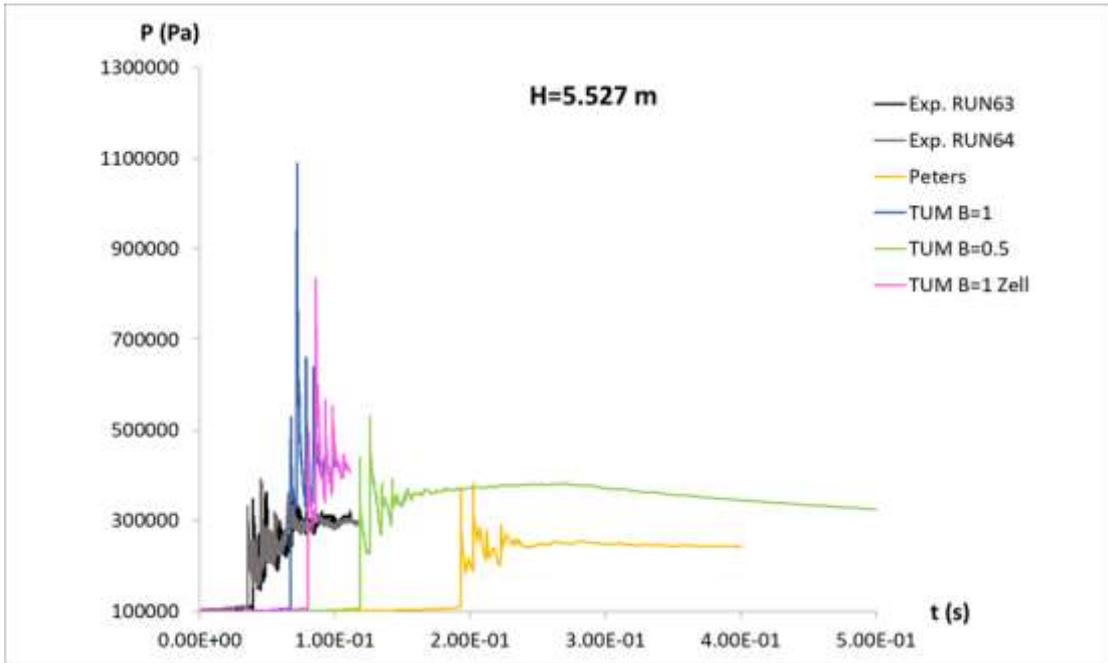


Abb. 4.130 Druck bei 13 vol-% H_2 in Luft, $T_{ini} = 20$ °C an der Messstelle in 5,527 m Höhe

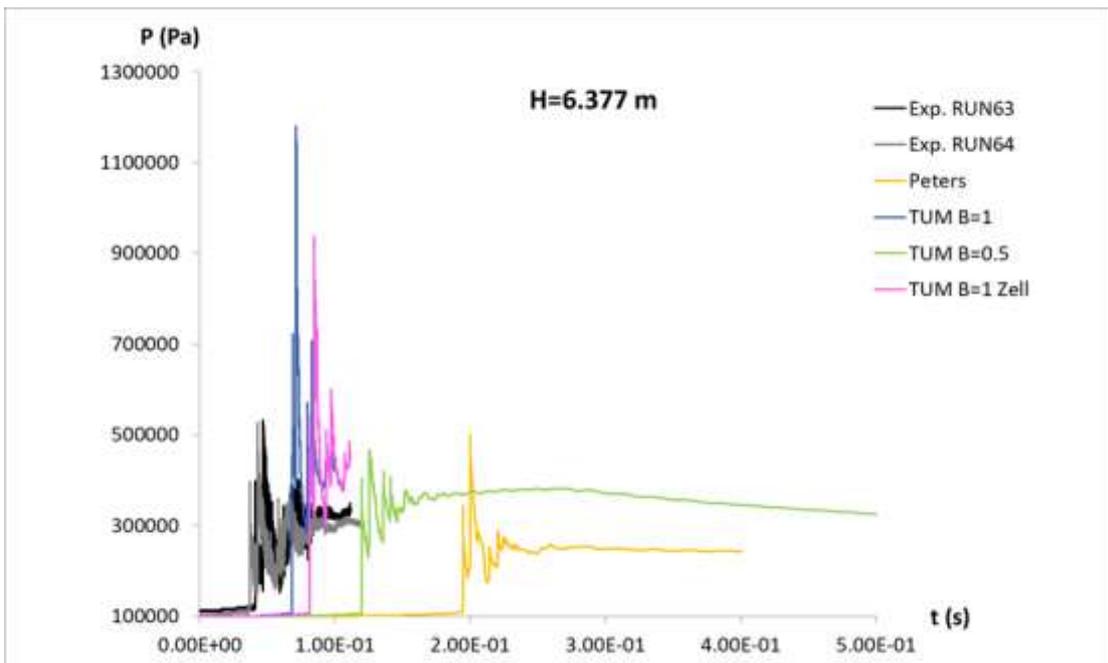


Abb. 4.131 Druck bei 13 vol-% H_2 in Luft, $T_{ini} = 20$ °C an der Messstelle in 6,377 m Höhe

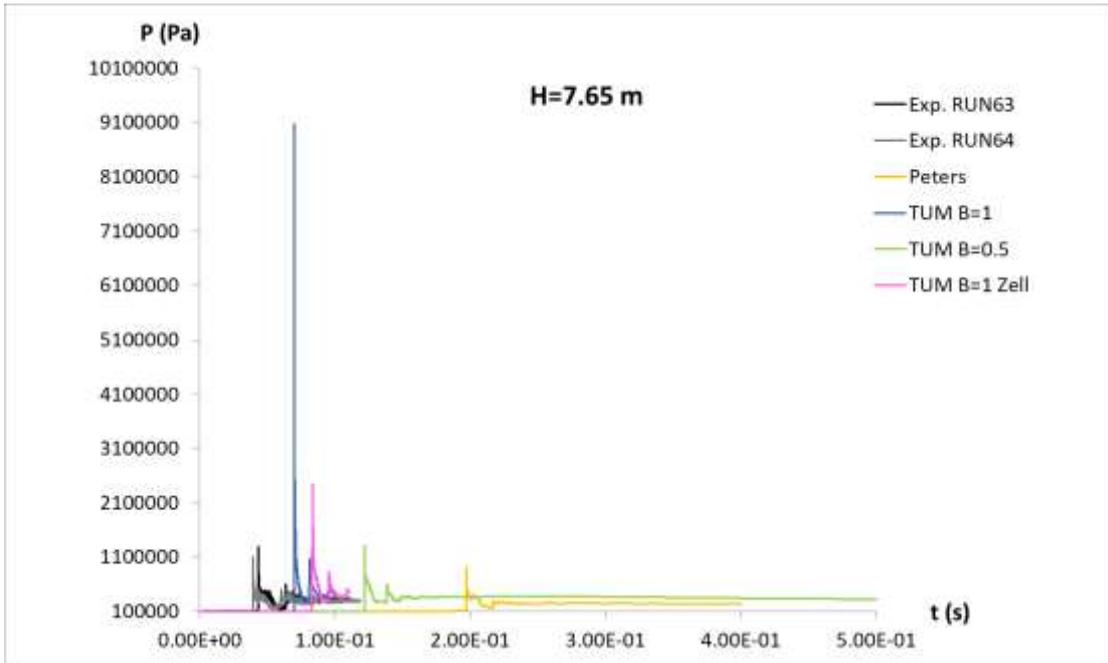


Abb. 4.132 Druck bei 13 vol-% H₂ in Luft, $T_{\text{ini}} = 20$ °C an der Messstelle in 7,65 m Höhe

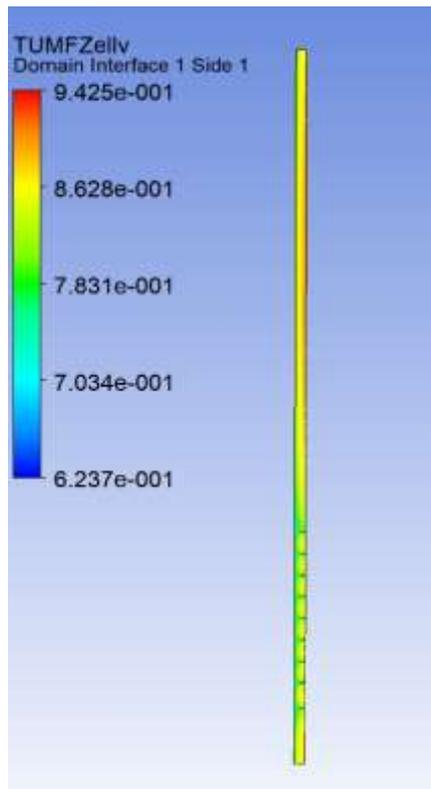


Abb. 4.133 Faktor F_{zell} in der Korrelation der TUM

4.2.2.10 Verbrennung von 11 vol-% H₂ in Luft bei T_{ini} = 20 °C in ENACCEF2

Für die ENACCEF-Versuche mit der initialen Gaszusammensetzung 11 vol-% und 15 vol-% H₂ in Luft liegen keine Messergebnisse in elektronischer Form vor. Die gemessenen Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten stammen aus /BEN 18/. Für diese Experimente liegen keine Informationen über die Reproduzierbarkeit der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit vor. Es kann aber davon ausgegangen werden, dass sie ähnlich wie bei 13 vol-% H₂ ist (Abb. 4.112).

Die Simulation mit der Peters-Korrelation unterschätzt bis 2 m Höhe die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit (Abb. 4.134). Das Geschwindigkeitsmaximum wird dagegen um knapp 100 m/s überschätzt. Der Geschwindigkeitsabfall hinter den Hindernissen wird dagegen in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet.

Die Simulation mit der Dinkelacker-Korrelation berechnet eine deutlich zu langsame Flammenausbreitung während des gesamten Versuchsablaufs.

Bei den Simulationen mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation zeigt sich eine deutlich stärkere Sensitivität in Bezug auf die Modellparameter A und B. Die Flammenbeschleunigung und die maximale Ausbreitungsgeschwindigkeit hängen stark von beiden Parametern ab. Die Verlangsamung der Flamme nach den Hindernissen verläuft dagegen bei allen Simulationen mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation ($B \geq 2$) ähnlich. Verglichen mit dem Experiment erfolgt der Geschwindigkeitsabfall nach dem Maximum (3 m – 4 m) Höhe langsamer. Bei Simulationen, die den Maximalwert in guter Übereinstimmung simuliert haben, ist dieser Effekt deutlicher erkennbar. Im späteren Verlauf sind die Unterschiede zwischen den Simulationen geringer. Bei den Versuchen mit der initialen Wasserstoffkonzentration von 13 vol-% zeigen sich in dieser Versuchsphase Unterschiede bei den Wiederholungsexperimenten. Geht man von einem ähnlichen Verhalten auch bei 11 vol-% aus, so zeigen alle Simulationen bis auf die mit der unmodifizierten Dinkelacker-Korrelation eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit dem Experiment.

Die Simulation mit modifizierter Dinkelacker-Korrelation und den Modellparametern $A = B = 2$ berechnet eine deutlich zu langsame Verbrennung bis 3 m Höhe. Insbesondere die Maximalgeschwindigkeit wird deutlich (~ 150 m/s) unterschätzt. Mit $A = 1$ und $B = 3$ wird immer noch eine zu geringe Maximalgeschwindigkeit berechnet, die Abweichung ist aber mit etwa 90 m/s deutlich geringer. Mit $A = 2$ und $B = 3$ wird dagegen eine

gute Übereinstimmung erzielt. Die Unterschätzung des Messwertes beträgt nur ca. 30 m/s. Mit $A = B = 3$ wird das Experiment am besten simuliert. Mit einer Unterschätzung der maximalen Flammenausbreitungsgeschwindigkeit um etwa 15 m/s liegt man im Bereich der experimentellen Unsicherheiten.

Die Simulation mit der Korrelation der TUM und dem Formfaktor $B = 0,5$ wird eine signifikant zu hohe Flammenausbreitungsgeschwindigkeit berechnet (Abb. 4.135). Der qualitative Verlauf entspricht zwar dem des Experiments, die maximale Geschwindigkeit wird aber um mehr als 200 m/s überschätzt. Eine Erhöhung des Formfaktors auf $B = 1$ würde zu einer Verdopplung der turbulenten Flammengeschwindigkeit in der TUM-Korrelation führen. Dies würde die Abweichung vom Experiment weiter vergrößern. Deshalb wurde auf die Durchführung einer entsprechenden Simulation verzichtet.

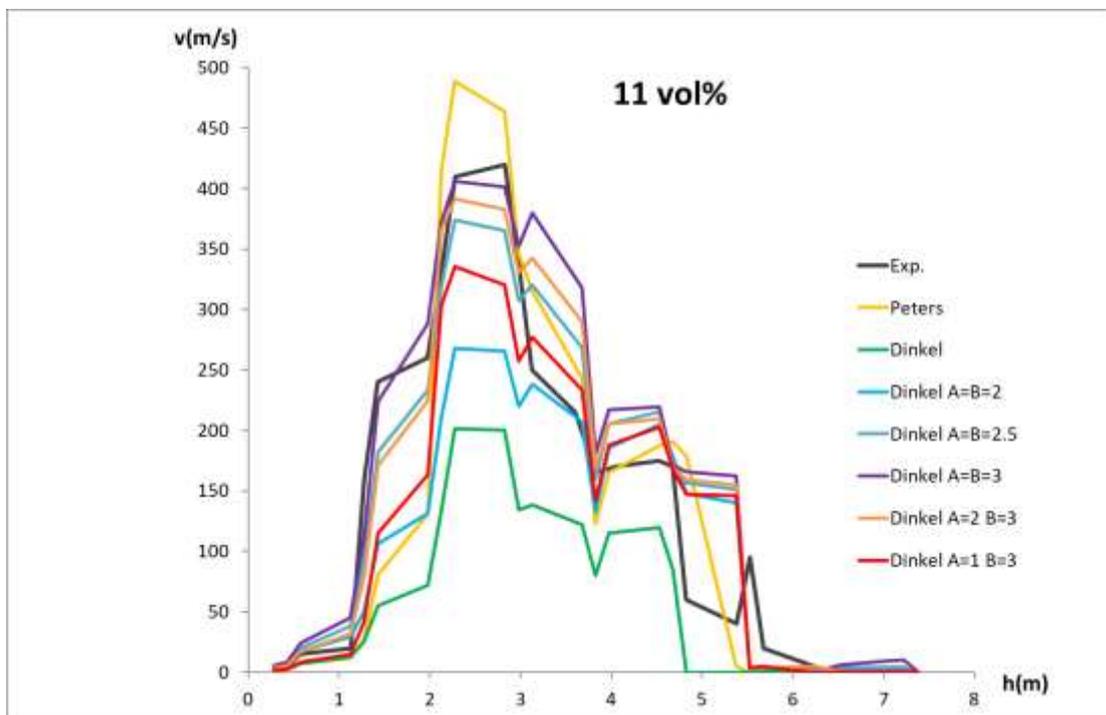


Abb. 4.134 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei 11 vol-% H_2 in Luft, $T_{ini} = 20\text{ °C}$

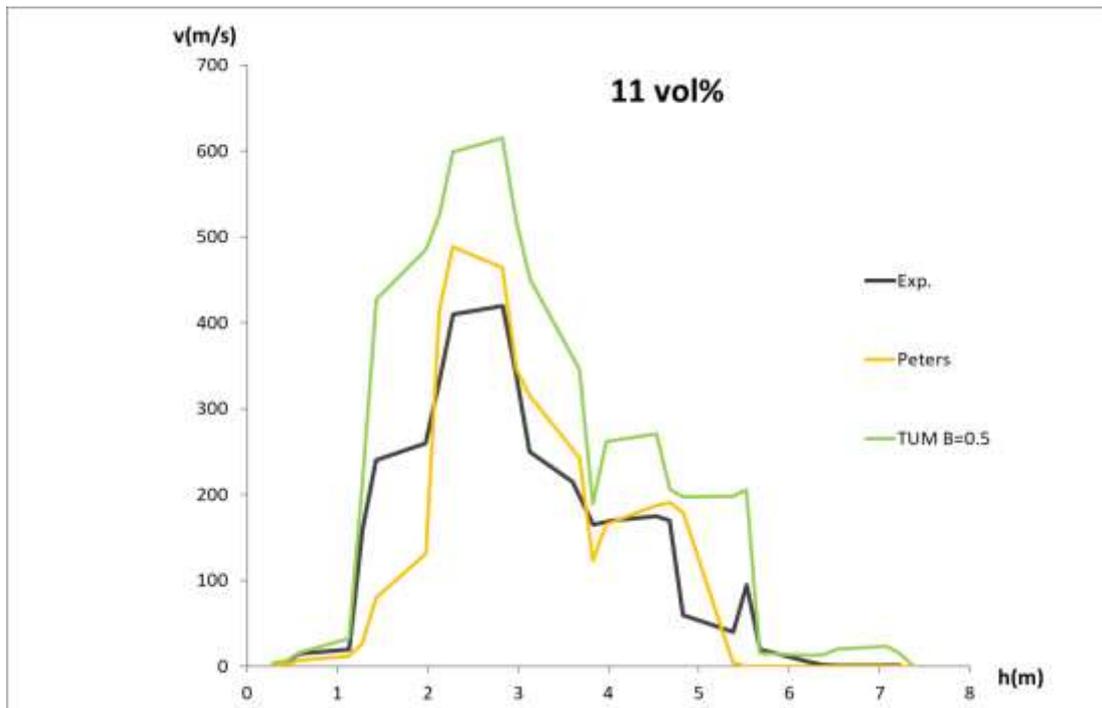


Abb. 4.135 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei 11 vol-% H₂ in Luft, T_{ini} = 20 °C

4.2.2.11 Verbrennung von 15 vol-% H₂ in Luft bei T_{ini} = 20 °C in ENACCEF2

Mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit wurde auch ein ENACCEF2-Versuch mit 15 vol-% initialer Wasserstoffkonzentration nachgerechnet. Die übrigen Versuchsparameter stimmen mit den beiden vorher beschriebenen ENACCEF2-Experimenten überein. Bei der Simulation mit der Peters-Korrelation wird in der Anfangsphase eine zu langsame Beschleunigung berechnet (Abb. 4.136). Die Position und die Höhe der maximalen Flammenausbreitungsgeschwindigkeit werden dagegen in guter Übereinstimmung mit dem Experiment simuliert. Die Verlangsamung der Flammenausbreitung nach den Hindernissen wird korrekt berechnet, wobei tendenziell die Messwerte etwas unterschätzt werden. Da auch für diesen Versuch keine Daten für Wiederholungsexperimente vorliegen, ist es schwer zu beurteilen, ob die Simulationsergebnisse noch in der Bandbreite der experimentellen Unsicherheiten liegen. Bei der Verbrennung von 13 vol-% H₂ war in diesem Bereich die Streuung der Versuchsdaten relativ groß.

Die Dinkelacker-Korrelation berechnet zwar den richtigen qualitativen Verlauf der Flammengeschwindigkeit, allerdings ist überall die simulierte Geschwindigkeit zu gering. Das Geschwindigkeitsmaximum wird deutlich um etwa 200 m/s unterschätzt.

Die Simulationen mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation sind in der Lage, das Experiment bis auf moderate Abweichungen richtig zu simulieren (Abb. 4.136). Mit den Parametern $A = B = 2$ und auch mit $A = 1$ und $B = 3$ werden die Flammenbeschleunigung und das Geschwindigkeitsmaximum geringfügig unterschätzt. Bei den Parametern $A = 2$ und $B = 3$ wird in der Anfangsphase eine bessere Übereinstimmung erzielt, das Geschwindigkeitsmaximum wird aber ebenfalls leicht unterschätzt. Mit $A = B = 2,5$ wird die beste Übereinstimmung erzielt. Die Flammenbeschleunigung in der Anfangsphase stimmt relativ gut überein und die maximale Flammenausbreitungsgeschwindigkeit wird mit nur minimalen Abweichungen berechnet. Bei $A = 3$ und $B = 3$ wird die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bis zu einer Höhe von 4 m immer leicht überschätzt. Alle Simulationen mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation simulieren einen etwas langsameren Abfall der Flammengeschwindigkeit nach den Hindernissen (3 m – 4 m Höhe), danach wird die Geschwindigkeit etwas unterschätzt. Ohne Kenntnis der Streuung der Messwerte ist aber unklar, ob die Abweichungen schon signifikant sind, oder ob sie noch in der Bandbreite von Wiederholungsexperimenten liegen.

Die Simulation mit der Korrelation der TUM und dem Formfaktor $B = 0,5$ berechnet die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bis zu einer Höhe von 1 m in guter Übereinstimmung mit dem Experiment (Abb. 4.136). Das Geschwindigkeitsmaximum ist an derselben Position wie im Experiment, allerdings wird die maximale Flammengeschwindigkeit um einen Faktor größer als 2 überschätzt. Die hier simulierten Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten lassen vermuten, dass es zu DDT kommen würde, falls ein entsprechendes Modell implementiert würde. Die sicherheitstechnisch wichtige Flammenbeschleunigung und die erreichte Maximalgeschwindigkeit werden vom Modell nur unzureichend simuliert. Der Geschwindigkeitsabfall hinter den Hindernissen wird wieder in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Da schon mit dem Formfaktor $B = 0,5$ die Verbrennungsgeschwindigkeit signifikant überschätzt wurde, wurde auf die Durchführung einer Simulation mit $B = 1$ verzichtet, da hierbei die Abweichungen zum Experiment noch weiter vergrößert werden. (siehe Abschnitt 4.2.2.9.4).

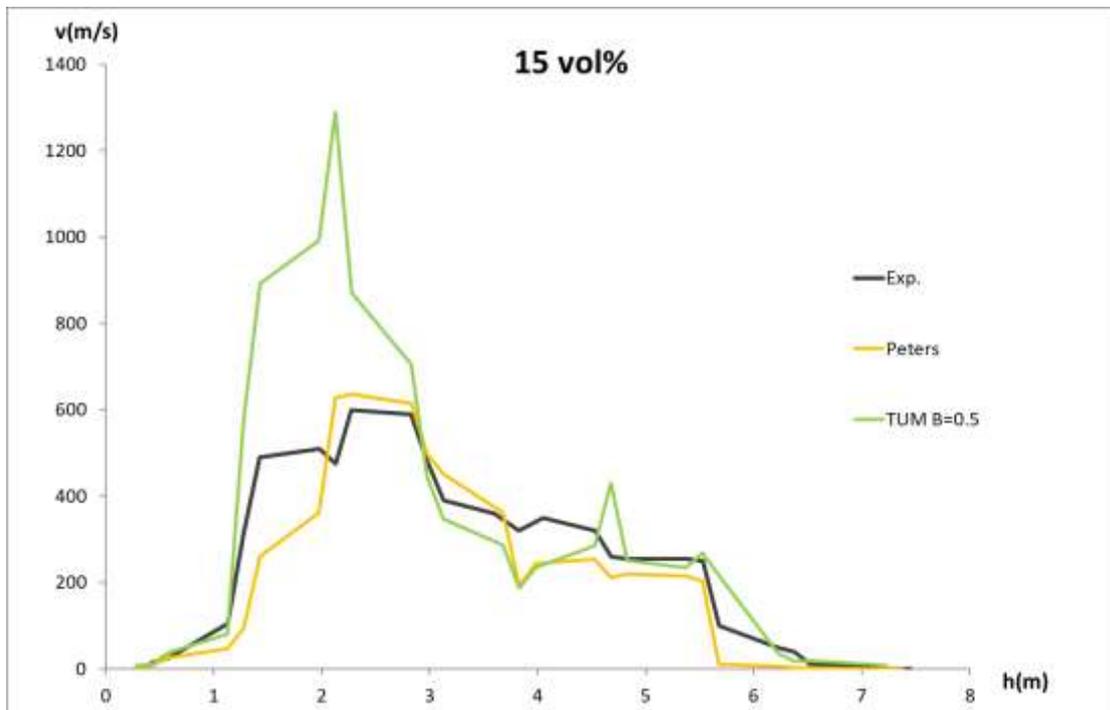
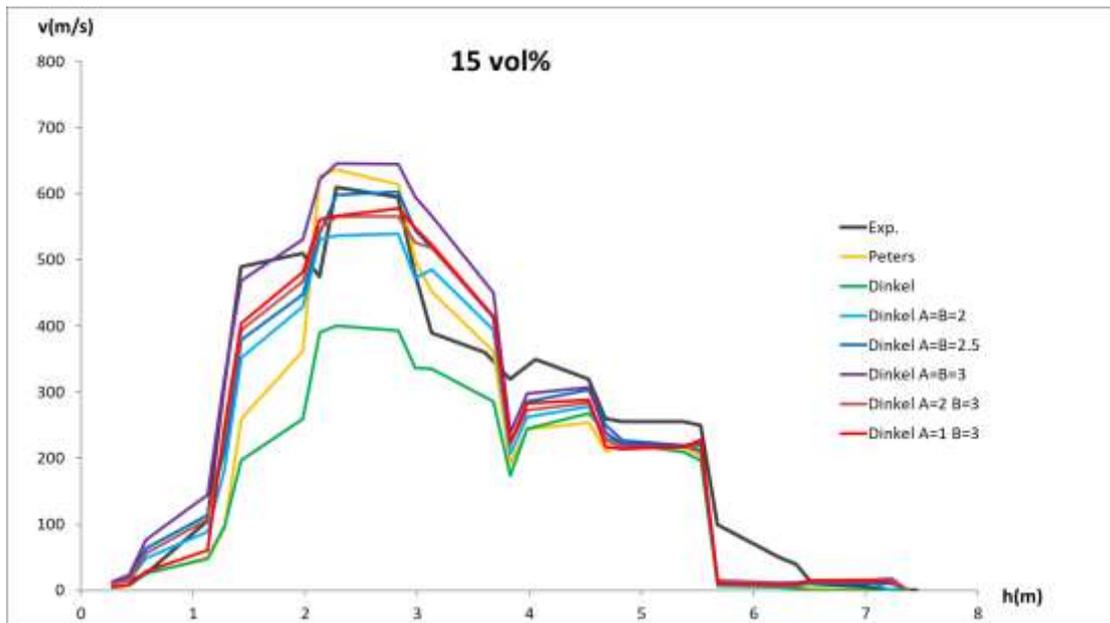


Abb. 4.136 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei 15 vol-% H_2 in Luft, $T_{\text{ini}} = 20 \text{ }^\circ\text{C}$

4.2.2.12 ETSON-SAMHYCO-NET Benchmark

4.2.2.12.1 Einleitung

Die GRS hat sich mit CFX-Simulationen am ETSON-SAMHYCO-NET Benchmark zur Verbrennung von Wasserstoff beteiligt. Bei diesem Benchmark wurden Verbrennungsversuche an der ENACCEF2-Versuchsanlage durchgeführt. Der Versuchsaufbau

entspricht dem der bereits in den vorigen Abschnitten dargestellten Versuchen und ist in Abschnitt 4.2.2.8.1 beschrieben. Die in diesem Benchmark durchgeführten Versuche unterscheiden sich von den bereits simulierten Experimenten durch die Startbedingungen (initiale Temperatur, initialer Druck und die Gaszusammensetzung (hier initialer Dampf) des unverbrannten Gases. Die Startbedingungen für die verschiedenen Benchmarkversuche sind in Tab. 4.9 zu finden. Zum Zeitpunkt der Berichtserstellung lagen die Messergebnisse noch nicht in elektronischer Form vor. Aus Präsentationen im Rahmen von Benchmarktreffen und aus einer geplanten gemeinsamen Publikation im Rahmen von NURETH-19 /BEN 22/ liegen der GRS allerdings bereits die gemessenen Flammenankunftszeiten und die daraus berechneten Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten als Bilder vor. Diese Bilder wurden ausgewertet und die gemessene Flammenausbreitungsgeschwindigkeit wurde abgelesen. Der exakte Algorithmus der dabei zur Berechnung der experimentellen Flammenausbreitungsgeschwindigkeit aus den Flammenankunftszeiten verwendet wurde, ist nicht bekannt, was zu zusätzlichen Unsicherheiten beim Vergleich mit den Simulationsergebnissen führt. Das direkte Ablesen der Flammenankunftszeiten aus den vorliegenden Bildern war insbesondere im Bereich der schnellen Flammenausbreitung nicht mit der notwendigen Genauigkeit möglich. Diese abgelesenen Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten werden im Folgenden zum Vergleich mit den Simulationen herangezogen. Sobald die Messwerte in elektronischer Form vorliegen, kann eine genauere Auswertung der Simulationen durchgeführt werden.

Die in den Abschnitten 4.2.2.9 bis 4.2.2.11 durchgeführten Parameterstudien zeigen, welche Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit für die Simulationen der ENACCEF2-Experimente geeignet sind, und welche Gitterauflösung notwendig ist, um eine zuverlässige Simulation der Experimente zu gewährleisten. Diese Erkenntnisse sind die Basis für die im Folgenden durchgeführten Simulationen. Die bisherigen Versuchsnachrechnungen (THAI, THAI+, ENACCEF-2) haben gezeigt, dass mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation und den Parametern $A = 1$ bzw. $A = 2$ und $B = 3$ alle untersuchten Experimente zumindest zufriedenstellend simuliert werden können. Deshalb wurden nur diese 2 Korrelationen für die folgenden Versuchsnachrechnungen getestet.

Tab. 4.9 Startbedingungen im ETSON-SAMHYCO-NET Benchmark

Step	H ₂	H ₂ O _g	T _{ini}	P _{ini}
0	13 vol-%	0 vol-%	90 °C	1 bar
1	13 vol-%	30 vol-%	90 °C	1 bar
2	13 vol-%	30 vol-%	90 °C	2 bar

4.2.2.12.2 Step 0

In Step 0 wurden 13 vol-% H₂ in Luft verbrannt. Im Gegensatz zu den Versuchen in Abschnitt 4.2.2.9 liegt hier zu Beginn des Experiments eine höhere initiale Anfangstemperatur von 90 °C vor. Die Simulationsergebnisse mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation und den Parametern (A = 1, B = 3) und (A = 2, B = 3) unterscheiden sich nur in der 1. Phase des Versuchs signifikant (Abb. 4.137). Bei Wahl von A = 2 erfolgt die Flammenbeschleunigung schneller und passt etwas besser zum experimentellen Verlauf. Beide Simulationen berechnen eine sehr ähnliche maximale Geschwindigkeit, die nur geringfügig unterhalb der gemessenen liegt. Die Verlangsamung der Flammen nach den Hindernissen wird von den Simulationen berechnet. Diese ist aber etwas langsamer als im Experiment. Hier wurden allerdings bei anderen Versuchen Abweichungen bei mehrmaliger Durchführung des Experiments beobachtet (siehe Abb. 4.112).

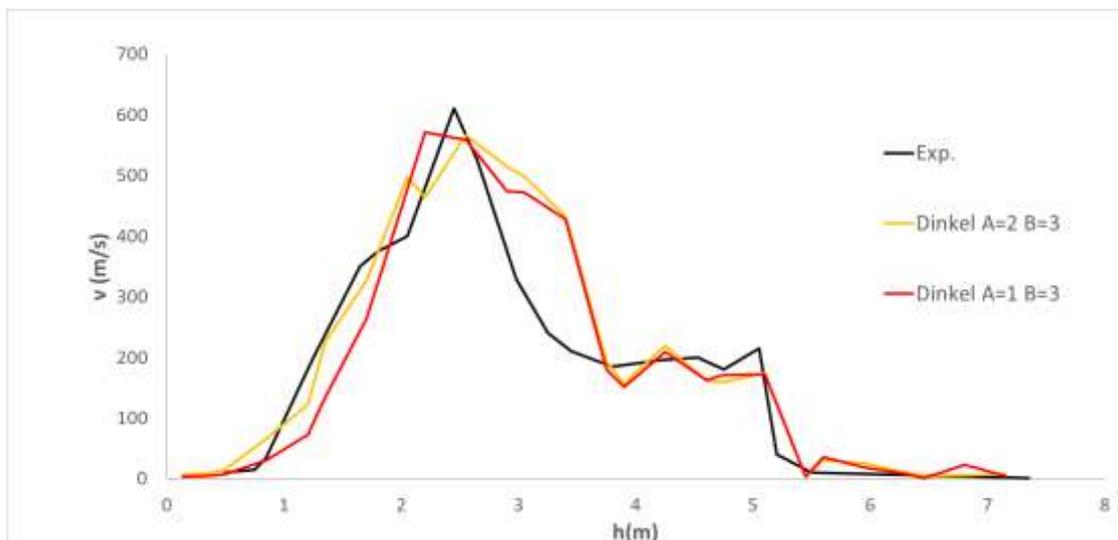


Abb. 4.137 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei 13 vol-% H₂ in Luft, T_{ini} = 90 °C

4.2.2.12.3 Step 1

Bei Step 1 liegt gegenüber von Step 0 zusätzlich zu Luft noch 30 vol-% Dampf zu Beginn der Verbrennung vor. Wie schon bei anderen ENACCEF2-Experimenten, unterscheiden sich die Simulationen mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation und A = 1 bzw. A = 2 vor allem in der Anfangsphase (Abb. 4.138). Auch in Step 1 unterschätzt die Simulation mit A = 1 die Flammenbeschleunigung. Allerdings ist bei diesem Experiment auch die erreichte Maximalgeschwindigkeit mit A = 1 um etwa 35 m/s niedriger als die mit A = 2. Auch mit A = 2 liegt die erreichte Maximalgeschwindigkeit mit 479 m/s noch leicht unterhalb des experimentellen Werts (~510 m/s). Wie schon bei Step 1 werden die

Unterschiede zwischen den beiden Simulationen im weiteren Verlauf des Verbrennungsprozesses geringer und verschwinden nahezu.

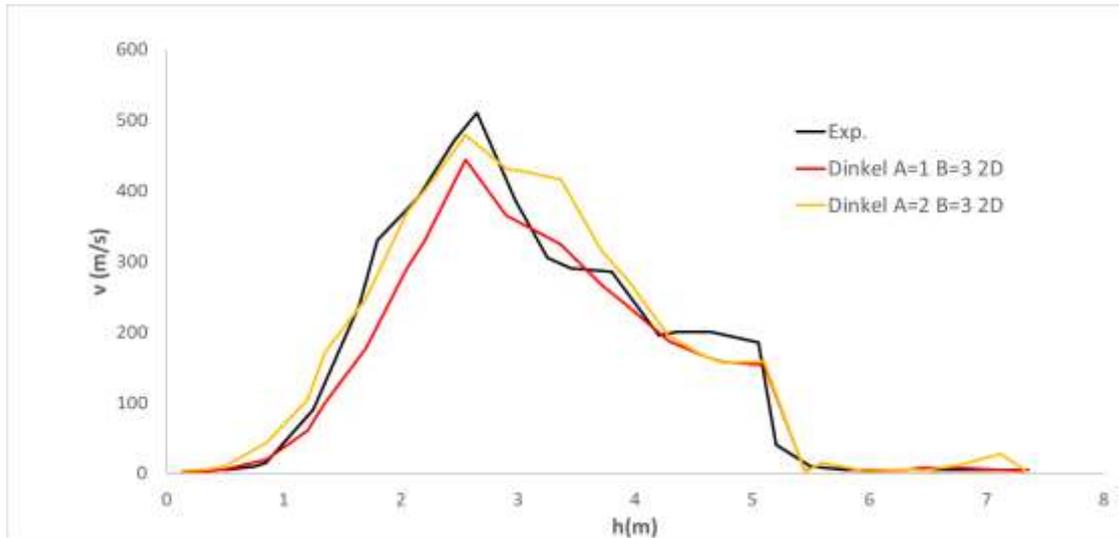


Abb. 4.138 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei 13 vol-% H_2 in 30 vol-% Dampf und Luft 57 vol-%, $T_{ini} = 90$ °C

4.2.2.12.4 Step 2

Im Gegensatz zu den ersten beiden Benchmarkstufen wird in Step 2 der anfängliche Druck auf 2 bar erhöht. Auch bei diesen Simulationen wird das Experiment in guter Übereinstimmung berechnet (Abb. 4.139). In Step 2 ist die Flammenbeschleunigung bei $A = 2$ ebenfalls etwas schneller als bei $A = 1$ und passt besser zum Experiment, allerdings sind die Unterschiede zwischen beiden Simulationen geringer als in Step 1. Beide Simulationen berechnen eine sehr ähnliche maximale Geschwindigkeit (535 m/s bzw. 544 m/s). Sie ist etwas höher als der abgelesene experimentelle Wert von 525 m/s. Die Verlangsamung der Flammenfront nach Passieren der Hindernisse wird von beiden Simulationen sehr ähnlich berechnet und stimmt gut mit dem Experiment überein.

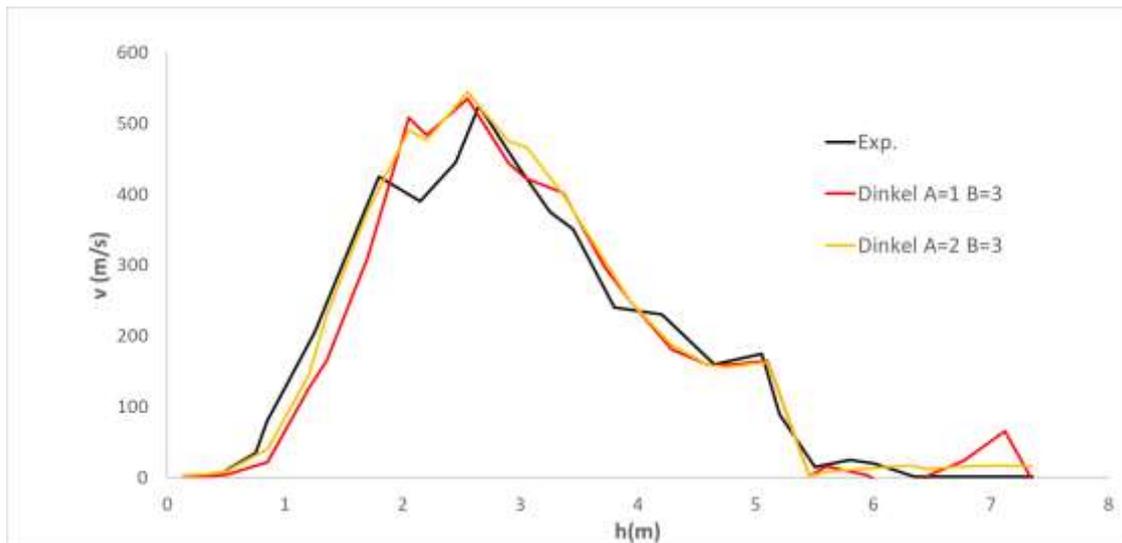


Abb. 4.139 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei 13 vol.-% H₂ in Dampf 30 vol.-% und Luft 57 vol.-%, T_{ini} = 90 °C und P_{ini}=2 bar

4.2.2.12.5 Vorläufiges Fazit der Simulation der Benchmark-Versuche ETSON-SAMHYCO-NET

Auch bei diesen Versuchen konnte mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation und den Parametern A = 1 bzw. A = 2 und B = 3 die Versuche in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden. Die Flammenbeschleunigung an den Hindernissen und die Position und Größe des Geschwindigkeitsmaximums werden in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Die Verlangsamung der Flamme hinter den Hindernissen wird ebenfalls in Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Die Abweichungen liegen meist in der Größe der aus Wiederholungsexperimenten abgeleiteten experimentellen Unsicherheiten. Der Faktor A hat vor allem in der Anfangsphase einen Einfluss auf die turbulente Flammengeschwindigkeit, da mit zunehmender Turbulenz der 1. Term mit A vernachlässigbar wird. Die vorläufige Auswertung legt nahe, dass mit A = 2 die Anfangsphase genauer berechnet wird. Dies ist aber noch zu überprüfen, sobald die experimentellen Daten in elektronischer Form vorliegen. Da der exakte Algorithmus zur Berechnung der experimentellen Flammenausbreitungsgeschwindigkeit nicht bekannt ist, ist es möglich, dass sich Abweichungen zu der Berechnung der simulierten Flammenausbreitungsgeschwindigkeit ergeben. Diese könnten unter anderen zu einer Verschiebung entlang der x-Achse (hier h(m)) führen.

4.2.2.13 Zusammenfassung der Nachrechnung der ENACCEF2-Versuche

Die Nachrechnungen mit der Korrelation der TUM berechnen eine signifikant zu starke Flammenbeschleunigung. Selbst bei einem Formfaktor $B = 0,5$ wird die maximale Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei allen drei Versuchen signifikant überschritten. Bei $B = 1$ wird die Abweichung zum Experiment weiter vergrößert. Bei 13 vol.-% H_2 und 15 vol.-% H_2 legen die erreichten Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten nahe, dass es zur Ausbildung von DDT kommt. Da ein entsprechendes Modell bei der Verbrennungsmodellierung nicht implementiert ist, kann dieser Prozess nicht physikalisch richtig berechnet werden. Die Simulationen bewegen sich außerhalb des Gültigkeitsbereichs der verwendeten Modelle.

Mit der Peters-Korrelation konnten die ENACCEF2-Experimente in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden. Bei Verwendung der Dinkelacker-Korrelation wird dagegen die Flammenbeschleunigung in den ENACCEF2-Experimenten deutlich unterschätzt. Bei den Simulationen mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation $B \geq 2$ konnten die Experimente mit nur geringfügigen Abweichungen berechnet werden. Bei Wahl $A = B = 2$ wird tendenziell die Flammenbeschleunigung etwas unterschätzt. Bei Wahl $A = 2$ und $B = 3$ konnte bei den betrachteten ENACCEF2-Versuchen eine gute Übereinstimmung hinsichtlich der Flammenbeschleunigung und der Druckverläufe erzielt werden. Diese Modellkonstanten sollten bei der zukünftigen Berechnung von ENACCEF2-Versuchen vorzugsweise zur Anwendung kommen. Auch bei der Simulation der Verbrennungsbenchmark-Experimente ETSON-SAMHYCO-NET konnte mit $A = 2$ und $B = 3$ eine gute Übereinstimmung hinsichtlich der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit erzielt werden.

4.2.3 Fazit der Validierungsrechnungen zu H_2 -Verbrennung

Im Rahmen von RS1562 wurde mit CHEMKIN eine eigene Flamelet-Bibliothek für die Verbrennung von H_2/H_2O /Luft-Gemische erzeugt. In Abhängigkeit von der initialen Gemischzusammensetzung (H_2 , H_2O) und der initialen Temperatur werden die Gemischzusammensetzung und die Temperatur des verbrannten Gases tabelliert. Radikale (O, OH, ...), die nur in sehr geringen Mengen vorkommen und lediglich die Temperatur des verbrannten Gases beeinflussen, wurden zu einer Spezies zusammengefasst. Diese Flamelet Bibliothek und die benötigten User-Fortran-Routinen wurden erfolgreich getestet.

Unterschiedliche Korrelationen für die turbulente Flammgeschwindigkeit beim Burning-Velocity-Modell wurden durch Nachrechnung verschiedener Versuche getestet. Die initiale H₂-Konzentration lag im Bereich von 6 vol-% – 15 vol-%. Dabei konnten folgende Schlussfolgerungen gezogen werden:

- Die Peters-Korrelation unterschätzt die Brenngeschwindigkeit bei den langsam verbrennenden THAI-Experimenten (HD-7, HD-10, HD-39) signifikant. Bei der schnellen, turbulent beschleunigten Verbrennung in den ENACCEF2-Experimenten (11 vol-% – 15 vol-% H₂) wird dagegen eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt.
- Die Simulationen mit der Dinkelacker-Korrelation unterschätzen bei allen Experimenten die Verbrennungsgeschwindigkeit.
- Es wurde eine modifizierte Dinkelacker-Korrelation mit 2 Modellkonstanten getestet. Die Kombination $A = 2$ und $B = 3$ hat bei Berücksichtigung aller Experimente die beste Übereinstimmung erzielt. Mit dieser Korrelation konnten alle simulierten Experimente zumindest zufriedenstellend berechnet werden. Allerdings war auch bei dieser Korrelation nicht möglich, alle Details der Flammenausbreitung und des Druckverlaufs richtig zu simulieren.
- Auch andere Kombinationen wie ($A = 1$ und $B = 3$; $A = B = 2,5$; $A = B = 3$) haben eine ähnlich gute Übereinstimmung erzielt. Je nach Versuch und gewählter Anfangsturbulenz ergibt sich ein anderes Ranking. Die Ergebnisse unterschieden sich in der Regel aber nur moderat.
- Die Korrelation der TUM für die turbulente Flammgeschwindigkeit wurde getestet. Es war nicht möglich, mit dem gleichen Formfaktor B alle Experimente zufriedenstellend nachzurechnen. Mit $B = 1$ konnten die THAI-Versuche HD-7 und HD-10 in guter Übereinstimmung mit dem Experiment simuliert werden. Bei HD-39 wurde mit $B = 1$ eine zu schnelle Verbrennung simuliert, mit $B = 0,5$ wurde die Verbrennungsgeschwindigkeit leicht unterschätzt. Bei den ENACCEF2-Experimenten wird selbst mit $B = 0,5$ eine viel zu schnelle Flammenausbreitung simuliert.
- Die Anfangsturbulenz wurde bei keinem Versuch gemessen. Bei den THAI-Experimenten hat die Anfangsturbulenz einen deutlichen Einfluss auf den Ablauf der Verbrennung. Der Einfluss ist ähnlich groß wie der Einfluss des Parameters A ($1 \leq A \leq 3$) in der Korrelation. Ohne Kenntnis der Anfangsturbulenz ist eine genauere Parameteranpassung kaum möglich. Bei den ENACCEF2-Experimenten

ist der Einfluss der Anfangsturbulenz auf die Anfangsphase begrenzt, sofern realistische Annahmen für die initialen Werte getroffen werden.

- Beim Experiment HD-39 liegt zu Beginn überall eine H₂-Konzentration größer als 6 vol-% vor. Im Experiment wurde nach Ende der Verbrennung noch eine mittlere H₂-Konzentration von 1,1 vol-% gemessen. Diese unvollständige Verbrennung konnte nicht berechnet werden, da das Gemisch überall eine Konzentration größer als die Zündgrenze (4 – 5 vol-% H₂) hatte und Verlöschungsprozesse nicht modelliert werden können. Hierzu wäre eine Modellerweiterung notwendig.

4.3 AP3.3 Aerosolmodellierung

Einleitung

Bei den bisherigen Arbeiten mit CFX in RS1526 /SCH 17/wurde die Wechselwirkung von Aerosolen mit Dampf noch nicht modelliert. Dieser Aspekt wurde in dem vorliegenden Projekt untersucht und modelliert. Primäres Ziel ist, dabei ein möglichst gutes Modell zur Berechnung der Verteilung und Ablagerung der Aerosolpartikel zu finden. Weiterhin wurde auch die Ausbreitung von Aerosolen in einer Mehrraumgeometrie untersucht und simuliert. Es wurden sowohl die KAEVER-Versuche wie auch der VANAM-M3-Versuch für die Modellertüchtigung und Validierung verwendet .

4.3.1 KAEVER-Versuche

4.3.1.1 Beschreibung und vertiefte Analyse

Die KAEVER-Versuche /POS 97/ untersuchen die Sedimentation und das Ablagerungsverhalten von Aerosolen (CsI, Ag, CsOH, SnO₂) in einer reaktortypischen Geometrie. Es handelt sich um die Personenschleuse eines Kernkraftwerks (Durchmesser ca. 2 m, Länge ca. 3,5 m). Für die CFX-Rechnungen wurde die Geometrie vereinfacht nachgebildet (siehe Abb. 4.140). Im Rahmen der KAEVER-Versuche wurde untersucht, wie sich eine Erhöhung der Luftfeuchtigkeit auf die Aerosoldurchmesser und auf das Ablagerungsverhalten der Aerosole auswirkt. Im Vorhaben RS1526 wurde schon eine Berechnung des Ablagerungsverhaltens von CsI-Aerosol bei trockenen Zuständen durchgeführt (KAEVER-Versuche K100A und K102A), ähnliche Versuche auch mit höherer Luftfeuchtigkeit. Eine Übersicht zu den Versuchen mit CsI findet sich in Tab. 4.10.

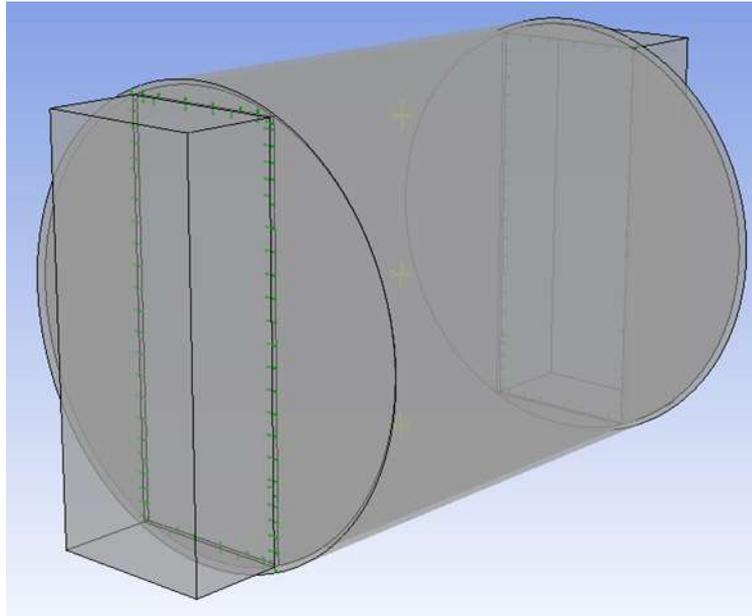


Abb. 4.140 KAEVER-Versuchsbehälter (CFX-Geometrie)

Tab. 4.10 KAEVER-Versuchsreihe

Versuch	Aerosol	TH-Bedingung (relative Feuchte)
K100A / K102A	CsI	0 – 10 %
K106A	CsI	85 – 90 %
K108A / K110A	CsI	95 %
K123A	CsI	100 % (schwach übersättigt)

In Abb. 4.141 ist der Abbau der luftgetragenen CsI-Konzentration über der Zeit aufgetragen. Um die Kurven vergleichbar zu machen, wurden die CsI-Konzentrationen auf den Anteil der Anfangskonzentration normiert. Die Darstellung ist logarithmisch. Der Abbau der Konzentrationen bei den unterschiedlichen Versuchen lässt sich gut durch Exponentialfunktionen approximieren. Es zeigt sich sehr deutlich, dass bei den Experimenten mit höherer relativer Luftfeuchtigkeit der Abbau der CsI-Konzentration deutlich schneller geht als bei den Experimenten mit niedrigerer relativer Luftfeuchte.

Ein sehr ähnliches Bild findet sich auch beim Abbau der Aerosole CsOH, Ag und SnO₂, die in Abb. 4.142 bis Abb. 4.144 dargestellt sind. Hier lässt sich überall der Trend zu einem deutlich schnelleren Abbau des Aerosols bei höherer Luftfeuchtigkeit klar erkennen.

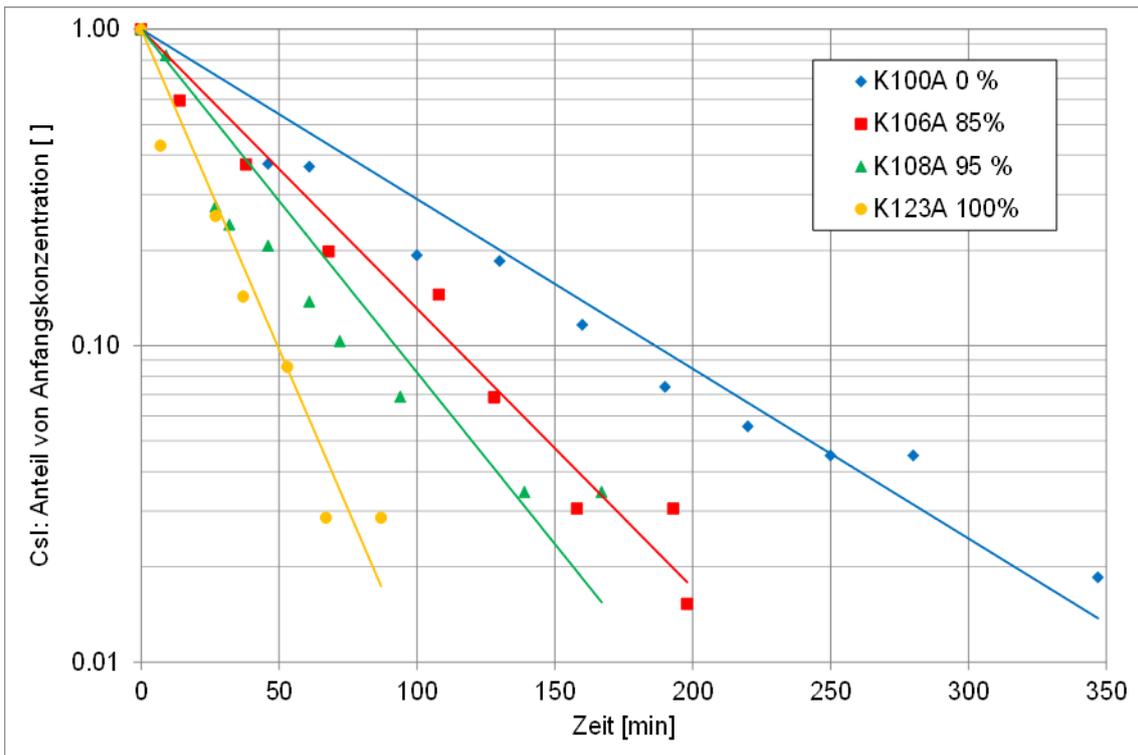


Abb. 4.141 Einfluss der relativen Feuchte auf den Abbau der luftgetragenen CsI-Konzentration

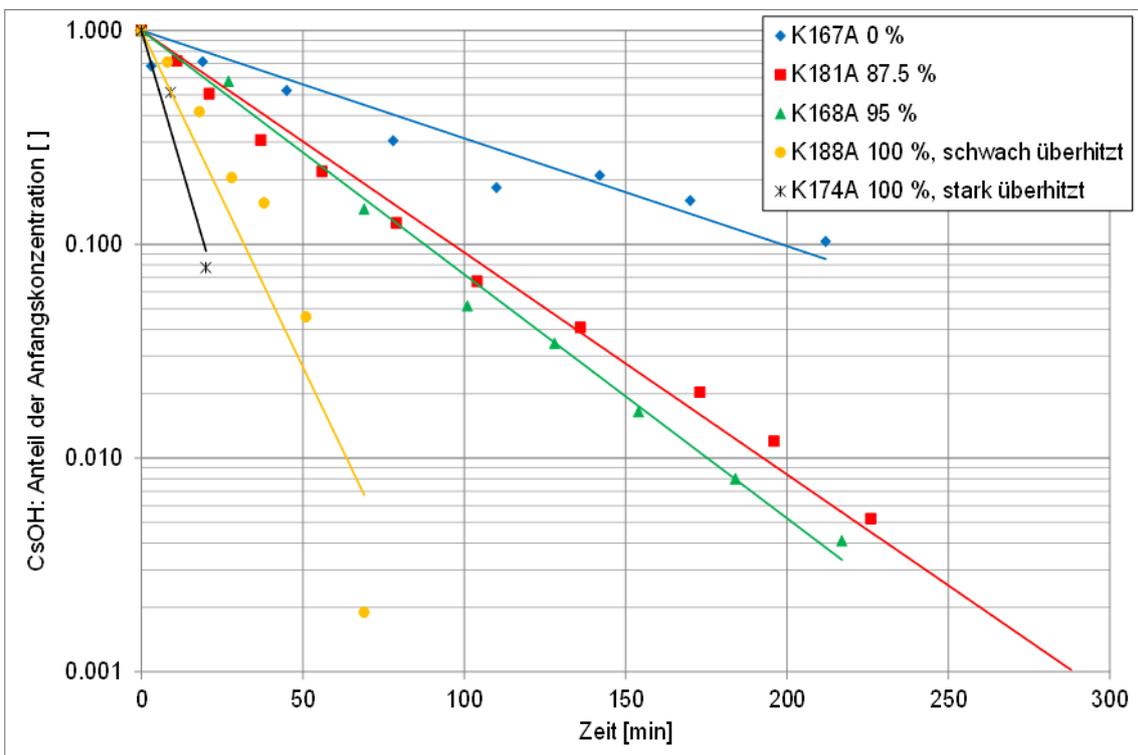


Abb. 4.142 Einfluss der relativen Feuchte auf den Abbau der luftgetragenen CsOH-Konzentration

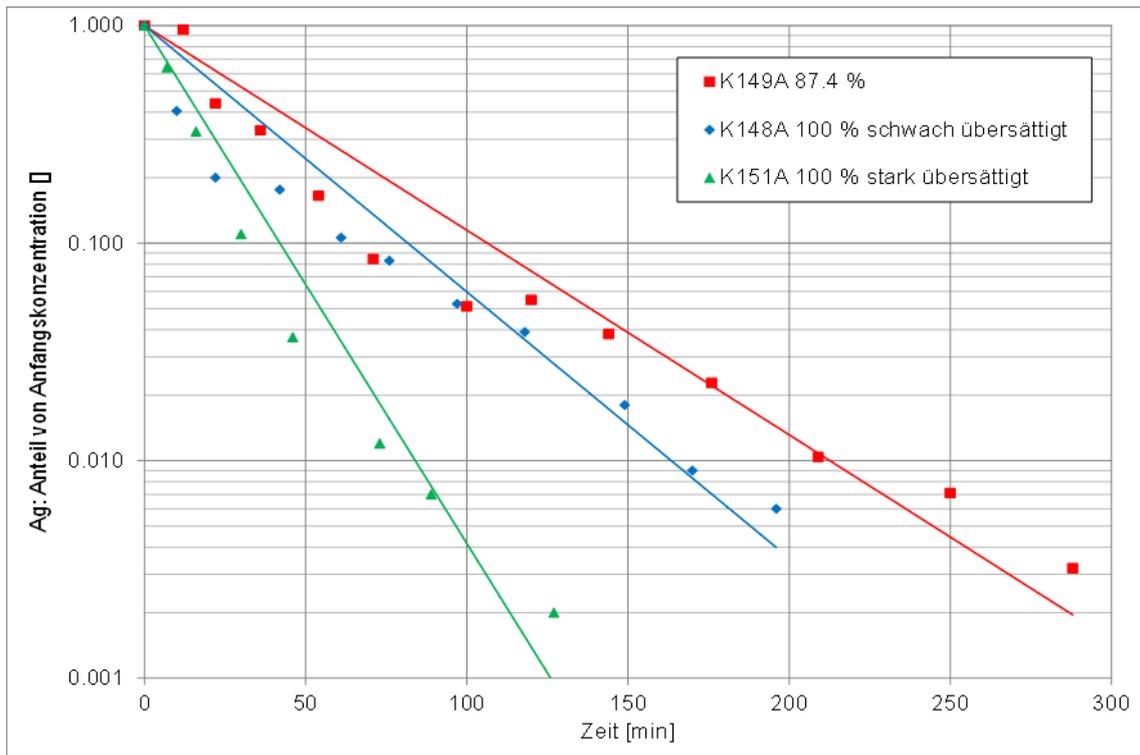


Abb. 4.143 Einfluss der relativen Feuchte auf den Abbau der luftgetragenen Ag-Konzentration

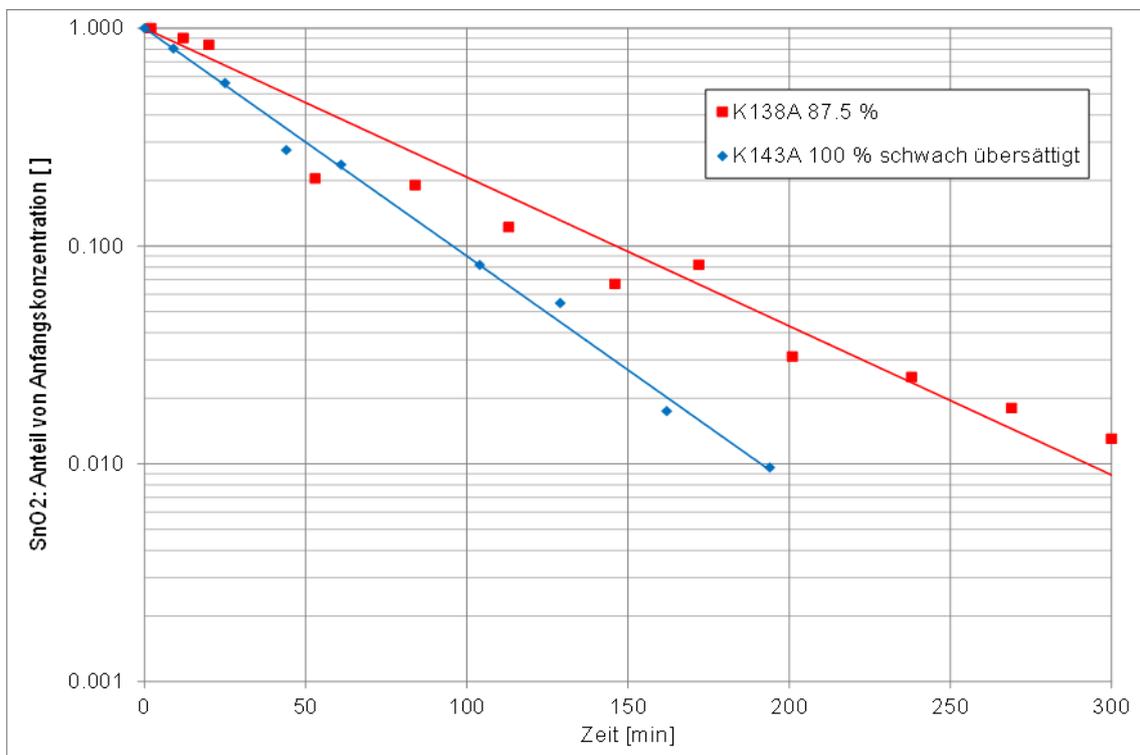


Abb. 4.144 Einfluss der relativen Feuchte auf den Abbau der luftgetragenen SnO₂-Konzentration

Im Folgenden wird die *Abbauzeit* als diejenige Zeit definiert, ab der die luftgetragene Aerosolkonzentration unter 5 % der Anfangskonzentration fällt. Diese Abbauzeit wurde für alle Experimente anhand der Abb. 4.141 bis Abb. 4.144 bestimmt. Diese Abbauzeiten sind in Abb. 4.145 über der relativen Luftfeuchte aufgetragen. Auch hier zeigt sich bei allen Aerosolen der klare Trend zu einer Verringerung der Abbauzeiten bei höherer Luftfeuchte. Als Ursache wird einer Vergrößerung der Partikel durch Kondensation von Dampf an den Aerosolpartikeln angenommen. Bei löslichen Partikeln (hier: CsI und CsOH) wird der Partialdruck abgesenkt, bei dem Dampf an den Partikeln kondensieren kann. Deshalb kann bei ihnen schon unterhalb von 100 % rel. Luftfeuchte eine Partikelvergrößerung und dadurch ein schnellerer Abbau der luftgetragenen Konzentration stattfinden. Bei den nicht-löslichen Partikeln (hier: Ag und SnO₂) tritt dieser Effekt nicht auf und erst bei 100 % rel. Luftfeuchte findet eine Partikelvergrößerung statt. Die zu den Partikeldurchmessern vorhandenen Messwerte sollen im Folgenden untersucht werden.

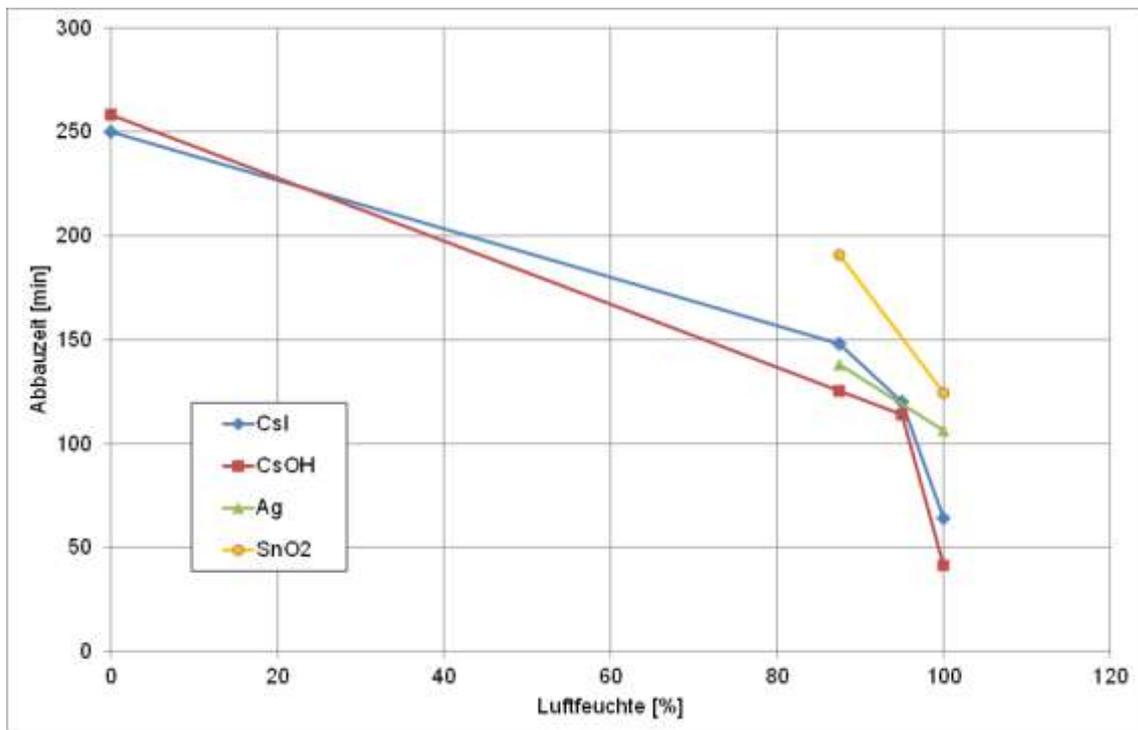


Abb. 4.145 Abhängigkeit der Abbauzeiten von der relativen Luftfeuchte

Bei den KAEVER-Experimenten gab es unterschiedliche Methoden zur Messung der Partikeldurchmesser:

- Aerodynamic Particle Sizer (APS): Beschleunigung der Partikel in einem Gasstrahl. Die Geschwindigkeit der Partikel ist proportional zu deren aerodynamischen Durchmesser und wird mittels Lichtschranke gemessen.

- Impaktor: Enthält unterschiedliche Stufen, in denen die Partikel umgelenkt werden. Größere (trägerer) Partikel scheiden sich jeweils auf einer Prallplatte ab.
- REM-Aufnahmen: Analyse der Partikeldurchmesser unter dem Raster-Elektronen-Mikroskop.

Bei den REM-Aufnahmen wurden nur die Partikeldurchmesser ohne Wasseranlagerungen gemessen. Da hier aber gerade die Vergrößerung der Partikel durch Dampf/Wasseranlagerungen untersucht werden soll, können die REM-Aufnahmen hierfür keine Hinweise geben. In Abb. 4.146 sind die gemessenen mittleren (aerodynamischen) Durchmesser des CsI-Aerosols über die relative Luftfeuchtigkeit aufgetragen (APS und Impaktormessungen). Die Fehlerbalken stellen die Standardabweichung dar. Im Bereich 10 – 80 % relativer Luftfeuchte gibt es keine Messwerte. Die vorhandenen Messwerte schwanken relativ stark und sie haben einen großen Messfehler. Aufgrund der Daten lässt sich die Partikelvergrößerung durch Kondensation kaum erkennen, geschweige denn quantitativ sicher beschreiben.

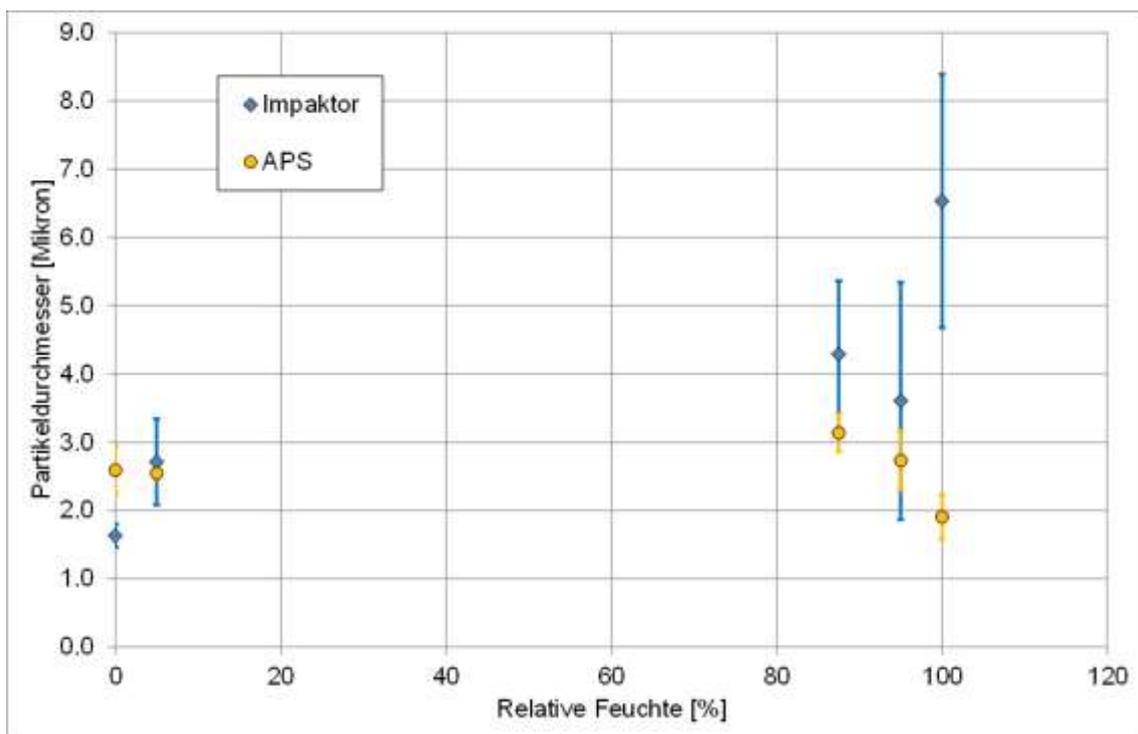


Abb. 4.146 Einfluss der relativen Luftfeuchtigkeit auf die aerodynamischen Durchmesser der CsI-Aerosole (Impaktormessung)

Ein ähnliches Bild findet sich auch bei den CsOH-Versuchen. In Abb. 4.147 sind die gemessenen CsOH-Partikeldurchmesser über der relativen Luftfeuchte aufgetragen. Hier gibt es nur Impaktormessungen, aber keine APS-Messungen. Grundsätzlich lässt sich

der Trend herauslesen, dass bei hohen Luftfeuchtigkeiten ($> 80\%$) die Partikel größer sind als bei trockenen Bedingungen. Allerdings haben die Impaktormessungen wieder starke Schwankungen, so dass eine quantitative Aussage nicht möglich ist. So scheint z. B. der Durchmesser bei 87% relativer Feuchte größer zu sein als bei 95% oder 100% , was physikalisch schwierig zu erklären ist.

Auch bei den Messwerten zu den Versuchen mit Silber (Ag) und SnO_2 zeigen sich starke Schwankungen (siehe Abb. 4.148, Abb. 4.149). Beim SnO_2 sind teilweise keine Fehlerbalken angegeben. Hier gab es nur jeweils einen Messwert, so dass keine Standardabweichung angegeben werden kann.

Generell kann gesagt werden, dass die Messgenauigkeit der Partikelgrößen zu groß ist, um verlässliche Aussagen machen zu können. Je nach Messmethode sind deutliche Unterschiede bei gleichen Versuchen zu beobachten. Ein Trend zu größeren Durchmessern bei höherer Luftfeuchtigkeit lässt sich anhand der vorhandenen Messwerte leider nicht generell beschreiben, weder qualitativ und erst recht nicht quantitativ. Aus diesem Grund wird im Folgenden der umgekehrte Weg gewählt und es wird mit CFX untersucht, welchen mittleren Durchmesser die Partikel haben müssten, um die richtigen Abbauezeiten (Abb. 4.145) wiederzugeben.

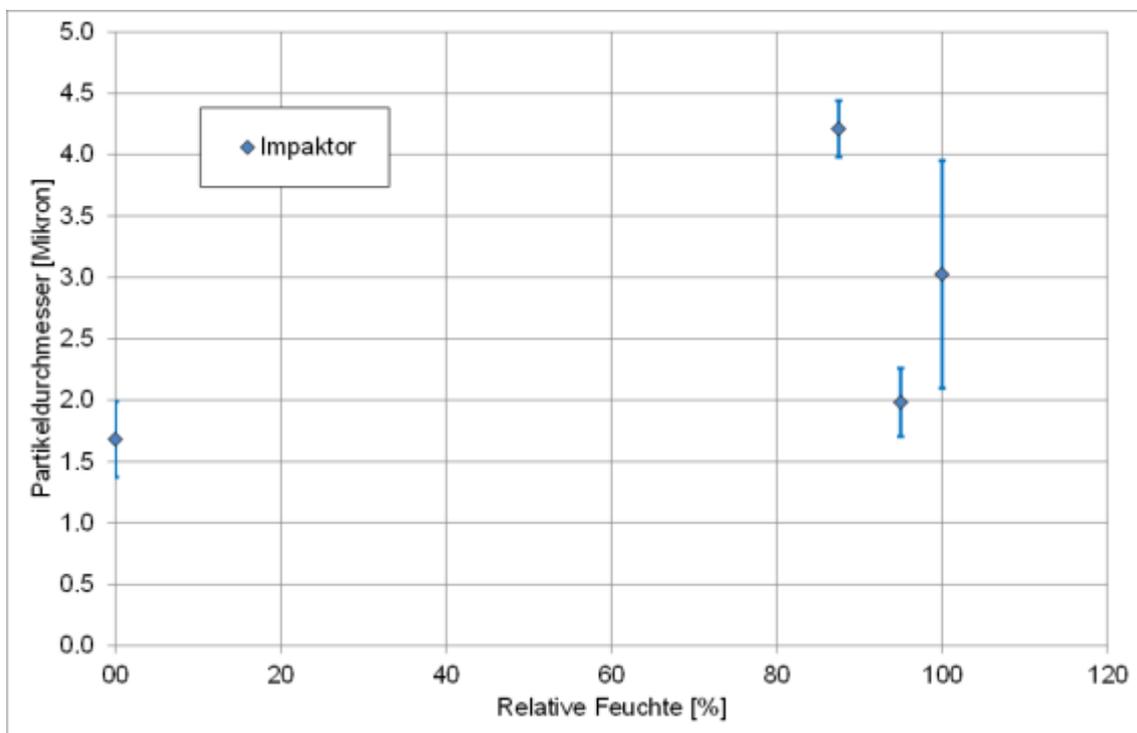


Abb. 4.147 Einfluss der relativen Luftfeuchtigkeit auf die aerodynamischen Durchmesser der CsOH-Aerosole (Impaktormessung)

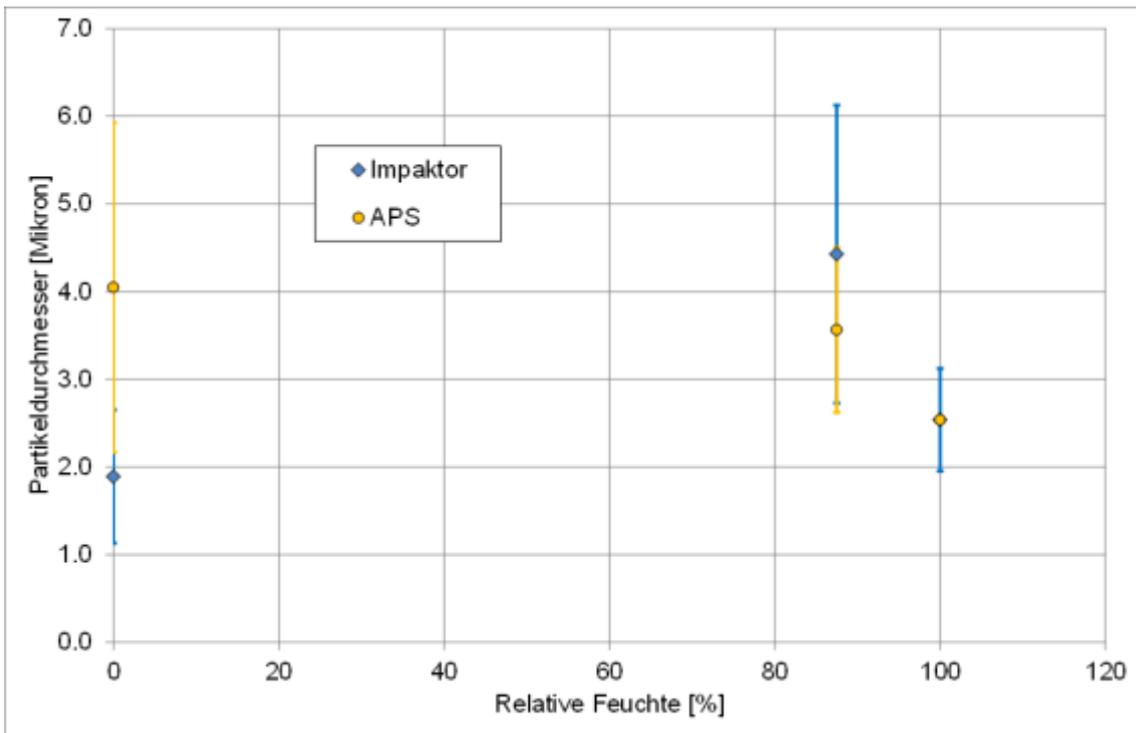


Abb. 4.148 Einfluss der relativen Luftfeuchtigkeit auf die aerodynamischen Durchmesser der Ag-Aerosole (Impaktormessung)

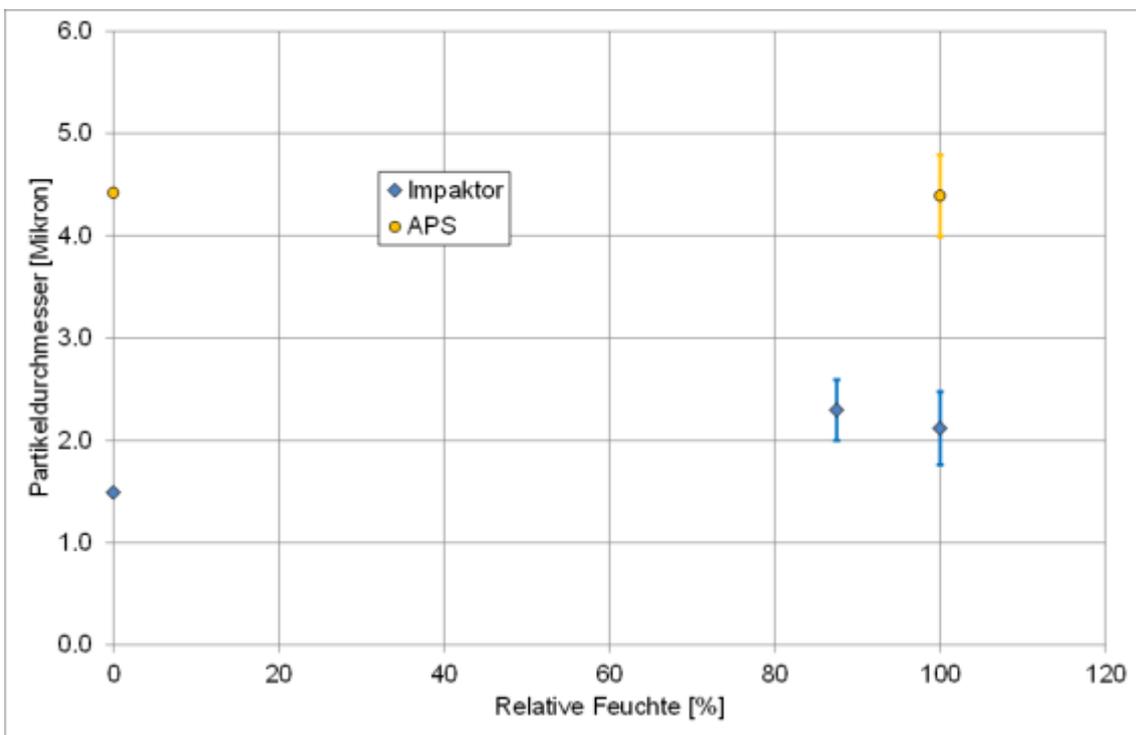


Abb. 4.149 Einfluss der relativen Luftfeuchtigkeit auf die aerodynamischen Durchmesser der SnO₂-Aerosole (Impaktormessung)

Leider gibt es auch innerhalb des KAEVER-Abschlussberichtes nur eine Angabe zur Dichte der Aerosolpartikel (siehe Abb. 4.150). Diese scheint unklar zu sein, wird aber mit 5 g/cm^3 abgeschätzt. Es wurden also vermutlich keine Messungen zur Dichtebestimmung durchgeführt. Generell hat sich im letzten CFD-Projekt die COCOSYS-Vorgehensweise (Verwendung der halben Dichte des Feststoffes) bewährt, darum wird hier im Folgenden für alle Aerosole von einer Dichte von $2,5 \text{ g/cm}^3$ ausgegangen.

Aerosolparameter			
Partikelmaterial:			
löslich:	CsOH, CsI (altern. NaCl, ?)		
unlöslich:	Ag, SnO ₂ (altern. In ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃)		
Partikelgröße:			
Primärpartikel:	d	< 0,1 μm) Kondensationspartikel) versch. Quellen
(Einzelpartikel)	d	= 0,3 μm - 0,8 μm	
	d	= 1 μm - 5 μm	
Partikeldichte: unklar, Basisannahme $\rho = 5 \text{ g/cm}^3$			
Agglomerate:			
Ketten:	$d_{\text{geom.}}$	~ 5 μm	
Klumpen:	$d_{\text{geom.}}$	= 1 μm - 5 μm	
Anlagerungen:	$d_{\text{geom.}}$	≥ 1,0 μm	
		(Anlagerung an großem Partikel)	
Partikelkonzentration:	C	≤ 10 g/m ³	

Abb. 4.150 KAEVER-Abschlussbericht: Unklare Partikeldichte

4.3.1.2 Erstellung eines CFX-Datensatzes

In Tab. 4.11 finden sich die Parameter für die CFX-Berechnung. Das Gitter ist mit einer Elementanzahl von 275 807 nicht allzu fein, aber eine genaue Auflösung von feinen Gasströmungen ist im vorliegenden Fall nicht notwendig. Als Turbulenzmodell wurde das k-omega-SST-Modell verwendet. Die Aerosolpartikel wurden mit Hilfe des Algebraic-Slip-Modells simuliert.

Tab. 4.11 Infobox für das KAEVER-Experiment

Experimente	KAEVER, zahlreiche Experimente (K100A bis K188A)
Phänomen	Absinken und Ablagerung von Aerosolpartikeln, Einfluss von Dampf auf das Absinkverhalten
Elementzahl	275 807
Materialien	Air, H ₂ Og, Aerosolartikel (CsI, CsOH, Ag, SnO ₂)

Experimente	KAEVER, zahlreiche Experimente (K100A bis K188A)
Turbulenzmodell	SST
Aerosolmodell	Algebraic-Slip-Modell (ASM)
Konvergenz	RMS < 0,0001
CFX-Version	17.0

4.3.1.3 Einfluss von Luftbewegungen im KAEVER-Behälter

Laut /FIR 02/ kann davon ausgegangen werden, dass die thermohydraulischen Bedingungen im Versuchsbehälter gut durchmischt sind. Ursache für die Luftbewegungen im Behälter sind laut /FIR 02/ sowohl die von den unisolierten Wandteilen eingebrachten thermischen Gradienten, die zu einer natürlichen Konvektionsschleife führen, wie auch die permanente Dampfeinspeisung nahe dem Behälterboden. Ob die Luftbewegungen im Experiment gerichtet sind, hat möglicherweise einen Einfluss auf das Abbauverhalten der Aerosole. Hierüber sind jedoch leider keine Informationen vorhanden. Da keine genaue Spezifikation über den Ort und die Stärke der Luftbewegungen im Experiment angegeben werden, wurde hierzu mit CFX eine Parameterstudie durchgeführt. Als von außen kommender Anstoß für Luftbewegungen wurde in CFX ein homogener Quellterm für turbulente kinetische Energie hinzugefügt (siehe Tab. 4.12). Der Quellterm wurde so eingefügt, dass die jeweilige turbulente kinetische Energie als Zielgröße erreicht wurde. In der Rechnung CFX 4 gab es permanent im gesamten Behälter also etwa eine turbulente kinetische Energie von $1,0E-2 \text{ m}^2/\text{s}^2$, was einer turbulenten Gasbewegung von etwa $0,14 \text{ m/s}$ entspricht (diese ist ungerichtet). Abb. 4.151 zeigt den Einfluss der turbulenten Luftbewegung auf die Partikelkonzentration. In beiden Bildern ist die Skalierung gleich. Links ist das Bild einer ruhenden Atmosphäre zu sehen, hier entsteht eine Schichtung mit einer hohen CsI-Konzentration unten und einer niedrigen Konzentration oben im Behälter. Durch den Luftmitriss der Partikel kommt es nur zu kleinen turbulenten Verwirbelungen. Rechts im Bild ist eine Rechnung mit zusätzlichem Turbulenzterm zu sehen (Rechnung CFX4). Die turbulente Gasbewegung hat zu einer homogenen Verteilung der Partikelkonzentration geführt.

Tab. 4.12 Parameterstudie zum Turbulenz-Einfluss

CFX-Rechnung	Quellterm / turbulente kinetische Energie [m ² /s ²]	Resultierende (turbulente) Gasgeschwindigkeitsfluktuation [m/s]
CFX1 (ruhende Atmosphäre)	0,0	0,0
CFX2	1,0E-4	0,014
CFX3	1,0E-3	0,045
CFX4	1,0E-2	0,14
CFX5	1,0E-1	0,45

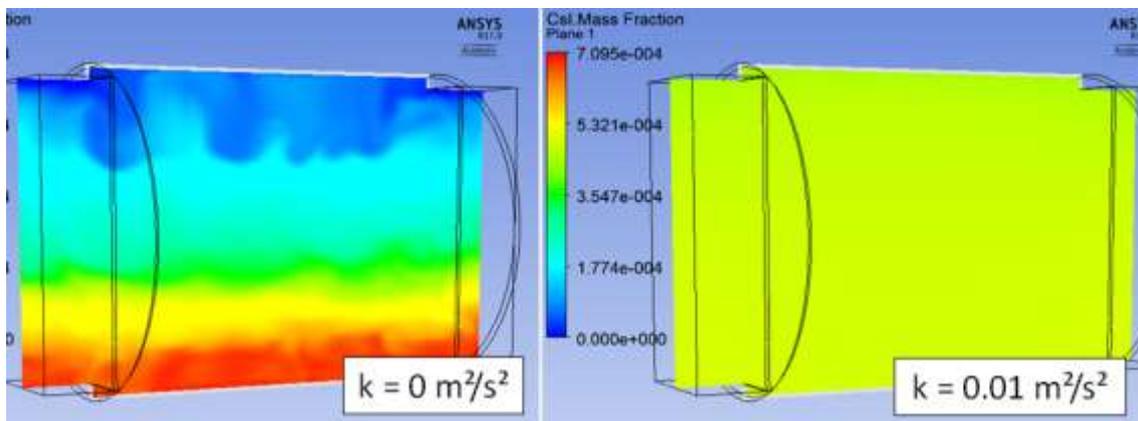


Abb. 4.151 Einfluss turbulenter Luftbewegung auf die Partikelkonzentration (Cell Mass Fraction)

Abb. 4.152 zeigt, wie sich dieser Turbulenzeinfluss auf den Abbau der mittleren luftgetragenen Csl-Konzentration auswirkt. Bei zunehmender Turbulenz kommt es zu einem verlangsamten Abbau. In einer ruhenden Atmosphäre ist die Csl-Konzentration unten im Behälter höher. Da die Ablagerung auf den Boden aus der unteren Schicht heraus erfolgt, geht dieser Vorgang in einer ruhenden Atmosphäre schneller als in einer turbulenten.

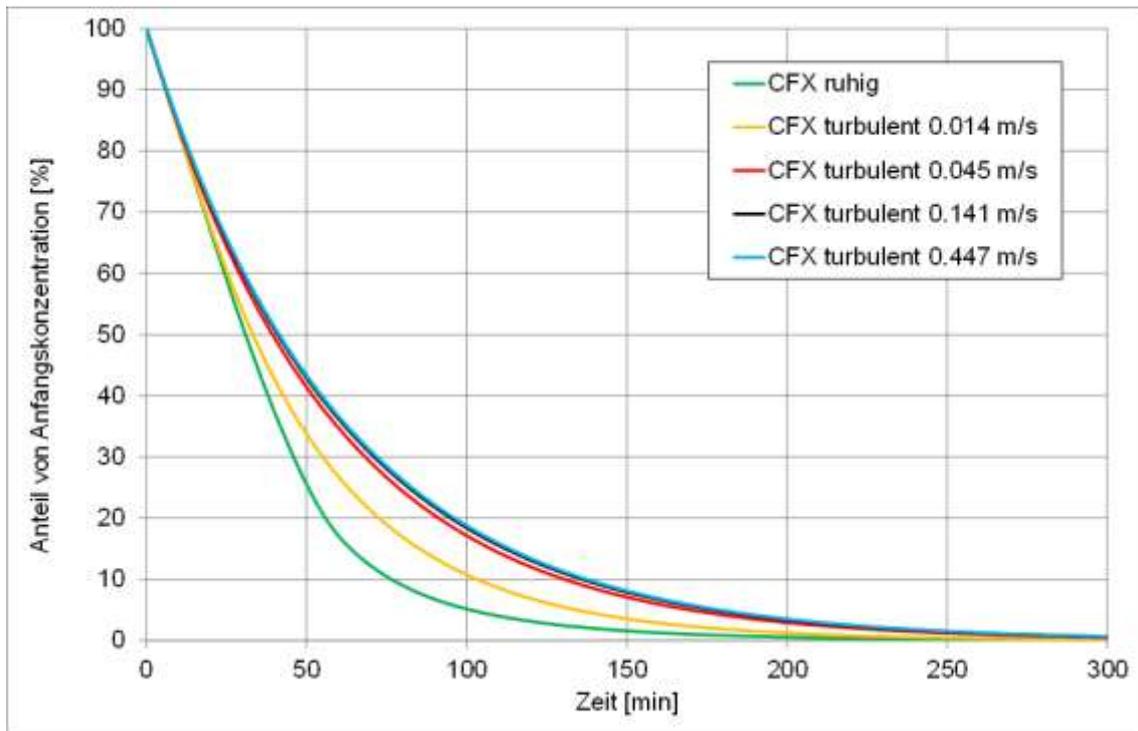


Abb. 4.152 Einfluss turbulenter Luftbewegung auf den Abbau des Csl

In Abb. 4.153 wurde die Abbaupzeit über die Turbulenz-Geschwindigkeit bei den unterschiedlichen CFX-Rechnungen aufgetragen. Auch hier ist zu sehen, dass eine höhere turbulente Luftgeschwindigkeit die Abbaupzeit vergrößert. Allerdings konvergiert die Abbaupzeit bei höherer Turbulenz gegen einen festen Wert (ca. 180 Minuten). Ist die Atmosphäre ideal gemischt, so kann auch mit noch höherer Turbulenz keine noch stärkere Vermischung erzeugt werden. Wie anfangs erwähnt, können Ort und Stärke der Luftbewegungen im Experiment nicht genau spezifiziert werden. Eine Luftbewegung im Bereich von 0 – 20 cm/s erscheint jedoch möglich, wobei 0,2 m/s schon zu einer nahezu ideal durchmischten Atmosphäre führen würde. Dieses deckt sich mit den Aussagen zum Experiment in /FIR 02/. In den folgenden Rechnungen wird ein Turbulenzterm von $0,01 \text{ m}^2/\text{s}^2$ angenommen, was einer Geschwindigkeit von 0,14 m/s entspricht.

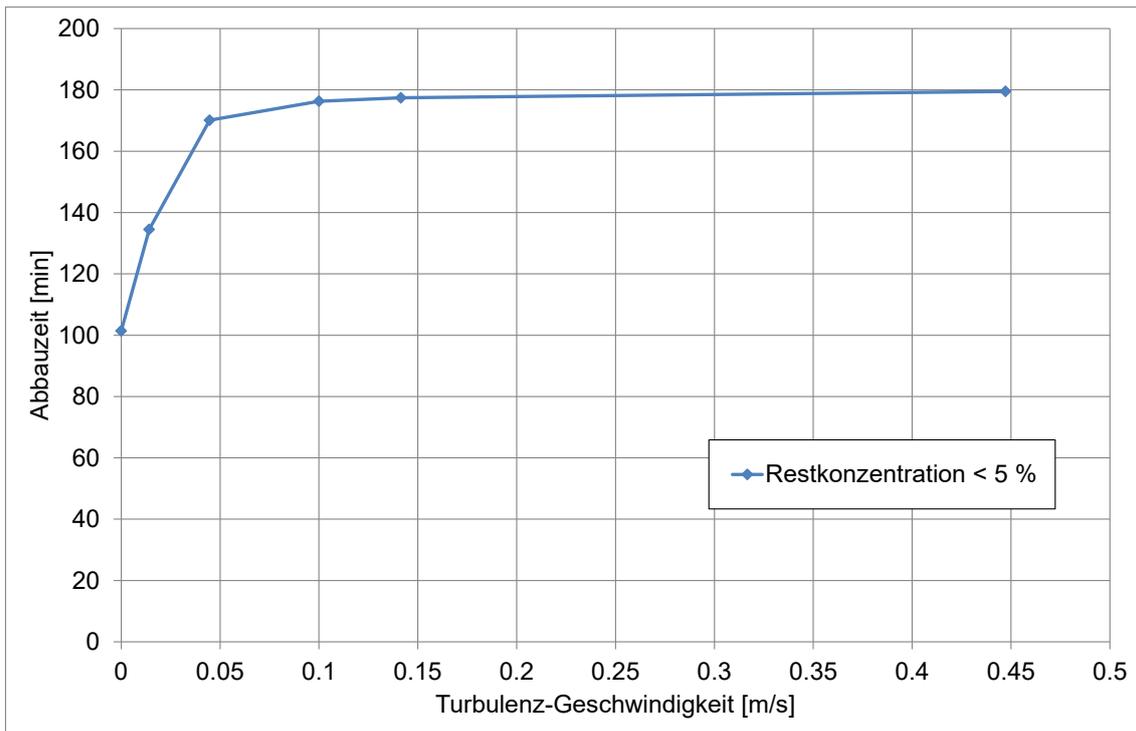


Abb. 4.153 Abhängigkeit der Abbauzeit des CsI von der induzierten Turbulenz im KAEVER-Behälter

4.3.1.4 Einfluss der Partikeldurchmesser auf die Abbauzeit

Zur Simulation der KAEVER-Experimente soll zunächst der passende trockene Partikeldurchmesser gefunden werden. Dazu wurde eine Parameterstudie durchgeführt, bei welcher der Partikeldurchmesser variiert wird und die zugehörige Abbauzeit bestimmt wird. In Abb. 4.154 sind die sich ergebenden Abbauzeiten in Abhängigkeit vom Partikeldurchmesser dargestellt. Dieser Zusammenhang lässt sich gut durch eine Potenzfunktion beschreiben. Aus der Umkehrfunktion kann nun zu einer beliebigen Abbauzeit auf den zugehörigen Partikeldurchmesser in Mikron geschlossen werden.

$$\text{Durchmesser} = \left(\frac{\text{Abbauzeit}}{1147.1 \text{ min}} \right)^{-\frac{1}{2.039}} \quad (4.1)$$

Dieses wurde zuerst für die CsI- und CsOH-Versuche gemacht, wo Messdaten in trockener Atmosphäre vorhanden sind. In Tab. 4.13 findet sich ein Vergleich der mit Gleichung (4.1) bestimmten Durchmesser mit den experimentellen Messwerten. Unter Berücksichtigung der großen experimentellen Unsicherheiten (Messunsicherheiten Impaktor, APS, unklare Partikeldichte, Gasturbulenz im KAEVER-Behälter) ist dies eine zufriedenstellende Übereinstimmung.

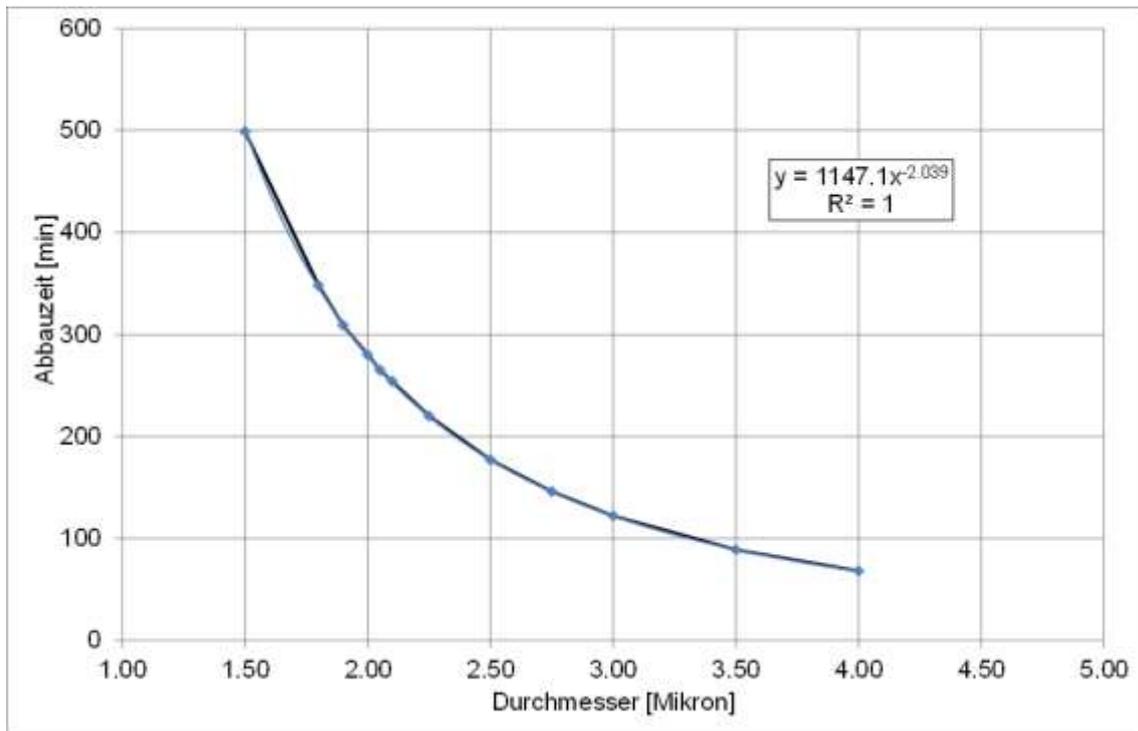


Abb. 4.154 Abhängigkeit der Abbauzeit vom Partikeldurchmesser

Tab. 4.13 Vergleich von Durchmessern nach Gleichung (4.1) und experimentellen Messwerten (lösliche Aerosole)

Material	Abbauzeit bei trockenen Versuchen	Durchmesser nach Gleichung (4.1)	Durchmesser Impaktor	Durchmesser APS
	[min]	[μm]	[μm]	[μm]
CsI	250	2,11	2,17±0,40	2,57±0,22
CsOH	258	2,08	1,68±0,31	-

Da für Ag und SnO₂ keine Versuche in trockener Atmosphäre durchgeführt wurden, werden die Abbauzeiten bei 87,5 % relativer Feuchte verwendet. Es wird davon ausgegangen, dass es bei diesen nicht-löslichen Aerosolen unterhalb von 100 % Feuchte nicht zu einer Partikelvergrößerung und damit nicht zu einer Veränderung der Abbauzeiten kommt. Aus dieser Abschätzung ergeben sich (wieder mit Gleichung (4.1)) die in Tab. 4.14 dargestellten Durchmesser. Diese Werte liegen zwischen den Messwerten der Impaktor- und APS-Messung, sind also in einer plausiblen Größenordnung.

Tab. 4.14 Vergleich von Durchmessern nach Gleichung (4.1) und experimentellen Messwerten (nicht-lösliche Aerosole)

Material	Abbauzeit bei trockenen Versuchen	Durchmesser nach Gleichung (4.1)	Durchmesser Impaktor	Durchmesser APS
	[min]	[μm]	[μm]	[μm]
Ag	138	2,83	1,89 \pm 0,76	4,05 \pm 1,88
SnO ₂	191	2,41	1,49 \pm (?)	4,22 \pm 0,04

Die einzelnen Werte für die Durchmesser sind noch einmal in Abb. 4.155 graphisch dargestellt. Insgesamt passen die mit Gleichung (4.1) aus den Abbauzeiten bestimmten Durchmesser gut zu den gemessenen Werten. Grundsätzlich zeigen sich bei den Messwerten sehr starke Schwankungen und auch die einzelnen Messgeräte (Impaktor, APS) weichen stark voneinander ab. Die mit dem APS bestimmten Durchmesser sind teilweise deutlich höher als die Impaktorwerte. Diese Durchmesser für die trockenen Zustände werden nun als Basis für die Versuche mit höherer Luftfeuchtigkeit verwendet. Anhand der Verringerung der Abbauzeiten bei höherer Luftfeuchte (siehe Abb. 4.145) wird nun die Partikelvergrößerung durch Kondensation von Dampf an Aerosolen ermittelt.

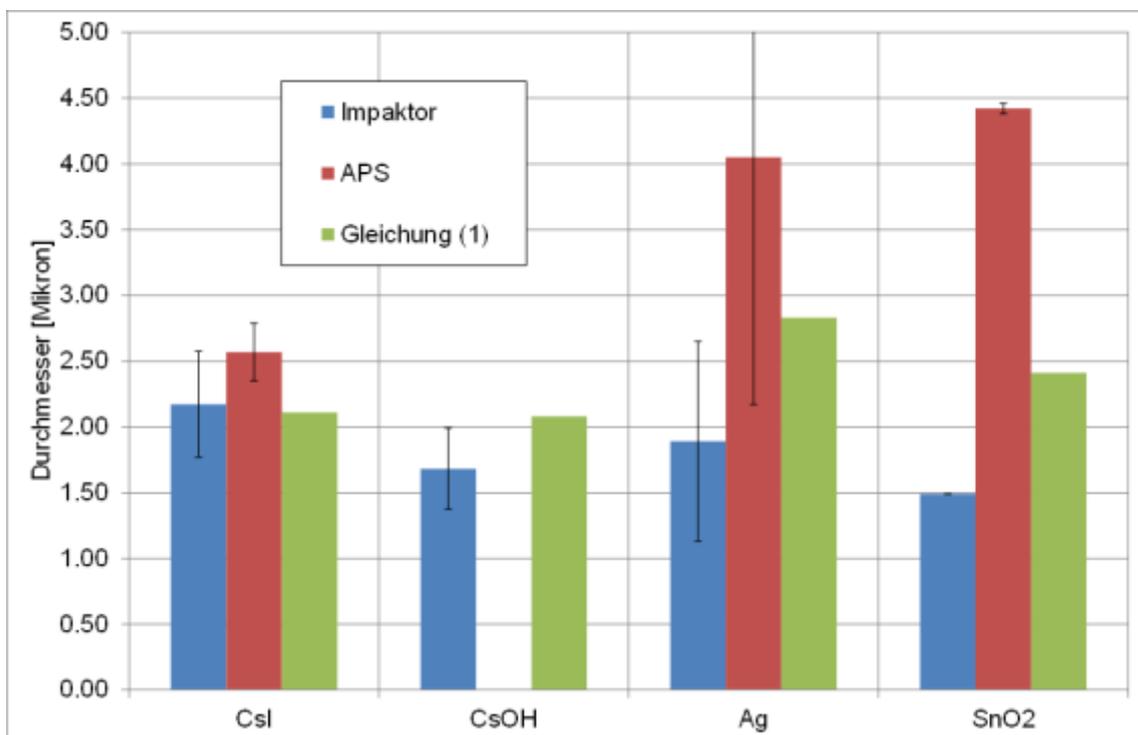


Abb. 4.155 Durchmesservergleich (Impaktor, APS, Gleichung (4.1))

4.3.1.5 Berechnung des Aerosol-Abbaus bei erhöhter Luftfeuchtigkeit

Da in den KAEVER-Experimenten zahlreiche experimentelle Unsicherheiten sind, soll der Einfluss der erhöhten Luftfeuchtigkeit nicht getrennt für die einzelnen Aerosole bestimmt werden, sondern nur ein genereller typischer Verlauf abgeschätzt werden (für lösliche und nicht-lösliche Aerosole). In Abb. 4.156 und Abb. 4.157 wurde versucht, eine mittlere Kurve durch die vorhandenen experimentellen Werte zu legen (schwarze Linie). Hierbei wurde das unterschiedliche Verhalten bei löslichen und nicht-löslichen Partikeln berücksichtigt. Bei den nicht-löslichen Aerosolen wird davon ausgegangen, dass bis nahe an 100 % relativer Feuchte keine Kondensation und Partikelvergrößerung stattfindet. Aus den abgeschätzten Abbauezeiten ergeben sich die in Tab. 4.16 und mit Gleichung (4.1) berechneten Partikeldurchmesser bzw. auch die Durchmesser-Zunahme durch Wasseranlagerungen. Diese Durchmesserzunahme soll nun auf die im vorherigen Abschnitt bestimmten Durchmesser der trockenen Aerosolpartikel (siehe Abb. 4.155) angewendet werden. Hierzu wird in CFX folgende Gleichung für den lokalen Partikeldurchmesser (im ASM-Modell) eingefügt und verwendet:

$$\text{Partikeldurchmesser} = d_{\text{trocken}} + \Delta d(\text{rel. Feuchte, Löslichkeit}) \quad (4.2)$$

Der trockene Partikeldurchmesser d_{trocken} ist abhängig vom Material (siehe Abb. 4.155, Tab. 4.13) die Durchmesserzunahme ist abhängig von der relativen Feuchte und der Löslichkeit (siehe Tab. 4.15 und Tab. 4.16). Im Gegensatz zum Experiment, in dem immer eine Partikelgrößenverteilung vorliegt, wird bei den vorliegenden CFX-Simulationen nur ein mittlerer Durchmesser verwendet. Zum einen, weil die experimentelle Datenbasis nicht gut genug ist für detailliertere Aussagen, zum anderen, weil dadurch die Simulationen vereinfacht und beschleunigt werden, was bei der Anwendung in komplexen Geometrien und bei der Simulation langer Transienten von hoher Bedeutung ist.

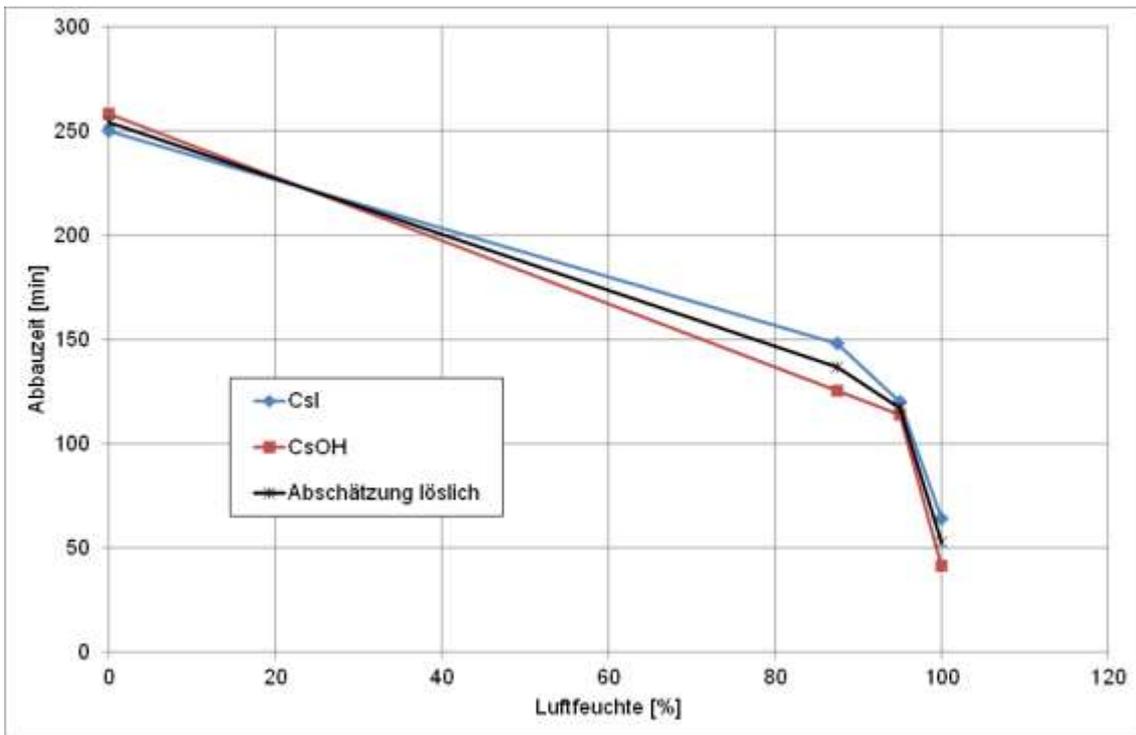


Abb. 4.156 Abschätzung der generellen Veränderung der Abbauzeiten durch erhöhte Luftfeuchtigkeit bei löslichen Aerosolen

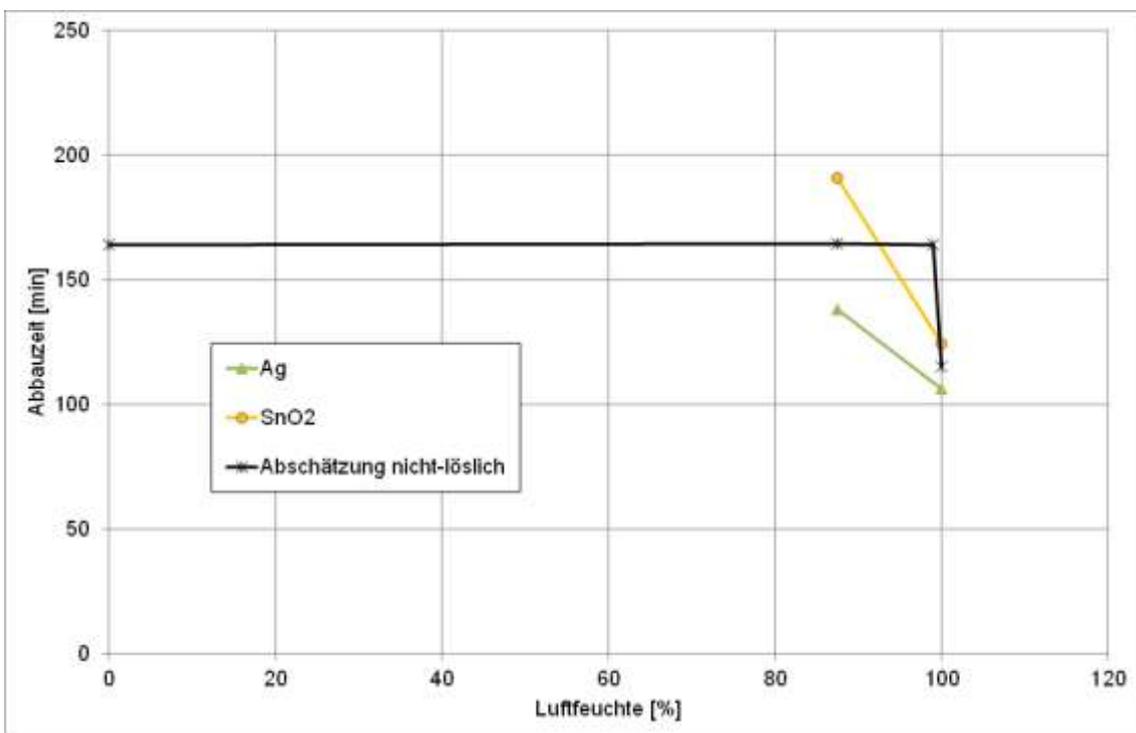


Abb. 4.157 Abschätzung der generellen Veränderung der Abbauzeiten durch erhöhte Luftfeuchtigkeit bei nicht-löslichen Aerosolen

Tab. 4.15 Einfluss der Luftfeuchte auf Abbauzeiten und Partikeldurchmesser bei löslichen Aerosolen

Relative Feuchte	Abbauzeit (geschätzt nach Abb. 4.156)	Durchmesser nach Gleichung (4.1)	Durchmesser-Zunahme
[%]	[min]	[μm]	[μm]
0,0	254	2,09	-
87,5	137	2,84	0,74
95,0	117	3,06	0,97
100,0	53	4,53	2,44

Tab. 4.16 Einfluss der Luftfeuchte auf Abbauzeiten und Partikeldurchmesser bei nicht-löslichen Aerosolen

Relative Feuchte	Abbauzeit (geschätzt nach Abb. 4.157)	Durchmesser nach Gleichung (4.1)	Durchmesser-Zunahme
[%]	[min]	[μm]	[μm]
0,0	164	2,09	-
87,5	164	2,81	0,00
99,0	164	3,09	0,00
100,0	115	3,69	0,49

Mit Gleichung (4.2) werden nun die Partikeldurchmesser in Abhängigkeit der relativen Feuchte noch einmal für die unterschiedlichen Materialien berechnet und mit den experimentellen Messwerten (Impaktor, APS) verglichen. Die Ergebnisse sind in Abb. 4.158 bis Abb. 4.161 für die unterschiedlichen Materialien dargestellt. Die mit Gleichung (4.2) berechneten Durchmesser passen insgesamt gut zu den experimentellen Werten. Wie schon erwähnt, schwanken die experimentellen Messwerte sehr stark. Deshalb lässt sich aus den experimentellen Werten der modellierte Größenzuwachs der Partikel bei erhöhter Feuchte auch nicht so gut herauslesen. Dies ist aber die zentrale Annahme, mit der die Verringerung der Abbauzeiten eines Aerosols erklärt wird. Insofern erscheint der mit Gleichung (4.2) jeweils errechnete Durchmesserlauf mindestens im Rahmen der experimentellen Werte als passend und als grundsätzlich plausibel.

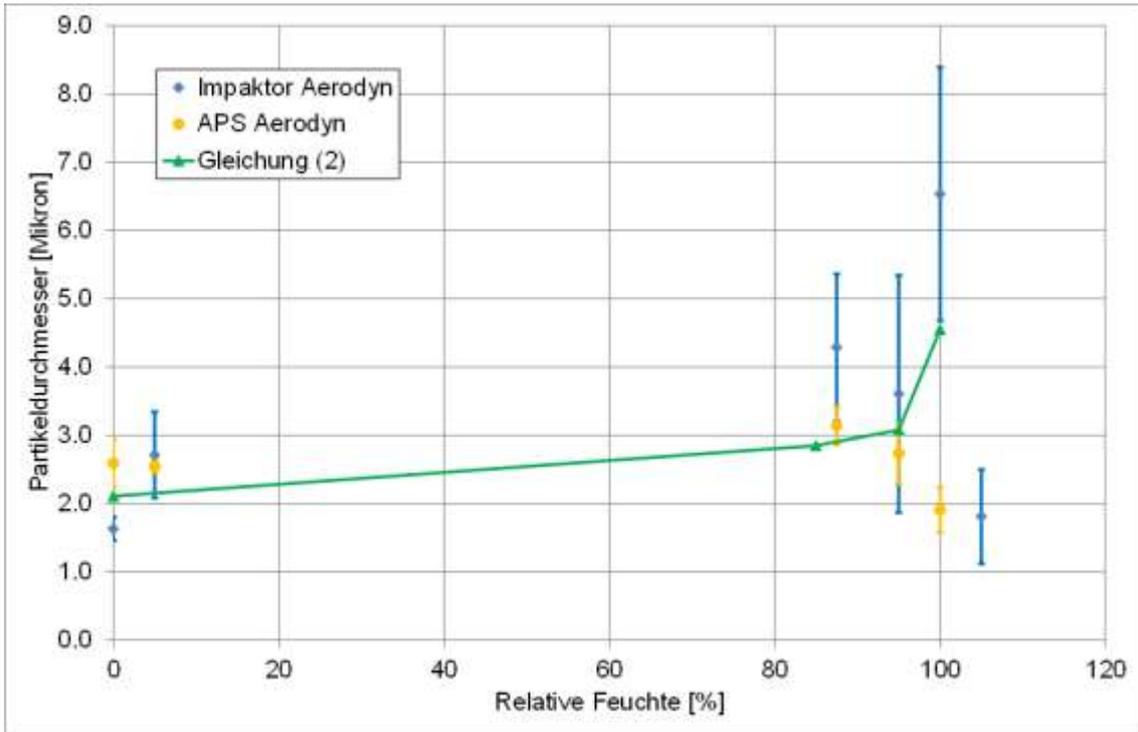


Abb. 4.158 CsI: Vergleich von Partikeldurchmessern aus Gleichung (4.2), Impaktor und APS

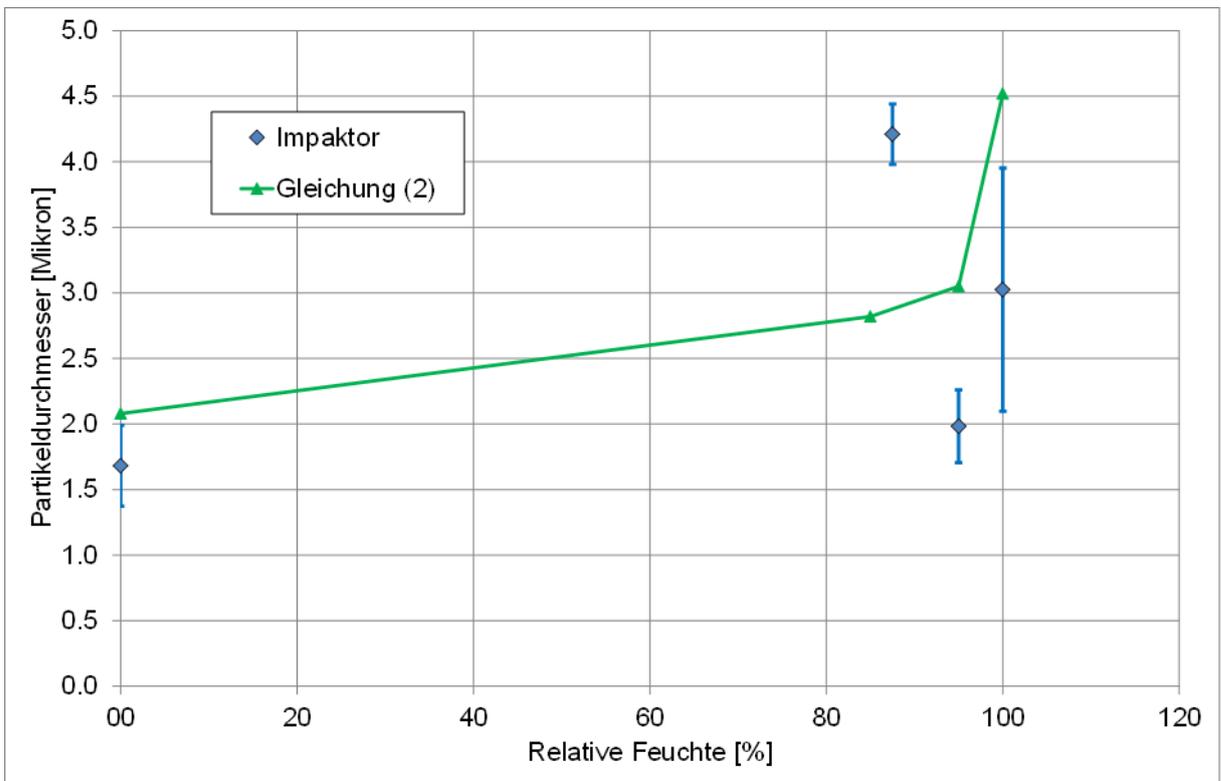


Abb. 4.159 CsOH: Vergleich von Partikeldurchmessern aus Gleichung (4.2) und Impaktor

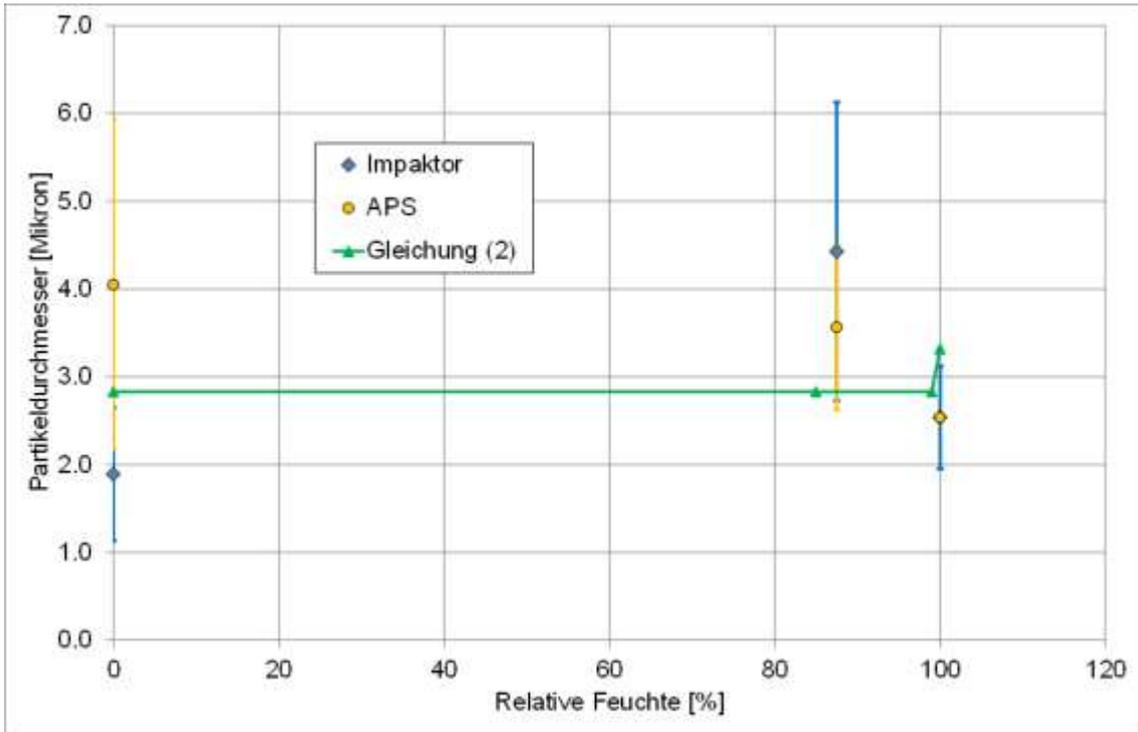


Abb. 4.160 Ag: Vergleich von Partikeldurchmessern aus Gleichung (4.2), Impaktor und APS

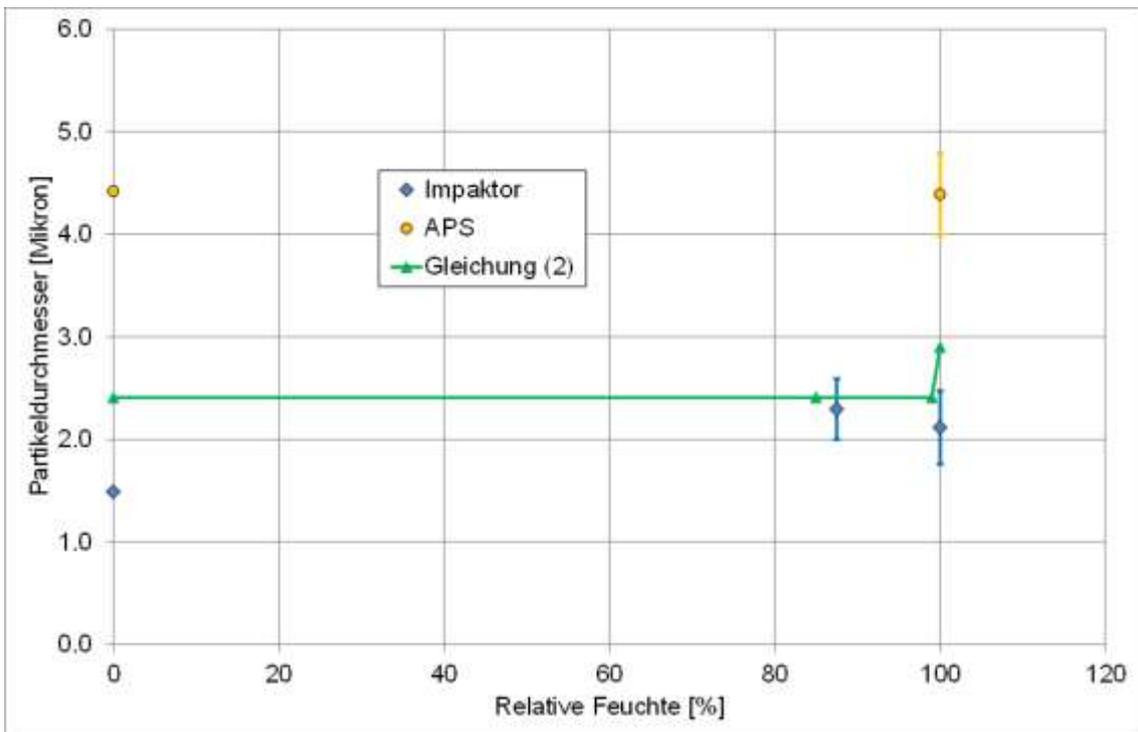


Abb. 4.161 SnO₂: Vergleich von Partikeldurchmessern aus Gleichung (4.2), Impaktor und APS

Mit Gleichung (4.2) werden weiterhin auch alle vorhandenen KAEVER-Experimente noch einmal mit CFX nachgerechnet und die Berechnungsergebnisse werden dann mit dem experimentellen Abbauverhalten (luftgetragene Aerosolkonzentration über der Zeit) abgeglichen. Die Ergebnisse der Berechnungen finden sich in Abb. 4.162 bis Abb. 4.165. Insgesamt kann der Effekt des schnelleren Abbaus bei höherer relativer Luftfeuchtigkeit gut wiedergegeben werden. Es gibt eine gewisse Streuung der Konzentrations-Messwerte um die berechneten CFX-Verläufe. Diese sind aber auf experimentelle Unsicherheiten zurückzuführen. Insgesamt bieten die in Abb. 4.156 und Abb. 4.157 getroffenen Abschätzungen also eine gute Annäherung, mit der man jetzt (getrennt für lösliche und nicht-lösliche Aerosole) den Einfluss der Dampfkondensation und das veränderte Ablagerungsverhalten der Aerosole in den CFX-Simulationen abbilden kann.

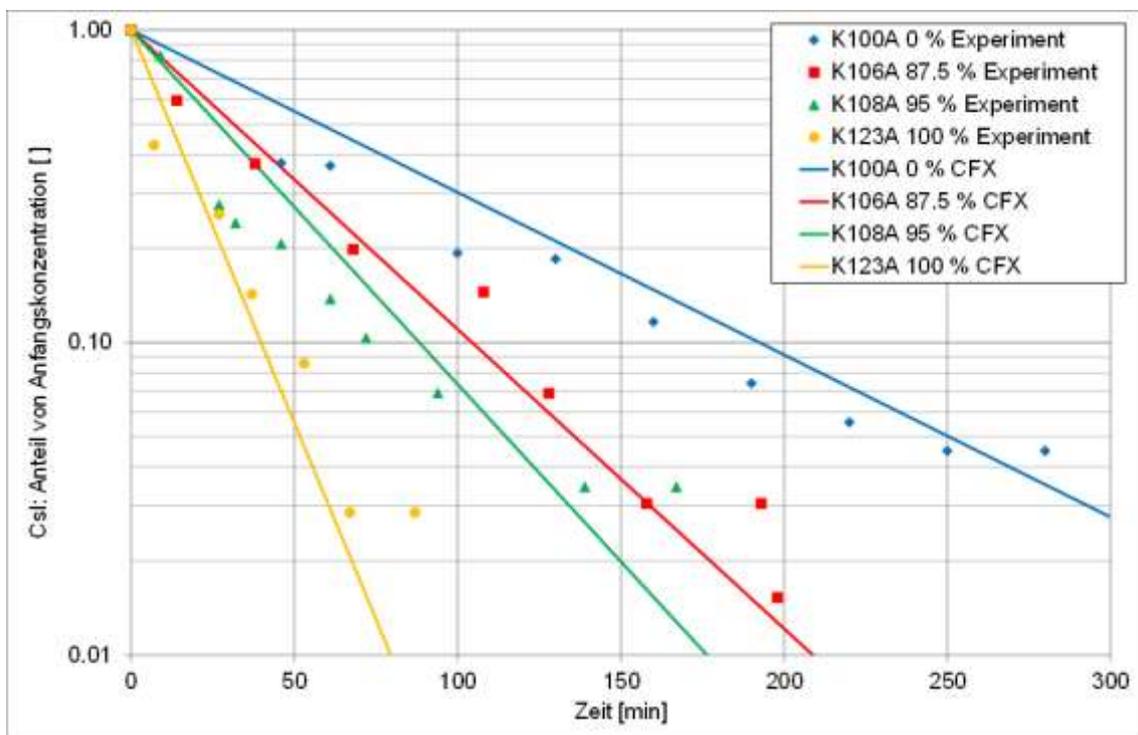


Abb. 4.162 Abbau der luftgetragenen Csl-Konzentration: Vergleich CFX / Messdaten

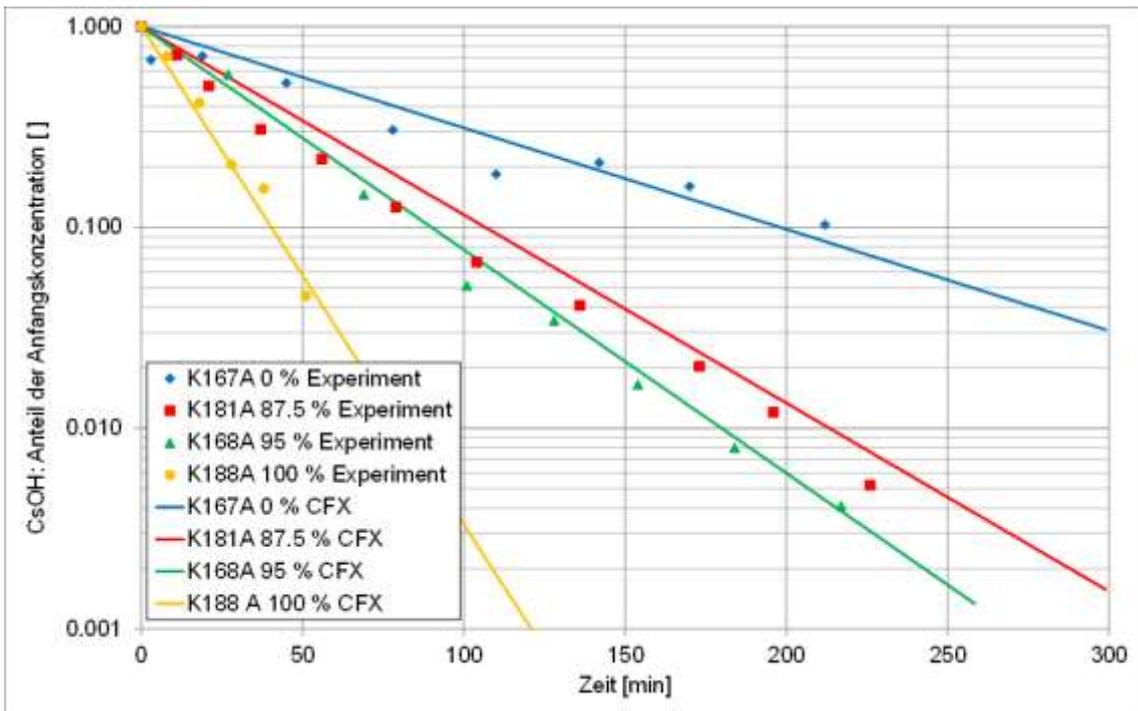


Abb. 4.163 Abbau der luftgetragenen CsOH-Konzentration: Vergleich CFX / Messdaten

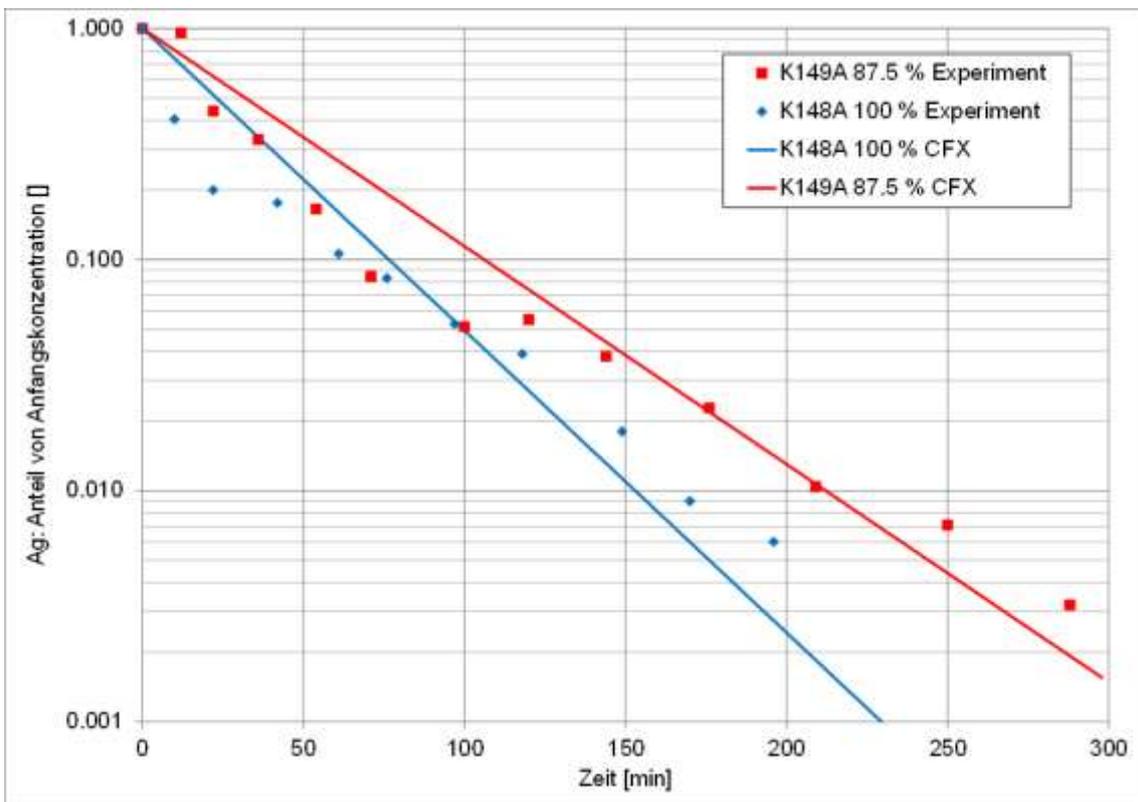


Abb. 4.164 Abbau der luftgetragenen Ag-Konzentration: Vergleich CFX / Messdaten

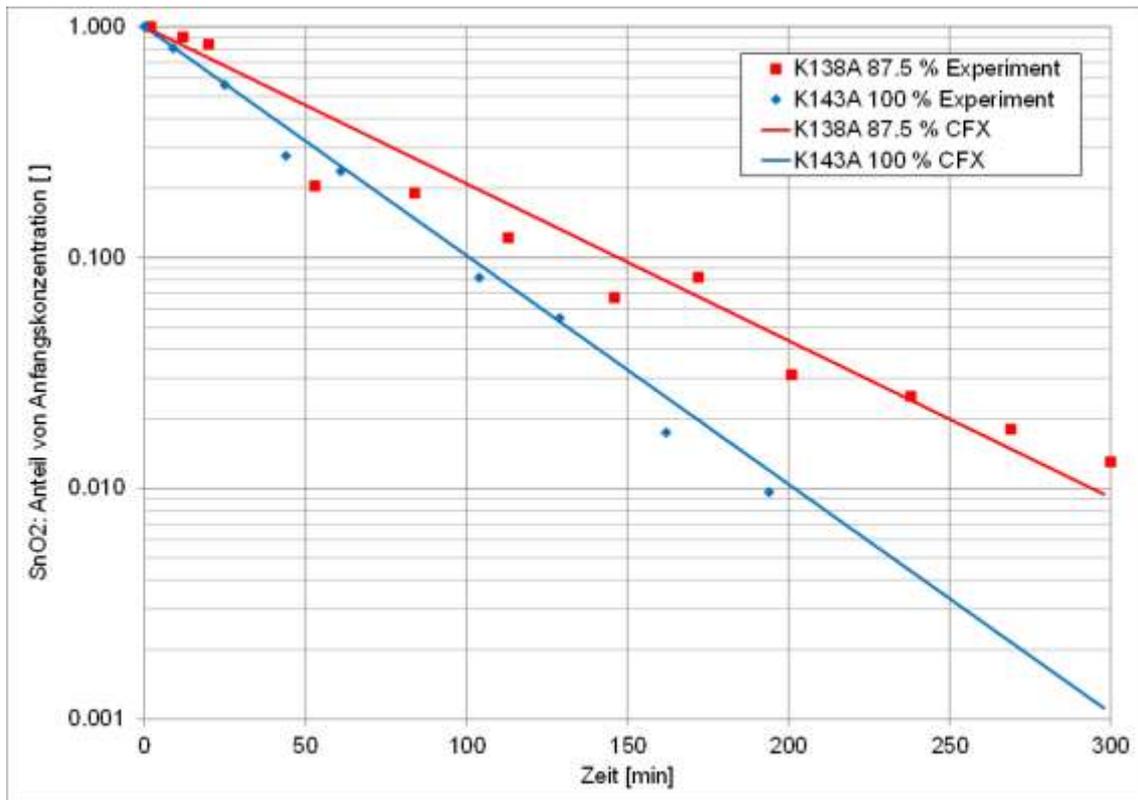


Abb. 4.165 Abbau der luftgetragenen SnO₂-Konzentration: Vergleich CFX / Messdaten

4.3.2 Fazit der KAEVER-Versuche

Die KAEVER-Versuche zeigen ganz klar, dass eine Erhöhung der relativen Luftfeuchte bei allen verwendeten Aerosolen (CsI, CsOH, Ag, SnO₂) zu einem schnelleren Abbau der luftgetragenen Aerosolkonzentration führt. Dieser Effekt tritt bei löslichen Aerosolen schon unterhalb von 100 % relativer Luftfeuchte auf, während er bei nicht-löslichen Aerosolen erst bei 100 % relativer Feuchte auftritt. In einem Störfall liegen in der Regel ausschließlich Misch aerosole vor, so dass es schon unterhalb von 100 % relativer Luftfeuchte zu einer Kondensation von Dampf kommen wird. Die luftgetragene Aerosolkonzentration im (KAEVER-)Experiment lässt sich messtechnisch gut erfassen und das Abbauverhalten qualitativ und quantitativ gut beschreiben.

Bei der Messung der Aerosoldurchmesser in den KAEVER-Versuchen gibt es jedoch große experimentelle Unsicherheiten. Die einzelnen Messwerte haben starke Schwankungen, und verschiedene Messmethoden (Impaktor, APS, ...) zeigen unterschiedliche Ergebnisse. Einen Trend zur Partikelvergrößerung bei höherer Luftfeuchte kann damit nicht sicher belegt werden. Trotzdem wird dieses Verhalten bei der Modellierung

unterstellt, da dieses die einzige plausible Erklärung für das geänderte Abbauverhalten der Aerosole darstellt.

Zunächst werden die Durchmesser der trockenen Partikel durch vergleichende CFX-Simulationen aus den Abbauzeiten für die unterschiedlichen Aerosole bestimmt. Dann wird (auch aus den Abbauzeiten) eine mittlere Partikelvergrößerung abgeschätzt. Die abgeschätzten Durchmesser stimmen im Rahmen der messtechnischen Unsicherheiten mit den Messwerten überein. Der Partikeldurchmesser kann nun durch eine Formel beschrieben werden, die den Durchmesser des trockenen Aerosols und einen feuchte-abhängigen Term enthält. Hier wird zwischen löslichen und nicht-löslichen Aerosolen unterschieden. Nach Implementation dieser Formel in CFX wurden nochmals alle KAEVER-Versuche nachgerechnet. Es zeigte sich eine gute Übereinstimmung zwischen dem simulierten und gemessenen Abbau-Verhalten.

CFX kann mit dieser Art der Modellierung prinzipiell den Effekt der Dampfkondensation und das damit geänderte Ablagerungsverhalten gut abbilden. Damit ist das primäre Ziel dieses Arbeitspunktes erreicht. Das Algebraic-Slip-Modell scheint für diese Anwendungen gut geeignet zu sein. Allerdings hängt die Güte der Ergebnisse stark von der Güte der (gemessenen / bekannten) Aerosolparameter (Durchmesser, Dichte, ...) ab. Für eine Übertragung auf ein anderes Aerosol bzw. eine Anwendungsrechnung wäre eine genaue(re) Ermittlung dieser Materialparameter sinnvoll. Die hier in Einzel-Effekt-Versuchen gewonnenen Erkenntnisse sollen nun im Weiteren auf eine etwas komplexere Mehrraum-Geometrie übertragen werden. Dazu soll der VANAM-M3-Versuch verwendet werden.

4.3.3 VANAM M3

4.3.3.1 Versuchsbeschreibung

Die VANAM-Versuche wurden im Battelle-Model-Containment durchgeführt /KAN 93/ . Es handelt sich um eine Mehrraum-Geometrie mit Betonwänden, die insgesamt eine Höhe von ca. 9,1 m hat. Abb. 4.166 zeigt den VANAM-M3-Versuchsaufbau (als CFX-Datensatz). Der gesamte Versuchsablauf enthält eine Aufheizphase, mehrere Einspeisephase für Dampf und Aerosol (NaOH) sowie Ruhe- bzw. Ablagerungsphasen zwischen den Einspeisungen. Insgesamt dauerte der Versuch über 30 Stunden.

In den vorliegenden Arbeiten sollen nur die Versuchsphasen 2 und 3 simuliert werden. Bei Phase 2 handelt es sich um die erste Einspeisephase für das Aerosol (NaOH). Innerhalb von etwa 30 Minuten werden ca. 2,21 kg NaOH-Aerosol eingespeist. Gleichzeitig mit dem Aerosol wird auch Dampf eingespeist. Bei Phase 3 handelt es sich um eine Phase des Aerosolabbaus in einer stagnierenden Atmosphäre.

Ziel der Simulationen ist eine Validierung der bisher erstellten CFX-Modelle für Aerosole. Dabei soll hiermit erstmalig eine Aerosolverteilung in einer Mehrraumgeometrie simuliert werden. Weiterhin spielt der in den KAEVER-Versuchen untersuchte Effekt der Kondensation von Dampf an Aerosolen auch in VANAM eine Rolle. Bei dem verwendeten Aerosol Natriumhydroxid handelt es sich um ein lösliches Aerosol, deshalb ist hier mit einer Partikelvergrößerung in der dampffreien Atmosphäre zu rechnen. Dieser Effekt sollte zu einem schnelleren Abbau der luftgetragenen NaOH-Konzentration führen.

4.3.3.2 Erstellung eines CFX-Datensatzes

Für die CFX-Simulationen wurde ein Gitter mit insgesamt etwa 3,3 Millionen Elementen erstellt, welches insbesondere in Wandnähe verfeinert wurde, um Effekte wie Wärmeabgabe und Wandkondensation gut abzubilden. Eine weitere Verfeinerung gab es in der Nähe der Einspeisestelle. Abb. 4.167 zeigt das erstellte CFX-Gitter. Die Einspeisung von Dampf und NaOH lag in Raum Nr. R5 in mittlerer Höhe. Zur Turbulenzmodellierung wurde wieder das SST-Modell verwendet und für die Aerosole das Algebraic-Slip-Modell (ASM) ergänzt durch eine Modellierung der Partikelvergrößerung bei dampfreicher Atmosphäre, Gleichung (4.2). Zur Modellierung der Kondensationsvorgänge wurde das ANSYS-Wandkondensationsmodell sowie auch das modifizierte IKE-Volumenkondensationsmodell verwendet. Eine Modellübersicht findet sich in Tab. 4.17.

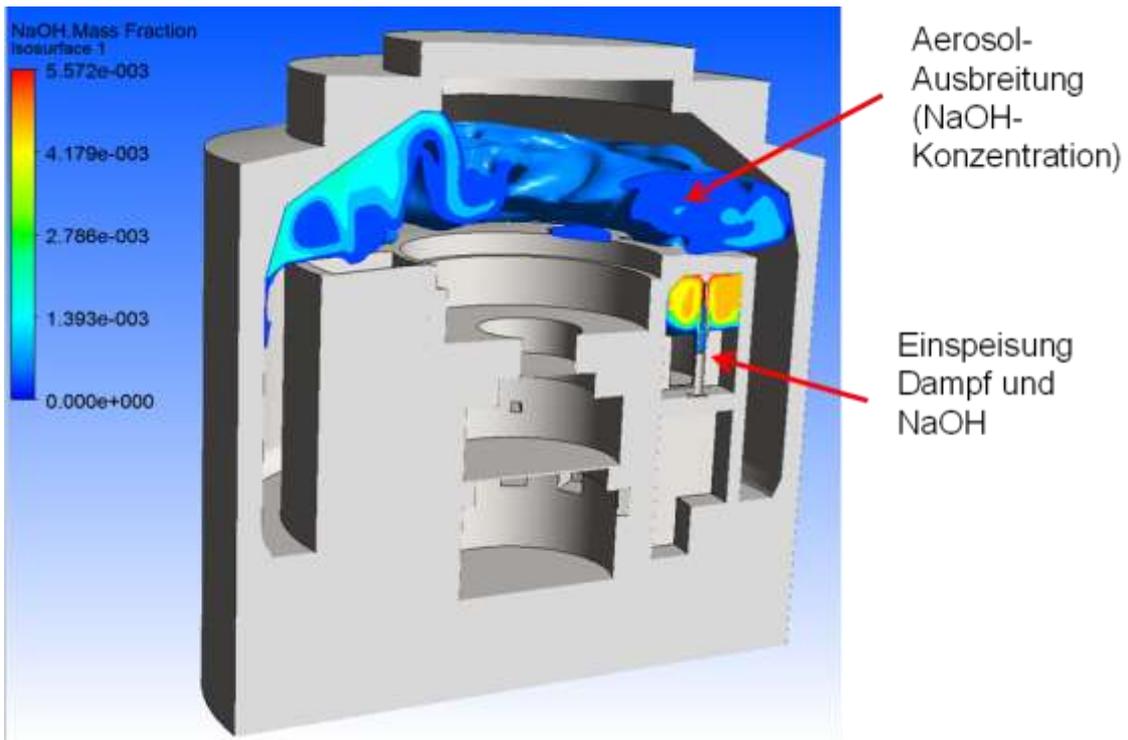


Abb. 4.166 VANAM-M3-Versuchsaufbau (CFX-Datensatz)

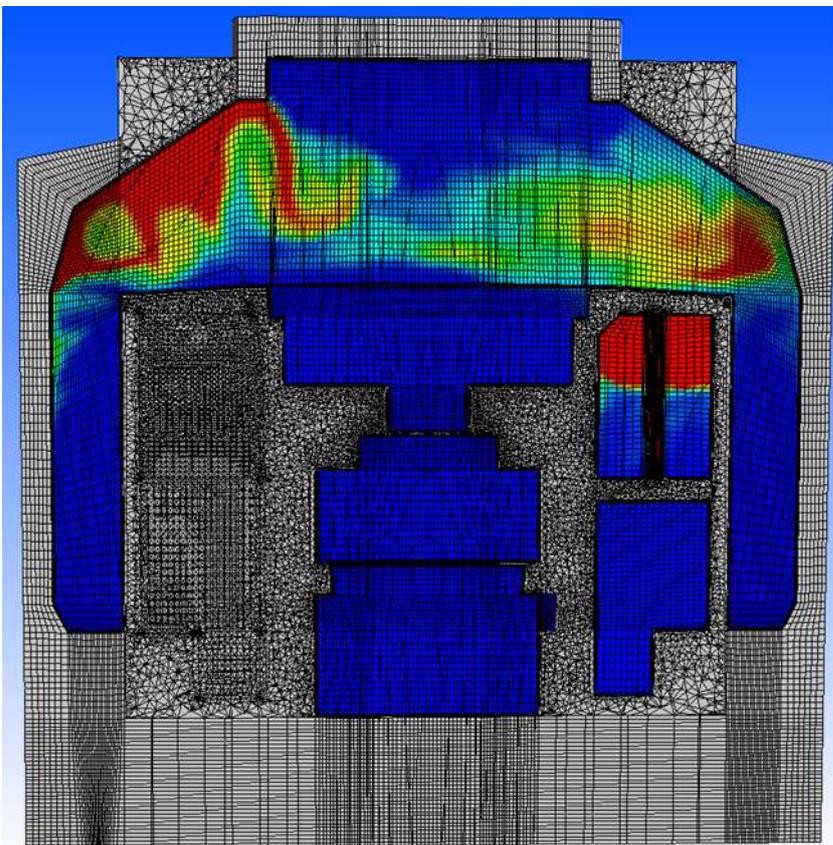


Abb. 4.167 CFX-Gitter für den VANAM-M3-Versuch

Tab. 4.17 Infobox für das VANAM-M3-Experiment

Experiment	VANAM M3
Phänomene	Ausbreitung von Aerosolen in einer Mehrraumgeometrie Absinken und Ablagerung von Aerosolpartikeln Einfluss von Dampf auf das Absinkverhalten
Elementzahl	3 313 771
Materialien	Air, H ₂ Og, H ₂ OI, Aerosolpartikel (NaOH)
Turbulenzmodell	SST
Aerosolmodell	Algebraic-Slip-Modell (ASM) + Partikelvergrößerung durch Dampf
Kondensationsmodelle	ANSYS-Wandkondensation und (modifiziertes) IKE-Volumenkondensationsmodell (siehe RS1526 Abschlussbericht)
Konvergenz	RMS < 0,0001
CFX-Version	17.0

4.3.3.3 Simulation der thermohydraulischen Bedingungen

In der CFX-Simulation wurden die experimentellen Phasen 2 und 3 simuliert. Hierzu war es notwendig, die Anfangsbedingungen (Luft- und Wandtemperaturen, Druck, Dampfkonzentrationen usw.) an die experimentellen Werte nach Phase 1 anzupassen. Dieses kann nur teilweise gelingen, so sind z. B. die genauen Strukturtemperaturen nicht bekannt. Dieser Fehler kann zu Abweichungen bei der Simulation von Phase 2 und 3 führen. Anbei ein kurzer Überblick zum zeitlichen Ablauf dieser Phasen:

- Phase 2:
 - Ermittlung von Initialwerten (Druck, Temperaturen, Dampfkonzentrationen) für $t = 17,20$ h aus dem Experiment
 - Simulation der Dampfeinspeisung ab $t = 17,20$ h mit CFX
 - NaOH-Einspeisung ab $t = 17,70$ h bis $t = 18,18$ h
- Phase 3:
 - Ab $t = 18,23$ h Ende der Dampfeinspeisung und Beginn der Ruhephase (Effekte: Auskühlung, Kondensation an Wänden, Ablagerung der NaOH-Aerosole)

Neben der Einspeisung von Dampf und NaOH gab es auch noch ein Entweichen von Luft aus Rissen im Containment. Diese Leckraten sind in der Versuchsbeschreibung spezifiziert und wurden in CFX als Massensenke im Raum R9 (Dom / Ringraum) berücksichtigt.

Abb. 4.168 zeigt den Druckverlauf in den Phasen 2 und 3. Dieser steigt mit Beginn der Dampfeinspeisung bei $t = 17,20$ h an. Bei $t = 18,23$ h endet die Dampfeinspeisung und der Druck sinkt durch Kondensation und Energieabgabe an die Wände langsam wieder ab. Die CFX-Rechnung startet bei $t = 17,20$ h. Hier lag die Schwierigkeit darin, die Temperaturverteilung im Gas und in den Wänden möglichst genau in der Werte-Initialisierung wiederzugeben. Nach Beginn der Dampfeinspeisung steigt der Druck in der CFX-Rechnung etwas schneller an als im Experiment. Auch der Druckabfall ab $t = 18,23$ h ist zu langsam. Die Ursachen hierfür sind unklar. Möglicherweise sind die verwendeten Leckraten zu klein oder die Wärmeabgabe an die Betonwände wird in der CFX-Rechnung unterschätzt. Diese wird möglicherweise auch durch die Fehler bei der Initialisierung der Wandtemperaturen verursacht. Neben der CFX-Rechnung werden auch noch COCOSYS-Ergebnisse dargestellt. Die COCOSYS-Rechnung umfasst den gesamten Versuch und startet bereits bei $t = 0$ h. Hier liegt der Druck bei $t = 17,20$ h schon ca. 0,1 bar oberhalb der experimentellen Werte. Dieser Abstand vergrößert sich im Laufe der Einspeisung noch leicht. Insgesamt werden Druckanstieg und Druckabfall aber gut wiedergegeben.

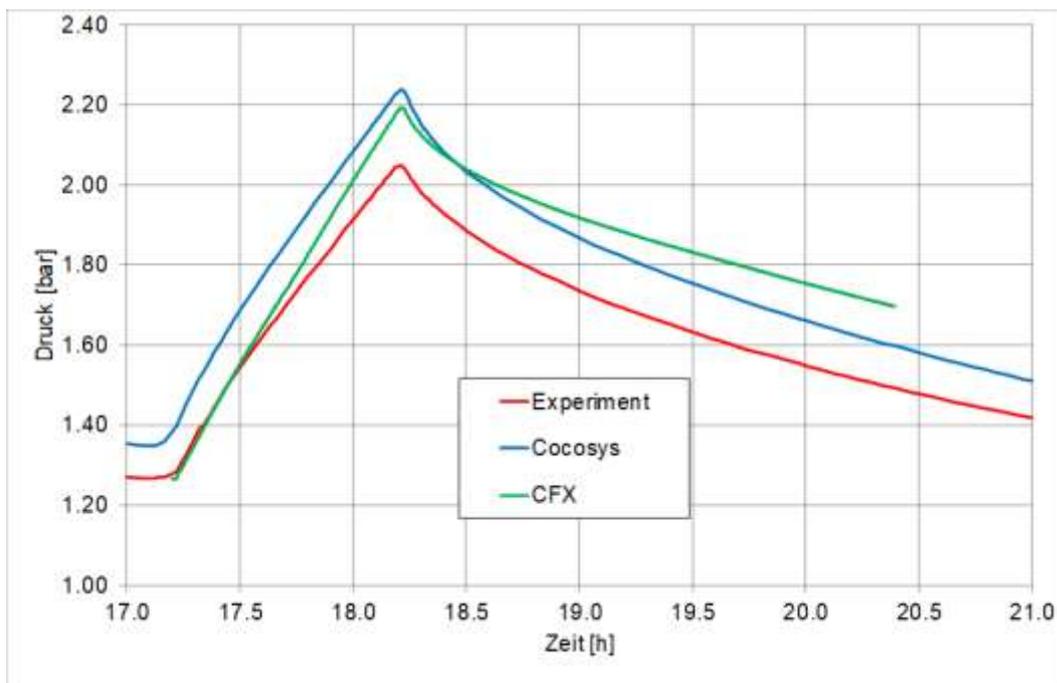


Abb. 4.168 Druckverlauf in den Phasen 2 und 3

Im Folgenden sollen die Temperaturen in den unterschiedlichen Räumen des Battelle-Modell-Containments diskutiert werden. Zur besseren Orientierung ist in Abb. 4.169 ein Überblick über das Containment mit den Raumnummern dargestellt. Abb. 4.170 stellt den Temperaturverlauf im Einspeiseraum (R5) dar. In CFX werden, analog zum

Experiment, die Temperaturen an einer genauen Messposition ermittelt, während in COCOSYS nur der Mittelwert der entsprechenden Zone vorhanden ist. Die CFX-Temperaturen liegen etwas oberhalb der experimentellen Werte. Grundsätzlich wird der Verlauf aber gut wiedergegeben.

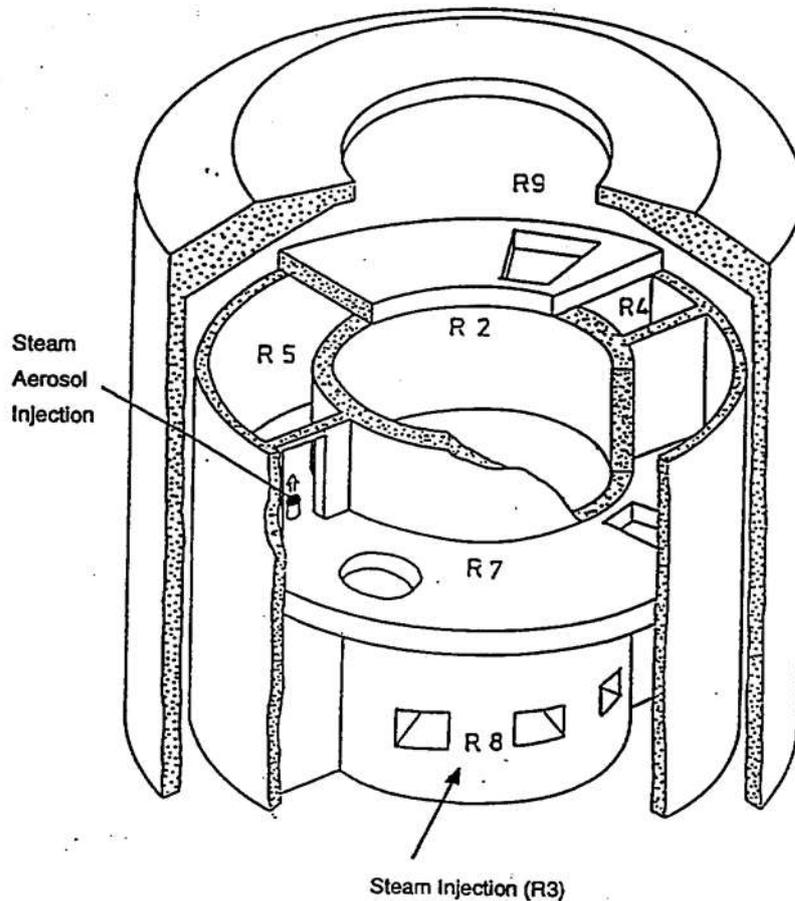


Abb. 4.169 Bezeichnung der Räume im Battelle-Modell-Containment

Abb. 4.171 zeigt den Temperaturverlauf im Dom (Raum R9). In der CFX-Rechnung steigen die Temperaturen an dieser Messstelle etwas schneller an als im Experiment und sind insgesamt etwas zu hoch. Dieses ist analog zu dem etwas zu hohen Druck. Der Temperaturverlauf in dem weiter unten liegenden Raum R8 (siehe Abb. 4.172) wird von der CFX-Rechnung ziemlich gut wiedergegeben. Insgesamt kann gesagt werden, dass der Druck und die Temperaturen an einigen Messpositionen etwas zu hoch liegen. Der grundsätzliche Verlauf wird aber ganz gut wiedergegeben. Die Gasverteilung (Dampf und Luft) bildet die Grundlage für die Aerosolverteilung im Containment. Dieser Aspekt soll im folgenden Abschnitt diskutiert werden.

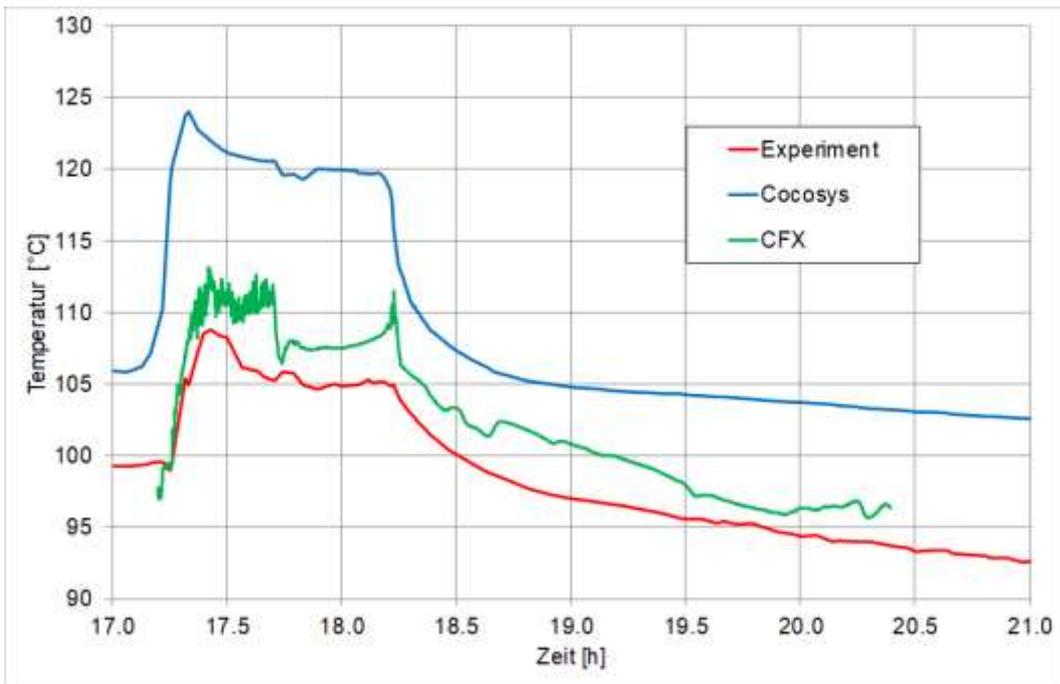


Abb. 4.170 Temperaturverlauf im Einspeiseraum R5

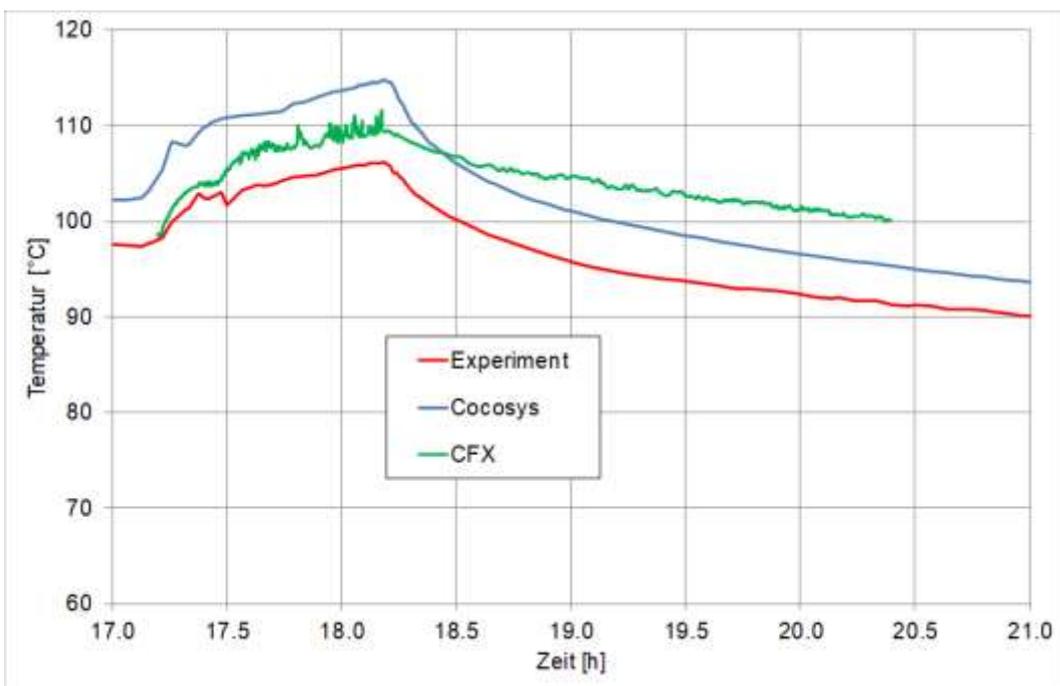


Abb. 4.171 Temperaturverlauf im Dom (R9)

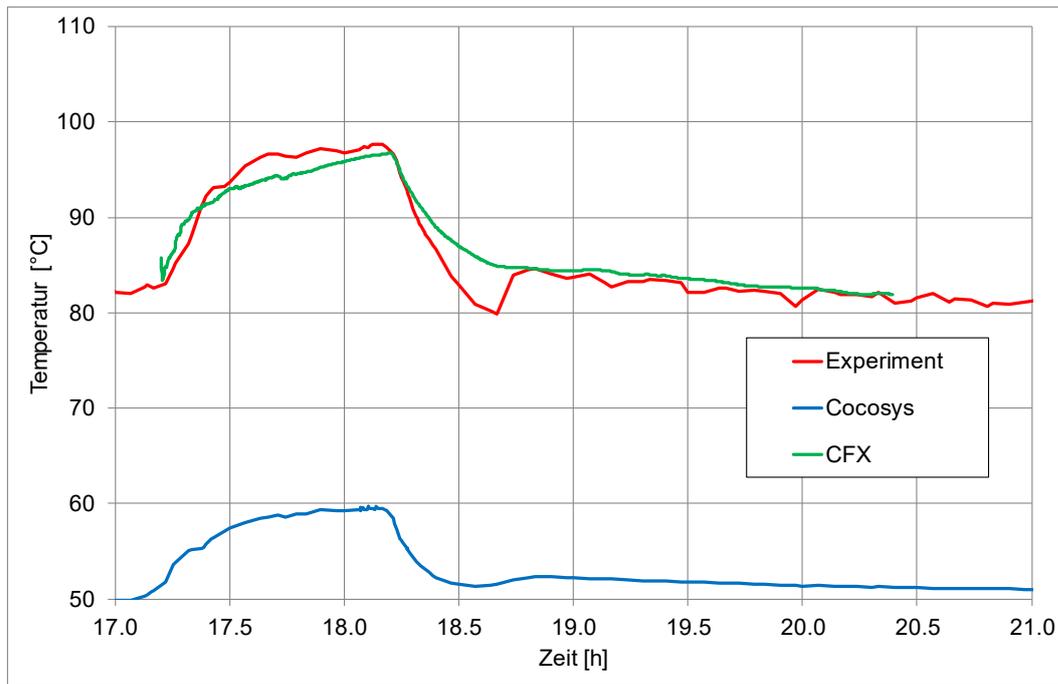


Abb. 4.172 Temperaturverlauf im weiter unten liegenden Raum R8

4.3.3.4 Simulation der Aerosolverteilung und Ablagerung

Der Verlauf der Aerosolkonzentration ist an mehreren Messstellen in unterschiedlichen Räumen gemessen worden. Hierbei liegen die einzelnen Messungen aber leider zeitlich relativ weit auseinander. Weiterhin gibt es auch nur wenige Angaben über die trockenen (und feuchten) Partikeldurchmesser. Laut /KAN 93/ lagen die Durchmesser der trockenen NaOH-Partikel unterhalb von $0,4 \mu\text{m}$, die Durchmesser der Lösungströpfchen bei $1 - 3 \mu\text{m}$. Hierzu wurde eine CFX-Parameterstudie durchgeführt. Eine Rechnung wurde mit kleinem trockenen Durchmesser ($0,3 \mu\text{m}$, wie in /KAN 93/) und eine Rechnung mit größerem trockenen Durchmesser ($2,3 \mu\text{m}$, ähnlich wie bei den KAEVER-Versuchen) durchgeführt. Bei beiden Rechnungen fand eine Partikelvergrößerung abhängig von der Luftfeuchte statt (entsprechend Gleichung (4.2) und Tab. 4.15).

In Abb. 4.173 bis Abb. 4.177 werden die Ergebnisse dieser CFX-Rechnungen mit den experimentellen Werten (und mit einer COCOSYS-Rechnung) an unterschiedlichen Messpunkten verglichen. Zu beachten ist die unterschiedliche Skalierung der y-Achse in den Diagrammen. Zunächst zeigt sich in der Aerosol-Einspeisephase ($t = 17,70 \text{ h} - 18,18 \text{ h}$) ein rascher Anstieg der luftgetragenen Aerosolkonzentration. An den unterschiedlichen Messpositionen erreichen die CFX-Simulationen ähnliche NaOH-Konzentrationen, wie sie zum Zeitpunkt $t = 18,20 \text{ h}$ im Experiment gemessen wurden. Somit ist die Verteilung des freigesetzten Aerosols auf die unterschiedlichen Räume

durch die CFX-Rechnungen gut abgebildet worden. In der folgenden Phase der Partikel-Ablagerung (ab $t = 18,23$ h) zeigen die beiden Simulationen ein unterschiedliches Verhalten. Die Partikel mit dem größeren Durchmesser lagern sich schneller ab als die Partikel mit dem kleineren Durchmesser. Das Absinken der Partikelkonzentration im Vergleich zum Experiment wird dabei am besten von der Rechnung mit dem größeren Durchmesser ($2,3 \mu\text{m}$) wiedergegeben. So liegt die CFX-Kurve für $2,3 \mu\text{m}$ große Partikel z. B. im Dom deutlich näher an den experimentellen Werten (siehe Abb. 4.174 und Abb. 4.175). In der Rechnung mit kleinerem Durchmesser sinken die Konzentrationen zu langsam ab.

CFX kann mit dieser Art der Modellierung prinzipiell den Effekt Aerosolausbreitung und das Ablagerungsverhalten gut abbilden. Das ASM-Modell scheint für diese Anwendungen gut geeignet zu sein. Allerdings hängt die Güte der Ergebnisse stark von der Güte der (gemessenen / bekannten) Aerosolparameter (Durchmesser, Dichte, ...) ab. Da die Partikeldurchmesser in dem VANAM-Experiment laut /KAN 93/ mit größeren Unsicherheiten belegt waren, lassen sich hier keine weiteren vertieften Erkenntnisse ableiten.

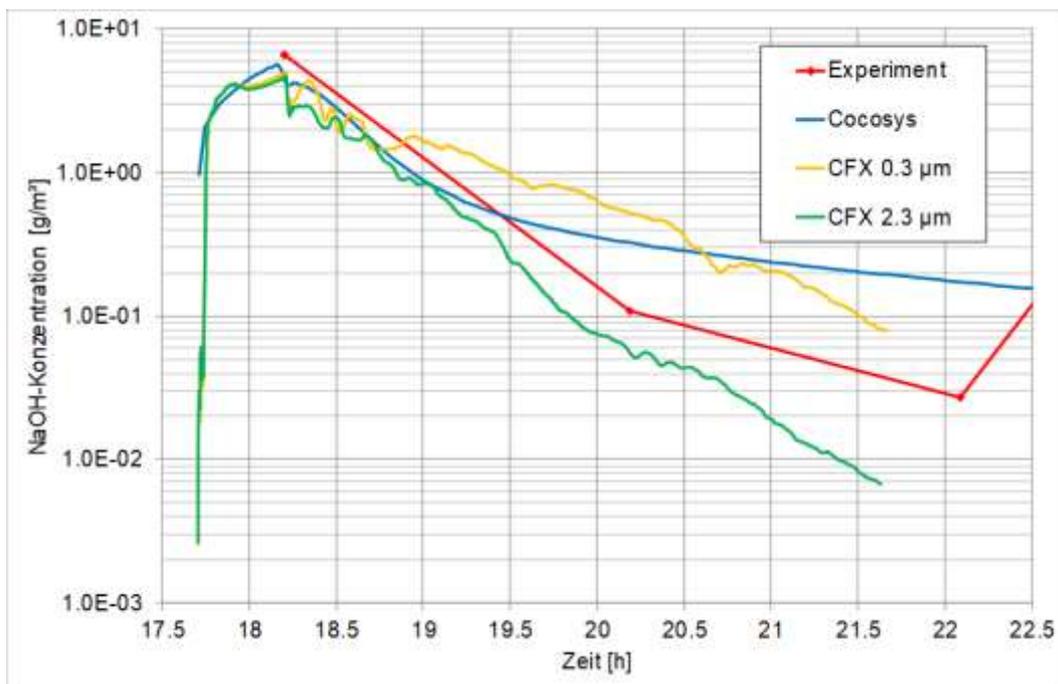


Abb. 4.173 NaOH-Konzentration im Einspeiseraum (R5)

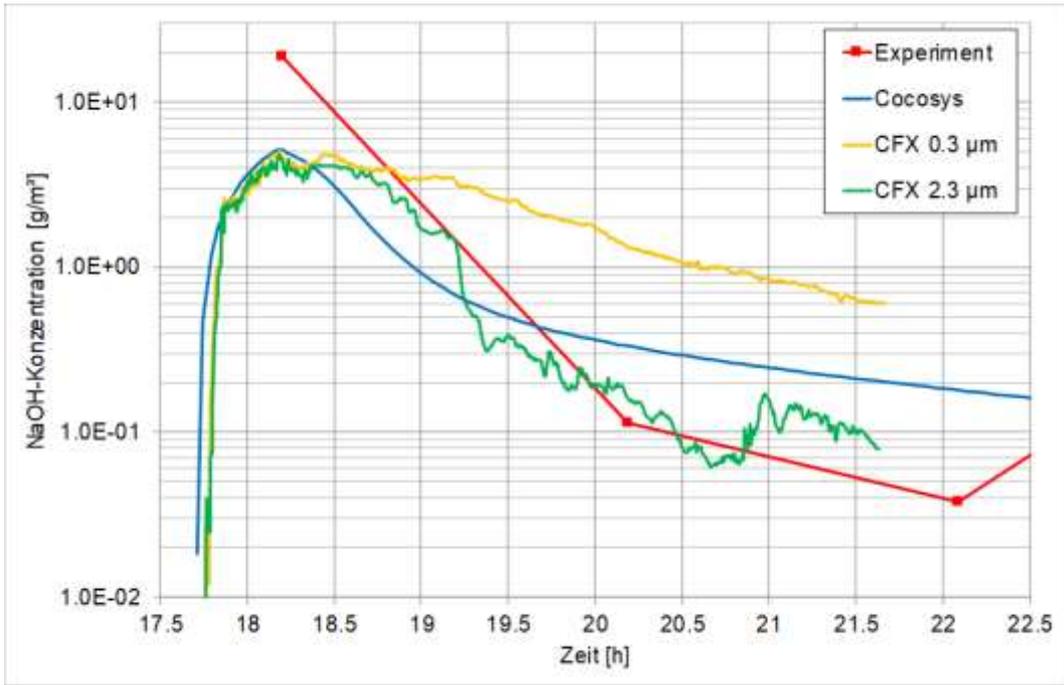


Abb. 4.174 NaOH-Konzentration im Dom (R9, 7,6 m Höhe)

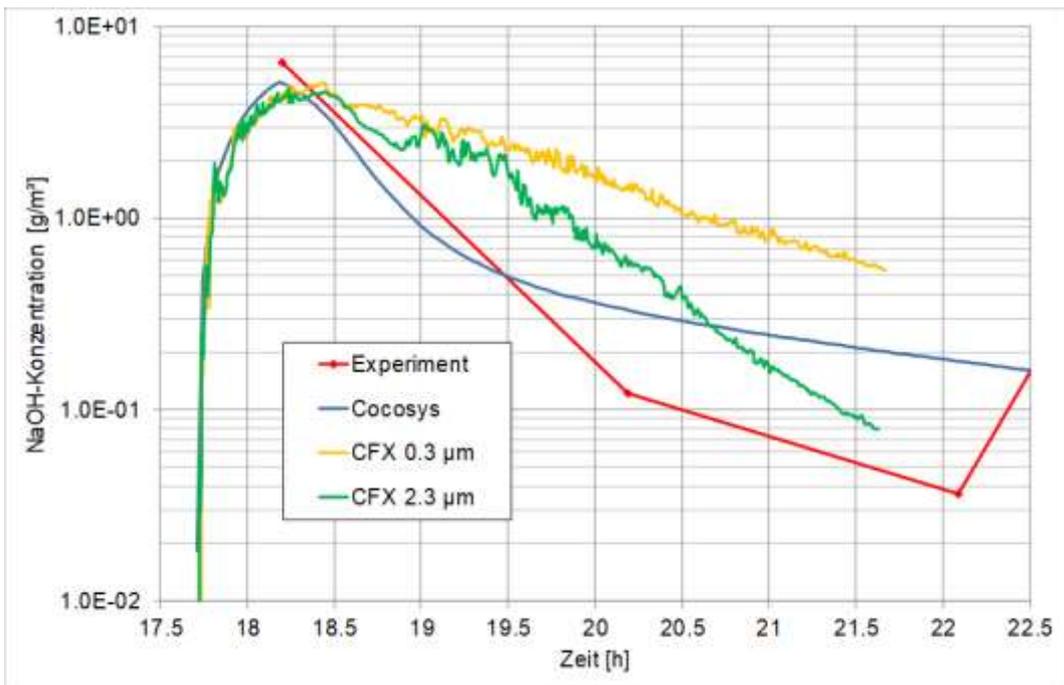


Abb. 4.175 NaOH-Konzentration im Dom (R9, 6,0 m Höhe)

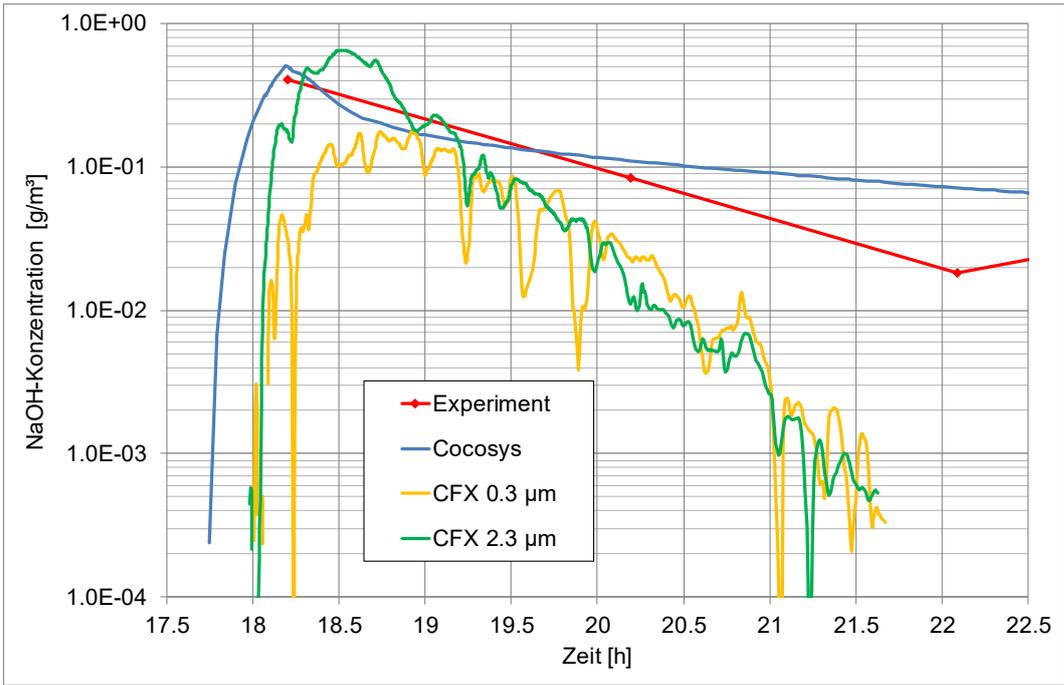


Abb. 4.176 NaOH-Konzentration in Raum R8

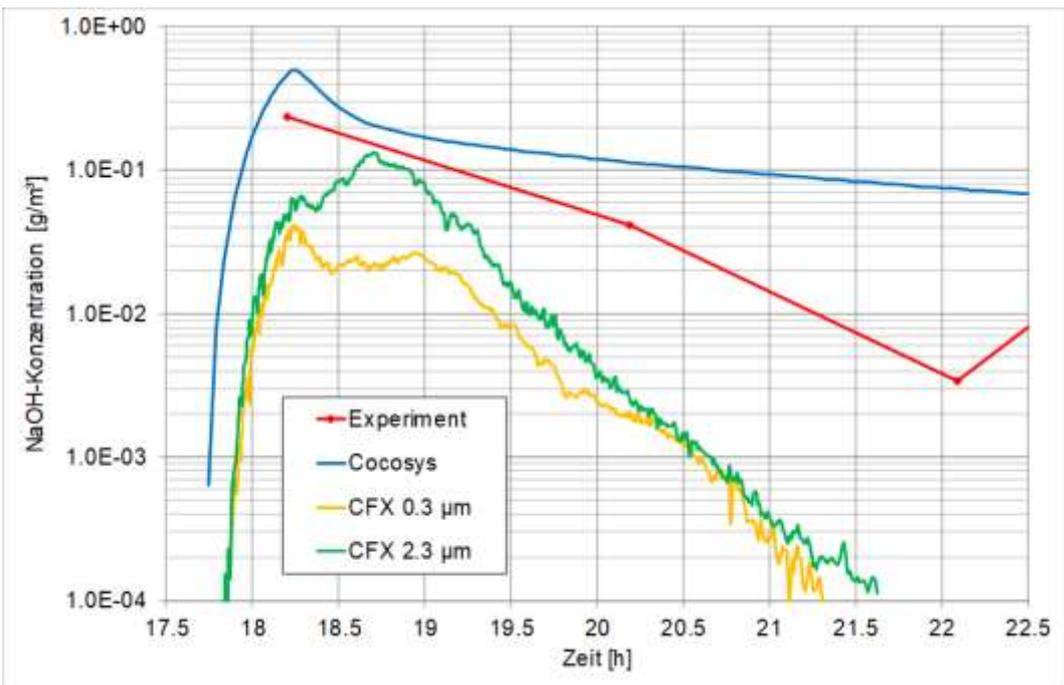


Abb. 4.177 NaOH-Konzentration in Raum R3

5 AP4 Anwendung von CFD-Codes zur Untersuchung unfalltypischer Phänomene unter reaktortypischen Randbedingungen und Geometrien

5.1 Aufgabenstellung

In den vorhergehenden Projekten RS1500 /SCH 14/ und RS1526 /SCH 17/ wurde ein Datensatz zur Simulation eines generischen KONVOI-Containments erstellt und weiterentwickelt. Es erscheint wahrscheinlich, dass die darin enthaltenen Berstscheiben und ihr Öffnungsverhalten sensitiv auf die Modellierung der Einspeisung sind. In diesem Arbeitspunkt soll deshalb eine Variation der Einspeisegeometrie und der Einspeisemodellierung durchgeführt und ihr Einfluss auf das Simulationsergebnis untersucht werden.

Hierzu ergänzend soll zunächst eine Analyse der Abhängigkeit des Öffnungsverhaltens von der Zeitschrittgröße bzw. vom Konvergenzkriterium durchgeführt werden. Dieser Punkt wird im Folgenden als erstes untersucht.

5.1.1 Geometrie und Randbedingungen

Die Entwicklung der CFD-Geometrie, die in den nachfolgenden Analysen verwendet wurde, ist ausführlich in dem Bericht /SCH 14/ beschrieben worden. In Abb. 5.1 werden die Positionen der Türen und der Berstscheiben im CFD-Modell des DWR-Containments dargestellt. Abb. 5.2 zeigt die Nummerierung der Berstscheiben in den Dampferzeugertürmen. Die Türen und die Berstscheiben in dem CFD-Modell öffnen sich in Abhängigkeit von den lokalen Druckverhältnissen. Dieser lokale Druck und damit auch das Öffnungsverhalten ist wahrscheinlich von der Einspeisegeometrie, der Einspeiserate und deren Temperatur etc. abhängig.

Im ANSYS-CFX-Modell wurden die Türen und die Berstscheiben als sogenannte „Conditional Interfaces“ implementiert. Die verwendeten Ansprechdrücke sind in Tab. 5.1 dargestellt. In diesem Beispiel wurden sie zufällig um einen mittleren Ansprechdruck von 0,035 bar variiert. Hierdurch sollte eine etwas realistischere Verteilung von Ansprechdrücken erzeugt werden.

Der Ansprechdruck für die Türen wurde etwas höher eingestellt. Am Anfang der Simulationen sind alle Türen und Berstscheiben geschlossen und diese öffnen, wenn die spezifizierte Druckdifferenz erreicht wird. Bei den vorliegenden Arbeiten wurden

Simulationen mit einem Massenstrom zwischen 40 kg/s und 200 kg/s und einer festen Eintrittstemperatur von 120 °C durchgeführt. Das simulierte Fluid wurde als ideales Gas modelliert. Die Viskosität und die Wärmeleitfähigkeit wurden mit Hilfe von temperaturabhängigen CEL (CFX Expression Language)-Funktionen spezifiziert.

Das Modell besteht aus einer Fluid-Domain (*Atmosphäre*) und 5 Solid-Domains: *Abklingbecken*, *Beton*, *Kran*, *Primärkreis* und *Stahlschale*. Die Anfangstemperatur beträgt überall 30 °C. Die Domäne *Atmosphäre* wurde mit 1 bar und 100 vol.-% Luft initialisiert. In Tab. 5.2 wurden wesentliche Parameter für die Simulation zusammengestellt.

Tab. 5.1 Ansprechdrücke für die Berstscheiben und die Türen

Berstscheiben	Druck – ΔP – [bar]	Berstscheiben/ Tür	Druck – ΔP – [bar]
B1_1>	0,03708	B2_1>	0,03737
B1_2>	0,03728	B2_2>	0,03780
B1_3>	0,03070	B2_3>	0,03605
B1_4>	0,02801	B2_4>	0,04130
B1_5>	0,03586	B2_5>	0,03453
B1_6>	0,04045	B2_6>	0,03523
B1_7>	0,03545	B2_7>	0,03001
B1_8>	0,02815	B2_8>	0,03013
B1_9>	0,03591	B2_9>	0,02848
		Tür 1 bis 10	0,55

Tab. 5.2 Einstellungen für die Containment-Rechnung

Phänomene	Öffnungsverhalten von Berstscheiben im Containment
Elementzahl	2 157 529
Materialien	H ₂ , H ₂ O, N ₂ , O ₂
Turbulenzmodell	SST
Diffusionskoeffizient	Nach Fuller
Wärmestrahlung	Ohne
Kondensationsmodell	ANSYS-Wandkondensation und GRS-Volumenkondensation
Konvergenz	RMS < 0,00001
ANSYS CFX-Version	19.2

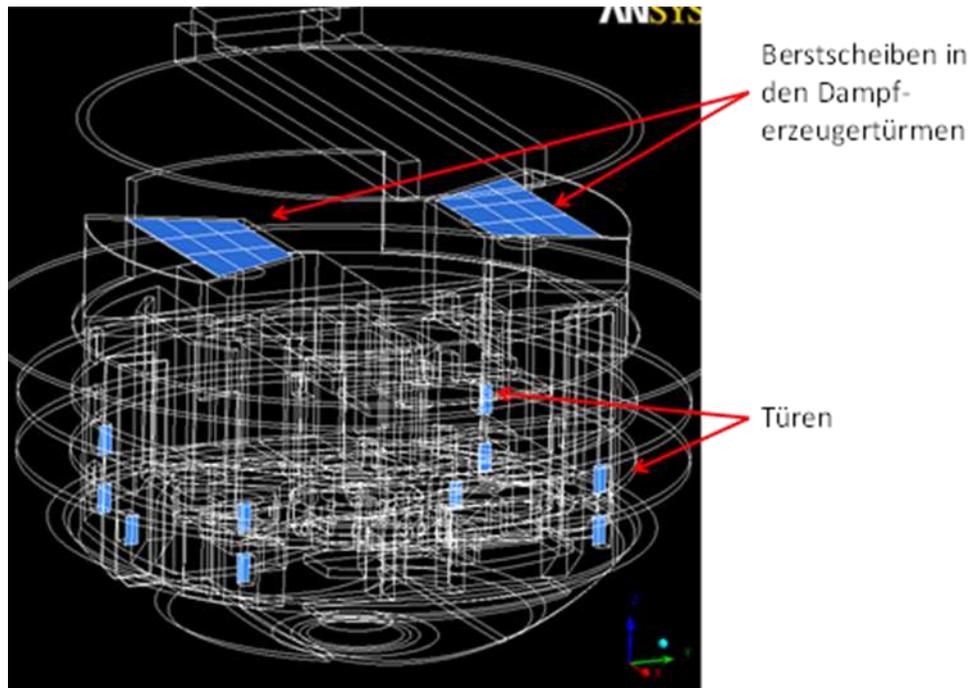


Abb. 5.1 Positionen von Berstscheiben und Türen im CFD-Modell des DWR-Containments

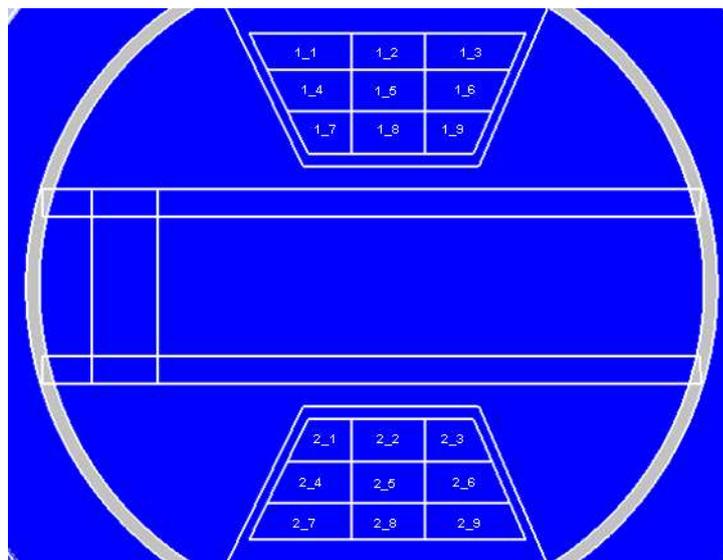


Abb. 5.2 Nummerierung der Berstscheiben in Dampferzeugerturm 1 (oben) und 2 (unten)

5.2 Ergebnisse der CFX Berechnungen

5.2.1 Einfluss des Zeitschritts auf die Öffnung von Berstscheiben

Im Folgenden wird der Einfluss der Zeitschrittweite der Simulationen auf das Öffnungsverhalten der Berstscheiben untersucht. Die Zeitschrittweiten und die zugehörigen Ergebnisse finden sich in Tab. 5.3. Es ist zu sehen, dass unterschiedliche Ergebnisse bei konstanter Einspeiserate erzielt werden, falls der maximale Zeitschritt einen Wert von 0,00075 s überschreitet. Aus diesem Grund wurde dieser Wert als maximale Zeitschrittgröße auch in den nachfolgenden Simulationen verwendet.

Tab. 5.3 Parametrische Studie (Einspeiserate: 200 kg/s)

Maximale Zeitschrittgröße [s]	Minimale Zeitschrittgröße [s]	Geöffnete Berstscheiben und Türen	
		Zeit [s] – Berstscheiben	
0,0125	0,0005	0,44 – B1_3 0,42 – B1_8	0,39 – B2_1
0,005	0,001	0,45 – B1_4 0,35 – B1_8	0,38 – B2_7 0,36 – B2_9
0,003	0,0005	0,47 – B1_4 0,37 – B1_8	0,36 – B2_9
0,0015	0,0005	0,45 – B1_4 0,35 – B1_8	0,37 – B2_7 0,35 – B2_9
0,00075	0,0005	0,45 – B1_4 0,28 – B1_8	0,35 – B2_9
0,00065	0,0005	0,44 – B1_4 0,28 – B1_8	0,34 – B2_9
0,0006	0,0005	0,44 – B1_4 0,28 – B1_8	0,34 – B2_9
0,0006	0,0005	0,44 – B1_4 0,28 – B1_8	0,35 – B2_9

Mit der festgestellten maximalen Zeitschrittgröße von 0,00075 s wurden weitere Simulationen mit unterschiedlichen Einspeiseraten durchgeführt. Die Ergebnisse sind in der Tab. 5.4 zusammengefasst. Es zeigt sich, dass – je nach Einspeiserate – unterschiedliche Berstscheiben öffnen.

Tab. 5.4 Variation der Einspeiserate mit einem maximalen Zeitschritt von 0,00075 s

Einspeiserate Dampf	Geöffnete Berstscheiben (alle anderen bleiben geschlossen)		
	Zeit [s] – Berstscheiben		
[kg/s]	Dampferzeugerturm 1 (über dem Leck)	Dampferzeugerturm 2	Türen
40	Keine	3,4 – B2_9	Keine
80	1,3 – B1_8	Keine	Keine
120	0,73 – B1_4	0,74 – B2_9	Keine
200	0,45 – B1_4, 0,28 – B1_8	0,35 – B2_9	Keine

5.2.2 Variation der Leckposition im Sumpfraum

Im Containment wurde für die Einspeisung ein Rohr modelliert, das einen Durchmesser von 0,4 m und eine Länge von 1 m hat. Der Rohrmittelpunkt liegt bei $X = 3,5$ m, $Y = 8$ m und $Z = 5$ m. Abb. 5.3 zeigt das im Sumpfraum positionierte Rohr. In den bisherigen Analysen wurde nur die Einspeiserate variiert, die Leck-Position und die Leck-Richtung (X) waren fest. In einem realen Störfall kann jedoch die Richtung der Einspeisung variieren. Um den Einfluss der Einspeiserichtung auf das Öffnungsverhalten von Türen und Berstscheiben zu untersuchen, wurde eine Parameterstudie durchgeführt. Der Dampf wurde dabei in die unterschiedlichen Richtungen (X , $-X$, Y , $-Y$, Z und $-Z$) freigesetzt. Dieses entspricht unterschiedlichen Richtungen des Lecks an der Bruchstelle. Die Einspeiserate wurde dabei in allen Simulationen auf 80 kg/s festgelegt. Tab. 5.6 fasst die wesentlichen Ergebnisse zusammen. Die dargestellten Ergebnisse zeigen, dass die Einspeiserichtung einen Einfluss auf die Öffnung der Berstscheiben hat. Je nach Richtung öffnen unterschiedliche Berstscheiben. Im Dampferzeugerturm 1 öffnet bei allen Simulationen eine Berstscheibe (B1_4 oder B1_8). In den Rechnungen mit einer Einspeiserichtung in X , Y und $-Z$ Richtung öffnet im Dampferzeugerturm 2 keine Berstscheibe. Bei den übrigen Simulationen öffnet im Dampferzeugerturm 2 dagegen eine Berstscheibe (B2_1 oder B2_7). Das unterschiedliche Öffnungsverhalten der Berstscheiben kann einen Einfluss auf den weiteren Störfallverlauf haben (siehe Abschnitt 5.2.6). Insbesondere das unterschiedliche Öffnungsverhalten im 2. Dampferzeugerturm kann das globale Strömungsverhalten signifikant beeinflussen.

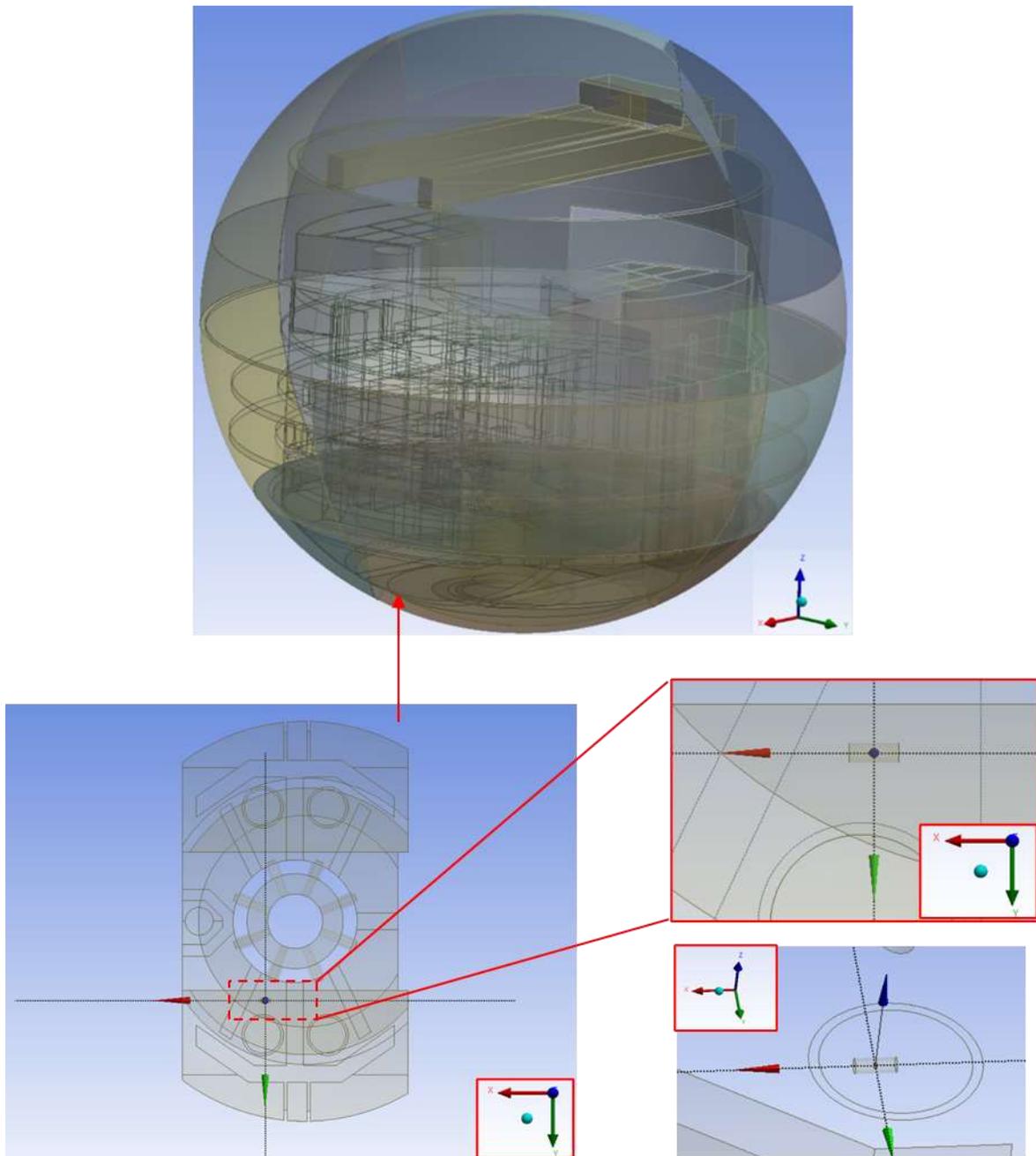


Abb. 5.3 Einspeiserohr im Containment

Tab. 5.5 Einfluss der Leck-Richtung auf die Berstscheiben-Öffnung

Leck	Geöffnete Berstscheiben (alle anderen bleiben geschlossen)		
	Zeit [s] – Berstscheiben		
Richtung	Dampferzeugerturm 1 (über dem Leck)	Dampferzeugerturm 2	Türen
X	1,3 – B1_8	Keine	Keine
-X	0,55 – B1_8	1,46 – B2_1	Keine
Y	1,34 – B1_4	Keine	Keine

-Y	1,43 – B1_4	1,48 – B2_7	Keine
Z	1,41 – B1_4	1,37 – B2_7	Keine
-Z	1,39 – B1_4	Keine	Keine

In einer weiteren Variation wird das Einlassrohr um 0,5 m in -X-Richtung versetzt. Dieses entspricht einem Leck an einer anderen Stelle. In Abb. 5.4 ist das versetzte Einspeiserohr zu sehen. Tab. 5.6 zeigt die Ergebnisse der Simulationen. Hier ist zu sehen, dass in Abhängigkeit von der Position unterschiedliche Berstscheiben öffnen. Bei beiden Rechnungen öffnen in beiden Dampferzeugertürmen jeweils eine Berstscheibe. Bei der verschobenen Position öffnet sich jedoch im Dampferzeugerturm 2 eine andere Berstscheibe. Somit ist das Berstscheibenverhalten auch sensitiv auf eine Versetzung der Leckposition.

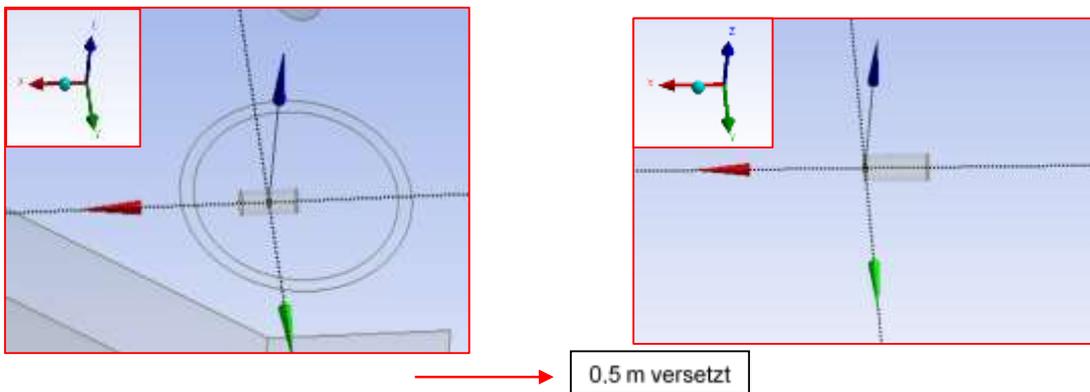


Abb. 5.4 Versetzung des Lecks um 0,5 m in Richtung -X

Tab. 5.6 Einfluss der Leckposition auf die Berstscheiben-Öffnung

Einspeise- rate	Position & Strömungs- richtung	Geöffnete Berstscheiben (alle anderen bleiben geschlossen)	
		Dampferzeugerturm 1 (über dem Leck)	Dampferzeugerturm 2
[kg/s]	[-]	Zeit [s] – Berstscheiben	
80	ursprüngliche Position	0,55 – B1_8	1,46 – B2_1
80	0,5 m ver- setzte Position	1,49 – B1_8	1,58 – B2_9

Abb. 5.5 zeigt die Druckverteilung (Relativdruck zum Referenzdruck von 1 bar) in einer XY-Ebene (bei Z = 29 m) bei 0,44 s. Ab diesem Zeitpunkt ergeben sich lokale Druckunterschiede in den beiden Simulationen, die nicht nur die Öffnungszeiten der Berstscheiben beeinflussen, sondern auch zum Öffnen unterschiedlicher Berstscheiben führen.

Insgesamt kann festgestellt werden, dass sowohl die Leckrichtung als auch die Leckposition einen Einfluss auf den lokalen Druck an den Berstscheiben haben, der zu einem unterschiedlichen Öffnungsverhalten der Berstscheiben führt. Eine Erhöhung der Einspeiserate führt tendenziell zum Öffnen einer größeren Anzahl von Berstscheiben. Wie sich dies auf den längerfristigen Störfallablauf auswirkt, wird weiter unten untersucht. Im nächsten Abschnitt soll erstmal noch untersucht werden, welche Änderungen sich durch eine Modellierung der Einspeisung mit einer volumetrischen Quelle ergeben.

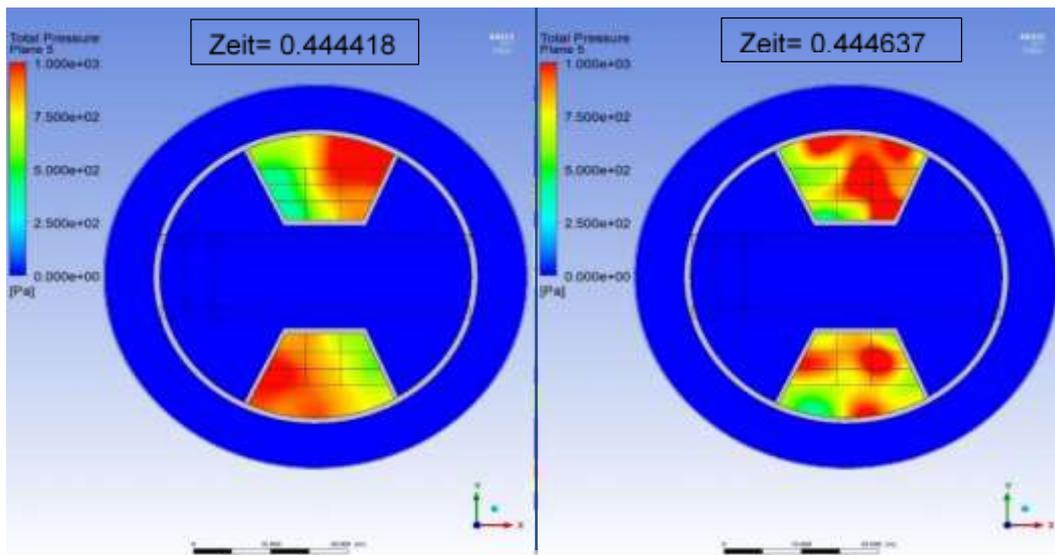


Abb. 5.5 Druck relativ zu Referenzdruck (1 bar) bei $t = 0,44$ s, links: ursprünglicher Fall, rechts: versetzter Fall

5.2.3 Einfluss einer volumetrischen Quelle

In den vorherigen Kapiteln wurde die Einspeisung mit einer Leckfläche und einem Massenstrom spezifiziert. Dadurch konnte eine Einströmrichtung vorgegeben werden. In den nachfolgenden Untersuchungen wird das Sumpfvolumen (siehe Abb. 5.6) als volumetrische Dampfquelle definiert und der Einfluss dieser Veränderung auf die Simulationsergebnisse evaluiert. Die volumetrische Einspeisung entspricht dem Vorgehen bei einer Lumped-Parameter-Simulation, bei der in ein Kontrollvolumen eingespeist wird.

Tab. 5.7 zeigt die verwendeten Einstellungen in den Untersuchungen. Die Tabelle zeigt auch die umgerechneten volumetrischen Massenquellen. Diese geben das Verhältnis des Massenstroms kg s^{-1} zum Volumen m^3 an. Das Gesamtvolumen des Sumpfs beträgt $5499,48 \text{ m}^3$.

Zeitschrittstudie

Als erster Schritt wurde wieder eine Zeitschrittstudie durchgeführt (siehe Tab. 5.8). Diese zeigte, dass auch hier die Zeitschrittgröße eine wichtige Rolle spielt, weil sich – je nach Einstellungen – unterschiedliche Berstscheiben öffnen. Für die weiteren Arbeiten wird deshalb hier der kleinere Zeitschritt (0,00075 s) verwendet. Eine weitere Verringerung des Zeitschritts war aufgrund begrenzter Rechenleistung nicht praktikabel.

Konvergenzkriterium

Es zeigt, dass nur bei Verwendung eines strengen Konvergenzkriteriums das Öffnen der Berstscheiben zuverlässig berechnet werden kann. Beim Standard-Kriterium RMS-Residuum $< 1,0e-4$ öffnen im Fall gleichen Ansprechdrucks deutlich mehr Berstscheiben als bei einer genaueren Berechnung (siehe Tab. 5.9). Dies gilt insbesondere, falls ein gleicher Öffnungsdruck für alle Berstscheiben unterstellt wird. Eine Studie zum Einfluss des Konvergenzkriteriums zeigt, dass die Kriterien Max-Residuum $< 1,0e-3$ oder RMS-Residuum $< 1,0e-5$ ausreichend genau sind.

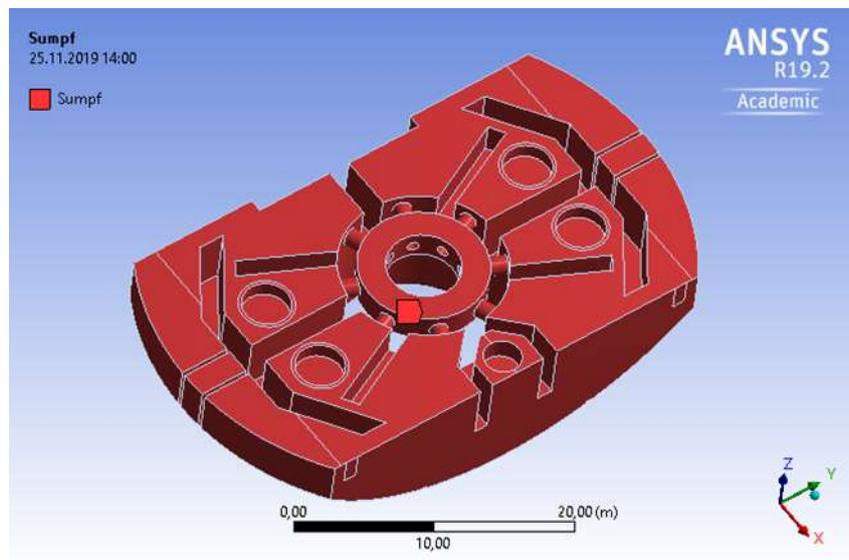


Abb. 5.6 Kontroll-Volumen für die Dampfeinspeisung

Tab. 5.7 Volumetrische Massenquellen, Einspeisung in den gesamten Sumpf

Phänomene	Werte	Einheit
Einspeiserate	Volumetrische Massenquelle	
200 [kg/s]	0,036367074	kg m ⁻³ s ⁻¹
120 [kg/s]	0,021820244	kg m ⁻³ s ⁻¹
80 [kg/s]	0,014546829	kg m ⁻³ s ⁻¹
40 [kg/s]	0,007273414	kg m ⁻³ s ⁻¹
Temperatur	120	°C
Turbulenz kinetische Energie	0,0001	m ² s ⁻²
Turbulenz Wirbelfrequenz	0,1	s ⁻¹
Geschwindigkeit (U, V und W)	0	m s ⁻¹

Tab. 5.8 Zeitschrittstudie (Einspeiserate 200 kg/s)

Maximale Zeitschrittgröße [s]	Minimale Zeitschrittgröße [s]	Öffnung der ersten Berstscheibe / Tür [s]	Geöffnete Berstscheiben
0,003	0,0005	0,9063	B1_4 und B2_7
0,00075	0,0005	0,9066	B1_4 und B2_9

Tab. 5.9 Variiertes Residuen-Kriterium mit den Ansprechdrücken nach Tab. 5.1

Residuen-Kriterium	Massenstrom	Leck-Richtung	Geöffnete Berstscheiben	
			Dampferzeugerturm 1	Dampferzeugerturm 2
RMS = 1E-5	80 kg/s	X	B1_7	Keine
RMS = 1E-4		X	B1_3, B1_4, B1_7, B1_8, B1_9	B2_5, B2_7, B2_8, B2_9

Einspeisung in gesamten Sumpf

Tab. 5.10 stellt die Ergebnisse der Parameterstudie dar. In allen Simulationen mit volumetrischer Einspeisung öffnen sich die Berstscheiben 1_4 und 2_9. Unterschiede ergeben sich bei der Öffnungszeit. Je höher die Einspeiserate ist, desto eher öffnet sich die erste Berstscheibe. Grund dafür ist die gleichmäßige Verteilung der Dampfquelle im Sumpf-Bereich. Dieses Ergebnis unterscheidet sich von den Ergebnissen, die mit einem gerichteten Leck-Strahl erzielt wurden (vergleiche hierzu mit Tab. 5.4, Tab. 5.5, Tab. 5.6).

Tab. 5.10 Ergebnisse der Parameterstudie mit volumetrischer Dampfquelle und Einspeisung in den gesamten Sumpf

Einspeiserate	Fluid Mass Source	Öffnung der ersten Berstscheibe / Tür	Geöffnete Berstscheiben (alle anderen bleiben geschlossen)	
			Dampferzeugerturm 1	Dampferzeugerturm 2
[kg/s]	[kg/m ³ s]	[s]		
40	0,007273414	4,435	B1_4	B2_9
80	0,014546829	2,212		
120	0,021820244	1,489		
200	0,036367074	0,906		

Einspeisung in Viertelsumpf

Bisher wurde der gesamte Sumpf als Volumenquelle definiert. In einem nächsten Schritt sollte der Dampf nur in einem Viertel des Sumpfes freigesetzt werden. Hier ist der Hintergrund, dass auch in Lumped-Parameter-Analysen der Sumpf teilweise in (vier) Zonen aufgeteilt und dann in einer Zone volumetrisch eingespeist wird. Der Effekt auf die Berstscheiben soll untersucht werden. Der Sumpf wurde in der Parameterstudie in vier symmetrische Teile aufgeteilt (siehe Abb. 5.7). Das spezifizierte Volumen des Viertels betrug 1353,78 m³.

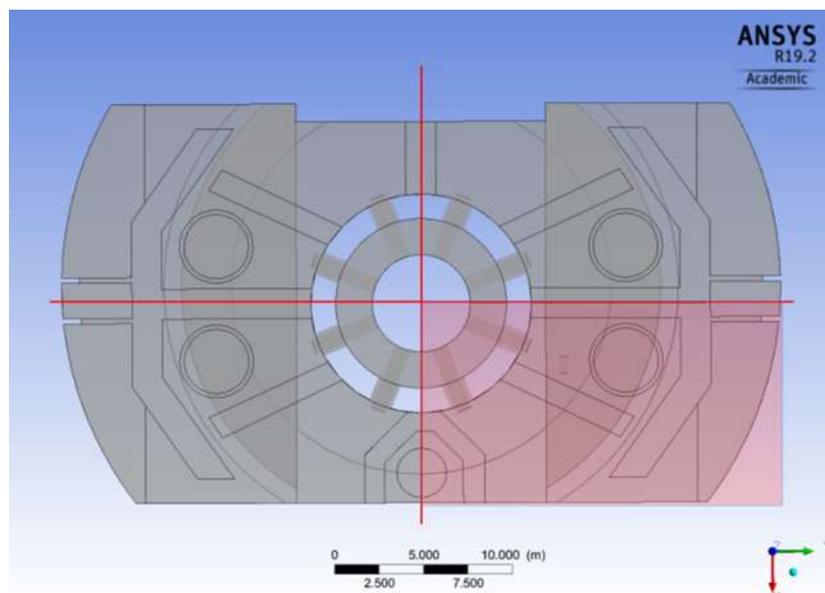


Abb. 5.7 Viertel-Sumpf für die volumetrische Dampfeinspeisung

Es wurden zwei Rechnungen mit unterschiedlichen Einspeiseraten durchgeführt (siehe Tab. 5.11). Abb. 5.8 zeigt die Druckverteilung in der Rechnung mit der Einspeiserate

80 kg/s. Es kann festgestellt werden, dass der Druck im Bereich der Einspeisung und den angrenzenden Regionen etwas höher ist. Es öffnen sich die Berstscheiben 1_4 und 2_9 in beiden Simulationen. Dies ist gleich wie in der Simulation mit der im gesamten Sumpf spezifizierten Dampfquelle.

Tab. 5.11 Ergebnisse des Viertel-Sumpfes als Dampfquelle

Einspeiserate	Volumetrische Quelle	Öffnung der ersten Berstscheiben / Tür	Geöffnete Berstscheiben
[kg/s]	[kg/m³s]	[s]	[-]
80	0,059093	2,07	B1_4, B2_9
200	0,147734	0,81	B1_4, B2_9

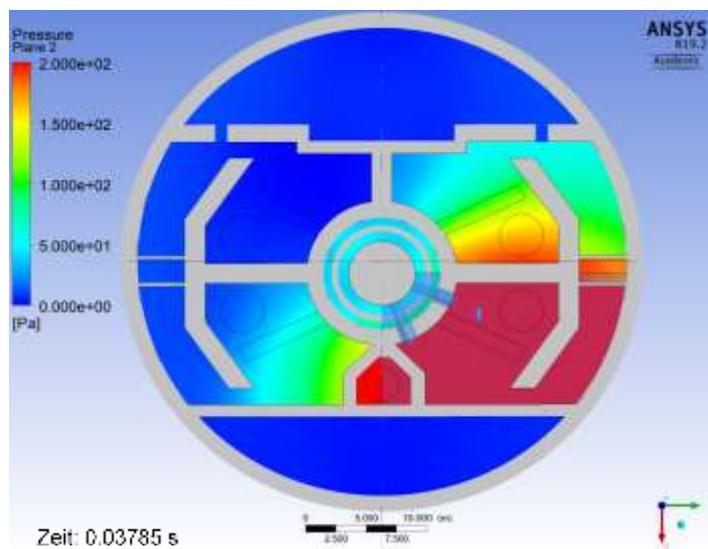


Abb. 5.8 Druckverteilung (relativ zu Referenzdruck 1 bar) bei Einspeisung in den Viertel-Sumpf (Einspeiserate: 80 kg/s)

5.2.4 Einfluss der Einspeisemodellierung auf die Gasverteilung im Containment

Um den Einfluss der Einspeisemodellierung auf die Dampfkonzentration im Containment zu untersuchen, wurden vier Simulationen mit unterschiedlichen Einspeisemethoden verglichen:

1. Einspeise in x-Richtung
2. Einspeise in -x-Richtung
3. Volumetrische Quelle im gesamten Sumpf
4. Volumetrische Quelle im Viertelsumpf

Die Einspeiserate beträgt bei allen vier Simulationen konstant 80 kg/s. Es strömt reiner Dampf ins Containment ein. Es wird die Gasverteilung nach 100 s verglichen. Parameterstudien haben gezeigt, dass sich in der Anfangsphase der Einspeisung entscheidet, welche Berstscheiben sich öffnen. Die sich in diesen Rechnungen öffnenden Berstscheiben sind in Tab. 5.12 aufgelistet. In dieser Phase ist ein sehr kleiner Zeitschritt bei der Berechnung notwendig. Im späteren Verlauf ist das Simulationsergebnis weniger sensitiv auf den Zeitschritt. Um Rechenzeit zu sparen, wurde nach Öffnung der Berstscheiben der Zeitschritt schrittweise von 0,00075 s auf 0,015 s erhöht.

Tab. 5.12 Geöffnete Berstscheiben (Gasverteilungsstudie)

Fall	Einspeisung	Geöffnete Berstscheiben (alle anderen bleiben geschlossen)	
		Dampferzeugerturm 1 (über dem Leck)	Dampferzeugerturm 2
1	Gerichtet, x-Richtung	B1_8	Keine
2	Gerichtet, -x-Richtung	B1_8	B2_1
3	Volumetrisch, ganzer Sumpf	B1_4	B2_9
4	Volumetrisch, Viertelsumpf	B1_4	B2_9

In Abb. 5.9 und Abb. 5.10 ist die Dampfkonzentration im Containment (in der yz-Ebene mit $x = 0,6$ m) zum Zeitpunkt $t = 100$ s dargestellt. Bei der volumetrischen Einspeisung in den gesamten Sumpf (3) ist die Dampfkonzentrationen in beiden Türmen etwa gleich hoch. Bei den Simulationen mit gerichteter Einspeisung (1, 2) und Volumenquelle Viertelsumpf (4) ist dagegen die Dampfkonzentration im 2. Dampferzeugerturm deutlich geringer als im 1. Dampferzeugerturm. Aber auch diese drei Simulationen unterscheiden sich deutlich hinsichtlich der Dampfverteilung. So ist z. B. bei der gerichteten Einspeisung in -x-Richtung (2) die Dampfkonzentration im 1. Dampferzeugerturm deutlich höher als bei den beiden anderen Simulationen. Es sei darauf hingewiesen, dass beim Vergleich der Bilder zu berücksichtigen ist, dass es sich lediglich um einen Schnitt handelt, bei anderen x-Positionen kann und wird sich insbesondere im Sumpfbereich ein anderes Bild ergeben. Bei den beiden Simulationen mit gerichteter Einspeisung ist die Strömung durch die geöffnete Berstscheibe in den Dombereich zu erkennen, die anderen geöffneten Berstscheiben liegen außerhalb der Schnittebene. Grundsätzlich zeigt sich jedoch ein deutlicher Einfluss der Einspeisemodellierung auf die Gasverteilung.

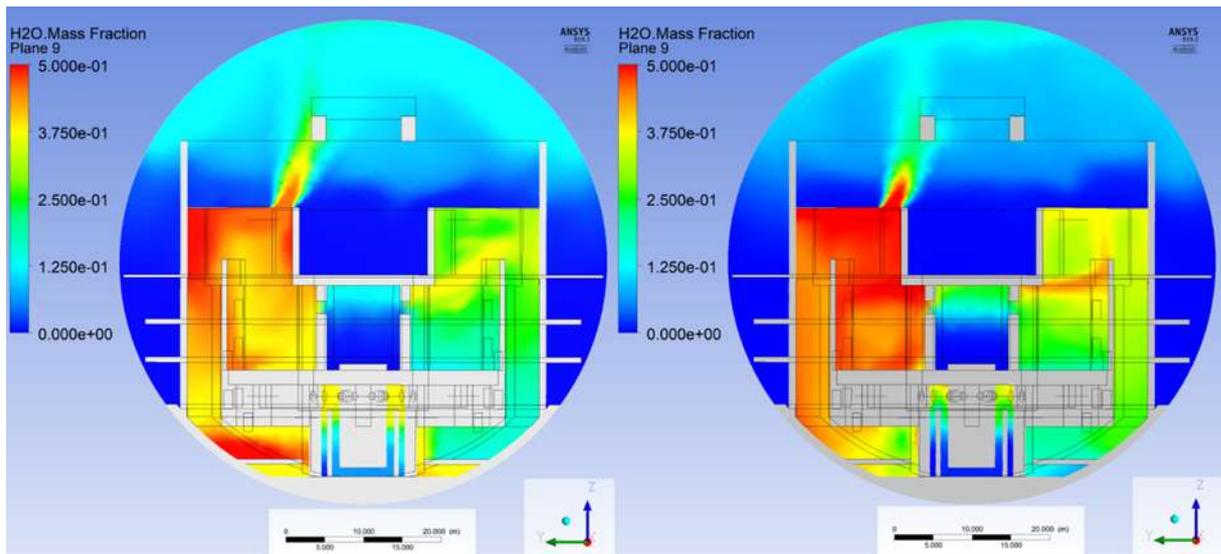


Abb. 5.9 Dampfverteilung im Containment, $t=100$ s (links: Fall 1 und rechts: Fall 2)

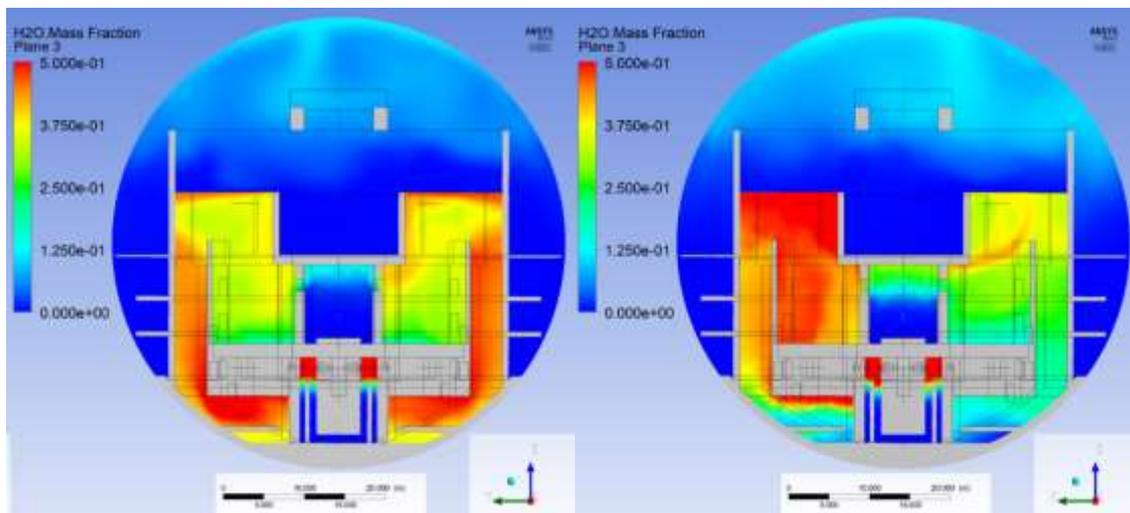


Abb. 5.10 Dampfverteilung im Containment, $t=100$ s (links Fall 3: und rechts: Fall 4)

5.2.5 Einfluss des Ansprechdruckes der Berstscheiben

Bei den bisherigen Studien wurde der Ansprechdruck der Berstscheiben entsprechend leicht unterschiedlich gewählt. Im Folgenden wird untersucht, wie sich die Simulationsergebnisse ändern, falls für alle Berstscheiben exakt der gleiche Öffnungsdruck von 0,035 bar angenommen wird.

Auch in diesem Fall zeigt sich ein Einfluss der Einspeiseposition und Modellierung auf die Anzahl und Position der sich öffnenden Berstscheiben. (siehe Tab. 5.13). Die Ergebnisse unterscheiden sich zwar im Hinblick auf die Berstscheiben, die sich öffnen, von

den vorherigen Untersuchungen, die Schlussfolgerungen hinsichtlich der Sensitivität auf die Einspeisebedingungen und Modellierung sind aber auch weiterhin gültig.

Tab. 5.13 Geöffnete Berstscheiben bei unterschiedlicher Leckrichtung und Leckmodellierung (gleicher Ansprechdruck bei allen Berstscheiben)

Einspeiserate	Leckrichtung und Leckmodellierung	Geöffnete Berstscheiben	
		Dampferzeugerturm 1	Dampferzeugerturm 2
80 kg/s	x	B1_7	Keine
	-x	Keine	B2_1
	z	B1_7	B2_1
	-z	B1_7	B2_3
	y	B1_7	B2_1
	-y	B1_7	B2_1
	Viertelsumpf	B1_1, B1_4	Keine

5.2.6 Einfluss der Leckmodellierung auf den weiteren Unfallablauf

Für ein Beispiel-Szenario wurde über einen Zeitraum von 4000 s die Gasverteilung im generischen Containment bei unterschiedlicher Leckmodellierung berechnet. Die Einspeiseraten für Dampf und H₂ sind in Abb. 5.11, Abb. 5.12 und Tab. 5.14 dargestellt. Diese Einspeiseraten entsprechen einem stark vereinfachten SB-LOCA-Fall (Small break loss-of-coolant accident) mit Ausfall von Sicherheitssystemen. Die H₂-Einspeisung wurde dabei vorgezogen, um an einem einfachen Fall die sicherheitsrelevanten H₂-Konzentrationen (Gefahr einer H₂-Verbrennung) zu untersuchen. Bei einer Rechnung wird das Leck als gerichteter Strahl (in x-Richtung) modelliert und in der anderen Rechnung erfolgt die Einspeisung durch eine volumetrische Quelle in ein Sumpfviertel. Bei dieser Studie wurden die Ansprechdrücke aller Berstscheiben auf 0,035 bar und die Ansprechdrücke aller Türen auf 0,55 bar eingestellt.

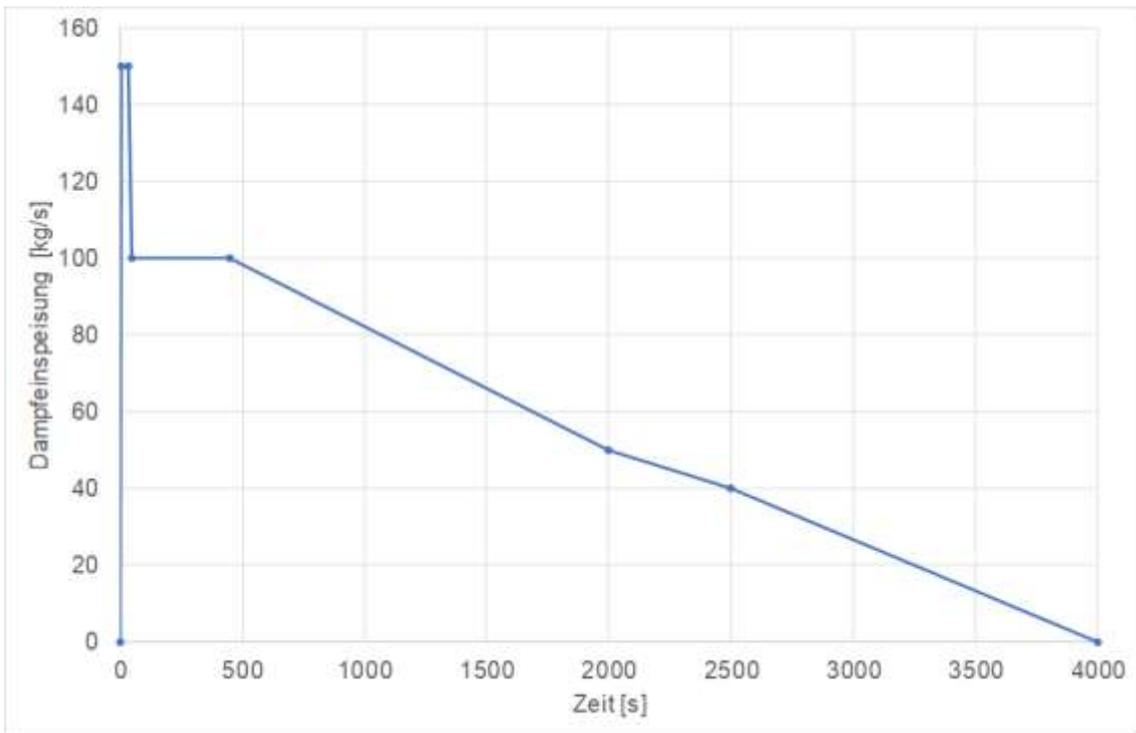


Abb. 5.11 Dampfeinspeisung beim Beispiel-Szenario

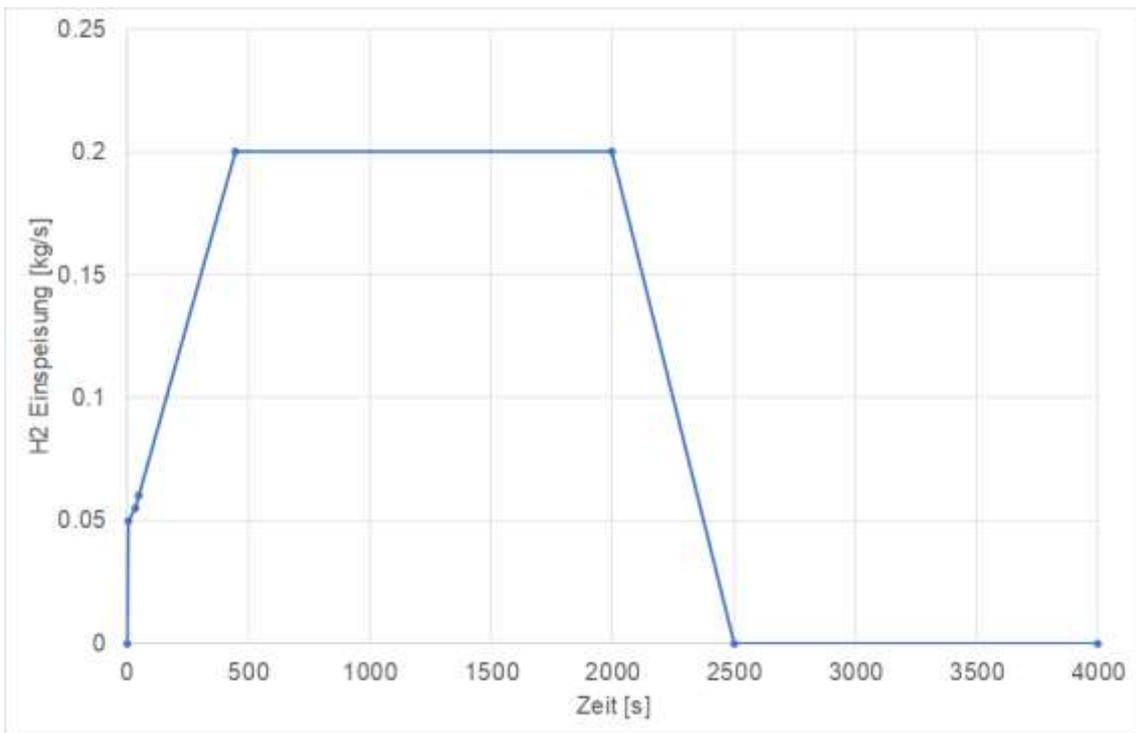


Abb. 5.12 H₂-Einspeisung beim Beispiel-Szenario

Tab. 5.14 Randbedingungen für das Beispiel-Szenario

Zeit [s]	Einspeisung Dampf [kg/s]	Einspeisung H₂ [kg/s]	Temperatur [°C]
0	0	0	30
5	150	0,05	120
35	150	0,055	150
50	100	0,06	150
450	100	0,2	160
2000	50	0,2	180
2500	40	0	190
4000	0	0	200

Es zeigt sich, dass sich bei der gerichteten Einspeisung drei Berstscheiben öffnen, während bei der volumetrischen Einspeisung sechs Berstscheiben öffnen (siehe Tab. 5.15 und Abb. 5.13). Türen öffnen sich bei keinem der beiden Fälle.

Tab. 5.15 Geöffnete Berstscheiben beim Langzeit-Szenario

Fall [-]	Öffnungszeit der ersten Berstscheibe [s]	Geöffnete Berstscheiben	
		Dampferzeugerturm 1	Dampferzeugerturm 2
Gerichtete Quelle	3,50	B1_1, B1_3	B2_8
Volumetrische Quelle	4,08	B1_1, B1_3	B2_1, B2_3, B2_7, B2_9

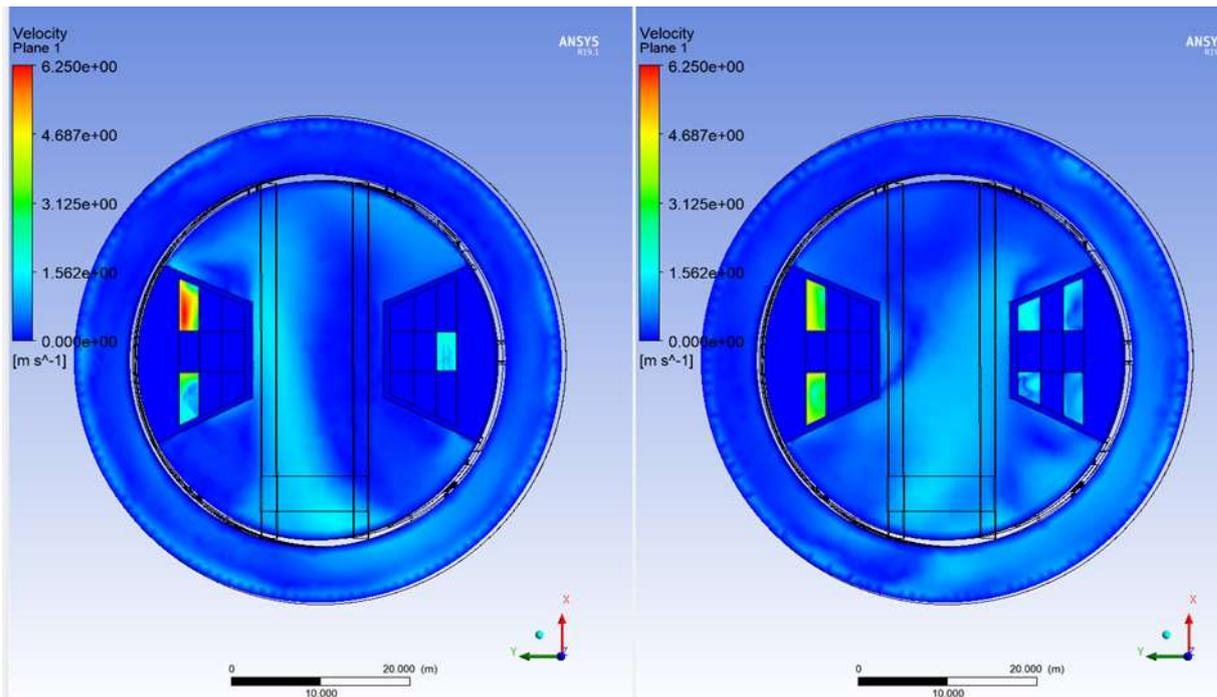


Abb. 5.13 Geöffnete Berstscheiben beim Langzeitszenario (links: gerichtete Quelle, rechts: volumetrische Quelle)

Die größere Anzahl an geöffneten Berstscheiben beim Fall der volumetrischen Einspeisung sorgt für eine schnellere Verteilung der heißen Gase (Dampf und H₂) in einem größeren Volumen. Es kommt beim Fall der volumetrischen Einspeisung zu einer höheren Wandkondensationsrate (siehe Abb. 5.14). Dieses führt bei der volumetrischen Einspeisung zu einer geringeren integralen Dampfmenge im Containment (siehe Abb. 5.15 und Abb. 5.16). In Abb. 5.17 sind in Rot die Bereiche dargestellt, die eine Dampfkonzentration unterhalb von 65 vol.-% haben und in denen deshalb prinzipiell eine Verbrennung von H₂ stattfinden könnte. Weiterhin hat die höhere Kondensationsrate bei der volumetrischen Einspeisung einen geringeren Containmentdruck zur Folge (siehe Abb. 5.18).

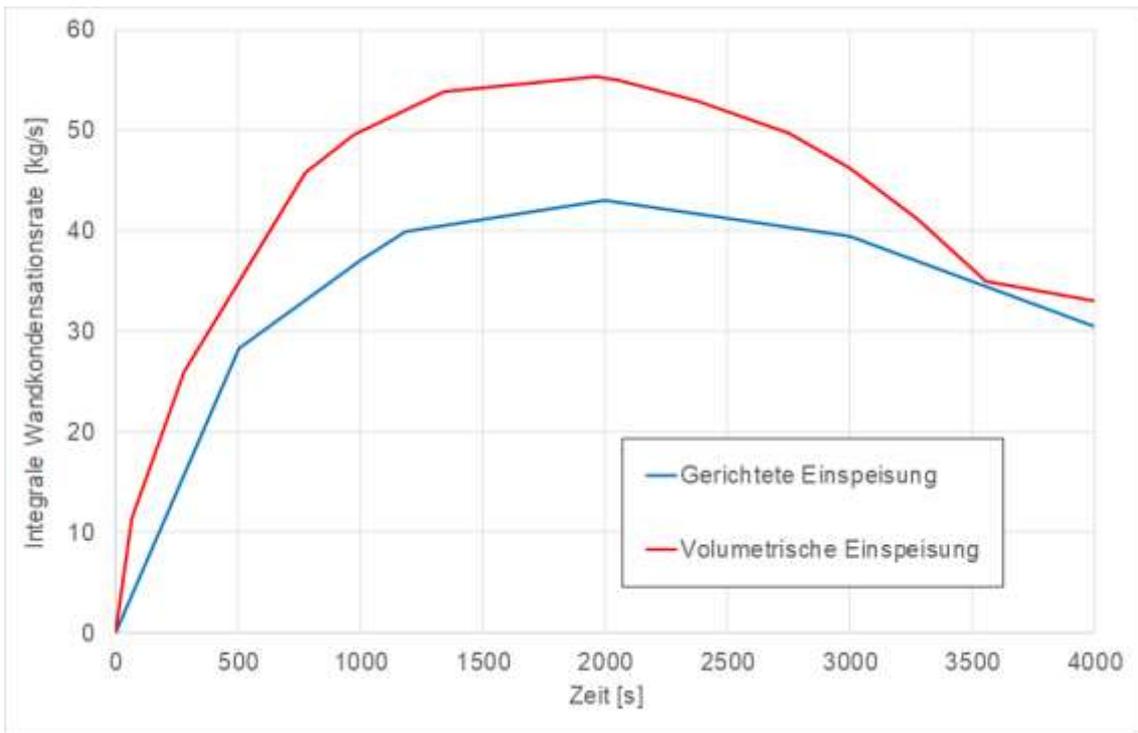


Abb. 5.14 Vergleich der integralen Wandkondensationsraten beim Langzeitszenario

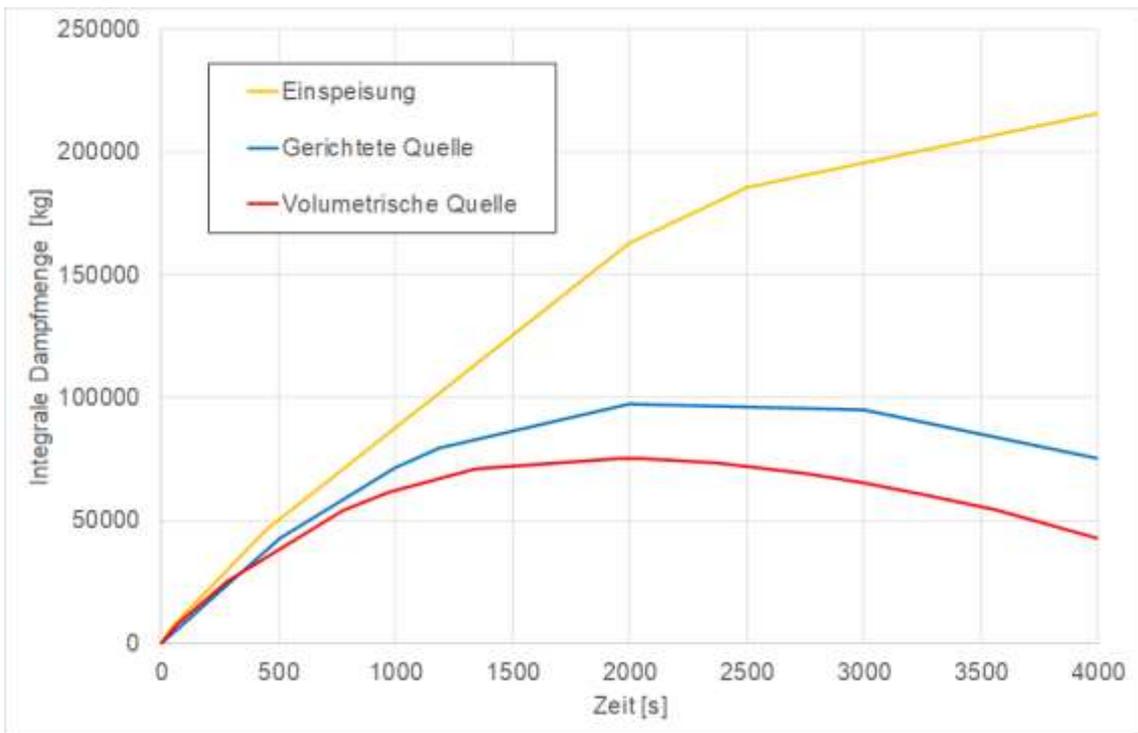


Abb. 5.15 Vergleich der integralen Dampfmenge im Containment

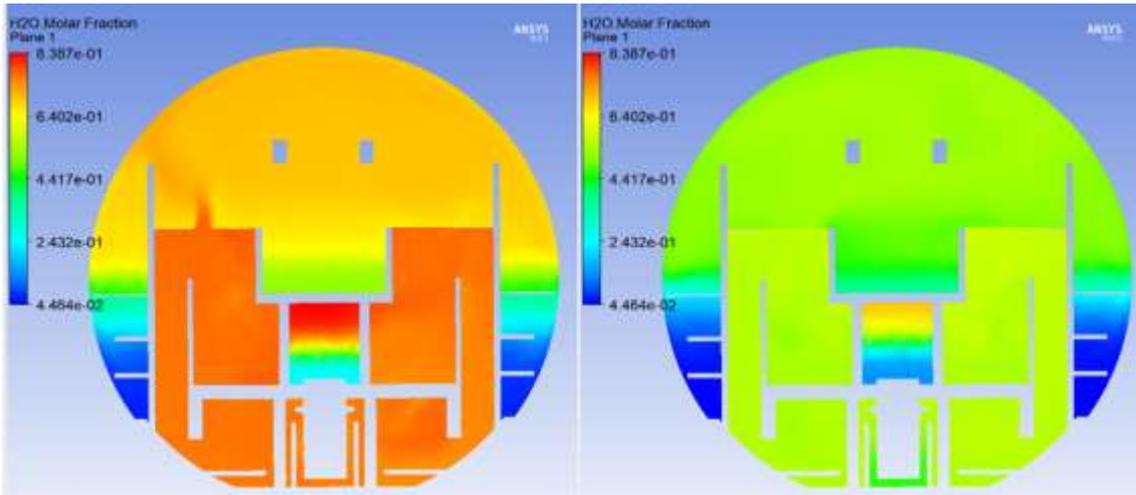


Abb. 5.16 Vergleich der Dampf-Konzentrationen bei $t = 4000$ s (links: gerichtete Einspeisung, rechts: volumetrische Einspeisung)

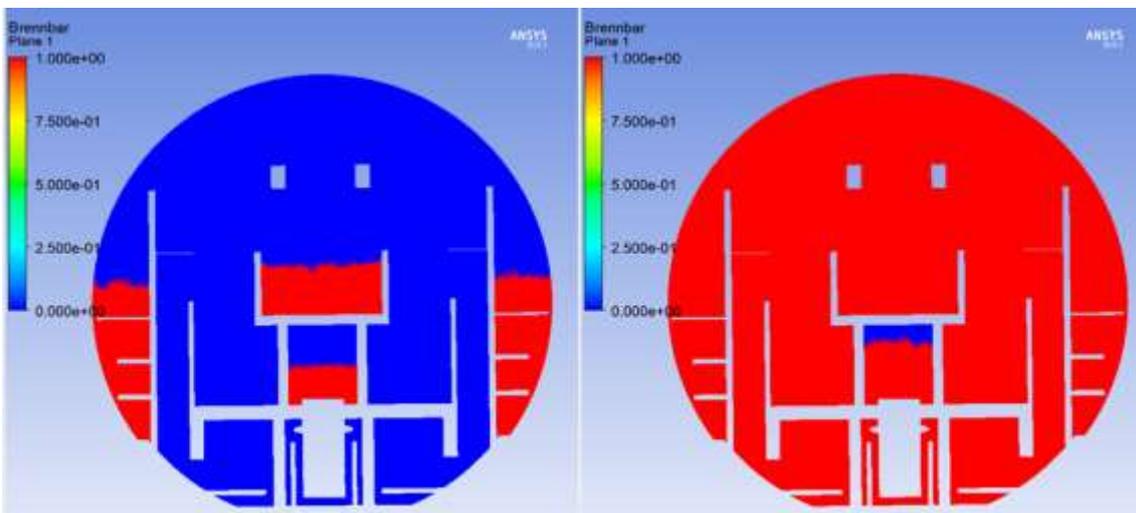


Abb. 5.17 Brennbare Bereiche (Dampf-Konzentration < 65 vol.-%, links: gerichtete Einspeisung, rechts: volumetrische Einspeisung)

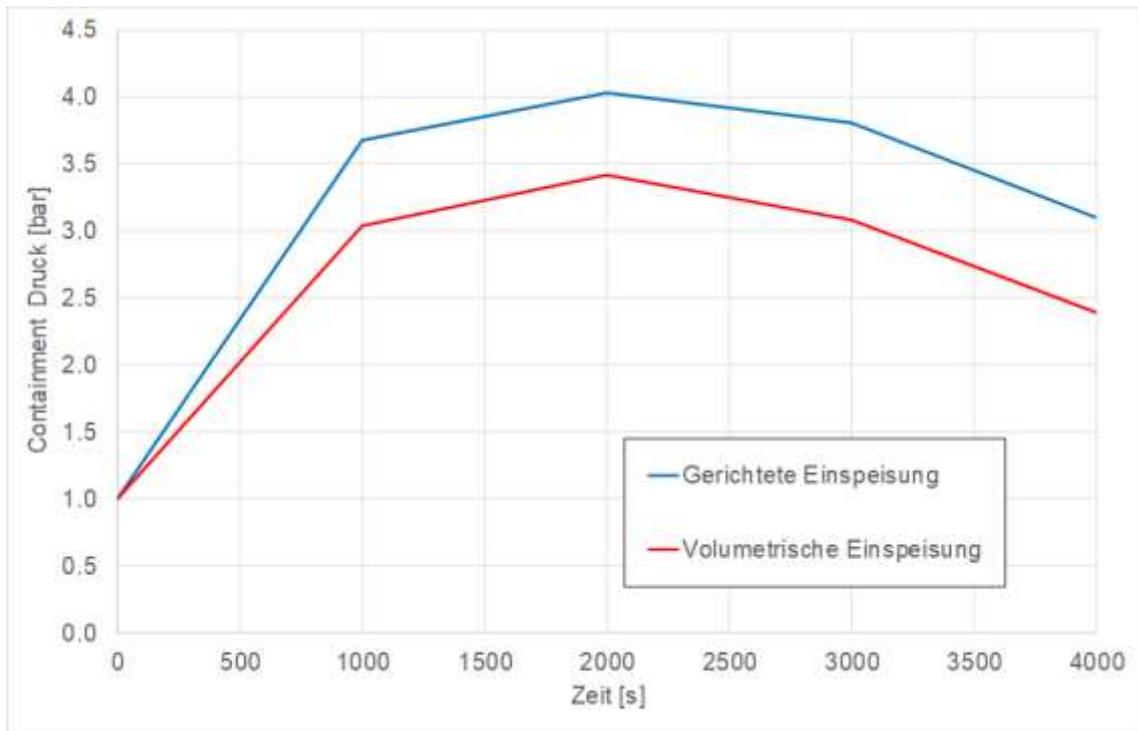


Abb. 5.18 Vergleich des Druckverlaufs im Containment

In Hinsicht auf die Integrität der Containmentstrukturen ist ein geringerer Druck zunächst günstiger. Hierbei spielt es natürlich eine Rolle, wie groß der Abstand zum Versagens- bzw. Auslegungsdruck des Containments ist. Andererseits führt die stärkere Kondensation bei der volumetrischen Einspeisung auch zu höheren lokalen H_2 -Konzentrationen und einer geringen Dampfkonzentration. Diese werden für unterschiedliche Monitorpunkte in Abb. 5.19, Abb. 5.20 und Abb. 5.21 dargestellt. Eine Gesamtübersicht der H_2 -Konzentrationen bei 4000 s findet sich in Abb. 5.22, hier sind auch die Monitorpunkte im Dom, Dampferzeugerturm und Sumpf durch Kreuze markiert. Die Modellierung der Einspeisung hat also auch einen starken Einfluss auf die lokalen H_2 -Konzentrationen und auf die Dampfkonzentration und damit ebenfalls auf die Brennbarkeit des Gasgemisches. In Abb. 5.23 sind in Rot die Bereiche mit einer H_2 -Konzentration größer 4 vol.-% dargestellt, in denen eine H_2 -Verbrennung stattfinden könnte. Kombiniert man dieses noch mit der Dampfkonzentration < 65 vol.-% (Abb. 5.17), so bleiben lediglich die in Abb. 5.24 dargestellten roten Bereiche als potentiell brennbare Bereiche übrig. Im Hinblick auf die Brennbarkeit ist im hier unterstellten Szenario die Modellierung der volumetrischen Einspeisung deutlich konservativer, da für einen größeren Raumbereich ein brennbares Gemisch berechnet wird. Auch die maximalen Wasserstoffkonzentrationen sind höher. Dabei ist aber zu berücksichtigen, dass in beiden Fällen die H_2 -Konzentration unterhalb von 7 vol.-% liegt, so dass keine schnelle Flammenausbreitung zu erwarten

ist. Es ist eher mit einer unvollständigen Verbrennung zu rechnen, eine Abschätzung durch den AICC-Druck ist konservativ.

Insgesamt kann eine starke Sensitivität bzgl. der Einspeisemodellierung festgestellt werden. Durch unterschiedliche Strömungspfade ändert sich die Gas- und Temperaturverteilung. Dies hat einen signifikanten Einfluss u. a. auf Kondensationsvorgänge. Dadurch werden sicherheitsrelevante Größen wie der Druck und die Dampf- und Wasserstoffkonzentration beeinflusst. Grundsätzlich sollten bei einer Untersuchung zur Containmentintegrität diese Aspekte berücksichtigt werden. Im Sinne einer Best-Estimate-Analyse wäre deshalb eine detaillierte Modellierung des Ausströmvorganges aus dem Leck (mit Hilfe von CFD) für kritische Szenarien zu empfehlen.

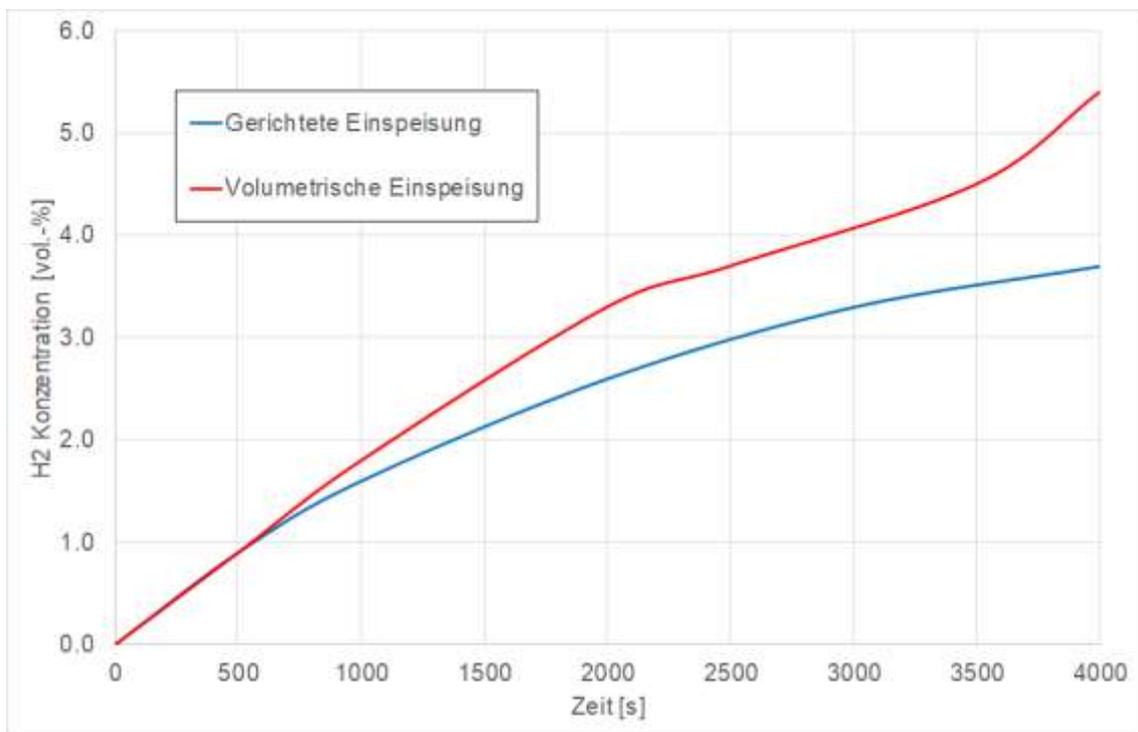


Abb. 5.19 H₂-Konzentration im oberen Dom

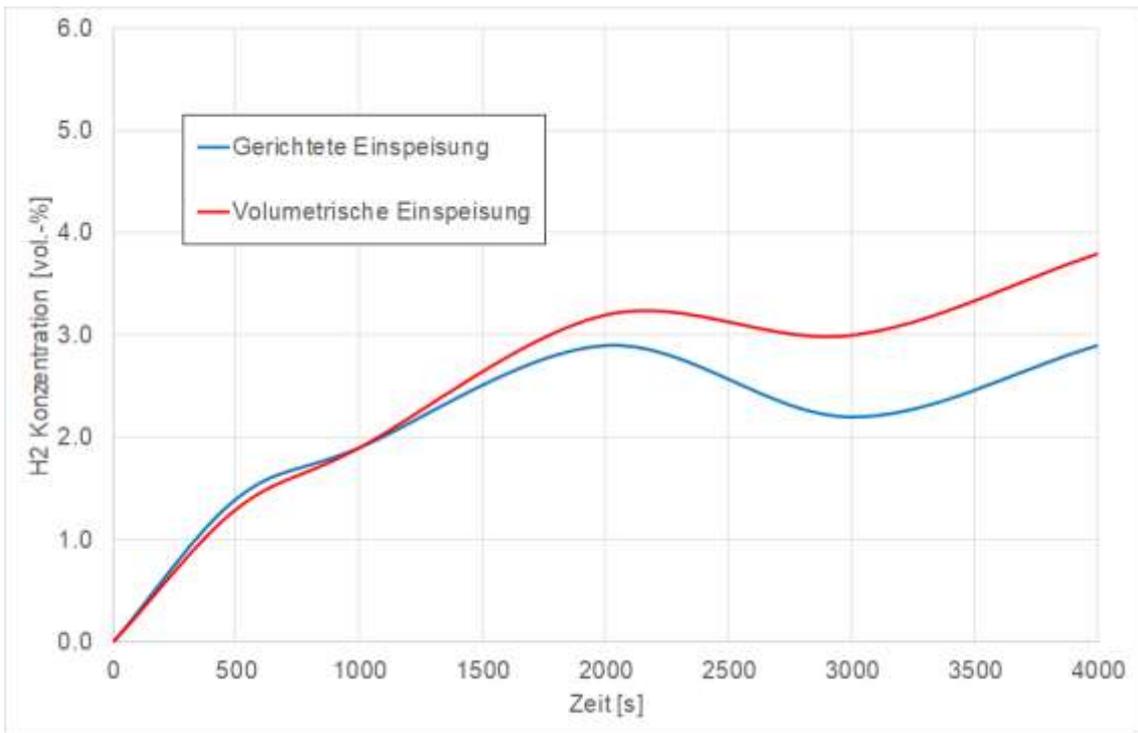


Abb. 5.20 H₂-Konzentration im Dampferzeugerturm

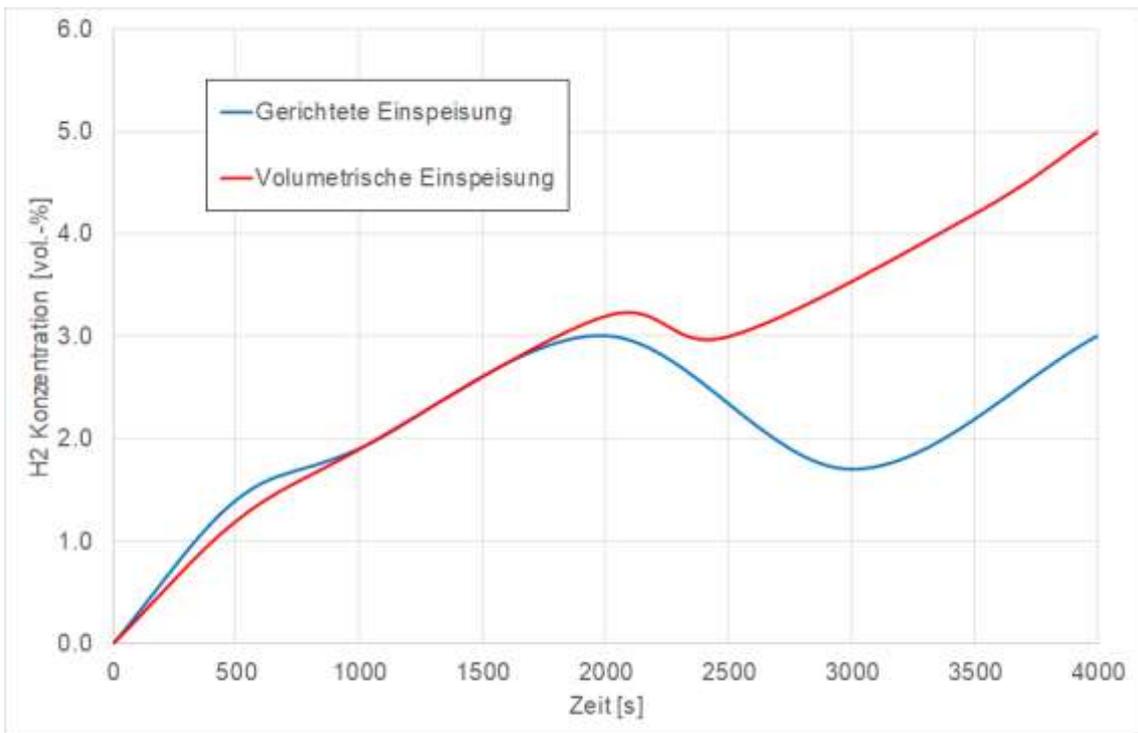


Abb. 5.21 H₂-Konzentration im Sumpf

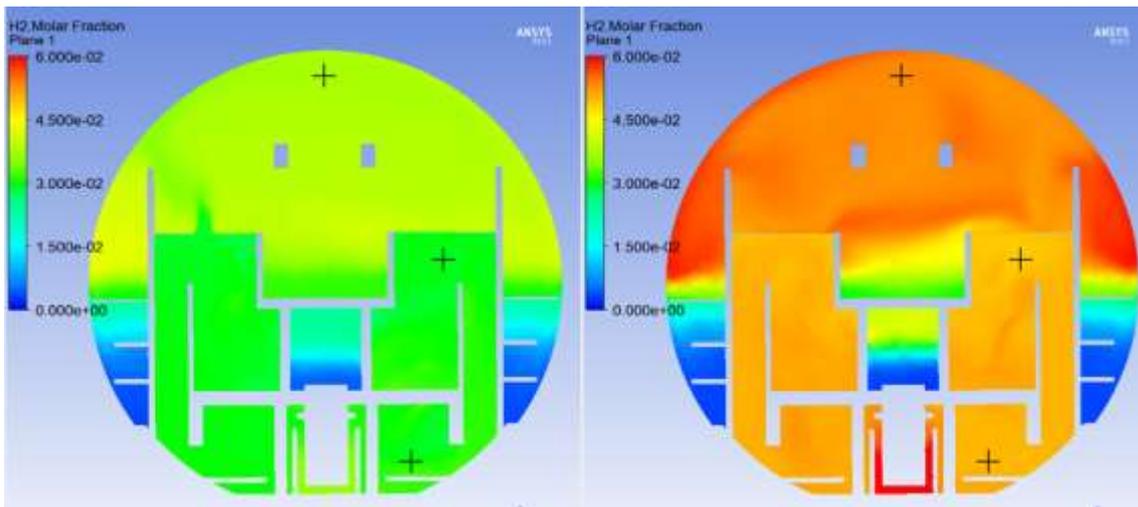


Abb. 5.22 Vergleich der H₂-Konzentrationen bei t = 4000 s (links: gerichtete Einspeisung, rechts: volumetrische Einspeisung)

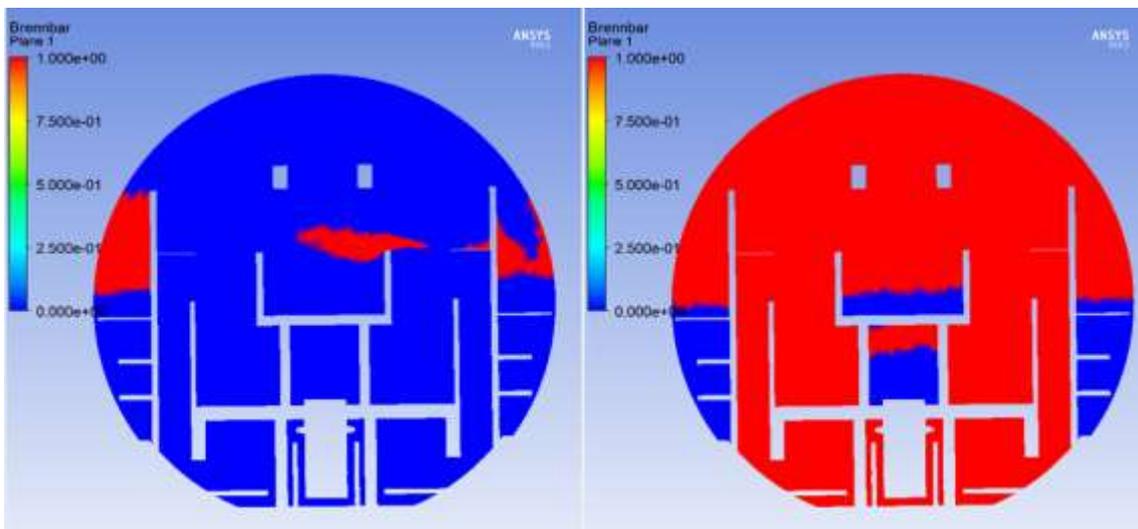


Abb. 5.23 Brennbare Bereiche (H₂-Konzentration > 4 vol.-%). (links: gerichtete Einspeisung, rechts: volumetrische Einspeisung)

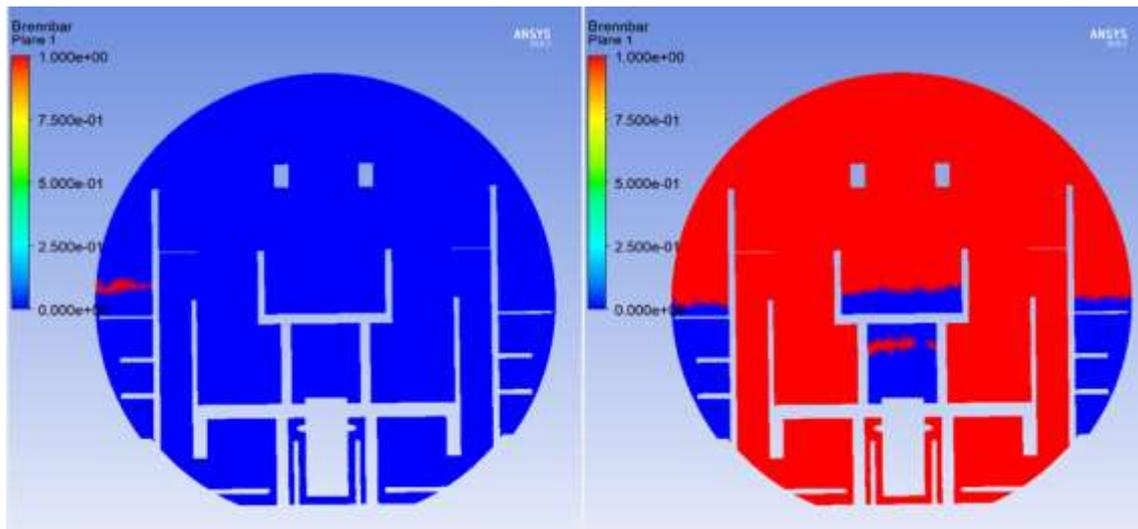


Abb. 5.24 Brennbar Bereiche (H_2 -Konzentration > 4 vol.-% und Dampfkonzentration < 65 vol.-%, links: gerichtete Einspeisung, rechts: volumetrische Einspeisung)

5.3 Zusammenfassung

In dem vorliegenden Arbeitspunkt wurde untersucht, welchen Einfluss die Modellierung eines Lecks (Position, Richtung, Strahl/Volumetrisch) auf den Unfallablauf hat. Dazu wurden zunächst numerische Untersuchungen (Zeitschrittstudie, Residuen) durchgeführt. Hierbei wurde eine Zeitschrittweite ermittelt, unterhalb derer es keine Veränderungen bei den Ergebnissen mehr gibt. Dann wurde das kurzfristige Verhalten (Öffnen von Berstscheiben) bei unterschiedlichen Leck-Massenströmen untersucht. Hier zeigt sich, dass ein unterschiedlicher Massenstrom zu einer Öffnung von unterschiedlichen Berstscheiben führen kann. Weiterhin wurde eine Variation der Leck-Richtung und der Leck-Position durchgeführt. Auch diese Variation führte zum Öffnen von unterschiedlichen Berstscheiben. Weiterhin wurde untersucht, welchen Einfluss die Modellierung durch eine volumetrische Einspeisung hat. Auch hierauf ist die Öffnung der Berstscheiben sensitiv.

Die etwas längerfristigen Auswirkungen auf die Gasverteilung wurden anhand zweier Fälle (gerichteter Strahl und volumetrische Einspeisung) untersucht. Nachdem sich bei den beiden Fällen eine unterschiedliche Anzahl von Berstscheiben geöffnet hat, kam es auch zu einer unterschiedlich starken Verteilung der Gase (Dampf / H_2) im gesamten Containment. Hierdurch wurde dann auch die Dampfkondensation an den Wänden beeinflusst. Dieses hat weiterhin zur Folge, dass wegen unterschiedlicher Kondensation

auch der Gesamtdruck Unterschiede aufweist. Das Volumen mit einem brennbaren Gasgemisch war ebenfalls deutlich unterschiedlich.

Insgesamt zeigt sich eine deutliche Sensitivität des berechneten Unfallablaufs auf die Modellierung des Lecks. Im Sinne einer Best-Estimate-Analyse ist deshalb eine detaillierte Modellierung des Ausströmvorganges aus dem Leck (mit Hilfe von CFD) für kritische Szenarien zu empfehlen.

6 Zusammenfassung / Fazit

Zur Simulation und Beurteilung von unfalltypischen Vorgängen im Sicherheitsbehälter von Kernkraftwerken erlangen CFD-Simulationstechniken eine immer stärkere Bedeutung. Mit dem Forschungsvorhaben RS1562 hat die GRS dieser Entwicklung Rechnung getragen und Modelle für CFD-Simulationen mit ANSYS CFX und OpenFOAM weiterentwickelt und validiert. Im Vordergrund standen dabei nicht-stationäre, turbulente und anisotrope Strömungen und Phänomene in komplexen 3-D-Geometrien, so wie sie im Sicherheitsbehälter bei einem Störfall mit Leckage des Primärkreises auftreten können. Basierend auf einer Strategieentscheidung im zuständigen BMWi-Projektkomitee wurden im Vorhaben zudem Koordinierungsarbeiten im CFD-Verbund zur Bereitstellung und abgestimmten Weiterentwicklung und Validierung des Open-Source-Code OpenFOAM für Containmentanwendungen durchgeführt. Im Sinne dieser Neuausrichtung wurden im Vorgängervorhaben begonnene Arbeiten mit ANSYS CFX fortgeführt und abgeschlossen sowie für die Entwicklung und Validierung von OpenFOAM-Modellen genutzt.

Im **AP1.1** erfolgte die **Auswahl einer geeigneten OpenFOAM-Code-Version und eines geeigneten Solvers**. Im letzten Forschungsvorhaben RS1526 wurde erstmalig die Leistungsfähigkeit des Open-Source-Codes OpenFOAM 2.1 (Release von Henry Weller) untersucht und mit der kommerziellen Software ANSYS CFX verglichen.

In der Zwischenzeit wurde OpenFOAM weiterentwickelt und bis zum Start des Forschungsvorhabens RS1562 lag die neue Version 5.x vor. Diese wurde als erster Ausgangspunkt für eine Untersuchung der Leistungsfähigkeit verwendet. Wegen der zahlreichen, zum Teil grundlegenden Neuerungen wurden die Versuche Mini-Panda und OECD/NEA-PSI CFD-Benchmark mit dieser Version neu gerechnet. Dabei wurden auch erste Untersuchungen zur Numerik (Zeitschrittweite, Gitter, Diskretisierungsschemata) durchgeführt. Die Version 5.x zeigte (neben einigen anderen Änderungen, wie z. B. bei der Gittererstellung) eine gute Leistung bei der Berechnung von Gasverteilungen bzw. Schichtungsauflösungen. Weiterhin konnten erste Standards (Zeitschritte, Gitter, Numerik) für weitere Rechnungen ermittelt werden.

Ab Juli 2018 lag eine neue OpenFOAM-Basisversion (OpenFOAM 6.0) der Foundation vor. In ihr waren insbesondere Verbesserungen bei der Kombination von Gas-Regionen und Solid-Regionen (Wände, Strukturen, ...) implementiert worden. Dazu wurde der Solver rhoReactingBuoyantFoam (für Fluid-Region) mit Solid-Regionen zusammengefasst und ein Wärmeaustausch zwischen beiden Regionen erlaubt. Das Ergebnis war der

kombinierte Solver chtMultiRegionFoam. Dieser Solver war die Basis für die OpenFOAM-Entwicklungen zur Simulation von Gasverteilungen.

Am Solver chtMultiRegionFoam waren jedoch noch zwei Änderungen notwendig:

- Korrektur / Modifizierung der Diffusionsterme
- Einfügen von Quellen-/Senkentermen für die Wandkondensation

Der geänderte Solver wurde danach unter dem Namen chtMultiRegionSchmidtFoam05 (temporärer Workaround Diffusionsmodellierung) und später als chtMultiRegionSchmidtFoam (Fick'sches Diffusionsmodell) geführt.

Im **AP1.2** wurde OpenFOAM um ein **Wand- und Volumenkondensationsmodell** erweitert.

Für das Volumenkondensationsmodell wurden die Quell- und Senkterme für Masse, Spezies (H_2O) und Energie mit Hilfe der Datei „fvOptions“ als dynamischer Code eingefügt. Die Quellterme ergeben sich aus dem aktuellen Partialdruck des Dampfes, dem Sättigungsdampfdruck und einer Zeitkonstante, die die Geschwindigkeit definiert, mit der sich das Gleichgewicht einstellt. Der Sättigungsdampfdruck wird mit der Antoine-Gleichung (aus aktuellem Druck und Temperatur) berechnet. Anschließend wurden Testrechnungen durchgeführt, bei denen ein System im Ungleichgewicht in den Gleichgewichtszustand (Sättigungsdampfdruck) übergeht. Die OpenFOAM-Ergebnisse wurden mit CFX-Ergebnissen (mit dem IKE-Volumenkondensationsmodell) verglichen. Hier zeigte sich eine sehr gute Übereinstimmung der sich einstellenden Gleichgewichtszustände. Die Quell- und Senkenterme für Masse, Energie und Spezies wurden also korrekt implementiert.

Für die Wandkondensation muss der Transport von Dampf in Luft durch Konvektion und Diffusion an die Wand berechnet werden. Damit die Masse des Kondensats aus dem Fluidrechengebiet wirklich entzogen wird, muss noch ein Senkenterm zur Kontinuitätsgleichung hinzugefügt werden. Weiterhin ist die Berechnung der Wandtemperatur und damit der Energieflüsse, die zwischen Fluid und Wand stattfinden, notwendig. Außerdem wird bei der Kondensation latente Wärme freigesetzt. Das Volumen- und das Wandkondensationsmodell wurden durch Nachrechnung mehrerer Validierungsversuche validiert (Conan/SARNET, THAI TH-2, TH-24, Panda 4bis).

Es wurden insgesamt fünf Versuche des CONAN/SARNET-Benchmarks zur Wandkondensation mit unterschiedlichen Dampfkonzentrationen berechnet. Bei den Versuchen mit mittlerer Dampfkonzentration findet sich eine sehr gute Übereinstimmung mit CFX und auch mit dem Experiment. Bei den Versuchen mit sehr kleiner und sehr großer Dampfkonzentration finden sich noch leichte Abweichungen bei den berechneten Kondensationsraten. Bei der Nachrechnung des Versuchs Panda 4bis konnten die Gasverteilung und Temperatur meist mit geringen Abweichungen zu entsprechenden CFX-Simulationen nachgerechnet werden. Allerdings kam es im Verlauf der Simulation zu Konvergenzproblemen, die nur durch unpraktikabel kleine Zeitschritte zu lösen waren, so dass teilweise das Konvergenzkriterium (insbesondere Druckgleichung) nicht erfüllt wurde. Bei anderen Versuchen stellte die Konvergenz dagegen kein Problem dar.

Sowohl bei THAI TH-2 als auch bei THAI TH-24 findet sich eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten. Die Temperaturen und Dampfkonzentrationen passen recht gut zu den experimentellen Werten. Sie sind auch ähnlich zu den CFX-Werten. Gewisse Unterschiede zu CFX liegen vermutlich in etwas geänderten Randbedingungen (durch neue Erkenntnisse) und in Unterschieden in den verwendeten Modellen (Diffusion, Wärmestrahlung, Wandfunktionen). Auch die in den beiden Versuchen berechneten Volumen- und Wandkondensationsraten stimmen gut mit den entsprechenden CFX-Werten überein. Hierzu gibt es keine experimentellen Werte.

Insgesamt konnte dieser Arbeitspunkt (Implementierung und Validierung von Kondensationsmodellen) erfolgreich abgeschlossen werden. Es liegen nun Modelle vor, die bei weiteren Rechnungen (Validierung und Anwendung) genutzt werden können. Zukünftig sind Modellerweiterungen, wie z. B. das Abfließen des Wasserfilms bei Wandkondensation und die detaillierte Modellierung des Transports, der Sedimentation und der Verdampfung von bei Volumenkondensation gebildeten Wassertropfchen, sinnvoll.

Im Rahmen des **AP1.3 (Wärmestrahlung)** hat sich die GRS an drei vom Paul-Scherrer-Institut organisierten Benchmarks (Code-zu-Code-Vergleich) zum Thema Wärmestrahlungsmodellierung beteiligt. Hierbei wurde zunächst ein Fall einer Schichtungsauflösung ohne Wärmestrahlung untersucht. Danach wurde Strahlung berücksichtigt, aber der Absorptionskoeffizient war konstant 1 m^{-1} . Im dritten Schritt wurde der Absorptionskoeffizient im Rahmen einer Parameterstudie variiert.

Die wichtigen Erkenntnisse aus diesen Untersuchungen waren, dass die Berücksichtigung der Wärmestrahlung einen signifikanten Einfluss auf die Temperaturverteilung und

die Geschwindigkeit der Schichtungsauflösung haben kann. Insbesondere ist die Auflösung der Heliumschicht bei CFX ohne Strahlungsmodellierung deutlich langsamer. Auch ein kleiner Absorptionskoeffizient ($0,05 \text{ m}^{-1}$) kann schon einen deutlichen Einfluss auf das Simulationsergebnis haben (insbesondere bei CFX). Bei optisch dichten Medien (Absorptionskonstante 10 m^{-1}) wird mit dem P1- und dem Discrete-Transfer-Modell eine ähnlich schnelle Schichtungsauflösung berechnet. Bei optisch dünnen Medien ($0,05 \text{ m}^{-1}$) sind die Abweichungen größer, aber auch hier liefert das P1-Modell noch ähnliche Ergebnisse.

Aus der Versuchsserie H2P2 wurden die Versuche 1_2 (sehr wenig Dampf) und 5 (viel Dampf) nachgerechnet. Ziel der Arbeiten war es, geeignete Wärmestrahlungsmodelle und Absorptionskoeffizienten zu ermitteln. Die Simulationen mit CFX und OpenFOAM zeigen bei gleichen Wärmestrahlungsmodellen sehr ähnliche Ergebnisse. Der Druck wird bei beiden Experimenten von den Simulationen um ca. 5 % überschätzt, die Ursache ist noch unklar. Hierzu sind weitere Diskussionen im Rahmen des HYMERES-2 Nachfolger PANDA-Projekts geplant. Bei den Temperaturen zeigt sich eine deutliche Sensitivität auf die Wärmestrahlungsmodellierung. Die besten Ergebnisse wurden beim Experiment 1_2 mit einem Planck'schen Absorptionskoeffizienten erzielt. Bei diesem Versuch zeigte sich kaum ein Einfluss des Strahlungsmodells. Anders war es beim Versuch 5, hier hatte das Strahlungsmodell einen deutlichen Einfluss. Hier passte ein mittlerer Absorptionskoeffizient von ca. 10 (m bar)^{-1} am besten zum Experiment.

Im Rahmen der Nachrechnung der Versuche H2P1_3 und H2P1_5 (siehe AP3.1) mit CFX und OpenFOAM wurde eine Untersuchung zur Wärmestrahlungsmodellierung durchgeführt. Dabei wurden das Strahlungsmodell und die Absorptionskonstante von Dampf variiert. Es zeigt sich ein signifikanter Einfluss des Wärmestrahlungsmodells und auch der Absorptionskonstante von Dampf sowohl auf die Temperaturverteilung als auch auf die Erosionsgeschwindigkeit der Heliumschicht. Aufgrund von Unsicherheiten bei den Randbedingungen und der Überlagerung des Einflusses unterschiedlicher Modelle bei der Schichtungsauflösung (z. B. Turbulenzmodellierung, Diffusion, Wandfunktionen etc.) konnte keine eindeutige Aussage über die Eignung einzelner Modelle und Modellparameter getroffen werden. Weitere Untersuchungen zum Einfluss der Wärmestrahlung werden im Rahmen des Nachfolgeprojekts RS1603A durchgeführt in dem u. a. Versuche aus dem PANDA-Versuchsprogramm simuliert werden.

Im **AP1.4** wurde ein **PAR-Modell** für OpenFOAM entwickelt und anhand mehrerer Testfälle und zweier Experimente (THAI HR-5 und HR-43) validiert. Das PAR-Modell wurde

als getrenntes „recombiner“-Modul entwickelt, das mit Hilfe von codedFixedValue-Randbedingungen eingebunden werden kann.

Die Testfälle zeigen, dass die unterschiedlichen Korrelationen (Effizienz, Rekombinationsrate, PAR-Wände, Sauerstoffarmut) korrekt implementiert wurden. Bei der Nachrechnung der zwei THAI-Experimente zeigt sich insgesamt eine gute Übereinstimmung, sowohl mit den experimentellen Daten als auch mit den CFX-Ergebnissen. Die erfolgreiche Simulation von HR-43 zeigt, dass das auf Korrelationen basierende PAR-Modell auch für einen PAR in Gegenströmung erfolgreich angewendet werden kann.

Das implementierte PAR-Modell sollte zukünftig noch erweitert werden. Im späteren Unfallverlauf kann durch Schmelze/Beton-Wechselwirkung neben H_2 auch CO gebildet werden. Die hier modellierten passiven autokatalytischen Rekombinatoren sind auch in der Lage, CO mit O_2 zu CO_2 zu rekombinieren. Das PAR-Modell sollte in Zukunft entsprechend erweitert werden. Je nach Anwendungsfall können noch weitere Erweiterungen (z. B. um den Einfluss von Aerosolen oder Wassertröpfchen /SCH 17/) notwendig werden.

Im Rahmen von **AP2 (Koordinierung der Zusammenarbeit)** wurden technische und inhaltliche Arbeiten zur Koordination von OpenFOAM-Containment durchgeführt. Vor Austausch von OpenFOAM-Modellen mit Partnern wurde geklärt, wie eine mit der GNU General Public Licence V3 sowie dem Rahmenvertrag der GRS mit dem BMWi konforme Weitergabe von OpenFOAM-Modellen rechtlich realisiert werden kann. Es wurde ein GitLab-Server zum Austausch von Modellen, Testbeispielen etc. eingerichtet. Für den Referenzsolver der GRS zur Berechnung der Gasverteilung in Containmentanwendungen wurden Continuous-Integration-Prozesse (CI) aufgesetzt. Zur inhaltlichen Koordinierung zukünftiger OpenFOAM-Arbeiten (Containment) wurde ein Konzeptpapier für die Priorisierung der OpenFOAM-Entwicklungs- und -Validierungsaktivitäten erstellt und im CFD-Verbund abgestimmt. Die im Rahmen des Vorhabens RS1562 durchgeführten Entwicklungsarbeiten stehen im Einklang mit dem Strategiepapier.

Im **AP3.1 (Gasverteilung und Schichtungsauflösung)** wurde die Validierung der Simulation der Gasverteilung und Schichtungsauflösung weitergeführt. Dazu wurden die Panda-Experimente H2P1_3 und H2P1_10 sowie das THAI-Experiment TH-32 nachgerechnet. Das Panda-Experiment H2P1_3 untersucht die Erosion einer stabilen Heliumschicht durch einen vertikalen Dampfstrahl /PAR 18b/. Dieser trifft auf eine horizontale Platte, bevor er die Heliumschicht erreicht. Der Versuch wurde mit CFX und mit

OpenFOAM nachgerechnet. Dabei wurde die Wärmestrahlungsmodellierung (Strahlungsmodell, Absorptionskonstante von Dampf) variiert. Unabhängig von der Strahlungsmodellierung und auch anderer getesteter Modelle wird die Schichtungsauflösung von allen Simulationen signifikant zu schnell berechnet. Das Temperaturniveau und der qualitative Verlauf wird an den meisten Messpunkten mit moderaten Abweichungen berechnet, es gibt aber Messstellen, in denen im Experiment ein qualitativ anderer Verlauf beobachtet wird. Grund sind unter anderem unzureichend bekannte Start- und Randbedingungen. Es wurden im Gas temporär so niedrige Temperaturen gemessen, dass dies im Widerspruch zu den gemessenen Randbedingungen steht. Vermutliche Ursache ist eine lokal unzureichende Isolierung im Deckelbereich. Da unklar ist, inwieweit dies einen Einfluss auf die Erosionsgeschwindigkeit und die Temperaturverteilung hat, ist dieser Versuch nur bedingt zur Validierung/Auswahl von Modellen geeignet. Beim HYMERES2-Versuch H2P1_10_2 wird eine stabile Heliumschicht durch einen vertikalen Dampfstrahl erodiert. Zwischen Einlassrohr und Heliumschicht ist ein schräggestellter Gitterrost eingebracht, der den Dampfstrahl ablenkt. Der Versuch wurde mit CFX und OpenFOAM simuliert. Mit beiden Programmen konnte die Schichtungsauflösung in guter Übereinstimmung mit dem Experiment simuliert werden, wobei OpenFOAM eine etwas zu schnelle und CFX eine geringfügig zu langsame Erosion vorhersagt. Die im Versuch vorliegenden Temperaturen konnten bis auf einige lokale Abweichungen ebenfalls richtig berechnet werden.

Das THAI-Experiment TH-32 beinhaltet den Aufbau und die Erosion einer Heliumschicht durch eine Naturkonvektion. Diese wird durch unterschiedliches Beheizen und Kühlen der Wände des THAI-Behälters erzeugt. Die GRS hat sich mit CFX- und OpenFOAM-Rechnungen sowohl an der blinden als auch an der offenen Phase der durch Becker Technologies organisierten Benchmarks beteiligt. Grundsätzlich zeigt sich eine starke Sensitivität der Temperaturen und auch der Schichtungsauflösung auf die Wahl geeigneter Randbedingungen für die Heizmäntel, den Kühlmantel und die unbeheizten Bereiche. Die in der Einspeisephase erzeugte Heliumschicht wird sowohl von CFX als auch von der offenen OpenFOAM-Rechnung in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet, dabei wird sie im oberen Bereich geringfügig überschätzt. Die blinde OpenFOAM-Rechnung hat die Schichtung im oberen Bereich dagegen etwas unterschätzt.

In der Phase der Schichtungserosion liegt die blinde OpenFOAM-Rechnung am nächsten am Experiment bzgl. der Auflösungszeit für die Schichtung. Die CFX-Rechnung überschätzt die Auflösungszeit deutlich. Die offene OpenFOAM-Rechnung (verbesserte

Diffusion und Numerik) berechnet eine langsamere Erosion und liegt damit weiter vom Experiment entfernt, dafür aber näher an der CFX-Rechnung. Aufgrund der beobachteten Sensitivität wäre es wichtig, zukünftige Experimente so zu gestalten, dass eine solche Sensitivität ausgeschlossen wird oder aber die Randbedingungen (Temperaturen / Wärmeströme) experimentell genauer bestimmt werden.

Die durchgeführten Validierungsrechnungen zeigen, dass bei der Berechnung der Auflösung von stabilen Leichtgasschichtungen erhebliche Fortschritte erzielt wurden. Die mit dem OpenFOAM Referenzsolver erzielten Ergebnisse zeigen eine ähnliche Prognosequalität wie CFX (bzw. andere kommerzielle CFD-Codes). Es sind aber weitere Entwicklungs-/Validierungsarbeiten erforderlich, insbesondere bei der Simulation von freier Konvektion (z. B. TH-32).

Im Rahmen des **AP3.2 (H₂-Verbrennung)** wurde zunächst mit CHEMKIN eine eigene Flamelet-Bibliothek für die Verbrennung von H₂/H₂O/Luft-Gemische erzeugt. In Abhängigkeit von der initialen Gemischzusammensetzung (H₂, H₂O) und der initialen Temperatur werden die Gemischzusammensetzung und die Temperatur des verbrannten Gases tabelliert. Dies ermöglicht die konsistente Verbrennungssimulation von H₂/Luft/Dampf-Gemischen. Die Flamelet-Bibliothek und die benötigten User-Fortran-Routinen wurden erfolgreich getestet.

Unterschiedliche Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit beim Burning-Velocity-Modell wurden durch Nachrechnung verschiedener Versuche getestet. Die initiale H₂-Konzentration lag im Bereich von 6 vol.-% – 15 vol.-%. Es wurden dabei langsame schwach turbulente und schnelle turbulent beschleunigte Flammen simuliert. DDT (Deflagration-to-Detonation-Transition) und Detonationen wurden nicht untersucht.

Mit einer modifizierten Dinkelacker-Korrelation konnte mit den Modellkonstanten $A = 2$ und $B = 3$ bei Berücksichtigung aller Experimente die beste Übereinstimmung erzielt werden. Mit dieser Korrelation konnten alle simulierten Experimente zumindest zufriedenstellend berechnet werden. Allerdings war es auch bei dieser Korrelation nicht möglich, alle Details der Flammenausbreitung und des Druckverlaufs richtig zu simulieren. Auch andere Kombinationen haben eine ähnlich gute Übereinstimmung erzielt. Je nach Versuch und gewählter Anfangsturbulenz ergibt sich ein anderes Ranking. Die Ergebnisse unterscheiden sich in der Regel aber nur moderat.

Die Korrelation der TUM für die turbulente Flammgeschwindigkeit wurde getestet. Es war nicht möglich, mit dem gleichen Formfaktor B alle Experimente zufriedenstellend nachzurechnen. Mit $B = 1$ konnten die THAI-Versuche HD-7 und HD-10 in guter Übereinstimmung mit dem Experiment simuliert werden. Bei HD-39 wurde mit $B = 1$ eine zu schnelle Verbrennung simuliert, mit $B = 0,5$ wurde die Verbrennungsgeschwindigkeit leicht unterschätzt. Bei den ENACCEF2-Experimenten wird selbst mit $B = 0,5$ eine viel zu schnelle Flammenausbreitung simuliert.

Die Anfangsturbulenz wurde bei keinem Versuch gemessen. Bei den THAI-Experimenten hat die Anfangsturbulenz einen deutlichen Einfluss auf den Ablauf der Verbrennung. In zukünftigen Experimenten sollten deshalb entsprechende Messungen vorgenommen werden. Beim Experiment HD-39 kam es zu einer unvollständigen Verbrennung. Sie konnte nicht berechnet werden, da das Gemisch überall eine Konzentration größer als die Zündgrenze hatte und Verlöschungsprozesse nicht modelliert werden können. Entsprechende Modellerweiterungen wären zukünftig sinnvoll.

Im **AP3.3** wurde die **Wechselwirkung von Aerosolen mit Dampf** untersucht und modelliert. Primäres Ziel war es, dabei ein möglichst gutes Modell zur Berechnung der Verteilung und Ablagerung der Aerosolpartikel zu finden. Weiterhin wurde auch die Ausbreitung von Aerosolen in einer Mehrraumgeometrie untersucht und simuliert. Es wurden sowohl die KAEVER-Versuche wie auch der VANAM-M3-Versuch für die Modellertüchtigung und Validierung verwendet.

Die KAEVER-Versuche zeigen ganz klar, dass eine Erhöhung der relativen Luftfeuchte bei allen verwendeten Aerosolen (CsI , CsOH , Ag , SnO_2) zu einem schnelleren Abbau der luftgetragenen Aerosolkonzentration führt. Bei der Messung der Aerosoldurchmesser in den KAEVER-Versuchen gibt es jedoch große experimentelle Unsicherheiten.

Anhand der Messwerte wurde eine Korrelation erstellt, die den Partikeldurchmesser in Abhängigkeit von der Luftfeuchte beschreibt. Hier wird zwischen löslichen und nicht-löslichen Aerosolen unterschieden. Nach Implementation dieser Korrelation in CFX wurden alle KAEVER-Versuche nachgerechnet. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen dem simulierten und gemessenen Abbau-Verhalten.

Die in Einzel-Effekt-Versuchen gewonnenen Erkenntnisse wurden im Weiteren auf eine komplexere Mehrraum-Geometrie übertragen (Battelle-Modell-Containment / VANAM-M3-Versuch). Der gesamte Versuchsablauf enthält eine Aufheizphase, mehrere

Einspeisephasen für Dampf und Aerosol (NaOH) sowie Ruhe- bzw. Ablagerungsphasen zwischen den Einspeisungen. Diese wurden mit CFX nachgerechnet. Die Gasverteilung (Dampf und Luft) bildet die Grundlage für die Aerosolverteilung im Containment.

Es zeigt sich, dass CFX den Effekt Aerosolausbreitung und das Ablagerungsverhalten gut abbilden kann. Das Algebraic-Slip-Modell scheint für diese Anwendungen gut geeignet zu sein. Allerdings hängt die Güte der Ergebnisse stark von der Güte der (gemessenen / bekannten) Aerosolparameter (Durchmesser, Dichte, ...) ab. Da die Partikeldurchmesser in dem VANAM-Experiment mit größeren Unsicherheiten belegt sind, lassen sich hier keine weiteren vertieften Erkenntnisse ableiten.

In **AP4** wurden **unfalltypische Phänomene** untersucht. Insbesondere wurde untersucht, welchen Einfluss die Modellierung eines Lecks (Position, Richtung, Strahl/Volumetrisch) auf den weiteren Unfallablauf hat. Dazu wurden zunächst numerische Untersuchungen (Zeitschrittstudie, Residuen) durchgeführt. Dann wurde das kurzfristige Verhalten (Öffnen von Berstscheiben) bei unterschiedlichen Leck-Massenströmen untersucht. Hier zeigt sich, dass ein unterschiedlicher Massenstrom zu einer Öffnung von unterschiedlichen Berstscheiben führen kann. Weiterhin wurde eine Variation der Leck-Richtung und der Leck-Position durchgeführt. Auch diese Variation führte zum Öffnen von unterschiedlichen Berstscheiben. Dann wurde untersucht, welchen Einfluss die Modellierung durch eine volumetrische Einspeisung hat. Auch hierauf ist die Öffnung der Berstscheiben sensitiv.

Die etwas längerfristigen Auswirkungen auf die Gasverteilung wurden anhand zweier Fälle (gerichteter Strahl und volumetrische Einspeisung) untersucht. Nachdem sich bei den beiden Fällen eine unterschiedliche Anzahl von Berstscheiben geöffnet hat, kam es auch zu einer unterschiedlich starken Verteilung der Gase (Dampf / H₂) im gesamten Containment. Hierdurch wurde dann auch die Dampfkondensation an den Wänden beeinflusst. Dies hat weiterhin zur Folge, dass wegen unterschiedlicher Kondensation auch der Gesamtdruck Unterschiede aufweist. Das Volumen mit einem brennbaren Gasgemisch war ebenfalls deutlich unterschiedlich.

Insgesamt zeigt sich eine deutliche Sensitivität des berechneten Unfallablaufs auf die Modellierung des Lecks. Im Sinne einer Best-Estimate-Analyse ist deshalb eine detaillierte Modellierung des Ausströmvorganges aus dem Leck (mit Hilfe von CFD) für kritische Szenarien zu empfehlen.

Insgesamt konnten die Vorhabensziele erfolgreich erreicht werden. Es steht nun eine erprobte OpenFOAM-Version zur Berechnung containment-relevanter Fragestellungen unter Störfallbedingungen und einer Reihe der dabei auftretenden wesentlichen Vorgänge bereit. Dazu wurden neue Modelle entwickelt (Wand- und Volumen Kondensation, PARs), Verbesserungen in vorhandenen Modellen eingebracht (Buoyancy-Turbulenz, Diffusion) und zahlreiche Test- und Validierungsrechnungen durchgeführt. Dabei konnten wichtige Modellparameter und notwendige (numerische) Einstellungen identifiziert werden.

Bei der Simulation von Verbrennungsvorgängen mit CFX konnte ein signifikanter Fortschritt erzielt werden. Es wurde eine neue Flamelet-Tabelle erstellt, mit der auch die Verbrennung von H_2 /Luft/Dampf-Gemischen simuliert werden kann. Mit einer modifizierten Dinkelacker-Korrelation konnten alle untersuchten Versuche ohne Parameteranpassung zufriedenstellend nachgerechnet werden.

Literaturverzeichnis

- /ALE 20/ Alexandridis, G., Bläsius, C., Demazière, C., Destouches, C., Dokhane, A., Durrant, A., Fiser, V., Girardin, G., Herb, J., Ioannou, G., Jacqmin, R., Knospe, A., Kollias, S., Lange, C., et al.: CORTEX Deliverable 4.4, Results of the application and demonstration calculations. 2020.
- /AMB 09/ Ambrosini, W., et al.: SARNET-2 condensation benchmark No. 2, Data for a Numerical Benchmark on Condensation Modelling proposed in the frame of the SARNET-2 NoE. Universität Pisa, 2009.
- /AND 13/ Andreani, M.: OECD/NEA – PSI CFD Benchmark Specifications. Paul Scherrer Institute (PSI), 2013.
- /ANS 11/ ANSYS, Inc.: ANSYS CFX-Solver Theory Guide, Release 14.0. November 2011.
- /AUN 19/ Aung, T. T., Terada, A., Hino, R.: Preliminary combustion analyses using OpenFOAM. 56 S.: Japan, 2019.
- /BEN 18/ Bentaib, A., et al.: ETSON-MITHYGENE benchmark on simulations of upward flame propagation experiment in the ENACCEF2 experimental facility, NUTHOS-12. 2018.
- /BEN 19/ Bentaib, A., Chameix, N.: BENCHMARK EXERCICE ON HYDROGEN FLAME PROPAGATION IN STRATIFIED ATMOSPHERE, ETSON-SAMHYCO-NET Benchmark. IRSN, 2019.
- /BEN 22/ Bentaib, A., et al.: ETSON-SAMHYCO-NET BENCHMARK ON SIMULATIONS OF UPWARD FLAME PROPAGATION EXPERIMENT IN REPRESENTATIVE HYDROGEN-AIR-STEAM MIXTURES OF SEVERE ACCIDENTS CONTAINMENTS ATMOSPHERE, NURETH-19. 2022.
- /DIN 10/ Dinkelacker, F., et al.: Modelling and Simulation of Lean Premixed Turbulent Methane/Hydrogen/Air Flames with an Effective Lewis Number Approach. Hrsg.: Combustion and Flame, Volume 158, 2010.

- /ETT 13/ Ettner, F. A.: Effiziente numerische Simulation des Deflagrations–Detonations–Übergangs. Dissertation, Technische Universität München (TUM): München, 2013.
- /FIR 02/ Firnhaber, M.: Betreuung eines Internationalen Standardproblems (ISP) zum Aerosolverhalten (KAEVER). GRS-A-, Nr. 3051, 60 S., Juli 2002.
- /FRE 16/ Freitag, M., Schmidt, E., Colombet, M., Laufenberg, B. von, Kühnel, A., Gupta, S.: Rekombinator in Gegenströmung, Versuchsserie HR43-HR45. 138 S., Oktober 2016.
- /FRE 17/ Freitag, M., et al.: Hydrogen Deflagration Tests in a Two-Vessel Test Facility Hydrogen Deflagration Tests in a Two-Vessel Test Facility, Test series HD-36 – HD-39, Report No. 1501455 – TR – HD36-39. Becker Technologies GmbH, 2017.
- /FRE 20/ Freitag, M., Schmidt, E.: Untersuchung zu experimentellen Unsicherheiten bei Leichtgasschichtungen und deren Auflösung in Naturkonvektion, Test TH-32. 25 S., Januar 2020.
- /FSF 07/ Free Software Foundation, Inc. (FSF): GNU General Public License, Version 3, 29 June 2007. Erreichbar unter <https://www.gnu.org/licenses/gpl-3.0.en.html>, Stand von 2007.
- /FUN 15/ Funke, F., Langrock, G., Gupta, S., Schmidt, E., Laufenberg, B. von, Kühne, A., Colombet, M., Freitag, M., Weber, G.: Results of the THAI Iodine Test Iod-28 in Multi-Compartment Vessel with Decontamination Paint at High Humidity, Becker Technical Report. AREVA GmbH (AREVA), Becker Technologies GmbH, 1501455–TR-Iod-28, 2015.
- /GIT 21a/ Git Community: git --everything-is-local. Erreichbar unter <https://git-scm.com/>, abgerufen am 15. März 2021.
- /GIT 21b/ GitLab Inc.: GitLab Web page. Erreichbar unter <https://about.gitlab.com/>, abgerufen am 27. Oktober 2021.

- /GRO 17/ Grosseuvres, R., Chaumeix, N., Bentaib, A.: PRESSURE PROFILES MEASUREMENTS IN ENACCEF FACILITY FOR FAST FLAME PROPAGATION, NURETH. 2017.
- /GRS 21/ Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS): Softwareentwicklung (TKP 03-05). Managementhandbuch, Kapitel 2.2.3.5, Rev. 2, 2021.
- /GUP 12/ GUPTA: Auflösung einer Dampf-Luft Schichtung durch Naturkonvektion, Versuchsserie TH24 (CV5). 86 S., August 2012.
- /HER 18/ Herb, J.: A Continuous Integration Platform for the Deterministic Safety Analyses Code System AC2. In: International Conference on Nuclear Engineering (ICONE), American Society of Mechanical Engineers (ASME), Nihon-Kikai-Gakkai, Zhongguo-Hexuehui, ICONE: Proceedings of the 26th International Conference on Nuclear Engineering - 2018. 2018 26th International Conference on Nuclear Engineering, London, England, 22. - 26. Juli 2018, ISBN 978-0-7918-5146-3, DOI 10.1115/ICONE26-81123, The American Society of Mechanical Engineers: New York, N.Y., 2018.
- /HER 19/ Herb, J.: Coordination of OpenFOAM works to containment questions, CFD Verbundtreffen. 2019.
- /IAEA 19/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Deterministic Safety Analysis for Nuclear Power Plants, Specific Safety Guide. IAEA Safety Standards Series, SSG-2 (Rev. 1), ISBN 978-92-0-102119-9, IAEA, 2019.
- /KAN 93/ Kanzleiter, T.: VANAM-Mehrraum-Aerosolabbau-Versuch M3 mit löslichem Aerosolmaterial. 212 S., Juli 1993.
- /KAN 08/ Kanzleiter, T. L. G.: Hydrogen Deflagration Tests HD-1R, HD-4, HD-7, HD-8 and HD-10, Quick Look Report. Becker Technologies GmbH, 2008.
- /KAN 09/ Kanzleiter, T.: Quick Look Report Hydrogen Recombiner Tests HR-1 to HR-5, HR-27 and HR-28. 90 S., Februar 2009.

- /KAT 18/ Katzy, P., Sattelmayer, T.: Entwicklung und Validierung eines effizienten Modellierungskonzeptes für die Wasserstoffverbrennung mit hohem Luftüberschuss, Abschlussbericht 1501485. TU München (TUM), 2018.
- /KAT 20a/ Katzy, P.: 2. Antwort: Druckbegrenzung bei Korrelation für turbulente Flammengeschwindigkeit. An Schramm, B., Email, 18. Juni 2020.
- /KAT 20b/ Katzy, P.: 1. Antwort: Druckbegrenzung bei Korrelation für turbulente Flammengeschwindigkeit. An Schramm, B., 16. März 2020.
- /KEL 12/ Kelm, S., Ritterath, M., Heierli, R., Prasser, H.-M., Allelein, H.-J.: MiniPanda - Layer Breakup, Evaluation and Code Benchmark. 40 S., Dezember 2012.
- /KEL 19/ Kelm, S.: Design of a Common Mesh for the HP2_1_10_2 Benchmark exercise, Mesh Documentation. FZ Jülich: Internal Note, 2019.
- /KEL 20/ Kelm, S., et al.: Status of containmentFOAM for Analysis of H2 mixing and mitigation, CFD Verbund Treffeb. Garching, 2020.
- /KUM 19/ Kumar G., V., et al.: Development and verification of a multi-species gas transport solver, OpenFOAM Workshop 2019. Duisburg, 2019.
- /KUM 20/ Kumar, V. K. G., et al.: Development and Verification of a full multi component solver in containmentFOAM, German CFD Network of Competence. FZ Jülich, et al., March, 2020.
- /OEC 22/ OECD NEA: Topical Opinion Paper on the Use of CFD for Nuclear Safety, CFD Task Group OECD-NEA/CSNI/WGAMA. (to be published), 2022.
- /OPE 16/ The OpenFOAM Foundation Ltd: Coding Style Guide. Stand von 2016, erreichbar unter <https://openfoam.org/dev/coding-style-guide/>, 2016.
- /OPE 17/ The OpenFOAM Foundation Ltd: OpenFOAM 5.0 Release Notes. Erreichbar unter <https://openfoam.org/release/5-0/>, Stand von 2017.
- /OPE 18/ The OpenFOAM Foundation Ltd: OpenFOAM 6 Release Note. Erreichbar unter <https://openfoam.org/release/6/>, Stand von 2018.

- /OPE 21/ The OpenFOAM Foundation Ltd: OpenFoam User Guide, Version 9. Erreichbar unter <https://cfd.direct/openfoam/user-guide/>, abgerufen am 10. August 2021.
- /PAL 21/ Paladino, D., et al.: OECD/NEA HYMERES-2 project: Final Report. Paul Scherrer Institute (PSI), 2021.
- /PAP 21/ Papukchiev, A., Herb, J., Schaffrath, A., Wielenberg, A.: Priorisierung von Entwicklungs- und Validierungsarbeiten an OpenFOAM für den Reaktorkühlkreislauf, Technischer Bericht, Revision 0. TB-CFD-2021-02, Rev. 0, August 2021.
- /PAR 18a/ Paranjape, S., Kapulla, R., et al.: PANDA test H2P1_0, Quick-Look Report, OECD/NEA HYMERES-2 PROJECT. PSI, 2018.
- /PAR 18b/ Paranjape, S., Kapulla R., et al.: PANDA Test H2P1_3, Quick-Look Report OECD/NEA HYMERES-2 PROJECT. PSI, 2018.
- /PAR 19/ Paranjape, S., Kapulla, R., Fehlmann, M., Suter, S., Bissels, W., Andreani, M., Paldino, D.: PANDA Test H2P1_10_2 Specifications for the blind benchmark with initial and boundary conditions, OECD/NEA HYMERES-2 Project. PSI, 2019.
- /PET 00/ Peters, N.: Turbulent Combustion. Hrsg.: Cambridge University Press, 2000.
- /POS 97/ Poss, G., Weber, D.: Versuche zum Verhalten von Kernschmelzaerosolen im LWR-Containment -KAEVER-, Abschlussbericht Teil I. 232 S., Mai 1997.
- /SCH 10/ Schramm, B., Stewering, J., Sonnenkalb, M.: Qualifizierung von CFX für die Simulation der Thermohydraulik im Sicherheitseinschluss, Abschlussbericht RS1181. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), 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-, Nr. 324: Köln, 2014.

- /SCH 17/ Schramm, B., Stewering, J., Sonnenkalb, M.: Einsatz von CFD-Codes für die Simulation von unfalltypischen Phänomenen im Sicherheitseinschluss Validierung und gezielte Modellerweiterung. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS, Bd. 472, GRS-472, 566 S., ISBN 978-3-946607-55-7, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, 2017.
- /SCH 21a/ Schramm, B. A., Stewering, J., Sievers, J., Wielenberg, A., Schaffrath, A.: Priorisierung von Entwicklungs- und Validierungsarbeiten an OpenFOAM für das Containment, Technischer Bericht Revision 0. TB-CFD-2021-01 Rev. 0, August 2021.
- /SCH 21b/ Schaffrath, A.: Welcome Address, 32nd German CFD Network of Competence Meeting, CFD Verbund Treffen. Garching, 2021.
- /SCH 22/ Schramm, B., Stewering, J., Herb, J., Mistry, H., Wielenberg, A., Sievers, J.: Ertüchtigung von CFD-Codes für die Simulation von störfalltypischen Phänomenen im Containment, GRS-A-4061. GRS, 2022.
- /SIA 15/ Sicherheitsanforderungen an Kernkraftwerke vom 22. November 2012 (Si-Anf) in der Fassung von 3. März 2015 - Neufassung (BANz AT 30.03.2015 B2).
- /STU 20/ Studer, E., Abdo, D., Benteboula, S., Bernard-Michel, G., Cariteau, B., Coulon, N., Dabbene, F., Debesse, P., Koudriakov, S., Ledier, C., Magnaud, J.-P., Norvez, O., Widloecher, J.-L., Beccantini, A., Gounand, S., Brinster, J.: Challenges in Containment Thermal Hydraulics. Nuclear Technology, Bd. 206, Nr. 9, S. 1361–1373, DOI 10.1080/00295450.2020.1731406, 2020.
- /THE 20/ The OpenFOAM Foundation Ltd: OpenFOAM User Guide, Version 8. Erreichbar unter <https://cfd.direct/openfoam/user-guide/>, abgerufen am 23. Oktober 2020.
- /WIE 20/ Wielenberg, A.: Diskussion zur OpenFOAM Strategie im deutschen CFD Verbund, CFD Verbund Treffen. Garching, 2020.

- /ZBO 06/ Zboray, R., Paladino, D., Auban, O., Strassberger, H. J., Candreia, P., Fehlmann, M.: OECD/SETH PANDA Test 4bis-1, Quick-Look Report. 17 S., Mai 2006.
- /ZSC 15/ Zschaeck, G., et al.: Simulation von dreidimensionalen Vermischungsvorgängen in Sicherheitsbehältern von Kernreaktoren, Abschlussbericht 150 1415. ANSYS Germany, 2015.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Vergleich der unterschiedlichen Gitter	9
Abb. 2.2	Gittereinfluss: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_9 (Höhe 8,03 m)	10
Abb. 2.3	Gittereinfluss: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_2 (Höhe 6,71 m)	11
Abb. 2.4	Gittereinfluss: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_12 (Höhe 6,00 m)	11
Abb. 2.5	Gittereinfluss: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_19 (Höhe 0,16 m)	12
Abb. 2.6	Zeitschritte: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_9 (Höhe 8,03 m)	13
Abb. 2.7	Zeitschritte: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_2 (Höhe 6,71 m)	13
Abb. 2.8	Zeitschritte: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_12 (Höhe 6,00 m)	14
Abb. 2.9	Zeitschritte: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_19 (Höhe 0,16 m)	14
Abb. 2.10	CFX-Vergleich: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_9 (Höhe 8,03 m)	15
Abb. 2.11	CFX-Vergleich: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_2 (Höhe 6,71 m)	16
Abb. 2.12	CFX-Vergleich: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_12 (Höhe 6,00 m)	16
Abb. 2.13	CFX-Vergleich: Heliumkonzentration am Messpunkt MS_19 (Höhe 0,16 m)	17
Abb. 2.14	Unterschiedliche Gitter für den Mini-Panda-Benchmark.....	18
Abb. 2.15	Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_30 (Höhe: 1,82 m).....	19
Abb. 2.16	Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_22 (Höhe: 1,47 m).....	20
Abb. 2.17	Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_14 (Höhe: 1,22 m).....	20
Abb. 2.18	Temperatur am Messpunkt TC_7 (Höhe: 1,46 m).....	21
Abb. 2.19	Unterschiedliche Diskretisierungsschemata.....	22

Abb. 2.20	Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_30 (Höhe: 1,82 m).....	23
Abb. 2.21	Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_22 (Höhe: 1,47 m).....	24
Abb. 2.22	Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_14 (Höhe: 1,22 m).....	24
Abb. 2.23	Temperatur am Messpunkt TC_7 (Höhe: 1,46 m).....	25
Abb. 2.24	Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_30 (Höhe: 1,82 m).....	26
Abb. 2.25	Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_22 (Höhe: 1,47 m).....	26
Abb. 2.26	Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_14 (Höhe: 1,22 m).....	27
Abb. 2.27	Temperatur am Messpunkt TC_7 (Höhe: 1,46 m).....	27
Abb. 2.28	Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_30 (Höhe: 1,82 m).....	28
Abb. 2.29	Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_22 (Höhe: 1,47 m).....	29
Abb. 2.30	Heliumkonzentration am Messpunkt Kath_14 (Höhe: 1,22 m).....	29
Abb. 2.31	Temperatur am Messpunkt TC_7 (Höhe: 1,46 m).....	30
Abb. 2.32	Testbeispiel für das Diffusionsmodell mit Monitorpunkten.....	35
Abb. 2.33	Verlauf der Dampf-Massenbrüche an den unterschiedlichen Monitorpunkten (vereinfachter OpenFOAM-Ansatz / chtMultiRegionSchmidtFoam05).....	35
Abb. 2.34	Vergleich der Dampfkonzentration bei unterschiedlichen Diffusionsmodellen (bei Monitorpunkt 04).....	36
Abb. 2.35	Vergleich der Temperaturen bei unterschiedlichen Diffusionsmodellen (bei Monitorpunkt 04).....	37
Abb. 2.36	Deklaration der Funktion zur Berechnung der Diffusionskonstante von Wasserdampf in Luft.....	38
Abb. 2.37	Volumen und Gitter für die Testrechnungen.....	40
Abb. 2.38	Vergleich der Dampfkonzentrationen (Gleichgewichts-Endzustand).....	41
Abb. 2.39	Vergleich der Temperaturen (Gleichgewichts-Endzustand).....	42
Abb. 2.40	Vergleich der Drücke (Gleichgewichts-Endzustand).....	42
Abb. 2.41	Gitter für Conan-Versuche.....	44
Abb. 2.42	Vergleich der Strömungsprofile von CFX und OpenFOAM.....	45
Abb. 2.43	Vergleich der Strömungsgeschwindigkeiten an der Wand.....	46

Abb. 2.44	Vergleich der Temperaturen in Strömungskanal und Wand	46
Abb. 2.45	Vergleich der Temperaturprofile an der Wand (senkrecht zum Strömungskanal).....	47
Abb. 2.46	Aufheizen der Solid-Strukturen (Zeitlicher Verlauf an Probepunkt mittig im Solid)	48
Abb. 2.47	THAI-Versuch TH-2: OpenFOAM-Geometrie, Gitter und Berechnungsergebnis.....	54
Abb. 2.48	Druckverlauf beim THAI Experiment TH-2	56
Abb. 2.49	Temperaturverlauf in 8,4 m Höhe	56
Abb. 2.50	Temperaturverlauf in 6,3 m Höhe	57
Abb. 2.51	Temperaturverlauf in 3,5 m Höhe	57
Abb. 2.52	Integrale Wandkondensationsrate	58
Abb. 2.53	Integrale Volumenkondensationsrate.....	58
Abb. 2.54	Integrale Dampfmasse.....	59
Abb. 2.55	Konfiguration des THAI-Versuches TH-24	60
Abb. 2.56	Naturkonvektionsschleifen durch unterschiedliches Heizen / Kühlen beim TH-24-Experiment.....	60
Abb. 2.57	Geometrie für den Conan-Benchmark	62
Abb. 2.58	Berechnungsergebnisse des Conan-Benchmarks	63
Abb. 2.59	Druckverlauf beim TH-24-Experiment.....	64
Abb. 2.60	Dampfkonzentration in 8,7 m Höhe.....	65
Abb. 2.61	Dampfkonzentration in 7,7 m Höhe.....	65
Abb. 2.62	Dampfkonzentration in 5,6 m Höhe.....	66
Abb. 2.63	Dampfkonzentration in 2,8 m Höhe.....	66
Abb. 2.64	Temperaturverlauf in 7,7 m Höhe	67
Abb. 2.65	Temperaturverlauf in 2,1 m Höhe	67
Abb. 2.66	Integrale Wand- und Volumenkondensationsraten.....	68
Abb. 2.67	Schematische Darstellung des Experimentes Panda 4bis /ZBO 06/	69

Abb. 2.68	Verwendete CFD-Gitter (rechts: Behälter 1 mit Einspeiserohr, links: Behälter 2).....	70
Abb. 2.69	Dampf-Molenbruch zum Zeitpunkt $t = 1000$ s (rechts: Behälter 1, links: Behälter 2).....	72
Abb. 2.70	Dampf-Molenbruch am Messpunkt D1B20 (Behälter 1, Höhe 7,478 m).....	72
Abb. 2.71	Dampf-Molenbruch am Messpunkt D1S20 (Behälter 1, Höhe 1,076 m).....	73
Abb. 2.72	Dampf-Molenbruch am Messpunkt D2C20 (Behälter 2, Höhe 6,93 m).....	73
Abb. 2.73	Dampf-Molenbruch am Messpunkt D2R20 (Behälter 2, Höhe 1,726 m).....	74
Abb. 2.74	Vergleich der berechneten integralen Wandkondensationsraten	74
Abb. 2.75	Links: Helium- Molenbruch im Wärmestrahlungsbenchmark (Skala 0 – 25 vol.-%), rechts: Verwendetes CFD-Gitter	78
Abb. 2.76	Vergleich der Temperaturen entlang der Mittelachse ($t = 400$ s).....	80
Abb. 2.77	Horizontales Temperaturprofil in 5,0 m Höhe ($t = 400$ s).....	81
Abb.2.78	Auflösung der Heliumschicht (Höhe, in der Helium-Molenbruch 0,1 ist)	81
Abb. 2.79	Vergleich der einfallenden Strahlung entlang der Mittelachse ($t = 400$ s).....	82
Abb. 2.80	Horizontales Strahlungsprofil in 5,0 m Höhe ($t = 400$ s).....	82
Abb. 2.81	Vergleich der Temperaturen entlang der Mittelachse ($t = 400$ s).....	83
Abb. 2.82	Horizontales Temperaturprofil in 5,0 m Höhe ($t = 400$ s).....	84
Abb. 2.83	Auflösung der Heliumschicht (Höhe, in der die Helium-Molenbruch 0,1 beträgt).....	84
Abb. 2.84	Vergleich der einfallenden Strahlung entlang der Mittelachse ($t = 400$ s).....	85
Abb. 2.85	Horizontales Strahlungsprofil in 5,0 m Höhe ($t = 400$ s).....	85
Abb. 2.86	Auflösung der Heliumschicht (Höhe, in der Helium-Molenbruch 0,1 ist)	86
Abb. 2.87	Vergleich der Vertikalgeschwindigkeiten entlang der Mittelachse ($t = 400$ s).....	87

Abb. 2.88	Vergleich der Helium-Molenbrüche entlang der Mittelachse (t = 400 s)	87
Abb. 2.89	Vergleich der Temperaturen entlang der Mittelachse (t = 400 s).....	88
Abb. 2.90	Horizontales Temperaturprofil in 5,0 m Höhe (t = 400 s).....	88
Abb. 2.91	Vergleich der einfallenden Strahlung entlang der Mittelachse (t = 400 s)	89
Abb. 2.92	Horizontales Strahlungsprofil in 5,0 m Höhe (t = 400 s)	89
Abb. 2.93	CFX: Einfluss der Absorptionskoeffizienten auf die Auflösung der Heliumschicht	90
Abb. 2.94	OpenFOAM: Einfluss der Absorptionskoeffizienten auf die Auflösung der Heliumschicht	91
Abb. 2.95	CFX: Integraler konvektiver und radiativer Wärmeaustausch mit der Wand	91
Abb. 2.96	OpenFOAM: Integraler konvektiver und radiativer Wärmeaustausch mit der Wand	92
Abb. 2.97	Einfluss des Absorptionskoeffizienten auf die Auflösung der Heliumschicht bei unterschiedlichen Strahlungsmodellen	92
Abb. 2.98	Links: OpenFOAM-Gitter (Ausschnitt), rechts: Initialer Helium- Massenbruch (t = 0,1 s).....	94
Abb. 2.99	Absorptionskoeffizienten für Dampf in OpenFOAM in der Datei radiationProperties (Temperaturangaben in Kelvin).....	95
Abb. 2.100	Temperaturabhängigkeit der Absorptionskoeffizienten von Dampf bei einem Druck von 1 bar.....	96
Abb. 2.101	Temperatur hinter der Anströmplatte zum Zeitpunkt 1115,9 s und 1116,6 s bei der CFX-Simulation DTA10E03 des Experiments H2P2- 5	98
Abb. 2.102	Berechnung von Effizienz und Rekombinationsrate im recombiner- Modul.....	102
Abb. 2.103	Definition des PAR-Auslasses als codedFixedValue-Randbedingung (hier nur Temperaturen).....	103
Abb. 2.104	Geometrie für das PAR-Testbeispiel.....	103
Abb. 2.105	H ₂ -Konzentrationen am PAR-Einlass und PAR-Auslass	105
Abb. 2.106	O ₂ -Konzentrationen am PAR-Einlass und PAR-Auslass	105

Abb. 2.107	H ₂ O-Konzentrationen am PAR-Einlass und PAR-Auslass.....	106
Abb. 2.108	Vergleich der PAR-Effizienz.....	106
Abb. 2.109	Vergleich der Massenströme	107
Abb. 2.110	Temperaturen am PAR-Einlass und PAR-Auslass.....	108
Abb. 2.111	Vergleich des Druckverlaufes	108
Abb. 2.112	Verlauf der PAR-Wandtemperaturen	109
Abb. 2.113	Wandtemperaturen mit und ohne Berücksichtigung der Wärmeabgabe an das Umgebungs-Gas (WHF: WallHeatFlux).....	110
Abb. 2.114	Einfluss der PAR-Wände auf die Gastemperaturen am PAR-Auslass....	111
Abb. 2.115	Einfluss der PAR-Wände auf den Druck im Testvolumen	111
Abb. 2.116	Vergleich von Rekombinationsraten	112
Abb. 2.117	H ₂ -Konzentrationen am PAR-Einlass und PAR-Auslass (bei O ₂ - Armut).....	113
Abb. 2.118	O ₂ -Konzentrationen am PAR-Einlass und PAR-Auslass (bei O ₂ - Armut).....	113
Abb. 2.119	H ₂ O-Konzentrationen am PAR-Einlass und PAR-Auslass (bei O ₂ - Armut).....	114
Abb. 2.120	Vergleich der PAR-Effizienz (bei O ₂ -Armut)	115
Abb. 2.121	Vergleich der Massenströme (bei O ₂ -Armut).....	115
Abb. 2.122	Vergleich der H ₂ -Rekombinationsraten (bei O ₂ -Armut).....	116
Abb. 2.123	Temperaturen am PAR-Einlass und PAR-Auslass (bei O ₂ -Armut)	116
Abb. 2.124	Vergleich des Druckverlaufes (bei O ₂ -Armut).....	117
Abb. 2.125	Experimenteller Aufbau des THAI-Versuches HR-5 /KAN 09/.....	118
Abb. 2.126	Aufbau des PARs (Typ: Areva / Siemens: 0,5*FR-380 size /KAN 09/)...	119
Abb. 2.127	H ₂ -Einspeiserate, Rekombinationsrate und Druck im Experiment /KAN 09/	119
Abb. 2.128	OpenFOAM Geometrie, Gitter und Berechnungsergebnis (H ₂ - Konzentration)	120
Abb. 2.129	H ₂ -Konzentration am PAR-Einlass.....	122

Abb. 2.130	H ₂ -Konzentration am PAR-Auslass.....	122
Abb. 2.131	H ₂ -Rekombinationsrate im Zeitverlauf.....	123
Abb. 2.132	H ₂ -Rekombinationsrate über H ₂ -Konzentration am PAR-Einlass	123
Abb. 2.133	PAR-Effizienz im Zeitverlauf	124
Abb. 2.134	PAR-Effizienz über H ₂ -Konzentration am PAR-Einlass	124
Abb. 2.135	Temperaturen am PAR Einlass.....	125
Abb. 2.136	Temperaturen am PAR-Auslass im Zeitverlauf	125
Abb. 2.137	Temperaturen am PAR-Auslass über H ₂ -Konzentration am PAR-Einlass.....	126
Abb. 2.138	Massenstrom durch den PAR (keine experimentellen Werte vorhanden)	127
Abb. 2.139	Druckverlauf im THAI-Behälter	127
Abb. 2.140	Temperatur in 8,4 m Höhe	128
Abb. 2.141	Temperatur in 6,3 m Höhe	128
Abb. 2.142	H ₂ -Konzentration in 8,4 m Höhe.....	129
Abb. 2.143	H ₂ -Konzentration in 1,7 m Höhe.....	129
Abb. 2.144	Vergleich der Wandkondensationsraten	130
Abb. 2.145	Experimenteller Aufbau des THAI-Versuches HR-43 /FRE 16/.....	131
Abb. 2.146	H ₂ - und Dampfeinspeiseraten beim Versuch HR-43 /FRE 16/	132
Abb. 2.147	OpenFOAM-Geometrie für Versuch HR-43.....	133
Abb. 2.148	Ausschnitt des OpenFOAM-Gitters für Versuch HR-43.....	133
Abb. 2.149	H ₂ -Verteilung beim Versuch HR-43 zum Zeitpunkt t = 1500 s (links: CFX, rechts: OpenFOAM).....	136
Abb. 2.150	H ₂ -Konzentration an einem Monitorpunkt im THAI-Behälter (TTV, Höhe 8,4 m).....	136
Abb. 2.151	H ₂ -Konzentration am PAR-Einlass.....	137
Abb. 2.152	H ₂ -Konzentration am PAR-Auslass.....	137
Abb. 2.153	H ₂ -Konzentration am Auslass über H ₂ -Konzentration am Einlass	138
Abb. 2.154	PAR-Effizienz im Zeitverlauf	138

Abb. 2.155	PAR-Effizienz über H ₂ -Konzentration am PAR-Einlass	139
Abb. 2.156	H ₂ -Rekombinationsrate im Zeitverlauf.....	139
Abb. 2.157	H ₂ -Rekombinationsrate über H ₂ -Konzentration am PAR-Einlass	140
Abb. 2.158	Temperaturen am PAR-Auslass im Zeitverlauf	140
Abb. 2.159	Temperaturen am PAR-Auslass über H ₂ -Konzentration am PAR-Einlass.....	141
Abb. 3.1	Automatisch generiertes Postprocessing-Bild für die Simulation eines Conan-Versuchs (integrale Kondensationsrate auf der Wand über die Zeit)	150
Abb. 3.2	Beispiel für automatisierten Vergleich eines OpenFOAM-Ergebnisses mit vorgegebenen Grenzkurven (Konzentration von Wasserdampf über die Zeit an einem vorgegebenen Ort).....	151
Abb. 4.1	Geometrie beim H2P1_TE-Experiment bei Annahme eines geraden (links) und eines gekrümmten Einlassrohres (rechts).....	173
Abb. 4.2	Geschwindigkeitsprofil bei geradem Rohr zu unterschiedlichen Zeitpunkten.....	173
Abb. 4.3	Ausschnitt aus CFD-Gitter bei geradem Einlassrohr (links) und gekrümmten Einlassrohr rechts	175
Abb. 4.4	Einfluss des CFD-Gitters für die Geometrie „gerades Rohr“, SST-Turbulenzmodell	176
Abb. 4.5	Einfluss des CFD-Gitters für die Geometrie: Rohr einschließlich der Krümmung	176
Abb. 4.6	Einfluss des Turbulenzmodells für die Geometrie: Rohr einschließlich der Krümmung	177
Abb. 4.7	Einfluss des Konvergenzkriteriums/Zeitschritts auf das Strömungsprofil am Rohrauslass bei gekrümmtem Rohr	178
Abb. 4.8	Einfluss des Konvergenzkriteriums/Zeitschritts auf das Strömungsprofil am Rohrauslass	179
Abb. 4.9	Versuchsaufbau und nominale Anfangs- und Randbedingungen /PAR 19/	182
Abb. 4.10	Heliumkonzentration (links) und Geschwindigkeit (rechts) in der CFX Simulation nach t = 33 s	182

Abb. 4.11	Verwendetes CFD-Gitter. Links: Längsschnitt, rechts: Bereich des Gitterrosts (rot)	183
Abb. 4.12	Geometrie und verwendetes CFD-Gitter.....	184
Abb. 4.13	Position der im Bericht verglichenen Temperatur- und Konzentrationsmessstellen	184
Abb. 4.14	Temperatur in °C (links) und Geschwindigkeit nach 200 s in der CFX- (oben) und in der offenen OpenFOAM-Simulation (unten)	186
Abb. 4.15	Temperatur in °C (links) und Geschwindigkeit nach Schichtungsauflösung (1600 s bzw. 1300 s) in der CFX- (oben) und in der offenen OpenFOAM-Simulation (unten).....	187
Abb. 4.16	Heliumkonzentration an den Messpunkten A20, B20.....	189
Abb. 4.17	Heliumkonzentration an den Messpunkten C20 und D20.....	190
Abb. 4.18	Heliumkonzentration am Messpunkt H20.....	191
Abb. 4.19	Temperatur an den Messpunkten A20, B20.....	193
Abb. 4.20	Temperatur an den Messpunkten B22 und C20.....	194
Abb. 4.21	Temperatur an den Messpunkten C22, C26	195
Abb. 4.22	Temperatur an den Messpunkten GH20, GH19.....	196
Abb. 4.23	Temperatur an den Messpunkten GH21 und GH26.....	197
Abb. 4.24	Temperatur an der Messstelle H20.....	198
Abb. 4.25	Vertikalgeschwindigkeit im Bereich des Gitterrosts bei der offenen OpenFOAM Simulation nach 1350 s.....	198
Abb. 4.26	Position der Temperaturmessstellen im Gitterrost /PAR 19/	200
Abb. 4.27	Vergleich der Temperaturen des Gitterrosts an der mittleren Messstelle G3.....	200
Abb. 4.28	Vergleich der Temperaturen des Gitterrosts an den Messstellen GR1 und GR5.....	201
Abb. 4.29	Temperatur des Gitterrosts am Rand (GR1 und GR5) und Gastemperaturen in der Nähe (GHx, Hx) im Experiment	202
Abb. 4.30	Geometrie des THAI-Experimentes TH-32.....	204
Abb. 4.31	Position ausgewählter Messstellen	205
Abb. 4.32	In den Simulationen verwendetes CFD-Gitter	206

Abb. 4.33	y^+ (CFX-Sim.) an den Außenwänden während Heliumeinspeisung ($t = 50$ s, links) und während der Auslösung der Heliumschicht ($t = 1710$ s, rechts).....	207
Abb. 4.34	Temperaturverteilung am Ende der Aufwärmphase	211
Abb. 4.35	Vergleich des Heliumprofils am Ende der Einspeisung bei $t = 237$ s.....	212
Abb. 4.36	Vergleich der Heliumkonzentrationen in 9,0 m Höhe (Messpunkt DCH90F06)	213
Abb. 4.37	Vergleich der Heliumkonzentrationen in 7,9 m Höhe (Messpunkt DCH79A11)	214
Abb. 4.38	Vergleich der Heliumkonzentrationen in 7,1 m Höhe (Messpunkt DCH71A11)	214
Abb. 4.39	Vergleich der Temperaturen in 9,0 m Höhe (Messpunkt DTF90F06)	215
Abb. 4.40	Vergleich der Temperaturen in 7,5 m Höhe (Messpunkt DTF75A11).....	216
Abb. 4.41	Vergleich der Temperaturen in 4,2 m Höhe (Messpunkt CTF42M00)	216
Abb. 4.42	Vergleich der Temperaturen in 2,8 m Höhe (Messpunkt CTF28M00)	217
Abb. 4.43	Druck und Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei Simulation des Versuchs HD-7 ohne (rot) und mit (blau) einem unteren Limit für T_u	225
Abb. 4.44	Radikalkonzentration bei trockener Luft und einer Temperatur von 293 K bzw. 593 K des unverbrannten Gases	227
Abb. 4.45	Radikalkonzentration über dem Äquivalenzverhältnis bei $T_u = 293$ K bei unterschiedlicher initialer Dampfkonzentration	228
Abb. 4.46	Temperatur des verbrannten Gases bei Verwendung der Flamelet- Bibliothek und bei Berechnung mit dem vereinfachten Mechanismus	228
Abb. 4.47	Abweichung zwischen simplen Reaktionsmechanismus und Flamelet-Bibliothek bei trockener Luft einer Temperatur des unverbrannten Gases von 293 K bzw. 593 K.....	229
Abb. 4.48	Abweichung zwischen simplen Reaktionsmechanismus und Flamelet-Bibliothek bei trockener Luft, $T_u = 593$ K ohne initialen Dampf (blau) und bei einer initialen Dampfkonzentration von 25 vol-%	230
Abb. 4.49	T_u (links) und Reaktionsfortschrittsvariable (rechts) nach 1,2 s bei Simulation von HD-10 mit der CFX Flamelet-Library (oben) und der neu erstellten Flamelet-Library (unten)	232

Abb. 4.50	T _u (links) und Reaktionsfortschrittsvariable (rechts) nach 2 s bei Simulation von HD-10 mit der CFX-Flamelet-Library (oben) und der neu erstellten Flamelet-Library (unten)	233
Abb. 4.51	Druck bei Simulation von HD-7 mit der CFX Flamelet-Library (grün) und der neu erstellten Flamelet-Library (gelb). Oben Simulation mit der Peters-Korrelation unten mit der modifizierten Peters-Korrelation....	234
Abb. 4.52	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse bei Simulation von HD-7 mit der CFX Flamelet-Library (grün) und der neu erstellten Flamelet-Library (gelb). Oben Simulation mit der Peters-Korrelation unten mit der modifizierten Peters-Korrelation.....	235
Abb. 4.53	Druck (oben) und Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittel-achse bei Simulation von HD-10 mit der CFX-Flamelet-Library (grün) und der neu erstellten Flamelet-Library (gelb)	236
Abb. 4.54	Laminare Brenngeschwindigkeit nach Ettner (blau) und Katzy (rot). Approximation über dem H ₂ -Molenbruch bei Standardbedingungen	244
Abb. 4.55	Druckexponent β nach Ettner (blau) und Katzy (rot). Approximation über dem H ₂ -Molenbruch.....	244
Abb. 4.56	Druckexponent β nach Ettner (blau) und Katzy (rot). Approximation über dem H ₂ -Molenbruch.....	245
Abb. 4.57	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/.....	248
Abb. 4.58	Experimenteller Druckverlauf an unterschiedlichen Messstellen	248
Abb. 4.59	Experimentelle Flammenankunftszeiten	249
Abb. 4.60	Maximaler Druck und maximale Temperatur verglichen mit dem AICC-Druck und der AICC-Temperatur /KAN 08/.....	249
Abb. 4.61	Untersuchung der Gitterabhängigkeit bei HD-7: Druckverlauf.....	250
Abb. 4.62	Untersuchung der Gitterabhängigkeit bei HD-7: Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse	251
Abb. 4.63	Druck in Abhängigkeit von der initialen turbulenten kinetischen Energie. Die Simulationen mit A = B = 2 und k = 1,0e-6 m ² /s ² liefern einen nahezu gleichen Druckverlauf	254
Abb. 4.64	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse in Abhängigkeit von der initialen Turbulenz	254

Abb. 4.65	Reaktionsfortschritt bei Simulation Nr.1 ($k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 10$) links und Nr. 5 ($k = 1,0e-6 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 0,1$) rechts	255
Abb. 4.66	Turbulente Brenngeschwindigkeit (oben) und chemischer Quellterm für die Reaktionsfortschrittsvariable (unten) bei Simulation Nr. 1 ($k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 10$) links und Nr. 5 ($k = 1,0e-6 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 0,1$) rechts.....	256
Abb. 4.67	Turbulente kinetische Energie bei Simulation Nr.1 ($k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 10$) links und Nr. 5 ($k = 1,0e-6 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 0,1$) rechts	257
Abb. 4.68	Turbulente Dissipation bei Simulation Nr.1 ($k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 10$) links und Nr. 5 ($k = 1,0e-6 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\nu_r = 0,1$) rechts	257
Abb. 4.69	Druck bei Verwendung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammgeschwindigkeit bei einer Anfangsturbulenz von $k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $\nu_r = 10$	260
Abb. 4.70	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse bei Verwendung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammgeschwindigkeit bei einer Anfangsturbulenz von $k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $\nu_r = 10$	260
Abb. 4.71	Faktor F_{zell} bei Simulation von HD-7 mit der TUM-Korrelation	262
Abb. 4.72	Druckverlauf bei Simulation mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammgeschwindigkeit	263
Abb. 4.73	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei Simulation bei unterschiedlicher Korrelation für die turbulente Flammgeschwindigkeit.....	263
Abb. 4.74	Reaktionsfortschrittsvariable bei Simulation mit der TUM-Korrelation $B = 1$ (links), TUM-Korrelation mit $B = 0,5$ (Mitte), modifizierte Dinkelacker-Korrelation mit $A = 1$, $B = 3$ (rechts)	264
Abb. 4.75	Reaktionsfortschrittsvariable bei Simulation mit der TUM-Korrelation $B = 1$ (links), TUM-Korrelation mit $B = 0,5$ (Mitte), modifizierte Dinkelacker-Korrelation mit $A = 1$, $B = 3$ (rechts)	265
Abb. 4.76	Experimenteller Druckverlauf an unterschiedlichen Messstellen /KAN 08/	267
Abb. 4.77	Aus den Flammenankunftszeiten berechneter Verlauf der Flamme bei HD-10	267
Abb. 4.78	Untersuchung der Gitterabhängigkeit bei HD-10: Druckverlauf.....	269

Abb. 4.79	Untersuchung der Gitterabhängigkeit bei HD-10: Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse aufgetragen über dem Abstand von der Zündposition.....	269
Abb. 4.80	Reaktionsfortschrittsvariable bei $t = 0,8$ s (oben) und $t = 1,6$ s (unten); links: grobes Gitter; rechts: feines Gitter	270
Abb. 4.81	Reaktionsfortschrittsvariable bei $t = 2,6$ s (oben) und $t = 2,8$ s (unten); links: grobes Gitter; rechts: feines Gitter	271
Abb. 4.82	Druckverlauf bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz.....	273
Abb. 4.83	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz aufgetragen über dem Abstand vom Zündort (d)	274
Abb. 4.84	Reaktionsfortschritt bei Simulation Nr. 2 ($k = 1,0e-4$ m^2/s^2 , $\nu_r = 10$) links und Nr. 6 ($k = 1,0e-6$ m^2/s^2 , $\nu_r = 0,1$) rechts	274
Abb. 4.85	Turbulente Brenngeschwindigkeit bei Simulation Nr. 2 ($k = 1,0e-4$ m^2/s^2 , $\nu_r = 10$) links und Nr. 6 ($k = 1,0e-6$ m^2/s^2 , $\nu_r = 0,1$) rechts.....	275
Abb. 4.86	Chemischer Quellterm für die Reaktionsfortschrittsvariable bei Simulation Nr. 2 ($k = 1,0e-4$ m^2/s^2 , $\nu_r = 10$) links und Nr. 6 ($k = 1,0e-6$ m^2/s^2 , $\nu_r = 0,1$) rechts	275
Abb. 4.87	Turbulente kinetische Energie bei Simulation Nr. 2 ($k = 1,0e-4$ m^2/s^2 , $\nu_r = 10$) links und Nr. 6 ($k = 1,0e-6$ m^2/s^2 , $\nu_r = 0,1$) rechts	276
Abb. 4.88	Turbulente Dissipation bei Simulation Nr. 2 ($k = 1,0e-4$ m^2/s^2 , $\nu_r = 10$) links und Nr. 6 ($k = 1,0e-6$ m^2/s^2 , $\nu_r = 0,1$) rechts	276
Abb. 4.89	Druck bei Verwendung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit	279
Abb. 4.90	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse bei Verwendung unterschiedlicher Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit. Die Geschwindigkeit ist aufgetragen über dem Abstand vom Zündort.....	280
Abb. 4.91	Reaktionsfortschritt bei Simulation mit der TUM-Korrelation $B = 1$ links und $B = 0,5$ (Mitte), modifizierte Dinkelacker-Korrelation mit $A = 1$ und $B = 3$ rechts	281
Abb. 4.92	Reaktionsfortschritt bei Simulation mit der TUM-Korrelation $B = 1$ links und $B = 0,5$ (Mitte), modifizierte Dinkelacker-Korrelation mit $A = 1$ und $B = 3$ rechts	282

Abb. 4.93	Druck bei Verwendung der TUM-Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit.....	283
Abb. 4.94	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse bei Verwendung TUM-Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit.....	283
Abb. 4.95	Druckverlauf an unterschiedlichen Messstellen	286
Abb. 4.96	Aus den Flammenankunftszeiten berechneter Verlauf der Flamme bei HD-39 /FRE 17/. Die blaue Linie kennzeichnet den bei der Auswertung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit betrachteten Weg L1	287
Abb. 4.97	Initiale H ₂ -Konzentrationsstudie zur Gitterabhängigkeit.....	288
Abb. 4.98	Druckverlauf bei unterschiedlich feiner Diskretisierung	289
Abb. 4.99	Reaktionsfortschrittsvariable nach 3,4 s bei der Simulation mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation mit A = B = 2	290
Abb. 4.100	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Strecke L1	290
Abb. 4.101	Druck an unterschiedlichen Messstellen bei der Simulation mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation (A = 1 B = 3).....	294
Abb. 4.102	Druckverlauf bei Simulation mit unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit	294
Abb. 4.103	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Linie L1	295
Abb. 4.104	Druckverlauf bei unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Flammengeschwindigkeit.....	296
Abb. 4.105	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang Linie L1.....	297
Abb. 4.106	Druckverlauf bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz.....	298
Abb. 4.107	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse des VTT (Linie L1) bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz	298
Abb. 4.108	Flammenfortschritt bei der modifizierten Dinkelacker-Korrelation (A = 2 und B = 3) bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz. Links: $k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ $\nu_r = 10$, rechts $k = 1,0e-8 \text{ m}^2/\text{s}^2$ $\nu_r = 0,1$	300
Abb. 4.109	Druckverlauf (VTT-Behälter unten) in Abhängigkeit von der Modellierung der Berstmembran.....	302
Abb. 4.110	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Linie L1 mit und ohne Modellierung der Berstmembran	302

Abb. 4.111	Links: ENACCEF2-Versuchsanlage Mitte: schematischer Aufbau, rechts: in den Verbrennungskanal eingebrachte Hindernisse /BEN 19/	305
Abb. 4.112	ENACCEF2-Wiederholungsexperimente für die Verbrennung von 13 vol-% H ₂ in Luft mit T _{ini} = 20 °C, /STU 20/, /BEN 18/	306
Abb. 4.113	Druck an unterschiedlichen Messstellen beim Experiment RUN 63	306
Abb. 4.114	Druck an unterschiedlichen Messstellen bei der Simulation mit der modifizierten Dinkelacker-Korrelation (A = 2 B = 3).....	307
Abb. 4.115	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei Verwendung unterschiedlicher CFD-Gitter	308
Abb. 4.116	Druck in 5,53 m Höhe bei unterschiedlichen CFD-Gittern	309
Abb. 4.117	Zeitlicher Verlauf der Reaktionsfortschrittsvariablen an Monitorpunkten auf unterschiedlicher Höhe (PM01 = 0,28 m, PM08 = 2,13 m, PM17 = 4,68 m, PM21 = 5,68 m, PM27 = 7,45 m)	310
Abb. 4.118	Reaktionsfortschrittsvariable in der Simulation des Versuchs mit 13 vol-% H ₂ in Luft mit T _{ini} = 20 °C	311
Abb. 4.119	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz bei Simulation mir der modifizierten Dinkelacker- Korrelation A = 2, B = 3.....	312
Abb. 4.120	Druck bei unterschiedlicher Anfangsturbulent bei Simulation mir der modifizierten Dinkelacker-Korrelation A = 2, B = 3.....	313
Abb. 4.121	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei 13 vol-% H ₂ in Luft, T _{ini} = 20 °C	317
Abb. 4.122	Druck bei 13 vol-% H ₂ in Luft, T _{ini} = 20 °C an der Messstelle in 1,28 m Höhe	317
Abb. 4.123	Druck aufgetragen über t* bei 13 vol-% H ₂ in Luft, T _{ini} = 20 °C an der Messstelle in 1,28 m Höhe.....	318
Abb. 4.124	Druck bei 13 vol-% H ₂ in Luft, T _{ini} = 20 °C an der Messstelle in 5,53 m Höhe	318
Abb. 4.125	Druck bei 13 vol-% H ₂ in Luft, T _{ini} = 20 °C an der Messstelle in 6,38 m Höhe	319
Abb. 4.126	Druck bei 13 vol-% H ₂ in Luft, T _{ini} = 20 °C an der Messstelle in 7,65 m Höhe	319
Abb. 4.127	Flammenankunftszeiten bei 13 vol-% H ₂ in Luft, T _{ini} = 20 °C	320

Abb. 4.128	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei 13 vol-% H ₂ in Luft, T _{ini} = 20 °C	322
Abb. 4.129	Druck bei 13 vol-% H ₂ in Luft, T _{ini} = 20 °C an der Messstelle in 1,277 m Höhe	322
Abb. 4.130	Druck bei 13 vol-% H ₂ in Luft, T _{ini} = 20 °C an der Messstelle in 5,527 m Höhe	323
Abb. 4.131	Druck bei 13 vol-% H ₂ in Luft, T _{ini} = 20 °C an der Messstelle in 6,377 m Höhe	323
Abb. 4.132	Druck bei 13 vol-% H ₂ in Luft, T _{ini} = 20 °C an der Messstelle in 7,65 m Höhe	324
Abb. 4.133	Faktor F _{zell} in der Korrelation der TUM	324
Abb. 4.134	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei 11 vol-% H ₂ in Luft, T _{ini} = 20 °C	326
Abb. 4.135	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei 11 vol-% H ₂ in Luft, T _{ini} = 20 °C	327
Abb. 4.136	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei 15 vol-% H ₂ in Luft, T _{ini} = 20 °C	329
Abb. 4.137	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei 13 vol-% H ₂ in Luft, T _{ini} = 90 °C	331
Abb. 4.138	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei 13 vol-% H ₂ in 30 vol-% Dampf und Luft 57 vol-%, T _{ini} = 90 °C	332
Abb. 4.139	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei 13 vol-% H ₂ in Dampf 30 vol-% und Luft 57 vol-%, T _{ini} = 90 °C und P _{ini} =2 bar	333
Abb. 4.140	KAEVER-Versuchsbehälter (CFX-Geometrie)	337
Abb. 4.141	Einfluss der relativen Feuchte auf den Abbau der luftgetragenen CsI-Konzentration	338
Abb. 4.142	Einfluss der relativen Feuchte auf den Abbau der luftgetragenen CsOH-Konzentration.....	338
Abb. 4.143	Einfluss der relativen Feuchte auf den Abbau der luftgetragenen Ag-Konzentration	339
Abb. 4.144	Einfluss der relativen Feuchte auf den Abbau der luftgetragenen SnO ₂ -Konzentration.....	339
Abb. 4.145	Abhängigkeit der Abbaueiten von der relativen Luftfeuchte.....	340

Abb. 4.146	Einfluss der relativen Luftfeuchtigkeit auf die aerodynamischen Durchmesser der CsI-Aerosole (Impaktormessung)	341
Abb. 4.147	Einfluss der relativen Luftfeuchtigkeit auf die aerodynamischen Durchmesser der CsOH-Aerosole (Impaktormessung)	342
Abb. 4.148	Einfluss der relativen Luftfeuchtigkeit auf die aerodynamischen Durchmesser der Ag-Aerosole (Impaktormessung)	343
Abb. 4.149	Einfluss der relativen Luftfeuchtigkeit auf die aerodynamischen Durchmesser der SnO ₂ -Aerosole (Impaktormessung)	343
Abb. 4.150	KAEVER-Abschlussbericht: Unklare Partikeldichte	344
Abb. 4.151	Einfluss turbulenter Luftbewegung auf die Partikelkonzentration (CsI.Mass Fraction)	346
Abb. 4.152	Einfluss turbulenter Luftbewegung auf den Abbau des CsI	347
Abb. 4.153	Abhängigkeit der Abbaupzeit des CsI von der induzierten Turbulenz im KAEVER-Behälter	348
Abb. 4.154	Abhängigkeit der Abbaupzeit vom Partikeldurchmesser	349
Abb. 4.155	Durchmesservergleich (Impaktor, APS, Gleichung (4.1))	350
Abb. 4.156	Abschätzung der generellen Veränderung der Abbaupzeiten durch erhöhte Luftfeuchtigkeit bei löslichen Aerosolen	352
Abb. 4.157	Abschätzung der generellen Veränderung der Abbaupzeiten durch erhöhte Luftfeuchtigkeit bei nicht-löslichen Aerosolen	352
Abb. 4.158	CsI: Vergleich von Partikeldurchmessern aus Gleichung (4.2), Impaktor und APS	354
Abb. 4.159	CsOH: Vergleich von Partikeldurchmessern aus Gleichung (4.2) und Impaktor	354
Abb. 4.160	Ag: Vergleich von Partikeldurchmessern aus Gleichung (4.2), Impaktor und APS	355
Abb. 4.161	SnO ₂ : Vergleich von Partikeldurchmessern aus Gleichung (4.2), Impaktor und APS	355
Abb. 4.162	Abbau der luftgetragenen CsI-Konzentration: Vergleich CFX / Messdaten	356
Abb. 4.163	Abbau der luftgetragenen CsOH-Konzentration: Vergleich CFX / Messdaten	357

Abb. 4.164	Abbau der luftgetragenen Ag-Konzentration: Vergleich CFX / Messdaten	357
Abb. 4.165	Abbau der luftgetragenen SnO ₂ -Konzentration: Vergleich CFX / Messdaten	358
Abb. 4.166	VANAM-M3-Versuchsaufbau (CFX-Datensatz)	361
Abb. 4.167	CFX-Gitter für den VANAM-M3-Versuch.....	361
Abb. 4.168	Druckverlauf in den Phasen 2 und 3	363
Abb. 4.169	Bezeichnung der Räume im Battelle-Modell-Containment	364
Abb. 4.170	Temperaturverlauf im Einspeiseraum R5.....	365
Abb. 4.171	Temperaturverlauf im Dom (R9)	365
Abb. 4.172	Temperaturverlauf im weiter unten liegenden Raum R8	366
Abb. 4.173	NaOH-Konzentration im Einspeiseraum (R5).....	367
Abb. 4.174	NaOH-Konzentration im Dom (R9, 7,6 m Höhe)	368
Abb. 4.175	NaOH-Konzentration im Dom (R9, 6,0 m Höhe)	368
Abb. 4.176	NaOH-Konzentration in Raum R8.....	369
Abb. 4.177	NaOH-Konzentration in Raum R3.....	369
Abb. 5.1	Positionen von Berstscheiben und Türen im CFD-Modell des DWR- Containments	373
Abb. 5.2	Nummerierung der Berstscheiben in Dampferzeugerturm 1 (oben) und 2 (unten)	373
Abb. 5.3	Einspeiserohr im Containment.....	376
Abb. 5.4	Versetzung des Lecks um 0,5 m in Richtung -X.....	377
Abb. 5.5	Druck relativ zu Referenzdruck (1 bar) bei t = 0,44 s, links: ursprünglicher Fall, rechts: versetzter Fall.....	378
Abb. 5.6	Kontroll-Volumen für die Dampfeinspeisung	379
Abb. 5.7	Viertel-Sumpf für die volumetrische Dampfeinspeisung	381
Abb. 5.8	Druckverteilung (relativ zu Referenzdruck 1 bar) bei Einspeisung in den Viertel-Sumpf (Einspeiserate: 80 kg/s).....	382
Abb. 5.9	Dampfverteilung im Containment, t=100 s (links: Fall 1 und rechts: Fall 2)	384

Abb. 5.10	Dampfverteilung im Containment, t=100 s (links Fall 3: und rechts: Fall 4)	384
Abb. 5.11	Dampfeinspeisung beim Beispiel-Szenario	386
Abb. 5.12	H ₂ -Einspeisung beim Beispiel-Szenario	386
Abb. 5.13	Geöffnete Berstscheiben beim Langzeitszenario (links: gerichtete Quelle, rechts: volumetrische Quelle)	388
Abb. 5.14	Vergleich der integralen Wandkondensationsraten beim Langzeitszenario.....	389
Abb. 5.15	Vergleich der integralen Dampfmenge im Containment	389
Abb. 5.16	Vergleich der Dampf-Konzentrationen bei t = 4000 s (links: gerichtete Einspeisung, rechts: volumetrische Einspeisung)	390
Abb. 5.17	Brennbare Bereiche (Dampf-Konzentration < 65 vol.-%, links: gerichtete Einspeisung, rechts: volumetrische Einspeisung).....	390
Abb. 5.18	Vergleich des Druckverlaufs im Containment.....	391
Abb. 5.19	H ₂ -Konzentration im oberen Dom	392
Abb. 5.20	H ₂ -Konzentration im Dampferzeugerturm	393
Abb. 5.21	H ₂ -Konzentration im Sumpf.....	393
Abb. 5.22	Vergleich der H ₂ -Konzentrationen bei t = 4000 s (links: gerichtete Einspeisung, rechts: volumetrische Einspeisung)	394
Abb. 5.23	Brennbare Bereiche (H ₂ -Konzentration > 4 vol.-%). (links: gerichtete Einspeisung, rechts: volumetrische Einspeisung)	394
Abb. 5.24	Brennbare Bereiche (H ₂ -Konzentration > 4 vol.-% und Dampfkonzentration < 65 vol.-%, links: gerichtete Einspeisung, rechts: volumetrische Einspeisung).....	395

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Verwendung und Vergleich unterschiedlicher OpenFOAM-Versionen	6
Tab. 2.2	Infobox für den OECD-Panda-Benchmark	9
Tab. 2.3	Infobox für den Mini-Panda-Benchmark	19
Tab. 2.4	Alte und neue Definition der Diffusionsterme in OpenFOAM	34
Tab. 2.5	Startbedingungen für die Parameterstudie	40
Tab. 2.6	Berechnungsparameter für den Conan/SARNET-Versuch	44
Tab. 2.7	Definition der thermodynamischen Größen an der Wand und angrenzenden Zellen	51
Tab. 2.8	Berechnungsparameter für den TH2-Versuch	54
Tab. 2.9	Berechnungsparameter für den TH-24-Versuch	61
Tab. 2.10	Berechnungsparameter für den Conan-Benchmark	63
Tab. 2.11	Infobox: Panda-Experiment 4bis zur Wandkondensation	69
Tab. 2.12	Infobox HYMERES-2-Benchmark zur Wärmestrahlungsmodellierung	79
Tab. 2.13	Infobox Panda-Experiment H2P2 zur Wärmestrahlungsmodellierung	95
Tab. 2.14	Parametervariationen bei den CFX-Simulationen	97
Tab. 2.15	Parameterstudie mit OpenFOAM zum H2P2_2 Experiment	98
Tab. 2.16	Parameterstudie mit OpenFOAM zum Experiment H2P2_1_5	99
Tab. 2.17	Infobox für den PAR-Test	104
Tab. 2.18	Infobox für den THAI-Versuch HR-5	121
Tab. 2.19	Infobox für den THAI-Versuch HR-43	134
Tab. 3.1	Priorisierung von Themen und relevanten Phänomenen für das Containment	154
Tab. 3.2	Themen und Phänomene, für die im Rahmen der nuklearen Sicherheitsforschung OpenFOAM qualifiziert werden soll, und ihre Priorisierung für den Kühlkreislauf	161
Tab. 3.3	Phänomene, für die im Rahmen der nuklearen Sicherheitsforschung OpenFOAM qualifiziert werden soll, und ihre Priorisierung für den Kühlkreislauf	165

Tab. 3.4	Priorisierung verschiedener Kopplungsarten, die im Bereich der Reaktorsicherheit eingesetzt werden	167
Tab. 4.1	Informationen zu den verwendeten Gittern	174
Tab. 4.2	Temperaturrandbedingungen in CFX-Simulation	208
Tab. 4.3	Infobox für den THAI-Versuch TH-32.....	209
Tab. 4.4	Randbedingungen für die OpenFOAM-Rechnungen (blind und offen) ...	209
Tab. 4.5	Vergleich von Parametern bei blinder und offener OpenFOAM-Rechnung	210
Tab. 4.6	In den Simulationen verwendete Flamelet-Tabelle zur H ₂ /H ₂ O/Luft-Verbrennung.....	223
Tab 4.7	Anfangsturbulenz bei der Parameterstudie	253
Tab. 4.8	Anfangsturbulenz bei der Parameterstudie	273
Tab. 4.9	Startbedingungen im ETSON-SAMHYCO-NET Benchmark	330
Tab. 4.10	KAEVER-Versuchsreihe	337
Tab. 4.11	Infobox für das KAEVER-Experiment.....	344
Tab. 4.12	Parameterstudie zum Turbulenz-Einfluss	346
Tab. 4.13	Vergleich von Durchmessern nach Gleichung (4.1) und experimentellen Messwerten (lösliche Aerosole)	349
Tab. 4.14	Vergleich von Durchmessern nach Gleichung (4.1) und experimentellen Messwerten (nicht-lösliche Aerosole).....	350
Tab. 4.15	Einfluss der Luftfeuchte auf Abbauzeiten und Partikeldurchmesser bei löslichen Aerosolen	353
Tab. 4.16	Einfluss der Luftfeuchte auf Abbauzeiten und Partikeldurchmesser bei nicht-löslichen Aerosolen	353
Tab. 4.17	Infobox für das VANAM-M3-Experiment	362
Tab. 5.1	Ansprechdrücke für die Berstscheiben und die Türen.....	372
Tab. 5.2	Einstellungen für die Containment-Rechnung	372
Tab. 5.3	Parametrische Studie (Einspeiserate: 200 kg/s)	374
Tab. 5.4	Variation der Einspeiserate mit einem maximalen Zeitschritt von 0,00075 s.....	375

Tab. 5.5	Einfluss der Leck-Richtung auf die Berstscheiben-Öffnung.....	376
Tab. 5.6	Einfluss der Leckposition auf die Berstscheiben-Öffnung.....	377
Tab. 5.7	Volumetrische Massenquellen, Einspeisung in den gesamten Sumpf....	380
Tab. 5.8	Zeitschrittstudie (Einspeiserate 200 kg/s)	380
Tab. 5.9	Variiertes Residuen-Kriterium mit den Ansprechdrücken nach Tab. 5.1	380
Tab. 5.10	Ergebnisse der Parameterstudie mit volumetrischer Dampfquelle und Einspeisung in den gesamten Sumpf.....	381
Tab. 5.11	Ergebnisse des Viertel-Sumpfes als Dampfquelle.....	382
Tab. 5.12	Geöffnete Berstscheiben (Gasverteilungsstudie)	383
Tab. 5.13	Geöffnete Berstscheiben bei unterschiedlicher Leckrichtung und Leckmodellierung (gleicher Ansprechdruck bei allen Berstscheiben).....	385
Tab. 5.14	Randbedingungen für das Beispiel-Szenario	387
Tab. 5.15	Geöffnete Berstscheiben beim Langzeit-Szenario	387

**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