

**Erweiterung, Validierung
und Bereitstellung
von qualitätsgesicherten
OpenFOAM-Solvern
für Containment-
anwendungen
(CFDCONT II)**

Teil 1

Erweiterung, Validierung und Bereitstellung von qualitätsgesicherten OpenFOAM-Solvern für Containment- anwendungen (CFDCONT II)

Teil 1

Berthold Schramm
Jörn Stewering

Oktober 2025

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Eigenforschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Klimaschutz, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMUKN) unter dem Förderkennzeichen RS1603A 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 BMUKN übereinstimmen.

Deskriptoren

CFD, Containment, containmentFOAM, Gasströmung, Gebäudekondensatoren, Kondensation, OpenFOAM, PANDA, THAI, Verbrennung, Wärmestrahlung, xDynFOAM

Kurzfassung

Seit vielen Jahren beteiligt sich die GRS an der Entwicklung, Validierung und Anwendung von CFD-Methoden für Reaktorsicherheitsanalysen mit dem Ziel, Aussagefähigkeit zu einem breiten Spektrum von Fragestellungen für die gängigen (Generation II – III+) und zukünftigen (Generation IV und SMR) KKW-Technologien sicherzustellen. Ziel dieses Projektes war die Weiterentwicklung, Validierung und Bereitstellung von qualitätsgesicherten OpenFOAM-Referenzsolvern für Containment-Fragestellungen für LWR. Diese Arbeiten erfolgen im Rahmen eines Verbundvorhabens mit dem Forschungszentrum (FZ) Jülich. Der folgende Bericht umfasst die von der GRS durchgeführten Arbeiten, das FZ Jülich hat einen eigenen Abschlussbericht erstellt.

OpenFOAM zur Berechnung der Gasverteilung

Der vom FZ Jülich entwickelte Solver containmentFOAM bildete den Ausgangspunkt für die Erstellung eines Referenzsolvers zur Berechnung von Gasverteilungen für Containment-Anwendungen. Zu Beginn des Projekts wurde anhand unterschiedlicher Versuche (CONAN, PANDA 4bis, OECD/NEA-Benchmark zur Schichtungsauflösung, SETH ST2.1, THAI TH-24) containmentFOAM mit dem von der GRS entwickelten Solver cht-MultiRegionSchmidtFOAM verglichen. Anschließend wurde ContainmentFOAM für die Simulation der Strömung in komplexen Mehrraumgeometrien validiert. Im THAI-Versuch TH-35 wurde eine Gegenströmung in einem Verbindungsrohr untersucht und in den OECD-PANDA-Experimenten P1A1-3 und P1A1-4 wurde die Strömung in einer Konfiguration betrachtet, die an eine Freisetzung in einen Dampferzeugerturm im Sicherheitsbehälter angelehnt ist. Anhand von Versuchen aus der OECD-PANDA-Versuchsreihe P1A2 wurde die Wärmestrahlungsmodellierung mit unterschiedlichen Strahlungsmodellen untersucht. Ein weiterer Schwerpunkt war die Modellierung von Gebäudekondensatoren. Es wurden die HYMERES-2-Versuche H2P6-1 und H2P6-2 mit unterschiedlicher Modellierung von Gebäudekondensatoren nachgerechnet.

Einsatz von OpenFOAM bei H₂ bzw. H₂/CO Verbrennung

Der von der TU München entwickelte Solver xDynFOAM wurde von der GRS für die Simulation von H₂-Verbrennung validiert. Langsame Verbrennungsvorgänge wurden anhand der THAI-Experimente HD-7, HD-8, HD10 und HD-12 nachgerechnet. Anhand eines ENACCEF-2-Experiments mit 13 Vol.-% H₂ in Luft wurde ein Experiment mit schneller, turbulent-beschleunigter Verbrennung simuliert. Anhand eines GraVent-Experiments

wurde die Simulation von DDT und Detonation getestet. Zur Durchführung von Multi-Physik-Analysen zur Fluid-Struktur-Interaktion (FSI) wurde eine Kopplung von OpenFOAM mit LS-DYNA entwickelt. Dazu wurde ein Kopplungsprogramm, FS-Converter, von der GRS erstellt. Es ermöglicht, die mit OpenFOAM berechneten lokalen Druckverläufe als räumlich verteilte Last-Zeit-Funktionen in LS-DYNA zu verwenden. Der FS-Converter wurde anhand unterschiedlicher Versuche erprobt (HySEA-Experiment, Offermann-Versuche und ein GraVent-Experiment).

Anwendbarkeit von OpenFOAM für komplexe Containment-Analysen

Durch die Simulation der Gasverteilung eines Kühlmittelverluststörfalls (Surge-Line-Bruch) in einem generischen Containment angelehnt an einen DWR vom Typ KONVOI wurde die Leistungsfähigkeit von containmentFOAM für reale Anwendungen untersucht und Weiterentwicklungsbedarf aufgezeigt.

Nationale und internationale Zusammenarbeit

Die GRS hat sich an nationalen und internationalen Treffen/Konferenzen aktiv beteiligt. Das jährliche CFD-Verbund-Treffen wurde von der GRS organisiert und dabei wurden regelmäßig GRS-Arbeiten zu Containment-Fragestellungen vorgestellt. Die GRS hat an den Treffen des PRG des OECD/NEA-PANDA-Projekts teilgenommen und ausgewählte Arbeiten mit Bezug zu diesem Versuchsprogramm vorgestellt. Des Weiteren hat sich die GRS mit xDynFOAM-Simulationen am ETSO-AMHYCO-Verbrennungsbenchmark zur Verbrennung von H₂/CO-Gemischen beteiligt.

Koordination von OpenFOAM-Aktivitäten (Containment)

Die GRS hat einen passwortgeschützten GitLab-Server eingerichtet, auf den nationale CFD-Verbund-Partner zugreifen können, um Modelle und Solver (z. B. containmentFOAM, xDynFOAM; GRS-PAR-Modell) herunterzuladen sowie eigene Modelle den Partnern zur Verfügung zu stellen. Die GRS hat bereits eine Reihe von Validierungsfällen auf diesen Server hochgeladen. Die GRS hat das GRS-PAR-Modell, das auf modifizierten AREVA-Gleichungen basiert, an containmentFOAM gekoppelt und an neue OpenFOAM-Versionen angepasst. Zudem wurde eine verbesserte Implementation am THAI-Experiment HR-5 validiert. Die GRS hat das FZ Jülich bei der Portierung von containmentFOAM in neue OpenFOAM-Versionen mit Validierungsrechnungen unterstützt.

Abstract

For many years, GRS has been involved in the development, validation, and application of CFD methods for reactor safety analyses with the goal of ensuring their validity for a broad spectrum of applications for current (Generation II - III+) and future (Generation IV and SMR) nuclear power plant technologies. The goal of this project was the further development, validation and provision of quality-assured OpenFOAM reference solvers for containment applications for LWRs. This work is being carried out as part of a joint project with the Jülich Research Centre (FZ). The following report covers the work conducted by GRS; the Jülich Research Centre has prepared its own final report.

Simulation of gas distribution with OpenFOAM

The OpenFOAM-Solver containmentFOAM developed by Research Centre Jülich formed the starting point for the creation of a reference solver for simulating gas distributions for containment applications. At the beginning of the project, containmentFOAM was compared with the solver chtMultiRegionSchmidtFOAM developed by GRS using various experiments (CONAN, PANDA 4bis, OECD/NEA benchmark for the erosion of a stable light gas layer, SETH ST2.1, THAI TH-24). Subsequently, containmentFOAM was validated for simulating flow in complex multi-compartment geometries. In the THAI experiment TH-35, counterflow in a connecting pipe was investigated, and in the OECD-PANDA experiments P1A1-3 and P1A1-4, the flow was considered in a configuration like a release into a steam generator tower in the containment vessel. Thermal radiation modelling was investigated using different radiation models based on experiments from the OECD-PANDA test series P1A2. Another focus was the modelling of building condensers. The HYMERES-2 tests H2P6-1 and H2P6-2 were simulated using different modelling of building condensers.

OpenFOAM for H₂ and H₂/CO combustion

The xDynFOAM solver, developed by the Technical University of Munich, was validated by GRS for the simulation of hydrogen combustion. Slow combustion processes were simulated using the THAI experiments HD-7, HD-8, HD10, and HD-12. An experiment with fast, turbulence-accelerated combustion was simulated using an ENACCEF-2 experiment with 13 vol.-% hydrogen in air. The simulation of deflagration-to-detonation (DDT) and detonation was tested using a GraVent experiment. To conduct multi-physics analyses of fluid-structure interaction (FSI), a coupling of OpenFOAM with LS-DYNA was

developed. For this purpose, a coupling program, FS-Converter, was developed by GRS. It enables the use of the local pressure curves calculated with OpenFOAM as locally distributed load-time functions in LS-DYNA. The FS converter was tested in various experiments (HySEA experiment, Offermann experiments and a GraVent experiment).

Applicability of OpenFOAM for complex containment analyses

By simulating the gas distribution of a loss-of-coolant accident (surge line break) in a generic containment based on a KONVOI PWR, the performance of containmentFOAM for real applications was investigated and the need for further development was identified.

National and international cooperation

GRS has actively participated in national and international meetings and conferences. The annual CFD-Network meeting was organized by GRS, and GRS work on containment issues was regularly presented there. GRS participated in the PRG meetings of the OECD/NEA-PANDA project and presented selected work related to this experimental program. Furthermore, GRS contributed xDynFOAM simulations to the ETSON-AMHYCO combustion benchmark for the combustion of H₂/CO mixtures.

Coordination of OpenFOAM activities (containment)

GRS has set up a password-protected GitLab server that national CFD network partners can access to download models and solvers (e.g., containmentFOAM, xDynFOAM; GRS-PAR model) and to make their own models available to the partners. GRS has already uploaded several validation cases to this server. GRS has coupled the GRS-PAR model, which is based on modified AREVA equations, to containmentFOAM and adapted it to new OpenFOAM versions. Furthermore, an improved implementation was validated on the THAI experiment HR-5. GRS supported the Jülich Research Centre in porting containmentFOAM to new OpenFOAM versions with validation simulations.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung	I
	Abstract	III
1	Einleitung	1
1.1	Zielsetzung	1
1.2	Einzelzielsetzungen	2
1.3	Zusammenarbeit.....	4
1.4	Stand von Wissenschaft und Technik	4
2	AP 1 Weiterentwicklung und Validierung von OpenFOAM zur Berechnung der Gasverteilung für containment-typische Anwendungen	9
2.1	AP 1.1 Nachrechnung mehrerer Versuche zur Mehrraumgeometrie mit OpenFOAM	9
2.1.1	Einleitung.....	9
2.1.2	Nachrechnung des THAI-Experiments TH-35	9
2.2	Nachrechnung der PANDA-Versuche P1A1_3 und P1A_4	49
2.3	AP 1.2: Weiterentwicklung und Validierung der Wärmestrahlungsmodellierung in OpenFOAM (gekürzt).....	50
2.4	AP 1.3 Simulation von Gebäudekondensatoren mit OpenFOAM	52
2.4.1	Einleitung.....	52
2.4.2	Das Experiment H2P6-2	53
2.4.3	Modellierung in OpenFOAM	53
2.4.4	Simulationen mit detaillierter Gebäudekondensatorgeometrie	54
2.4.5	Simulationen mit vereinfachter Gebäudekondensatorgeometrie	69
2.4.6	Das Experiment H2P6_1	79
2.4.7	Simulation H2P6_1	79
2.4.8	Schlussfolgerungen aus den Simulationen zu H2P6.....	92
2.5	AP 1.4 Erstellung eines Referenzsolvers zur Berechnung der Gasverteilung bei Containmentfragestellungen.....	94
2.5.1	Einleitung.....	94

2.5.2	Nachrechnung des OECD/NEA-PSI Benchmarks zur Auflösung einer stabilen Leichtgasschichtung	95
2.5.3	Nachrechnung des PANDA-Experimentes SETH-2 ST2_1	111
2.5.4	Simulation von CONAN-Versuchen ohne Modellierung der Kühlmittelströmung	119
2.5.5	Simulation der CONAN-Versuche einschließlich der Kühlmittelströmung	130
2.5.6	Nachrechnung des Panda 4bis Experiments	138
2.5.7	Nachrechnung des TH-24-Experimentes mit containmentFOAM	150
2.5.8	Zusammenfassung und Schlussfolgerungen aus AP1.4	163
3	AP 2 Einsatz von OpenFOAM bei Hz bzw. Hz/CO-Verbrennungsvorgängen	165
3.1	AP 2.1 Auswahl/Erstellung und Validierung eines OpenFOAM-Solvers zur Simulation der Hz/CO/Dampf/Luft-Verbrennung (GRS)	165
3.1.1	THAI Experiment HD-7	165
3.1.2	OpenFOAM-Setup	166
3.1.3	THAI-Experiment HD-8	175
3.1.4	THAI-Experiment HD-10	178
3.1.5	THAI-Experiment HD-12	180
3.1.6	ENACCEF-2-Experiment	182
3.1.7	GraVent-Experiment	187
3.1.8	Zusammenfassung AP2.1 (OpenFOAM-Solver für H ₂ -Verbrennungen)	192
3.2	AP 2.2 Kopplung von CFD und CSM	193
3.2.1	Zielsetzung	193
3.2.2	Erstellung von Rechenmodellen für OpenFOAM und LS-DYNA	193
3.2.3	Kopplung von OpenFOAM und LS-DYNA	204
3.2.4	Überprüfung der Schnittstelle anhand von Versuchsnachrechnungen (HySEA-Experiment)	205
3.2.5	Überprüfung der Schnittstelle anhand von Versuchsnachrechnungen (Offermanns-Experiment)	206
3.2.6	Überprüfung der Schnittstelle anhand von Versuchsnachrechnungen (GraVent-Experiment)	215

3.2.7	Zusammenfassung AP2.2 (Kopplung CFD und CSM)	218
4	AP3 – Untersuchung zur Anwendbarkeit von OpenFOAM für komplexe Containment-Analysen.....	219
4.1	Erstellung eines Rechenmodells mit OpenFOAM	219
4.2	Unfall-Szenario	222
4.3	Vergleich mit CFX und COCOSYS	227
4.4	Zusammenfassung und Fazit.....	234
5	AP 4 Nationale und internationale Zusammenarbeit bzgl. CFD- Anwendung	235
6	Koordination der OpenFOAM-Aktivitäten zu Containmentfragestellungen	237
6.1	Bereitstellung einer Plattform zum Austausch von Code und Daten	237
6.2	Softwarepflege des GRS-PAR-Modells.....	237
6.2.1	Motivation	237
6.2.2	Vorgehensweise bei der Pflege des GRS-PAR-Modells	238
6.2.3	Versuchsbeschreibung THAI HR-5	239
6.2.4	Modellierung mit OpenFOAM.....	240
6.2.5	Zusammenfassung zu Nachrechnung HR-5	254
6.3	Portierung des Gebäudekondensatormodells von containmentFOAM-9 nach containmentFOAM-11	255
6.4	Unterstützung des FZ Jülich bei der Softwarepflege	256
6.4.1	Test der Portierung des Monte-Carlo-SNBCK- Wärmestrahlungsmodells von der containmentFOAM-Version 9 zur Version 11	257
7	Zusammenfassung und Fazit.....	261
	Literaturverzeichnis.....	269
	Abbildungsverzeichnis.....	279
	Tabellenverzeichnis.....	293

1 Einleitung

1.1 Zielsetzung

Zur Untersuchung von unfalltypischen Vorgängen im Sicherheitsbehälter von Kernkraftwerken erlangen CFD-Simulationstechniken eine immer stärkere Bedeutung /OEC 24/. Insbesondere zu Fragestellungen, in denen lokale Größen wie Gaszusammensetzung oder Temperatur sicherheitstechnisch relevant sind, oder zur Simulation von Verbrennungsvorgängen ist der Einsatz von CFD zur Ergänzung von Analysen mit Systemcodes sinnvoll /SCH 21a/.

Seit vielen Jahren beteiligt sich die GRS an der Entwicklung, Validierung und Anwendung von CFD-Methoden für Reaktorsicherheitsanalysen. Dabei verfolgt die GRS die Zielsetzung, mit den bereitgestellten Methoden ihre Aussagefähigkeit zu einem breiten Spektrum von Fragestellungen für die gängigen (Generation II – III+) und zukünftigen (Generation IV und SMR) KKW-Technologien sicherzustellen und zu erweitern. Der deutsche CFD-Verband hat hierfür das Open-Source CFD-Programm OpenFOAM als einen geeigneten Baustein identifiziert. Im Rahmen einer Strategiediskussion des Projektkomitees „Transienten und Unfallabläufe“ am 10.10.2017 wurde beschlossen, dass zukünftig für Containment-Fragestellungen unter Federführung der GRS verstärkt der frei verfügbare Open-Source-Code OpenFOAM erprobt und für Containment-Anwendungen ertüchtigt werden soll. Dabei wurde der GRS die koordinierende Funktion im Bereich der zukünftigen Nutzung von CFD-Programmen für Containment-Analysen übertragen. OpenFOAM wurde als geeignetes Werkzeug identifiziert, weil es ein Open-Source-Programm mit frei zugänglichem Quellcode ist, in dem die Implementierung der einzelnen Modelle genau nachvollzogen und auch überarbeitet werden kann. Dieses ist bei kommerziellen Programmen nicht der Fall. Weiterhin fallen keine Lizenzgebühren an und die Aufnahme von Modellen ist unabhängig von kommerziellen Interessen.

Ziel der durchgeführten Arbeiten war die Weiterentwicklung, Validierung und Bereitstellung von qualitätsgesicherten OpenFOAM-Referenzsolvern für Containment-Fragestellungen für LWR. Im Rahmen dieses Verbundvorhabens erfolgte die Validierung und Erweiterung des containmentFOAM-Pakets als Basis für das Themenfeld Gasverteilung in enger Zusammenarbeit mit dem Forschungszentrum Jülich (FZJ). Ein weiterer Schwerpunkt war die Validierung des Referenzsolvers für die Simulation von Verbrennungsvorgängen explosionDynamicsFOAM (abgekürzt xDynFOAM) /ZIV 23/, der von der TU München entwickelt wurde. Des Weiteren wurden Multi-Physik-Analysen zur Fluid-

Struktur-Interaktion (FSI) bei Verbrennungsvorgängen mit explosionDynamicsFOAM und LS-DYNA durchgeführt. Das Projekt hat Bezug zum Förderprogramm im Hinblick auf das FuE-Feld A2.3: „Containment und angrenzende Gebäude“, insbesondere zur Analyse der Containmentintegrität im Hinblick auf die Kühlung und Druckbegrenzung sowie das Verhalten inerter und explosiver Gase.

1.2 Einzelzielsetzungen

Im Forschungsprojekt RS1603A waren fünf übergeordnete Arbeitspakete (AP) definiert, deren technische Arbeitsziele nachfolgend erläutert werden.

AP 1 Weiterentwicklung und Validierung von OpenFOAM zur Berechnung der Gasverteilung für containment-typische Anwendungen

Ziel dieses Arbeitspunkts war die Validierung und punktuelle Weiterentwicklung eines OpenFOAM-Referenzsolvers, der in der Lage ist, die Gasverteilung bei einem Stör- oder Unfall in einem DWR-Reaktorsicherheitsbehälter mit Kühlmittelfreisetzung realistisch zu berechnen. Dazu musste neben allen relevanten physikalischen Phänomenen (z. B. Turbulenz, Kondensation, Wärmetransport) auch der Einfluss technischer Systeme (z. B. PAR, Gebäudekondensatoren etc.) simuliert werden. Der vom FZ Jülich entwickelte Solver containmentFOAM diente als Basis für den Referenzsolver zur Simulation von Gasverteilungen. Zu verschiedenen physikalischen Fragestellungen (Gasverteilung, Schichtungsauflösung, Wandkondensation) wurden containmentFOAM-Modelle mit Modellen des von der GRS erstellten OpenFOAM-Solvers chtMultiRegionSchmidtFOAM anhand unterschiedlicher Modelle verglichen und eine Modellauswahl für den Referenzsolver und die weiteren Arbeiten getroffen (AP1.4, Abschnitt 2.5). Weitere Schwerpunkte dieses Arbeitspunkts waren die Anwendung des Solvers auf komplexe Strömungen in Mehrraumgeometrie. Dazu wurde containmentFOAM zur Simulation der Gegenströmung im THAI+-Experiment TH-35 /FRE 23/ eingesetzt und es wurden PANDA-Experimente aus der Versuchsreihe 1 /CHA 24a/ berechnet, in denen die Strömung in einem Dampferzeugerturm und die Gasverteilung im umgebenden Containment nachgebildet wurden. (AP 1.1, Abschnitt 2.22.1). Weiterhin wurden die Arbeiten zur Wärmestrahlungsmodellierung aus RS1652 /SCH 22a/ anhand neuer Versuche aus dem PANDA-Projekt /RIV 24/ fortgeführt. Dabei wurde auch das in containmentFOAM implementierte Wärmestrahlungsmodell Monte-Carlo-SNBCK validiert (AP1.2, Abschnitt 2.3). In AP 1.3 (Abschnitt 2.4) wurden unterschiedliche Ansätze zur Modellierung von

Gebäudekondensatoren anhand von zwei Versuchen aus dem HYMERES2-Versuchsprogramm (H2P6-1, H2P6-2 /KAP 21a/) getestet.

AP 2 Einsatz von OpenFOAM bei H₂-Verbrennungsvorgängen

Ziel dieses Arbeitspunkts war die Bereitstellung eines validierten OpenFOAM-Solvers zur Simulation von H₂-Verbrennungsvorgängen. Der von der TU München erstellte OpenFOAM-Solver explosionDynamicsFOAM (abgekürzt xDynFOAM) wurde als Basis ausgewählt. Der Solver wurde für unterschiedliche Verbrennungsregimes validiert. Es wurden langsame H₂-Verbrennungsexperimente in der THAI-Anlage (HD-7, HD-12) /KAN 08/ simuliert. Zur Validierung der schnellen, turbulenten H₂-Verbrennung wurde ein an der ENACCEF2-Anlage durchgeführter Versuch nachgerechnet /BEN 18/. Die Modellierung von DDT/Detonationen wurde durch Simulation eines GraVent-Versuchs /ETT 13/ einem ersten Test unterzogen. Weiterer Schwerpunkt dieses Arbeitspunkts war die Durchführung von Multi-Physik-Berechnungen zur Simulation der Auswirkungen von durch Verbrennungen erzeugten Druckbelastungen auf Strukturen. Hierzu wurde ein Konverterprogramm erstellt, das den lokalen, zeitabhängigen Druck aus OpenFOAM-Simulationen als lokale Druck-Lastfunktionen LS-DYNA-Simulationen zur Verfügung stellt. Hiermit wurde eine Multi-Physik-Analyse mit xDynFOAM und LS-DYNA für einen HYSEA-Versuch /PIN 17/ und einen GraVent-Versuch durchgeführt.

AP3 Untersuchungen zur Anwendbarkeit von OpenFOAM für komplexe Containment-Analyse

Durch die Simulation der Gasverteilung eines ausgewählten Kühlmittelverlustunfalls mit H₂-Freisetzung in einem generischen Containment wurde die Leistungsfähigkeit des in AP 1 definierten, erweiterten und abgesicherten Referenzsolvers an einem Beispiel aus der Anwendungspraxis durch die GRS überprüft.

AP4 Nationale und internationale Zusammenarbeit bzgl. CFD-Anwendung

Die nationale und internationale Zusammenarbeit bzgl. CFD-Anwendung ist ein zentraler Punkt bei der Ermittlung und Weiterentwicklung des Stands von Wissenschaft und Technik. Im Rahmen dieses Arbeitspunkts hat die GRS den nationalen CFD-Verbund organisiert und regelmäßig Arbeitsergebnisse aus RS1603A vorgestellt sowie an internationalen Treffen (insbesondere Teilnahme und Vorträge beim OECD-PANDA PRG) teilgenommen. Des Weiteren hat sich die GRS an der offenen und blinden Phase des AMHYCO-Verbrennungsbenchmarks beteiligt.

AP 5 Koordination der OpenFOAM-Aktivitäten zu Containmentfragestellung

Ziel dieses Arbeitspunkts war die Entwicklung und Bereitstellung von qualitätsgesicherten OpenFOAM-Referenzsolvern für Containmentfragestellungen (nationales CFD-Referenzpaket) und die fachliche Koordinierung der entsprechenden Aktivitäten im deutschen CFD-Verbund. Neben der Bereitstellung der Solver containmentFOAM und xDynFOAM auf einem passwortgeschützten Server stellt die GRS auch Validierungsfälle zu unterschiedlichen Fragestellungen den Partner im CFD-Verbund zur Verfügung. Im Rahmen diese Arbeitspunkts hat die GRS weiterhin das FZ Jülich mit Validierungsrechnungen bei der Aktualisierung von containmentFOAM auf die neuen Releases 9 und 11 unterstützt. Des Weiteren wurde das in RS1562 in den GRS-Solver chtMultiRegionSchmidFOAM implementierte PAR-Modell für containmentFOAM verfügbar gemacht und anhand von THAI HR-5 validiert.

1.3 Zusammenarbeit

Die Arbeiten in RS1603A wurden im Rahmen eines Verbundprojekts mit dem FZ Jülich („CFD-ContainmentFOAM: Unterstützung bei der Integration und Anwendung von ContainmentFOAM im nationalen CFD-Referenzpaket für das Forschungsfeld Sicherheitseinschluss“ FKZ1501633B) durchgeführt. Im Folgenden werden die von der GRS durchgeführten Arbeiten beschrieben, für das Teilprojekt des FZ Jülich wurde ein separater Abschlussbericht erstellt /KEL 25/. Neben der sehr engen Zusammenarbeit mit dem Verbundpartner FZ Jülich hinsichtlich der Weiterentwicklung und Validierung von containmentFOAM fand eine enge Zusammenarbeit mit der TU München hinsichtlich der Übernahme und Nutzung des Verbrennungssolvers xDynFOAM statt. Weiterhin bestand ein reger Austausch mit dem Paul Scherrer Institut (PSI) hinsichtlich der Durchführung und Auswertung von PANDA-Experimenten (z. B. PANDA- Serie P1A1 und P1A2 sowie HYMERES-2 H2P6-Serie) sowie mit Becker Technologies bezüglich THAI-Experimenten (z. B. TH-35). Weiterhin fand ein regelmäßiger fachlicher Austausch mit nationalen und internationalen Partnern im Rahmen der CFD-Verbundtreffen und der PANDA-PRGs statt.

1.4 Stand von Wissenschaft und Technik

CFD-Simulation von Gasverteilungen: Die Entwicklung der lokalen Gasverteilung und thermo-fluiddynamischen Bedingungen im Sicherheitsbehälter ist Grundlage für die

weitergehende Untersuchung der Effektivität passiver Sicherheitssysteme (z. B. PARs, Gebäudekondensatoren) und Notfallschutzmaßnahmen. Zudem bestimmen sie die lokale Brennbarkeit des Gasgemischs und das Potential einer Flammbeschleunigung oder Detonation. In der Vergangenheit wurden überwiegend kommerzielle Mehrzweck-CFD-Pakete (z. B. ANSYS CFX, FLUENT) genutzt, um die relevanten Phänomene abzubilden. Seit 2015 wird am FZ Jülich das maßgeschneiderte CFD-Paket containmentFOAM /KEL 21a/ mit dem Ziel entwickelt, alle relevanten Phänomene und Sicherheitssysteme mit einem ausgewogenen Detaillierungsgrad zu berücksichtigen. Dazu wurden/werden unter anderem Modelle zur Diffusion („effective binary diffusion“ einschließlich „cross-diffusion“), zur Turbulenz (k- ω SST-Modell mit „buoyancy terms“, „simple and generalized gradient diffusion hypothesis formulation“), zur Wärmestrahlung (Monte-Carlo Modell mit unterschiedlichen Spektralmodellen, insbesondere „Statistical narrow band correlated-k model“ (SNBCK)) und Aerosoltransport in containmentFOAM implementiert /LIU 22/, /LIU 23/. In containmentFOAM ist ein einphasiges Wand- und Volumenkondensationsmodell implementiert, das in Zusammenarbeit u. a. mit der RWTH weiterentwickelt wird (z. B. Verbesserung der Wandfunktionen) /CAM 23/. Ein zweiphasiges Wand- und Volumenkondensationsmodell wird gegenwärtig in Zusammenarbeit mit dem KIT weiterentwickelt /GEO 23/, /GEO 25/. Es wurden Modelle für eine Reihe von technischen Systemen entwickelt/implementiert (z. B. für PARs (REKODIREKT), Modell für Türen und Berstscheiben)). Eine Kopplung von containmentFOAM mit OpenModelica ist vorhanden. Dies ermöglicht dem Nutzer, eigene Modelle für technische Systeme zu implementieren. In Zusammenarbeit mit der TU München (KEK-Projekt /ZIV 23/) wurden in einer prototypischen Rechenkette COCOSYS / containmentFOAM / xDynFOAM Verbrennungslasten untersucht. An der Universität der Bundeswehr München (UniBW, Prof. Klein) wurden CFD-Modelle zur Beschreibung des Ablaufverhaltens von Flüssigkeiten und dem resultierenden Abwaschverhalten von Spaltprodukten auf Oberflächen entwickelt. Weiterhin wurden in Zusammenarbeit mit dem FZ Jülich zwei Methodiken zur Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse entwickelt und auf Auftriebsströmungen angewandt /JIR 24/, /WEN 24/.

International gibt es einige OpenFOAM-Aktivitäten mit Bezug zu den geplanten Arbeiten. Untersuchungen zur Problematik der Schichtungsbildung und deren Auflösung bei Gasverteilungsrechnungen wurden unter anderem durch /ABE 20/ durchgeführt, der insbesondere auf die Relevanz der Turbulenz durch Auftriebseffekte hinweist. Auch /WIL 13/ vom NRG beschäftigte sich mit Gasverteilungsrechnungen mittels OpenFOAM. Dabei wurden z. B. Experimente im Battelle-Model-Containment nachgerechnet.

Einen guten Überblick über die aktuellen Probleme in der Thermohydraulik und Gasverteilung gibt unter anderem /STU 20/. Hier wird auch auf die bestehenden Probleme bei der Simulation der passiven Wärmeabfuhr mit Hilfe von Gebäudekondensatoren eingegangen. Auch /WIL 13/ vom NRG beschäftigt sich mit Gasverteilungsrechnungen mittels OpenFOAM. Dabei wurden z. B. Experimente im Battelle-Model-Containment nachgerechnet. Das Korea Atomic Energy Research Institute (KAERI) hat sich u. a. mit einer OpenFOAM-7-Simulation am HYMERES-2-Benchmark zur Auflösung einer stabilen Leichtgasschichtung beteiligt /AND 19/. Weitere Entwicklungen am KAERI betreffen Sprays /JUN 18/. In einer anwendungsorientierten Arbeit wurde untersucht, wie mit einer aerodynamischen Barriere die Ausbreitung von Spaltprodukten im Falle eines Containment-Versagens verringert werden kann /ULL 20/. Am PSI fanden FLUENT-Arbeiten zur Wandkondensation /DEH 20/, zur Wärmestrahlungsmodellierung /DEH 23/ sowie zur Simulation von Gebäudekondensatoren und deren Wechselwirkung mit einer stabilen Leitgasschichtung /DEH 24/ statt.

H₂/CO-Verbrennung: H₂-Explosionen bei Unfällen wie z. B. in Fukushima zeigen das Gefährdungspotential durch H₂-Ansammlungen. Im Fall von schneller turbulent-beschleunigter Verbrennung, DDT und Detonationen treten sehr hohe Drücke auf, die die Integrität von Strukturen gefährden können. Da Flammenbeschleunigung durch Turbulenz erzeugt wird, ist hier die Verwendung von CFD-Codes empfehlenswert. Die TU München hat den OpenFOAM-Löser xDynFOAM zur Berechnung der H₂/CO-Verbrennung entwickelt /ZIV 23/. Mit diesem Löser können unterschiedliche Verbrennungsregimes (von langsamen Verbrennungsvorgängen bis hin zur Detonation) simuliert werden. Im Löser sind unterschiedliche Modelle implementiert, die die Flammgeschwindigkeit beeinflussen und teilweise auch in Kombination miteinander genutzt werden können. Diese umfassen z. B. ein Modell zum Einfluss von Darrieus-Landau-Instabilitäten, die Dinkelacker-Korrelation zur Beschreibung des Einflusses der Turbulenz und zum Einfluss der Lewis-Zahl (thermo-diffusive Flammeninstabilitäten) sowie unterschiedliche Detonationsmodelle. In diesem Löser und Modellpaket sind wichtige Entwicklungen früherer Arbeiten der TU München zusammengeführt worden, insbesondere die DDT/Detonationsmodellierung für CO/H₂-Luft-Gemische. Hierfür wurde vormals der spezialisierte ddtHyCoCentralFoam-Löser entwickelt /BAR 22/, /BAR 23/. Außerdem gibt es frühere Arbeiten zu unterschiedlichen Aspekten der H₂-Verbrennung/Detonation /ETT 13/, /HAB 17/. In enger Abstimmung zu der OpenFOAM-Entwicklung der TU München wurde an der Universität der Bundeswehr München (Prof. Klein) an der Modellierung von Stoß-Flamme-Interaktionsvorgängen geforscht /BAM 20/. Ziel dieses Vorhabens war die Erstellung eines Subgittermodells der Richtmyer-Meshkov-Instabilität

(RMI), welche maßgeblich zur Vorhersage der Flammenbeschleunigung und des sicherheitskritischen Deflagrations-Detonations-Übergangs beiträgt. Sie beschreibt die Auffaltung der Flammenoberfläche, welche bei der Interaktion einer Stoßwelle und einer Flamme auftritt.

International wird OpenFOAM von zahlreichen Instituten zur Simulation von H₂- bzw. H₂/CO-Verbrennung eingesetzt. Am Lithuanian Energy Institute (LEI) wird der OpenFOAM-Löser flameFOAM zur Simulation turbulenter vorgemischter Verbrennung entwickelt und validiert /POV 21/. Im Rahmen einer Zusammenarbeit zwischen der Hefei University of Technology und der Universität Warwick wurden mit dem OpenFOAM-Solver explosion-FOAM die Flammenbeschleunigung und DDT in H₂/Luftgemischen mit Konzentrations-Gradienten durchgeführt /WAN 17/. Am Korea Atomic Energy Research Institute (KAERI) wurde mit OpenFOAM der Einfluss der Wärmestrahlungsmodellierung bei der Verbrennung von H₂/Luft/Dampf-Gemischen untersucht /KIM 22/, /KIM 22/ und OpenFOAM zur Simulation von Detonationen genutzt /KIM 19/.

Hochwertige *Versuchsdaten* sind für die Modellentwicklung und Validierung von zentraler Bedeutung. An der THAI-Versuchsanlage wurden in verschiedenen nationalen und internationalen Projekten Versuche zu unterschiedlichen containment-relevanten Phänomenen durchgeführt. Für dieses Projekt sind vor allem die Versuche zur Gegenströmung /FRE 23/ zur H₂-Verbrennung /KAN 08/ sowie zu PARs /KAN 09/ relevant. An der SETCOM-Versuchsanlage durchgeführte Versuche zur Kondensation waren wichtiger Bestandteil der Modellentwicklung und Validierung der Wandkondensationsmodellierung bei containmentFOAM /CAM 23/.

An der PANDA-Versuchsanlage am PSI wurden im Rahmen mehrerer OECD-Projekte Versuche zu verschiedenen containment-relevanten Fragestellungen durchgeführt. In diesem Projekt wurden unter anderem Versuche aus dem Projekt OECD-HYMERES-2 /KAP 21a/ und dem OECD-PANDA-Projekt /CHA 24b/, /RIV 24/ zur Validierung genutzt. Im Rahmen von SARNET-2 hat die Universität Pisa Versuchsdaten der CONAN-Versuchsanlage verfügbar gemacht /AMB 09/. Diese leisten einen wichtigen Beitrag zur Validierung der Wandkondensationsmodellierung.

2 AP 1 Weiterentwicklung und Validierung von OpenFOAM zur Berechnung der Gasverteilung für containment-typische Anwendungen

2.1 AP 1.1 Nachrechnung mehrerer Versuche zur Mehrraumgeometrie mit OpenFOAM

2.1.1 Einleitung

Ziel der Arbeiten in AP1.1 ist es, containmentFOAM für Strömungen in komplexer Mehrraumgeometrie zu validieren. Ein untersuchtes Phänomen war die Gegenströmung in der Verbindung zwischen zwei Räumen (THAI TH-35). Bei Mehrraumgeometrien kann es bei einer entsprechenden Dichteverteilungen zu einer Gegenströmung in der Verbindung zwischen zwei Räumen kommen. Eine solche Gegenströmung wurde bereits in Experimenten wie Panda 4bis simuliert, aber bei diesen Experimenten wurde die Gegenströmung nicht detailliert experimentell untersucht. Beim THAI-Experiment TH-35 wurde dagegen die lokale Strömungsgeschwindigkeit im Verbindungsrohr gemessen. Zusätzlich wurde auch die Temperatur im Verbindungsrohr an zahlreichen Punkten gemessen, so dass sich ein detailliertes Bild von der Geschwindigkeit und der Temperatur/Dichte der Gegenströmung ergibt.

Die andere untersuchte Konfiguration war die Strömung in einer Geometrie angelehnt an einen Dampferzeugerturm im Sicherheitsbehälter. In der OECD-PANDA P1A1-Serie wird in vereinfachter Form die Strömung durch einen Dampferzeugerturm in einem generischen DWR nachgebildet, die zu einer Schichtung im umgebenden Sicherheitsbehälter führt. Dazu wurde im unteren Bereich des PANDA-Behälters eine Kammer mit Öffnungen eingebaut, die den Dampferzeugerturm vereinfacht nachbilden soll. In diese Kammer wurde Dampf und später Helium eingespeist. Es kam zur Ausbildung einer Schichtung heißen Gases im oberen Teil des PANDA-Behälters. Wichtige Phänomene waren Gasvermischung, Kondensation und Wärmeleitung.

2.1.2 Nachrechnung des THAI-Experiments TH-35

2.1.2.1 Versuchsbeschreibung TH-35

Ziel des Experiments war es, eine Gegenströmung im unteren Verbindungsrohr zwischen den beiden THAI+-Behältern TTV und PAD zu erzeugen und die lokale

Strömungsgeschwindigkeit in der Gegenströmung zu messen (Abb. 2.1, Abb. 2.2). Um die Gegenströmung zu erzeugen, wurden alle drei Heizmäntel des TTV auf ca. 411 K geheizt. Die elektrische Heizung am TTV-Deckel und die untere elektrische Heizung im TTV waren mit einer Solltemperatur von 413 K eingeschaltet. Die Wände des TTV-Sumpfs, des Verbindungsrohrs und des PAD wurden nicht beheizt; bei ihnen gab es kleine Wärmeverluste durch die Isolation. Durch ein senkrechttes Rohr im TTV (Höhe der Rohröffnung 6 m) wurde Luft eingespeist (Tab. 2.1). Durch ein Ventil im PAD (Höhe 9,015 m) wurde der Druck konstant auf 1,3 bar gehalten. Die Messung der Geschwindigkeit im Verbindungsrohr erfolgte über das METUSA-System (**M**inimal **E**ncroaching **T**urnable **S**tream-wise **A**neomome) und über HDA (hot-wire aneometer). Zusätzlich wurden an verschiedenen Messtellen die Gas- und die Wandtemperatur gemessen. Eine genaue Versuchsbeschreibung kann dem Bericht /FRE 22/, /FRE 23/ entnommen werden.

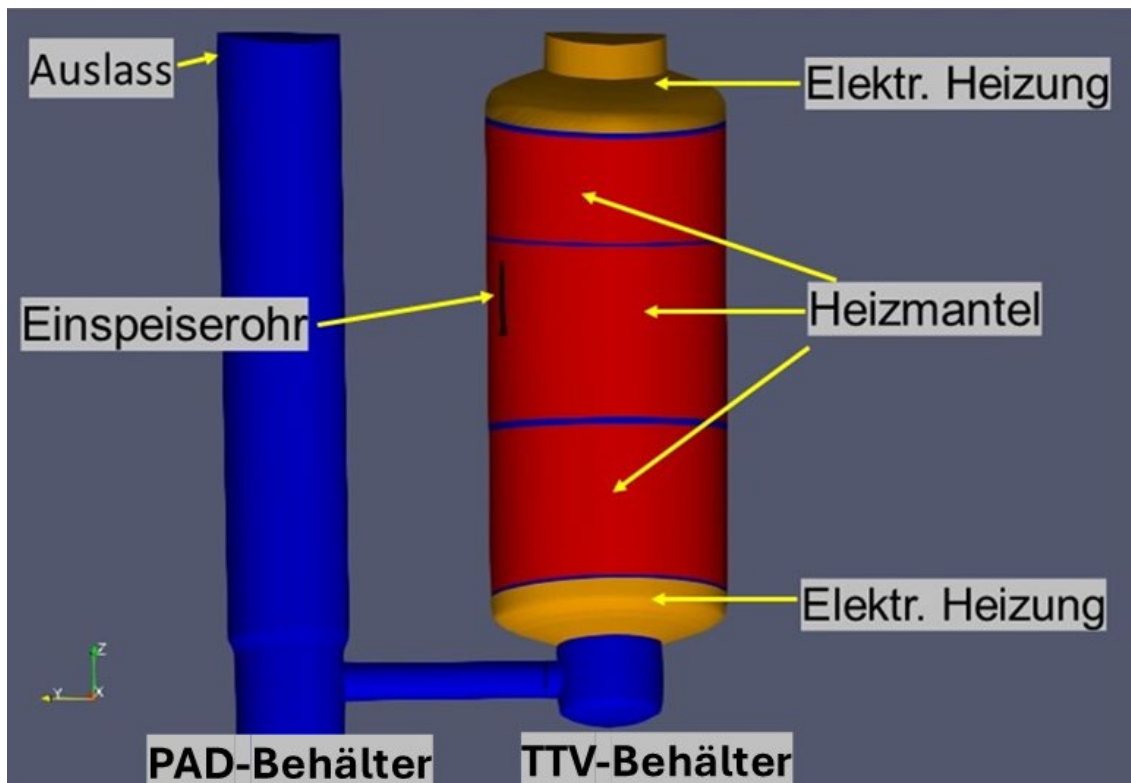


Abb. 2.1 Schematischer Versuchsaufbau TH-35

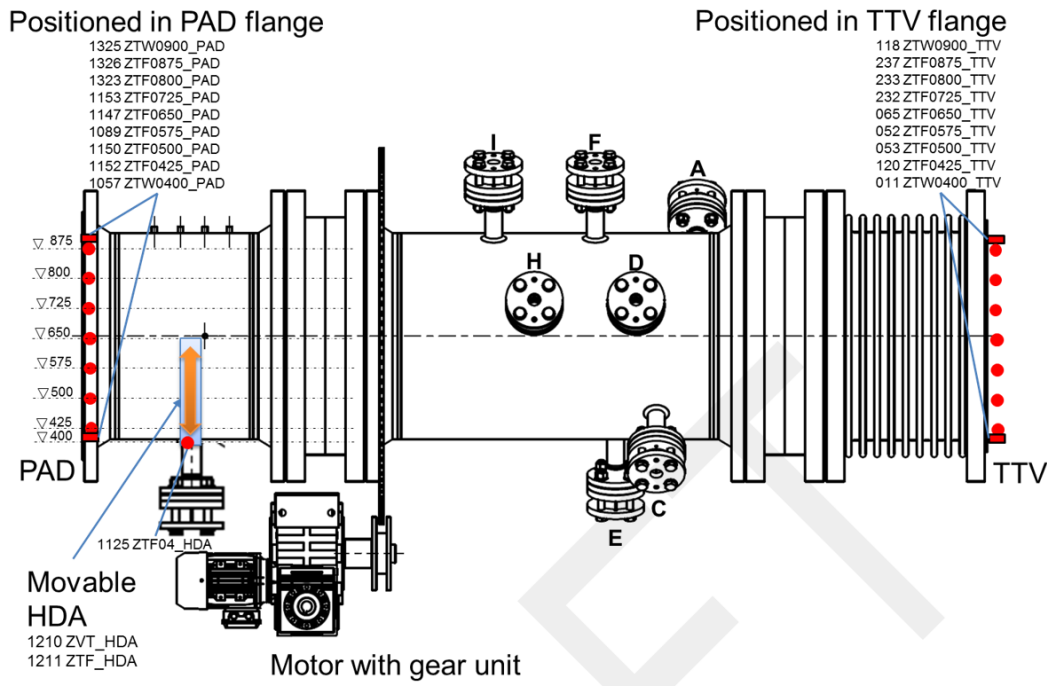


Abb. 2.2 Verbindungsrohr mit Messinstrumentierung /FRE 22/

Tab. 2.1 Luftspeisung in TH35

	Phase 1	Phase 2	Phase 3
Startzeit [s]	0	5820	11760
Endzeit [s]	5820	11760	17520
Massenstrom [g/s]	10,1	19,9	29,8
Mittlere Temperatur [K]	365,0	390,5	397,5

2.1.2.2 Simulation mit OpenFOAM

Bei den im Folgenden beschriebenen Simulationen kamen die standardmäßigen Modelle und numerischen Einstellungen zum Einsatz, wie sie den Voreinstellungen im containmentFOAM-GUI entsprechen. Die Turbulenz wurde mit dem SST-Modell einschließlich der Auftriebsterme (cfkOmegaSST+SGDH) modelliert. Luft wurde als ideales Gas modelliert. Die PANDA-Versuchsreihe H2P2 /KAP 21b/ aus dem HYMERES-2-Projekt hat gezeigt, dass selbst kleine Dampfanteile (z. B. durch Luftfeuchtigkeit) dazu führen können, dass thermische Strahlung einen Einfluss auf die Temperaturverteilung hat. Deshalb wurde die Wärmestrahlung mit dem P1-Modell simuliert. Für Luft wurde ein kleiner Absorptionskoeffizient von $0,1 \text{ (m bar)}^{-1}$ angenommen. Die Emissivität der Behälterwände wurde mit 0,4 abgeschätzt. Um den Einfluss dieser Annahmen auf das

Rechenergebnis abzuschätzen, wurde zusätzlich eine Simulation durchgeführt, bei der Wärmestrahlung vernachlässigt wurde.

Ein wichtiger Punkt bei der Simulation des Experiments ist die Modellierung der Randbedingungen an den beheizten Wänden. Es wurden eine Reihe von Rechnungen durchgeführt, bei denen unterschiedliche Randbedingungen für die beheizten Wände getestet wurden. An allen Heizsystemen wurde von den Experimentatoren der integrale Wärmestrom für die einzelnen Versuchsphasen bestimmt /FRE 22/. Dieser Wärmestrom führt neben der Erwärmung der Wände zu einer Energieabgabe in das Gas und auch in die Isolierung. Am Ende der Aufwärmphase ändern sich die Wandtemperaturen nur noch geringfügig. Ist das an den Wandbereich angrenzende Gas ähnlich heiß wie die Wand, so fließt trotz der guten Isolierung der THAI-Behälter ein großer Teil der eingespeisten Energie nach außen. Deshalb kann die gemessene Heizleistung in den meisten Fällen nicht als Randbedingung verwendet werden. Stattdessen wurde die gemessene Temperatur an den Ölmänteln als fester Wert an der Außenseite der Stahlwände vorgegeben. Ebenso wurde der Sollwert der oberen elektrischen Heizung (413 K) als fester Wert an der Außenseite als Randbedingung gewählt. Mit diesen Randbedingungen zeigt sich, dass sich in den Simulationen nach kurzer Zeit ein Wärmestrom in die Wände einstellt, der deutlich niedriger ist als die mittlere gemessene Heizleistung (siehe Abb. 2.3). Bei der unteren elektrischen Heizung ist diese Vorgehensweise nicht erfolgreich. Wird auch hier die Temperatur an der Außenseite der Wand fest vorgegeben, so ergibt sich in der Simulation ein integraler Wärmestrom, der zu einer Heizleistung deutlich oberhalb des gemessenen Wertes führt. Grund für dieses unterschiedliche Verhalten ist, dass es zu einer signifikanten Wärmeströmung innerhalb des Stahls hin zum kalten, ungeheizten Sumpf kommt. Außerdem ist die Temperatur des Gases in diesem Bereich niedriger als im oberen Teil des Behälters, so dass auch mehr Energie ins Gas abgegeben wird. Deshalb wurde für die untere elektrische Heizung als äußere Randbedingung der Wand ein Wärmestrom vorgegeben. Dieser entspricht der gesamten gemessenen Heizleistung. Da hierbei nicht die Wärmeverluste an der isolierten Außenfläche berücksichtigt werden, führt diese Modellierung tendenziell zu einer Überschätzung der eingespeisten Energie. In einer Parametervariation wurde der mögliche Fehler abgeschätzt. An den unbeheizten Wänden wurden die Wärmeverluste an der Isolierung mit einem Wärmeübergangskoeffizienten von $1,29 \text{ W}/(\text{m}^2\text{K})$ abgeschätzt.

Die initialen Temperaturen werden für die drei Raumbereiche, TTV, PAD und Verbindungsrohr unabhängig voneinander gewählt. Im TTV- und PAD-Behälter wird die Gas- und Wandtemperatur entsprechend der Messwerte bei $t = 0 \text{ s}$ in Abhängigkeit von der

Höhe gewählt. Im Verbindungsrohr wird zwischen der Hälfte, die an den TTV- und die an den PAD-Behälter angrenzt, unterschieden. Es werden jeweils 3 Zonen in Abhängigkeit von der Höhe gebildet. Die obere und die untere Zone werden entsprechend den Messwerten gesetzt, die mittlere wird durch Interpolation bestimmt (Abb. 2.5).

Die Simulationen wurden mit einem strukturierten CFD-Gitter bestehend aus 1,25 Millionen Hexaedern durchgeführt (Abb. 2.6). Im Verbindungsrohr, am Einspeiserohr und in der Nähe der beheizten Wände wurde das CFD-Gitter lokal verfeinert. Der Einfluss des CFD-Gitters wird im Rahmen einer Gitterstudie in Abschnitt 2.1.2.4 untersucht.

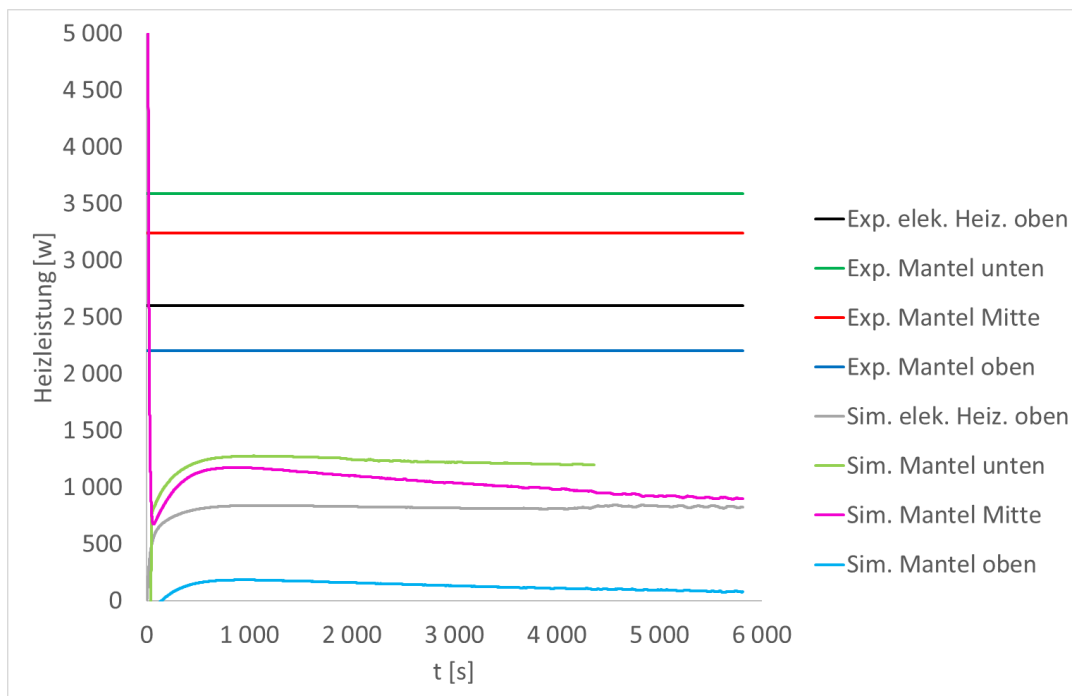


Abb. 2.3 Gemessene mittlere Heizleistung und berechneter integraler Wärmestrom an der Außenseite der Wände in der Simulation

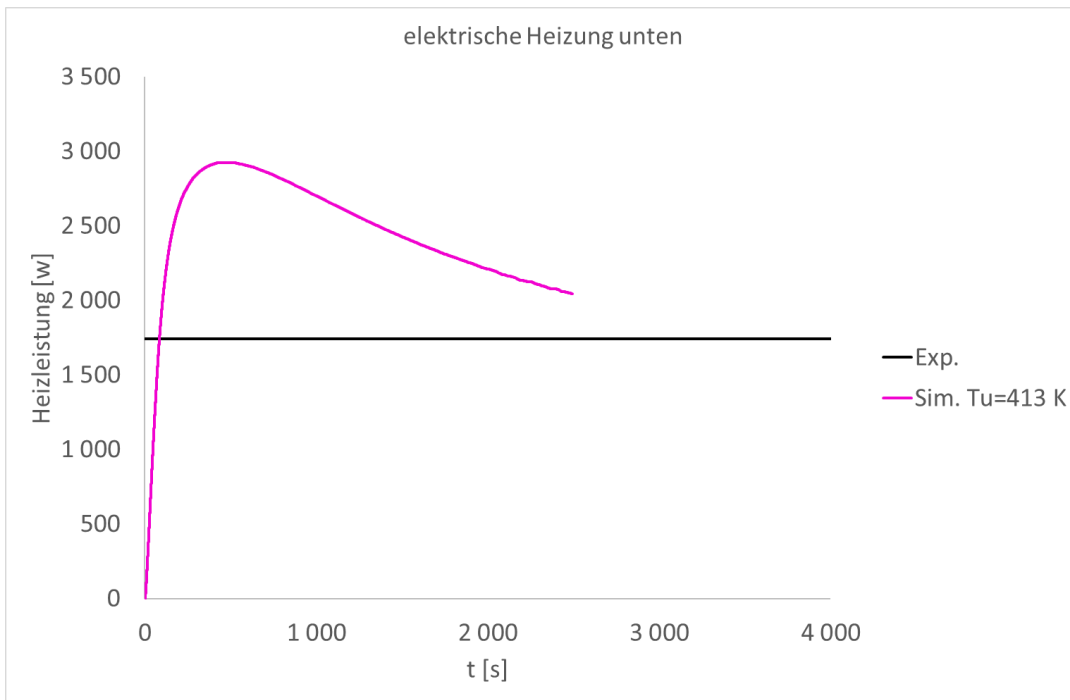


Abb. 2.4 Berechnete Heizleistung der unteren elektrischen Heizung bei fest vorgegebener Wandaußentemperatur von 413 K

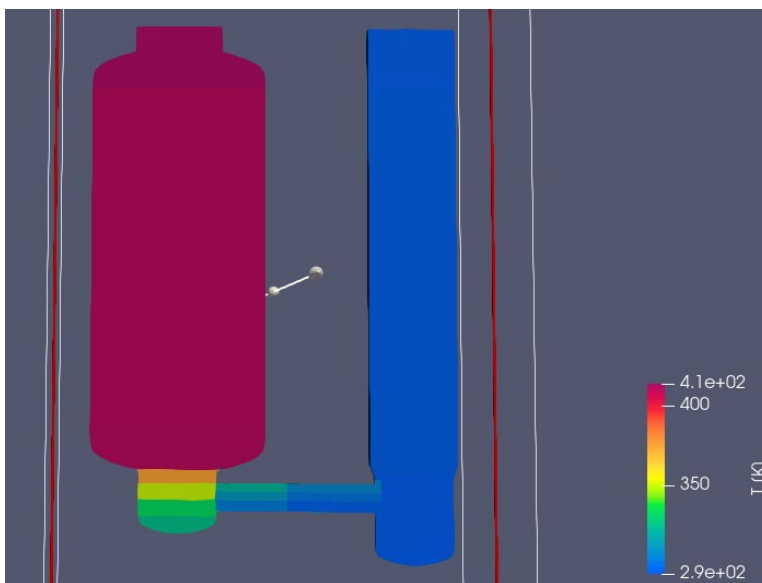


Abb. 2.5 Vorgegebene initiale Temperatur

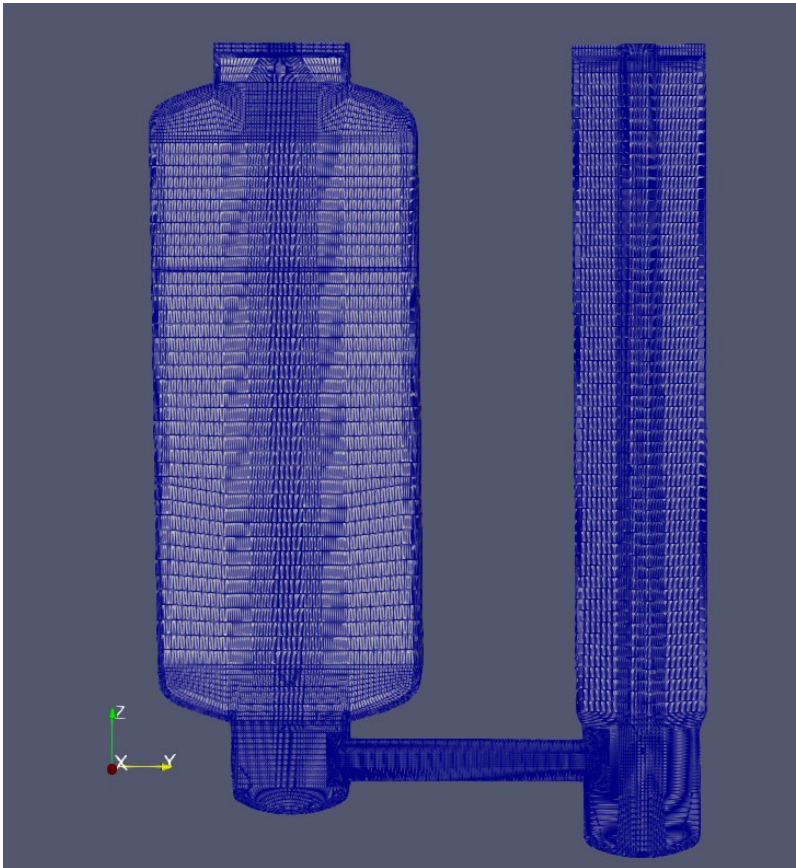


Abb. 2.6 Verwendetes CFD-Gitter bestehend aus 1,25 Millionen Zellen

2.1.2.3 Diskussion der Simulationsergebnisse

Vergleich der Gastemperaturen

In Abb. 2.7 ist die Temperaturverteilung im THAI+-Behälter und im Verbindungsrohr nach 2000 s dargestellt. Im TTV liegt die Temperatur bei über 400 K, im PAD liegt die Temperatur unterhalb von 310 K. Im TTV-Sumpf und im Verbindungsrohr ist eine sehr starke Temperaturschichtung erkennbar.

Die Temperatur im TTV oberhalb des Sumpfes wird von der Simulation in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet (Abb. 2.8). Da die gewählten Startbedingungen nicht exakt dem Experiment entsprechen, kommt es in der Anfangsphase zu etwas größeren Abweichungen. Nach ca. 400 s wird die Temperatur bis auf Abweichungen von maximal 1 – 2 K richtig berechnet. Dies zeigt, dass die Modellierung der Heizmäntel und der Lufteinspeisung erfolgreich war.

Im TTV-Sumpf liegt im Experiment eine starke Schichtung vor. Über eine Höhe von 60 cm nimmt die Temperatur um 75 K – 80 K ab (Abb. 2.10). Auch in der Simulation kommt es zu einem starken Gradienten im Sumpf. Die Temperatur in 1 m Höhe wird in der Simulation etwas überschätzt (bis zu 6 K). Bis ca. 3000 s wird die Temperatur in 40 cm Höhe mit nur geringen Abweichungen vom Experiment simuliert. Die Temperatur steigt an diesem Messpunkt in der Rechnung allerdings schneller an als im Versuch, so dass sich nach 7500 s größere Abweichungen (~ 11 K) ergeben. Grund für den stärkeren Temperaturanstieg ist die höhere Temperatur der rückströmenden Luft vom PAD in den TTV (Abb. 2.11). Beim Gradienten der Temperaturschichtung zeigen sich aber Unterschiede zwischen Rechnung und Versuch. In der Höhe von 80 cm wird in der Simulation eine deutlich höhere Temperatur berechnet. In 60 cm Höhe wird zu Beginn eine zu tiefe Temperatur vorhergesagt. Da an diesem Messpunkt – ähnlich wie in 40 cm Höhe – die Temperatur in der Simulation stärker ansteigt als im Experiment, wird die Temperatur am Ende der Simulation überschätzt.

Im Verbindungsrohr wird an zwei Positionen auf verschiedenen Höhen die Temperatur gemessen. Die erste liegt in der Nähe des TTV ($y = 1,1$ m). An dieser Messposition wird von der Simulation eine ähnliche Temperaturverteilung vorhergesagt. In der ersten Versuchsphase (bis 5850 s) wird am obersten Messpunkt (87,5 cm Höhe) die Temperatur um ~ 10 K überschätzt. An den tiefer liegenden Messstellen, die noch in der Strömung vom TTV zum PAD liegen (bis 65 cm Höhe) wird die Temperatur in der ersten Versuchsphase in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Die Temperatur der Rückströmung (vom PAD zum TTV) ist sowohl im Experiment als auch in der Simulation niedriger als die Strömung vom TTV zum PAD. Die Temperatur in 57,5 cm Höhe wird mit geringen Abweichungen richtig berechnet. Allerdings ist der Temperaturanstieg in der Rechnung stärker, so dass sich die Temperaturüberschätzung im Lauf der Simulation vergrößert. Am untersten Messpunkt (42,5 cm Höhe) ist die Temperatur im Versuch niedriger (5 K – 6 K) als in 57,5 cm Höhe. In der Simulation ist der Unterschied mit 1 K – 2 K geringer.

An der Messposition in der Nähe des PAD ist die Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment deutlich schlechter (Abb. 2.12) als in TTV-Nähe. Die Temperatur der Hinströmung wird insgesamt deutlich überschätzt. Am obersten Messpunkt (87,5 cm Höhe) wird die Temperatur um teils mehr als 25 K überschätzt. Auch an den tiefer gelegenen Messstellen in 80 cm – 65 cm Höhe) wird die Temperatur noch deutlich (über 10 K) überschätzt. Dies ist bemerkenswert, da auf diesen Höhen die Temperatur im Verbindungsrohr in 2,3 m Entfernung noch in guter Übereinstimmung berechnet werden

konnte. Die Ursache für diese Abweichung konnte nicht eindeutig bestimmt werden. Als wahrscheinlichste Ursache wurden geometrische Vereinfachungen bei der Simulation identifiziert. In der Simulation wird von einem glatten Verbindungsrohr ausgegangen. Im Experiment liegen aber hiervon Abweichungen vor. Es befinden sich im Verbindungsrohr Flansche, die beiden Kompensatoren und eine umfangreiche Messinstrumentierung (Abb. 2.2). Diese können die Strömung lokal beeinflussen und Turbulenz generieren, was letztendlich zu einer stärkeren Vermischung und zu einer Änderung des Strömungsprofils führen kann. Neben geometrischen Vereinfachungen kommt auch die Modellierung der Turbulenz mit dem 2-Gleichungsmodell SST in Betracht, die zum Beispiel die Richtungsabhängigkeit der Turbulenz nicht modellieren kann. Untersuchungen in den Abschnitten 2.1.2.5 und 2.1.2.6 zeigen, dass die initiale Wandtemperatur des Verbindungsrohrs, die Modellierung der unteren elektrischen Heizung und die Wärmestrahlungsmodellierung nicht die Hauptursache für die Abweichungen der Temperatur im Verbindungsrohr sind. Im unteren Teil des Verbindungsrohres nahe dem PAD ist sowohl im Experiment als auch in der Simulation die Temperatur an den Messtellen in 57,5 cm und in 42,5 cm Höhe sehr ähnlich. In der Simulation ist die Temperatur allerdings höher als im Experiment, bei 1000 s liegt die Überschätzung bei ~ 6 K und steigt dann auf 8 K – 10 K am Ende der ersten Versuchsphase (5850 s) an.

Im PAD wird die Temperatur an den Messtellen in 8,4 m und 5,6 m Höhe um 5 K – 7 K (Abb. 2.9) überschätzt. Im Laufe der Zeit nimmt dabei der Unterschied zwischen Simulation und Experiment leicht zu. Diese Abweichung ergibt sich aus der Überschätzung der Temperatur der in den PAD strömenden Luft. Auch im unteren Bereich des PAD wird die Temperatur überschätzt (Abb. 2.13). Dies führt zu einer zu hohen Temperatur des durch das Verbindungsrohr in den TTV zurückströmenden Gases.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass die Temperaturverteilung qualitativ richtig berechnet wird. Quantitativ werden die Temperaturen zufriedenstellend berechnet. Die Hauptabweichung ist, dass die Temperatur an den obersten Messtellen im Verbindungsrohr insbesondere in PAD-Nähe deutlich überschätzt wird. Dies führt im Weiteren auch zu einer moderaten Überschätzung der Temperatur im PAD und in der Rückströmung vom PAD zum TTV.

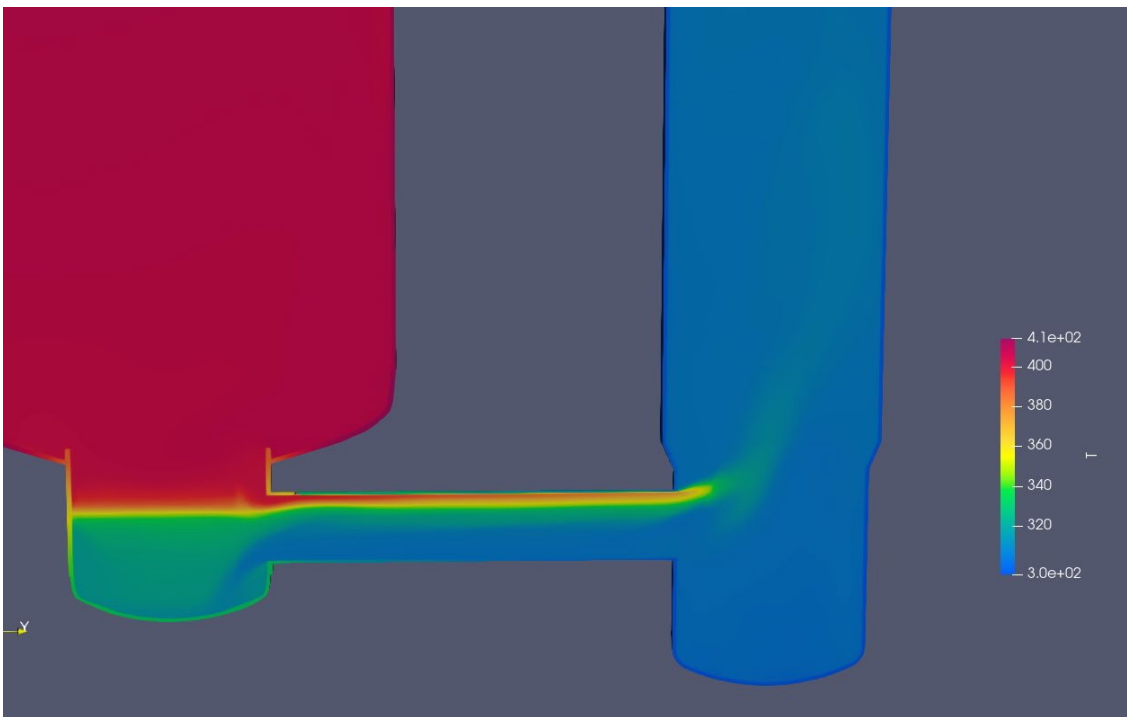
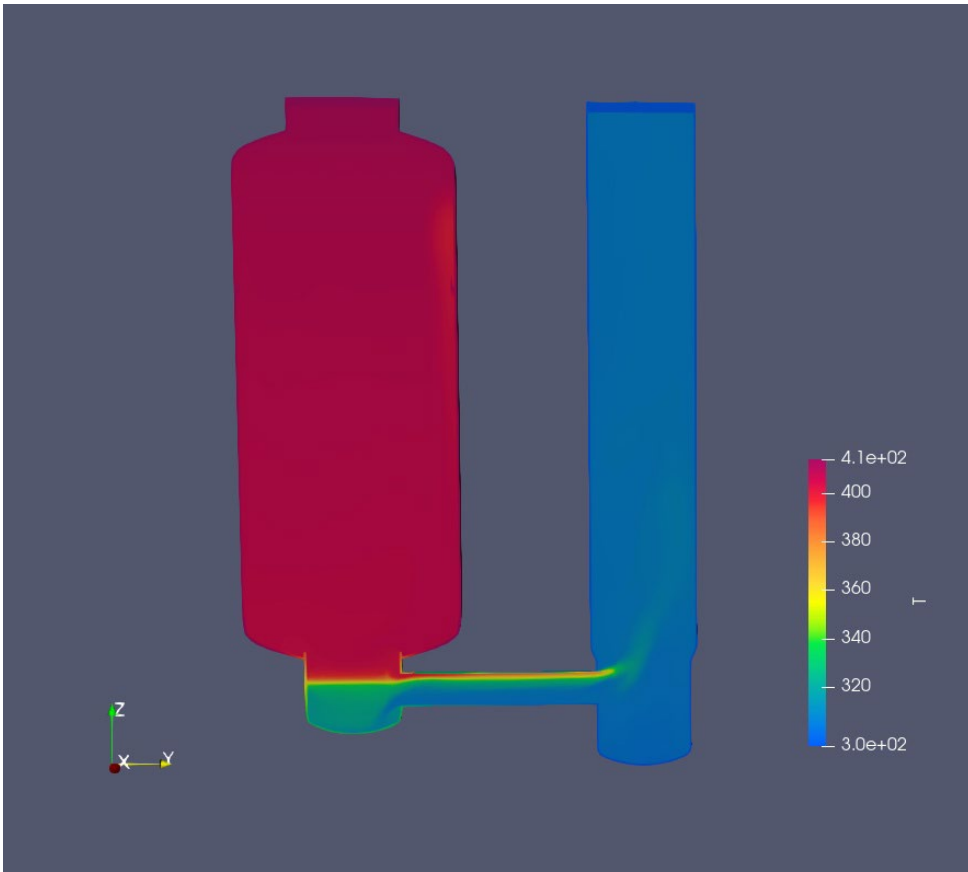


Abb. 2.7 Temperaturverteilung nach 2000 s, oben; THAI+-Behälter, unten: Verbindungsrohr

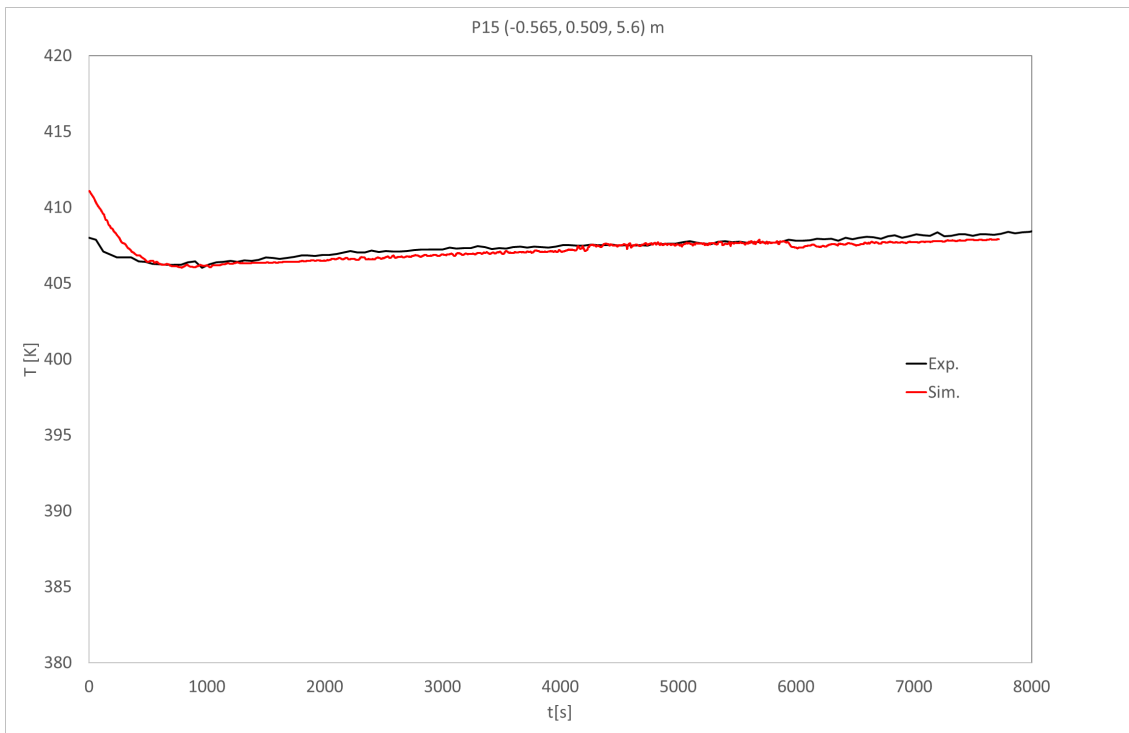
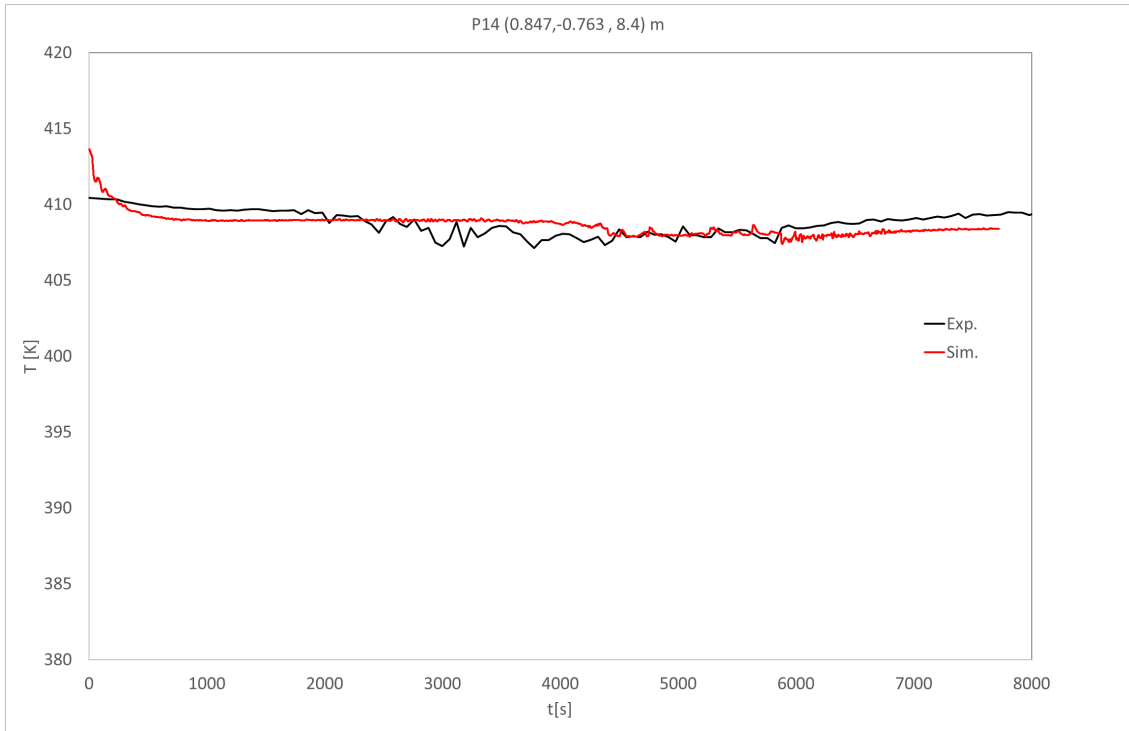


Abb. 2.8 Gastemperatur im TTV, oben: 8,4 m Höhe, unten: 5,6 m Höhe

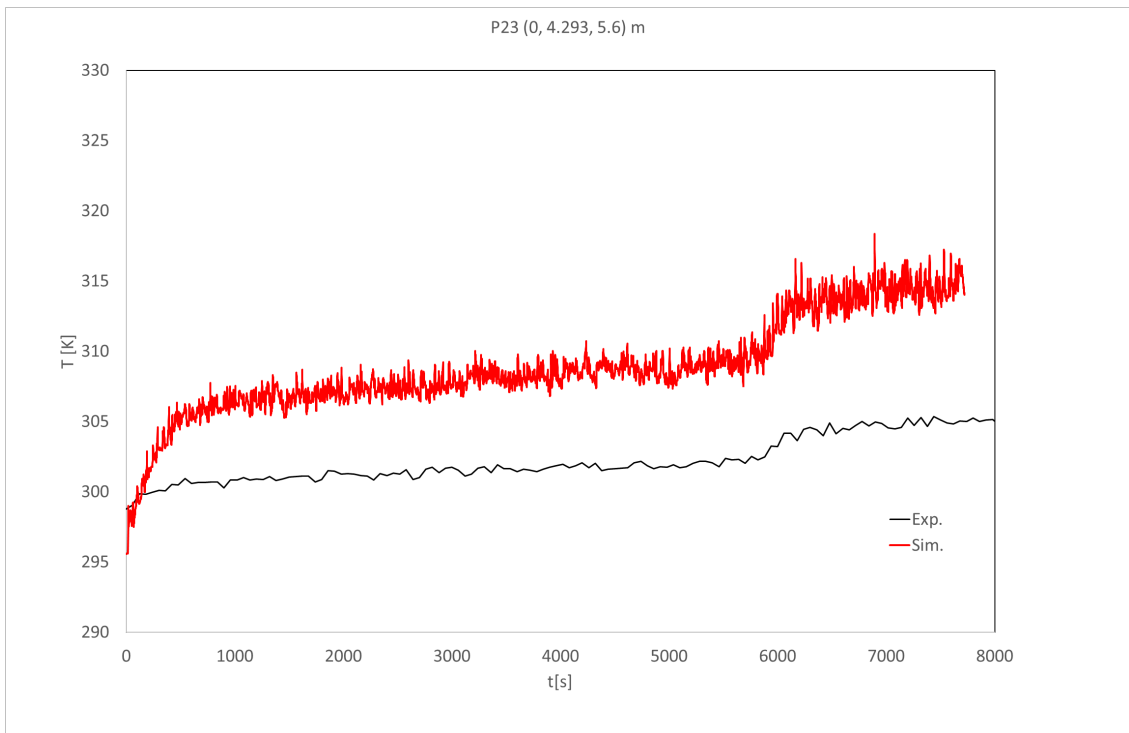
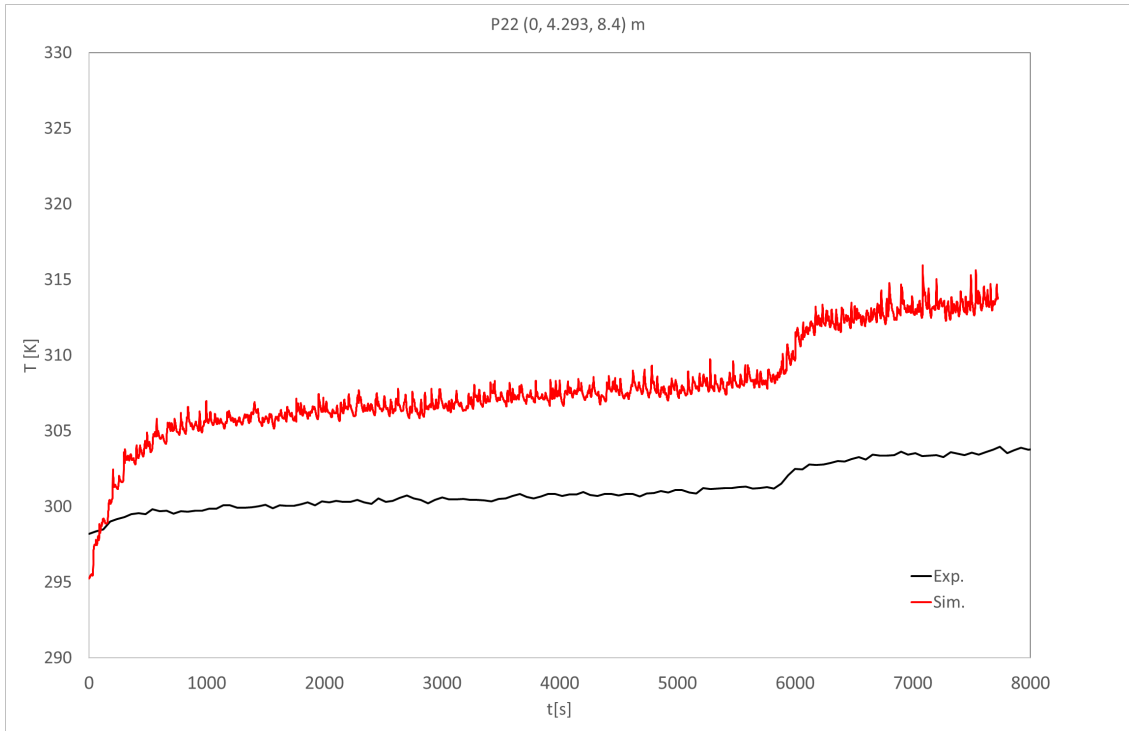


Abb. 2.9 Gastemperatur im PAD, oben: 8,4 m Höhe, unten: 5,6 m Höhe

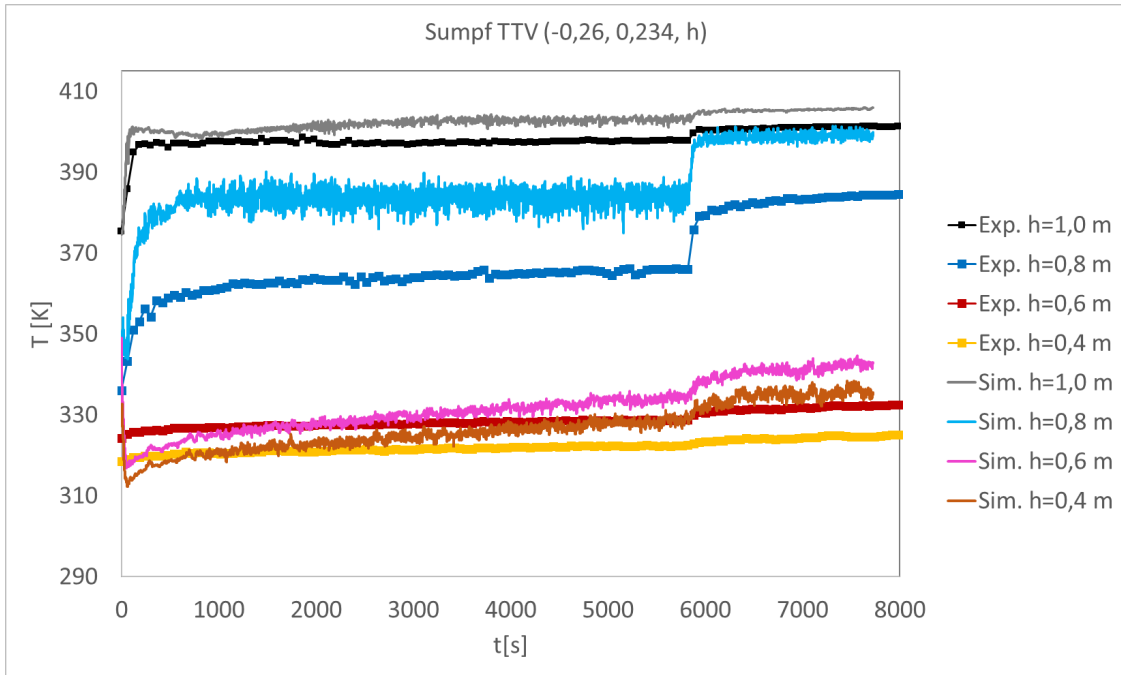


Abb. 2.10 Temperatur im TTV-Sumpf

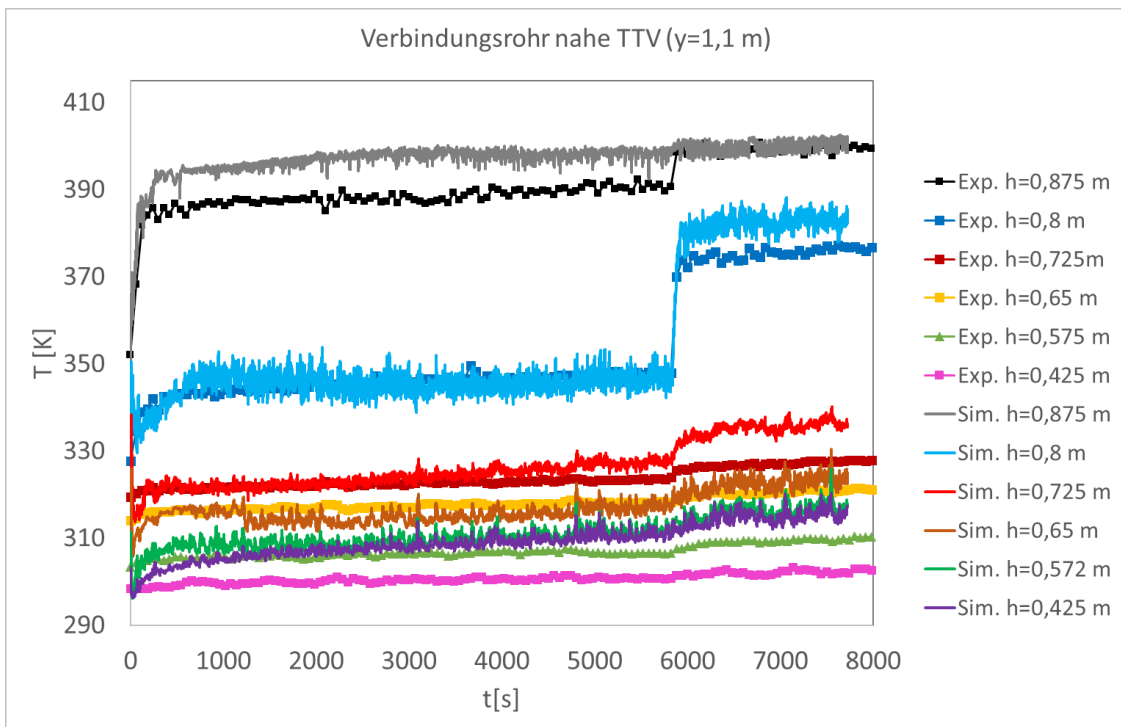


Abb. 2.11 Temperaturen im Verbindungsrohr in der Nähe des TTV (y = 1,1 m)

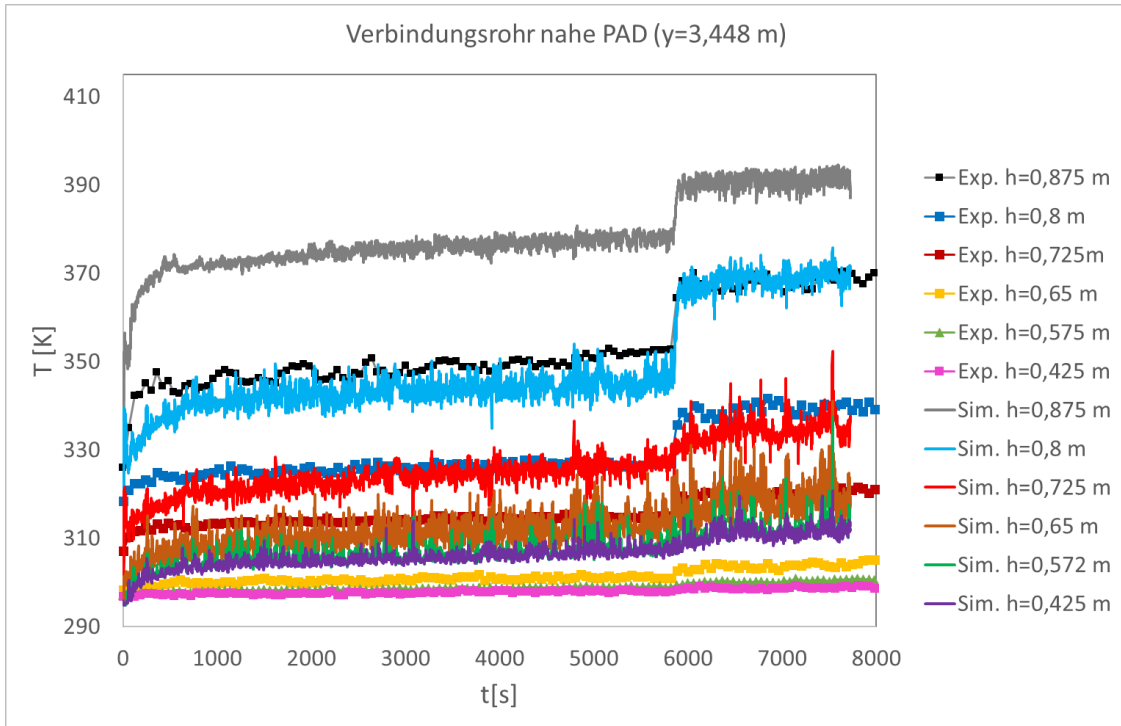


Abb. 2.12 Temperaturen im Verbindungsrohr in der Nähe des PAD ($y = 3,45$ m)

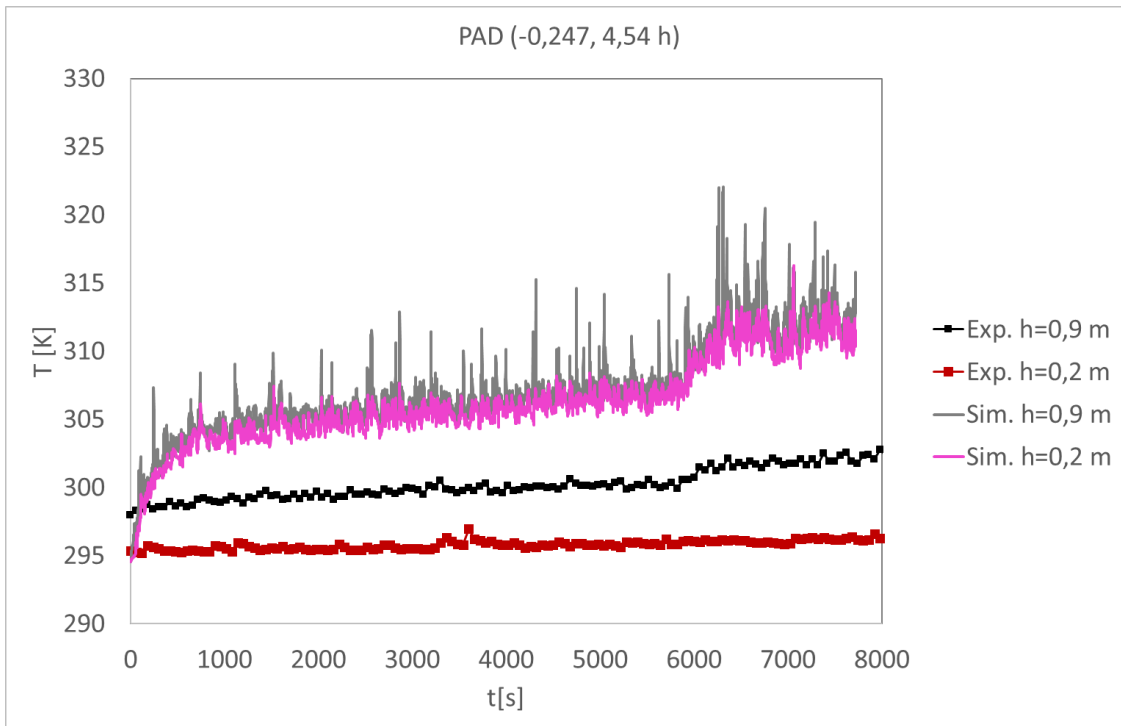


Abb. 2.13 Temperatur im unteren PAD

Geschwindigkeit im Verbindungsrohr

Im Versuch wurde die Geschwindigkeit im Verbindungsrohr detailliert gemessen. Die Berechnung der Gegenströmung im Verbindungsrohr ist eine wichtige Zielgröße. In der Simulation dauert es 1000 s – 1500 s, bis sich das Geschwindigkeitsfeld im THAI+-Behälter eingestellt hat (Abb. 2.16). Danach gibt es zwar noch zeitliche Oszillationen, während der ersten Versuchsphase ist aber kein Trend einer Veränderung des Mittelwertes erkennbar (Abb. 2.16).

Deshalb wurde die berechnete Geschwindigkeit über den Zeitraum 1500 s – 5750 s gemittelt und der Mittelwert mit dem Experiment verglichen Abb. 2.17.

Das Geschwindigkeitsfeld nach 2000 s ist in den Abb. 14 und Abb. 15 dargestellt. Die Gegenströmung wurde von der Simulation berechnet. Die Position des Umschlags der Strömungsgeschwindigkeit wird in Übereinstimmung mit dem Experiment bei 65 cm Höhe berechnet (Abb. 2.17). Dies lässt sich auch dem Vergleich der Temperaturen im Verbindungsrohr ableiten. Die Strömungsgeschwindigkeit im oberen Teil des Rohres ist bei der Simulation allerdings in der Nähe der Wände deutlich höher als im Experiment. Das Geschwindigkeitsmaximum liegt bei 86,6 cm Höhe relativ nahe bei der Rohrwand. Im Experiment wird dagegen ein deutlich flacheres Strömungsprofil gemessen. Die Stärke der Rückströmung wird deutlich besser vorhergesagt, aber auch hier ist die Strömung in der Simulation in Wandnähe etwas stärker. Auch bei den Abweichungen bei der Strömungsgeschwindigkeit können die geometrischen Vereinfachungen im Verbindungsrohr eine wichtige Rolle spielen. Die Untersuchung in Abschnitt 2.1.2.5 zum Einfluss der Wärmestrahlungsmodellierung zeigt, dass Abweichungen bei der Temperatur im unteren Bereich des THAI+-Behälters zu einer signifikanten Änderung der Strömung im Verbindungsrohr führen können. Daher können die Abweichungen bei der berechneten Gegenströmung nicht getrennt von den Unterschieden bei der Temperatur betrachtet werden.

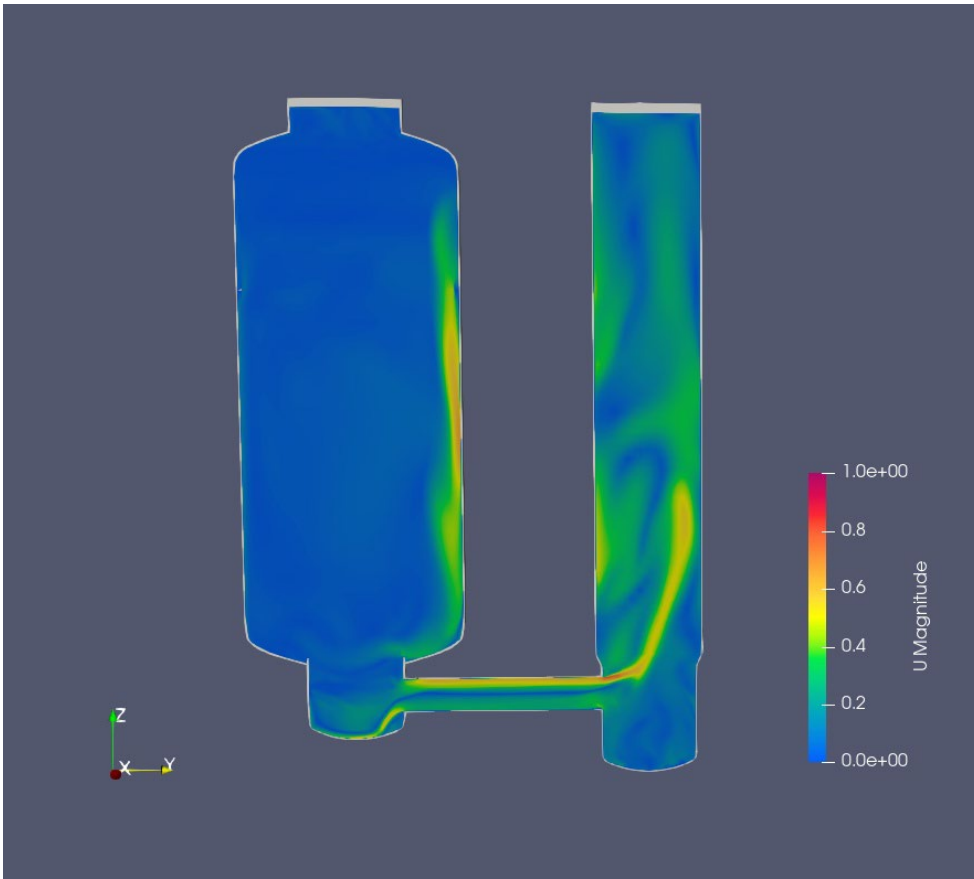


Abb. 2.14 Geschwindigkeit im THAI+-Behälter nach 2000 s

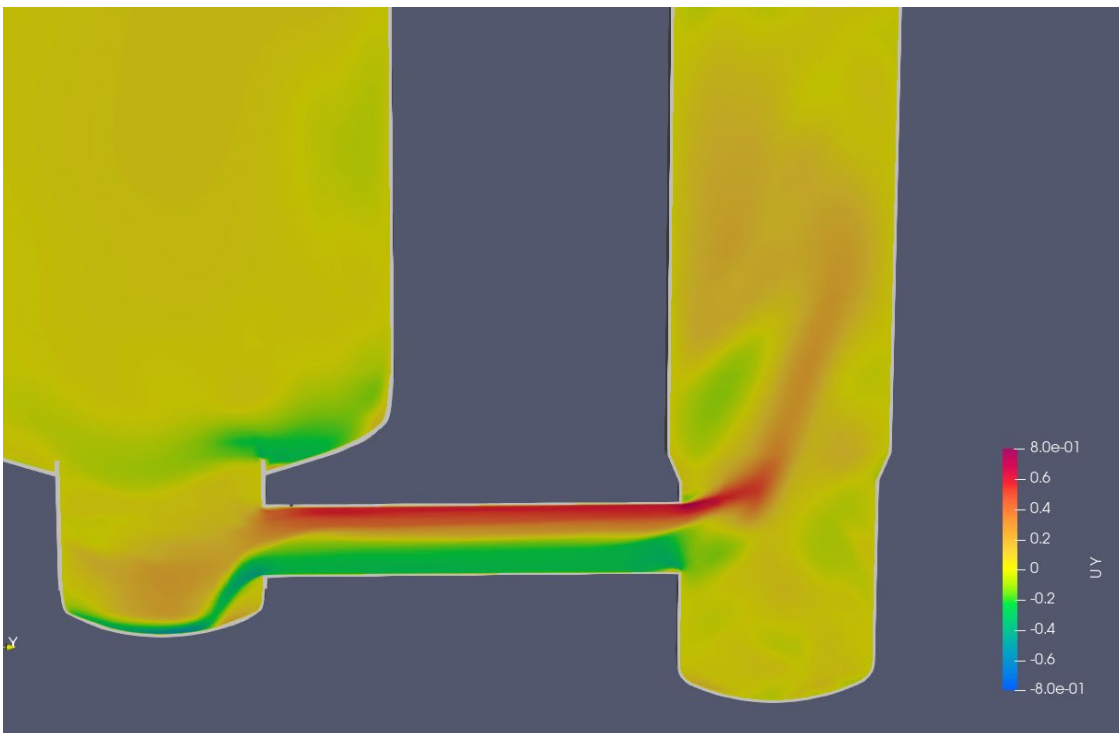


Abb. 2.15 y-Komponente v_y der Geschwindigkeit im Verbindungsrohr nach 2000 s

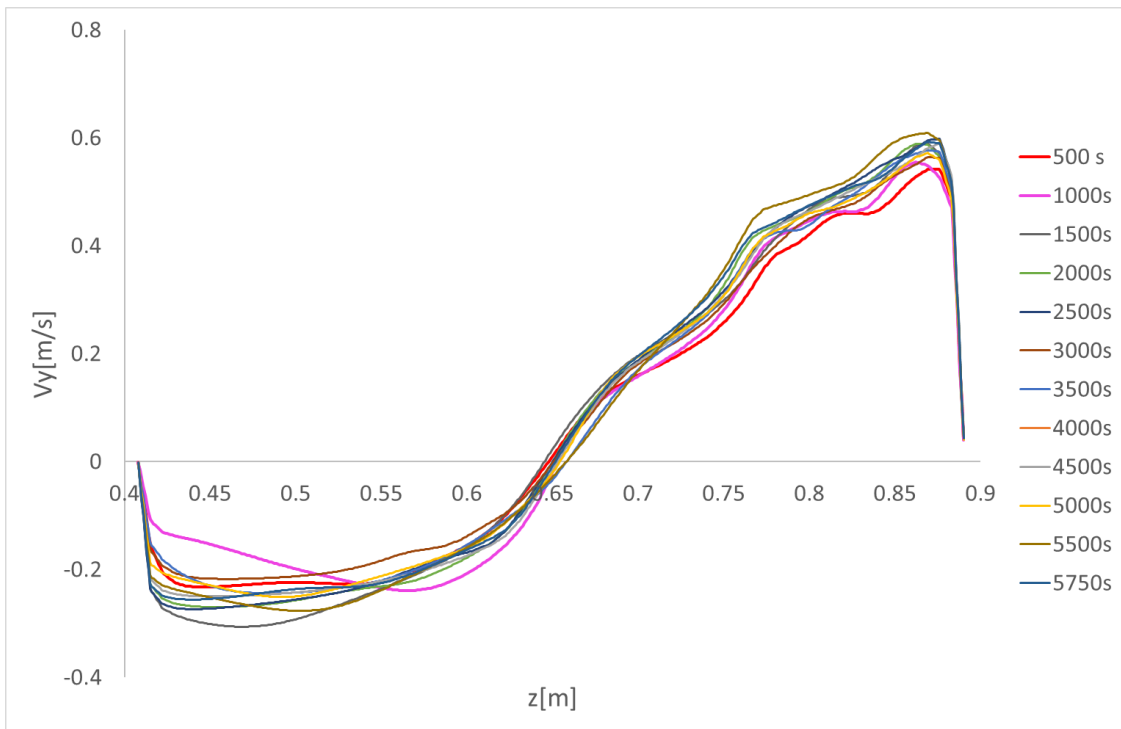


Abb. 2.16 Simulierte Geschwindigkeit im Verbindungsrohr zu unterschiedlichen Zeitpunkten

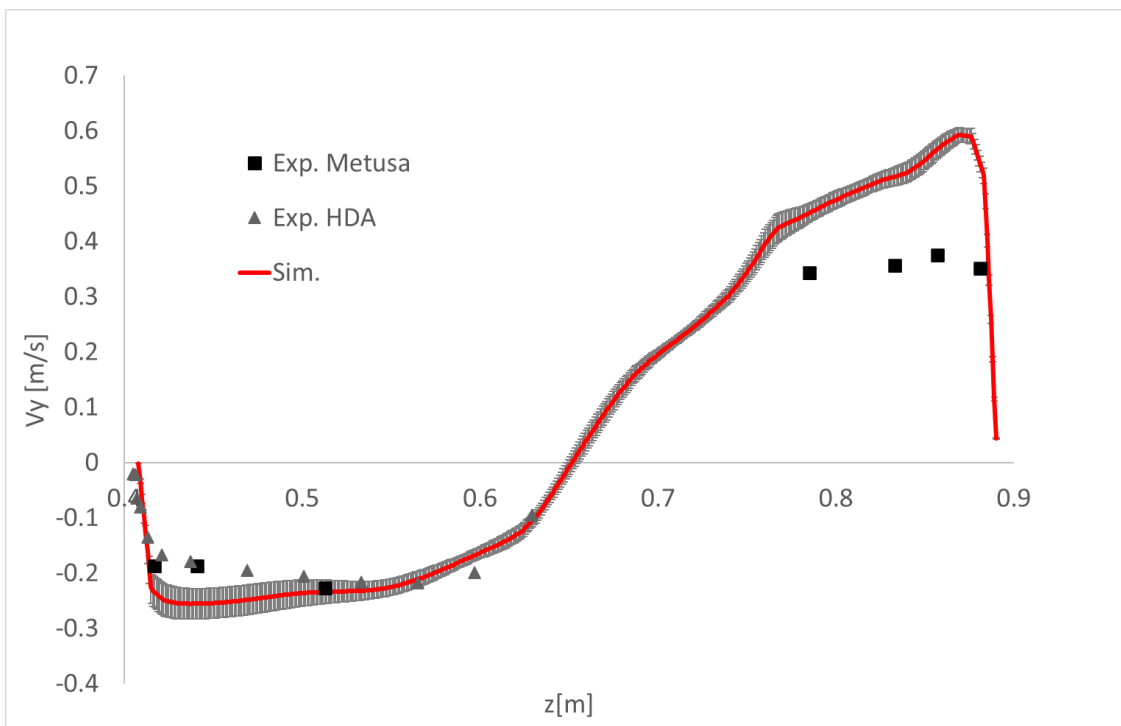


Abb. 2.17 Geschwindigkeit im Verbindungsrohr

Für die Simulation ist die Standardabweichung der zeitlichen Schwankung (1500 s – 5850 s) eingezeichnet.

2.1.2.4 Einfluss des CFD-Gitters

Im Folgenden wird der Einfluss des CFD-Gitters auf das Simulationsergebnis untersucht. Die Referenzrechnung (1,25e+6 Zellen) (siehe Abschnitt 2.1.2.3) wird mit einer Rechnung verglichen, bei der ein feineres Gitter (4,63e+6 Zellen) verwendet wurde. Das feinere Gitter besteht ebenfalls aus strukturierten Zellen (Hexaedern). Es wurde im gesamten Rechengebiet verfeinert. Laut OpenFOAM-Tool checkMesh erfüllt auch das feine Gitter die Qualitätsanforderungen von OpenFOAM. So ist die maximale Nicht-Orthogonalität 69, die mittlere 12. Die Gitterstudie wurde mit denselben physikalischen Modellen und numerischen Einstellungen wie die Referenzrechnung durchgeführt. Lediglich die Einstellung für laplacianSchemes und snGradSchemes wurde von 1 auf 0,4 abgesenkt. Ohne diese Änderung konnte keine konvergente Lösung gefunden werden.

Im TTV- und im PAD-Behälter oberhalb des Verbindungsrohres hat das verwendete Gitter keinen nennenswerten Einfluss auf die Temperatur (Abb. 2.18). Im TTV-Sumpf zeigt sich an der Messtelle in 0,8 m Höhe ein Einfluss des Rechengitters (Abb. 2.19). Oberhalb (1 m Höhe) und unterhalb des Punktes (0,6 m und 0,4 m Höhe) ist der Gittereinfluss gering. In diesem Bereich liegt ein sehr starker Gradient vor (~ 80 K über eine Höhe von 0,6 m). Im Verbindungsrohr zeigt sich ebenfalls insbesondere bei 0,8 m Höhe ein schwacher Einfluss des Rechengitters auf die Temperatur (Abb. 19, Abb. 20). Die berechnete Temperaturschichtung ist bis auf punktuelle Abweichungen allerdings nahezu identisch. Ein feineres Rechengitter führt nicht zu einer Absenkung der Temperatur an den obersten Messtellen und damit zu einer Verbesserung der Übereinstimmung mit dem Experiment (siehe Abb. 2.11, Abb. 2.12). Insgesamt zeigt die Studie zur Gittersensitivität eine gute Übereinstimmung der Simulationen mit unterschiedlich feinem Gitter. Die berechnete Temperaturverteilung ist nahezu gleich, es treten nur punktuell Abweichungen auf. Daher ist davon auszugehen, dass Abweichungen zwischen Experiment und Simulation nicht hauptsächlich auf ein zu grobes CFD-Gitter zurückzuführen sind.

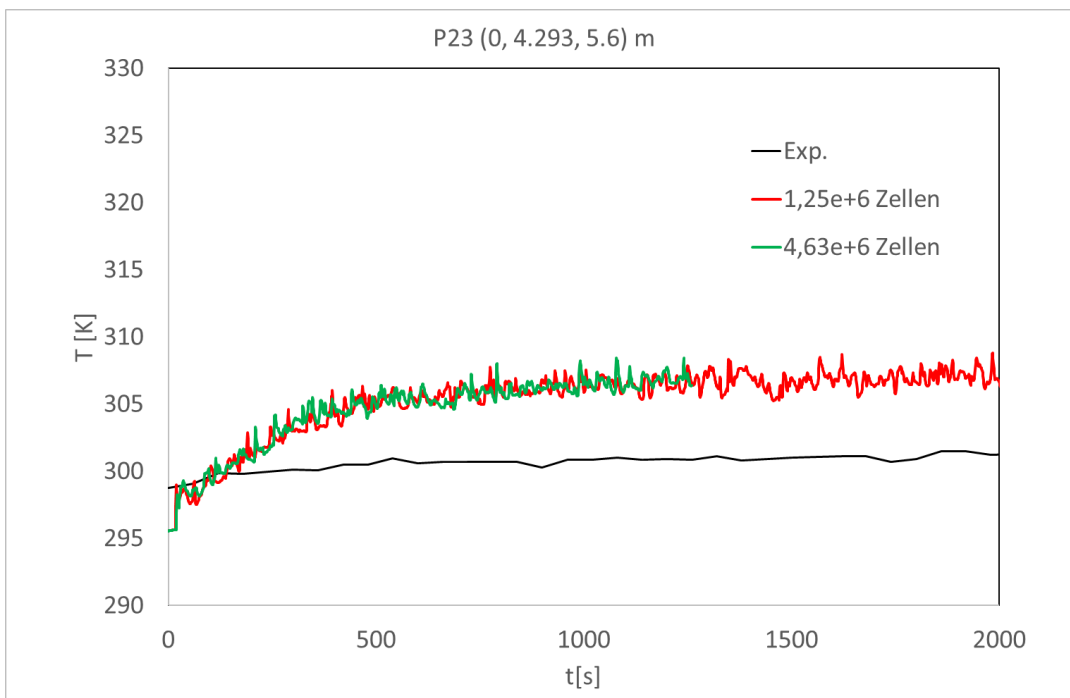
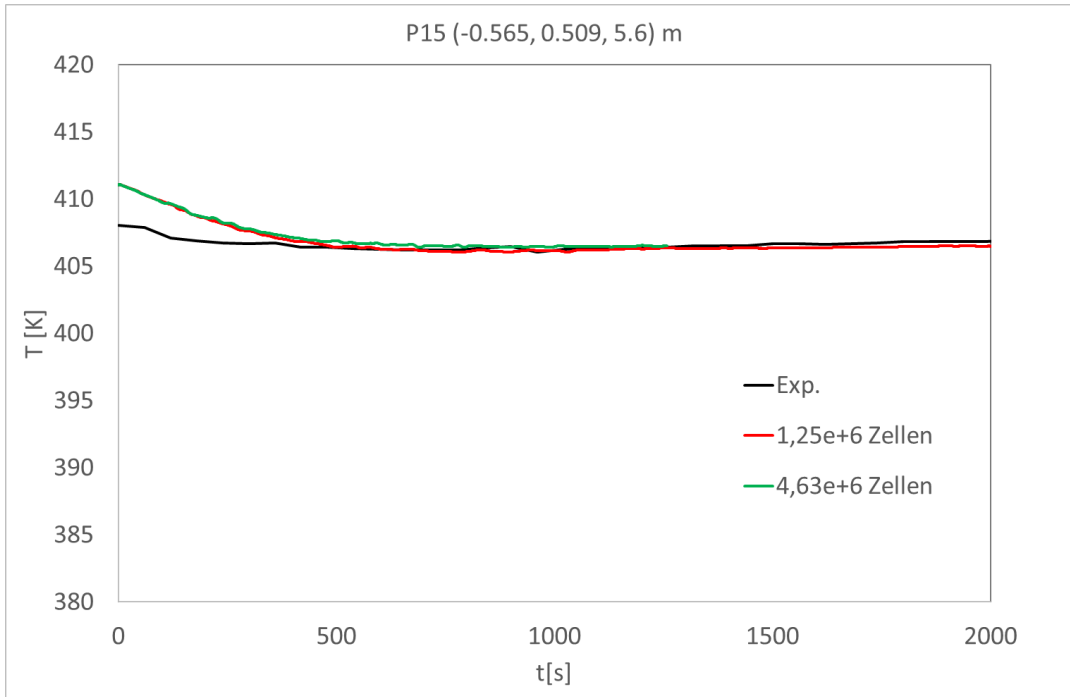


Abb. 2.18 Temperatur im TTV (oben) und im PAD (unten) in 5,6 m Höhe bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter

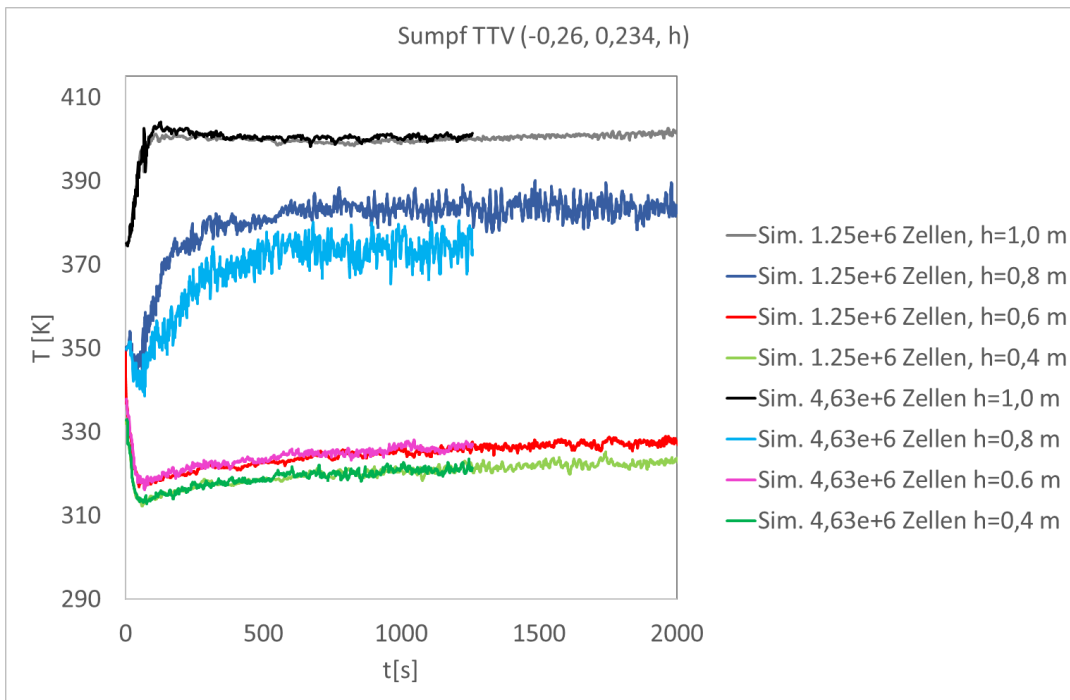


Abb. 2.19 Temperatur im TTV-Sumpf bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter

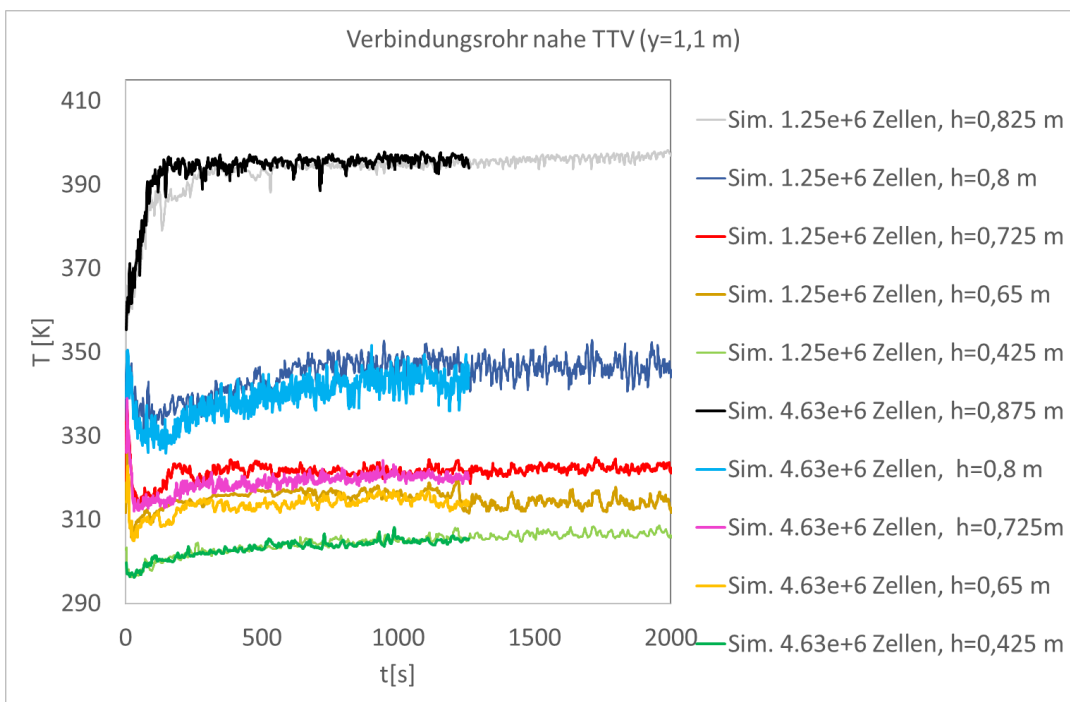


Abb. 2.20 Temperatur im Verbindungsrohr nahe TTV bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter

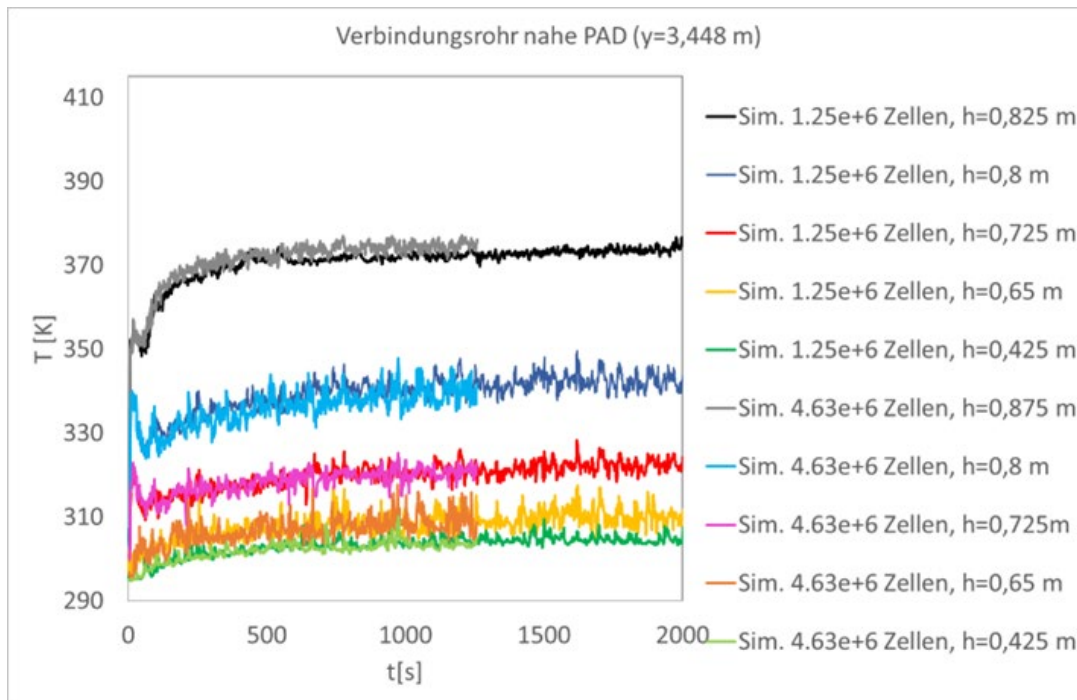


Abb. 2.21 Temperatur im Verbindungsrohr nahe PAD bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter

2.1.2.5 Untersuchung zum Einfluss der Wärmestrahlung

In den bisherigen Simulationen wurde unterstellt, dass Luft Wärmestrahlung mit einem Absorptionskoeffizienten von $0,1 \text{ (m bar)}^{-1}$ absorbiert/emittiert. Dies entspricht einer Luftfeuchtigkeit von 1 % Dampf mit einer Dampfabsorptionskonstanten von 10 (m bar)^{-1} . Die Wände emittieren/absorbieren ebenfalls Wärmestrahlung, die Wandemissivität wurde entsprechend Untersuchungen in HYMERES-2 mit 0,4 gewählt /SCH 22b/. Da der Dampfgehalt der Luft sowie die Annahme einer wellenlängenunabhängigen Absorptionskonstanten von 10 (m bar)^{-1} mit Unsicherheiten behaftet ist, wird untersucht, welchen Einfluss die Wärmestrahlung hat. Dazu wurde eine zusätzliche Simulation ohne Wärmestrahlungsmodellierung durchgeführt.

Im TTV oberhalb des Verbindungsrohres hat die Wärmestrahlungsmodellierung einen geringen Einfluss. Lediglich im oberen Bereich des Behälters (8,4 m Höhe, Abb. 2.22) dauert es deutlich länger, bis die etwas zu hohe Initialisierungstemperatur den experimentellen Wert erreicht. Ansonsten stimmen die Temperaturen beider Simulationen gut mit dem Experiment überein. Bei 0,8 m Höhe stimmen beide Simulationen ebenfalls noch gut überein, die gemessene Temperatur wird aber deutlich überschätzt (Abb. 2.23). An den tiefer gelegenen Messstellen im TTV-Sumpf führt die Berücksichtigung der

Wärmestrahlung zu einer höheren Temperatur (P20 bei 2000 s \sim 16 K, Abb. 2.23). Die Berücksichtigung von Wärmestrahlung führt zu einer guten Übereinstimmung mit dem Experiment, der Temperaturanstieg in dieser Simulation ist allerdings etwas stärker als gemessen (Abb. 2.23).

Für die Temperatur im PAD einschließlich des unteren Bereiches spielt die Wärmestrahlungsmodellierung keine signifikante Rolle (Abb. 2.24, Abb. 2.25). Unabhängig vom Wärmestrahlungsmodell wird die Temperatur im PAD etwas überschätzt. Im Laufe der Simulation steigt die Temperatur ohne Wärmestrahlungsmodell etwas schwächer an, so dass sich nach 6000 s ein Unterschied von 1 K – 2 K ergibt.

Im Verbindungsrohr gab es zwei Positionen, an denen die Temperatur auf unterschiedlichen Höhen gemessen wird (Abb. 2.2). Die erste Position befindet sich in der Nähe des TTV ($y = 1,104$ m). Am dem obersten Messpunkt hat die Wärmestrahlungsmodellierung keinen Einfluss (Abb. 2.26), an den tiefergelegenen Punkten (Abb. 2.26, Abb. 2.27) führt die Berücksichtigung von Wärmestrahlung zu einer teilweise deutlichen Erhöhung der Temperatur (auf 0,725 m Höhe (P2) 13 K). Die zweite Position befindet sich nahe dem PAD ($y = 3,45$ m). Auch an dieser Position führt die Vernachlässigung von Wärmestrahlung zu geringeren Temperaturen (Abb. 2.28). Der Vergleich mit gemessenen Temperaturen zeigt, dass unabhängig vom Wärmestrahlungsmodell die Abweichungen zum Experiment (deutlich zu hohe Temperaturen an den obersten Messstellen, Überschätzung der Temperatur im unteren Rohrbereich) bestehen bleiben.

An den meisten Messpunkten zeigt die Simulation mit Wärmestrahlungsmodellierung eine etwas bessere Übereinstimmung, aber solange noch große Abweichungen im Verbindungsrohr zwischen Simulationen und Experiment unabhängig von der Wärmestrahlungsmodellierung vorliegen, ist eine Bewertung der Wärmestrahlungsmodellierung wenig sinnvoll. Die Wärmestrahlungsmodellierung ist aber nicht Hauptursache für die Abweichungen der Simulationen vom Experiment.

Wie schon in Abschnitt 2.1.2.3 diskutiert, wird auch hier das über die erste Versuchsphase (ab 1000 s) gemittelte Geschwindigkeitsprofil verglichen. Es zeigt sich ein deutlicher Einfluss der Wärmestrahlungsmodellierung auf das Geschwindigkeitsprofil. Sowohl bei der Strömung vom TTV zum PAD in der oberen Rohrhälfte als auch bei der Rückströmung (PAD zum TTV) im unteren Teil des Rohrs ist die Geschwindigkeit bei Vernachlässigung von Wärmestrahlung deutlich niedriger. Die Form des Profils für die Hinströmung ist in beiden Simulationen sehr ähnlich, das Geschwindigkeitsmaximum ist in

beiden Rechnungen bei einer Höhe von etwa 0,87 m. In der Messung ist dagegen kein ausgeprägtes Maximum erkennbar und die Strömung ist in Wandnähe deutlich langsamer. Der Nullpunkt der Geschwindigkeit liegt in beiden Simulationen etwa in der Rohrmitte und stimmt gut mit dem Experiment überein. Bei der Simulation mit Wärmestrahlung wird auch in Wandnähe die höchste Geschwindigkeit gemessen. Bis auf den Bereich des Maximums wird die Geschwindigkeit der Rückströmung in guter Übereinstimmung mit dem Experiment gemessen. In der Simulation ohne Wärmestrahlungsmodellierung wird dagegen ein flacheres Strömungsprofil gemessen, was dem im Experiment entspricht. Die Geschwindigkeit wird allerdings deutlich ($\sim 40\%$ rel. Fehler) unterschätzt.

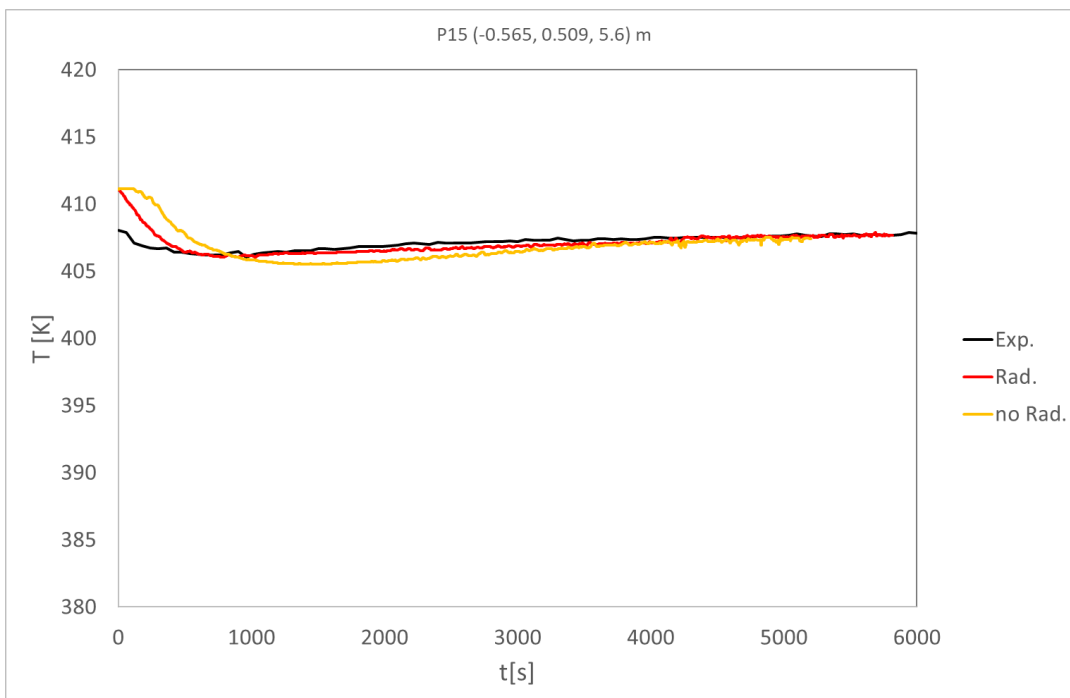
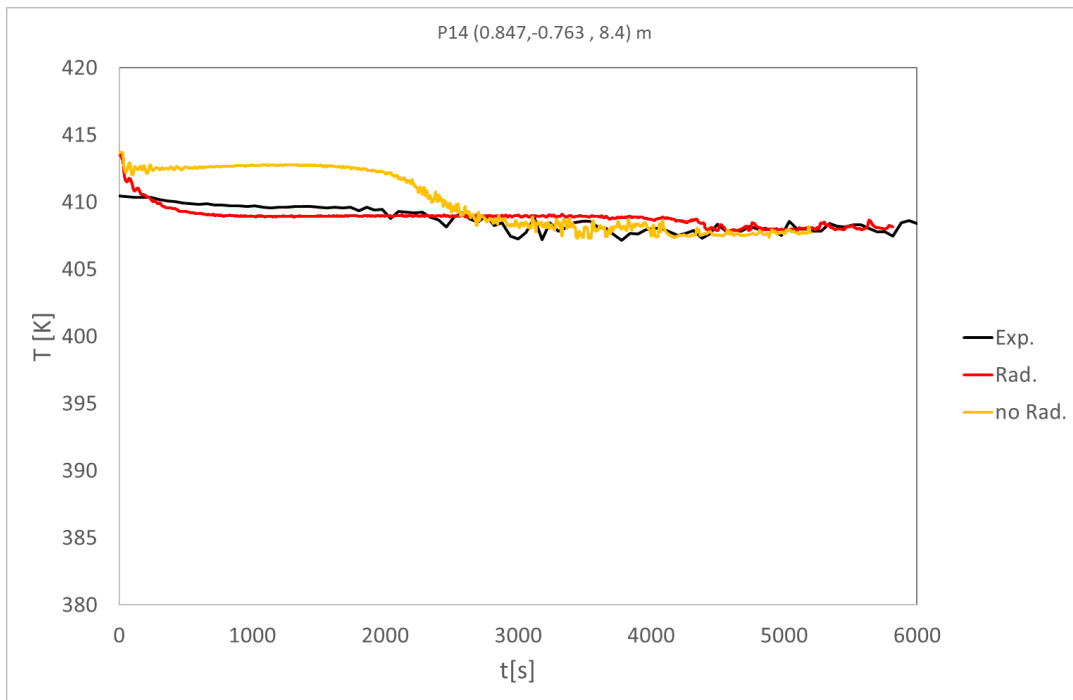


Abb. 2.22 Temperatur im TTV, oben: 8,4 m Höhe, unten: 5,6 m Höhe

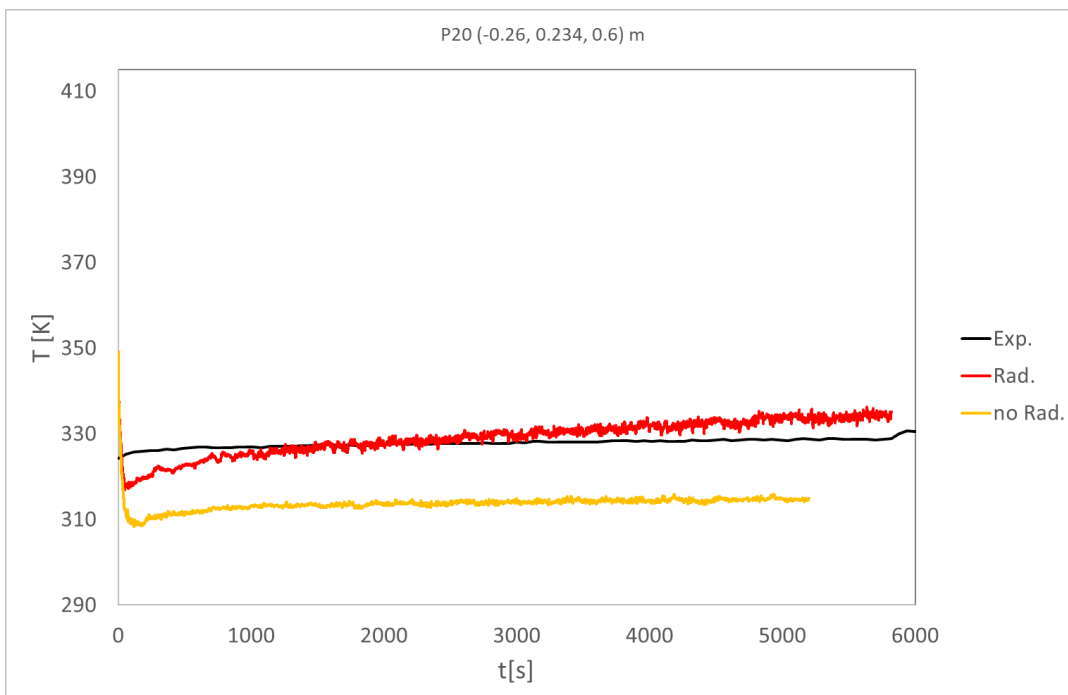
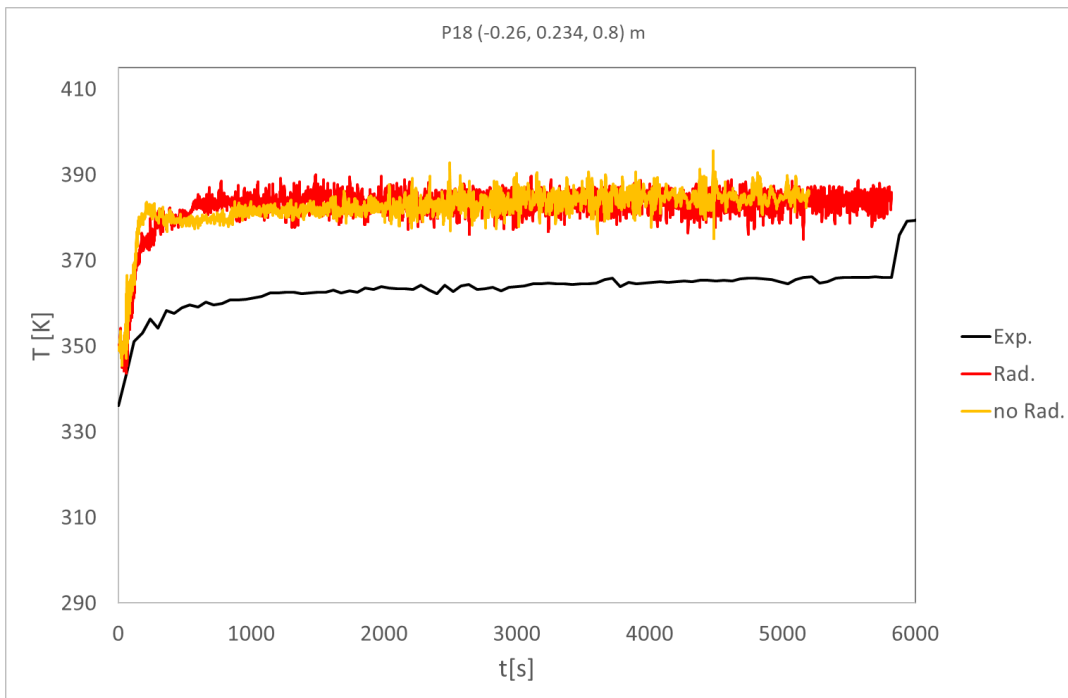


Abb. 2.23 Temperatur im Sumpf des TTV, oben: 0,8 m Höhe, unten: 0,6 m Höhe

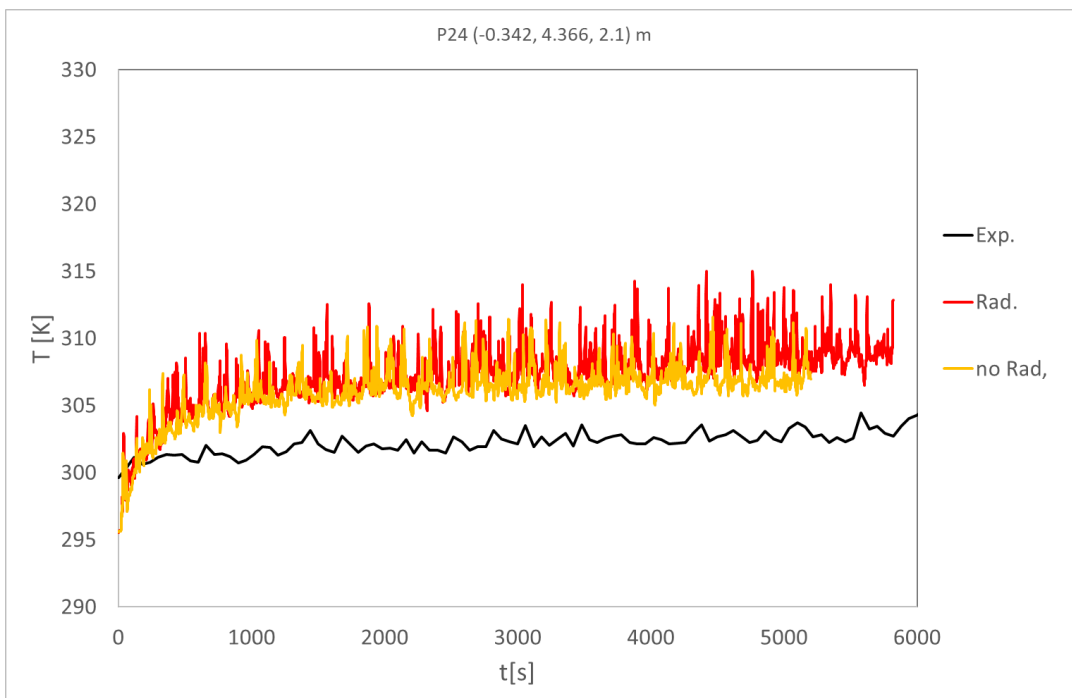
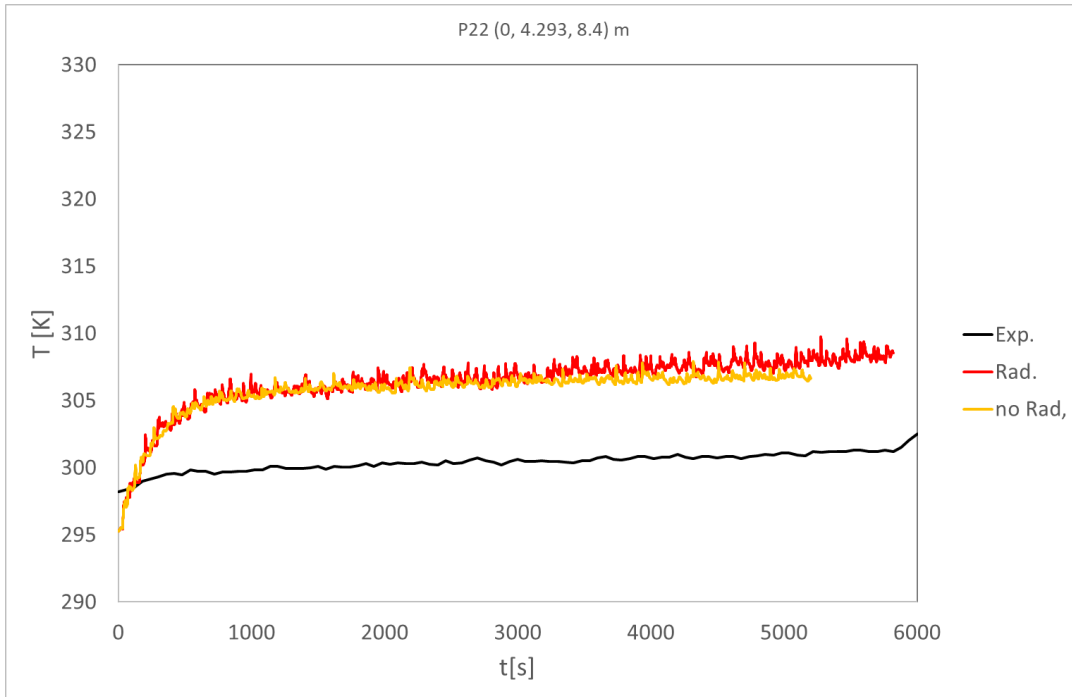


Abb. 2.24 Temperatur im PAD, oben: 8,4 m Höhe, unten: 5,6 m Höhe

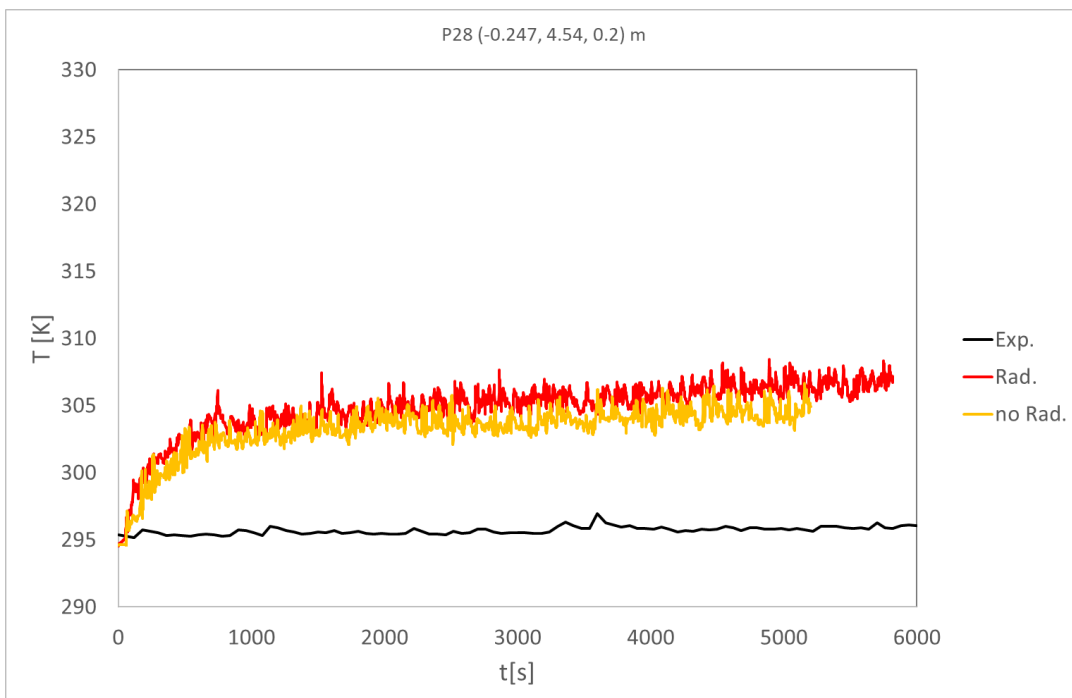
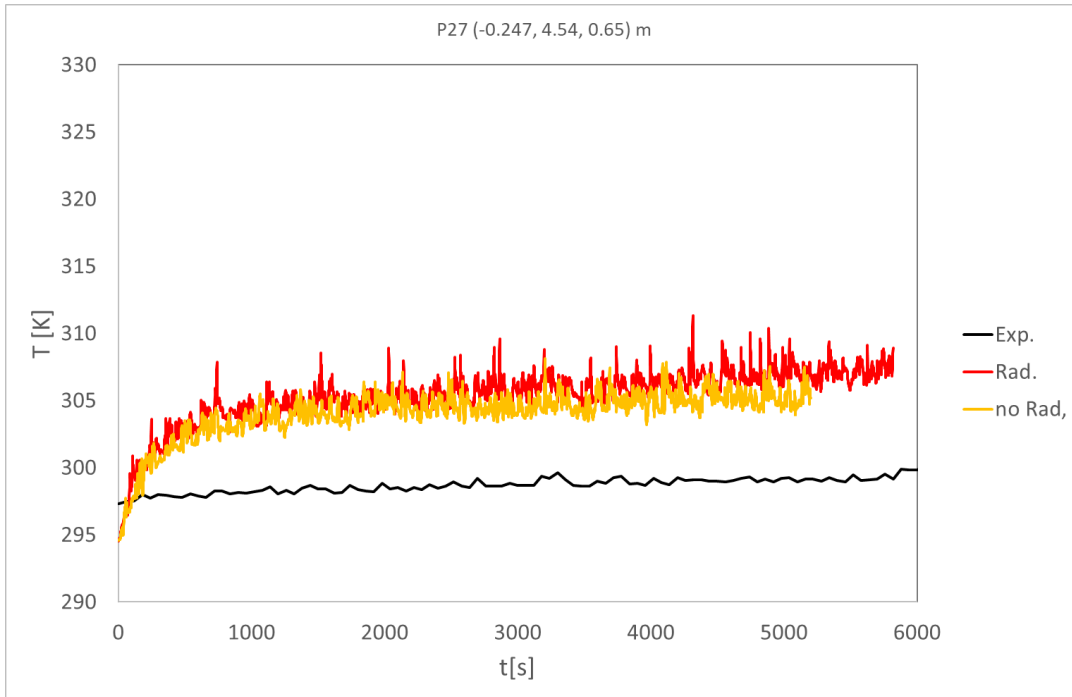


Abb. 2.25 Temperatur im PAD, oben: 0,65 m Höhe, unten: 0,2 m Höhe

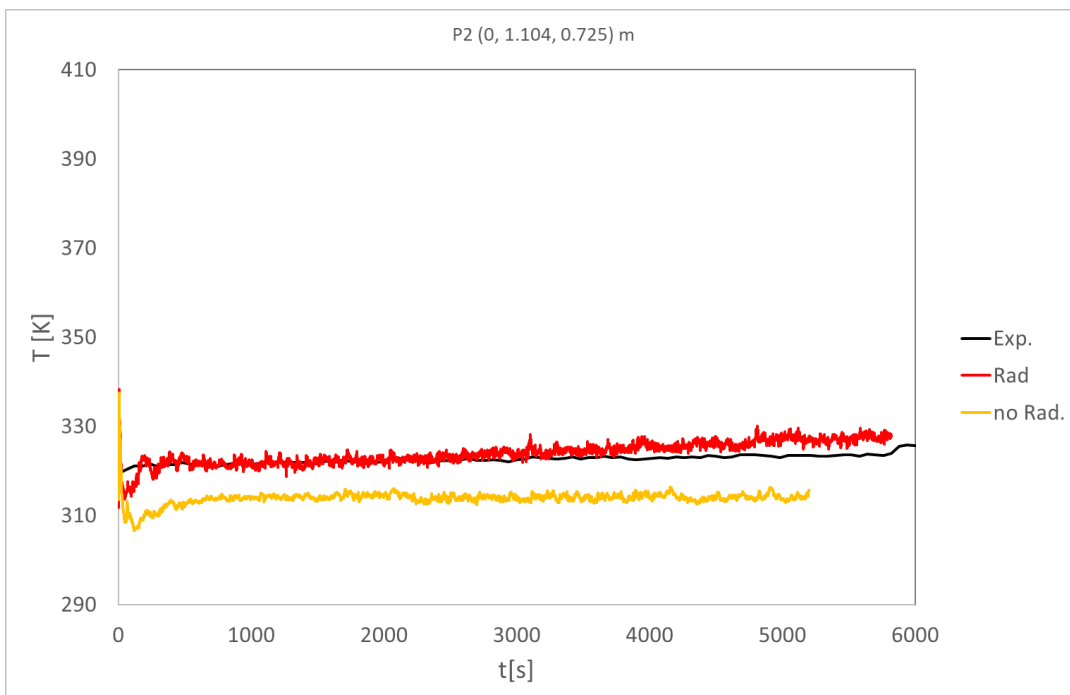
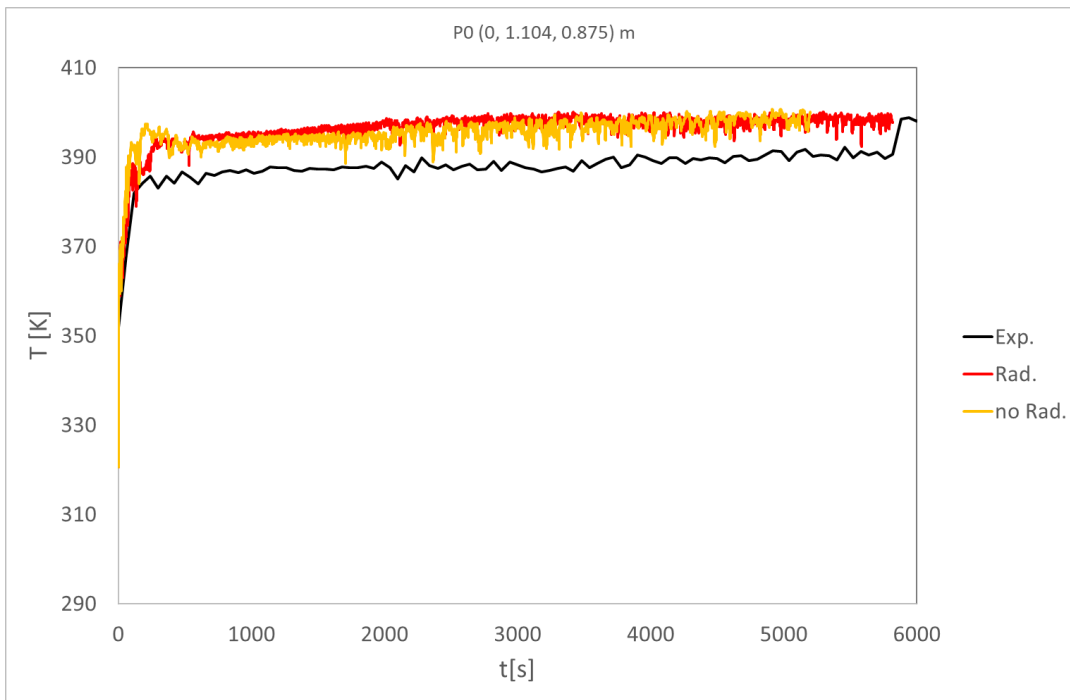


Abb. 2.26 Temperatur im Verbindungsrohr nahe TTV, oben: 0,875 m Höhe, unten: 0,725 m Höhe

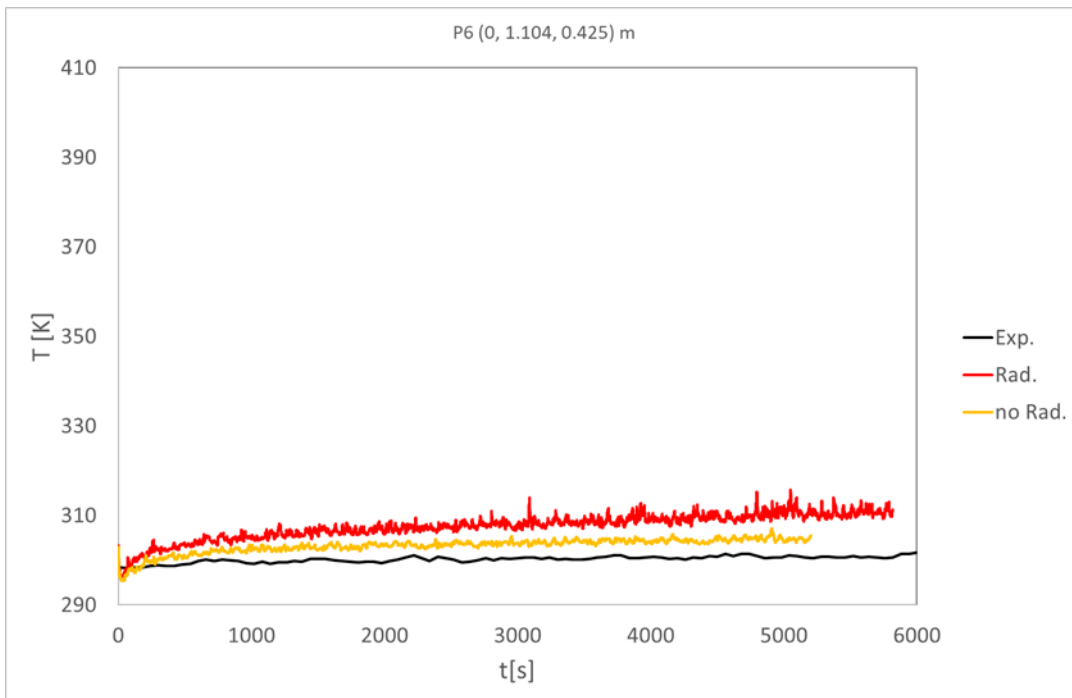
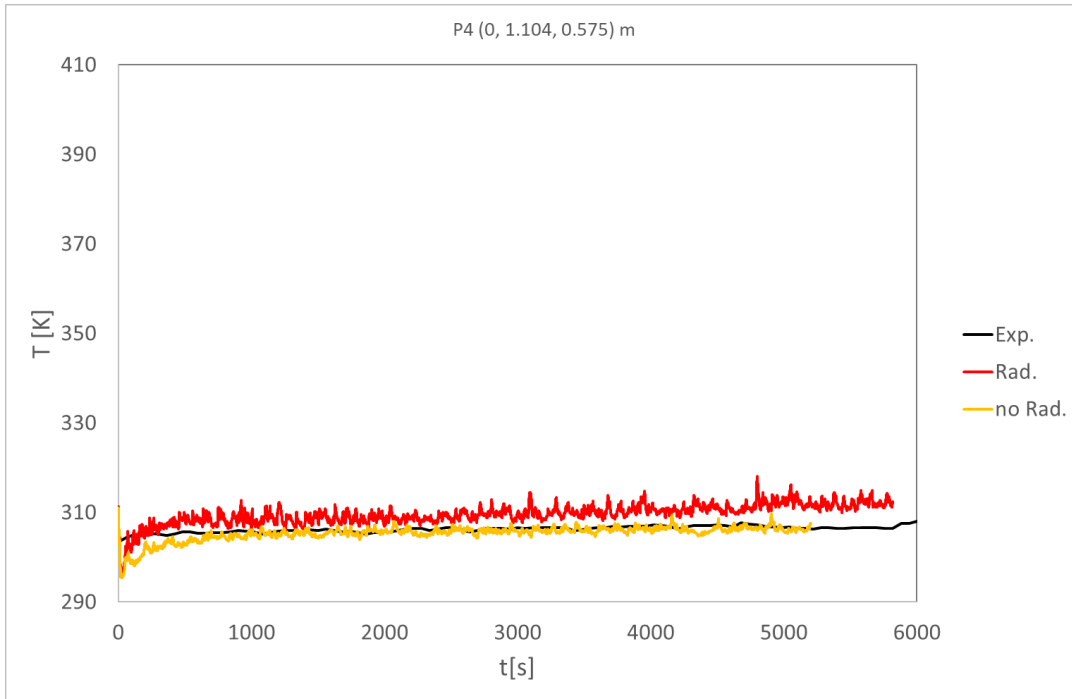


Abb. 2.27 Temperatur im Verbindungsrohr nahe TTV, oben: 0,575 m Höhe, unten: 0,425 m Höhe

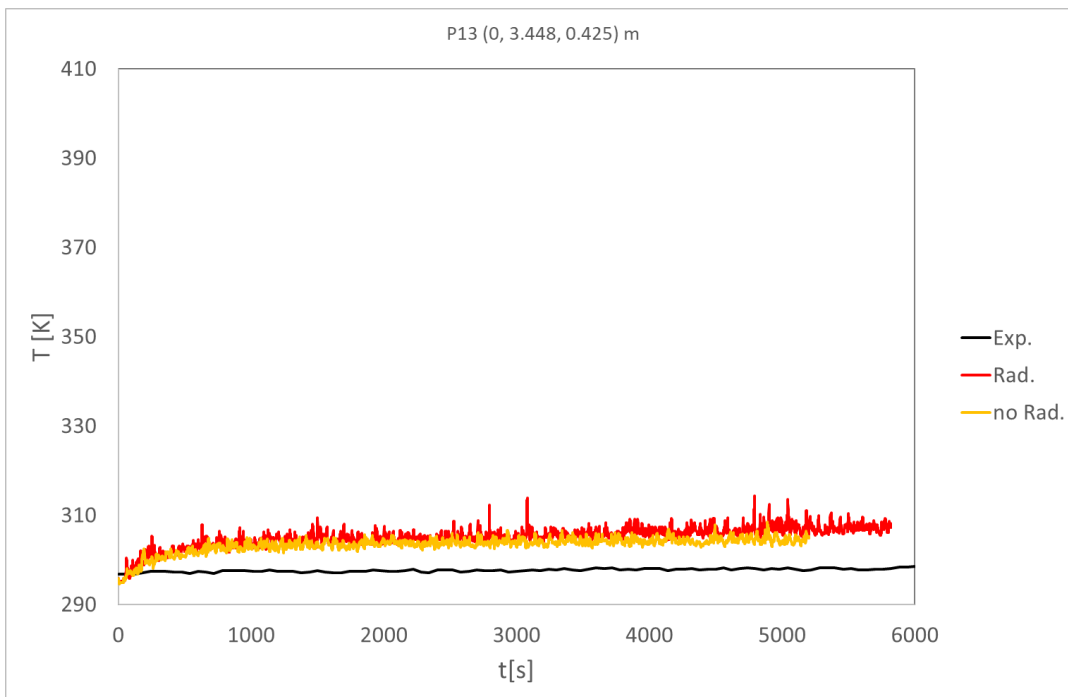
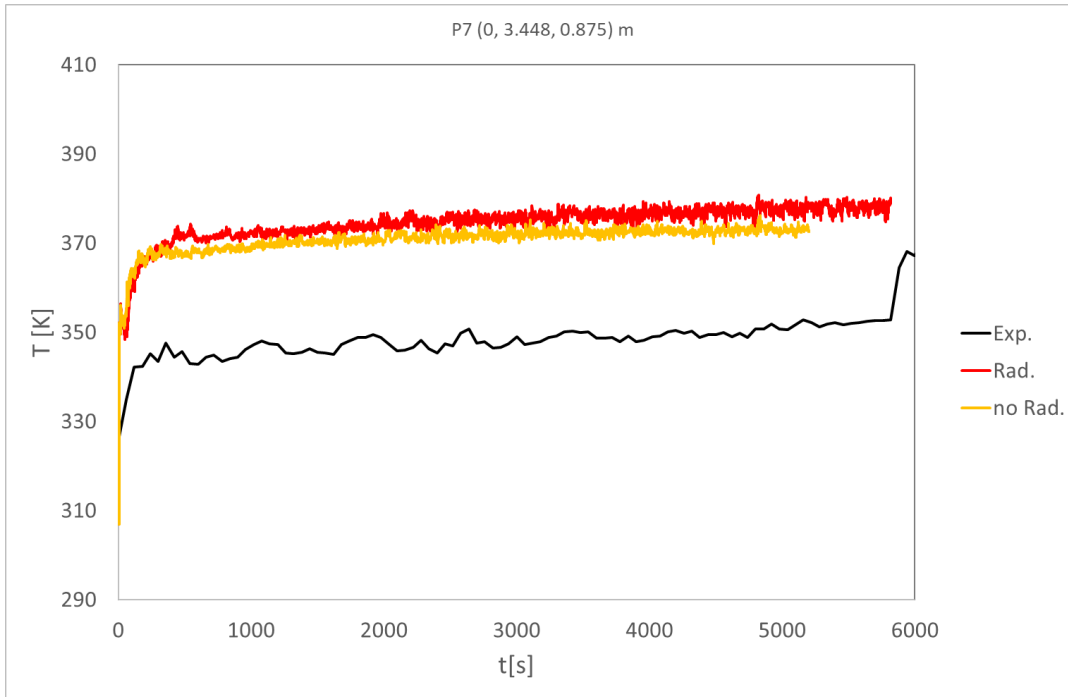


Abb. 2.28 Temperatur im Verbindungsrohr nahe PAD, oben: 0,875 m Höhe, unten: 0,425 m Höhe

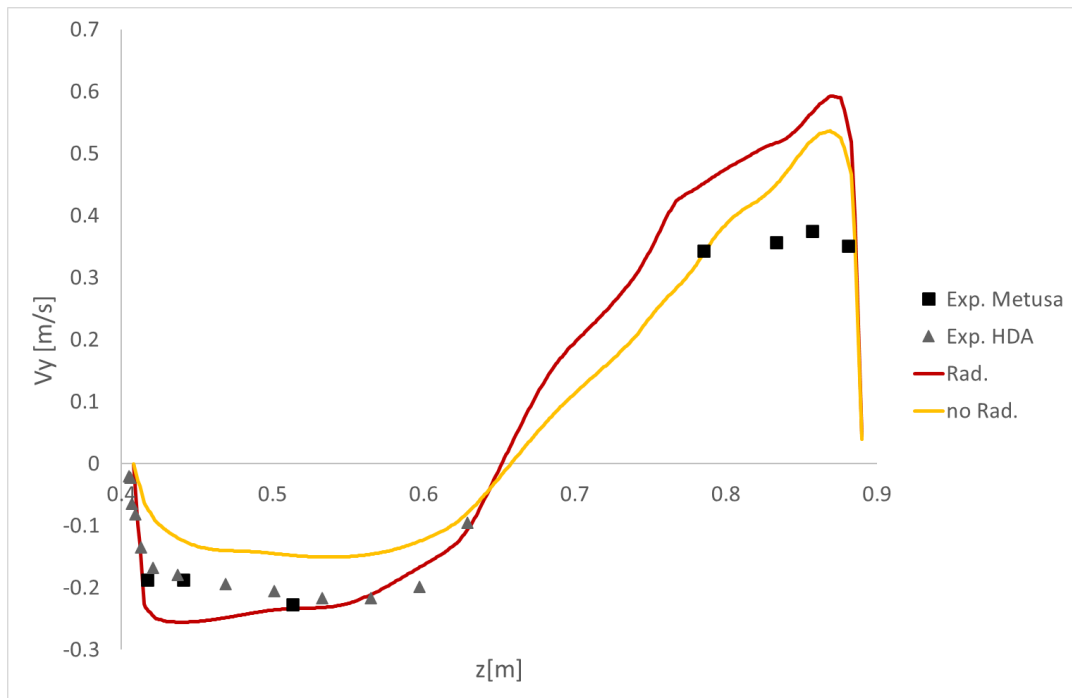


Abb. 2.29 Mittlere Geschwindigkeit (v_y) im Verbindungsrohr

2.1.2.6 Untersuchung zum Einfluss der elektrischen Heizleistung und der initialen Temperatur im Verbindungsrohr

Bei den Simulationen wird die Temperatur im oberen Bereich des Verbindungsrohrs teilweise deutlich überschätzt. Im Folgenden wird untersucht, ob die Modellierung der unteren elektrischen Heizung und die Anfangstemperaturen des Verbindungsrohrs und des TTV- Sumpfs eine Ursache für diese Abweichung sein können. Im Experiment wurden als mittlere Heizleistung in der 1. Versuchsphase 1740 W gemessen. In den bisherigen Simulationen wurde dieser Wert als Randbedingung für den Wärmestrom in die Behälterwand vorgegeben. Dieser Wert wird die Wand zu stark erwärmen, da nicht berücksichtigt wird, dass ein Teil der eingespeisten Wärme über die Isolierung nach außen verloren geht. Um den Einfluss dieses Fehlers abschätzen zu können, wurde eine zusätzliche Simulation (S174W) durchgeführt, bei der die Heizleistung auf 174 W verringert wird. Es kann davon ausgegangen werden, dass der Anteil der über Wärmeverluste verlorengangenen Leistung kleiner sein wird als bei der oberen elektrischen Heizung (siehe Abb. 2.3), da hier über Wärmeleitung im Stahl der kalte Sumpf aufgeheizt wird. Deshalb stellt die Verringerung der unteren elektrischen Heizung auf 10 % eine untere Schranke dar, die die eingespeiste Energie unterschätzt.

In den Simulationen wird die Temperatur im oberen Bereich des Rohres deutlich überschätzt (Abb. 2.11, Abb. 2.12). Eine mögliche Ursache könnte eine zu hohe

Anfangstemperatur sein. Um zu untersuchen, ob die Anfangstemperatur im Verbindungsrohr ein sensitiver Parameter ist, wurde eine Simulation (S174Wini) durchgeführt, bei der nicht nur die Heizleistung der unteren elektrischen Heizung reduziert wurde, sondern bei der auch die Anfangstemperatur auf maximal 303 K reduziert wurde. Für die am PAD angrenzende Hälfte des Rohres wurde am unteren Messpunkt zum Zeitpunkt $t = 0$ s eine niedrigere Temperatur von 296 K gemessen. Dieser niedrigere Wert wurde beibehalten.

Der Vergleich der Temperaturen im Verbindungsrohr zeigt, dass die beiden untersuchten Parameter nur einen geringen Einfluss auf die Gastemperatur haben (Abb. 2.30). Die auf 174 W verringerte Heizleistung der unteren elektrischen Heizung zeigt sich nur langfristig in einer etwas niedrigeren Gastemperatur im oberen Bereich des Verbindungsrohres (1 – 2 K nach 6000 s, am obersten Messpunkt in TTV-Nähe). An tiefer gelegenen Messstellen sind die Abweichungen der Gastemperaturen noch geringer und liegen im Bereich der Temperaturosillationen.

An der obersten Messstelle nahe dem PAD führt die Verringerung der initialen Wandtemperatur zu einer schwachen Temperaturabsenkung bis ca. 1000 s von maximal 3 K. Danach liegen die Abweichungen aufgrund der Absenkung der initialen Wandtemperatur (Vergleich S174W/S174Wini) innerhalb der Schwankungen. Die verringerte initiale Temperatur insbesondere im oberen Rohrbereich führt zu einer schnelleren Erwärmung des Verbindungsrohres. Bis 3000 s ist aber die Wandtemperatur an den beiden oberen Messpunkten niedriger als im Experiment. Trotzdem wird die Gastemperatur an den beiden obersten Messpunkten (P0 und P7) deutlich überschätzt. Eine zu hohe Wandtemperatur des Verbindungsrohres kann daher als Hauptursache für die zu hohen Gastemperaturen im oberen Teil des Verbindungsrohres ausgeschlossen werden. Erwartungsgemäß hat die verringerte initiale Wandtemperatur im Verbindungsrohr nur einen vernachlässigbaren Einfluss auf die Gastemperatur im TTV und PAD.

Wie schon die geringen Unterschiede bei den Gastemperaturen vermuten lassen, ist auch die Strömungsgeschwindigkeit im Verbindungsrohr in allen drei Simulationen sehr ähnlich (Abb. 2.33). Im oberen Bereich, bei dem das Gas vom TTV zum PAD strömt, gibt es geringfügige Abweichungen bei den drei Simulationen. Die Abweichungen liegen im Bereich der Schwankungen zwischen den Strömungsgeschwindigkeiten an den ausgewerteten Zeitpunkten (Abb. 2.33). Bei der Rückströmung (PAD zum TTV) sind nahezu keine Unterschiede erkennbar.

Die Zusammenfassung dieser Untersuchung ist, dass die Temperaturinitialisierung des Verbindungsrohres nur einen geringen Einfluss auf die Gastemperaturen und die Strömungsgeschwindigkeit hat. Auch bei einer Unterschätzung der Wandtemperatur im oberen Bereich des Verbindungsrohrs kann die Überschätzung der Gastemperatur nicht signifikant verringert werden. Ebenso hat eine verringerte Heizleistung der unteren elektrischen Heizung nur einen geringen Einfluss. Diese beiden Größen sind nicht die Hauptursache für die Abweichungen zwischen Simulation und Experiment in Abschnitt 2.1.2.3.

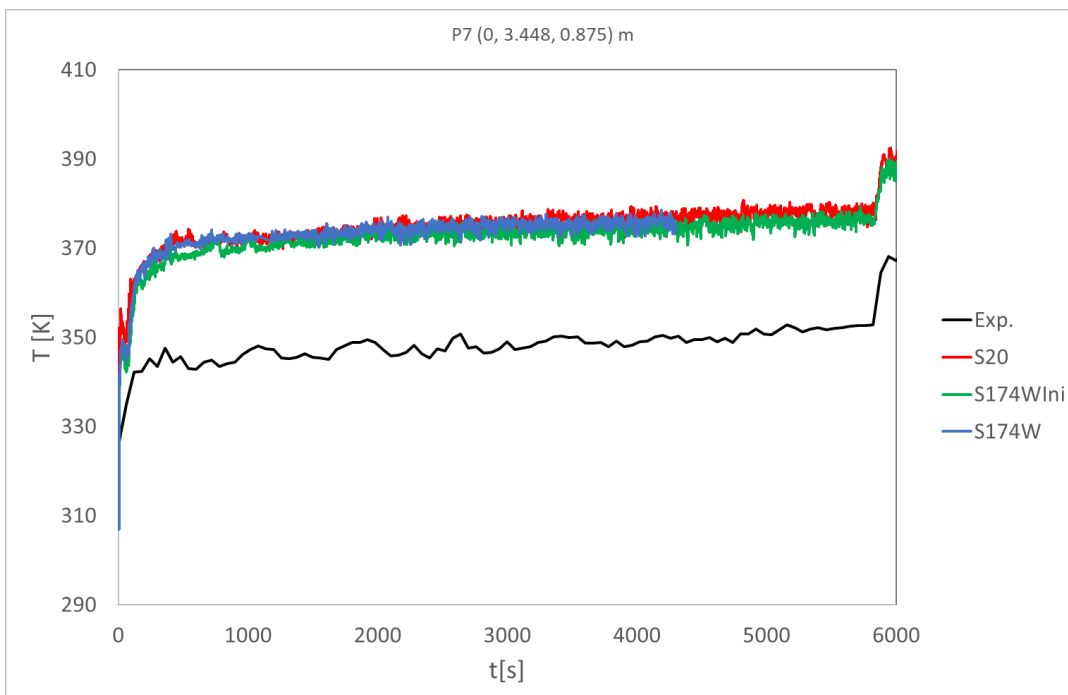
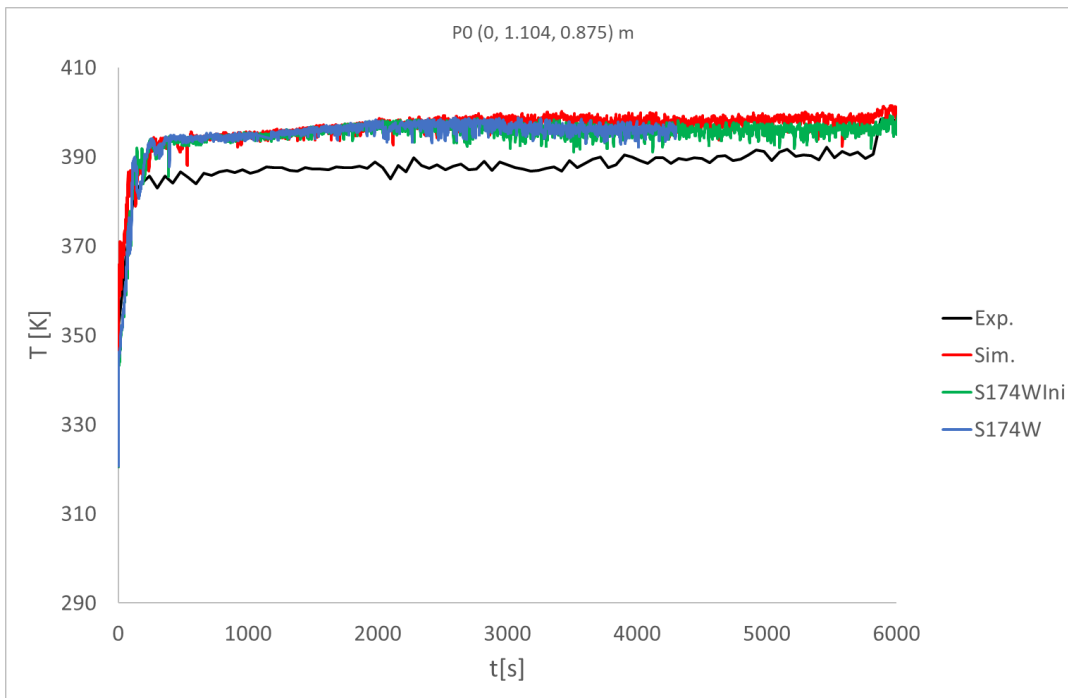


Abb. 2.30 Temperatur im Verbindungsrohr an der obersten Messstelle (Höhe 0,875 m), oben in TTV-Nähe, unten in PAD-Nähe

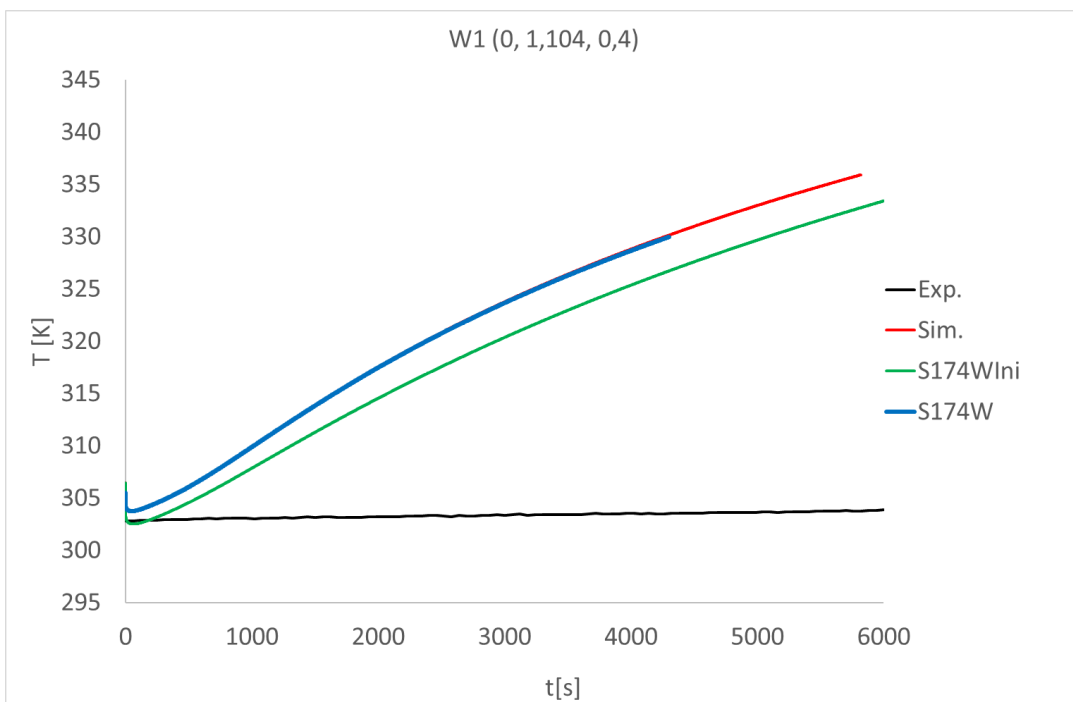
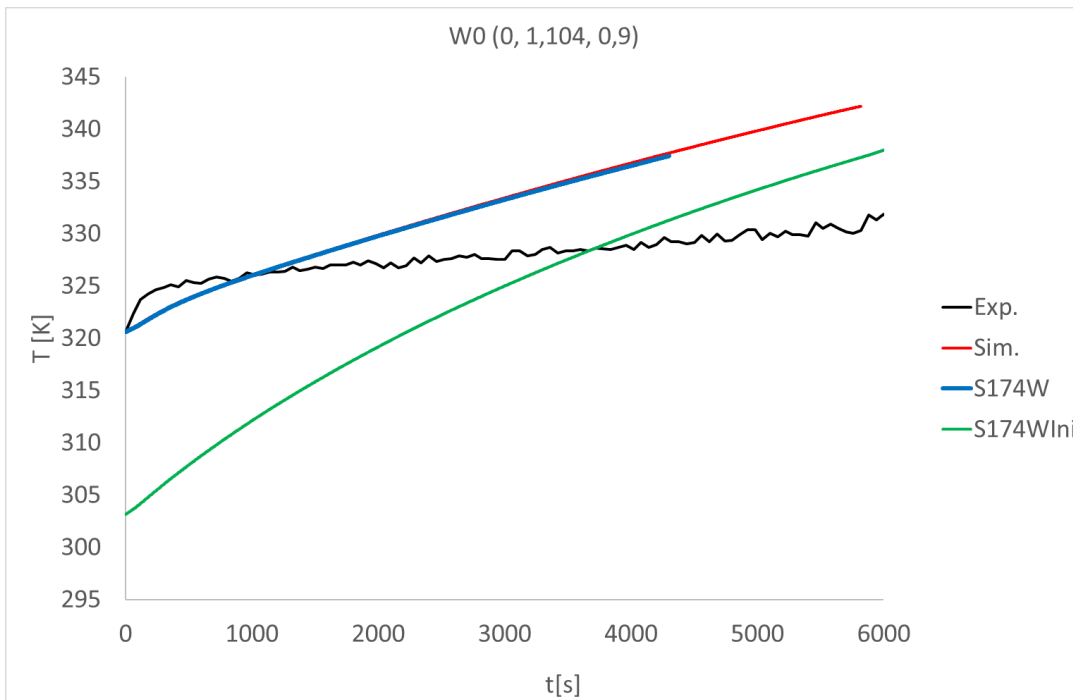


Abb. 2.31 Wandtemperatur im Verbindungsrohr nahe dem TTV, oben in 0,9 m Höhe, unten in 0,4 m Höhe

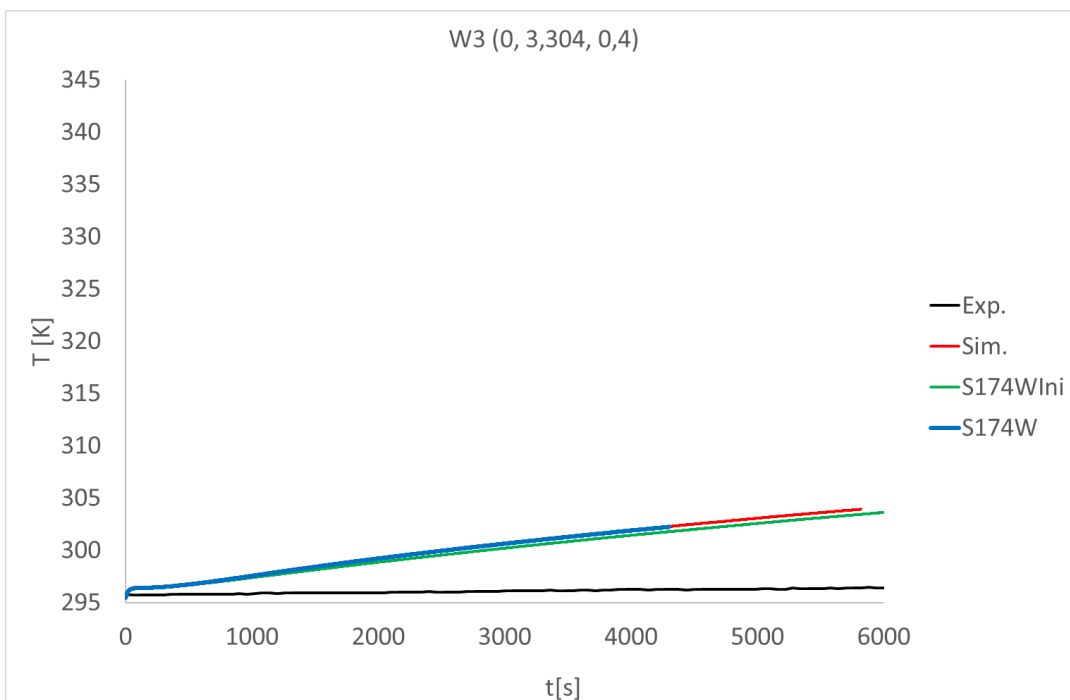
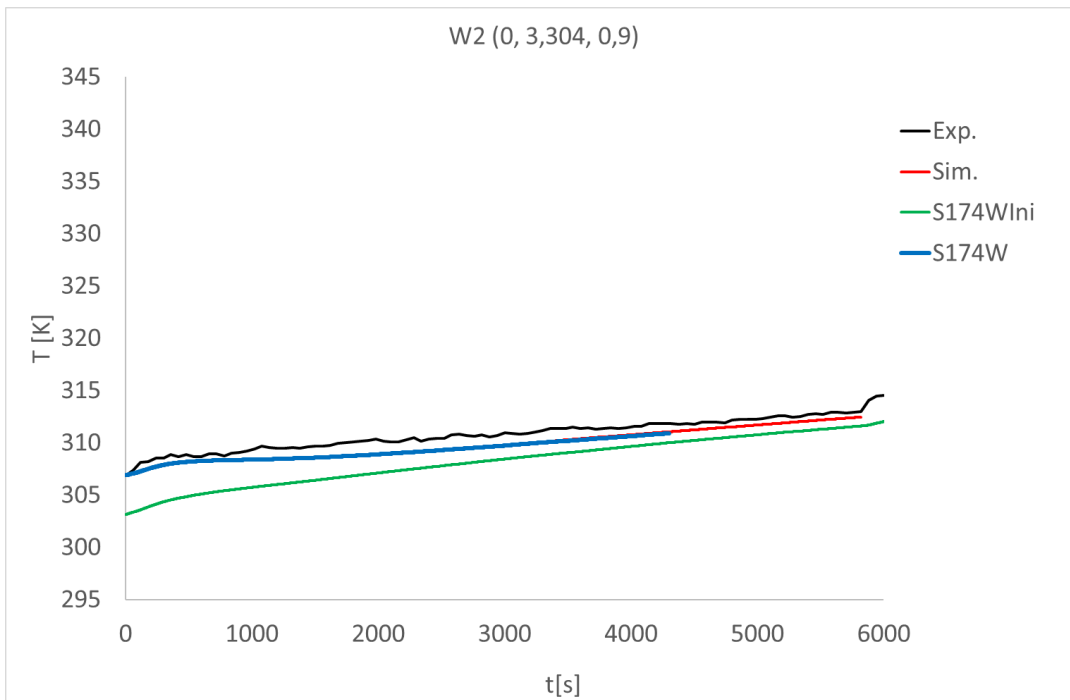


Abb. 2.32 Wandtemperatur im Verbindungsrohr nahe dem PAD, oben in 0,9 m Höhe, unten in 0,4 m Höhe

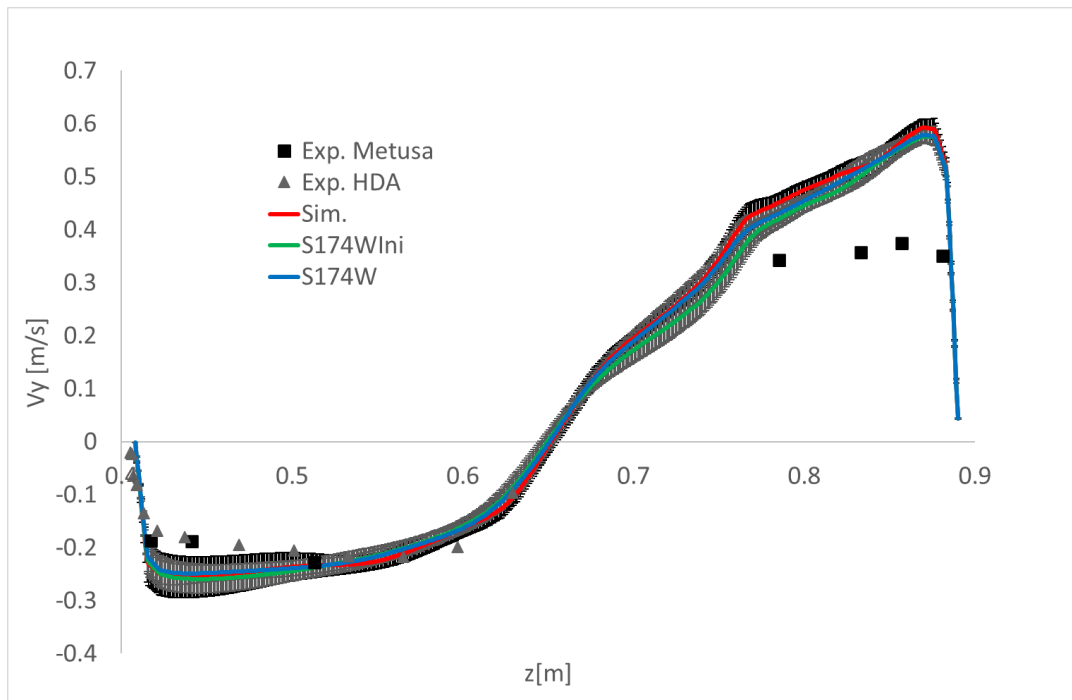


Abb. 2.33 Mittleres Geschwindigkeitsprofil (v_y) mit Standardabweichung im Verbindungsrohr

2.1.2.7 Untersuchung zur Auswahl der Wandfunktion für die turbulente Temperaturleitfähigkeit

In OpenFOAM muss der Nutzer die Randbedingung für die turbulente Temperaturleitfähigkeit α_t auswählen. Bei den bisherigen Simulationen wurde für Wände die Kader-Wandfunktion ausgewählt. Bei der Kaderwandfunktion kann zusätzlich die turbulente Prandtl-Zahl Pr_t in Wandnähe vorgegeben werden.

$$Pr_t = \frac{\gamma_t}{\alpha_t}$$

wobei γ_t die turbulente kinematische Viskosität ist.

In den bisherigen Rechnungen wurde $Pr_t = 0,85$ im Fluid und in der α_t -Wandfunktion angenommen, was der Empfehlung für containmentFOAM-Nutzer entspricht. In OpenFOAM stehen noch andere Wandfunktionen für α_t zur Verfügung (z. B. Jayatilleke-Wandfunktion) und die Pr_t kann für die Kader-Wandfunktion vom Nutzer vorgegeben werden. Im Folgenden wird untersucht, ob sich durch eine andere α_t -Wandfunktion eine Verbesserung des Simulationsergebnisses ergibt. Deshalb wurden zwei weitere Simulationen durchgeführt. In einer Simulation wurde die Jayatilleke-Wandfunktion getestet,

in einer weiteren Simulation wurde $Pr_t = 0,7$ in der Kader-Wandfunktion vorgegeben, was der unteren Grenze der Empfehlung für die Wahl dieser Größe entspricht (Empfehlung $0,7 < Pr_t < 1$).

An fast allen Messstellen hat die Wahl der α_t -Wandfunktion einen sehr geringen Einfluss auf die berechneten Temperaturen an den Messstellen (Abb. 2.34, Abb. 2.35). Am obersten Messpunkt im Verbindungsrohr (Abb. 2.36) nahe dem PAD wird mit der Jayatilleke-Wandfunktion und mit verringertem Pr_t in der Kader-Wandfunktion eine um 1 – 2 K niedrigere Temperatur berechnet. Verglichen mit der Abweichung vom Experiment ist die Verbesserung aber gering.

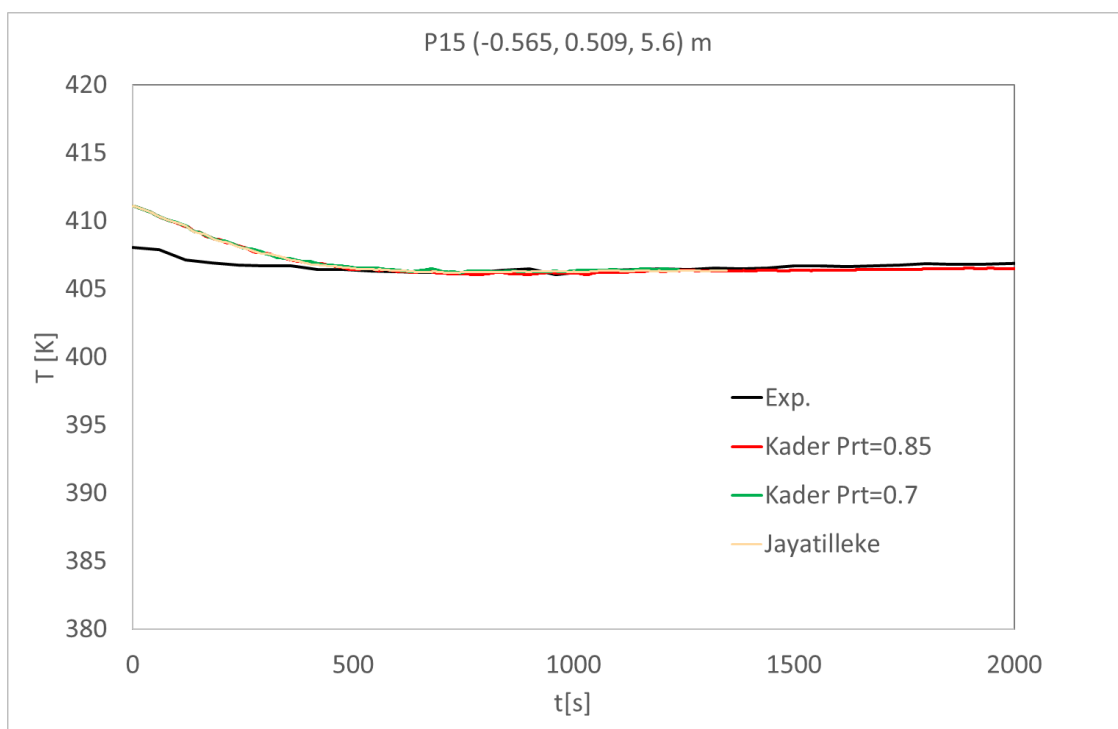


Abb. 2.34 Temperatur im TTV in 5,6 m Höhe

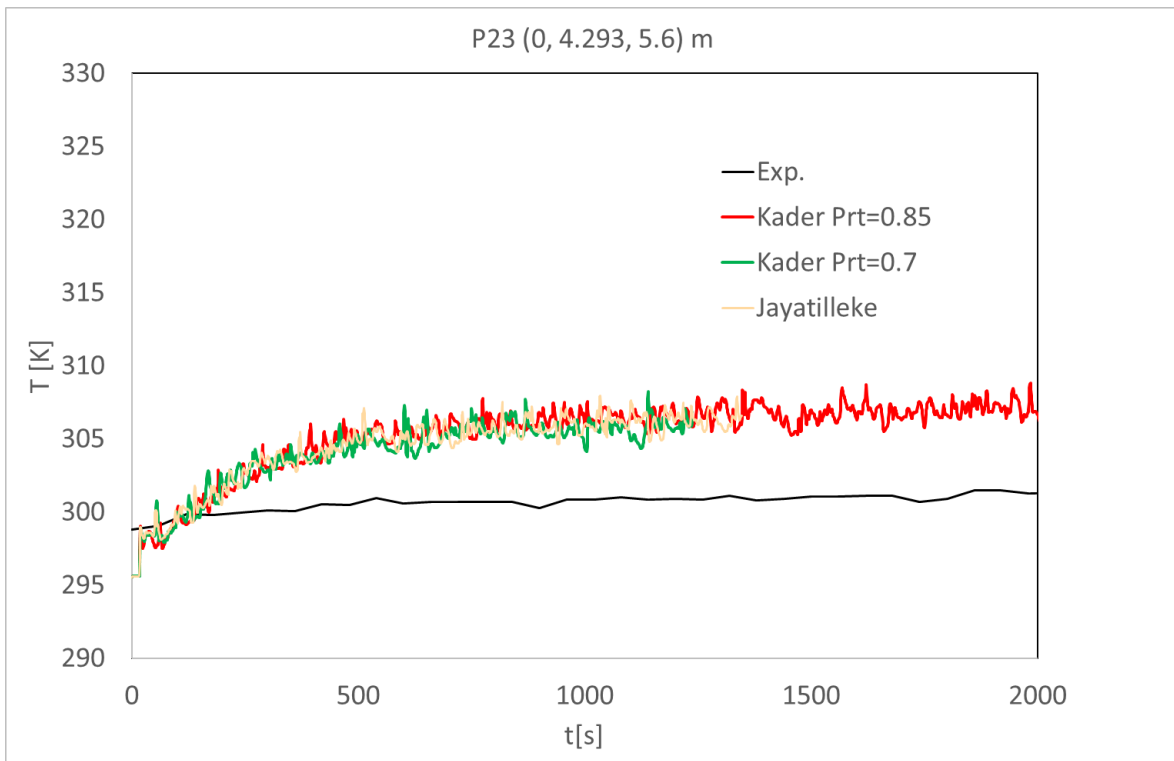


Abb. 2.35 Temperatur im PAD in 5,6 m Höhe

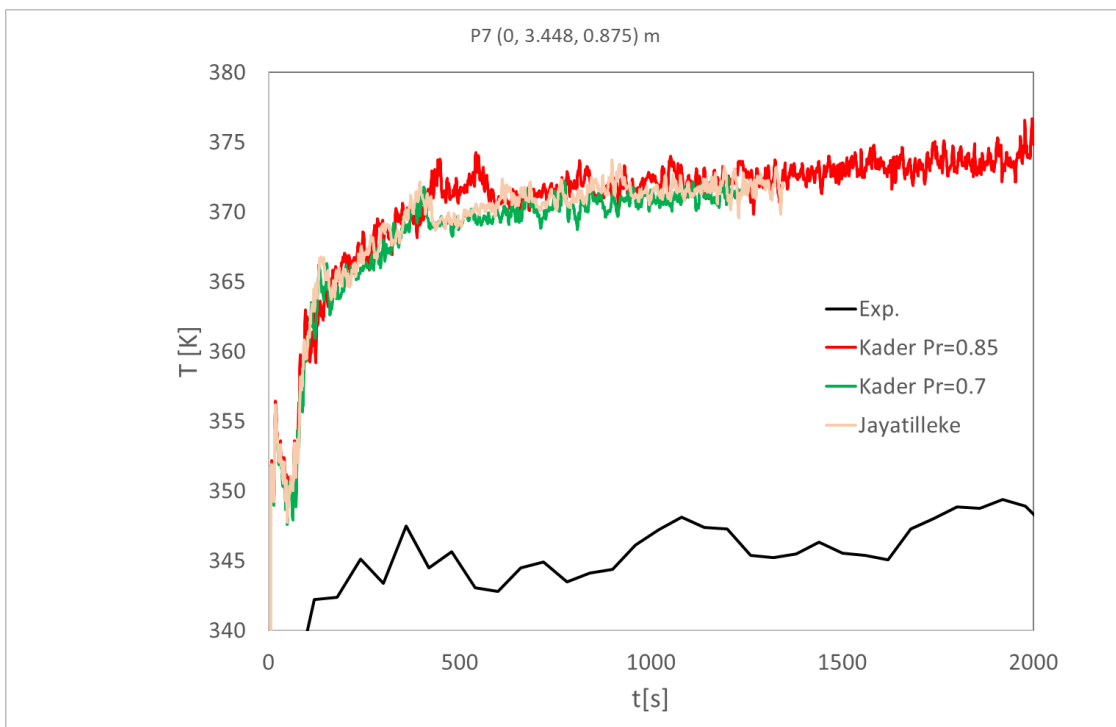


Abb. 2.36 Temperatur im Verbindungsrohr nahe PAD auf 0,875 m Höhe

2.1.2.8 Zusammenfassung THAI TH-35

Der Versuch THAI TH-35 wurde mit containmentFOAM simuliert. Beim TH-35 werden die Wände des TTV-Behälters geheizt und heiße Luft über ein vertikales Rohr in den TTV eingespeist. Der PAD-Behälter und das Verbindungsrohr sind unbeheizt. Über ein Ventil im oberen Bereich des PAD wird der Druck im Behälter konstant gehalten. Über das Verbindungsrohr strömt heißes Gas in den PAD. Im unteren Teil des Verbindungsrohres strömt kaltes Gas vom PAD in den TTV. Die Geschwindigkeit der Gegenströmung wurde im Experiment gemessen. Im Laufe des Versuchs wurde die Lufteinspeisung zweimal stufenweise erhöht. Der Fokus der Versuchsnachrechnung lag auf der ersten Versuchsphase. Dabei kamen die Standardmodelle zum Einsatz (Turbulenz (SST), Wärmestrahlung (P1)) und es wurden die vom containmentFOAM-GUI empfohlenen numerischen Einstellungen verwendet (numerische Schemata, Konvergenzkriterium etc.). Das standardmäßig verwendete strukturierte CFD-Gitter besteht aus 1,25 Millionen Hexaedern. Eine Gitterstudie zeigt, dass das verwendete CFD-Gitter ausreichend fein ist und dass eine unzureichende Gitterauflösung als Hauptgrund für die Abweichungen ausgeschlossen werden kann. An den Heizmänteln und der oberen elektrischen Heizung wurde eine Temperaturrandbedingung vorgegeben, an der unteren elektrischen Heizung ein Wärmestrom an der äußeren Behälterwand. Mit diesen Einstellungen konnten die Temperaturverteilung und die Strömung (insbesondere die Gegenströmung im Verbindungsrohr) qualitativ richtig berechnet werden. Quantitativ kommt es aber stellenweise zu Abweichungen. Die Temperatur im TTV oberhalb des Verbindungsrohrs wird in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Die Heizung der Wände und die Lufteinspeisung wurden erfolgreich modelliert. Im Verbindungsrohr zwischen TTV und PAD wird im Experiment eine Gegenströmung berechnet, bei der oben heiße Luft in den PAD strömt. Die Temperatur am obersten Messpunkt wird allerdings in der Simulation deutlich überschätzt. Während in TTV-Nähe die Abweichung in etwa 10 K beträgt, steigt die Abweichung in PAD-Nähe auf 25 K an. Die Überschätzung der Temperatur der Strömung in den PAD ist dafür verantwortlich, dass auch die Temperatur im PAD und in der Rückströmung vom PAD in den TTV etwas überschätzt wird. Die Geschwindigkeit der Gegenströmung im Verbindungsrohr wird qualitativ richtig vorhergesagt. Die Position des Übergangs der Strömungsrichtung wird in Übereinstimmung mit den experimentellen Daten vorhergesagt. Allerdings ist die Strömung in Wandnähe insbesondere bei der Hinströmung in der Simulation höher als im Experiment, bei der ein flacheres Strömungsprofil berechnet wird.

Der Grund für die Abweichungen konnte bisher nicht abschließend geklärt werden. Eine Untersuchung zum Einfluss der Wärmestrahlung zeigt, dass Wärmestrahlung einen moderaten Einfluss auf die Temperatur und auf die Gegenströmung hat. Allerdings ist der Einfluss der Wärmestrahlung auf die Temperatur der beiden obersten Messpunkte im Verbindungsrohr gering; Wärmestrahlung kann als Grund für deren Abweichung ausgeschlossen werden.

Eine Untersuchung zum Einfluss des Wärmestroms der unteren elektrischen Heizung zeigt, dass sie keinen signifikanten Einfluss auf die Temperatur und die Strömungsgeschwindigkeit im Verbindungsrohr hat. Auch eine Absenkung der initialen Wandtemperatur im Verbindungsrohr konnte die Temperaturüberschätzung an den obersten Messpunkten im Verbindungsrohr nicht signifikant verringern.

Als wahrscheinlichste Ursache für die zu hohe Temperatur im oberen Verbindungsrohr wird angenommen, dass das Verbindungsrohr in der Simulation ein glattes Rohr ist. Im Experiment gibt es aber eine Reihe von Abweichungen hiervon. Es gibt Strömungshindernisse wie die beiden Kompensatoren, Flansche und Messinstrumentierung wie METUSA oder HDA. Die genaue Geometrie dieser Bauteile ist teilweise nicht bekannt und ihre Abbildung im CFD-Gitter ist sehr aufwendig. Deshalb konnte im Rahmen dieses Vorhabens hierzu keine Untersuchung vorgenommen werden. Es kann aber davon ausgegangen werden, dass auch kleine Strömungshindernisse an der Wand die Vermischung verstärken und dafür sorgen, dass die Temperaturschichtung abgeschwächt wird.

Eine weitere Quelle für Fehler ist die Turbulenzmodellierung. In den Simulationen wird das (U)RANS Zweigleichungs-Modell SST verwendet. Es geht von einer isotropen Turbulenzverteilung aus, was in einer Gegenströmung nicht der Fall ist. Das SST-Modell wurde primär für erzwungene Strömungen angepasst und validiert, im Experiment liegt dagegen eine Mischform vor, bei der neben der erzwungenen Strömung durch die Luftspeisung eine freie Konvektion bei der Rückströmung vom PAD in den TTV gegeben ist.

2.2 Nachrechnung der PANDA-Versuche P1A1_3 und P1A_4

In der P1A1-Serie wird in vereinfachter Form die Strömung durch einen Dampferzeugerturm in einem generischen DWR nachgebildet, die zu einer Schichtung im umgebenden Sicherheitsbehälter führt. Dazu wurde im unteren Bereich des PANDA-Behälters eine

Kammer mit Öffnungen eingebracht, die den Dampferzeugerturm vereinfacht nachbilden soll. Die erste und zweite Versuchsphase des OECD-PANDA-Versuchs P1A1-3 (Dampf- und Helium-Einspeisung) sowie die erste Versuchsphase von P1A1-4 (Dampfeinspeisung) wurden erfolgreich mit containmentFOAM-11 nachgerechnet. Dabei kamen die Referenzmodelle zur Anwendung. Die Simulationen wurden mit einem CFD-Gitter bestehend aus ca. 2,5 Millionen Zellen nachgerechnet. Eine Gitterstudie für die ersten 230 s zeigt, dass keine gitterunabhängige Lösung gefunden wurde und dass mit dem feineren Gitter eine stärkere Wandkondensation berechnet wird, die zu einer besseren Übereinstimmung beim Druck führt. Aufgrund der hohen Rechenzeit von ca. 3 Monaten auf 60 CPUs bei dem gröberen Gitter kann gegenwärtig das feinere Gitter nicht mit vertretbarem Aufwand genutzt werden. Da im Experiment die Messung der Gaskonzentration wegen starker Volumenkondensation fehlgeschlagen ist, konnten nur Druck und Temperaturen verglichen werden. Es zeigt sich für beide Experimente eine gute qualitative Übereinstimmung bei Druck und Temperaturen. In der Anfangsphase (ca. 2500 s) werden der Druck und die Temperatur in Kammer und PANDA-Behälter in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Danach steigen die Temperaturen im Gas sowie der Druck in der Rechnung schneller an als im Experiment. Dabei spielt sicherlich die stärkere Aufheizung der PANDA-Behälterwände im Experiment eine Rolle. Diese führt zu einer schwächeren Wandkondensation und weniger Wärmetransfer in die Struktur. Ein Grund für die stärkere Erwärmung der Wände ist die Unterschätzung der Behältermasse um ca. 24,5 % aufgrund geometrischer Vereinfachung (Vernachlässigung von Flanschen etc.) sowie die Nichtberücksichtigung von Wärmeleitung in verbundene Strukturen (Verbindungsrohr, Stützkonstruktion).

Zum Zeitpunkt der Berichtserstellung waren die experimentellen Daten der OECD-PANDA-Versuche nicht frei zugänglich. Daher kann im Rahmen dieses öffentlichen Berichts nur eine Zusammenfassung der Ergebnisse erfolgen. Im nicht-öffentlichen zeiten Teil des Abschlussberichts erfolgt eine ausführliche Dokumentation der Arbeiten.

2.3 AP 1.2: Weiterentwicklung und Validierung der Wärmestrahlungsmodellierung in OpenFOAM (gekürzt)

Anmerkung: *Zur Zeit der Berichtserstellung waren die Versuchsdaten nicht öffentlich verfügbar. Deshalb erscheint im öffentlichen Teil (Teil 1) des Abschlussberichts nur eine gekürzte Fassung. Eine ausführliche Beschreibung der Arbeiten ist im nicht-öffentlichen Teil des Abschlussberichts (Teil 2) zu finden.*

Arbeiten in vorhergehenden Projekten haben gezeigt, dass Wärmestrahlung in Containernanwendungen einen signifikanten Einfluss auf die Temperatur, aber auch die Gasverteilung (z. B. auf die Auflösungsgeschwindigkeit von stabilen Leichtgasschichtungen) haben kann /SCH 22b/, /SCH 17/. In OpenFOAM und auch in kommerziellen CFD-Codes, wie ANSYS CFX, gibt es eine Reihe von unterschiedlichen Wärmestrahlungsmodellen, bei denen der Nutzer Modellparameter wie die Absorptionskonstanten für Spezies (insbesondere H₂O und CO₂) wählen muss. In RS1562 /SCH 22b/ wurden zu dieser Fragestellung bereits Untersuchungen anhand von HYMERES-2 Versuchen /KAP 21b/ durchgeführt. Bei Nachrechnungen dieser Versuche wurde sowohl von ANSYS CFX als auch von OpenFOAM der Druckanstieg signifikant überschätzt. Auch bei Nachrechnungen anderer Organisationen (z. B. PSI mit FLUENT /DEH 23/) wurde der Druckanstieg ähnlich stark überschätzt. Der Grund für die Abweichung zwischen Experiment und Simulationen konnte nicht eindeutig identifiziert werden. Da die Kompression des Gases Ursache für die Temperaturerhöhung in den Versuchen war, ist davon auszugehen, dass eine Abweichung beim Druck auch die Temperaturverteilung beeinflusst. Deshalb waren diese Experimente nur bedingt zur Auswahl und Kalibrierung der Wärmestrahlungsmodellierung geeignet. Daher werden in diesem Vorhaben zwei PANDA-Experimente mit anderer Versuchsdurchführung (P1A2_3 und P1A2_4) nachgerechnet. Zu Beginn lag in den Experimenten P1A2_3 und P1A2_4 Luft mit einem Dampfanteil von 0,7 Vol.-% bzw. 5 Vol.-% vor. Im oberen Bereich des PANDA-Behälters lag eine stabile Heliumschichtung von bis zu 47 Vol.-% vor, im unteren Teil des Behälters war der Heliumanteil ca. 30 Vol.-%. Die Anfangstemperatur betrug etwa 300 K, der Anfangsdruck ca. 1 bar. In der ersten Versuchsphase wurde das Gas komprimiert, indem durch eine abwärts gerichtete Strömung in 0,84 m Höhe Luft mit einem Massenstrom von ca. 74 g/s eingespeist wurde. Dadurch erhöhte sich die Temperatur abhängig von der lokalen Gaszusammensetzung unterschiedlich stark. Nach ca. 1200 s endete die Lufteinspeisung, durch Wärmeverluste an der Behälterwand kühlte sich das Gas insgesamt ab und der Druck nahm wieder ab. Die Simulationen dieser beiden Experimente führen zu folgenden Schlussfolgerungen:

Simulationen, welche die Wärmestrahlung mit dem P1- und dem fvDOM-Modell berechnen und die vom mittleren Planck'schen Absorptionskoeffizienten für Dampf oder einem festen Wert von 10 (m bar)^{-1} ausgehen, sind in der Lage, die Experimente P1A2_3 und P1A2_4 mit moderaten Abweichungen bei der Temperatur zu berechnen. Auffällig ist hierbei, dass verglichen mit dem Experiment der Temperaturanstieg räumlich stärker verteilt ist. Der Druck und die Gaszusammensetzung konnten in guter Übereinstimmung mit dem Experiment bestimmt werden. Insgesamt ist keine der Modellierungen mit dem

P1- und dem fvDOM-Modell in Bezug auf die Übereinstimmung mit dem Experiment eindeutig den anderen überlegen. Das P1-Modell benötigt allerdings deutlich weniger Rechenzeit. Die Strahlungsmodellierung mit dem Monte-Carlo-SNBCK-Modell ist für die meisten Containmentanwendungen (momentan) zu rechenzeitaufwendig. Obwohl dieses Modell die Wärmestrahlungsmodellierung am physikalisch genauesten simuliert, zeigt sich eine schlechtere Übereinstimmung mit dem Experiment. Die Ursache hierfür konnte nicht gesichert festgestellt werden. Ein Vergleich von Simulationen mit containmentFOAM-9 und containmentFOAM-11 zeigt aber eine gute Übereinstimmung (6.4.1), so dass davon ausgegangen werden kann, dass die Portierung des Modells in die neue containmentFOAM-Version erfolgreich und nicht Ursache für die Abweichung zum Experiment war.

2.4 AP 1.3 Simulation von Gebäudekondensatoren mit OpenFOAM

2.4.1 Einleitung

Gebäudekondensatoren kommen als passive Sicherheitssysteme in verschiedenen Reaktordesigns (z. B. WWER-1200, HPR1000) zum Einsatz. Ziel dabei ist die passive Wärmeabfuhr und die Begrenzung des Drucks im Sicherheitsbehälter. An der kalten Oberfläche des Gebäudekondensators wird aus der Gasphase Wärme abgeführt und es findet je nach Gaszusammensetzung verstärkt Kondensation statt. CFD-Simulationen können zum Nachweis der Wirksamkeit von Sicherheitskonzepten eingesetzt werden. Ein wichtiger Punkt ist hierbei der Einfluss von stabilen Leichtgasschichtungen auf die Wirksamkeit von Gebäudekondensatoren. Im Folgenden werden zwei Versuche (H2P6_1 und H2P6_2) aus dem OECD-HYMERES2-Versuchsprogramm simuliert, bei denen die Wechselwirkung von aktiven Gebäudekondensatoren mit einer stabilen Heliumschicht untersucht wurde.

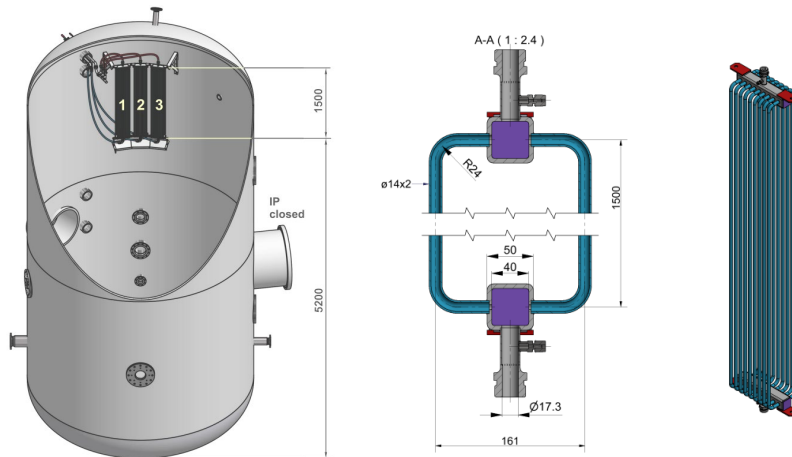


Abb. 2.37 Links: Schematische Darstellung der Experimente H2P6_1 und H2P6_2

In H2P6_2 ist nur der Gebäudekondensator 2 vorhanden. Mitte, rechts: Detaillierte Darstellung eines Gebäudekondensators /KAP 21a/.

2.4.2 Das Experiment H2P6-2

Das Experiment H2P6-2 wurde am Paul-Scherer-Institut an der PANDA-Versuchsanlage durchgeführt (Abb. 2.37). Es nimmt nur ein PANDA-Behälter am Versuch teil. Zu Beginn des Experiments lag ein Dampf/Luft-Gemisch mit einem Verhältnis von 60:40 vor. Im oberen Bereich des Behälters befand sich eine stabile Heliumschicht mit einem Molenbruch von ca. 0,18. Der Anfangsdruck betrug etwa 2,5 bar, die initiale Temperatur ca. 385 K. In H2P6-2 befand sich nur ein Gebäudekondensator im PANDA-Behälter. Der Kondensator bestand aus 2*9 Kühlrohren und war etwa 1,5 m hoch (Abb. 2.37). Die Temperatur des in den Kondensator einströmenden Kühlwassers betrug etwa 291 K, wobei sie zu Beginn des Experiments einige K höher war. An der kalten Oberfläche des Kondensators kühlte sich das Gas ab und es kam zu Wand- und auch zu Volumen Kondensation. Dadurch nahm der Druck ab und der Helium-Molenbruch stieg lokal an. Aufgrund der geringeren Dichte sank das Gas unterhalb des Kondensators ab. Dieser nach unten gerichtete Plume konnte allerdings nicht die Heliumschichtung verlassen, da das darunter liegende Gasgemisch eine höhere Dichte besaß. Im Laufe der Zeit vermischte sich das Gas und der Plume drängt weiter nach unten. Nach ca. 2700 s lag im gesamten Bereich um und unterhalb des Kondensators in etwa der gleiche Helium-Molenbruch vor.

2.4.3 Modellierung in OpenFOAM

Das H2P6-2-Experiment wurde mit containmentFOAM-9 simuliert. Dampf, Helium und Luft wurden als ideale Gase mit temperaturabhängigen Stoffeigenschaften modelliert.

Es wurde das Wilke-Mischungsmodell verwendet. Die Wandkondensation wird mit dem containmentFOAM-Wandkondensationsmodell /KEL 21a/ simuliert. Volumenkondensation wird mit dem Vyskocil-Schmid-Macek-Modell /VYS 14/ berechnet. In den ersten Simulationen zum Experiment H2P6_2 („Sim. detail“, Sim. skal., Sim. Quader und Sim. 2 Platten) wurde als Zeitkonstante im Vyskocil-Schmid-Macek-Modell der aktuelle Zeitschritt der Simulation verwendet. Es kann aber z. B. bei „Sim. skal. Tw“ zu numerischen Problemen in der Berechnung der Fog-Gleichung kommen. Deshalb wurde vom FZ Jülich eine zusätzliche Option eingefügt, in der der Nutzer die Zeitkonstante explizit wählen kann. Die übrigen Simulationen zu H2P6_2 und alle Simulationen zu H2P6_1 wurden mit einer fest vorgegebenen Zeitkonstante von 0,01 s durchgeführt. Die Brownsche Diffusion der Nebeltröpfchen wird mit dem Stokes-Einstein-Modell simuliert und das Drift-Model von Maninen/ARZ 19/, /MAN 96/ wird verwendet. Als mittlerer Tröpfchendurchmesser wird $2,5e-5$ m angenommen. Die Turbulenz wurde mit dem cfKOmegaSST-Modell einschließlich der Auftriebsterme (SGDH-Modell) berechnet. Die Wärmestrahlung wurde mit dem P1-Modell simuliert. Die Absorptionskonstante von Dampf wurde zu 10 (m bar)^{-1} gewählt, die Emissivität der Wände zu 0,3.

In allen Simulationen wurde die Wärmeleitung in der Behälterwand und den Gebäudekondensatorrohren von containmentFOAM berechnet (Solid-Region). Für die isolierte Außenfläche des Panda-Behälters wurde ein Wärmeübergangskoeffizient von $0,5 \text{ W/(m}^2 \text{ K)}$ angenommen. In einigen Simulationen mit detaillierter Gebäudekondensatorgeometrie wurde die Strömung des Kühlwassers ebenfalls mit containmentFOAM simuliert, ähnlich wie dies schon bei den CONAN-Experimenten getestet wurde (siehe 2.5.4). Dabei wurde auch hier das cfKOmegaSST-Turbulenzmodell verwendet. Bei anderen Simulationen wird für die Kondensatorrohre eine mittlere zeitabhängige Temperatur entsprechend den Messwerten angenommen. Die Steuerung des Zeitschritts erfolgt anhand der maximalen Courant-Zahl von 5. Dies führt zu Zeitschritten von typischerweise 1 ms – 2 ms.

2.4.4 Simulationen mit detaillierter Gebäudekondensatorgeometrie

2.4.4.1 CFD-Gitter bei Simulationen mit detaillierter Gebäudekondensatorgeometrie

In den folgenden Simulationen wurde der Gebäudekondensator im Gitter detailliert nachgebildet (Abb. 2.38). Im Bereich des Gebäudekondensators ist ein sehr feines Gitter nötig, um die Geometrie mit den dünnen Rohren abbilden zu können und das Interface

Gas/Kondensatorwand ausreichend fein aufzulösen (Abb. 2.39), so dass die Wandkondensationsrate hinreichend genau berechnet wird (siehe CONAN, 2.5.4). Ein mit Pointwise erzeugtes CFD-Gitter, bei dem der Gebäudekondensator hinreichend genau aufgelöst wurde und bei dem nur strukturierte Zellen verwendet wurden, hatte über 17 Millionen Zellen. Testrechnungen haben gezeigt, dass hiermit eine Simulation von H2P6_2 aufgrund des zu hohen Rechenaufwands (Rechendauer mehr als ein halbes Jahr auf 60 CPUs) nicht möglich ist. Deshalb wurden unterschiedliche Vernetzungsstrategien (arbitrary mesh interface AMI, Einsatz des Tools stitchMesh, Schicht von unstrukturierten Zellen) untersucht, bei denen nur der Bereich des Gebäudekondensators mit einem feinen Gitter vernetzt wurde. Tests haben gezeigt, dass die Verbindung der beiden Bereiche über eine Schicht von unstrukturierten Zellen am erfolgversprechendsten ist. Das mit diesem Ansatz erzeugte Gitter besteht aus insgesamt 6,8 Millionen Zellen, die sich wie in Tab. 2.2 aufgelistet auf die Raumbereiche aufteilen. Bei Simulation des Versuchs mit diesem Gitter (Sim. detailliert) ergibt sich ein mittleres y^+ von 3,5 an der Grenzfläche Gas/Kondensatorwand und $y^+_{\max} < 20$. Bei diesen niedrigen y^+ -Werten kann davon ausgegangen werden, dass die Fehler bei Berechnung der Wandkondensationsrate aufgrund von unzureichender Gitterauflösung gering sind (siehe CONAN-Simulationen, Abschnitt 2.5.4). Bei den CFD-Gittern wurden die Zufluss- und Abflussleitungen des Gebäudekondensators nicht berücksichtigt, da deren exakte Lage nicht bekannt ist und sie das Gitter verkomplizieren und weiter vergrößern würden. An der Oberfläche der Zufluss- und Abflussleitungen des Kühlwassers kann aber auch Kondensation stattfinden. Deshalb wurde eine zusätzliche Simulation durchgeführt, bei der die Größe des Gebäudekondensators so skaliert wurde (Faktor 1,07), dass die Fläche der gekühlten Oberfläche im Experiment und in der Simulation gleich ist (Sim. skaliert). Für dieses CFD-Gitter wurden im Bereich des Gebäudekondensators noch einige Verfeinerungen vorgenommen, um die Genauigkeit zu erhöhen (Tab. 2.3). Aufgrund des hohen Rechenzeitbedarfs von mehr als 3 Monaten auf 40 – 60 CPUs für die Simulation Sim. detailliert war es nicht möglich, das Gitter systematisch zu verfeinern, um eine Studie zur Gitterabhängigkeit der Ergebnisse durchzuführen.

Tab. 2.2 CFD-Gitter für Simulation (Sim. detailliert) des Versuchs H2H6_2

Gas	Strukturierte Zellen: 3,9 Millionen Unstrukturierte Zellen: 1,2 Millionen
Wasser	Strukturierte Zellen: 0,6 Millionen Zellen
Solid	Strukturierte Zellen: 0,6 Millionen Zellen

Tab. 2.3 CFD-Gitter für Simulation (Sim. skaliert) des Versuchs H2H6_2

Gas	Strukturierte Zellen: 5,1 Millionen Unstrukturierte Zellen: 1,9 Millionen
Wasser	Strukturierte Zellen: 1,1 Millionen Zellen
Solid	Strukturierte Zellen: 0,7 Millionen Zellen

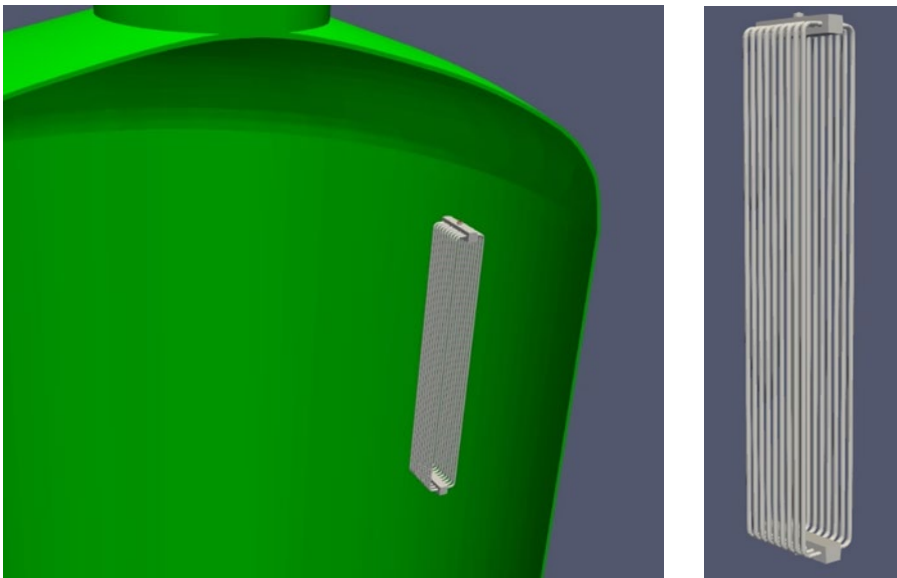


Abb. 2.38 Geometrie bei detaillierter Abbildung des Gebäudekondensators

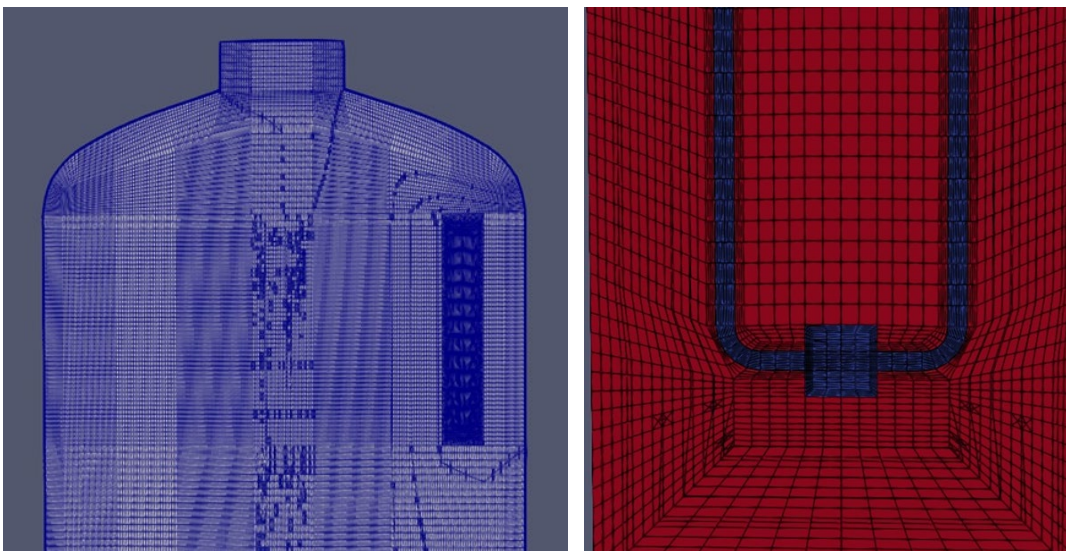


Abb. 2.39 CFD-Gitter bei detaillierter Abbildung des Kondensators (Sim. detailliert), rechts: Ausschnitt im Bereich des Kondensators (rot: Gas, blau: Wasser und Rohrwände)

2.4.4.2 Simulationsergebnisse für H2P6_2 mit detaillierter Gebäudekondensatorgeometrie

Durchgeführte OpenFOAM-Simulationen

Im Folgenden werden drei Simulationen mit detaillierter Abbildung der Gebäudekondensatorgeometrie mit experimentellen Daten verglichen. Bei der Simulation „Sim. detail“ entspricht die Größe des Gebäudekondensators der im Experiment, was aufgrund von fehlenden Zu- und Abflussleitungen des Kühlwassers die gekühlte Oberfläche unterschätzt. Bei der Simulation „Sim. skal.“ wurde der Kondensator so skaliert, dass die gekühlte Oberfläche der im Experiment entspricht. Bei diesen beiden Simulationen wurde die Strömung des Kühlwassers und seine Erwärmung mit containmentFOAM simuliert. Diese beiden Simulationen waren allerdings sehr aufwendig, so benötigte „Sim. detail.“ auf einem Cluster mit 40 – 60 CPUs mehr als 3 Monate. Als erste Vereinfachung wurde in der Simulation „Sim. skal. Tw“ eine aus experimentellen Daten abgeleitete mittlere Temperatur des Kühlmittels als Randbedingung an der Innenseite der Kondensatorrohre gesetzt. Mit dieser Vereinfachung konnte die Rechenzeit um ca. 20 % verringert werden.

Druck und Kondensation

Die Simulation „Sim. detail“ berechnet einen etwas schwächeren Druckabfall als „Sim. skal.“ (Abb. 2.40). Durch die vergrößerte gekühlte Oberfläche ist die durch Wandkondensation angefallene integrale Wandkondensationsrate bei „Sim. skal.“ größer (Abb. 2.41). Die Simulationsergebnisse von „Sim. skal.“ und „Sim. skal. Tw“ sind hinsichtlich des Drucks (Abb. 2.40) und hinsichtlich der integralen Wandkondensationsrate (Abb. 2.41) nahezu identisch. In H2P6_2 ist die Annahme einer mittleren Kühlwassertemperatur ausreichend genau. Hier spielt vermutlich auch eine Rolle, dass sich der Sättigungsdampfdruck von Wasser für $T \sim 20 \text{ °C}$ bei einer Änderung um wenige °C nur schwach ändert.

Alle Simulationen berechnen einen etwas schwächeren Druckabfall als im Experiment gemessen. Dabei fällt auf, dass ein Großteil der Abweichung vom Experiment in den ersten 200 s entsteht. Im Experiment kommt es zu Beginn zu einem schnellen Druckabfall. Der Grund hierfür ist unklar, eigentlich ist zu erwarten, dass der Gebäudekondensator in den ersten Sekunden weniger kondensiert, da warmes Wasser aus den Rohren verdrängt werden muss und sich die Kondensatorrohre erst abkühlen müssen. Im Experiment H2P6-1 tritt auch kein solches Verhalten auf. Im Experiment fällt der Druck im Zeitraum 0 s – 2500 s um 0,517 bar ab, im Zeitraum 200 s – 2500 s um 0,427 bar. In

„Sim. detail“ beträgt der Druckabfall 0,404 bar bzw. 0,355 bar, für „Sim. skal. Tw“ 0,450 bar bzw. 0,393 bar. Dies entspricht für „Sim. detail“ einem relativen Fehler von 22 % bzw. 17 %. Für „Sim skal. Tw“ ergeben sich relative Fehler von 13 % bzw. 8 %.

Im Experiment wurde das durch Wandkondensation am Gebäudekondensator anfallende Wasser in Eimer geleitet und gewogen. Diese Messung war ungenau und auch nicht Teil der offiziellen experimentellen Daten. Auf Anfrage wurde die Messung der GRS zur Verfügung gestellt. Die gemessene Kondensatmasse kann zum direkten Vergleich der Wandkondensation im Experiment und in der Simulation herangezogen werden. In der Simulation findet nur am Gebäudekondensator Wandkondensation statt. Im Experiment gibt es ebenfalls keine Daten, die auf eine signifikante Wandkondensation am PANDA-Behälter hindeuten.

Der Vergleich der angefallenen Kondensatmassen (Abb. 2.42) zeigt, dass die in den Simulationen angefallenen Kondensatmassen etwas geringer sind als im Experiment. Dies ist konsistent mit dem etwas geringeren Druckabfall in den Simulationen.

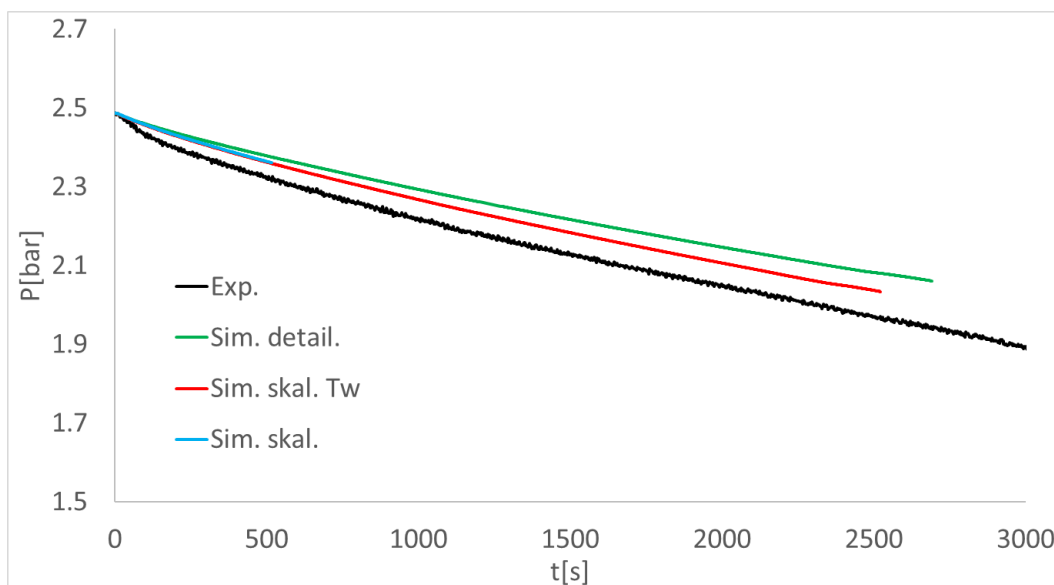


Abb. 2.40 Druck bei detaillierter Geometrie der Gebäudekondensatoren

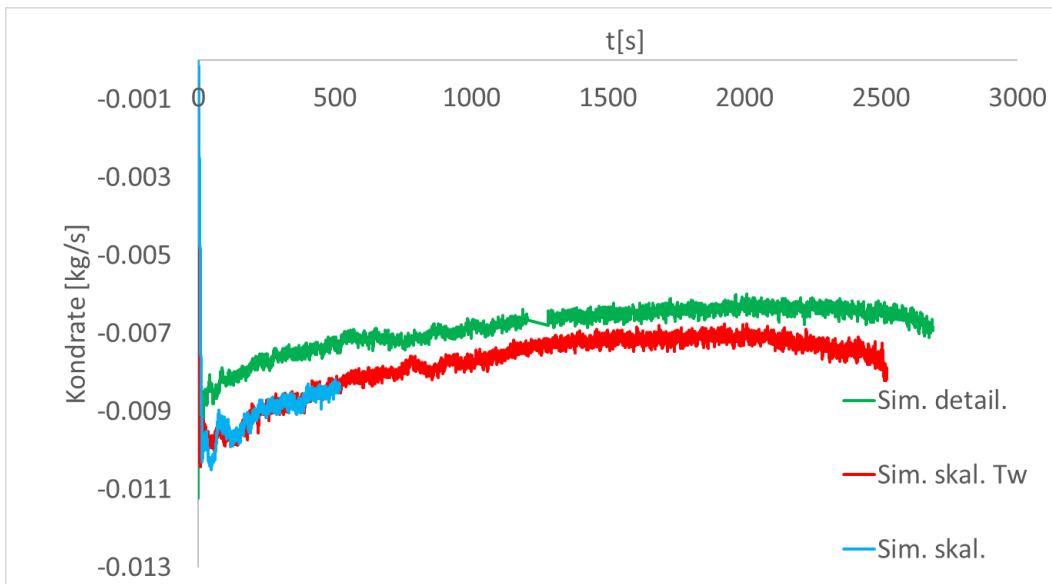


Abb. 2.41 Integrale Wandkondensationsrate

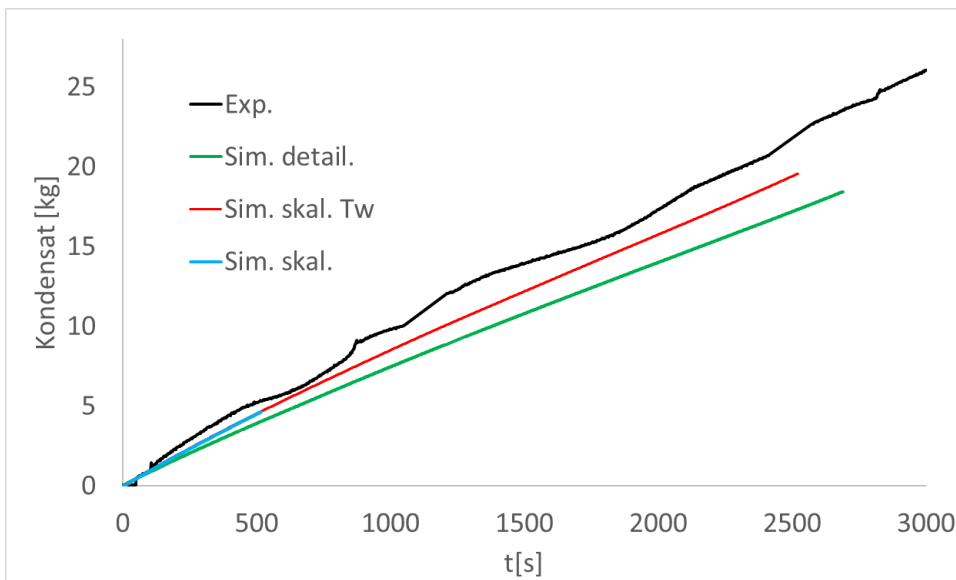


Abb. 2.42 Angefallenes Kondensat

Helium-Molenbruch

In den Experimenten der H2P6-Versuchsserie gab es zwei Effekte, die den Helium-Molenbruch in entgegengesetzte Richtungen beeinflussen. Zu Beginn der Versuche lag eine stabile Helium-Leichtgasschichtung vor. An der kalten Oberfläche des Gebäudekondensators kühlte sich das Gas ab (Abb. 2.43) und es kam zur Kondensation. Die Dichte des Gasgemischs stieg an und das Gas sank ab. Die Dichte des Gases unterhalb der Heliumschicht war allerdings noch höher als die des absinkenden kalten Gases, so dass das absinkende Gas die Heliumschicht nicht verlassen konnte (Abb. 2.44). Der

absinkende Plume des kalten Gases führte an der Grenze der Heliumschichtung zu einer Vermischung und die Heliumschicht breitete sich weiter nach unten aus. Dieser Prozess verringerte den mittleren Helium-Molenbruch der Schichtung. Durch die Dampfkondensation dagegen verringert sich der Dampfanteil des Gases im Bereich des Kondensators und damit stieg der Helium-Molenbruch an.

Der qualitative Verlauf der Heliumverteilung im Experiment und in den Simulationen ist ähnlich (Abb. 2.45 – Abb. 2.47). Oberhalb des Gebäudekondensators (A20 – C20, Höhe $\geq 6,93$ m, Abb. 2.48) ist die Vermischung sehr schwach, bei diesen Messpunkten verbleibt der Helium-Molenbruch im betrachteten Zeitraum auf einem hohen Niveau. Die darunter liegenden Messpunkte (F20 – H20, $6 \text{ m} \geq \text{Höhe} \geq 4,98$ m) haben von Beginn an einen ähnlichen Helium-Molenbruch. Dieser nimmt im Laufe des Experiments bis etwa 2500 s – 2700 s ab, während die darunter liegenden Punkte sich mit zunehmender Ausdehnung der Heliumschicht nach unten den Werten von F20 – H20 nach und nach annähern. Nachdem im gesamten Bereich unterhalb von C20 ein sehr ähnlicher Helium-Molenbruch vorliegt, steigt dieser wieder langsam an, da die Vermischung auch langsam nach oben erfolgt (siehe C20) und da durch die Verringerung des Dampfanteils durch Kondensation sich der Helium-Molenbruch erhöhte.

Die Gaszusammensetzung an den einzelnen Messstellen wurde nur in großen zeitlichen Abständen gemessen. Der Zeitpunkt der Messung ist in den Abbildungen Abb. 2.48 – Abb. 2.56) als Symbol gekennzeichnet.

An den obersten Messstellen B20 (Abb. 2.48) und C20 (Abb. 2.49), die oberhalb vom Gebäudekondensator liegen, wird der nahezu konstante Helium-Molenbruch richtig vorhergesagt. An den Messstellen, die auf Höhe des Gebäudekondensators liegen F20 (Abb. 2.50) und GH20 (Abb. 2.51), erfolgt in den Simulationen ab 400 s ein leichter kontinuierlicher Abfall des Helium-Molenbruchs, während er im Experiment bis 1800 s kaum abfällt und danach ein deutlicher Abfall auftritt. Nach 2500 s liegen die Simulationsergebnisse nur geringfügig unterhalb des Experiments. Bei den weiter unten liegenden Messstellen L20 – T20 (Abb. 2.53 – Abb. 2.56) erfolgt die Vermischung in den Simulationen deutlich schneller als im Experiment. Teilweise sinkt im Experiment vor dem Anstieg der Helium-Molenbruch sogar noch etwas ab (Abb. 2.52, Abb. 2.53). Je tiefer der Messpunkt gelegen ist, desto geringer ist der Unterschied zwischen Experiment und Simulationen. Bei den untersten Messstellen R20 und T20 erfolgt bei der Simulation „Sim. detail.“ eine etwas langsamere Vermischung, allerdings ist auch bei dieser Simulation die Vermischung noch schneller als im Experiment.

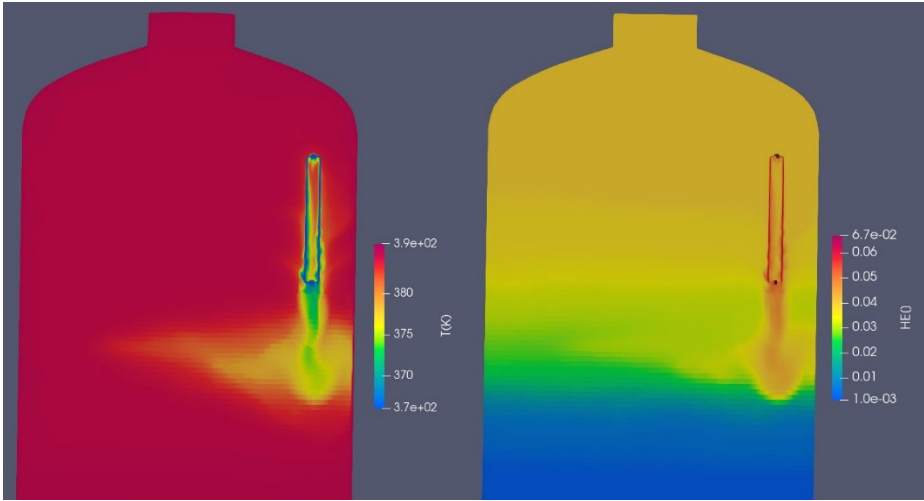


Abb. 2.43 Temperatur (links) und Helium-Massenbruch (rechts) in „Sim. detail.“ nach 50 s

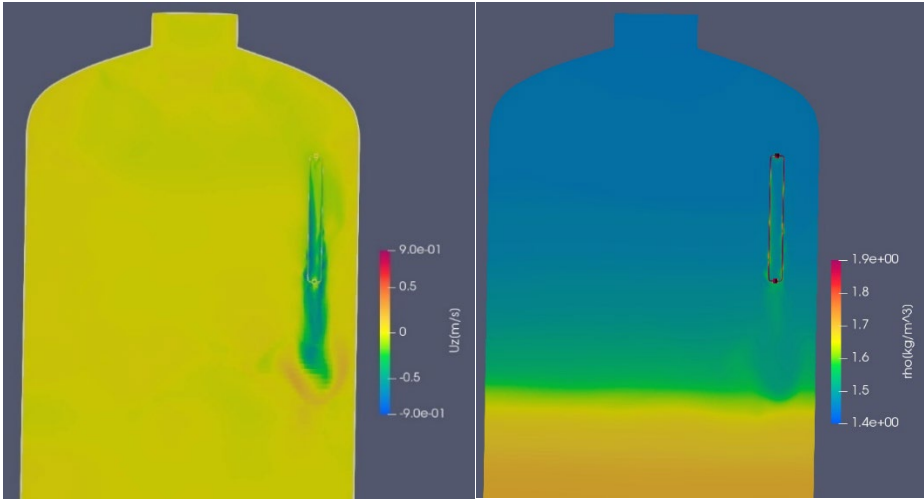


Abb. 2.44 Vertikalgeschwindigkeit (links) und Dichte (rechts) in „Sim. detail.“ nach 50 s

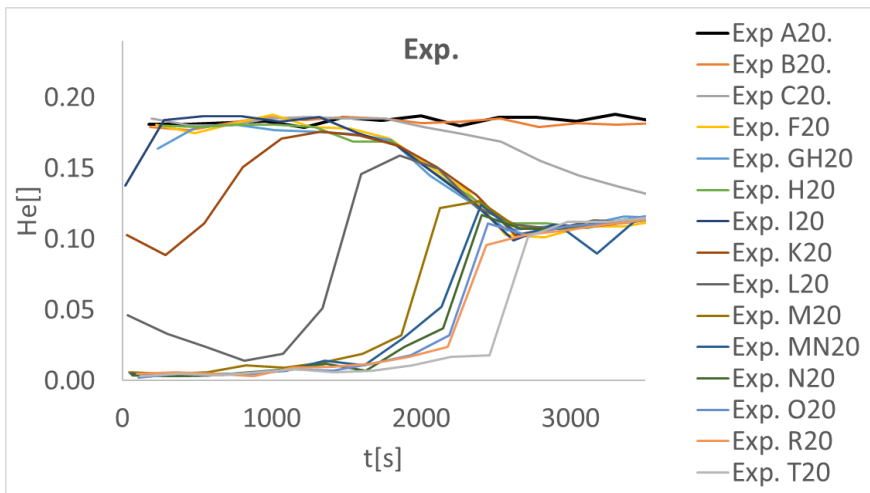


Abb. 2.45 Helium-Molenbruch im Experiment H2P6-2

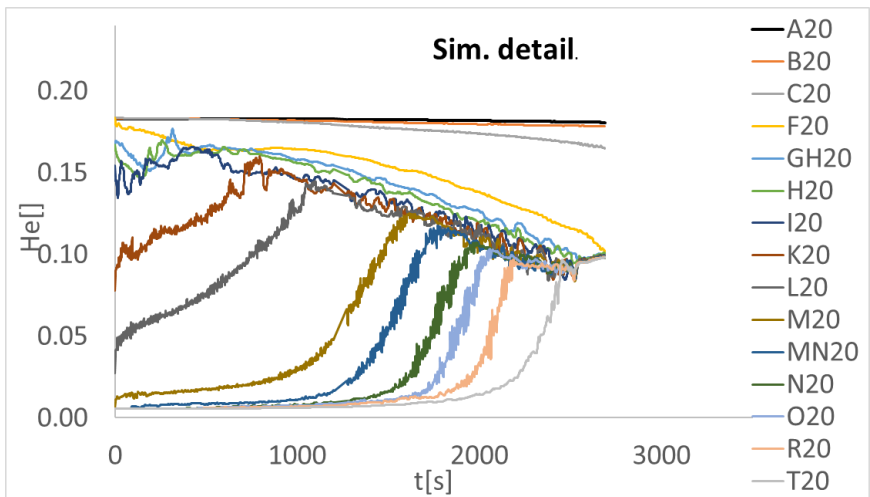


Abb. 2.46 Berechneter Helium-Molenbruch in Sim. detail.

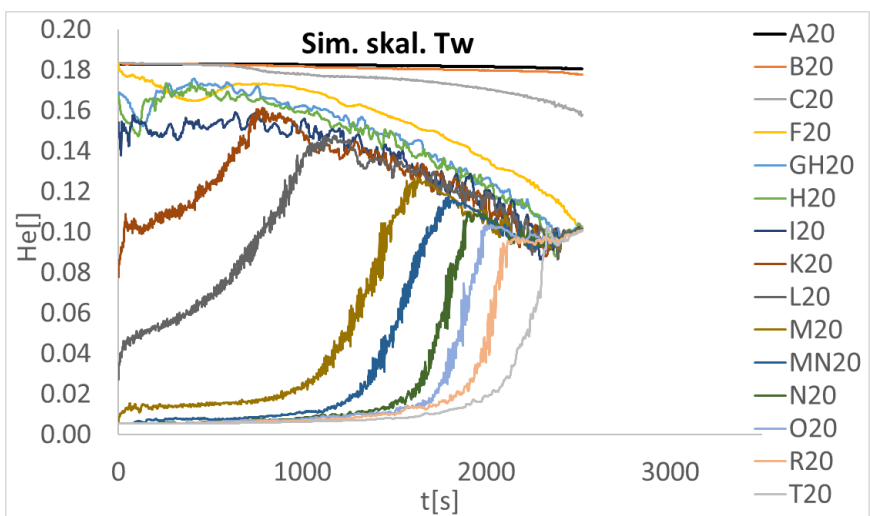


Abb. 2.47 Berechneter Helium-Molenbruch in Sim. skal. Tw

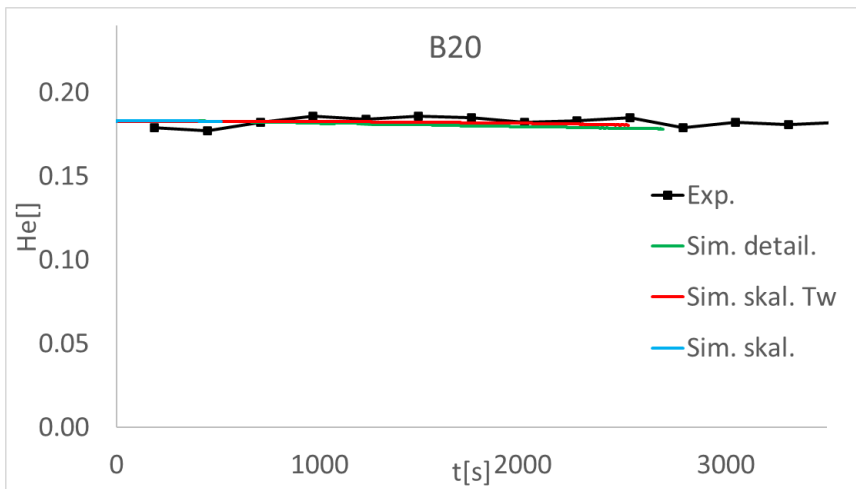


Abb. 2.48 Helium-Molenbruch an der Position B20 (Mitte, 7,48 m Höhe)

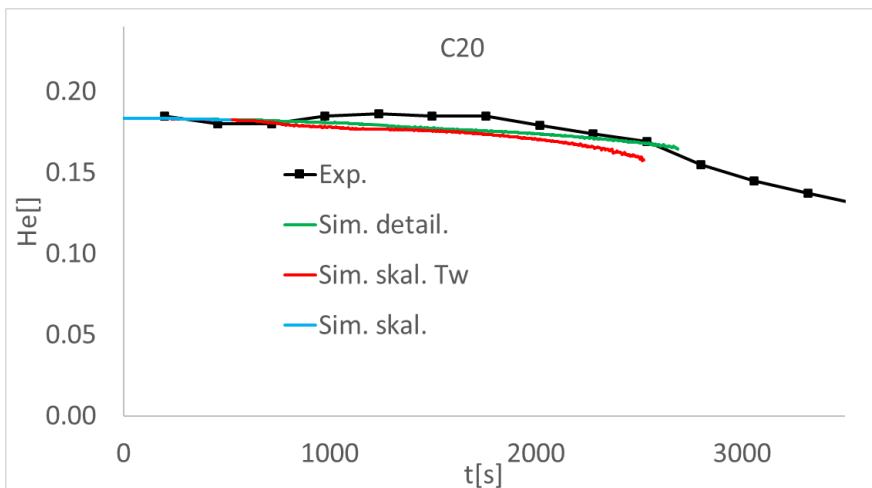


Abb. 2.49 Helium-Molenbruch an der Position C20 (Mitte, 6,9 m Höhe)

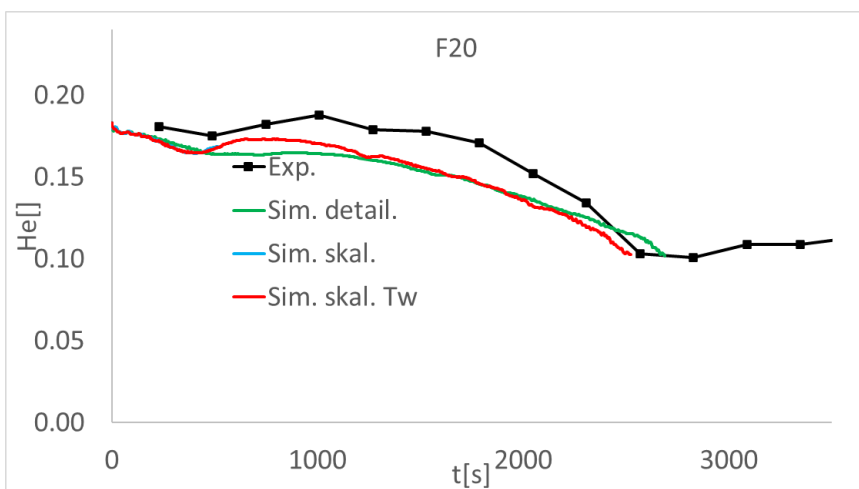


Abb. 2.50 Helium-Molenbruch an der Position F20 (Mitte, 6 m Höhe)

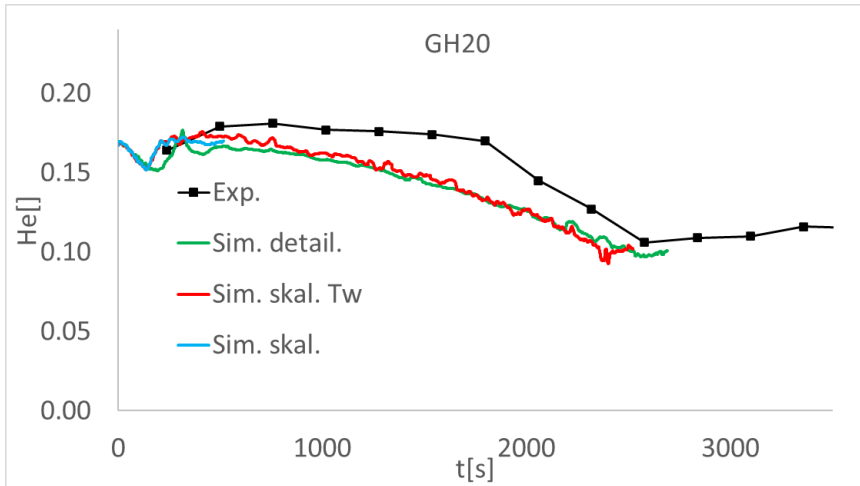


Abb. 2.51 Helium-Molenbruch an der Position GH20 (Mitte, 5,3 m Höhe)

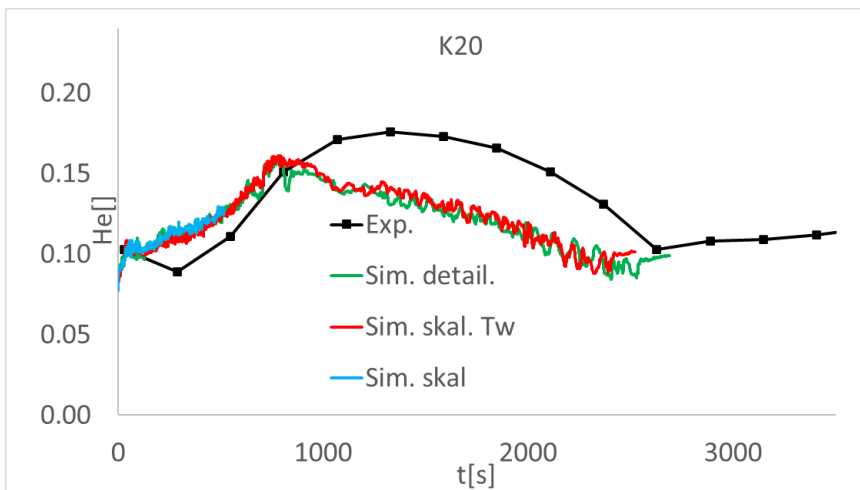


Abb. 2.52 Helium-Molenbruch an der Position K20 (Mitte, 4,0 m Höhe)

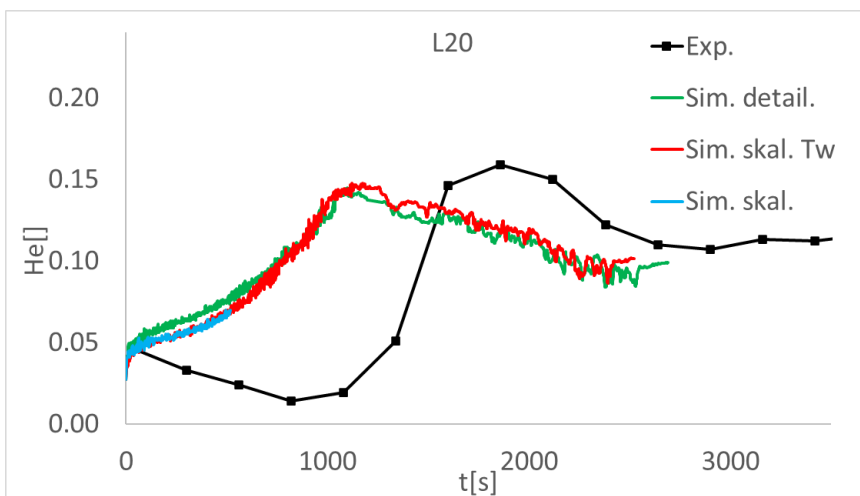


Abb. 2.53 Helium-Molenbruch an der Position L20 (Mitte, 3,68 m Höhe)

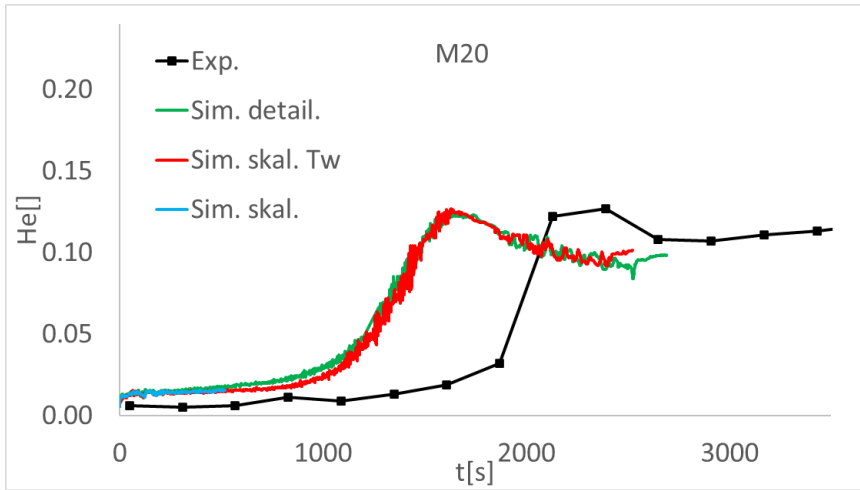


Abb. 2.54 Helium-Molenbruch an der Position M20 (Mitte, 3,03 m Höhe)

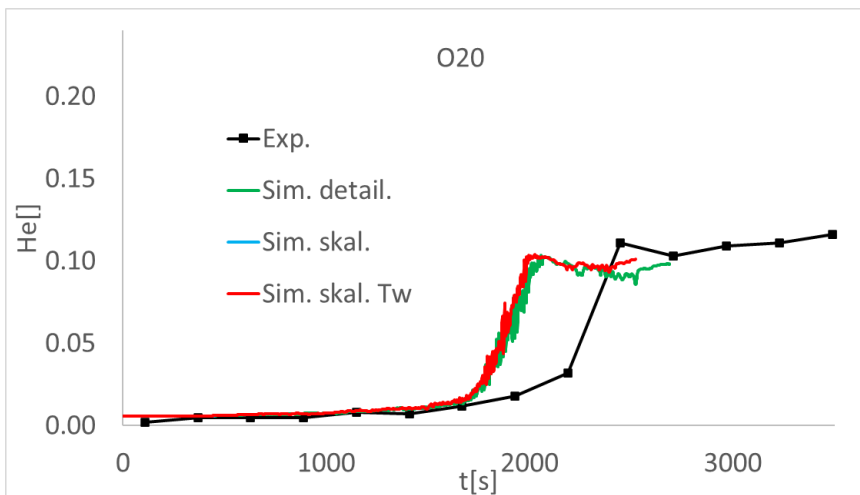


Abb. 2.55 Helium-Molenbruch an der Position O20 (Mitte, 2,1 m Höhe)

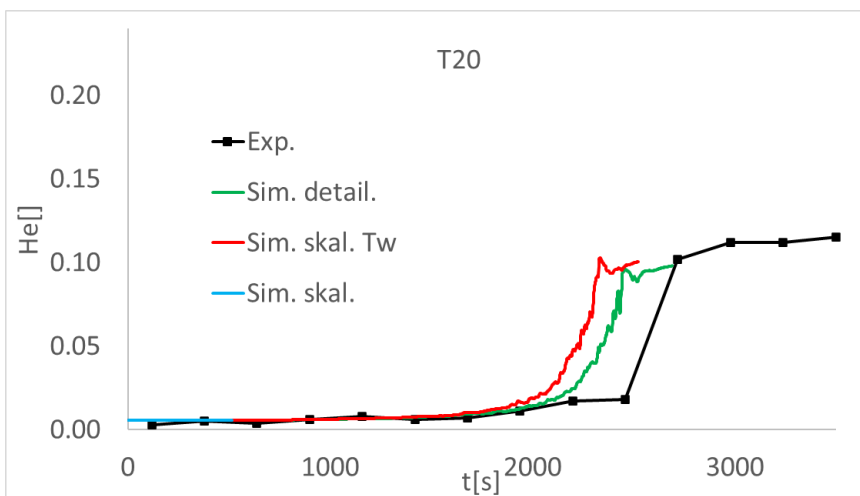


Abb. 2.56 Helium-Molenbruch an der Position T20 (Mitte, 0,54 m Höhe)

Temperatur

Die Rechnungen „Sim. skal.“ und „Sim. skal. Tw“ berechnen sehr ähnliche Temperaturverläufe. Diese Simulationen mit skaliertem Gebäudekondensator sagen tendenziell etwas niedrigere Temperaturen voraus als die Rechnung „Sim. detail“. Die Abweichung ist aber fast überall kleiner als 1,5 K. Diese etwas niedrigere Temperatur ist konsistent mit der etwas höheren Kühlleistung des skalierten Gebäudekondensators. An den Messstellen oberhalb von 5 m (Abb. 2.57 – Abb. 2.59) wird der Temperaturverlauf von den Simulationen in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Die Abweichungen sind meist nicht deutlich größer als der Messfehler von 0,7 K. Unterhalb des Gebäudekondensators ergibt sich die Hauptabweichung zwischen Experiment und Simulation dadurch, dass in den Simulationen die Vermischung im unteren Bereich schneller verläuft. Der prinzipielle Verlauf der Temperatur und ihre Höhe vor / nach der Schichtungsablösung wird mit moderaten Fehlern von meist nicht mehr als 2 K berechnet. Die größte Abweichung ergibt sich bei K20 (4 m Höhe). Hier wird die Temperatur durchgehend überschätzt, die größte Abweichung tritt dabei zu Beginn der Simulation $t < 700$ s auf, danach ist die Übereinstimmung insbesondere von „Sim. skal. Tw“ besser.

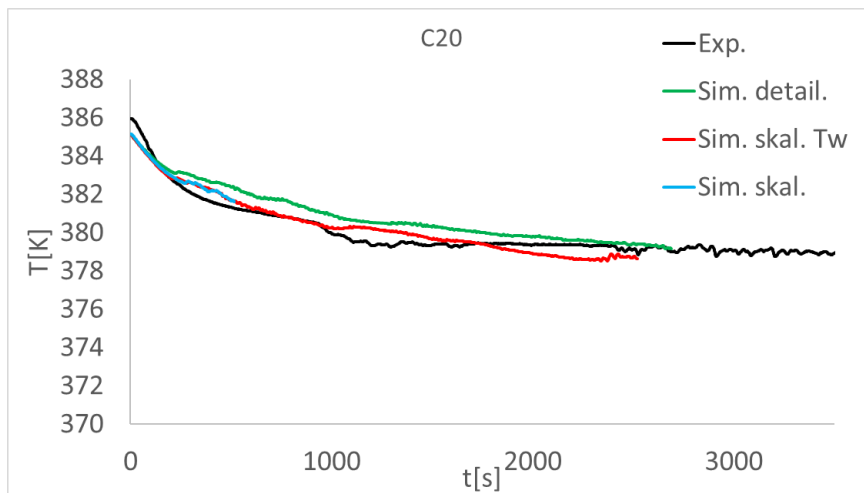


Abb. 2.57 Temperatur an der Position C20 (Mitte, 6,93 m Höhe)

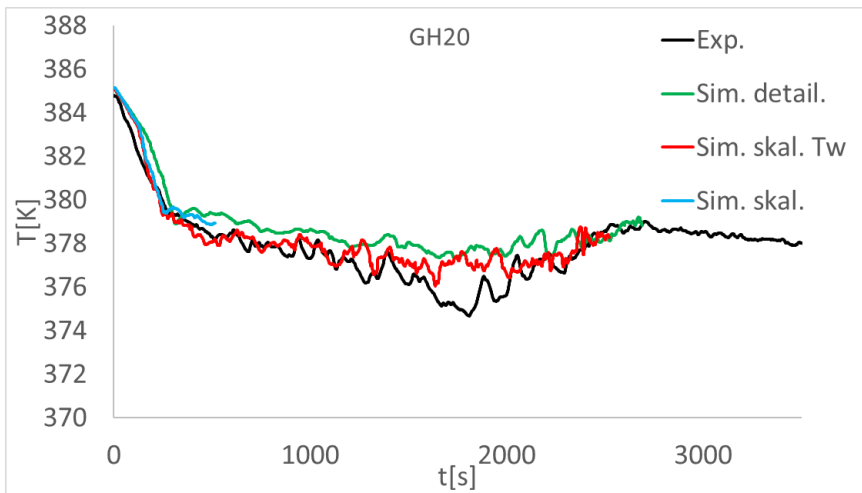


Abb. 2.58 Temperatur an der Position GH20 (Mitte, 5,3 m Höhe)

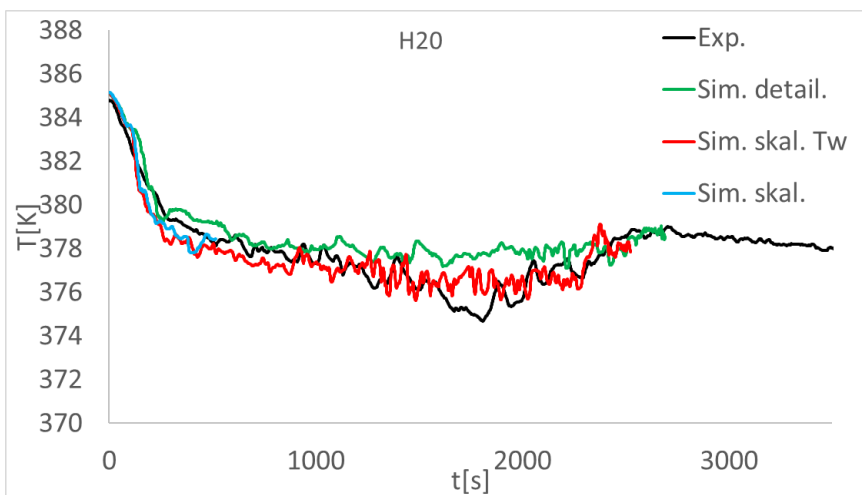


Abb. 2.59 Temperatur an der Position H20 (Mitte, 4,98 m Höhe)

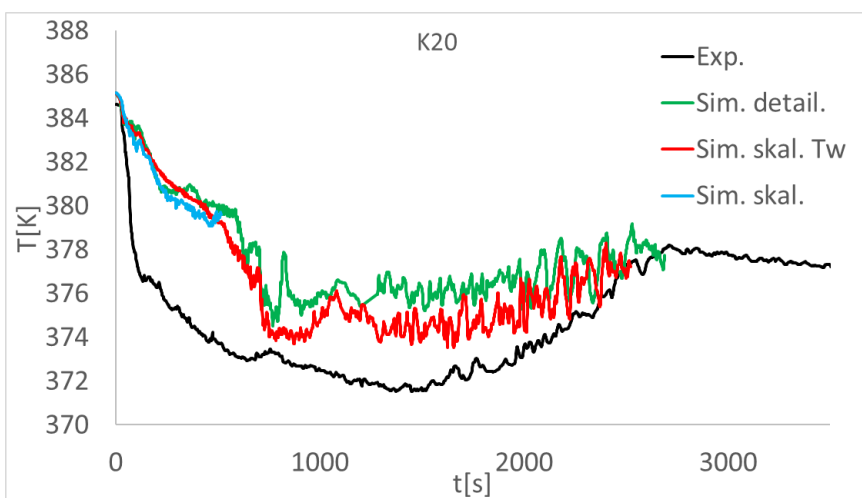


Abb. 2.60 Temperatur an der Position K20 (Mitte, 4,0 m Höhe)

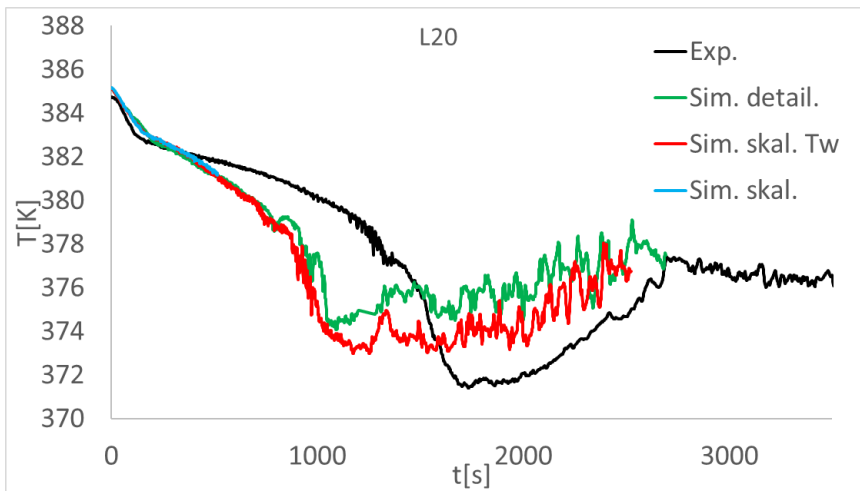


Abb. 2.61 Temperatur an der Position L20 (Mitte, 3,68 m Höhe)

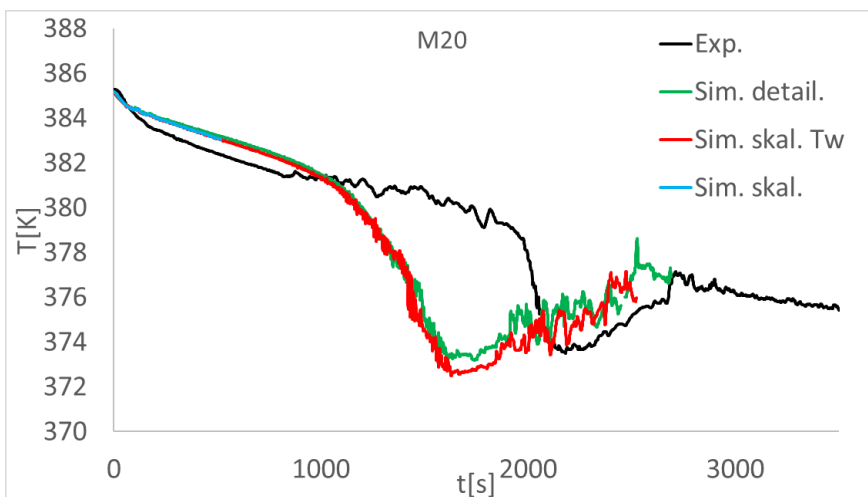


Abb. 2.62 Temperatur an der Position M20 (Mitte, 3,03 m Höhe)

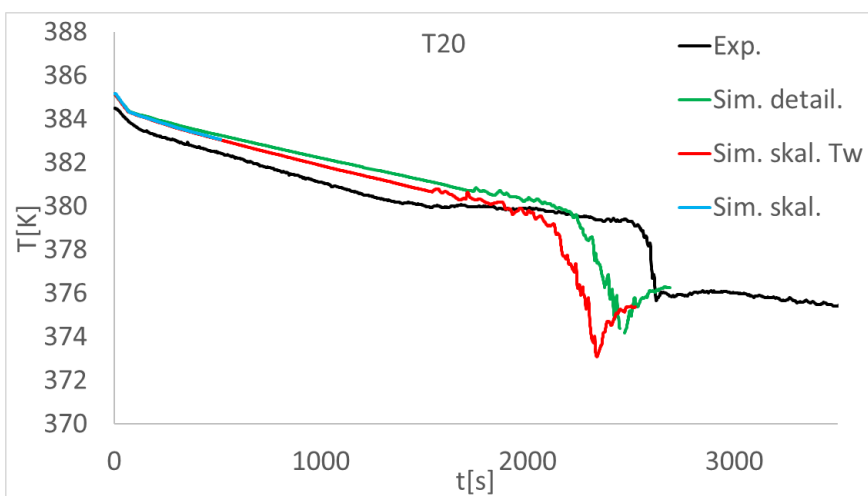


Abb. 2.63 Temperatur an der Position T20 (Mitte, 0,54 m Höhe)

2.4.5 Simulationen mit vereinfachter Gebäudekondensatorgeometrie

2.4.5.1 Einleitung

Die Simulationen mit detaillierter Gebäudekondensatorgeometrie konnten zwar die Kondensation gut beschreiben, allerdings betrug die Rechenzeit mehrere Monate, was für praktische Containmentanwendungen zu aufwendig ist. Grund für die hohe Rechenzeit ist die komplizierte Geometrie des Gebäudekondensators und die feine Vernetzung, die an der Oberfläche benötigt wird, um die Wandkondensation richtig zu simulieren. Deshalb wird im Folgenden versucht, den Gebäudekondensator mit einer vereinfachten Geometrie zu simulieren.

2.4.5.2 Geometrie und CFD-Gitter der Rechnungen mit vereinfachter Geometrie

Es wurden drei unterschiedliche vereinfachte Geometrien für den Gebäudekondensator getestet: ein Quader, zwei senkrecht stehende Platten und ein Bündel mit 21 Rohren (Abb. 2.64). Bei allen vereinfachten Geometrien wurden die Fläche der gekühlten Oberfläche und die Höhe und die Position des Kondensatormodells – soweit möglich – entsprechend dem Experiment gewählt. Durch die vereinfachte Geometrie verringert sich die Anzahl der Zellen insbesondere im Gasraum deutlich (Tab. 2.4), zudem ist die minimale Zellgröße bei den vereinfachten Geometrien deutlich größer, so dass bei gleicher maximaler Courant-Zahl (max. 5) größere Zeitschritte verwendet werden können. Dadurch ergibt sich eine signifikante Rechenzeiterparnis um einen Faktor von etwa 20 beim Quader, ca. 15 bei 2 Platten und um einen Faktor von ca. 7 bei der Geometrie „21 Rohre“. Bei den Simulationen mit vereinfachter Geometrie wurden die gleichen Modelle und Randbedingungen verwendet wie bei den Simulationen mit detaillierter Gebäudekondensatorgeometrie. An den gekühlten Kondensatorwänden wurde als Temperaturrandbedingung die mittlere Kühlwassertemperatur aus dem Experiment verwendet. Die Kondensatorwand wurde im Gegensatz zu „Sim. skal. T_w “ nicht simuliert.

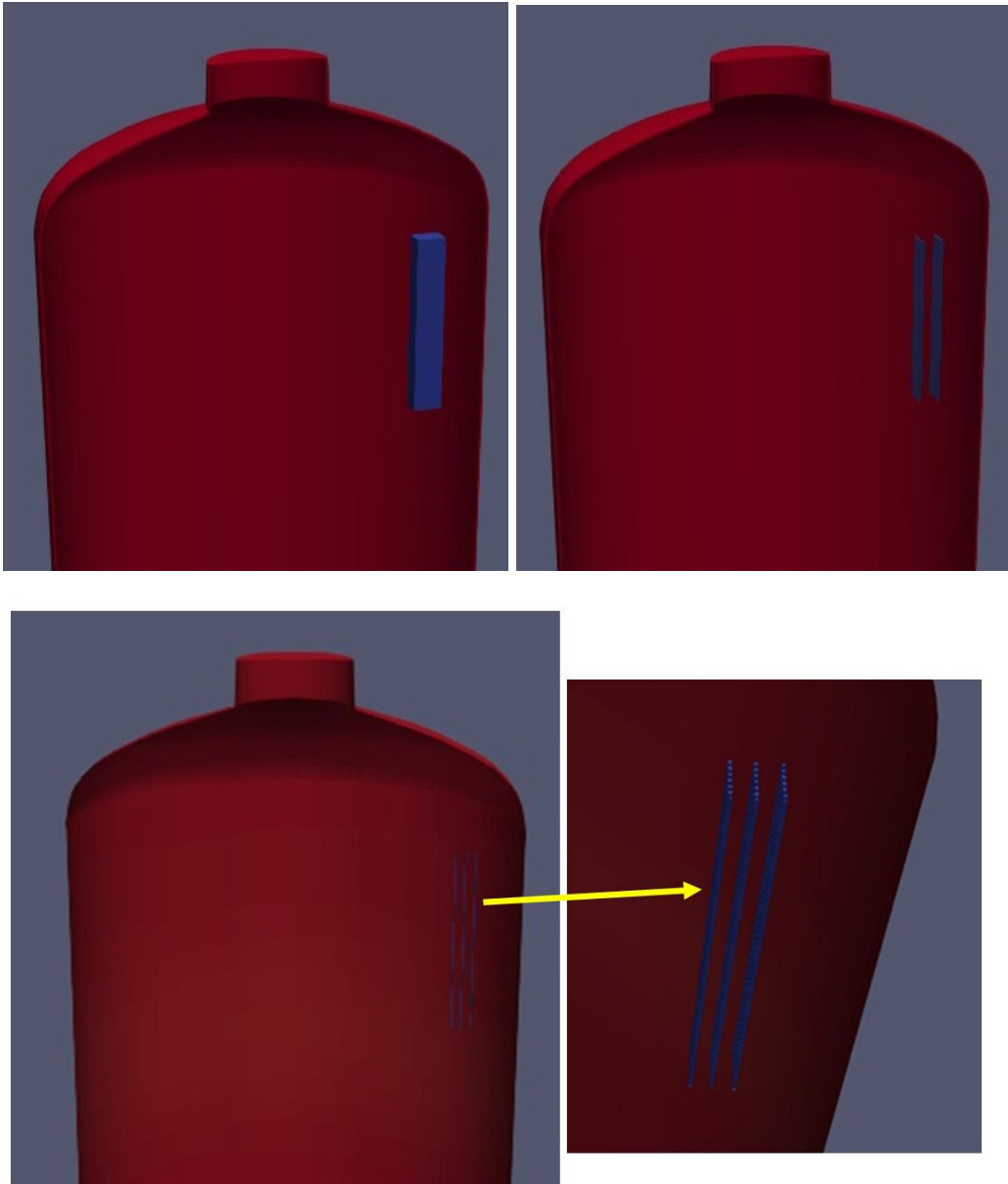


Abb. 2.64 Vereinfachte Geometrien: Oben links: Quader, oben rechts: 2 Platten, unten: 21 Rohre

Tab. 2.4 Vergleich der CFD-Gitter mit vereinfachter Gebäudekondensatorgeometrie

Geometrie	Gaszellen	Wandzellen
Sim skaliert Tw	7,01e+6	0,74e+6
Quader	2,43e+6	0,21e+6
2 Platten	2,86e+6	0,23e+6
21 Rohre	3,44e+6	0,24e+6

2.4.5.3 Simulationsergebnisse mit vereinfachter Geometrie

Bei der Diskussion der Simulationsergebnisse mit vereinfachter Gebäudekondensatorgeometrie erfolgt neben dem Vergleich mit dem Experiment auch ein Vergleich mit der Simulation „Sim. skal. Tw“, bei der der Gebäudekondensator detailliert modelliert wurde. Da die gleichen Modelle verwendet werden, sollte im Idealfall, wenn die geometrische Vereinfachung keinen zusätzlichen Fehler verursacht, das gleiche Ergebnis wie mit „Sim. skal. Tw“ erzielt werden. Liegt die Simulation mit vereinfachter Geometrie näher am Experiment, so liegt das daran, dass der Fehler durch die geometrische Vereinfachung andere Fehler/Ungenauigkeiten in der Simulation teilweise kompensiert.

Alle Simulationen mit vereinfachter Geometrie berechneten einen deutlich schwächeren Druckabfall als „Sim. skal. Tw“ und das Experiment (Abb. 2.65). Im Zeitraum 200 s – 2500 s fällt der Druck im Experiment um 0,427 bar, in „Sim. skal. Tw“ um 0,393 bar. Bei „Sim. Quader“ betrug der Abfall dagegen nur 0,274 bar, bei „Sim. 21 Rohre“ 0,342 bar, was einem relativen Fehler von ca. 36 % bzw. 20 % entspricht. Die Simulation „Sim. „Platten“ wurde nach 812 s abgebrochen, da sie ähnlich hohe Abweichungen wie „Sim. Quader“ gezeigt hat. Der geringere Druckabfall ist mit der geringeren integralen Kondensationsrate (Abb. 2.66) und der entsprechend geringeren Menge an Kondensat zu erklären (Abb. 2.67). Die bessere Übereinstimmung bei der vereinfachten Geometrie „21 Rohre“ kann damit erklärt werden, dass die Wandkondensation an einer gekrümmten Fläche stärker ist als bei einer entsprechenden ebenen Fläche /DEH 20/.

Das Experiment und alle Simulationen zeigten qualitativ einen ähnlichen Verlauf bei den Helium-Molenbrüchen (Abb. 2.45, Abb. 2.47, Abb. 2.68, Abb. 2.69), quantitativ gab es aber Abweichungen. Hauptunterschied war die Geschwindigkeit, mit der sich die Heliumschichtung durch den aktiven Gebäudekondensator nach unten ausbreitete. Bei „Sim. skal. Tw“ erfolgte die Schichtungsausbreitung durch die Vermischung mit dem unterhalb der Schichtung liegenden Gas am schnellsten, bei der vereinfachten Geometrie

„Quader“ erfolgte sie am langsamsten. Das korreliert mit der Stärke der Kondensation am Gebäudekondensator.

Oberhalb des Gebäudekondensators in 7,48 m Höhe (B20) wurde von allen Simulationen richtig eine weiterhin intakte Heliumschichtung berechnet (Abb. 2.70). In Höhe des unteren Bereichs des Gebäudekondensators (H20, 4,98 m Höhe, Abb. 2.71) wurde von allen Simulationen ein um 0,01 bis 0,03 zu geringer Helium-Molenbruch berechnet. Am Messpunkt M20 (3,03 m Höhe, Abb. 2.72), der etwa 2 m tiefer als der Gebäudekondensator liegt, berechneten alle Simulationen einen schnelleren Anstieg des Helium-Molenbruchs. Der Anstieg erfolgte bei „Sim. skal. Tw“ am frühesten, bei „Sim. Quader“ am spätesten. An den weiter unten liegenden Messpunkten (z. B. T20, 0,54 m Höhe) näherte sich die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Heliumschichtung dem Experiment an. Während „Sim. skal. Tw“ den Zeitpunkt der Vermischung bei T20 zu früh berechnete, so berechnete „Sim. 21 Rohre“ den Zeitpunkt in guter Übereinstimmung mit dem Experiment und „Sim. Quader“ sogar einen zu späten Zeitpunkt.

Die Temperaturen wurden von den containmentFOAM-Simulationen insgesamt in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet (Abb. 2.74 – Abb. 2.78). Je nach geometrischer Vereinfachung ergaben sich aber lokal Abweichungen um wenige K – wobei keine der Simulationen durchweg eine bessere Übereinstimmung erzielen konnte.

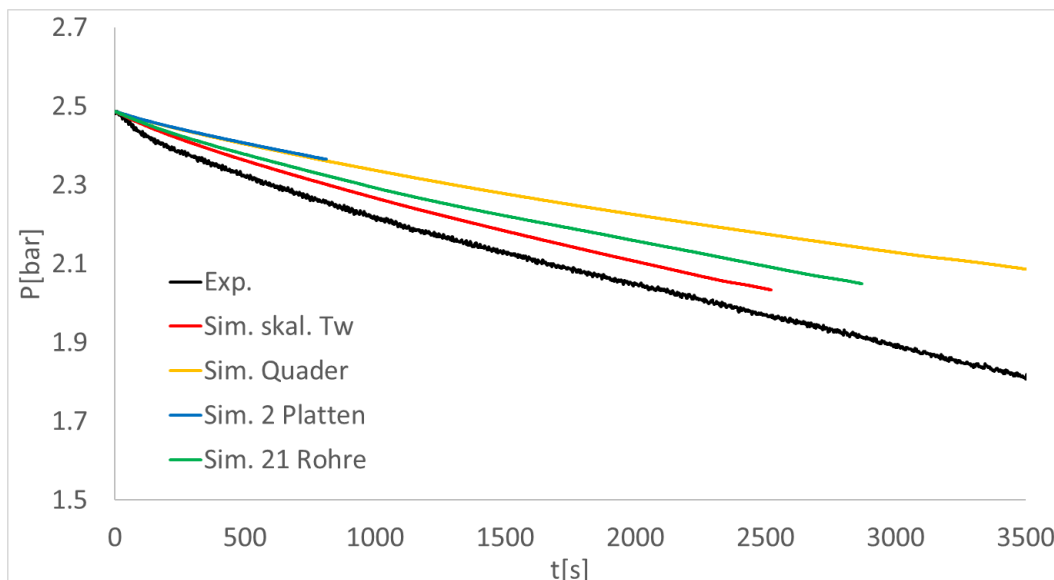


Abb. 2.65 Druckverlauf bei den Simulationen mit vereinfachter Geometrie

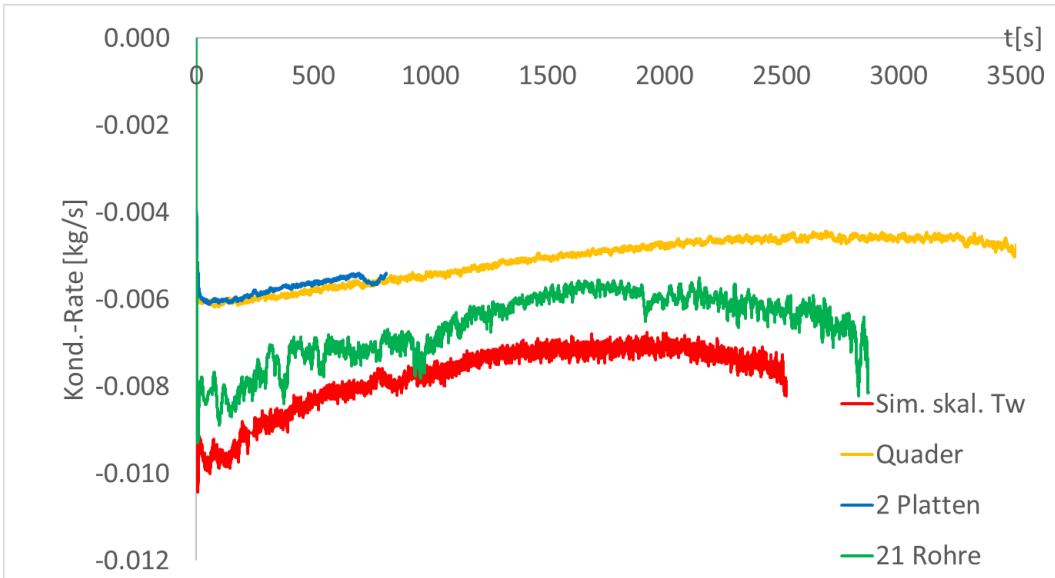


Abb. 2.66 Integrale Wandkondensationsrate

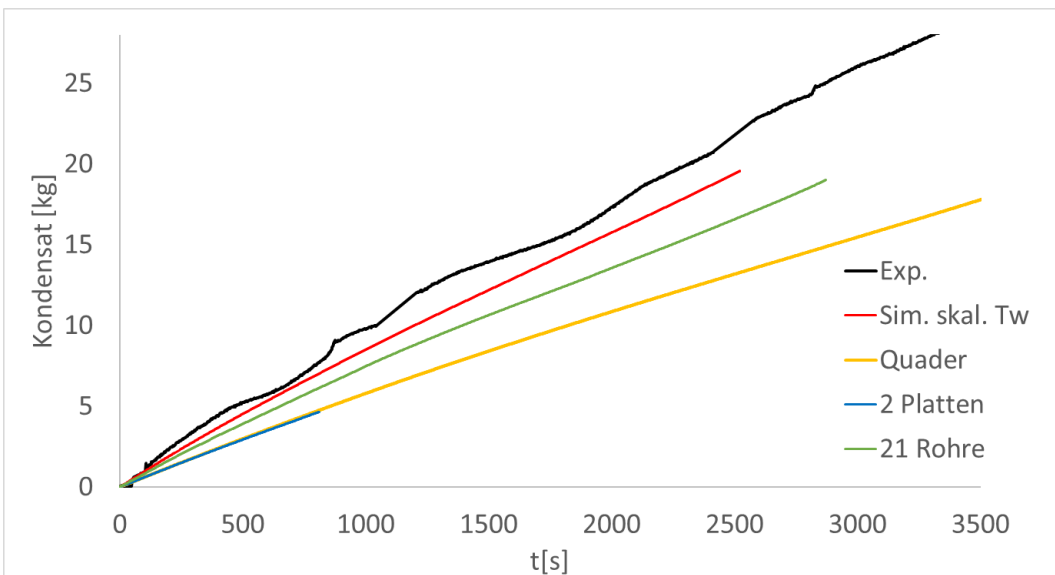


Abb. 2.67 Angefallenes Kondensat

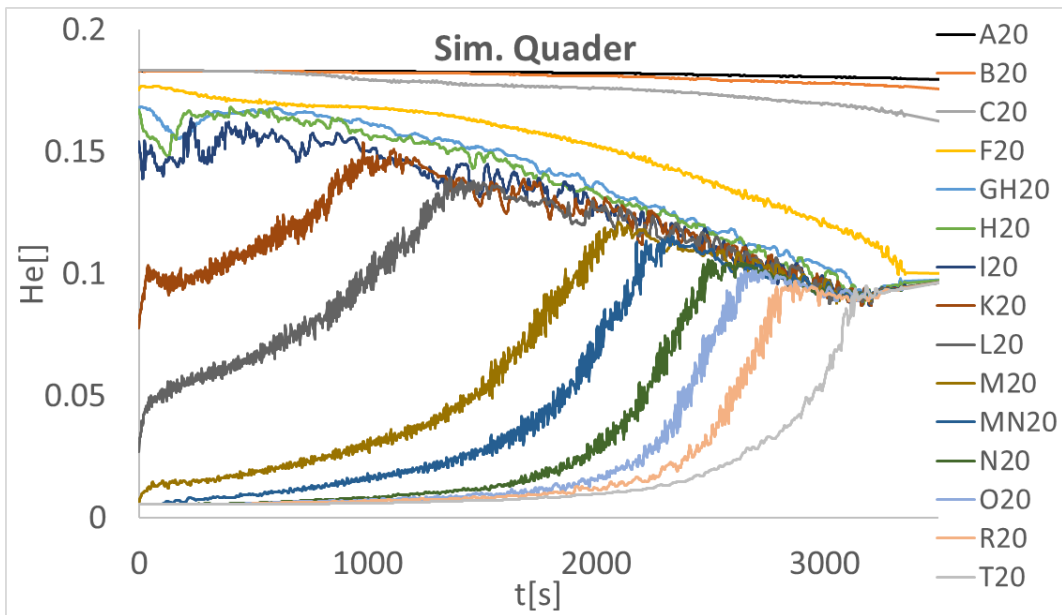


Abb. 2.68 Helium-Molenbruch bei „Sim. Quader“

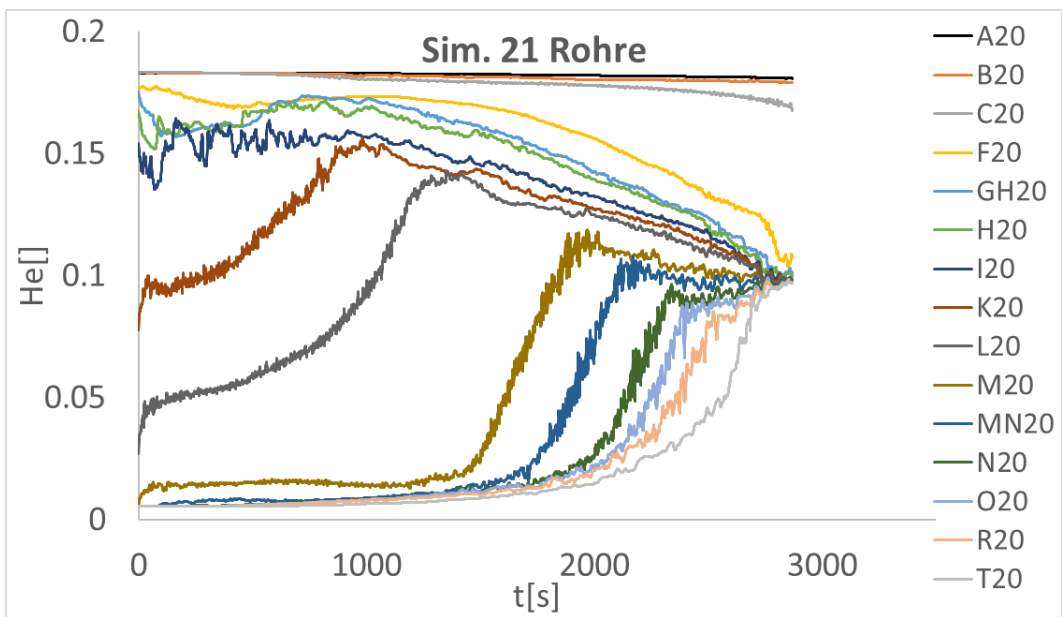


Abb. 2.69 Helium-Molenbruch bei „Sim. 21 Rohre“

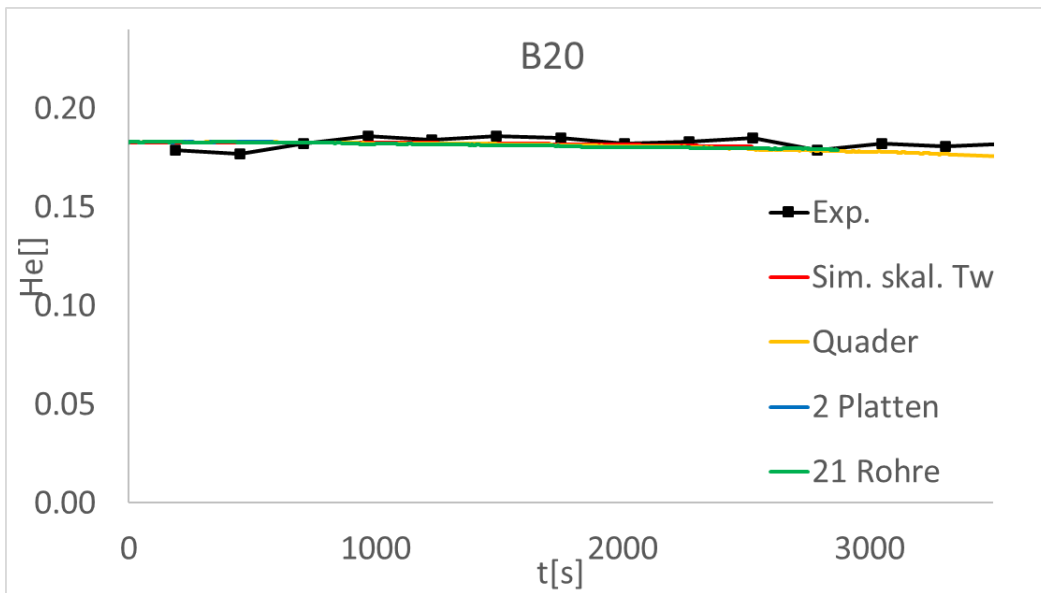


Abb. 2.70 Helium-Molenbruch an der Position B20 (Mitte, 7,48 m Höhe)

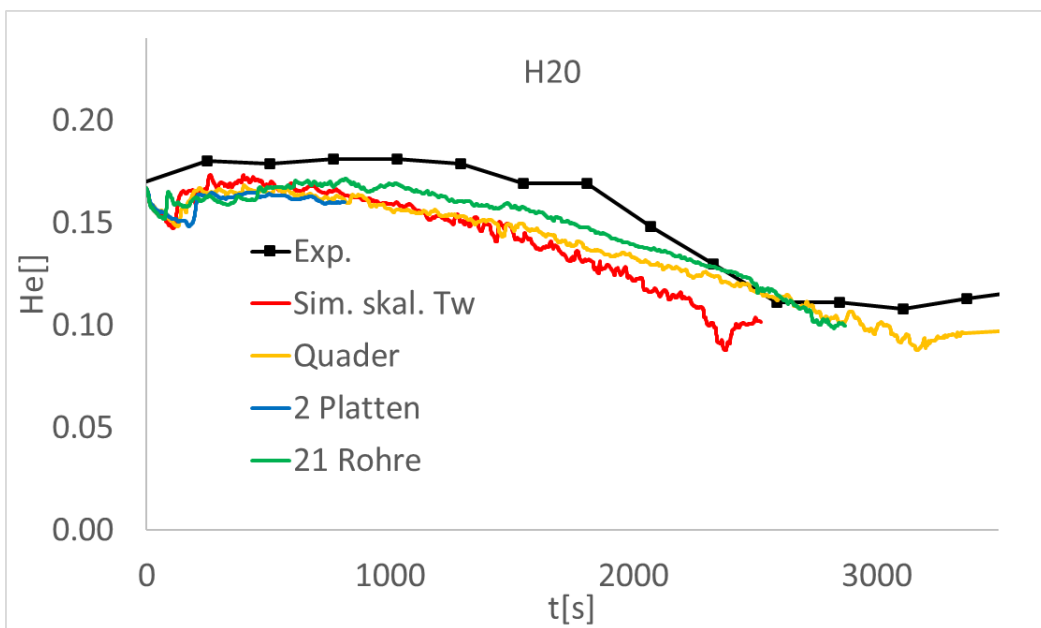


Abb. 2.71 Helium-Molenbruch an der Position H20 (Mitte, 4,98 m Höhe)

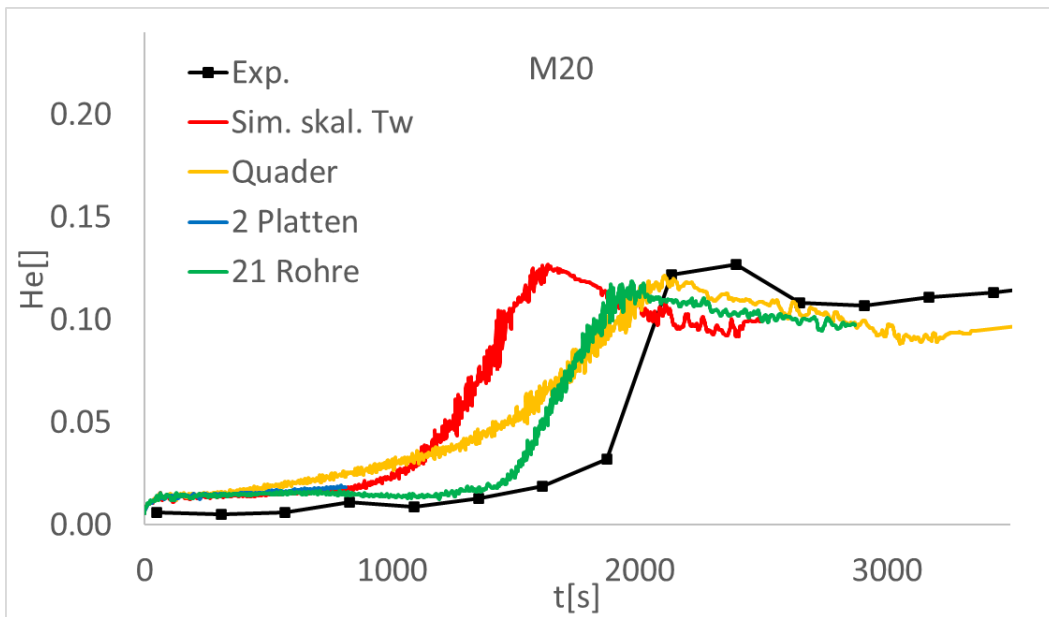


Abb. 2.72 Helium-Molenbruch an der Position M20 (Mitte, 3,03 m Höhe)

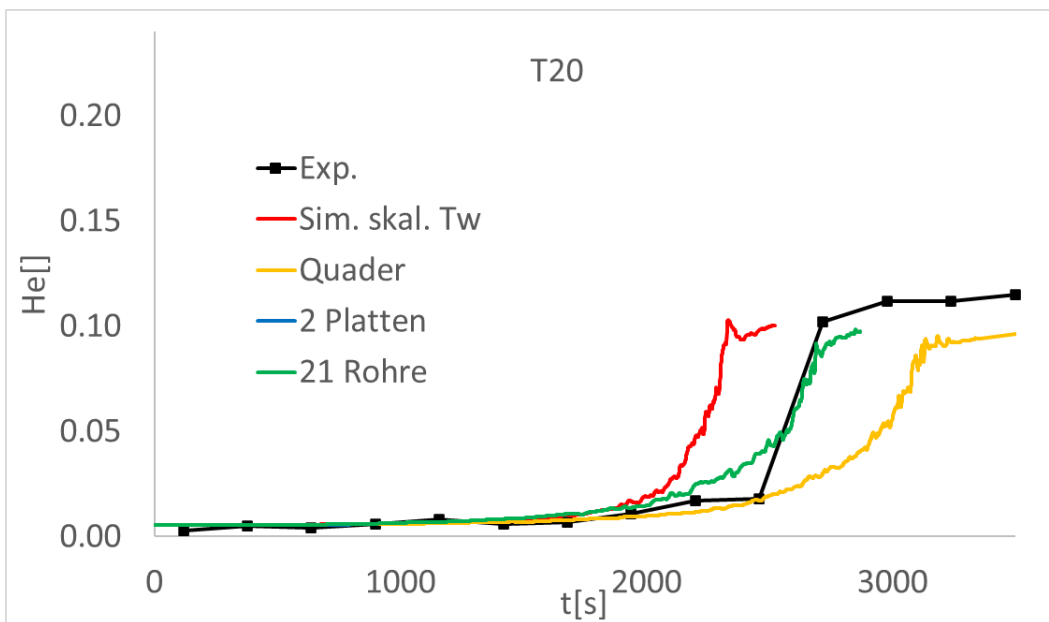


Abb. 2.73 Helium-Molenbruch an der Position T20 (Mitte, 0,54 m Höhe)

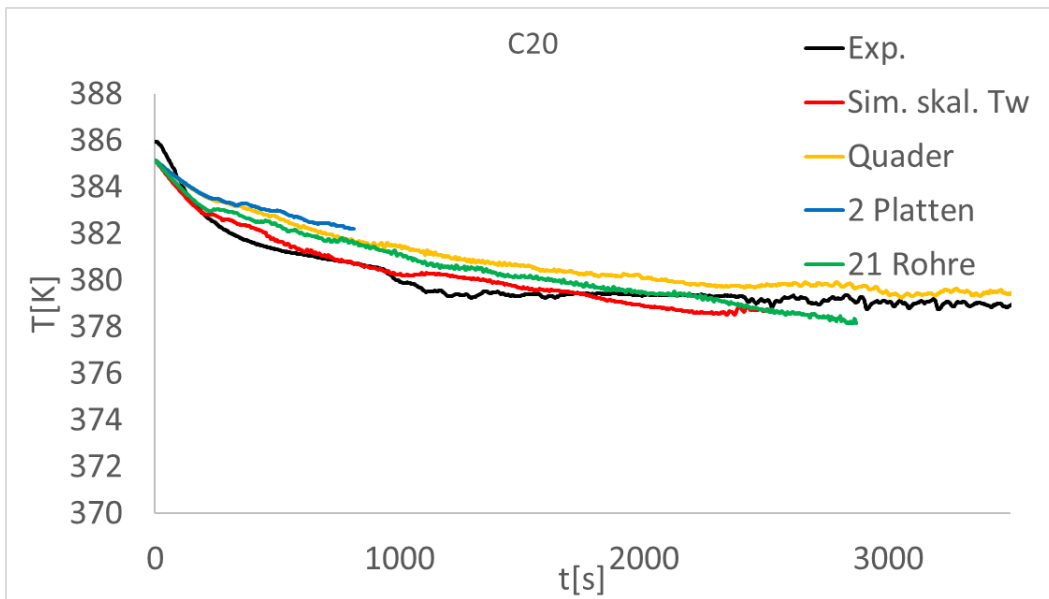


Abb. 2.74 Temperatur an der Position C20 (Mitte, 6,93 m Höhe)

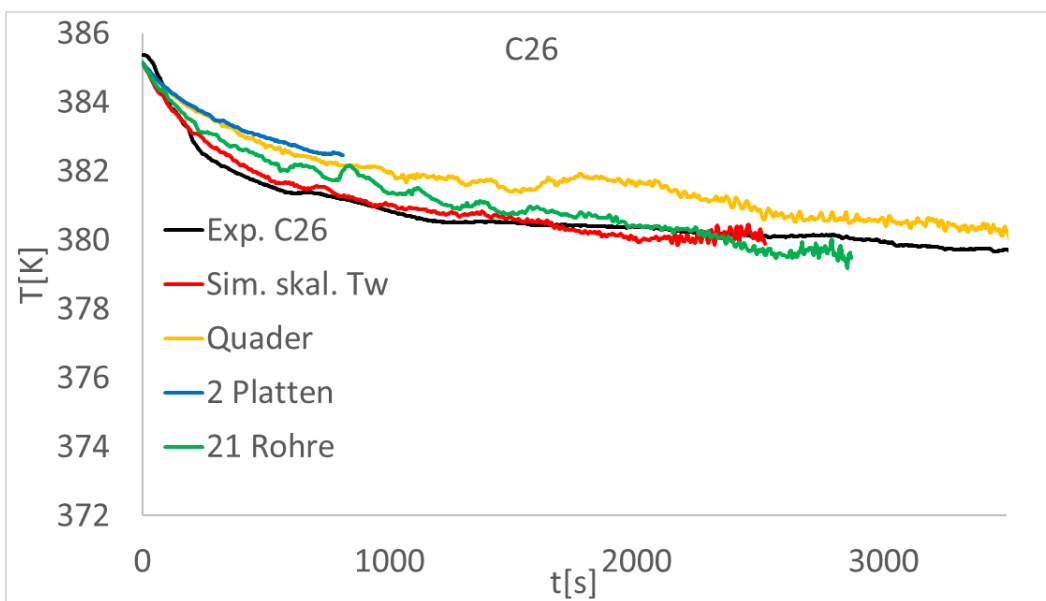


Abb. 2.75 Temperatur an der Position C26 (6,93 m Höhe, Radius 1,43 m)

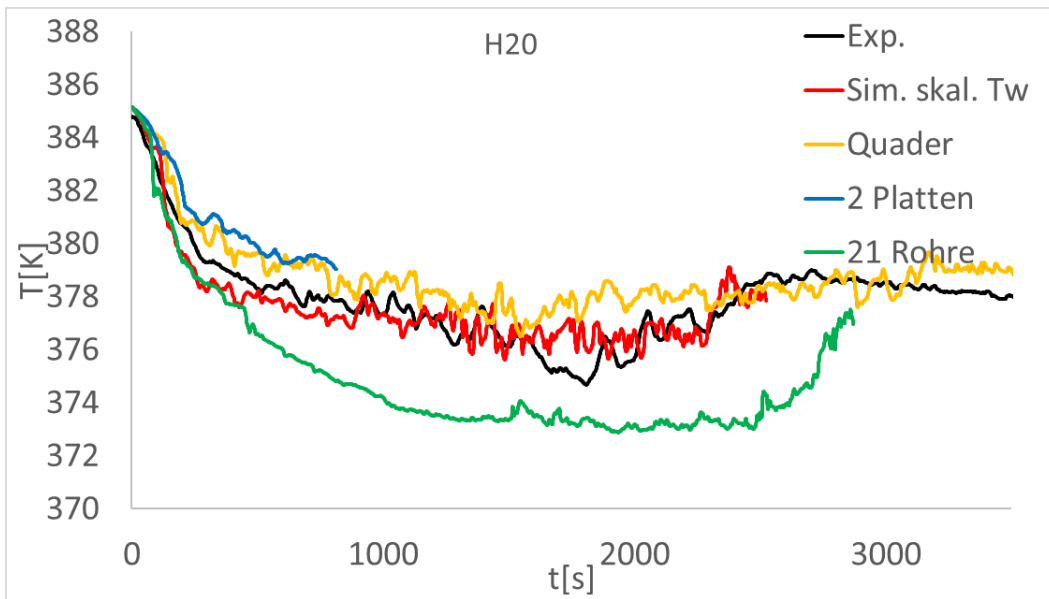


Abb. 2.76 Temperatur an der Position H20 (Mitte, 4,98 m Höhe)

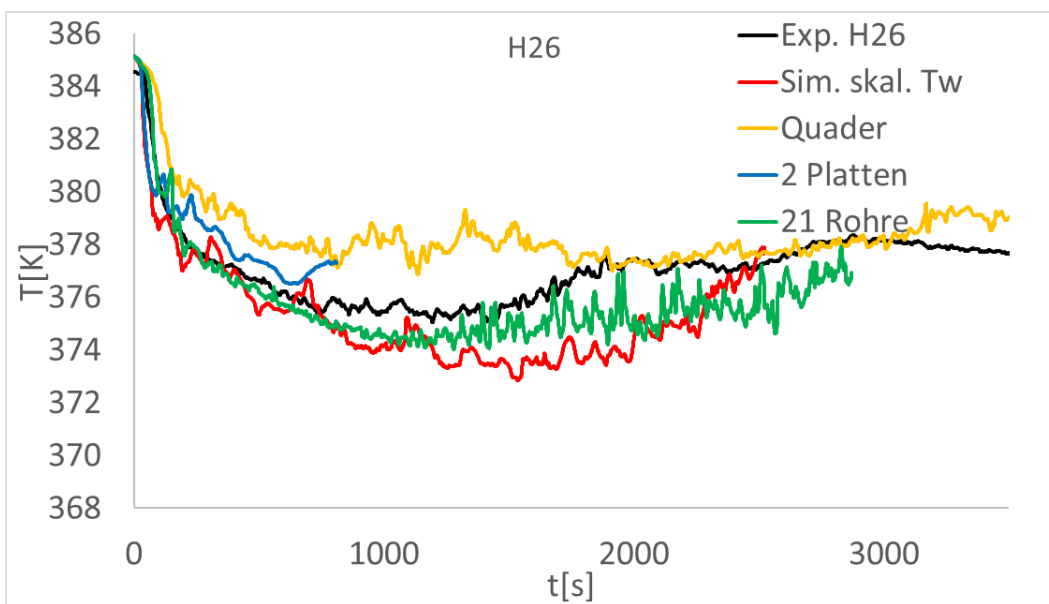


Abb. 2.77 Temperatur an der Position H26 (4,98 m Höhe, Radius 1,43 m)

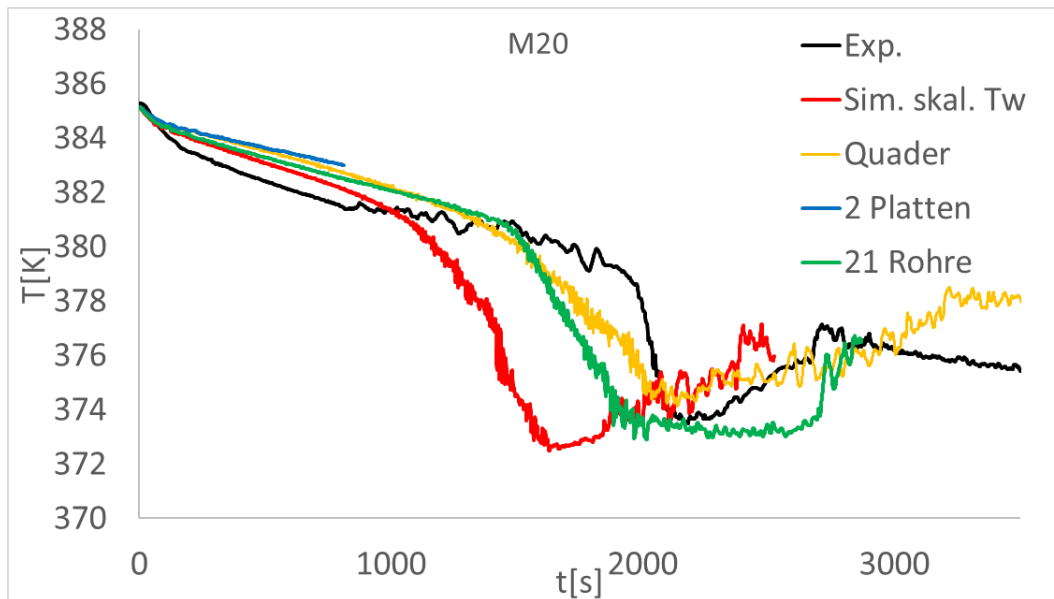


Abb. 2.78 Temperatur an der Position M20 (Mitte, 3,03 m Höhe)

2.4.6 Das Experiment H2P6_1

Das Experiment H2P6_1 unterschied sich im Wesentlichen von H2P6_2 dadurch, dass alle drei Gebäudekondensatoren aktiv waren. Dadurch erfolgten eine schnelle Abkühlung und eine stärkere Kondensation, was dazu führte, dass die relevanten Effekte wie Druckabfall und Auflösung der Heliumschicht deutlich schneller eintraten. Bis auf die Anzahl der Gebäudekondensatoren unterschieden sich die Start- und Randbedingungen der beiden Experimente nur unwesentlich.

2.4.7 Simulation H2P6_1

In den Nachrechnungen von H2P6_1 wurden die gleichen Modelle verwendet wie in „Sim. skal. Tw“. Einzige Ausnahme war die Temperaturrandbedingung für die gekühlten Rohre in den 3 Gebäudekondensatoren. In H2P6_2 wurde in Simulationen, bei denen die Kühlmitteltemperatur modelliert wurde, eine mittlere Temperatur angenommen, die aus den experimentellen Temperaturen am Zu- und Abfluss des Gebäudekondensators berechnet wurde. Für die im Versuch H2P6_2 vorliegenden Bedingungen war diese starke Vereinfachung ausreichend. In H2P6_1 wurde in der Simulation „Sim. Tw linear“ eine Modellverbesserung vorgenommen. Am Auslass oben am Kondensator und am Einlass unten wurden die zeitabhängigen Temperaturen aus dem Experiment gesetzt, für den dazwischen liegenden Bereich erfolgte eine lineare Interpolation abhängig von der Höhe. Für jeden Gebäudekondensator erfolgte die Interpolation unabhängig, da die Erwärmung des Kühlmittels für jeden Gebäudekondensator unterschiedlich sein kann.

Das Wandtemperaturmodell aus „Sim. Tw linear“ hat aber genauso wie das aus „Sim. skal. Tw“ eine Schwäche; es benötigt als Eingabegröße die Kühlwassertemperatur am Kondensatoraustritt. Diese Größe ist in realen Anwendungen nicht bekannt und sollte ein Ergebnis der Simulation sein. Deshalb wurde das Modell weiterentwickelt, so dass es die für die Interpolation benötigte Temperatur am Kondensatorauslass aus der Energiebilanz berechnet:

Über die gesamte gekühlte Fläche wird der Wärmestrom $j(x,y,z)$ (von den Rohren nach außen) integriert und ergibt die gesamte übertragene Wärmeenergie $\Delta Q(t)$. Im Modell wird angenommen, dass das in den Gebäudekondensator einfließende Wasser mit der Masse Δm sich wie folgt erwärmt:

$$\Delta T = \frac{\Delta Q}{\Delta m c_p}$$

Wobei c_p die Wärmekapazität des Wassers ist. Bei diesem Modell wird die Trägheit des Gebäudekondensators vernachlässigt. Im Modell führt eine Änderung der Temperatur am Kondensatoreinlass unmittelbar zu einer Änderung der Temperatur am Auslass, während in realen Gebäudekondensatoren eine gewisse Zeit benötigt wird, bis das Wasser den Kondensator durchflossen hat. Im realen Gebäudekondensator befindet sich außerdem ein nicht zu vernachlässigendes Wasservolumen, insbesondere im Einlass- und Auslassbereich. Das einfließende Wasser vermischt sich mit diesem Wasser, so dass sich Temperaturänderungen nur mit Verzögerung am Rohr bemerkbar machen. Dieses vereinfachte Modell wurde in der Simulation „mod. Tw“ getestet.

2.4.7.1 Geometrie und CFD-Gitter

In den Simulationen von H2P6_1 wurden für alle drei Gebäudekondensatoren die detaillierte Kondensatorgeometrie (Abb. 2.79) und die Vernetzung des umgebenden Gases aus Abb. 2.39 verwendet. Das resultierende CFD-Gitter bestand aus etwa 13 Millionen Zellen (Tab. 2.5). Laut OpenFOAM-Tool CheckMesh erfüllte das Gitter die Qualitätsanforderungen (insbesondere non-orthogonality < 70). Wie schon in den Simulationen von H2P6_2 wurden die Schläuche zur Zu-/Ableitung des Kühlwassers nicht ins Gitter integriert, sondern die korrekte Größe der Kondensationsfläche wurde durch eine Skalierung (Skalierungsfaktor 1,03) der Gebäudekondensatoren erreicht (siehe Abschnitt 2.4.4.1).

Tab. 2.5 CFD-Gitter H2P6_1

Gas	Strukturierte Zellen: 7,77 Millionen Unstrukturierte Zellen: 3,41 Millionen
Solid	Strukturierte Zellen: 1,79 Millionen

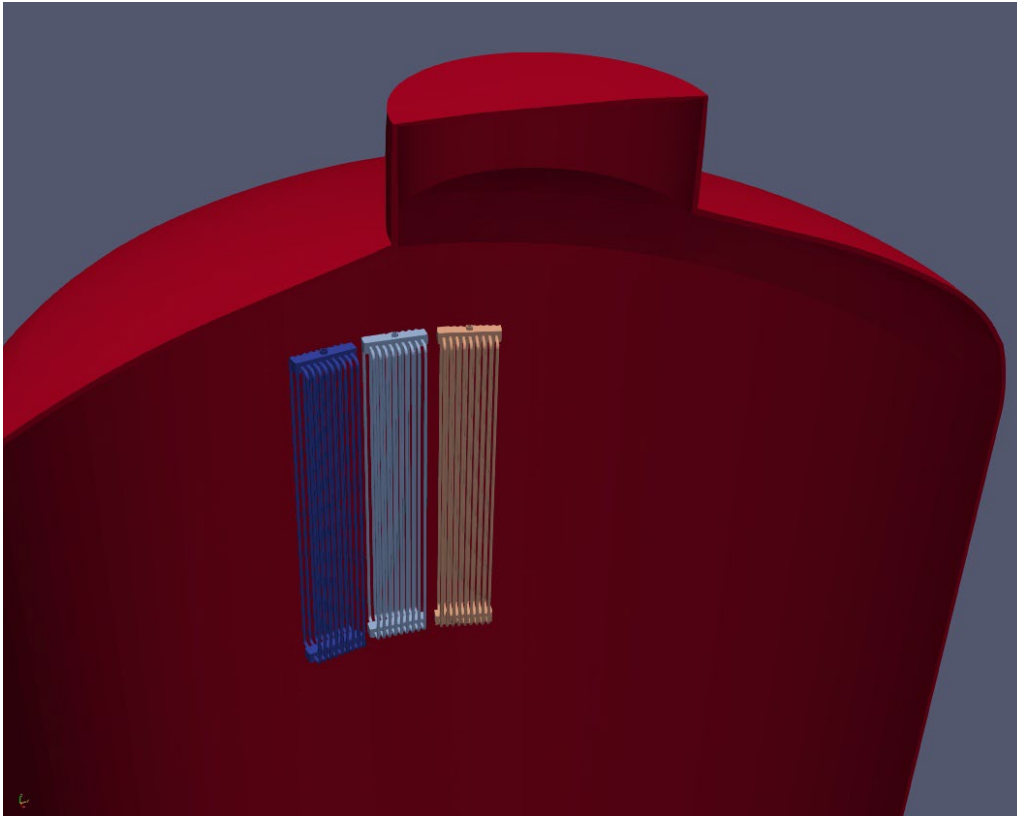


Abb. 2.79 Anordnung der Gebäudekondensatoren in H2P6_1

2.4.7.2 Vergleich mit experimentellen Daten

Kühlwassertemperatur in Sim. „Tw mod.“

Bei der Simulation „Tw mod.“ wurde die Temperatur des Kühlwassers am Austritt aus dem Gebäudekondensator aus der Wärmebilanz berechnet. Erwartungsgemäß traten in der Anfangsphase ($t < 60$ s) größere Abweichungen auf (Abb. 2.80), da im Modell die durch die beiden Wasserkammern und die Verweildauer in den Rohren verursachte Trägheit vernachlässigt wird. Im weiteren Verlauf stimmte die Austrittstemperatur in der Simulation mit dem Experiment gut überein, die Abweichung war kleiner als 1,5 K. Berücksichtigt man, dass die Wassereintrittstemperatur vorgegebene experimentelle Werte sind, so ergibt sich bei der Interpolation im Durchschnitt nur eine halb so große Abweichung. Außerdem ist die Dampfdruckkurve für Temperaturen unterhalb von 313 K

deutlich weniger sensitiv als für höhere Temperaturen. Dies erklärt, warum die beiden Simulationen „Tw linear“ und „Tw mod.“ nahezu identische Werte lieferten (siehe folgende Abschnitte).

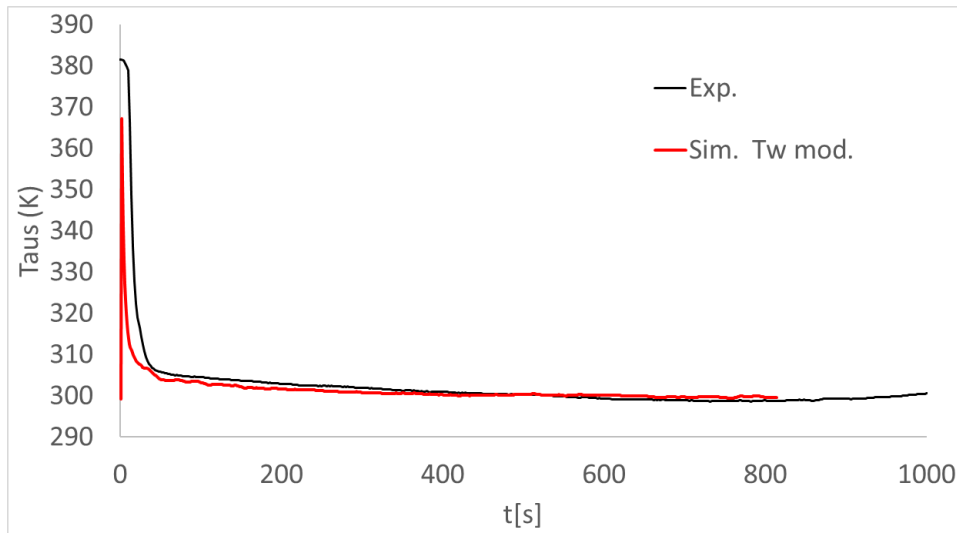


Abb. 2.80 Kühlwassertemperatur des ersten Gebäudekondensators bei Austritt aus Kondensator im Experiment und in Sim. „Tw mod.“

Druck

Der Druckverlauf wurde von beiden Simulationen in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Der Unterschied zwischen beiden Simulationen war vernachlässigbar. Im Gegensatz zu H2P6_2 (ein aktiver Gebäudekondensator) zeigte sich im Experiment kein stärkerer Druckabfall zu Beginn des Experiments und die Übereinstimmung mit den Simulationen war bei dem Versuch mit drei Gebäudekondensatoren deutlich besser. Der geringfügig schnellere Abfall des Drucks am Ende der Simulation kann mit einer etwas stärkeren Kondensation erklärt werden. Diese war darauf zurückzuführen, dass aufgrund der schnelleren Vermischung (siehe unten) mehr Dampf zu den Gebäudekondensatoren transportiert wurde.

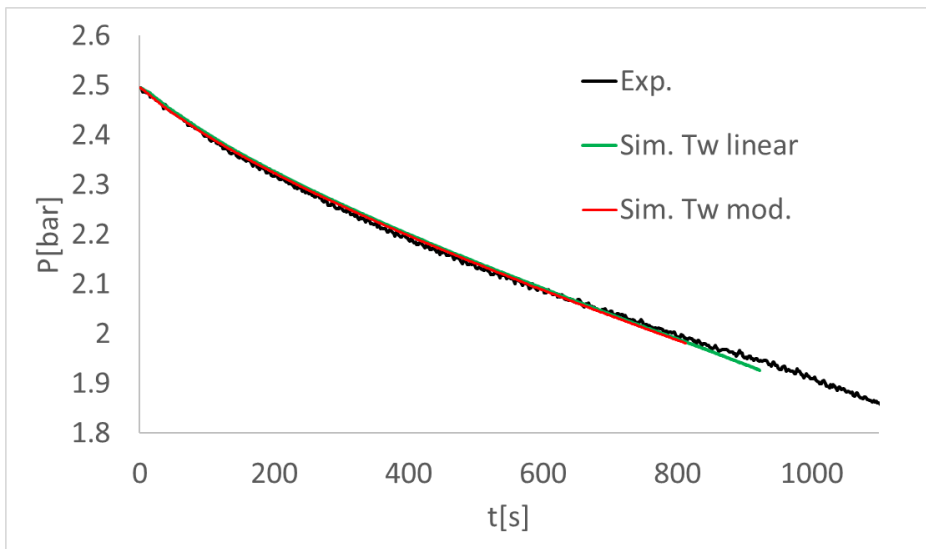


Abb. 2.81 Druckverlauf im Experiment und bei den Simulationen

Kondensation

In Abb. 2.82 ist die gesamte Kondensationsrate aller drei Kondensatoren aufgetragen. In der Anfangsphase ($t < 30$ s) waren Unterschiede zwischen den beiden Simulationen zu sehen. Danach war kein signifikanter Unterschied mehr vorhanden. Im Experiment wurde die angefallene Kondensatmasse mit Eimern gemessen. Die so bestimmte Kondensatmasse liefert nur eine grobe Abschätzung. Der zeitliche Anstieg der Kondensatmasse wurde von den Simulationen in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Das zeigt, dass die berechnete und die experimentelle Wandkondensation zumindest integral gut übereinstimmen. Im Experiment dauerte es etwa 40 s bis die Kondensatmasse ansteigt, was daran lag, dass das Kondensat Zeit benötigt, bis es die Eimer erreicht. Aufgrund des verzögerten Eintreffens des Kondensats lag die gemessene Kondensatmasse fast immer etwas unterhalb der berechneten.

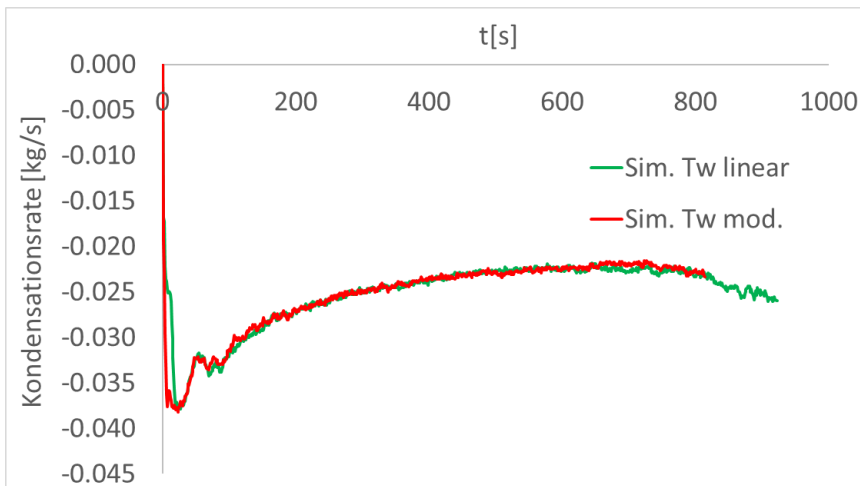


Abb. 2.82 Gesamte Kondensationsrate aller drei Gebäudekondensatoren in den beiden Simulationen

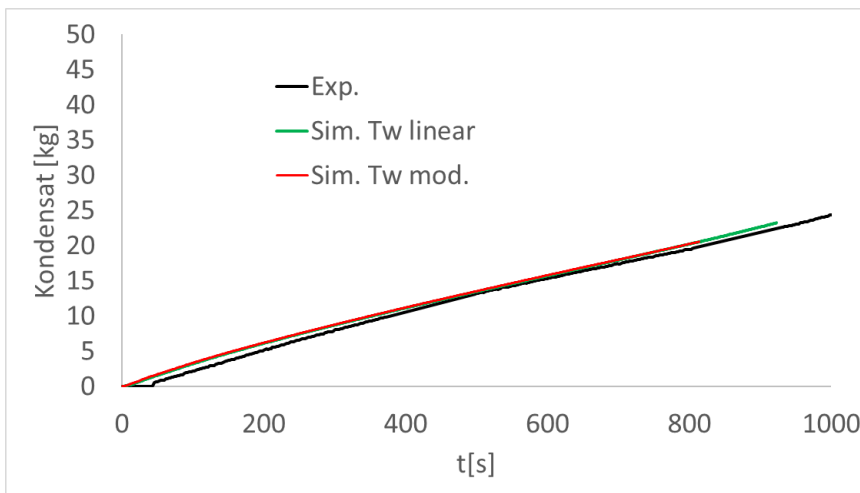


Abb. 2.83 Zeitlicher Verlauf der angefallenen Kondensatmasse

Helium-Molenbruch

Qualitativ stimmte der Verlauf der Helium-Molenbrüche an den unterschiedlichen Messstellen in der Simulation („Tw linear“) gut mit dem Experiment überein (Abb. 2.84, Abb. 2.85). Quantitativ fällt auf, dass in der Simulation die Vermischung unterhalb des Gebäudekondensators schneller erfolgte (ca. 850 s gegenüber ca. 1050 s im Experiment). Beim Vergleich ist zu berücksichtigen, dass zwischen den Messungen im Experiment mehrere 100 s liegen; dadurch können Gradienten nicht exakt gemessen werden. Der deutlich langsamere Anstieg an Messpunkten im unteren Bereich (z. B. T20) kann auch darauf zurückzuführen sein. Der deutlich schnellere Abfall der Temperatur im

Experiment am Messpunkt T20 (Abb. 2.102), der vergleichbar war mit dem in der Rechnung, gab darauf einen Hinweis.

In Bezug auf die Heliumverteilung waren die Ergebnisse in den Simulationen und dem Experiment sehr ähnlich mit denen in H2P6_2, sofern berücksichtigt wird, dass die drei Gebäudekondensatoren zu einer ungefähr dreifachen Geschwindigkeit der Vermischung führten (Abb. 2.45, Abb. 2.47, Abb. 2.84, Abb. 2.85).

Die Simulationsergebnisse der beiden Rechnungen „Tw linear“ und „Tw mod.“ waren sehr ähnlich (Abb. 2.86 – Abb. 2.94), deshalb werden die beiden Simulationen nicht getrennt diskutiert. Die gute Übereinstimmung der Simulationen zeigt, dass die Berechnung der Kühlwasseraustrittstemperatur in „Tw mod.“ erfolgreich war.

Oberhalb des Gebäudekondensators bis zu einer Höhe von 7 m (B20, Abb. 2.86, C20, Abb. 2.87) fand nur eine schwache Vermischung der Heliumschicht statt, was von den Simulationen richtig berechnet wurde. In Höhe der Gebäudekondensatoren wurde der Helium-Molenbruch mit geringfügigen Abweichungen berechnet (F20, Abb. 2.88, GH20, Abb. 2.89). Tendenziell war der Helium-Molenbruch etwas zu niedrig und die Vermischung erfolgte etwas schneller. Die größte Abweichung bestand bei den Messstellen auf einer Höhe unterhalb der Kondensatoren bis ca. 3,5 m Höhe (K20, Abb. 2.90, L20, Abb. 2.91). Der Anstieg und anschließende Abfall des Helium-Molenbruchs erfolgte deutlich schneller als im Experiment. An den darunter liegenden Messstellen nahm die Abweichung zwischen Experiment und Simulationen ab, am untersten Messpunkt T20 (Abb. 2.94) betrug die Abweichung etwa 125 s, wenn man die Temperaturmessung (Abb. 2.102) berücksichtigt.

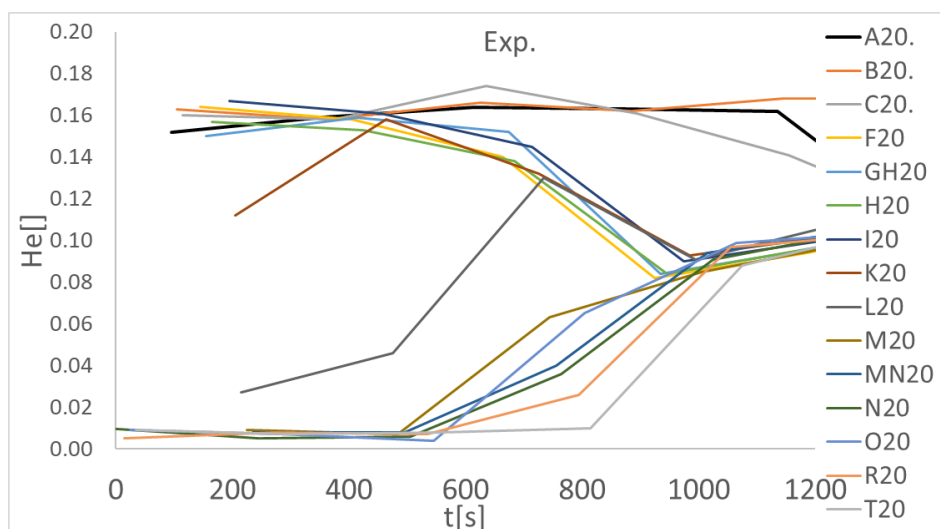


Abb. 2.84 Helium-Molenbruch im Experiment H2P6-1

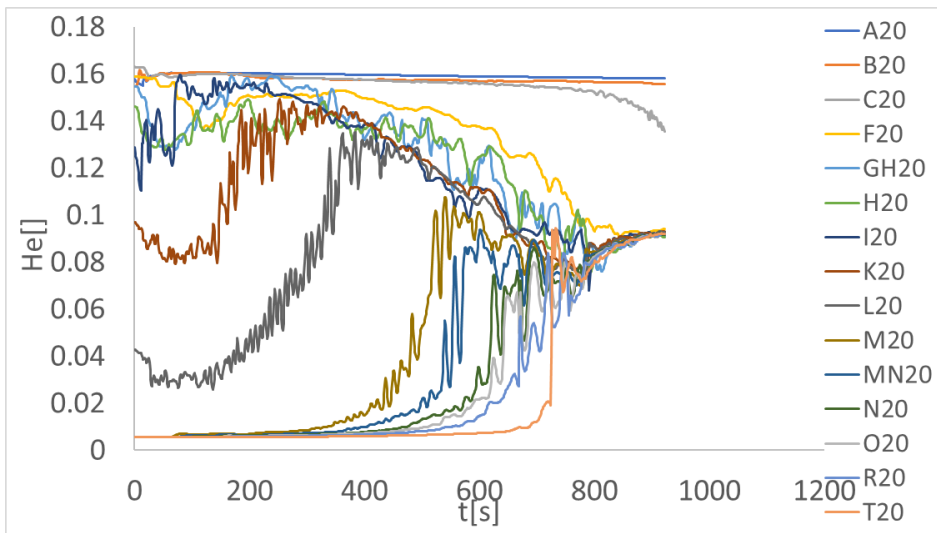


Abb. 2.85 Helium-Molenbruch in der Simulation „Tw linear“

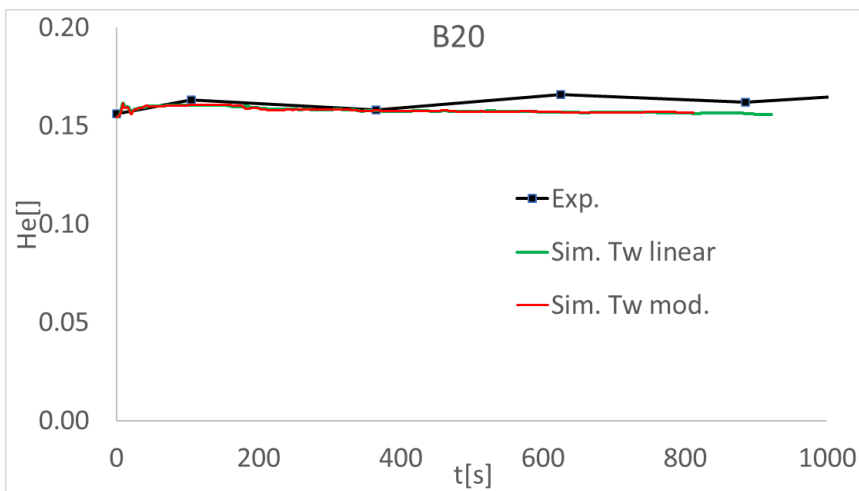


Abb. 2.86 Helium-Molenbruch an der Position B20 (Mitte, 7,48 m Höhe)

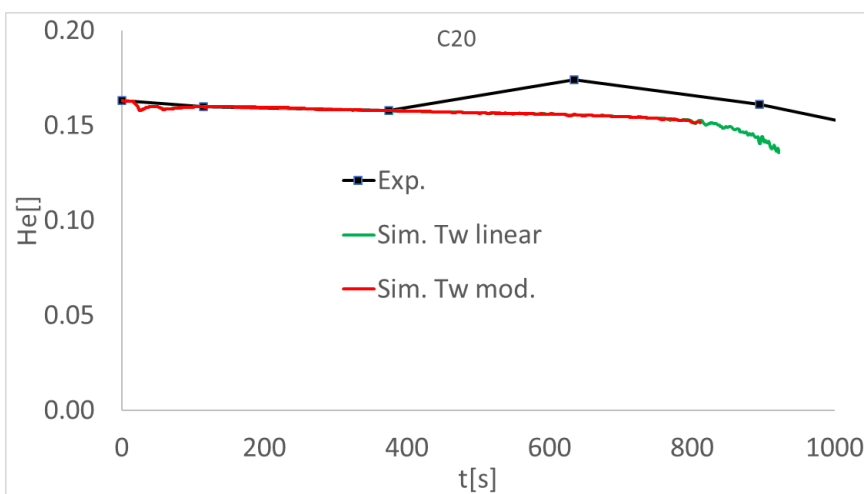


Abb. 2.87 Helium-Molenbruch an der Position C20 (Mitte, 6,93 m Höhe)

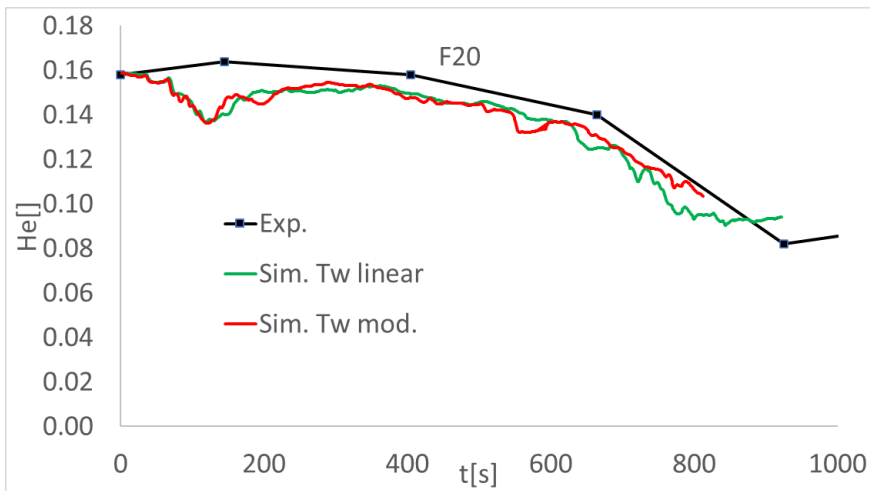


Abb. 2.88 Helium-Molenbruch an der Position F20 (Mitte, 6 m Höhe)

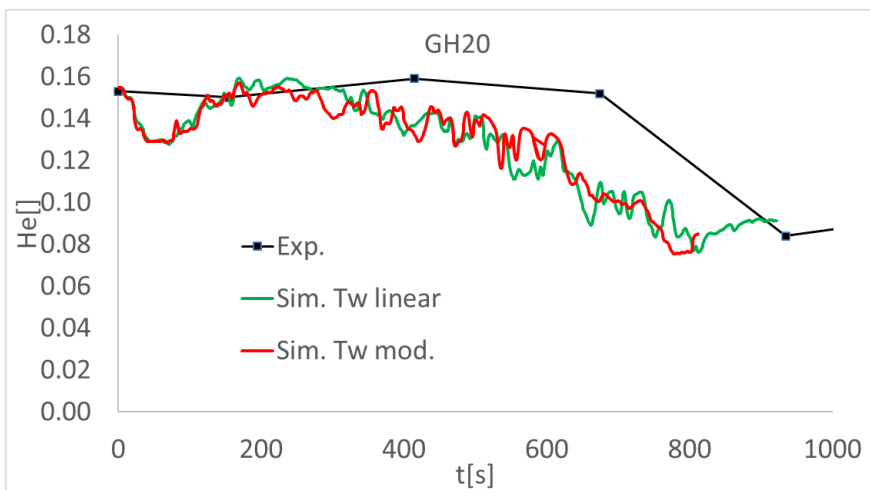


Abb. 2.89 Helium-Molenbruch an der Position GH20 (Mitte, 5,03 m Höhe)

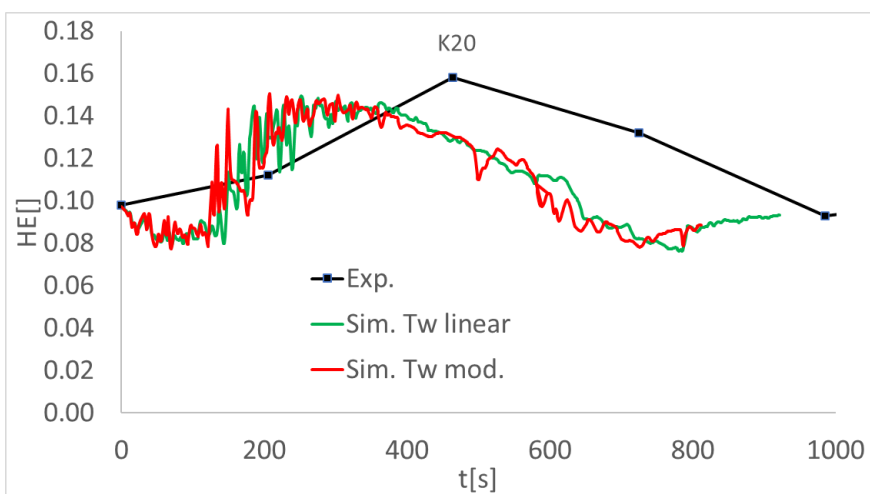


Abb. 2.90 Helium-Molenbruch an der Position K20 (Mitte, 4 m Höhe)

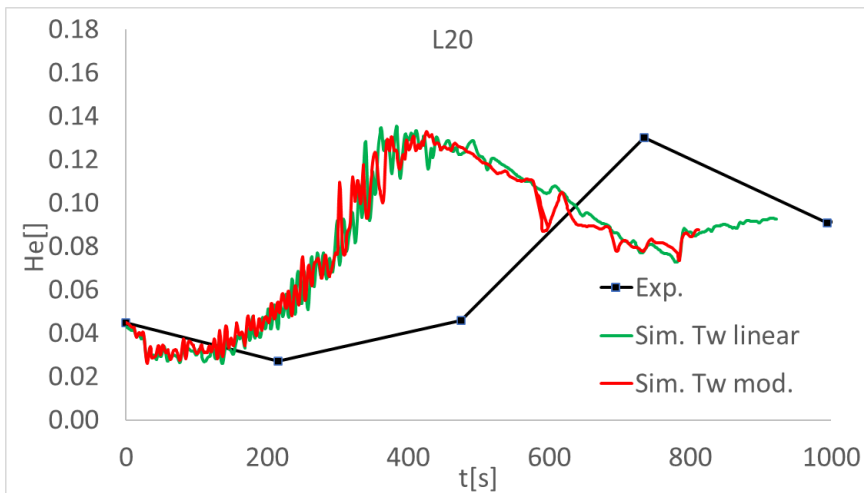


Abb. 2.91 Helium-Molenbruch an der Position L20 (Mitte, 3,68 m Höhe)

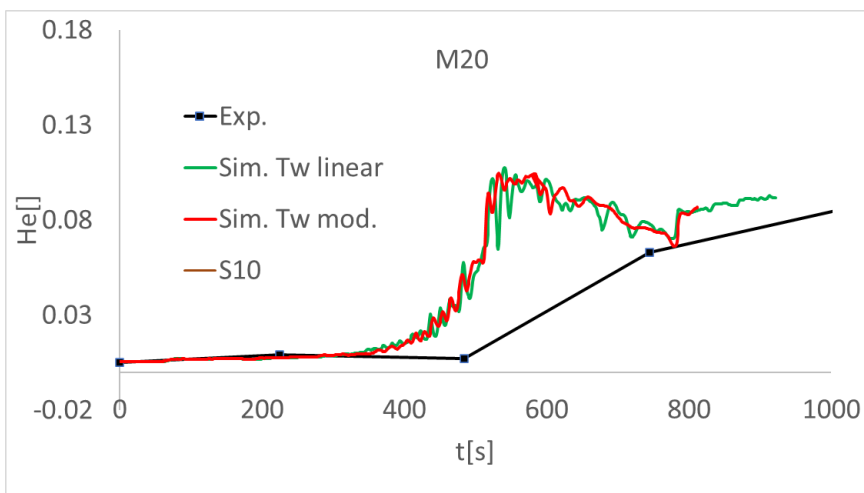


Abb. 2.92 Helium-Molenbruch an der Position M20 (Mitte, 3,03 m Höhe)

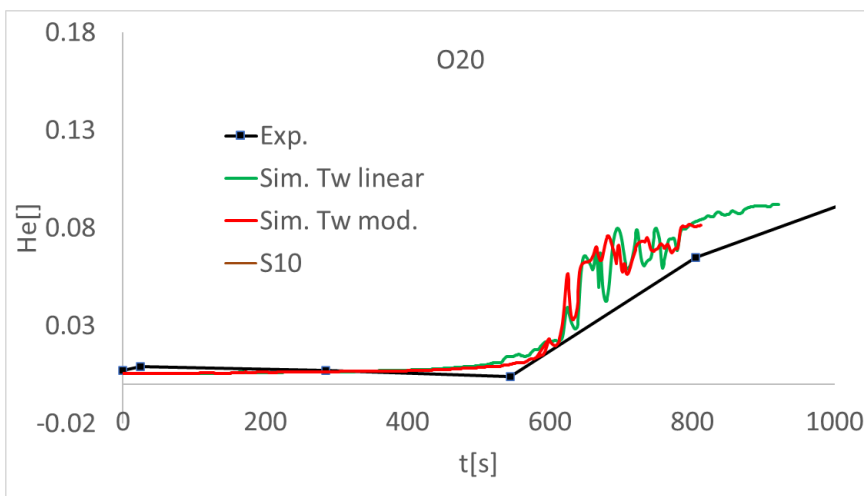


Abb. 2.93 Helium-Molenbruch an der Position O20 (Mitte, 2,1 m Höhe)

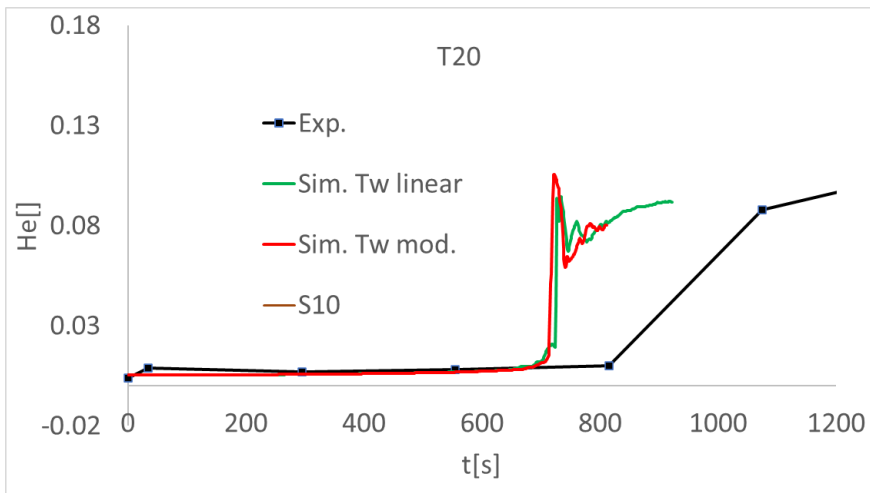


Abb. 2.94 Helium-Molenbruch an der Position T20 (Mitte, 0,54 m Höhe)

Temperatur

Der berechnete Temperaturverlauf stimmte qualitativ mit dem Experiment überein (Abb. 2.95 – Abb. 2.102). Wenn berücksichtigt wird, dass die fortschreitende Vermischung unterhalb des Gebäudekondensators mit einem Temperaturabfall einherging und dass die Vermischung im Experiment langsamer ablief, so wurde die Temperatur meist bis auf weniger als 2 K richtig berechnet. Größere Abweichungen waren lokal und temporär begrenzt. Die größte Abweichung ergab sich, wie schon beim Helium-Molenbruch, unterhalb des Kondensators in 4 m Höhe (K20, Abb. 2.100).

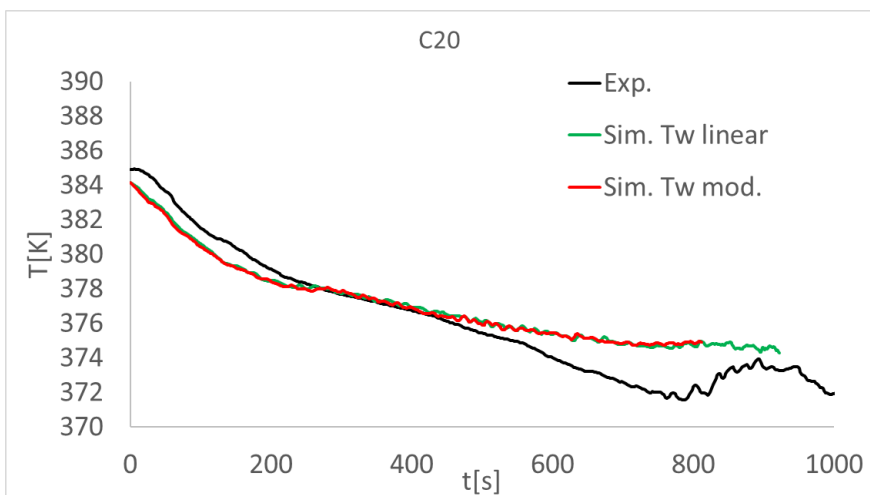


Abb. 2.95 Temperatur am Messpunkt C20 (Mitte, 6,93 m Höhe)

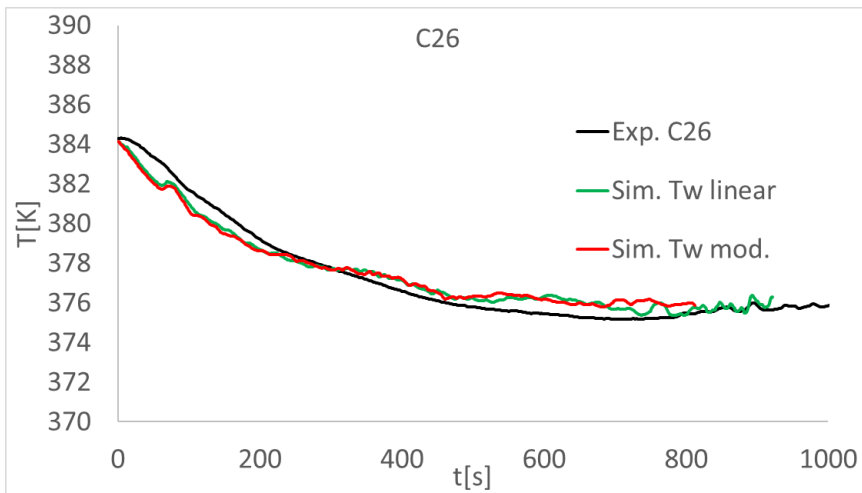


Abb. 2.96 Temperatur am Messpunkt C26 (6,93 m Höhe, Radius 1,43 m)

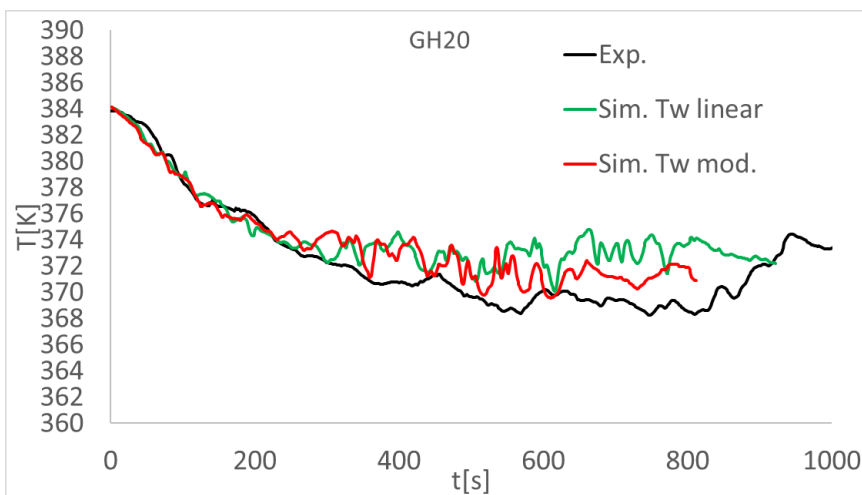


Abb. 2.97 Temperatur am Messpunkt GH20 (Mitte, 5,3 m Höhe)

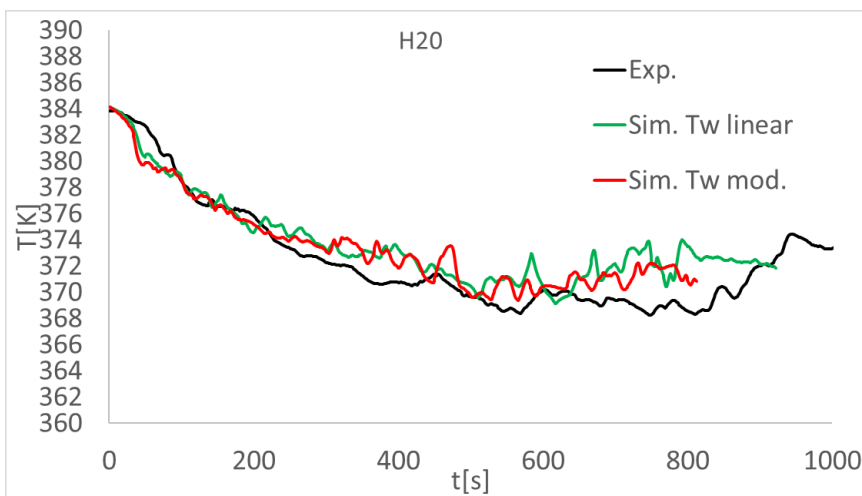


Abb. 2.98 Temperatur am Messpunkt H20 (Mitte, 4,98 m Höhe)

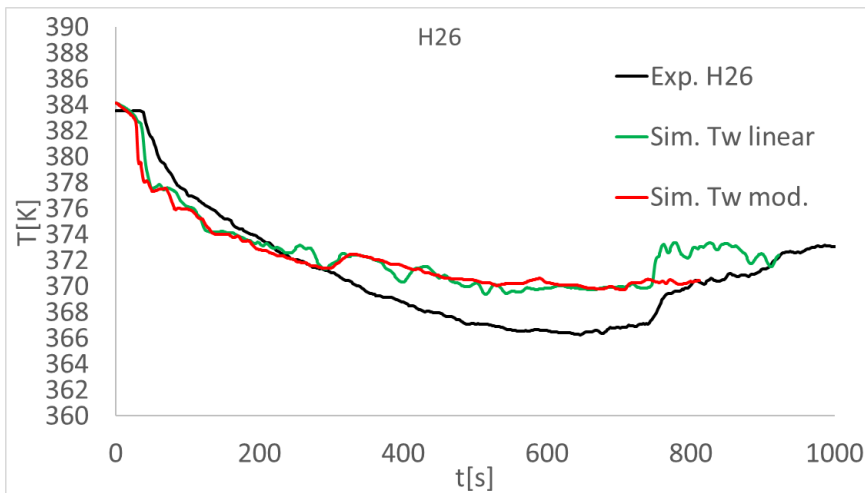


Abb. 2.99 Temperatur am Messpunkt H26 (4,98 m Höhe, Radius 1,43 m)

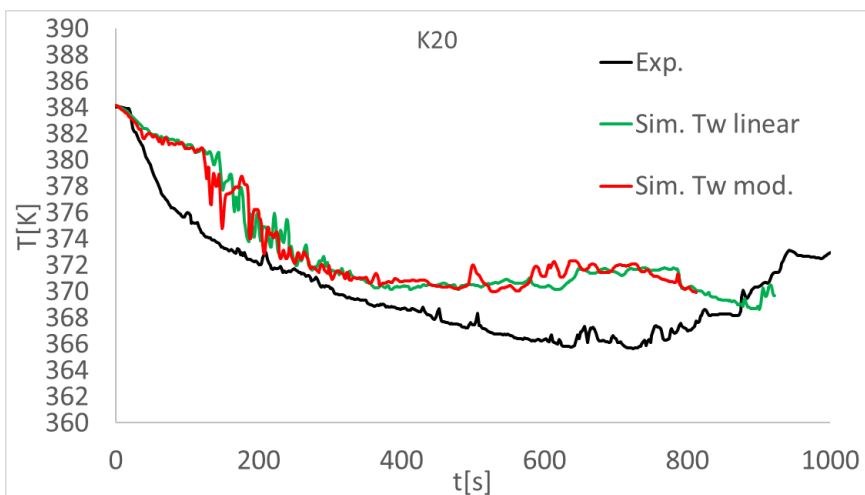


Abb. 2.100 Temperatur am Messpunkt K20 (Mitte, 4 m Höhe)

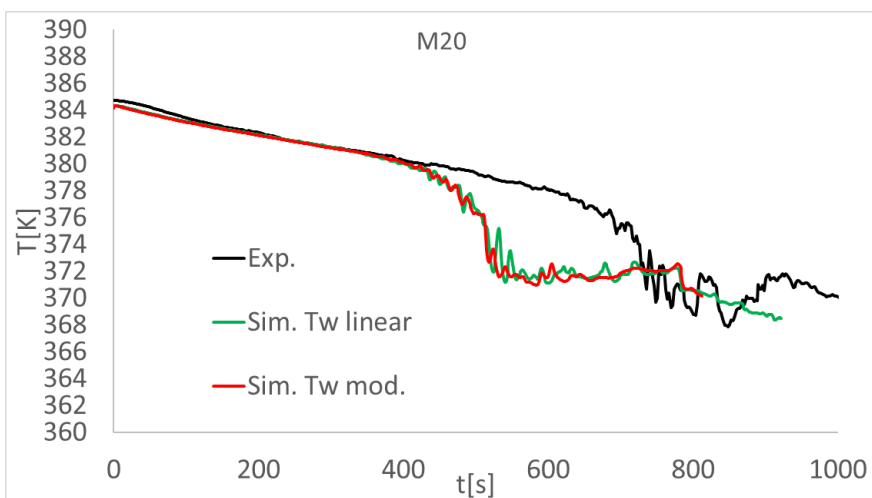


Abb. 2.101 Temperatur am Messpunkt M20 (Mitte, 3,03 m Höhe)

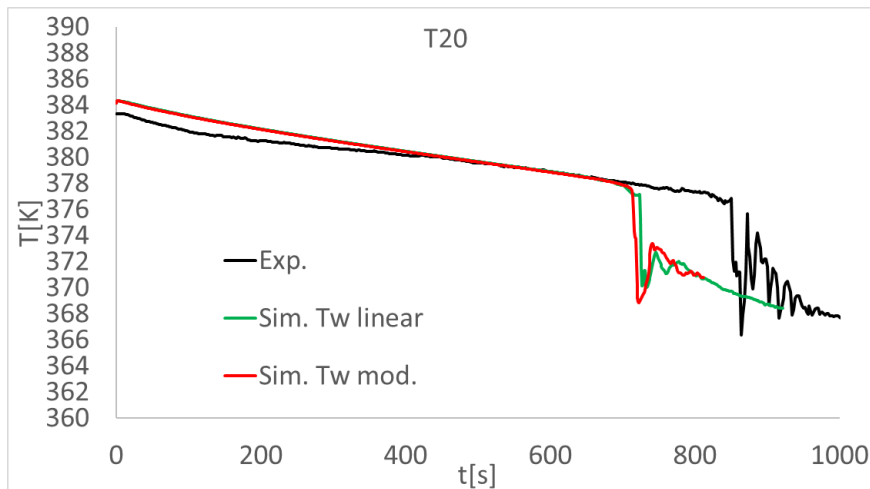


Abb. 2.102 Temperatur am Messpunkt T20 (Mitte, 0,54 m Höhe)

2.4.8 Schlussfolgerungen aus den Simulationen zu H2P6

Das Experiment H2P6_2 wurde erfolgreich mit containmentFOAM-9 berechnet. Im ersten Schritt wurde der Gebäudekondensator detailliert abgebildet und die Strömung des Kühlwassers wurde ebenfalls mit containmentFOAM simuliert.

Die gekühlte Oberfläche des Zu- und Ablaufs zum/vom Gebäudekondensator darf nicht vernachlässigt werden. Dies wurde dadurch erreicht, dass der Gebäudekondensator so skaliert wurde, dass die gekühlte Oberfläche im Experiment mit der in der Simulation übereinstimmt. Der Rechenaufwand dieser Simulationen war allerdings sehr hoch (über 3 Monate für „Sim. detail“ auf 40 – 60 CPUs). Deshalb wurde in einer weiteren Rechnung die Simulation des Kühlwassers mit containmentFOAM durch eine mittlere Wandtemperatur an der Rohrinneenseite ersetzt. Dadurch kam es zu einer moderaten Rechenzeiterparnis von ca. 20 %. Es zeigte sich, dass diese Vereinfachung keinen signifikanten Einfluss auf das Simulationsergebnis hatte. Der Druckabfall und die integrale Kondensationsrate waren nahezu gleich und auch die Gaszusammensetzung und Temperatur unterschieden sich fast nicht.

Die Simulation mit skaliertem Gebäudekondensator war in der Lage, den Druckabfall in guter Näherung zu berechnen. Der Druckabfall wurde um ca. 8 % unterschätzt (200 s – 2500 s). Entsprechend wurde auch die anfallende Kondensatmenge von der Simulation leicht unterschätzt. Der Verlauf der Gaszusammensetzung und der Temperatur wurde qualitativ richtig vorhergesagt. Die größte Abweichung zum Experiment ergab sich daraus, dass die Vermischung in den Simulationen schneller erfolgte als im Experiment.

Mögliche Ursachen für die Abweichung sind u. a.:

- Die Zu- und Abflussleitung des Gebäudekondensators wurde nicht detailliert abgebildet, sondern durch Skalierung des Gebäudekondensators berücksichtigt. Dadurch erfolgten die Abkühlung und Kondensation nur im Bereich des Gebäudekondensators, was die lokale Strömung beeinflusst.
- Am Gebäudekondensator herrschte eine stark fluktuierende 3-dimensionale Strömung. Es ist unklar, wie genau das URANS-2-Gleichungsmodell SST diese Strömung modellieren kann.
- Experimentelle Unsicherheiten:
 - Temperatur am obersten Messpunkt A20 ist kälter als an darunter liegender Position B20 (sowohl in H2P6_1 als auch H2P6_2)
 - In H2P6_2 schneller Druckabfall zu Beginn des Experiments
 - (Druck in H2P6_2 wird mit größerer Abweichung berechnet als in H2P6_1)

Die Simulationen mit detaillierter Gebäudekondensatorgeometrie konnten zwar die Kondensation gut beschreiben, allerdings betrug die Rechenzeit mehrere Monate, was für praktische Containmentanwendungen zu aufwendig ist. Um Rechenzeit zu sparen wurde untersucht, ob Gebäudekondensatoren mit einer vereinfachten Geometrie hinreichend genau simuliert werden können. Als vereinfachte Geometrien für den Gebäudekondensator wurden getestet: ein Quader, zwei senkrecht stehende Platten und ein Bündel mit 21 Rohren. Alle Simulationen mit vereinfachter Geometrie berechneten einen deutlich schwächeren Druckabfall als „Sim. skal. Tw“ und das Experiment. Der relative Fehler bei der vereinfachten Geometrie „Quader“ betrug ca. 36 %. Die Simulationen mit der Geometrie „2 Platten“ zeigte eine ähnlich hohe Abweichung und wurde deshalb nicht bis zu Ende geführt. Mit der vereinfachten Geometrie „21 Rohre“ konnte die beste Übereinstimmung beim Druck und der Wandkondensationsrate erzielt werden. Aber auch bei dieser Simulation betrug der relative Fehler noch ca. 20 %, während er bei einer detaillierten Abbildung des Gebäudekondensators nur 8 % beträgt. Die Rechenzeiterparnis bei vereinfachter Geometrie ist ca. ein Faktor 20 bei „Sim. Quader“ und ein Faktor 7 bei „Sim. 21 Rohre“.

Der Versuch H2P6_1 mit drei Gebäudekondensatoren wurde mit einer detaillierten, skalierten Kondensatorgeometrie nachgerechnet. Die Wasserkühlung wurde durch eine Temperaturrandbedingung an der Innenseite der Kühlrohre modelliert. Als

Weiterentwicklung gegenüber H2P6_2 wurde linear zwischen Eintritts- und Austrittstemperatur des Kühlmittels interpoliert. In der Simulation "Tw linear" wurden für die Wasseraustrittstemperatur experimentelle Daten verwendet. In der Simulation „Tw mod“ wurde die Wasseraustrittstemperatur aus der Wärmebilanz berechnet. Aufgrund von Modellvereinfachungen wich die Wasseraustrittstemperatur in der Anfangsphase ($t < 60$ s) bei „Tw mod“ deutlich vom Experiment ab, danach wurde eine gute Übereinstimmung erzielt. Deshalb unterschieden sich die Ergebnisse der beiden Rechnungen im Hinblick auf den Druck, die Gastemperatur und den Helium-Molenbruch kaum. Im Gegensatz zu H2P6_2 trat bei diesem Versuch kein schneller Druckabfall in der Anfangsphase auf. Der Druck wurde von den Simulationen in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Wie schon bei H2P6_2 wurde auch bei diesem Experiment die Geschwindigkeit der Vermischung überschätzt, wobei die größten Abweichungen in etwa 4 m Höhe aufgetreten sind. Sofern berücksichtigt wird, dass die Vermischung mit einem Abfall der Temperatur an den unterhalb der Gebäudekondensatoren gelegenen Messstellen einherging, wurde die Temperatur in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet.

Insgesamt kann geschlussfolgert werden, dass bei einer detaillierten Abbildung der Gebäudekondensatoren der Druckabfall, und mit etwas größeren Abweichungen, auch der Helium-Molenbruch und die Temperatur simuliert werden können. Allerdings ist die Rechenzeit von mehreren Monaten (gegenwärtig) noch zu hoch für praktische Anwendungen. Mit geometrischen Vereinfachungen konnte die Rechenzeit zwar drastisch reduziert werden, aber die Abweichungen nahmen auch deutlich zu.

2.5 AP 1.4 Erstellung eines Referenzsolvers zur Berechnung der Gasverteilung bei Containmentfragestellungen

2.5.1 Einleitung

Ziel dieses Arbeitspunktes war es, zu Beginn des Projekts einen Referenzsolver zur Berechnung der Gasverteilung zu erstellen, mit dem die Arbeiten in diesem Projekt durchgeführt werden können und der den Partnern im deutschen CFD-Verbund zur Verfügung gestellt werden kann. Der vom FZ Jülich entwickelte Solver containmentFOAM sollte als Basis für den Referenzsolver dienen. Anhand des Vergleichs mit dem von der GRS in RS1562 erstellten OpenFOAM-Solver chtmultiRegionSchmidtFOAM /SCH 22b/ sollte geprüft werden, inwieweit die Übernahme von GRS-Modellen sinnvoll erscheint. Dazu wurden im Folgenden Versuche zu unterschiedlichen Fragestellungen

(Schichtungsauflösung, (Wand-)Kondensation, ...) mit containmentFOAM und chtMultiRegion-SchmidtFOAM nachgerechnet und die Ergebnisse miteinander verglichen. Vorzugweise wurden dabei Versuche ausgesucht, die bereits in RS1562 mit chtMultiRegionSchmidtFOAM simuliert wurden, so dass nur noch die containmentFOAM-Simulation im Rahmen von RS1603A zu erstellen war.

2.5.2 Nachrechnung des OECD/NEA-PSI Benchmarks zur Auflösung einer stabilen Leichtgasschichtung

2.5.2.1 Kurze Versuchsbeschreibung

Der Versuch fand in einem Behälter des PANDA-Versuchsstands statt (Abb. 2.103) /AND 13/. Im oberen Bereich (bis ca. 5,3 m Höhe) wurde eine stabile Heliumschichtung mit einer maximalen Heliumkonzentration von 37 Vol.-% erzeugt. Diese wurde durch einen Luftstrahl erodiert, der durch ein vertikales Rohr (Höhe der Öffnung 2,995 m) austrat. Das Rohr war um 0,648 m von der Zylinderachse versetzt. Der Massenstrom der Luft-einspeisung betrug 21,53 g/s und deren Temperatur 23 °C – 29 °C. Durch eine Venting-Leitung im unteren Bereich des Behälters (Höhe 0,16 m) wurde der Druck konstant auf 0,994 bar gehalten.

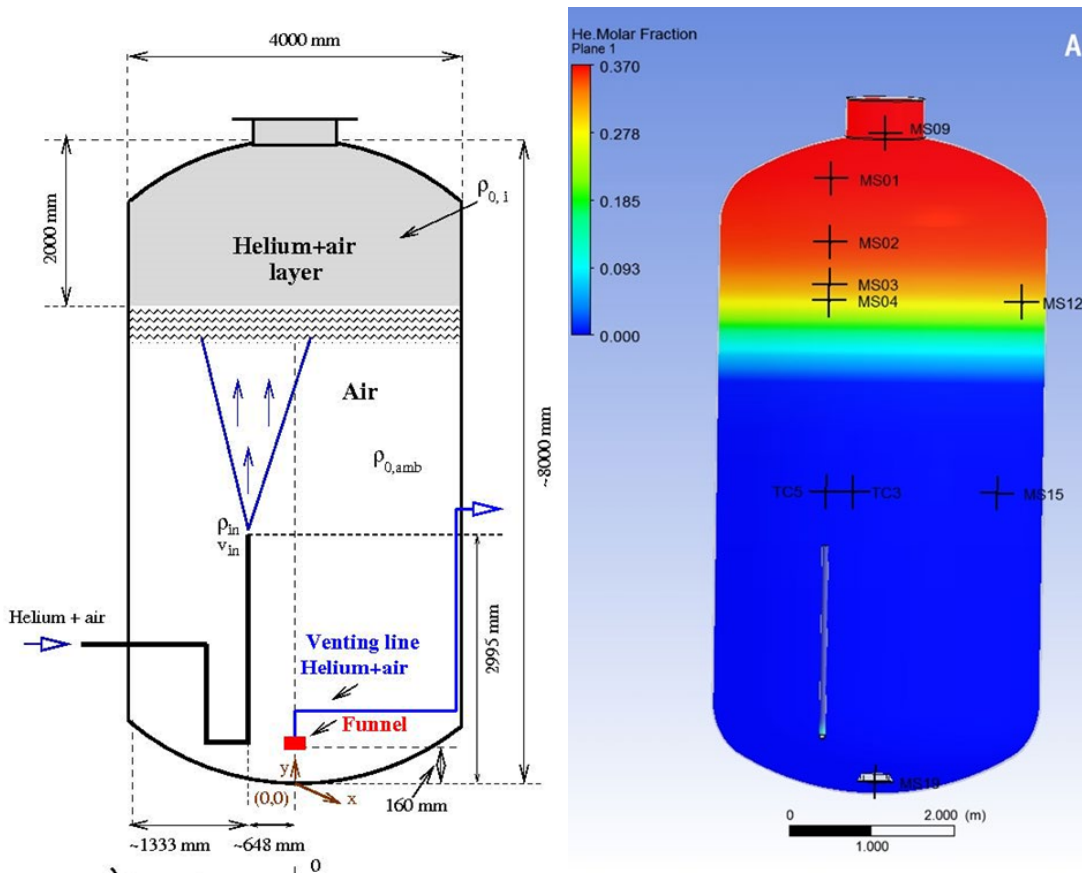


Abb. 2.103 Links: Schematische Darstellung des Experiments /AND 19/, /AND 13/

Rechts: Position der im Bericht aufgeführten Konzentrations- und Temperaturmesspunkte.

2.5.2.2 CFD-Gitter

Das für die Simulationen verwendete CFD-Gitter bestand aus ca. 1,3 Millionen strukturierter Zellen (Hexaeder) (Abb. 2.104). Gegenüber dem Versuch wurden geometrische Vereinfachungen vorgenommen. Die wichtigste ist die Modellierung des Einlassrohres, bei dem nur der gerade Teil berücksichtigt wurde. Die Venting-Vorrichtung wurde ebenfalls vereinfacht, so wurde die Öffnung vergrößert und nach unten verlegt. Dies vereinfachte zum einen die Generierung eines CFD-Gitters mit hoher Qualität, zum anderen wurden durch die Modifikationen hohe Strömungsgeschwindigkeiten unmittelbar am Auslass vermieden, die den Zeitschritt, der über die maximale Courant-Zahl gesteuert wird, begrenzen. Diese Vereinfachung beeinflusste nur die lokale Strömung im unteren Bereich des Behälters, nicht aber die Schichtungsauflösung, auf der der Fokus der Untersuchung lag. Die Stahlwand des Behälters wurde nicht im Gitter berücksichtigt, da im Experiment nur sehr geringe Temperaturunterschiede vorlagen und deshalb die Annahme einer konstanten Wandtemperatur hinreichend genau war.

Ausgangspunkt für das beschriebene CFD-Gitter war ein Gitter, das im Rahmen von RS1526 zur Teilnahme am OECD/NEA-PSI-Benchmark für ANSYS-CFX-Simulationen erzeugt wurde /SCH 17/. Die Erfahrungen mit OpenFOAM-6 haben gezeigt, dass die OpenFOAM-Numerik weniger gut mit stark nicht-orthogonalen Zellen zurechtkommt als die von CFX. Deshalb wurde das Gitter überarbeitet. So wurden alle nicht-strukturierten Zellen durch Hexaeder ersetzt, und auch in anderen Bereichen wurde das Gitter so modifiziert, dass eine geringe Nicht-Orthogonalität erzielt wurde. Die maximale Nicht-Orthogonalität konnte damit auf 65,8 reduziert werden. Laut Überprüfung durch das OpenFOAM-Tool checkMesh erfüllte das modifizierte Gitter alle Qualitätsanforderungen von OpenFOAM.

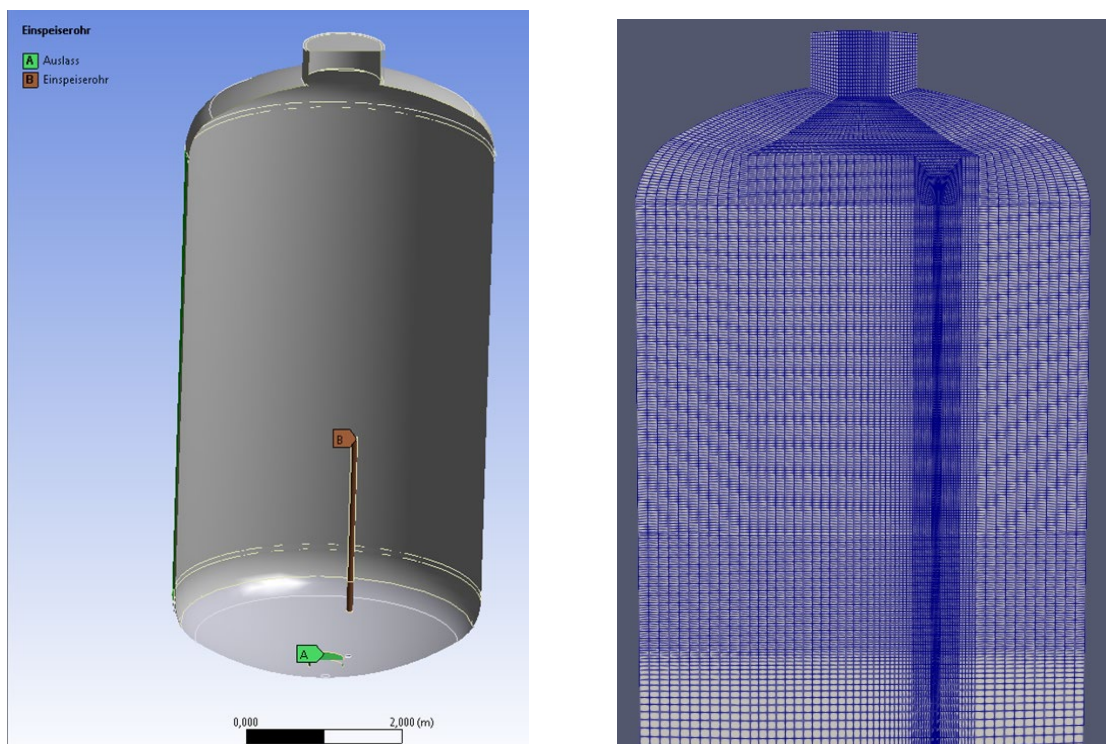


Abb. 2.104 Links: CAD-Daten, die zur Erzeugung des CFD-Gitters genutzt werden, rechts: Schnitt durch CFD-Gitter

2.5.2.3 Konvergenz der OpenFOAM-Simulationen

Der Versuch wurde mir dem von der GRS entwickelten Solver chtMultiRegionSchmidt-FOAM (mrs) und mit containmentFOAM (cont.) nachgerechnet, die beide auf der OpenFOAM Version-6 basieren. Die numerischen Einstellungen bei mrs beruhten auf den in RS1562 /SCH 22b/ gewonnenen Erkenntnissen, bei der containmentFOAM-Simulation wurde das vom FZJ vorgeschlagene „accurate scheme“ (Stand Anfang 2022) verwendet. Bei der Simulation mit mrs wurde die Turbulenz mit dem $k-\omega$ -SST-Modell

einschließlich Auftriebstermen verwendet, bei containmentFOAM kam das cfKOmega-SST-Modell (erweitertes (k- ω -SST-Modell) zum Einsatz, die Auftriebsturbulenz wurde mit dem SGDH-Modell simuliert. Wärmestrahlung wurde bei den Simulationen vernachlässigt, da im Experiment kein Dampf vorlag und die Temperatur nur wenig von der Raumtemperatur abwich.

Bei beiden Solvern wurden dabei folgende Einstellungen verwendet:

```
laplacianSchemes
{
  default      Gauss linear limited 1.0;
}
snGradSchemes
{
  default      limited 1.0;
}
```

Mit diesen Diskretisierungsschemata stürzten die Simulationen mit beiden Solvern nach wenigen Zeitschritten ab. In anschließenden Untersuchungen zeigte sich, dass wenn in laplacianSchemes und snGradSchemes statt dem Wert 1,0 der Wert 0,5 gewählt wurde, mit beiden Solvern die Simulationen numerisch stabil durchgeführt werden konnten. Allerdings konnte mit diesen Einstellungen keine konvergente Lösung erzielt werden. Auch eine Erhöhung der Iterationsanzahl z. B. durch Erhöhung des nNonOrthogonalCorrectors oder anderer Größen führte zu keiner Verbesserung, da die Residuen insbesondere für die Druckgleichung nicht weiter absanken. Das Ergebnis dieser Simulation (cont nicht konvergiert) ist in Abb. 2.105 für die oberste Konzentrationsmessstelle MS9 dargestellt. Wurde in cont und mrs für beide Schemata *limited 0,4* gesetzt, so wurde mit beiden OpenFOAM-Solvern eine konvergente Lösung gefunden. Vergleicht man die Simulationsergebnisse der konvergenten mit denen der nicht konvergierten Lösung, so zeigt sich bei der nicht-konvergenten Lösung eine schnellere Schichtungsauflösung. Auch ist die Form des Abfalls der Heliumkonzentration anders.

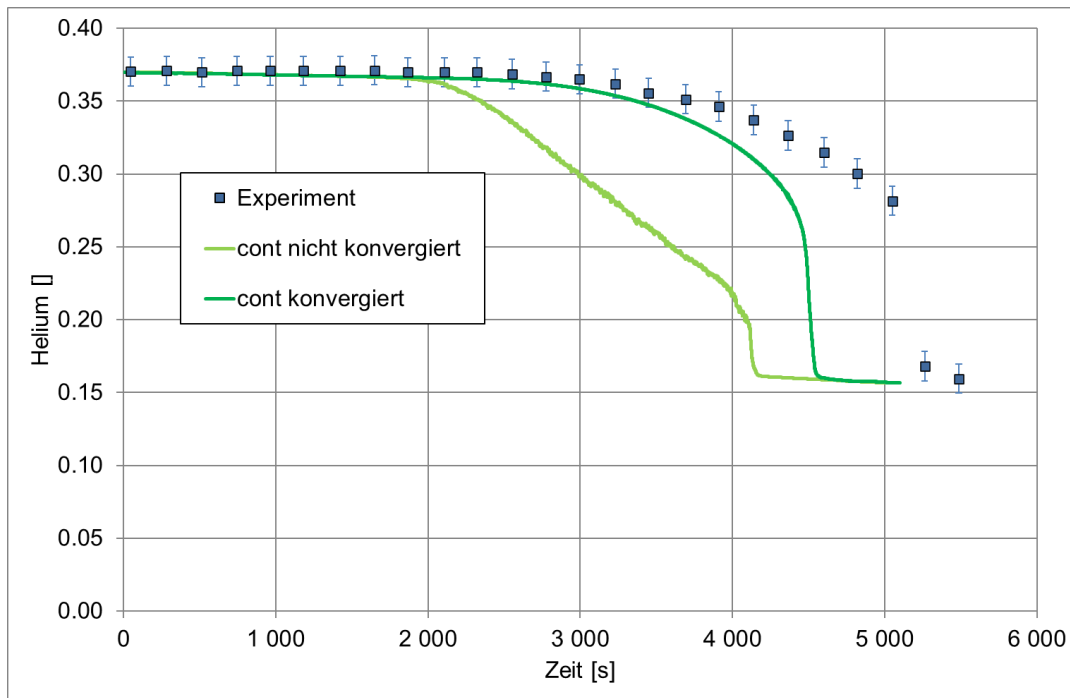


Abb. 2.105 Helium-Molenbruch am obersten Messpunkt MS9

2.5.2.4 Vergleich mit experimentellen Daten

Im Folgenden werden die Ergebnisse der beiden OpenFOAM-Solver (mrs, cont) mit experimentellen Daten und einer CFX-Simulation verglichen. Der Vergleich erfolgt anhand der konvergierten Simulationen, bei denen laplacianSchemes und snGradSchemes 0,4 gesetzt wurden.

Die mit den zwei unterschiedlichen OpenFOAM-Solvern berechneten Helium-Molenbrüche sind sehr ähnlich, sowohl was den Zeitpunkt der Schichtungsauflösung betrifft als auch den Verlauf des Abbaus (Abb. 2.106 – Abb. 2.111). Für die weiter oben liegenden Messpunkte (6,71 m – 7,99 m, Abb. 2.106 – Abb. 2.108) berechnete OpenFOAM eine etwas zu schnelle Schichtungsauflösung. Am obersten Messpunkt ist die Abweichung am größten. Sie beträgt ca. 600 s, was einem relativen Fehler von 11,5 % entspricht. Eine mit CFX durchgeführte Simulation berechnete einen etwas langsameren Abbau als OpenFOAM, der aber noch immer ca. 200 s schneller als das Experiment ist. An den weiter unten liegenden Punkten ist die Abweichung der Simulationen vom Experiment geringer (Abb. 2.109 – Abb. 2.111.). Hier liegen alle Simulationen fast immer im Bereich der experimentellen Unsicherheiten. Aber auch hier sind geringe Abweichungen der OpenFOAM-Simulationen von der Berechnung mit CFX zu sehen.

Die Temperaturen der beiden OpenFOAM-Simulationen sind ebenfalls sehr ähnlich, die maximale Abweichung an den Messtellen ist kleiner als $0,3\text{ °C}$. An der Messtelle TC3, die $0,68\text{ m}$ oberhalb des Einspeiserohres lag, ist die von beiden OpenFOAM-Simulationen berechnete Temperatur während des gesamten Versuchs um ca. 2 °C niedriger als im Experiment (siehe Abb. 2.112). Als wahrscheinliche Ursache hierfür wurde die Temperaturrandbedingung der Rohrwand des Einlasses identifiziert. Für sie wurde wie für die Außenwände der Wert 21 °C vorgegeben. Es kann davon ausgegangen werden, dass dadurch die Wärmeverluste des Gasstrahls an die Rohrwand überschätzt werden. In der CFX-Simulation wurden für die Rohrwand adiabate Randbedingungen gewählt. Die Temperatur am Messpunkt TC3 ist bei CFX höher und passt gut zu den experimentellen Daten. Die Abweichungen liegen im Bereich der Messungenauigkeit. Da der Fokus dieses Arbeitspunkts auf dem Vergleich der beiden OpenFOAM-Solver liegt, wurde auf die erneute Simulation des Versuchs mit mrs und cont und geänderter Temperaturrandbedingung verzichtet. Die Messtelle TC5 liegt seitlich des Einspeiserohres auf derselben Höhe wie TC3. Auch bei TC5 ist die Temperatur der CFX-Simulation um ca. 2 °C höher als die der OpenFOAM-Simulationen (siehe Abb. 2.113). Bis ca. 2000 s unterschätzen die OpenFOAM-Simulationen die Temperatur am Messpunkt. Danach liegen sie unterhalb des gemessenen Werts, aber noch innerhalb der Bandbreite der experimentellen Unsicherheit. Bei Bewertung der Simulationsergebnisse ist auch zu berücksichtigen, dass Wärmestrahlung vernachlässigt wurde. Berücksichtigt man, dass keine komplett trockene Luft im Versuch vorlag, und berücksichtigt man die Erkenntnisse aus der Analyse der HYMERES-2-Serie H2P2 in RS1562 /SCH 21b/, die eine mittlere Absorptionskonstante von Dampf in der Größenordnung von $10\text{ m}^{-1}\text{ bar}^{-1}$ als geeignet erscheinen lassen, so ist die Annahme einer Absorptionskonstante für die Luft in diesem Versuch von $0,1 - 0,2\text{ m}^{-1}\text{ bar}^{-1}$ plausibel. In zukünftigen Untersuchungen sollte deshalb auch für diesen Versuch die Wärmestrahlung berücksichtigt werden.

Vergleicht man die Vertikalgeschwindigkeiten entlang einer vertikalen Linie oberhalb der Einspeisung, so sind die Geschwindigkeiten der beiden OpenFOAM-Simulationen sehr ähnlich; CFX berechnet entlang dieser Linie nur geringfügig höhere Vertikalgeschwindigkeiten (Abb. 2.114). Die gemessenen Geschwindigkeiten liegen dagegen deutlich höher.

In Abb. 2.115 ist die Vertikalgeschwindigkeit zum Zeitpunkt $\sim 1213\text{ s}$ entlang einer horizontalen Linie in Höhe von $5,9\text{ m}$ dargestellt. Alle Simulationen (CFX, cont, mrs) berechnen ein sehr ähnliches Geschwindigkeitsprofil. Es ist breiter und die

Maximalgeschwindigkeit ist deutlich niedriger als die gemessene. Es fällt ebenfalls auf, dass es gegenüber dem Experiment zu kleineren x-Werten seitlich leicht verschoben ist.

Neben der Turbulenzmodellierung ist die wahrscheinlichste Ursache für die Abweichung bei den Geschwindigkeiten die Modellierung der Gaseinspeisung. Es wurde im CFD-Gitter nur der gerade Teil des Rohres berücksichtigt. Als Eintrittsrandbedingung wurde ein Blockprofil für die Geschwindigkeit angenommen, die unbekannte turbulente kinetische Energie an dieser Position wurde mit $1,0e-3 \text{ m}^2/\text{s}^2$ abgeschätzt. In RS1525 /SCH 17/ und RS1562 /SCH 22b/ wurde die Modellierung des Einlassrohres im Hinblick auf geometrische Vereinfachungen und Turbulenzmodellierung detailliert untersucht und eine Sensitivität aufgezeigt. Es wird davon ausgegangen, dass bei Vorgabe des tatsächlich vorhandenen Geschwindigkeitsfeldes und der Turbulenz am Ende des Einspeiserohres eine bessere Übereinstimmung mit den gemessenen Geschwindigkeiten erzielt werden kann. Aufgrund der deutlichen Abweichung von Simulationen und Experiment ist es nicht unwahrscheinlich, dass dies auch einen Einfluss auf die Geschwindigkeit der Schichtungsauflösung haben wird.

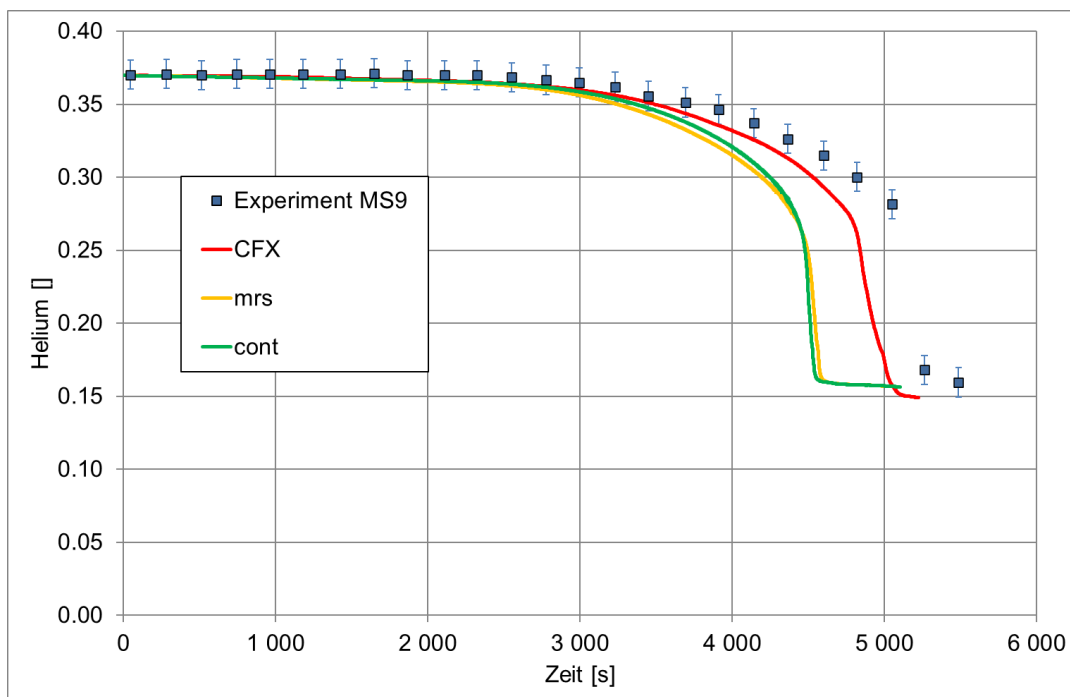


Abb. 2.106 Helium-Molenbruch an der Messstelle MS9 (Behältermitte in 7,99 m Höhe)

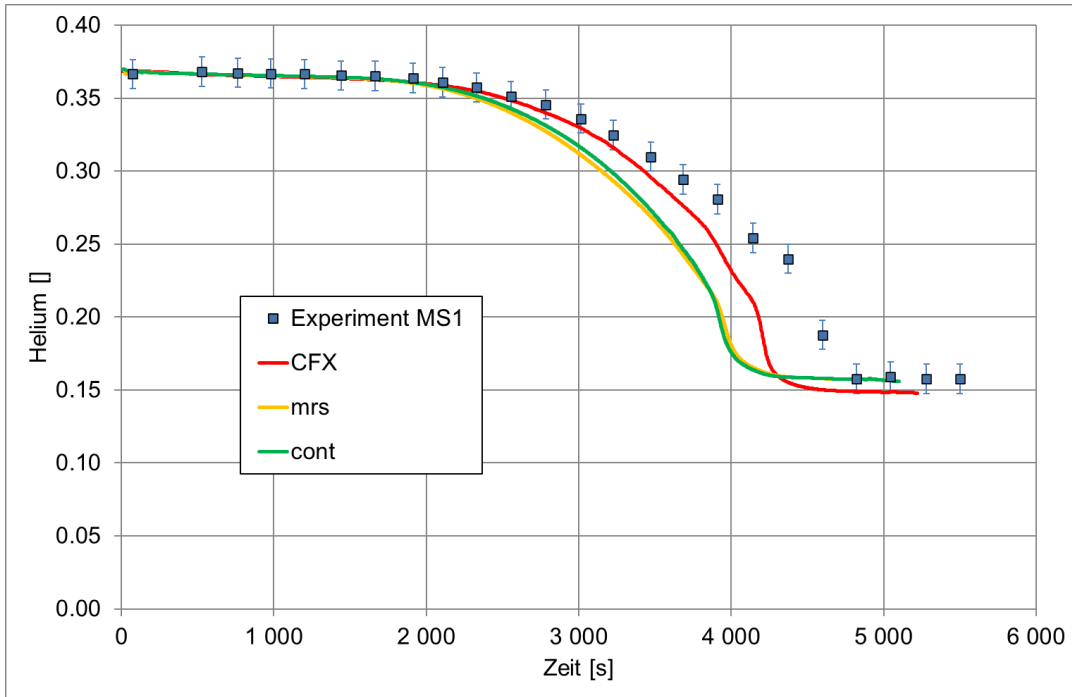


Abb. 2.107 Helium-Molenbruch an der Messstelle MS1 (oberhalb der Einspeisung in 7,48 m Höhe)

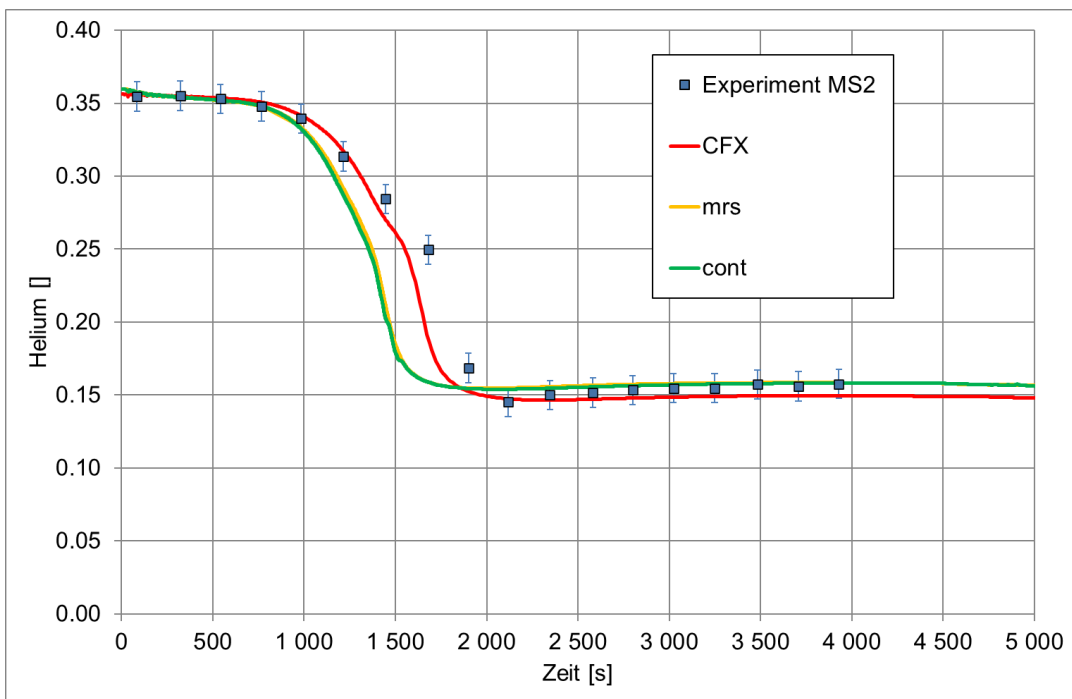


Abb. 2.108 Helium-Molenbruch an der Messstelle MS2 (oberhalb der Einspeisung in 6,71 m Höhe)

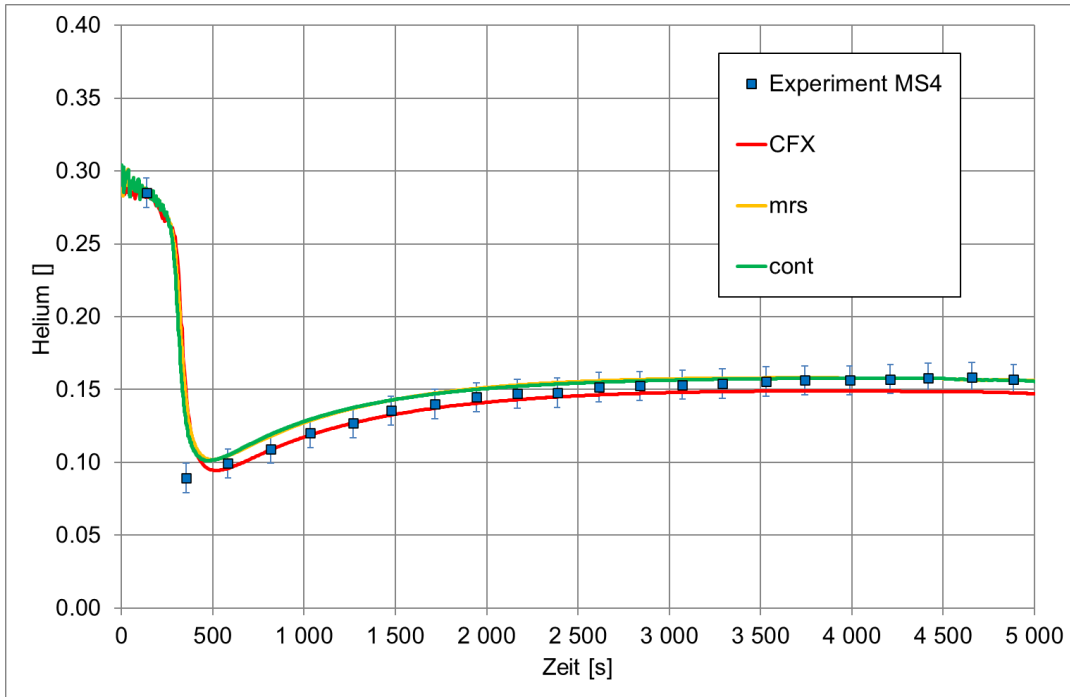


Abb. 2.109 Helium-Molenbruch an der Messstelle MS4 (oberhalb der Einspeisung in 6,0 m Höhe)

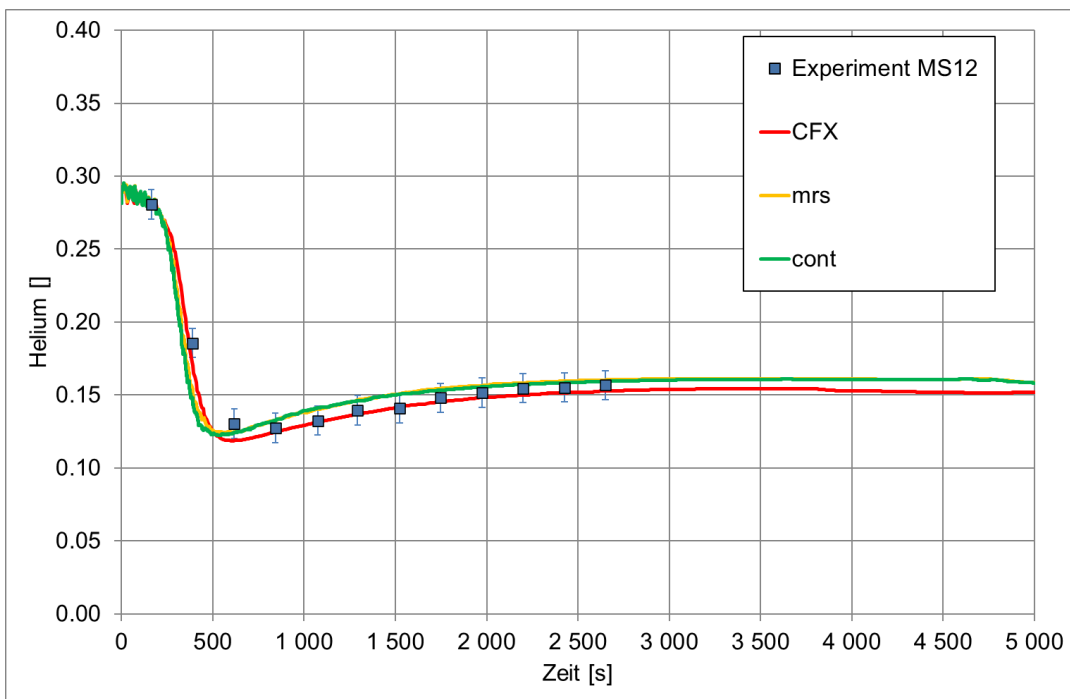


Abb. 2.110 Helium-Molenbruch an der Messstelle MS12 (nahe der Behälterwand in 6,0 m Höhe)

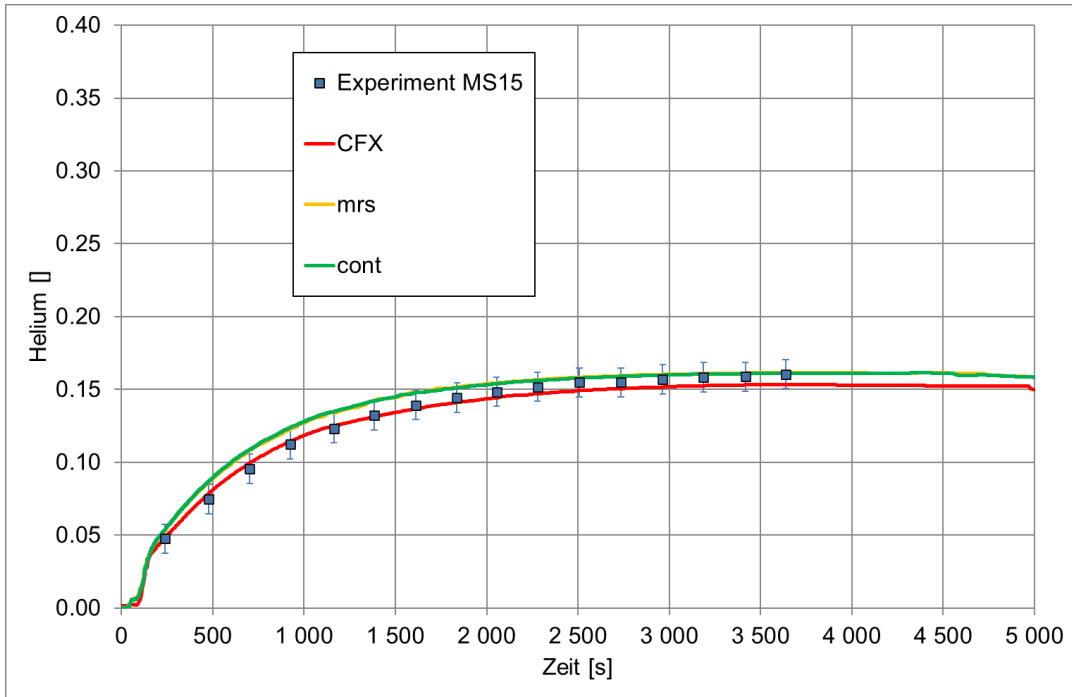


Abb. 2.111 Helium-Molenbruch an der Messstelle MS15 (nahe der Behälterwand in 3,68 m Höhe)

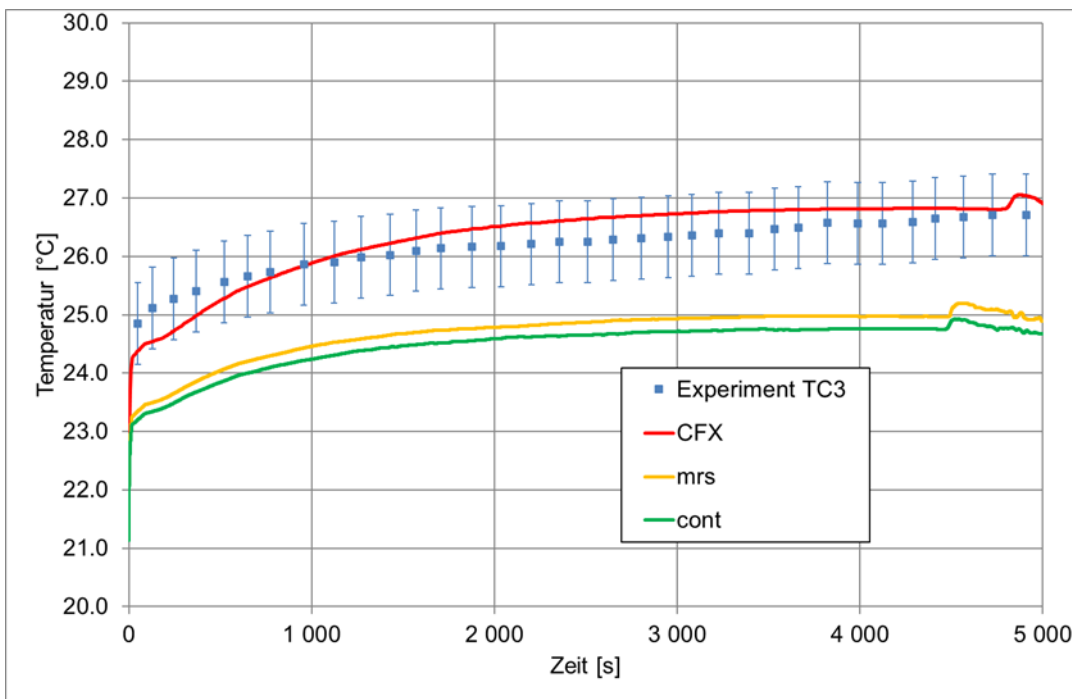


Abb. 2.112 Temperatur an der Messstelle TC3 (oberhalb der Einspeisung in 3,68 m Höhe)

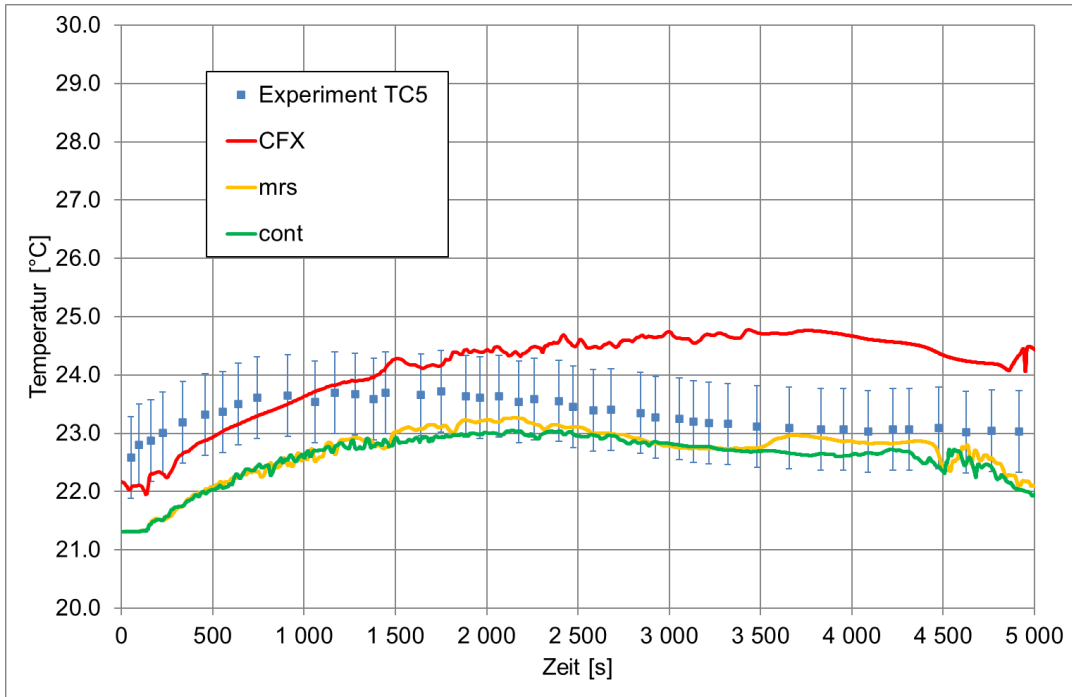


Abb. 2.113 Temperatur an der Messstelle TC5 (seitlich der Einspeisung in 3,68 m Höhe)

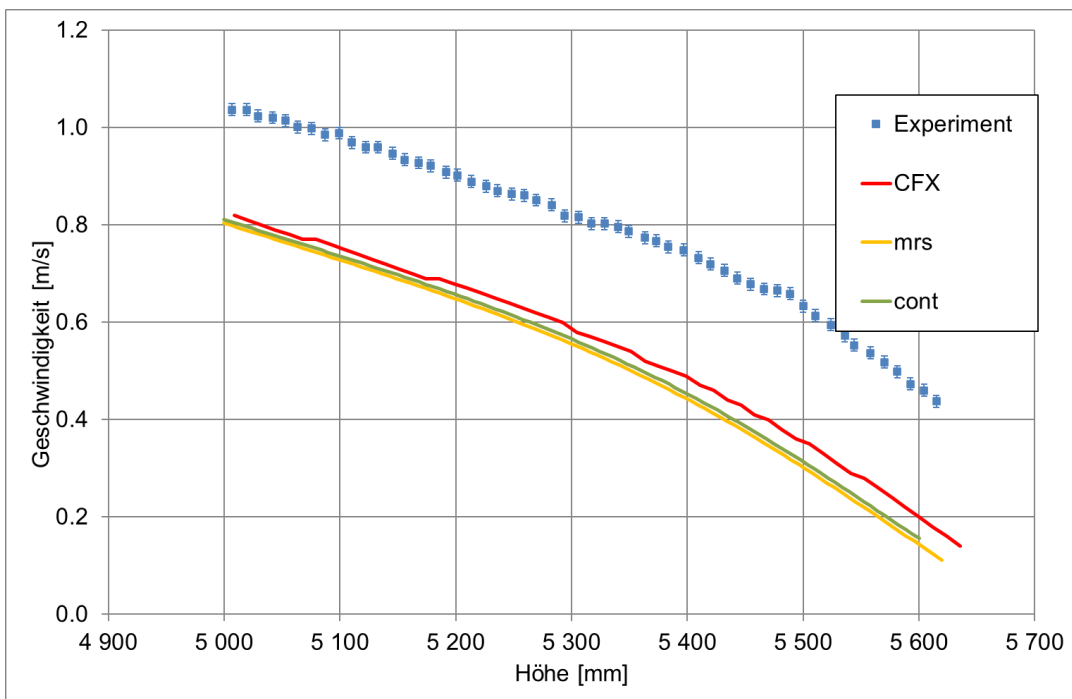


Abb. 2.114 Vertikalgeschwindigkeit entlang einer vertikalen Linie oberhalb der Einspeisung zum Zeitpunkt ~111 s

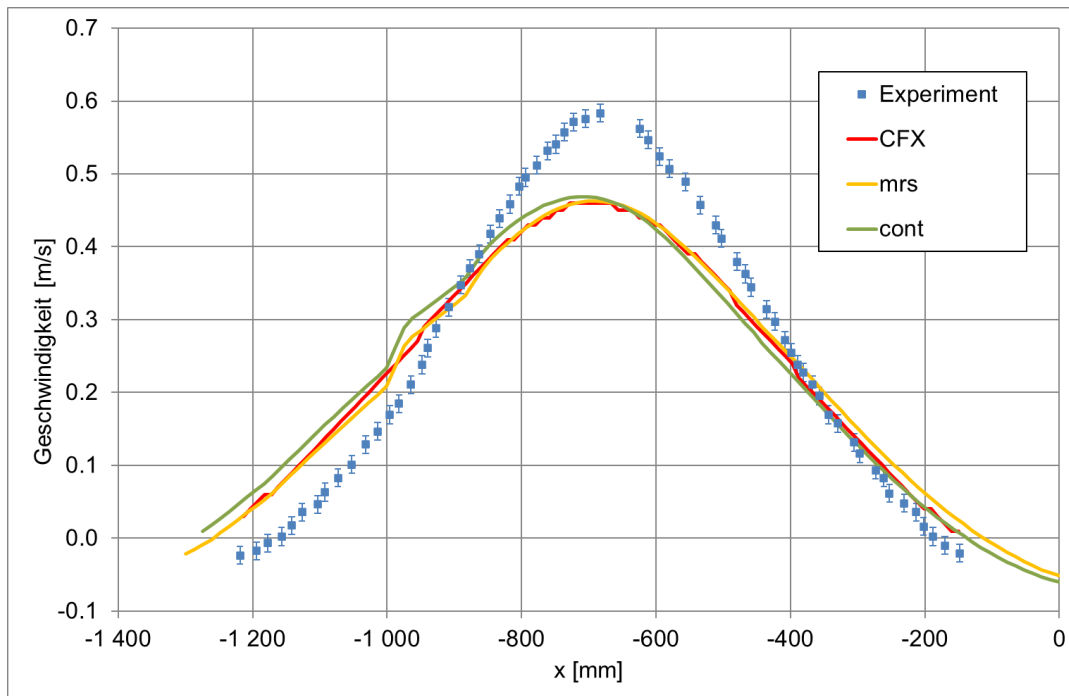


Abb. 2.115 Vertikalgeschwindigkeit entlang einer horizontalen Linie auf der Höhe 5,9 m zum Zeitpunkt ~1213 s

2.5.2.5 Untersuchung zum Wilke-Mischungsmodell für Transportgrößen

In OpenFOAM erfolgt genauso wie in CFX die Berechnung der Transportgrößen (z. B. Viskosität, Wärmeleitung) standardmäßig massenbruchgemittelt aus den Werten der einzelnen Spezies. In containmentFOAM ist zusätzlich noch das Wilke-Mischungsmodell implementiert, bei dem die Gewichtung entsprechend der Molenbrüche vorgenommen wird [KEL 21b]. Im Folgenden werden die Ergebnisse unter Nutzung des Wilke-Mischungsmodells mit denen des in den vorhergehenden containmentFOAM-Rechnungen verwendeten Modells multiComponentMixture verglichen. Es zeigt sich, dass die Wahl des Mischungsmodells keinen Einfluss auf die Heliumverteilung und den Schichtungsabbau in diesem Versuch hatte (Abb. 2.116, Abb. 2.117). Auch die Strömungsgeschwindigkeit im Bereich des Gasstrahls wurde nicht beeinflusst (Abb. 2.120). Die Temperaturen wurden dagegen durch die Wahl des Mischungsmodells merklich beeinflusst (Abb. 2.112, Abb. 2.113). Bei Wahl des Wilke-Mischungsmodells erfolgt der Anstieg der Temperaturen an den Messstellen TC3 und TC5 schneller als mit multiComponentMixture, was besser mit dem Experiment übereinstimmt, wobei bei der Bewertung der Verbesserung auch noch andere Verbesserungsmöglichkeiten (Temperaturrandbedingung am Einlassrohr und die Berücksichtigung von Wärmestrahlung) zu berücksichtigen sind.

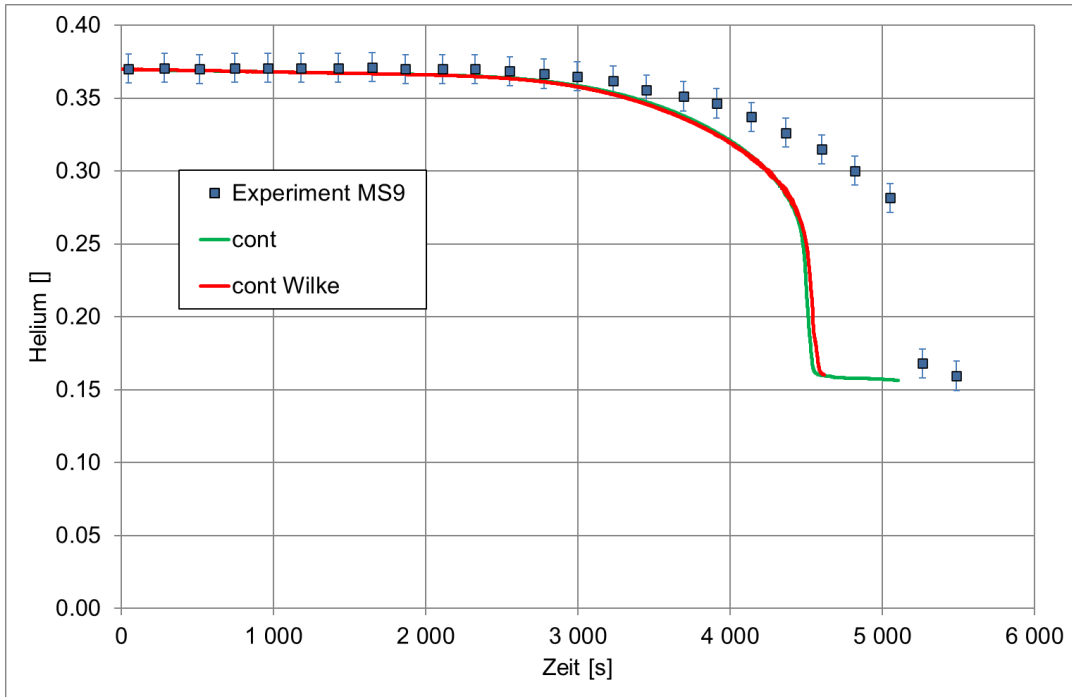


Abb. 2.116 Helium-Molenbruch an der Messstelle MS9 (Behältermitte, 7,99 m Höhe)

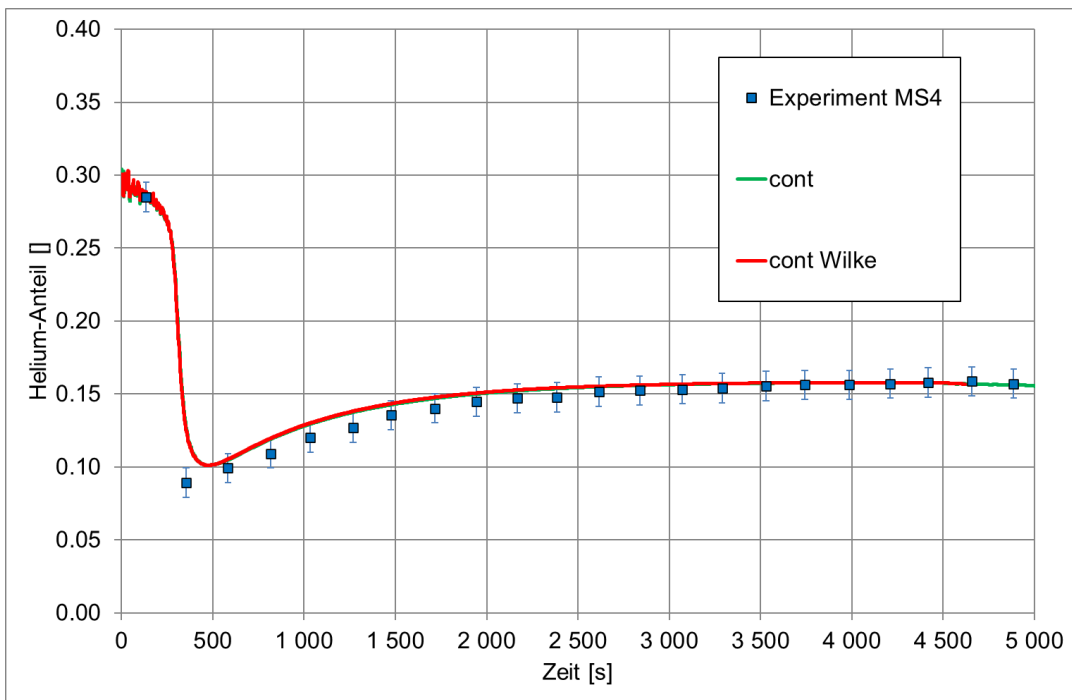


Abb. 2.117 Helium-Molenbruch an der Messstelle MS4 (oberhalb der Einspeisung, 6,0 m Höhe)

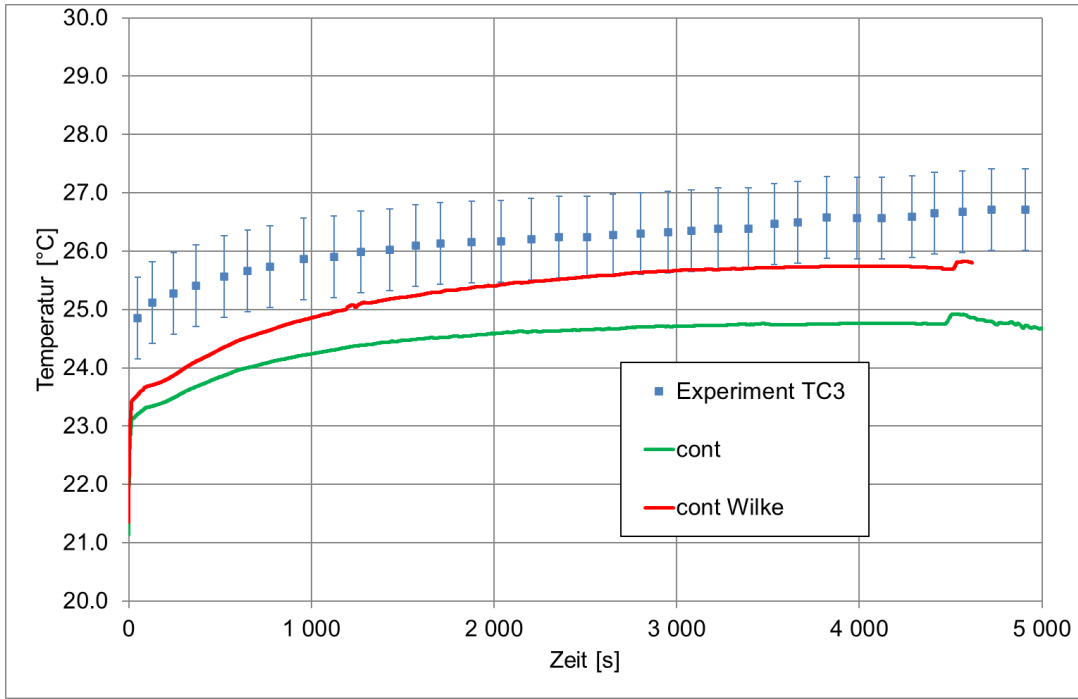


Abb. 2.118 Temperatur an der Messstelle TC3 (oberhalb der Einspeisung, 3,68 m Höhe)

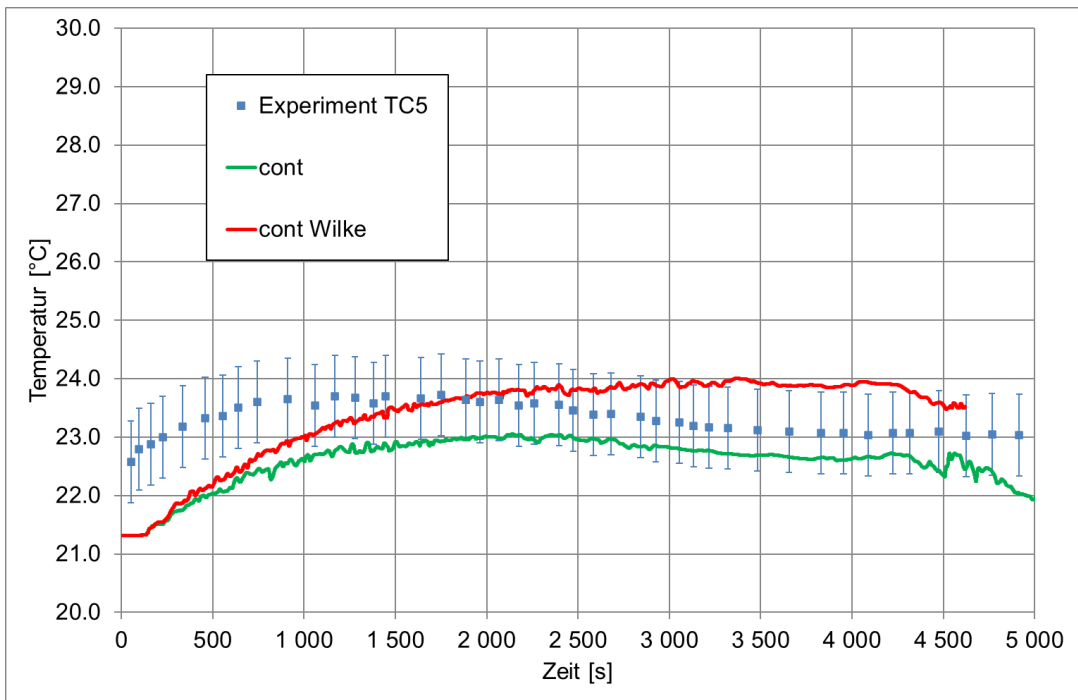


Abb. 2.119 Temperatur an der Messstelle TC5 (seitlich der Einspeisung, 3,68 m Höhe)

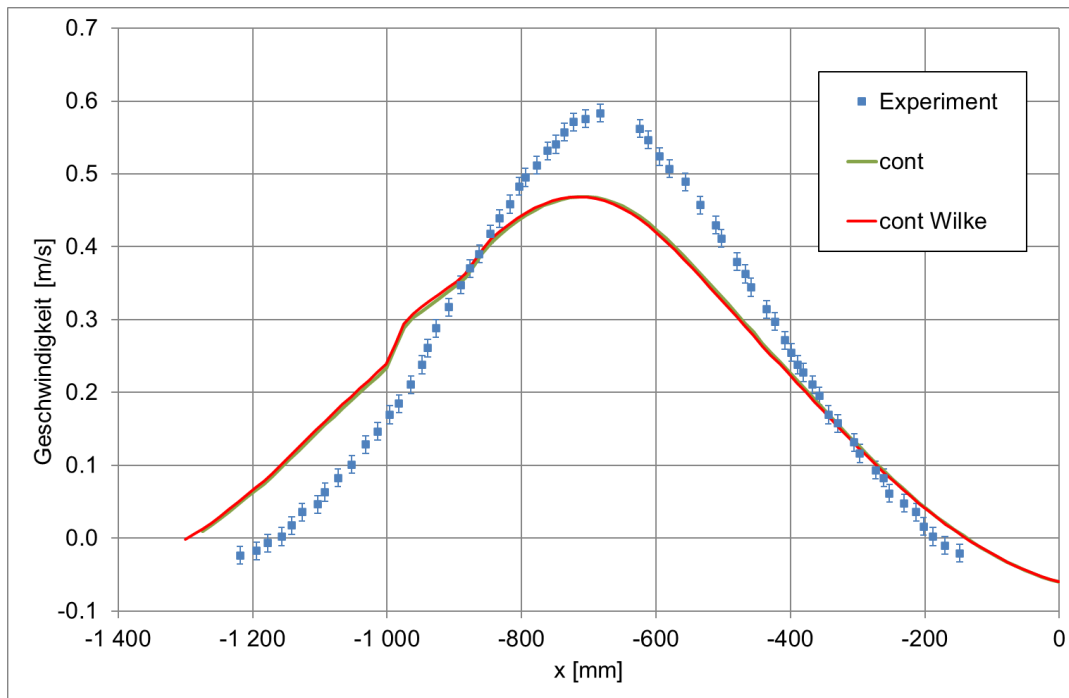


Abb. 2.120 Vertikalgeschwindigkeit entlang einer horizontalen Linie auf der Höhe 5,9 m zum Zeitpunkt ~1213 s

2.5.2.6 Einfluss der Diffusionskonstante

In containmentFOAM wurde die Diffusionskonstante von Helium in Luft mit der Fuller-Korrelation modelliert. Im Solver chtMultiRegionSchmidtFOAM (mrs) muss eine Konstante vom Nutzer vorgegeben werden, die üblicherweise ebenfalls mit Fuller berechnet wurde, wobei für die Temperatur ein mittlerer Wert angenommen wird. Da die Temperatur im Experiment nur schwach variierte, ergab sich in diesem Versuch kein merklicher Unterschied bei den verwendeten Diffusionskonstanten, bei anderen Versuchen mit größeren Temperaturunterschieden wird die Übereinstimmung schlechter sein. Zur Untersuchung des Einflusses der Diffusionskonstante D wurden zwei Simulationen mit dem Solver mrs durchgeführt. Bei einer wurde der Wert von $7,25e-5 \text{ m}^2/\text{s}$ angenommen, der der Fuller-Formel entspricht, und einer mit einer deutlich kleineren Konstante von $D = 3,49 \text{ m}^2/\text{s}$. Es zeigte sich, dass die Wahl der Diffusionskonstante einen signifikanten Einfluss auf den Schichtungsabbau hat (Abb. 2.121, Abb. 2.122). Die Simulation mit der größeren Diffusionskonstante berechnet einen um ca. 350 s schneller Abbau (MS9, Abb. 2.121). Auch der Verlauf des Abbaus ist unterschiedlich. Bei der kleineren Diffusionskonstante verharrte der Helium-Molenbruch länger auf dem ursprünglichen Wert, danach erfolgte eine schnellere Abnahme des Helium-Molenbruchs. Der Einfluss der

Diffusionskonstante war bei den oberen Messpunkten größer als bei den weiter unten liegenden.

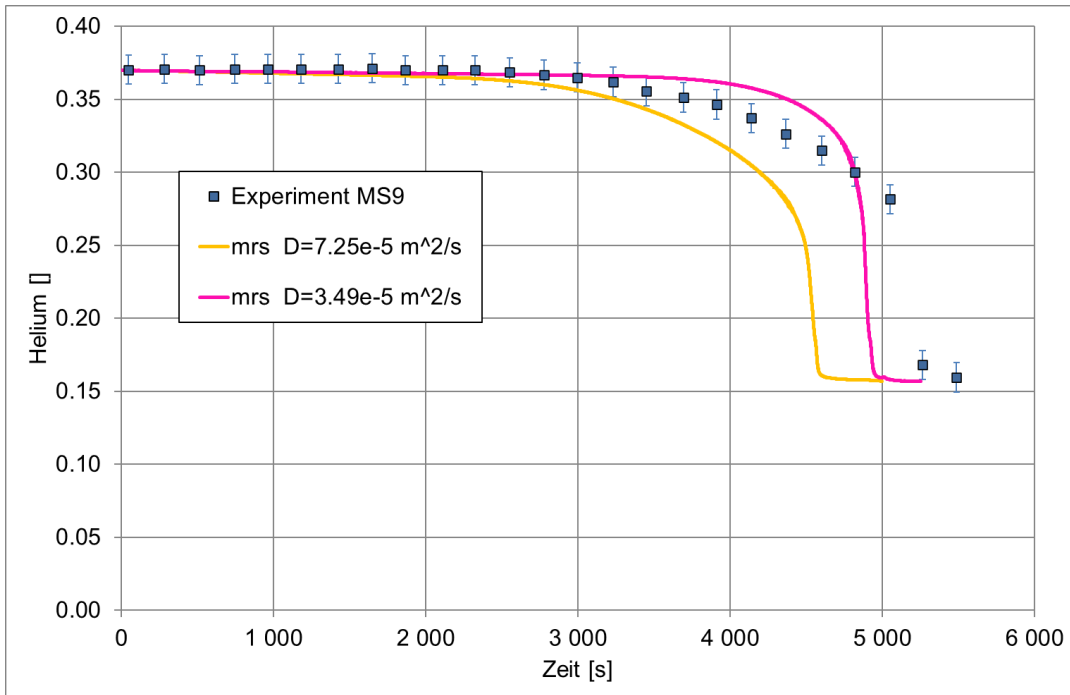


Abb. 2.121 Helium-Molenbruch an der Messstelle MS9 (Behältermitte in 7,99 m Höhe)

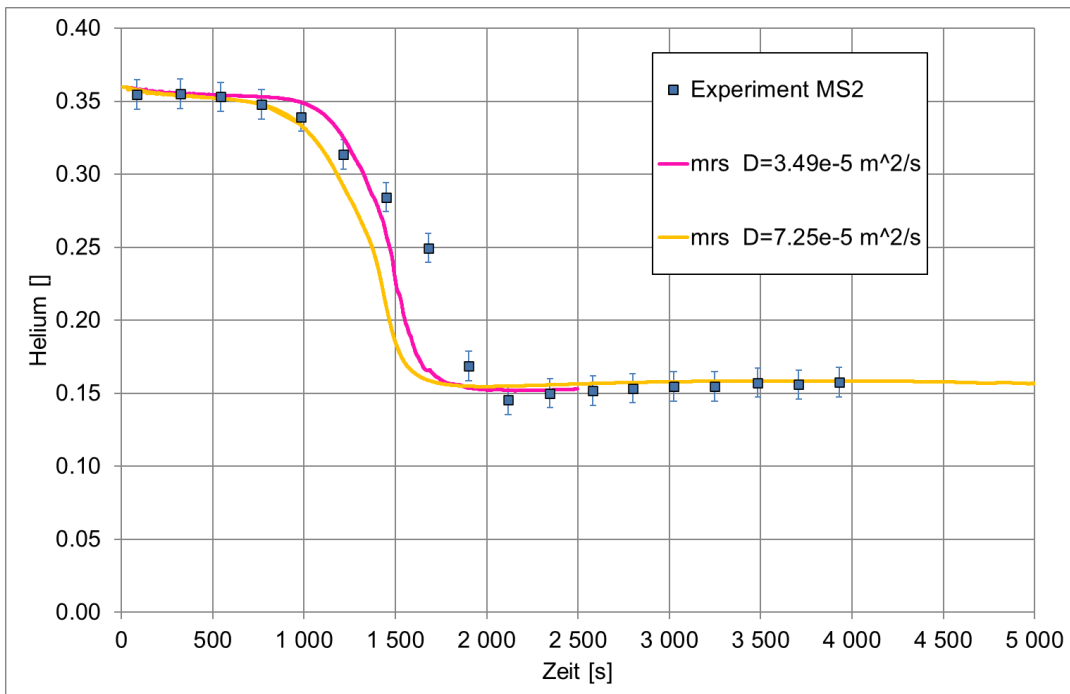


Abb. 2.122 Helium-Molenbruch an der Messstelle MS2 (oberhalb der Einspeisung in 6,71 m Höhe)

2.5.2.7 Zusammenfassung

Die OpenFOAM-Solver `containmentFOAM` und `chtMultiRegionSchmidtFOAM` wurden erfolgreich anhand des OECD/NEA-PSI-Benchmarks getestet. Laut Überprüfung durch das OpenFOAM-Tool `checkMesh` erfüllt das verwendete CFD-Gitter alle Qualitätsanforderungen von OpenFOAM. So betrug die maximale "Non-Orthogonality" des Gitters 65,8. Trotzdem mussten in den numerischen Schemata `laplacianSchemes` und `snGradSchemes` die Werte von 1 auf 0,4 verringert werden, um eine konvergente Lösung erzielen zu können.

Beide OpenFOAM-Simulationen nutzten sehr ähnliche physikalische Modelle und lieferten sehr ähnliche Simulationsergebnisse. Die Geschwindigkeit des Schichtungsbaus wurde von den OpenFOAM-Simulationen etwas überschätzt (relative Abweichung ~11,5 %). Es fällt auf, dass alle Simulationen (`cont`, `mrs`, `CFX`) ein deutlich anderes Geschwindigkeitsprofil oberhalb der Gaseinspeisung als im Experiment gemessen berechneten. In den Simulationen war die Maximalgeschwindigkeit im Strahl deutlich geringer (rel. Abweichung ~20 %), dafür war die Geschwindigkeit seitlich höher. Neben Fehlern durch das Turbulenzmodell wurde als wahrscheinliche Ursache die vereinfachte Modellierung der Gaseinspeisung identifiziert. Dies führte dazu, dass das Geschwindigkeitsprofil und die Turbulenz am Ende des Einspeiserohrs nicht der im Experiment entsprechen. Es erscheint plausibel, dass diese Abweichung auch die Geschwindigkeit des Schichtungsabbaus beeinflusst.

Das Wilke-Mischungsmodell in `containmentFOAM` wurde erfolgreich getestet. Gegenüber dem Standardmodell ergab sich bei der Temperatur ein signifikanter Einfluss, bei den Helium-Molenbrüchen und den Geschwindigkeiten konnte kein signifikanter Unterschied festgestellt werden.

2.5.3 Nachrechnung des PANDA-Experimentes SETH-2 ST2_1

2.5.3.1 Beschreibung des experimentellen Aufbaus

Abb. 2.123 zeigt eine schematische Darstellung der PANDA-Versuchsanlage. Diese besteht aus zwei großen Metallbehältern sowie einem geknickten Verbindungsrohr. Im Behälter 1 besteht die Möglichkeit, Helium und Dampf einzuspeisen, im Behälter 2 ist ein Ablassventil zur Druckentlastung angebracht. Beim Versuch ST2_1 /MIG 09/ wurde zunächst eine Heliumschichtung in Behälter 1 erzeugt, die dann in diesem Versuch durch

eine horizontale Dampfeinspeisung aufgelöst wurde. Als Startbedingung lag eine Heliumkonzentration (in der Schicht) von etwa 25 Vol.-% Helium vor, ansonsten waren beide Behälter vollständig mit Dampf gefüllt. In den Behältern lag eine mittlere Temperatur von 108 °C sowie ein Druck von 1,3 bar vor. Das Auslassventil in Behälter 2 wurde so geregelt, dass der Druck konstant bei diesen 1,3 bar gehalten wurde. Tab. 2.6 enthält die in der Simulation verwendeten Start- und Randbedingungen.

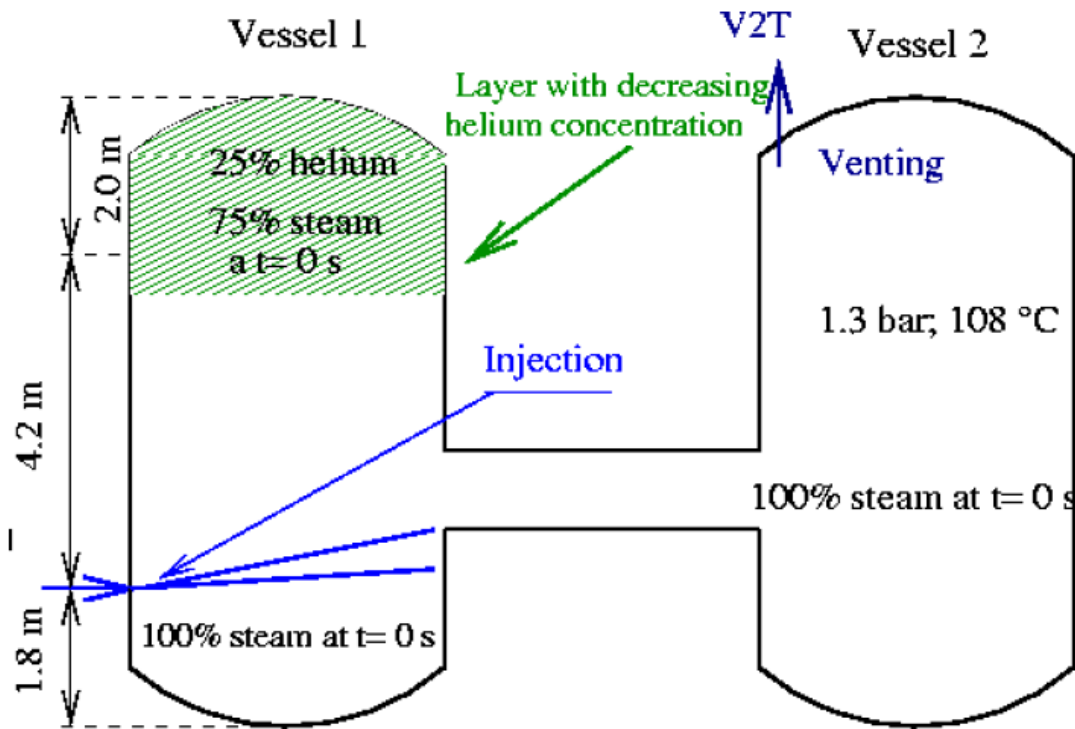


Abb. 2.123 Versuchsführung beim SETH-2-Versuch ST2_1 (Bild: /MIG 09/)

Tab. 2.6 Verwendete Start- und Randbedingungen

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

2.5.3.2 Setup mit containmentFOAM

Ziel der Arbeiten war ein Vergleich des Solvers containmentFOAM des FZ Jülich (Stand 2022, basierend auf OpenFOAM Version 6) mit dem Solver chtMultiRegionSchmidtFOAM der GRS /SCH 22b/. Im Folgenden wird für die Rechnung mit dem containmentFOAM-Solver des FZJ die Abkürzung „cont“ und für die Rechnung mit dem Solver chtMultiRegionSchmidtFOAM der GRS die Abkürzung „mrs“ verwendet.

Die für die cont-Rechnung verwendeten Parameter sind in Tab. 2.7 dargestellt. Sowohl in der cont- als auch in der mrs-Rechnung wurde das buoyantkOmegaSST-Turbulenzmodell verwendet. Alle Rechnungen wurden ohne Kondensationsmodell durchgeführt, da bei den gegebenen Bedingungen nicht mit einer Dampfkondensation gerechnet werden muss. Weiterhin wurden beide OpenFOAM-Simulationen mit Version 6.0 durchgeführt. Als Strahlungsmodell wurde genau wie bei der mrs-Rechnung das P1-Modell verwendet. Die beiden OpenFOAM-Rechnungen verwendeten einen konstanten Absorptionskoeffizienten von $10 \text{ m}^{-1} \text{ bar}^{-1}$ für H_2O . Die cont-Rechnung verwendete im Gegensatz zur mrs-Rechnung für den Diffusionskoeffizienten die Fuller-Korrelation. Die mit der Korrelation berechneten Werte liegen nahe an einem konstanten Wert von $1,0\text{e-}4 \text{ m}^2/\text{s}$. Dieser wurde als konstanter Wert in der mrs-Rechnung verwendet. Die maximale Courant-Zahl in der cont-Rechnung betrug 5. In der mrs-Rechnung konnten höhere Werte bis zu 200 verwendet werden. In Abb. 2.124 wird die verwendete Geometrie und die Heliumkonzentrationen zum Zeitpunkt $t = 10 \text{ s}$ dargestellt. Abb. 2.125 zeigt die Position der verwendeten Monitorpunkte.

Tab. 2.7 Berechnungsparameter für Versuch SETH-2 ST2_1

Versuch	Panda SETH-2 ST2_1
Phänomene	Gasverteilung, Schichtungsauflösung
Solver	containmentFOAM
Kondensationsmodell	Ohne
Strahlungsmodell	P1 (Abs. $\text{H}_2\text{O} = 10 \text{ m}^{-1}$)
Turbulenzmodell	buoyantkOmegaSST
Diffusionsmodell	twoSpecies / Fuller
Max. Courant-Zahl	5,0
Elementzahl	1 034 610 (atmosphere), 161 020 (wall)
Software / Version	OpenFOAM 6.0

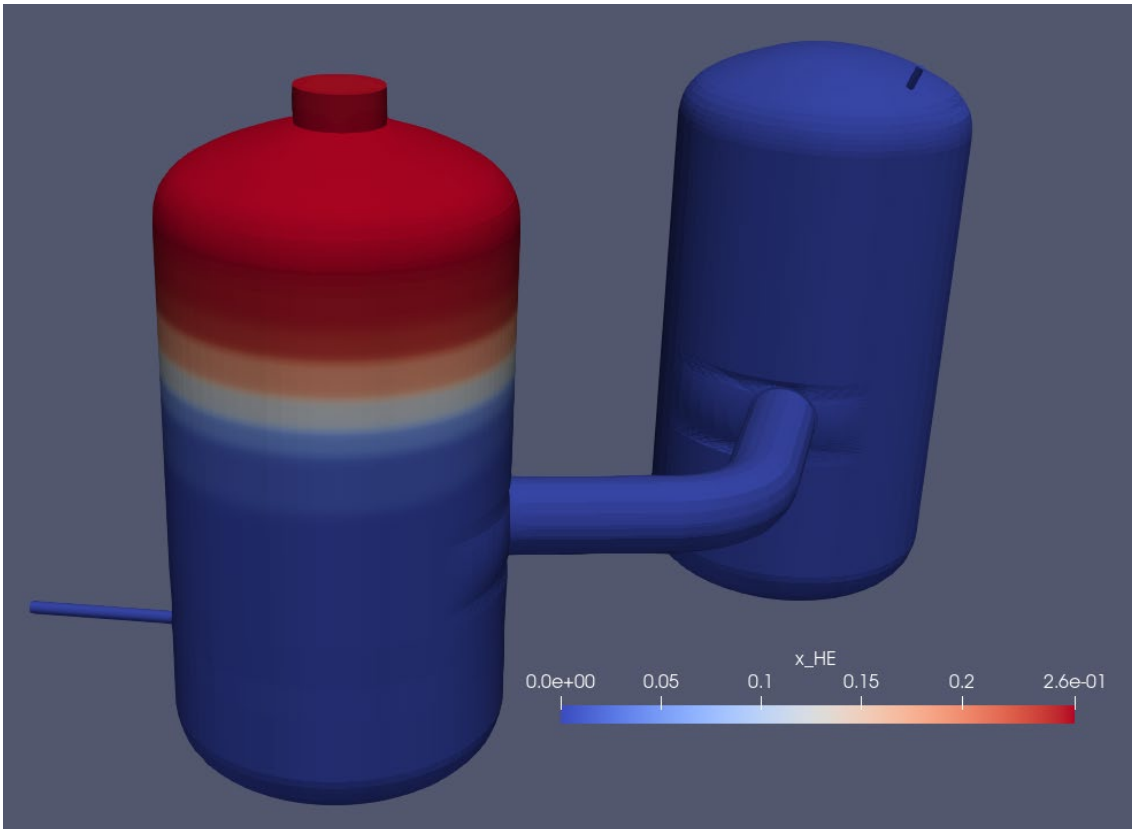


Abb. 2.124 PANDA-Geometrie und molare Helium-Konzentration zum Zeitpunkt $t = 10 \text{ s}$

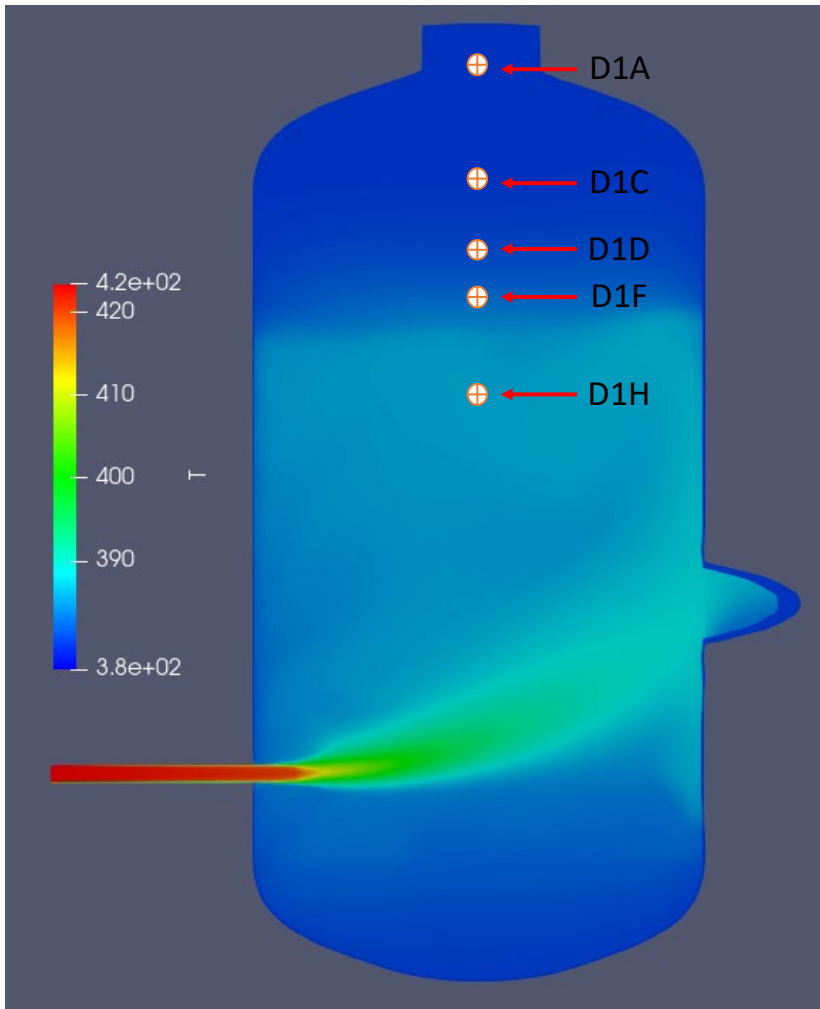


Abb. 2.125 Position der Monitorpunkte (und Temperatur zum Zeitpunkt $t = 500$ s)

2.5.3.3 Vergleich der Helium-Molenbrüche

In Abb. 2.126 bis Abb. 2.128 wird der Verlauf der Helium-Molenbrüche in unterschiedlichen Höhen miteinander verglichen. Die beiden OpenFOAM-Rechnungen (mrs und cont) zeigen relativ ähnliche Verläufe. Nur am obersten Messpunkt (MCG_D1A) zeigen sich ab dem Zeitpunkt 2700 s leichte Abweichungen bei der Schichtungsauflösung, wobei cont etwas besser mit dem Experiment übereinstimmt. Mögliche Gründe dafür sind unterschiedliche Einstellungen für die Numerik:

- Maximale Courant-Zahl: 200 (mrs) und 5 (cont)
- ddtScheme: CrankNicolson 0,3 (mrs) und CrankNicolson 0,5 (cont)
- nCorrectors/nNonOrthogonalCorrectors: 3 (mrs) und 2 (cont)
- relaxationFactors: p_rgh 0,9 (mrs) und 1,0 (cont)

Bei den anderen Messpunkten sind sich die beiden OpenFOAM-Rechnungen sehr ähnlich. Die mit cont berechnete Abbauzzeit der Heliumschicht passt weiterhin sehr gut zu den experimentellen Werten (siehe insbesondere Abb. 2.126).

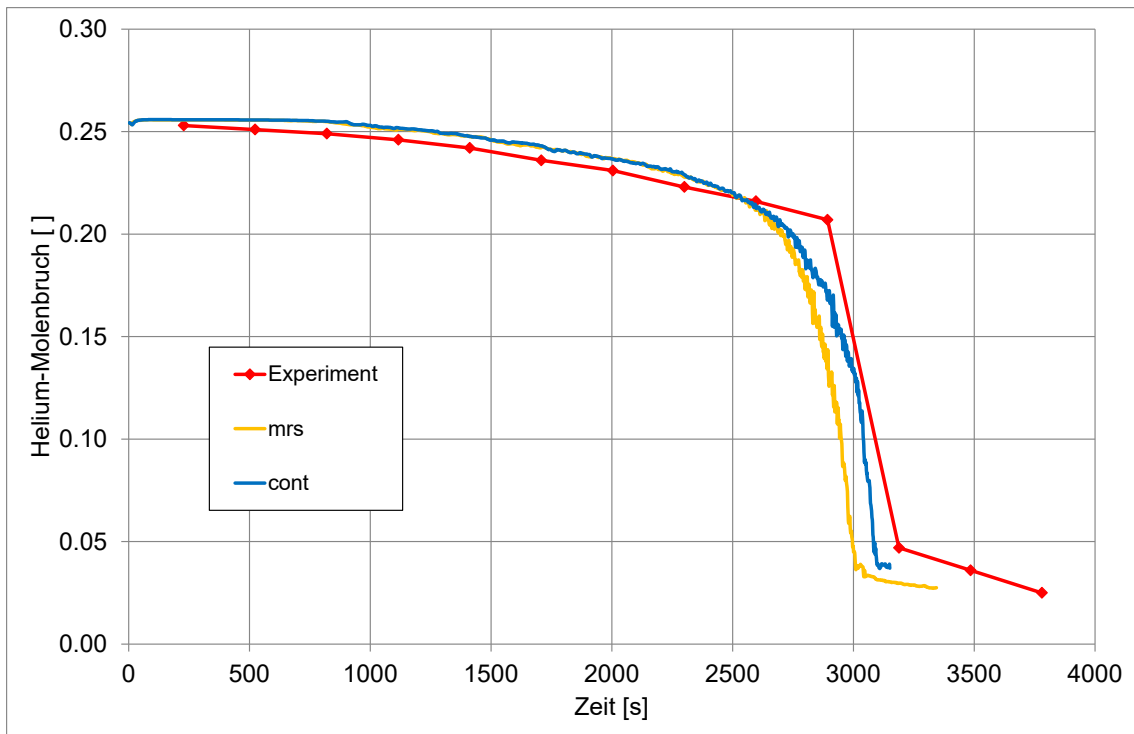


Abb. 2.126 Helium-Molenbruch am Monitorpunkt MCG_D1A (Höhe: 8,03 m)

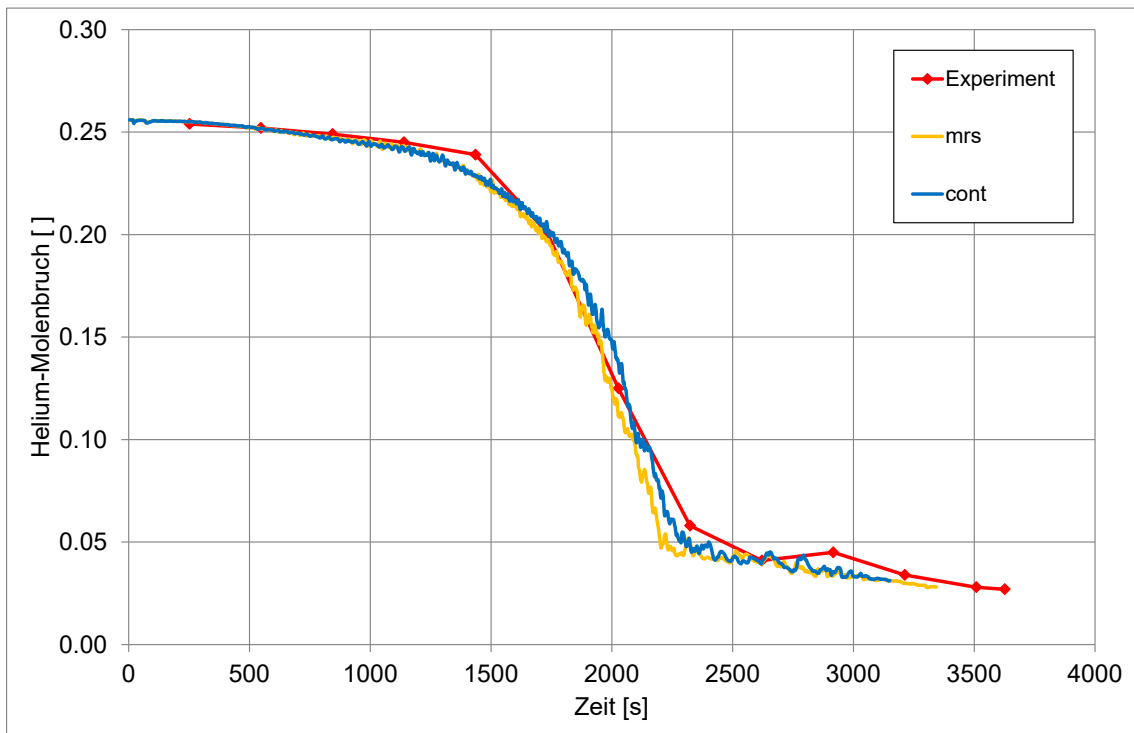


Abb. 2.127 Helium-Molenbruch am Monitorpunkt MCG_D1C (Höhe: 6,926 m)

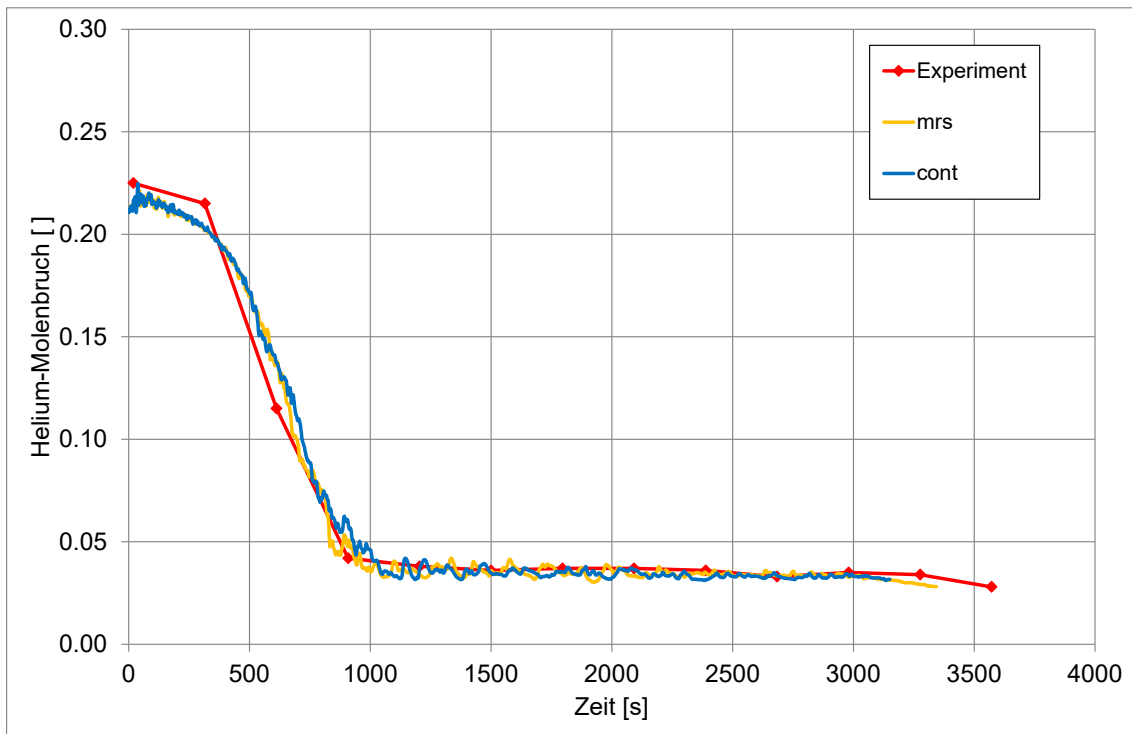


Abb. 2.128 Helium-Molenbruch am Monitorpunkt MCG_D1F (Höhe: 6,0 m)

2.5.3.4 Vergleich der Temperaturen

In Abb. 2.129 bis Abb. 2.131 werden die Temperaturverläufe miteinander verglichen. Wieder sind die Verläufe von mrs und cont sehr ähnlich. Für die betrachteten Messpunkte steigen die Temperaturen bei den Rechnungen anfangs zu schnell an, danach wird die Temperatur mit meist moderaten Abweichungen richtig berechnet.

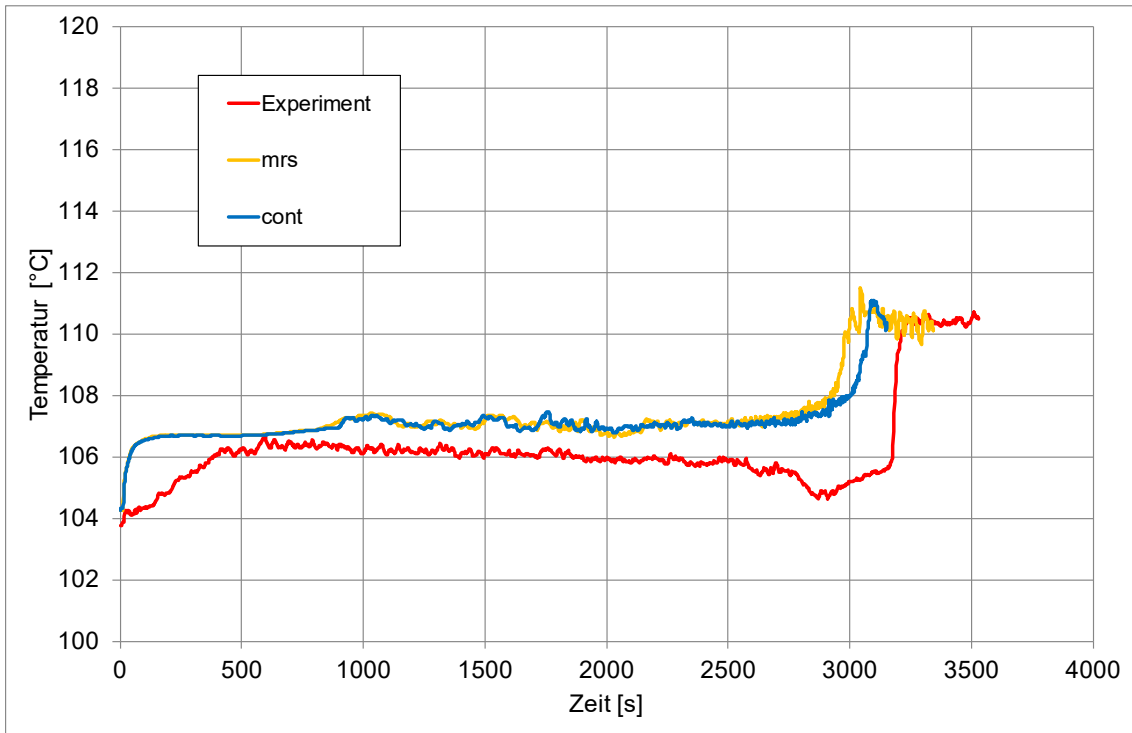


Abb. 2.129 Verlauf der Temperaturen am Monitorpunkt MTG_D1A (Höhe: 8,03 m)

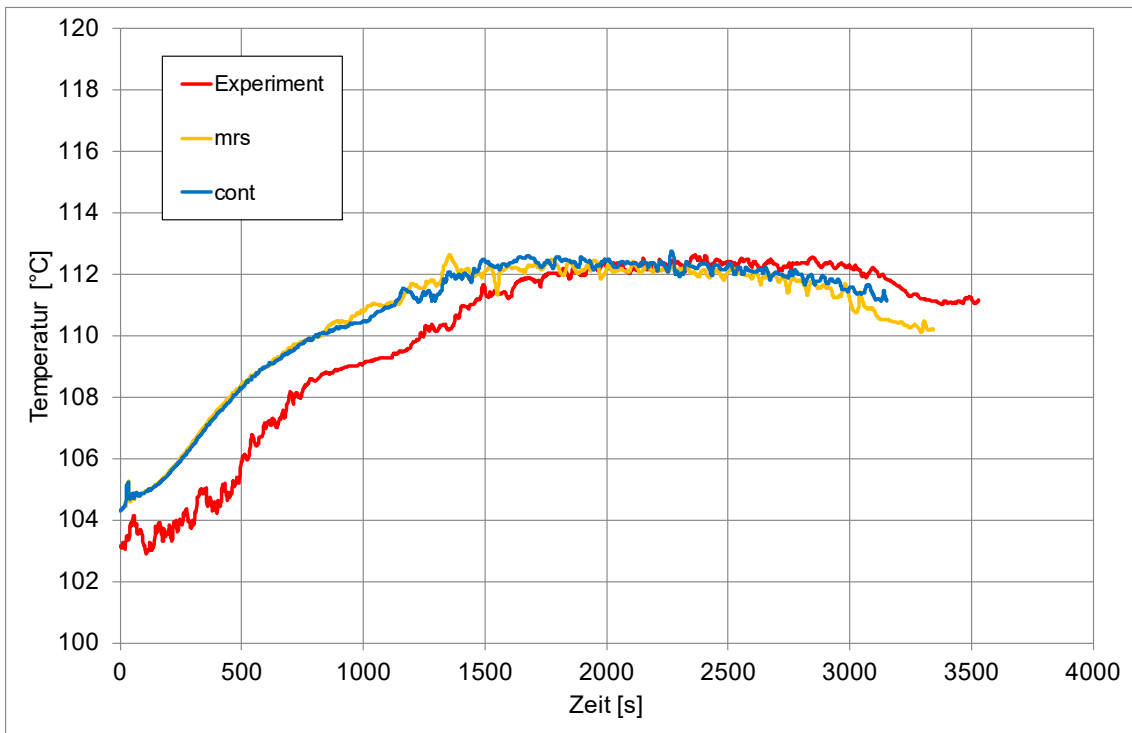


Abb. 2.130 Verlauf der Temperaturen am Monitorpunkt MTG_D1D (Höhe: 6,276 m)

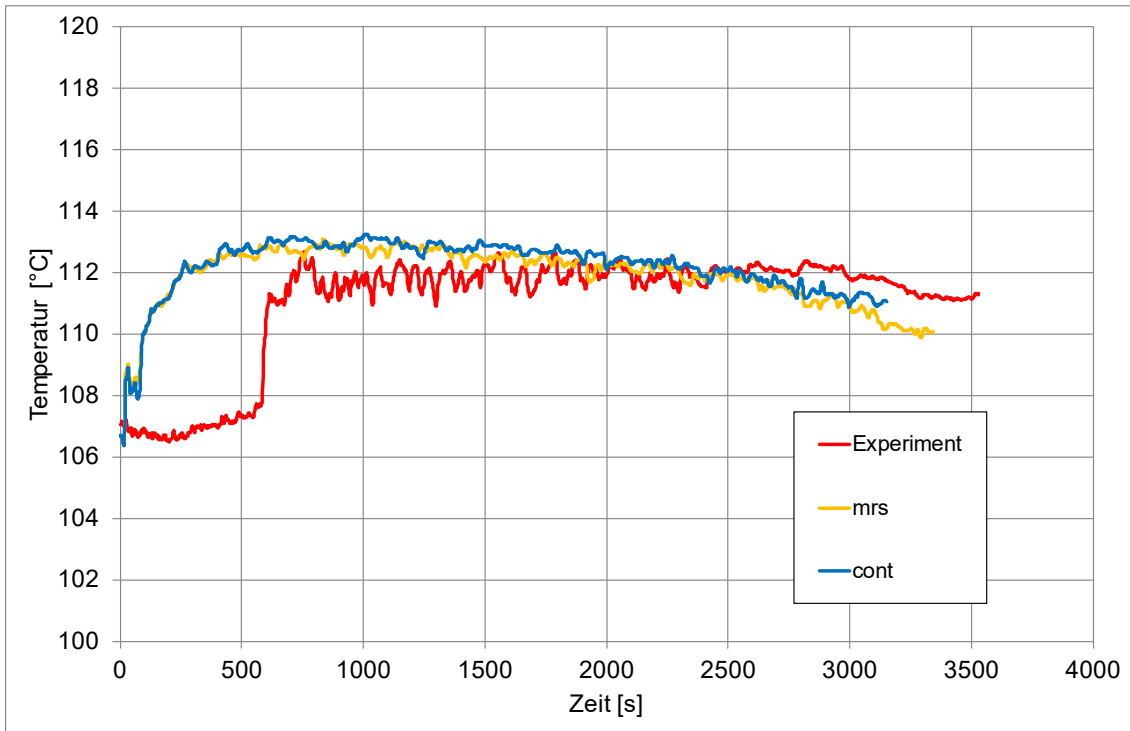


Abb. 2.131 Verlauf der Temperaturen am Monitorpunkt MTG_D1H (Höhe: 4,976 m)

2.5.3.5 Zusammenfassung und Fazit

Der Versuch SETH ST2_1 zum Abbau einer Heliumschicht durch einen horizontal eingespeisten Dampfstrahl wurde mit containmentFOAM nachgerechnet. Hierbei zeigen sich sehr ähnliche Ergebnisse wie bei den Berechnungen mit dem GRS-Solver chtMultiRegionSchmidtFOAM, trotz leichter Unterschiede in der Numerik. Beide OpenFOAM-Rechnungen zeigen eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment.

2.5.4 Simulation von CONAN-Versuchen ohne Modellierung der Kühlmittelströmung

2.5.4.1 Einleitung

Ziel der Arbeiten war es, das Wandkondensationsmodell in containmentFOAM zu testen und es mit dem GRS-Modell in chtMultiRegionSchmidtFOAM zu vergleichen. Die CONAN-Versuche sind hierzu gut geeignet, weil bei ihnen einfache wohldefinierte Strömungsbedingungen und Temperaturrandbedingungen vorliegen. Die einfache Geometrie und die stationären Versuchsbedingungen ermöglichen es, eine Vielzahl von Simulationen mit vertretbarem Aufwand durchzuführen. Neben der Wandkondensations-

modellierung spielten bei diesem Versuch auch Vermischungsvorgänge (Transport von Dampf zur Wand) und Wärmeleitung eine Rolle.

Es wurden drei CONAN-Versuche nachgerechnet, die sich hinsichtlich ihrer Wandkondensationsrate unterscheiden. Anhand eines Versuchs (P20-V25-T30, mittlere Kondensationsrate) wurde der Einfluss der Gitterfeinheit auf die berechnete Wandkondensationsrate untersucht.

2.5.4.2 Beschreibung der CONAN-Versuche

Bei den CONAN-Experimenten wurde ein Dampf/Luft-Gemisch in einen Kanal mit quadratischer Grundfläche von oben eingespeist. Der Dampfgehalt entsprach einer hundertprozentigen Sättigung und war damit direkt an die Eintrittstemperatur des Gases gekoppelt. In Abb. 2.132 ist der Versuchsaufbau für die CONAN-Experimente dargestellt. Eine Seitenwand wurde von außen gekühlt und dadurch auf einer konstanten Temperatur gehalten; an ihr fand Wandkondensation statt. An den anderen drei Seitenwänden lagen näherungsweise adiabate Randbedingungen vor. Das dampfärmere Gasgemisch trat unten aus dem Kanal aus. Die Randbedingungen blieben während eines Versuchs konstant und es stellte sich ein stationärer Zustand ein. Im Experiment wurde u. a. die räumlich-integrierte Kondensationsmasse gemessen. Sie war bei dem hier durchgeführten Vergleich der Wandkondensationsmodelle die wichtigste Vergleichsgröße. Es wurden unterschiedliche Versuche durchgeführt, bei denen die Strömungsgeschwindigkeit durch den Kanal, der Dampfgehalt und die Temperatur des eintretenden Gases sowie die Temperatur des Kühlmittels variiert wurden. Aus den zahlreichen CONAN-Versuchen wurden exemplarisch drei Versuche ausgewählt (siehe Tab. 2.8), die sich hinsichtlich des Dampfgehalts und damit auch der Eintrittstemperatur unterschieden, was zu einer unterschiedlich starken Wandkondensation führte. Weitere Informationen zu den CONAN-Versuchen sind u. a. in /AMB 09/ zu finden.

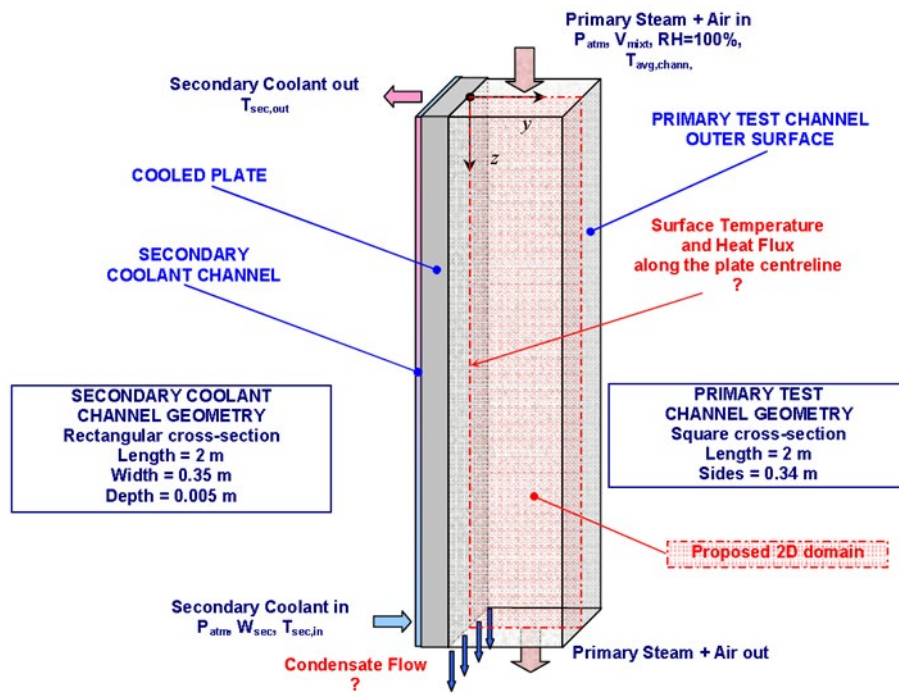


Abb. 2.132 Versuchsaufbau für die CONAN-Experimente (SARNET-2-Benchmark
Bild: /AMB 09/)

Tab. 2.8 Randbedingungen bei den nachgerechneten CONAN-Versuchen

	T_{ein}	V_{ein}	T_{Wand}	Molenbruch H_2Og
P10-V25-T30	75,6 °C	2,57 m/s	31,0 °C	0,39
P20-V25-T30	91,5 °C	2,59 m/s	32,2 °C	0,732
P30-V25-T30	97 °C	2,62 m/s	37,1 °C	0,897

2.5.4.3 Simulation mit OpenFOAM

Sowohl bei den Simulationen mit containmentFOAM (cont), als auch mit chtMultiRegionSchmidtFOAM (mrs) wurden die in früheren Arbeiten als geeignet identifizierten Modelle und numerischen Einstellungen verwendet /KEL 20/, /SCH 21b/. Bei den containmentFOAM-Simulationen wurden dabei die numerischen Einstellungen entsprechend den „testcases setcom2D bzw. setcom2d_cht“ (Stand März 2022) gewählt. Diese Rechenbeispiele wurden zusammen mit dem containmentFOAM-Solver als Tutorial bereitgestellt. Die in beiden Solvern implementierten Wandkondensationsmodelle wurden genutzt, Volumenkondensation wurde in beiden Fällen nicht berücksichtigt. Ebenso wurde Wärmestrahlung bei den beiden Versuchsnachrechnungen vernachlässigt.

Es wurden transiente Simulationen durchgeführt. Als Startwerte im Strömungskanal wurden die Einspeisebedingungen gewählt. Die Wahl der Startbedingung beeinflusst, wie schnell sich der stationäre Zustand einstellt; der hier zu bestimmende Gleichgewichtszustand war unabhängig von ihrer Wahl. Die Simulationen wurden so lange durchgeführt, bis sich der stationäre Zustand eingestellt hatte. Insbesondere war sicherzustellen, dass die Wandkondensationsrate konstant blieb. Ein Zeitraum von 200 s hatte sich dabei als ausreichend lang herausgestellt (Abb. 2.133). Die Strömung der Kühlflüssigkeit wurde in den folgenden Simulationen nicht modelliert. Als Randbedingung für die Außenfläche der gekühlten Wand wurde stattdessen die gemessene mittlere Temperatur des Kühlmittels und ein Wärmeübergangskoeffizient entsprechend /AMB 09/ vorgegeben.

Beide Solver waren mit den gewählten numerischen Einstellungen in der Lage, die Versuche ohne numerische Probleme nachzurechnen, insbesondere konnte eine konvergente Lösung (Residuen im Pimple-Loop $< 1,0e-4$; bei Turbulenzvariablen (k , ω) $< 1,0e-3$) erzielt werden. Eine Variationsrechnung mit einem um einen Faktor 10 verringerten Grenzwert lieferte nahezu identische Ergebnisse für die Kondensationsrate. Daher kann davon ausgegangen werden, dass das Konvergenzkriterium hinreichend genau war.

Im Experiment wurde die Turbulenz am Kanaleingang nicht gemessen. Bei den folgenden Untersuchungen wurde von einer Turbulenzintensität von 10 % am Einlass ausgegangen. In Abschnitt 2.5.4.6 wird der Einfluss dieser Annahme untersucht.

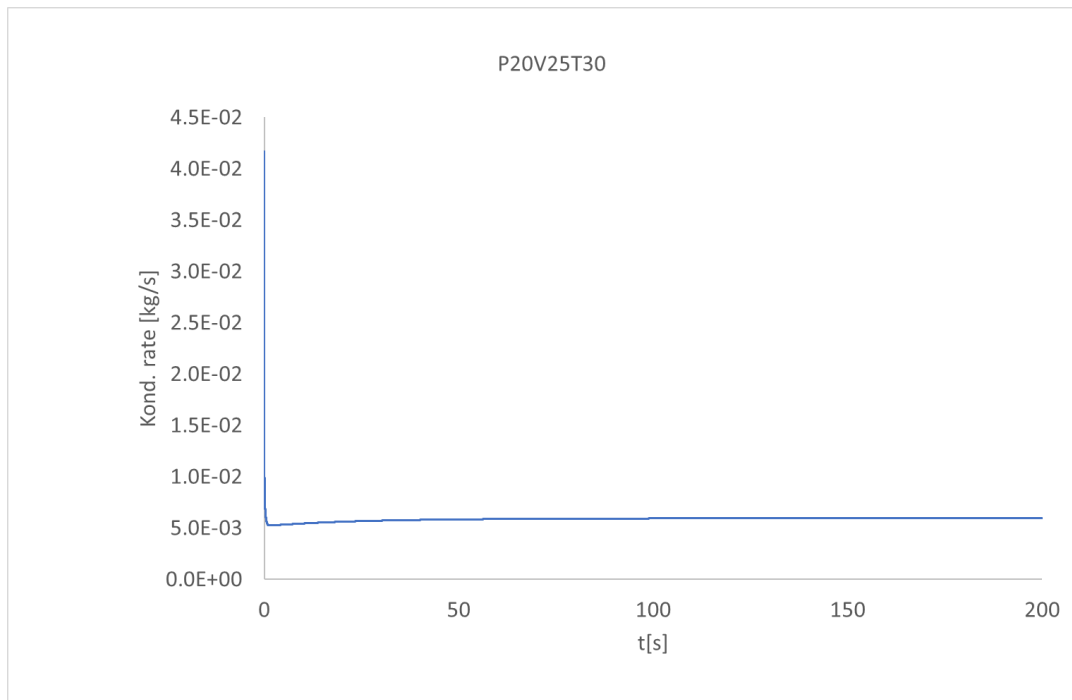


Abb. 2.133 Zeitlicher Verlauf der Wandkondensationsrate bei der containmentFOAM-Simulation unter Verwendung des feinsten CFD-Gitters

2.5.4.4 Untersuchung zum Einfluss des CFD-Gitters auf die Wandkondensationsmodellierung

Bei der Erstellung des CFD-Gitters wurde die Vereinfachung gemacht, dass an den Seitenwänden Symmetrie-Randbedingungen angenommen wurden. Deshalb wurden in dieser Richtung nur zwei Zellen berücksichtigt. Das Rechengebiet wurde am Einlass erweitert, so dass die Strömung schon vor der gekühlten Wand berechnet wird. Damit wurde verhindert, dass im Einlassbereich an der gekühlten Wand ein unrealistisches Strömungsprofil herrscht. Die Erweiterung des Rechengebiets am Auslass diente dazu, eine Rückströmung von Gas an der Randbedingung zu verhindern.

Im Folgenden wurde untersucht, wie sich die Gitterfeinheit im Gas (siehe Abb. 2.134, grüner Bereich) an der gekühlten Wand auf die berechnete Wandkondensationsrate bei den beiden OpenFOAM-Solvern auswirkt. Im Gas wurde das Gitter im Bereich der gekühlten Wand adaptiv verfeinert. Mit d wird die Dicke der ersten Gaszelle unmittelbar an der Wand bezeichnet. Es wurden Simulationen mit sechs unterschiedlich feinen Gittern durchgeführt (siehe Tab. 2.9). Dabei wurde $d = 2$ cm bis zu $d = 0,2$ mm untersucht, was im stationären Zustand mittleren y^+ -Werten von 88 bis 1,1 entspricht. Die Vernetzung in der gekühlten Wand wurde senkrecht zur Grenzfläche bei den Simulationen nicht

modifiziert. Es wurde ein äquidistantes Gitter mit einem Abstand von 1,3 mm verwendet. Die Gitterstudie wurde anhand des Versuchs P20-V25-T30 durchgeführt.

Sowohl der GRS-Solver chtMultiRegionSchmidtFOAM (mrs) als auch containmentFOAM (cont) waren in der Lage, die Kondensationsrate mit dem feinsten Gitter in guter Übereinstimmung mit dem Experiment zu berechnen (Abb. 2.135). Im Experiment wurde eine Kondensationsrate von 5,77 g/s gemessen. Der Solver mrs berechnete eine Rate von 5,84 g/s, containmentFOAM von 5,93 g/s. Mit dem etwas gröberen Gitter 2 (d = 0,5 mm) berechneten beide Solver sehr ähnliche Kondensationsraten. Bei weiterer Gittervergrößerung (Gitter Nr. 3 d = 1 mm) wurde in beiden Simulationen die Kondensationsrate etwas überschätzt (mrs: 6,07 g/s, cont: 6,46 g/s), dabei wurde mit dem Kondensationsmodell in mrs eine etwas bessere Übereinstimmung erzielt. Bei weiterer Vergrößerung des CFD-Gitters nahm die von beiden Solvoren berechnete Kondensationsrate ab. Bei Verwendung des größten Gitters (Nr. 6, d = 2 cm) berechneten beide Simulationen eine deutlich zu niedrige Kondensationsrate. Die Abweichung war bei containmentFOAM (4,67 g/s) allerdings deutlich geringer als bei chtMultiRegionSchmidtFOAM (3,53 g/s). Wegen der Implementation von verbesserten Wandfunktionen für Wandkondensation konnte containmentFOAM eine bessere Übereinstimmung bei gröberer Gitterauflösung erzielen.

Tab. 2.9 In den Simulationen verwendete CFD-Gitter

Nr.	d [m]	Anzahl der Zellen	y+ (mittel)
1	2,0e-4	194168	1,06
2	5,0e-4	124248	2,6
3	0,001	106768	5,4
4	0,002	84918	10,5
5	0,005	80548	24
6	0,02	76754	88

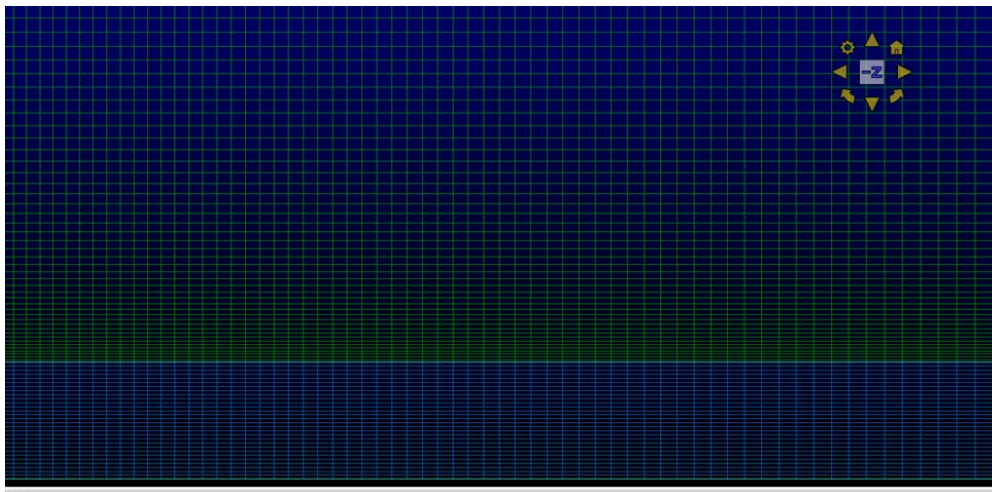
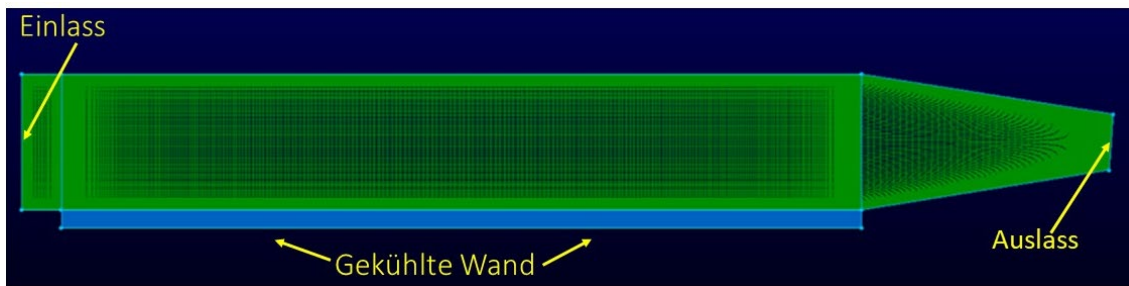


Abb. 2.134 Bei der Nachrechnung von CONAN verwendetes CFD-Gitter (Nr. 3)

Oben: gesamter Kanal, unten: Gitter in der Nähe der gekühlten Wand. Gas: grün, Wand: blau.

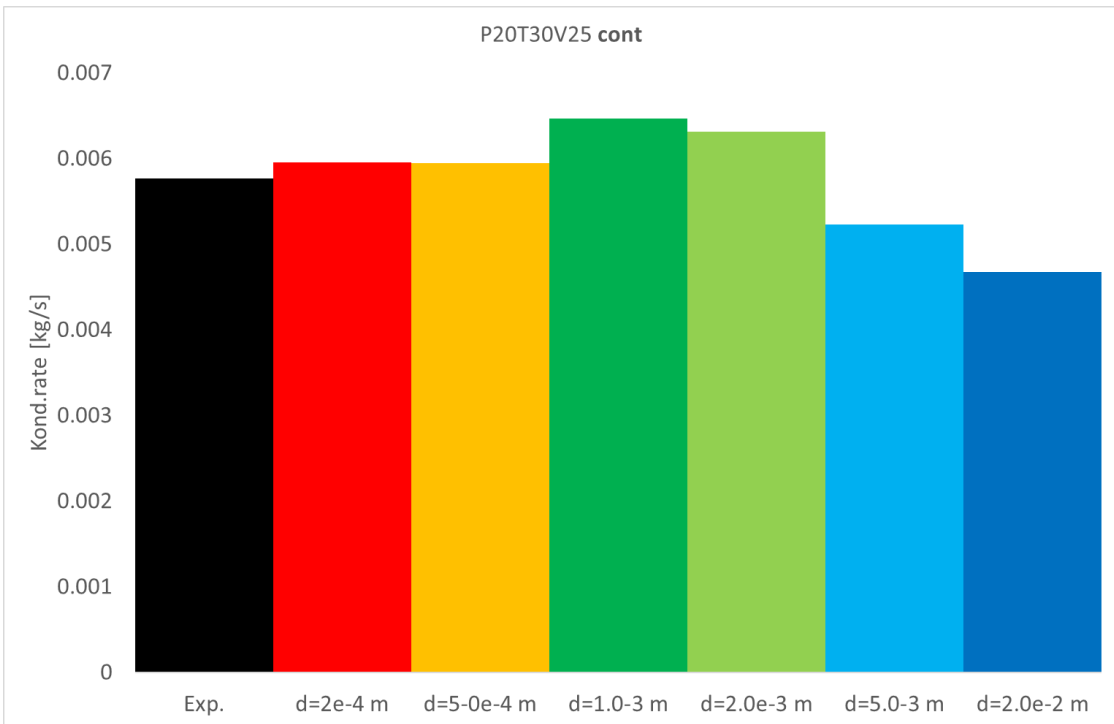
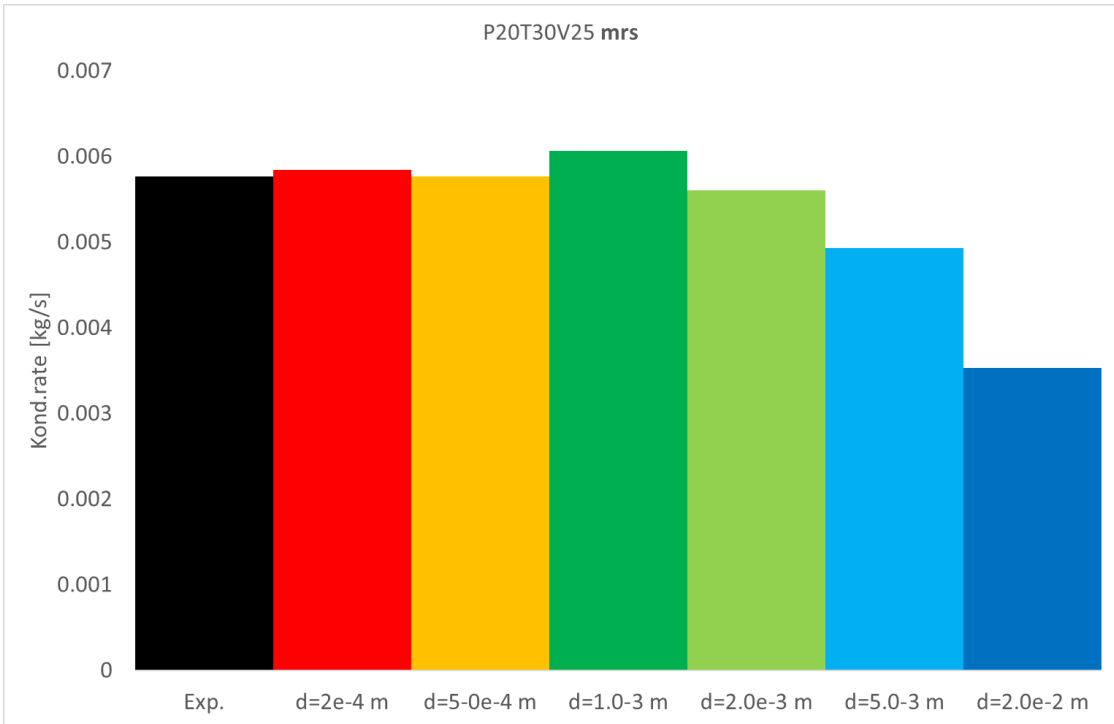


Abb. 2.135 Kondensationsrate bei Verwendung unterschiedlich feiner CFD-Gitter

Oben: Simulation mit Solver mrs, unten: Simulation mit containmentFOAM.

2.5.4.5 Nachrechnung von CONAN-Versuchen mit unterschiedlicher Wandkondensationsrate

Im Folgenden werden die Nachrechnungen von zwei weiteren CONAN-Versuchen mit dem GRS-Solver chtMultiRegionSchmidtFOAM und containmentFOAM diskutiert. Bei den Versuchen P10T30V25 und P30T30V25 wurde die eingespeiste Dampfkonzentration verringert (P10T30V25) bzw. erhöht (P30T30V25). Die genauen Einspeisebedingungen können Tab. 2.8 entnommen werden. Für die im Folgenden diskutierten Nachrechnungen wurde das feinste CFD-Gitter verwendet. Damit wurde sichergestellt, dass bei den CFD-Simulationen der räumliche Diskretisierungsfehler minimiert wurde.

Wie schon beim Versuch mit mittlerer Kondensationsrate wurde auch beim Versuch mit niedriger Kondensationsrate (P10T30V25) die experimentell gemessenen Kondensationsrate von 2,07 g/s von beiden Solvern in guter Übereinstimmung berechnet (mrs: 2.06 g/s, cont: 2.05 g/s) (siehe Abb. 2.136). Bei einer hohen Kondensationsrate wurde dagegen von beiden Solvern die gemessene Kondensationsrate von 8,86 g/s deutlich überschätzt (mrs: 10,86 g/s, cont: 11,31 g/s). Ein möglicher Grund für diese Abweichung war die Wahl der unbekanntes Einlassturbulenz. Dies wurde im folgenden Abschnitt 2.5.4.6 näher untersucht. Weitere mögliche Gründe für die schlechtere Übereinstimmung waren, dass bei hohen Kondensationsraten der Einfluss des abfließenden Kondensats nicht mehr vernachlässigt werden kann und die Annahme einer mittleren Temperatur an der Außenfläche der gekühlten Wand eine zu starke Vereinfachung darstellt. Dies wurde in Abschnitt 2.5.5 untersucht. Die hier auftretenden Effekte spielen auch bei der Modellierung von Gebäudekondensatoren eine wichtige Rolle (siehe AP 1.3, Abschnitt 2.4).

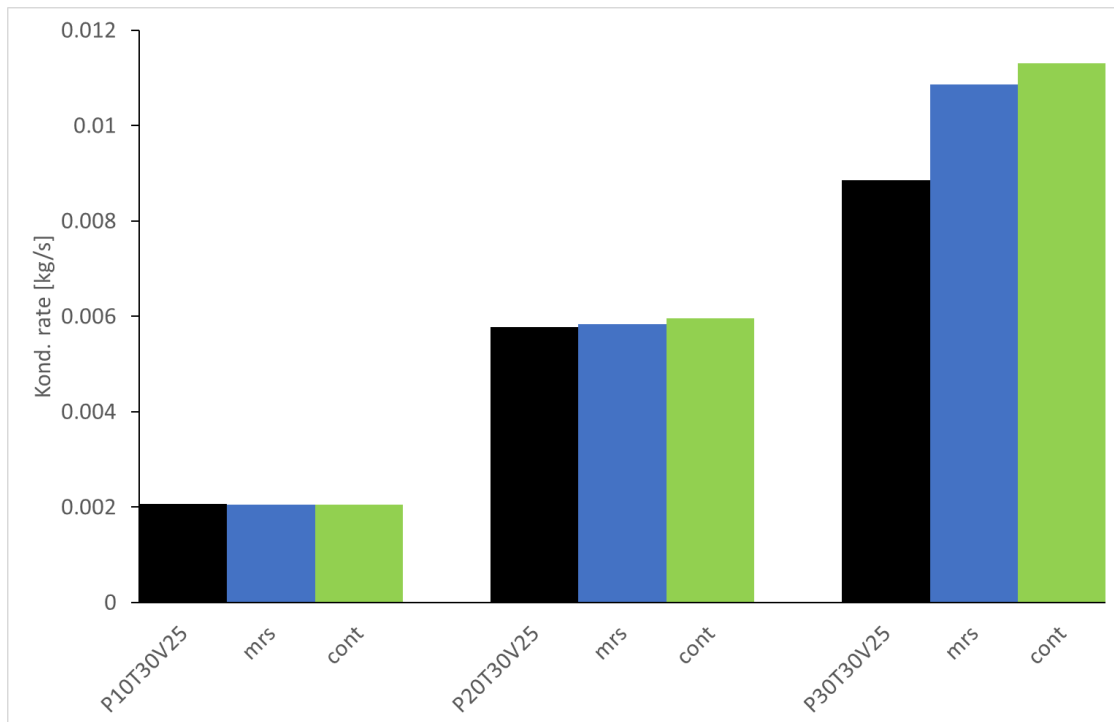


Abb. 2.136 Kondensationsrate bei Simulation unterschiedlicher CONAN-Versuche

2.5.4.6 Einfluss der Einlassturbulenz

Im Experiment wurde die Turbulenz am Kanaleingang nicht gemessen. In den bisherigen Simulationen wurde eine hohe Turbulenz am Einlass (Intensität 10 %) unterstellt. Im Folgenden wird der Einfluss dieser Annahme anhand der Experimente P20T30V25 und P30T30V25 mit containmentFOAM untersucht. Dazu wurde die Turbulenzintensität am Einlass variiert (1 %, 5 %, 10 %). Es zeigte sich bei beiden Experimenten, dass die Turbulenz am Einlass einen signifikanten Einfluss auf die Kondensationsrate hat (Abb. 2.137, Abb. 2.138). Eine höhere Turbulenz führte zu einer stärkeren Wandkondensation. Im Fall einer hohen Einlassturbulenz von 10 % wird das Experiment P20T30V25 in sehr guter Übereinstimmung mit den Versuchsdaten berechnet, bei P30T30V25 führt eine Turbulenzintensität von 10 % zu einer Überschätzung der Kondensationsrate. Bei einer geringeren Einlassturbulenz von 5 % wird das Experiment P30T30V25 in guter Übereinstimmung simuliert, bei P20T30V25 wird dagegen die Kondensation unterschätzt. Bei der niedrigsten Einlassturbulenz (1 % Intensität) wird dagegen in beiden Fällen eine deutlich zu geringe Kondensationsrate berechnet. Da in allen Versuchen die Einströmgeschwindigkeit ähnlich ist, wird davon ausgegangen, dass auch die Turbulenz am Einlass vergleichbar war. Mit einer Intensität der Turbulenz von 5 % – 10 % können die betrachteten CONAN-Experimente am besten simuliert werden.

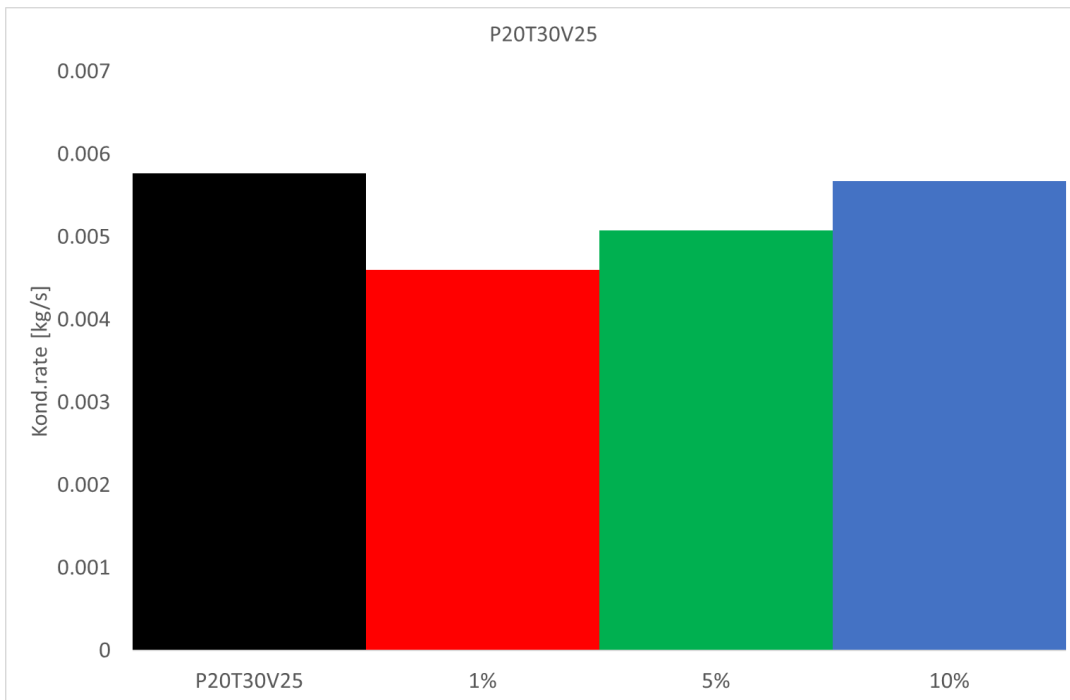


Abb. 2.137 Wandkondensationsrate bei unterschiedlicher Turbulenzintensität am Einlass für das Experiment P20T30V25

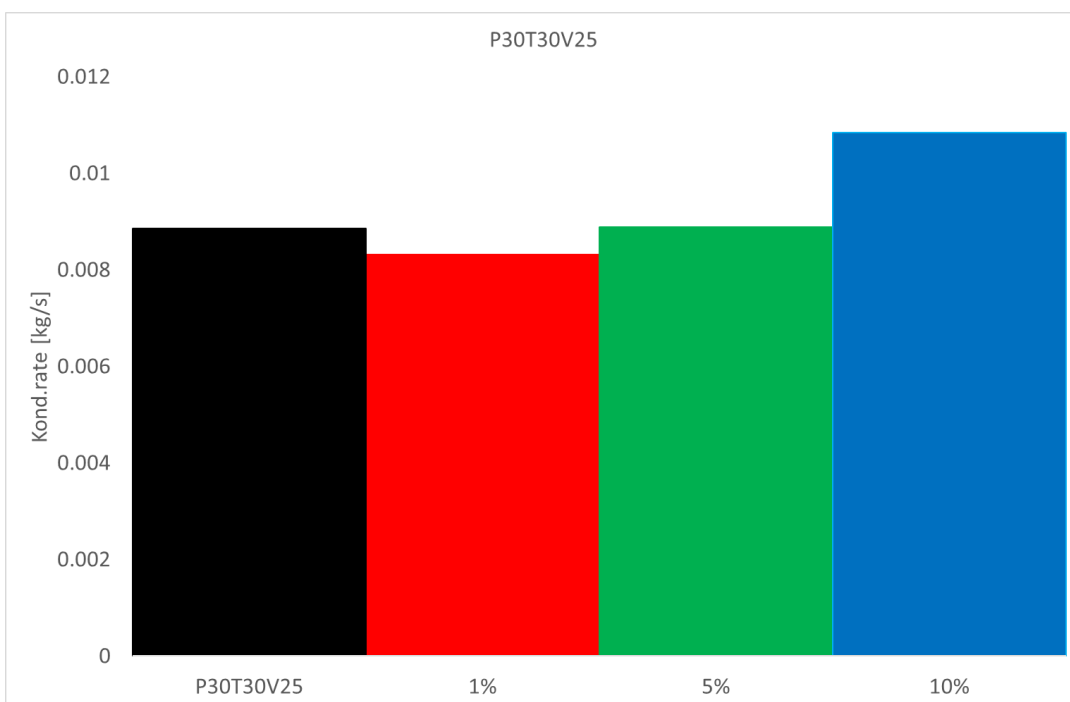


Abb. 2.138 Wandkondensationsrate bei unterschiedlicher Turbulenzintensität am Einlass für das Experiment P30T30V25

2.5.5 Simulation der CONAN-Versuche einschließlich der Kühlmittelströmung

2.5.5.1 Einleitung

Bei der Nachrechnung der CONAN-Versuche im Abschnitt 2.5.4 wurde das Kühlmittel nicht mit CFD simuliert, sondern für die Außenfläche der gekühlten Wand wurden die gemessene mittlere Temperatur des Kühlmittels und ein Wärmeübergangskoeffizient entsprechend /AMB 09/ vorgegeben. Bei höherem Dampfgehalt und damit auch höherer Kondensationsrate wurden bei den Versuchsnachrechnungen mit feiner Gitterauflösung die Kondensationsraten überschätzt, sofern die Einlassturbulenz eine Intensität von 10 % betrug. Eine mögliche Erklärung war, dass sich die Temperatur des Kühlmittels bei Kontakt mit der Kanalwand lokal deutlich erhöht und dass die Annahme einer mittleren Kühlmitteltemperatur nicht mehr hinreichend genau ist. Deshalb wurden im Folgenden Simulationen durchgeführt, bei denen die Strömung des Kühlmittels ebenfalls mit OpenFOAM simuliert wurde.

Die Simulation der CONAN-Versuche einschließlich der Kühlmittelströmung stellte eine Vorstufe zur Simulation von Gebäudekondensatoren dar. Das an einer gekühlten Oberfläche ablaufende Kondensat und der Wärmeübergang Gas/Wand und Wand/Kühlmittel entsprechen der bei einem Gebäudekondensator. Die Strömung des Wassers erfolgte aber durch eine erzwungene Konvektion mit einem konstanten Massenstrom. Dies entspricht der Vorgehensweise bei den HYMERES-2-Versuchen der H2P6-Versuchsserie. Aufgrund der einfachen Geometrie eignen sich die CONAN-Versuche gut dafür, die OpenFOAM-Modellierung der Wasserströmung und der Wärmeübertragung zu testen.

2.5.5.2 Modellierung mit OpenFOAM

An die in Abschnitt 2.5.4 verwendeten CFD-Gitter wurde noch der mit Wasser durchströmte Kühlmittelkanal angefügt (siehe Abb. 2.139). Damit sich ein realistisches Strömungsprofil einstellt, wurde der Kanal am Einlass verlängert. Damit auch die Auslassrandbedingung die Kühlung der Platte nicht beeinflusst, wurde auch beim Auslass das Rechenggebiet etwas erweitert. Auch für den Bereich des Wassers wurde ein strukturierteres Gitter verwendet. Die Größe der Zellen senkrecht zur Wand betrug 0,625 mm, damit bestand diese Region aus 8224 Zellen. In einer Gitterstudie wurde die Verfeinerung des Gitters im Bereich des Kühlmittels untersucht. Eine Simulation mit einem feineren Gitter

(0,2 mm Zellgröße senkrecht zur Wand) lieferte nahezu identische Ergebnisse (siehe Abb. 2.140, Vergleich Simulationen $d = 0,5$ mm, Kühlm. 0,625 mm und Kühlm. 0,2 mm).

Die folgenden Simulationen wurden mit containmentFOAM-9 durchgeführt. Die Modelle und numerischen Einstellungen für den Bereich des Gases und der Wand entsprechen denen aus Abschnitt 2.5.4.3. Für Wasser wurde eine temperaturabhängige Dichte angenommen:

```
thermoType
{
  type          heRhoThermo;
  equationOfState ;
  ...
}
equationOfState
{
  C (0.001278 -2.1055e-06 3.9689e-09 4.3772e-13 -2.0225e-16);
}
```

Mit diesem Ansatz ist es auch möglich, freie Konvektion aufgrund von Temperaturunterschieden zu simulieren. Die Randbedingungen für die Druckgleichung p_rgh wurden analog zum Gas gesetzt. Für den Einlass und die Wände wurde die Randbedingung

```
type          fixedFluxPressure;
gradient      uniform 0;
```

gewählt.

Es wurde auch eine Simulation mit einer konstanten Dichte durchgeführt:

```
equationOfState rhoConst;
```

In diesem Fall wurde als Randbedingung für die p_rgh -Gleichung bei Einlass und Wänden die Randbedingung *zeroGradient* verwendet. Mit diesen Einstellungen wird nahezu die gleiche Wandkondensationsrate berechnet (relative Abweichung $\sim 0,05$ %).

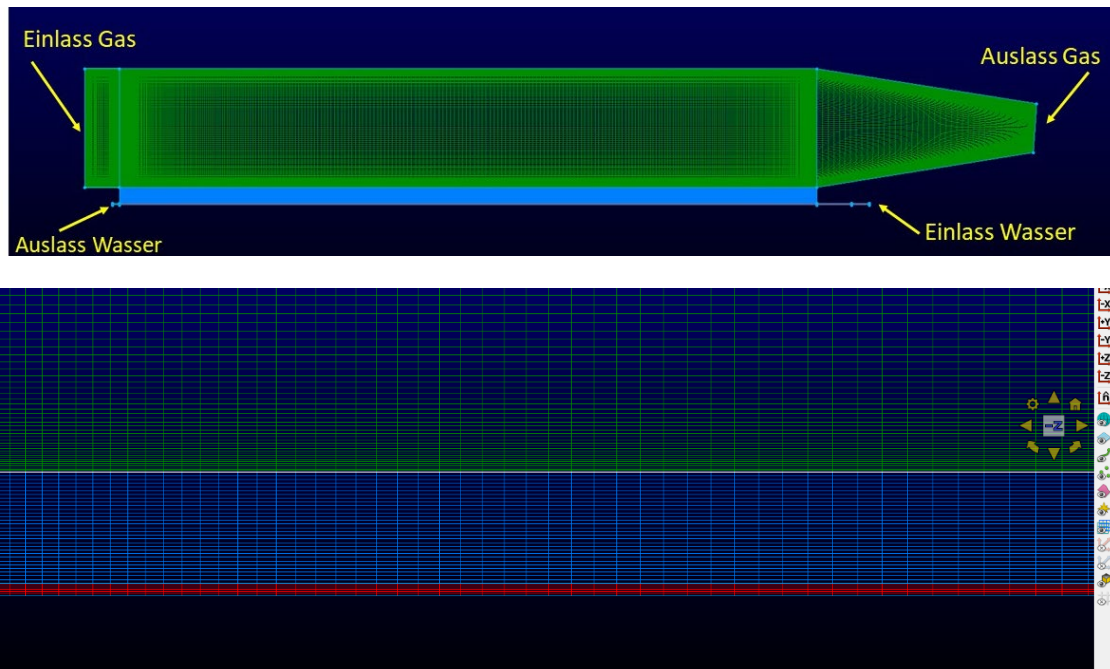


Abb. 2.139 CFD-Gitter bei Nachrechnung der CONAN-Versuche einschließlich der Strömung der Wasserkühlung

Grün: Gasraum, blau: gekühlte Wand, rot: Kühlkanal.

2.5.5.3 Vergleich mit experimentellen Daten

Der Vergleich der berechneten Kondensationsrate der Simulationen mit und ohne Berechnung der Kühlwasserströmung zeigt eine gute Übereinstimmung bei gleicher Gitterauflösung. Beim Experiment mit mittlerer Kondensationsrate P20V25T30 wurde bei Simulation der Wasserströmung für beide Gitterauflösungen eine nur geringfügig höhere Kondensationsrate berechnet (Abb. 2.140). Beim Experiment mit der höchsten Kondensationsrate wurde bei Berechnung der Wasserströmung ebenfalls eine etwas höhere Kondensationsrate berechnet, hier sind die Unterschiede etwas deutlicher ausgeprägt (Abb. 2.141). Die Berechnung der Kühlwasserströmung führte damit zu einer Vergrößerung des Abstands von Simulation und Experiment bei der vorgegebenen Einlassturbulenz von 10 %.

In Tab. 2.10 und Tab. 2.11 ist die Erwärmung des Wassers im Kühlkanal zu sehen. Die Temperatur am Kühlkanalauslass war eine mittlere Temperatur. Es zeigte sich in Abb. 2.142, dass im Kanal die Temperatur inhomogen war. An der zu kühlenden Wand war am Ende des Kanals die Wassertemperatur um etwa 4 K wärmer als an der adiabatischen Wand.

Die berechnete Erwärmung des Kühlwassers korrelierte mit der berechneten Kondensationsrate. Die Simulationen mit größerem Gitter im Gasraum berechneten eine geringere Wandkondensation, entsprechend war auch die Erwärmung des Wassers etwas geringer. Ebenso war sowohl im Experiment als auch in der Simulation die Erwärmung im Experiment P30V25T30 deutlich höher.

Die Simulation mit feinem Gitter im Gasraum ($d = 0,5$ mm) war bei P20V25T30 in der Lage, die Kondensationsrate in guter Übereinstimmung mit dem Experiment zu berechnen. Auch die Erwärmung des Wassers stimmte gut überein, allerdings wurde die Kondensationsrate leicht überschätzt, während die Temperaturerhöhung um etwa $0,2$ K unterschätzt wurde. Bei der Bewertung sind aber die Messungengenauigkeit (nicht bekannt) und auch die unterschiedliche Bestimmung der Temperatur zu berücksichtigen.

Beim Experiment mit höherer Kondensationsrate P30V25T30 wurde von den Simulationen mit feinem Gitter im Gasraum die Kondensationsrate etwas überschätzt. Entsprechend war auch die Temperaturerhöhung des Kühlwassers höher ($5,56$ K zu $4,6$ K).

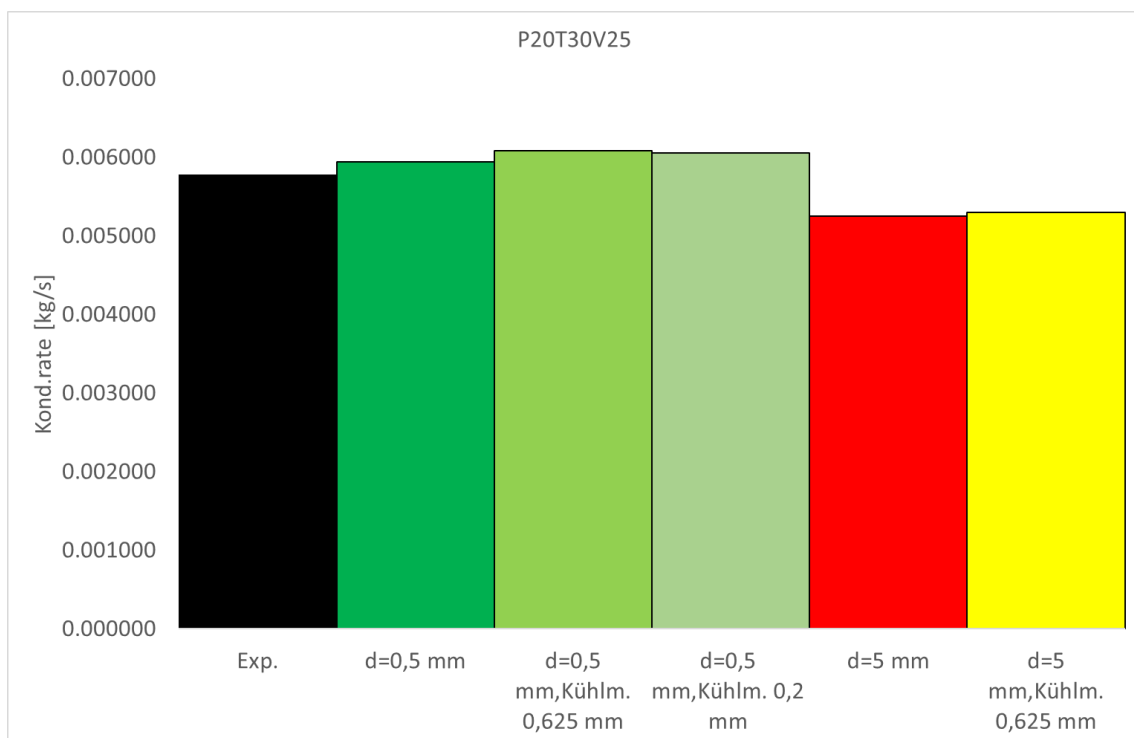


Abb. 2.140 Kondensationsrate beim Versuch P20V25T30 mit und ohne Simulation des Kühlwassers bei unterschiedlicher Gitterverfeinerung

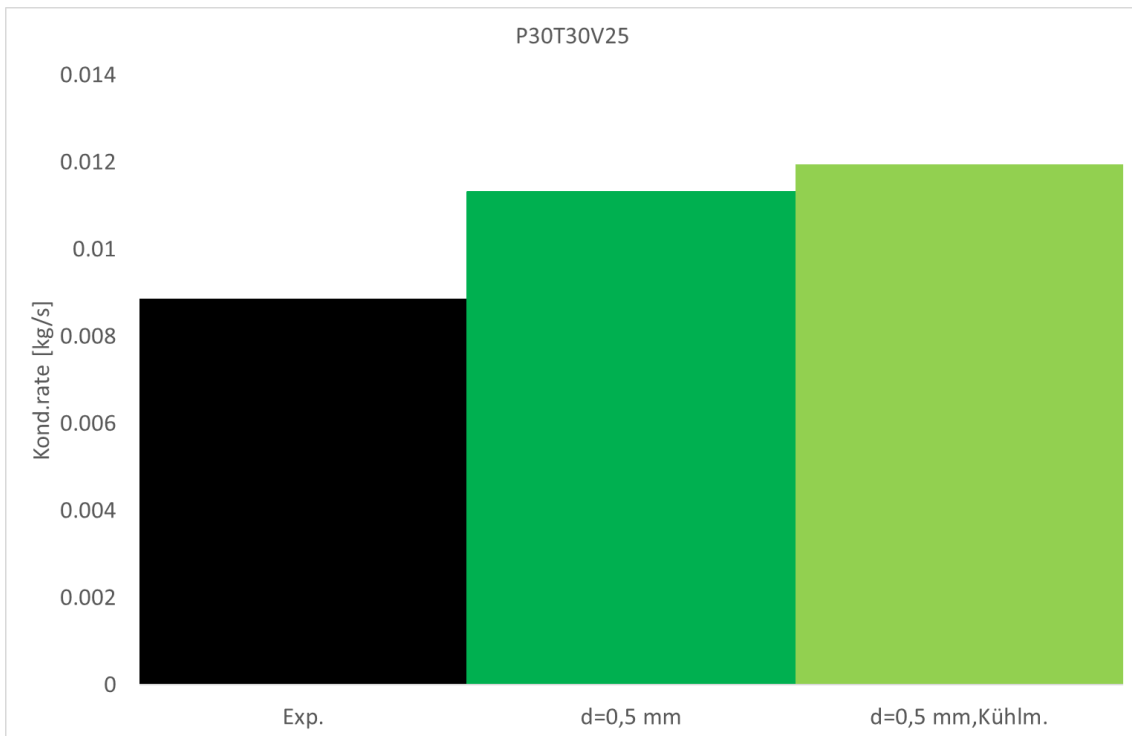


Abb. 2.141 Kondensationsrate beim Versuch P30V25T30 mit und ohne Simulation des Kühlwassers bei unterschiedlicher Gitterverfeinerung

Tab. 2.10 Wassertemperatur am Auslass ($T_{\text{Wasser,Auslass}}$) und Erwärmung des Wassers (dT_{Wasser}) im Experiment P20T30V25

P20T30V25	$T_{\text{Wasser,Auslass}}$ [K]	dT_{Wasser} [K]
Experiment	306,95	3,10
d = 0,5 mm, Kühlm.	306,74	2,89
d = 5 mm, Kühlm.	306,35	2,50

Tab. 2.11 Wassertemperatur am Auslass ($T_{\text{Wasser,Auslass}}$) und Erwärmung des Wassers (dT_{Wasser}) im Experiment P30T30V25

P30T30V25	$T_{\text{Wasser,Auslass}}$ [K]	dT_{Wasser} [K]
Experiment	312,55	4,6
d = 0,5 mm, Kühlm.	313,51	5,56

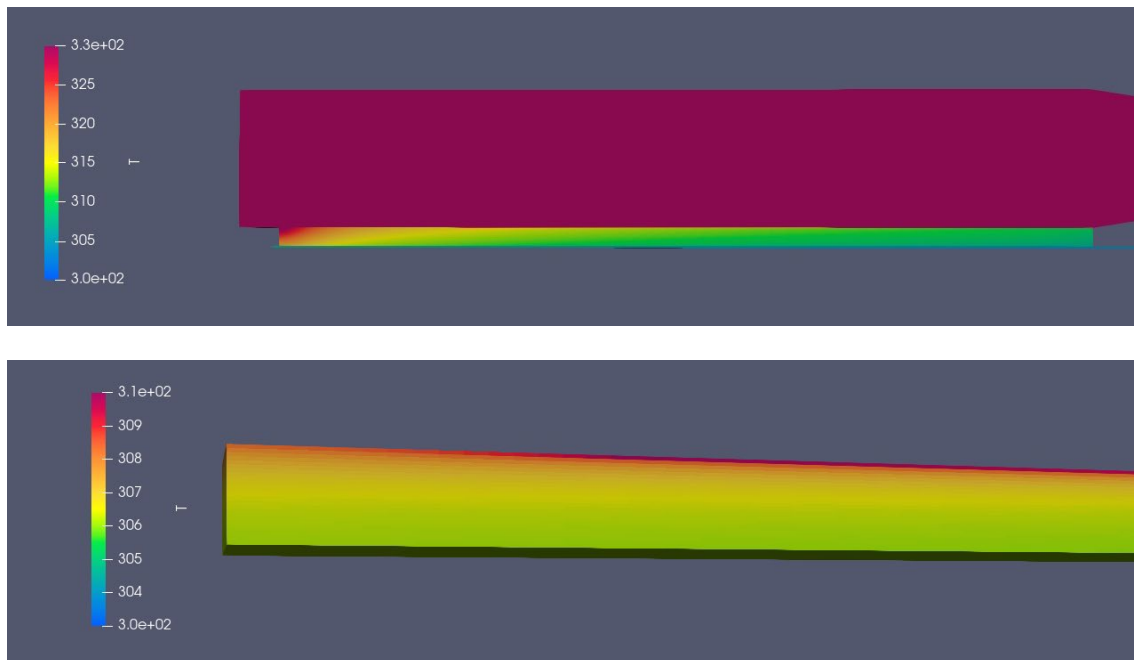


Abb. 2.142 Oben: Temperatur beim CONAN-Experiment P20V25T30, unten: Temperatur am Ende des Kühlwasserkanals

2.5.5.4 Einfluss von Volumen Kondensation

In den CONAN-Versuchen war die Wandkondensation das dominierende Phänomen, das zur Verringerung der Dampfkondensation führte. Entsprechend haben die Experimentatoren die Wandkondensation gezielt untersucht, eine möglicherweise zusätzlich auftretende Volumen Kondensation wurde nicht messtechnisch erfasst. Im Folgenden soll analytisch untersucht werden, ob und in welchem Ausmaß mit Volumen Kondensation zu rechnen ist und welche Auswirkungen die Berücksichtigung von Volumen Kondensation auf die berechnete Wandkondensationsrate hat. Es kam das in containment-FOAM-9 implementierte Volumen Kondensationsmodell zum Einsatz, dabei wurden die Modelle und Parameter aus dem Testbeispiel „Setcom2D“ verwendet:

```

solveBulkCondensation on;
bulkCondensationModel VyskocilSchmidMacek;
BrownianDiffusionModel StokesEinstein;
driftModel Stokes;
fog {
  d 25e-06; // droplet diameter
  rho 1000; // droplet density }

```

Da die Volumen Kondensation nicht messtechnisch erfasst wurde, ist eine Überprüfung der berechneten Kondensationsraten nicht möglich. Die Simulationen mit Volumen kondensationsmodell zeigten, dass die Volumen kondensationsrate um 1 – 2 Größenordnungen kleiner war als die Wandkondensationsrate (Abb. 2.144). Bei Berücksichtigung von Volumen kondensation verringerte sich die Wandkondensationsrate sehr geringfügig. (Abb. 2.143).

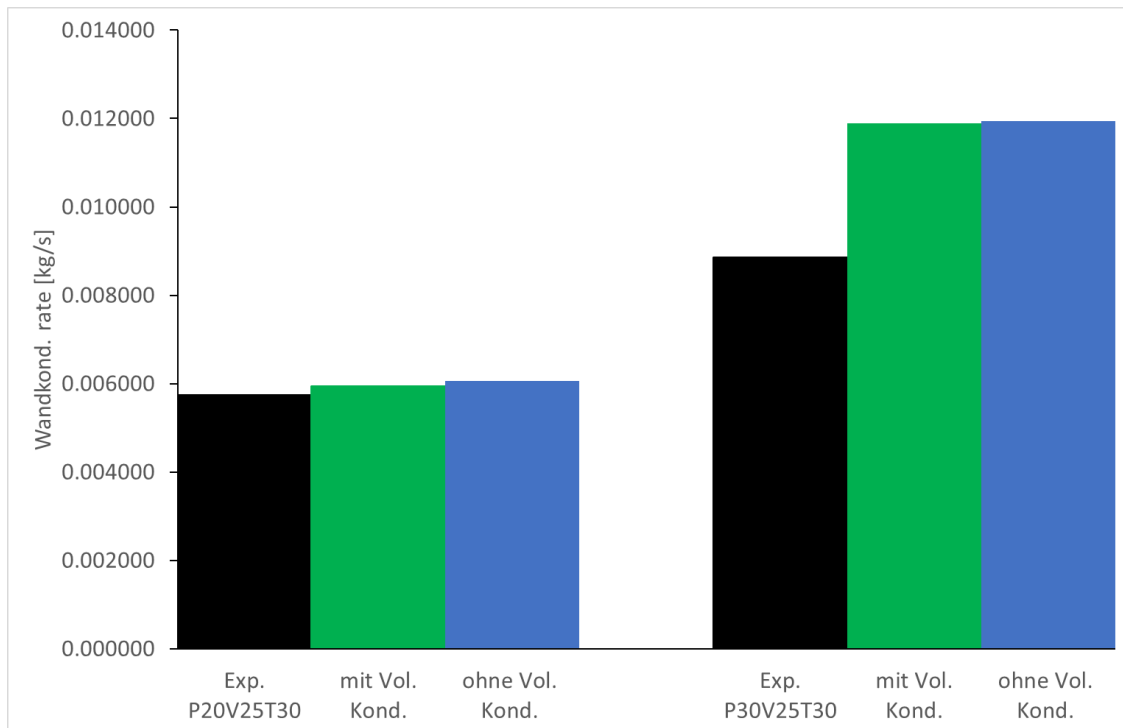


Abb. 2.143 Wandkondensationsrate mit und ohne Berücksichtigung von Volumen kondensation in den Simulationen

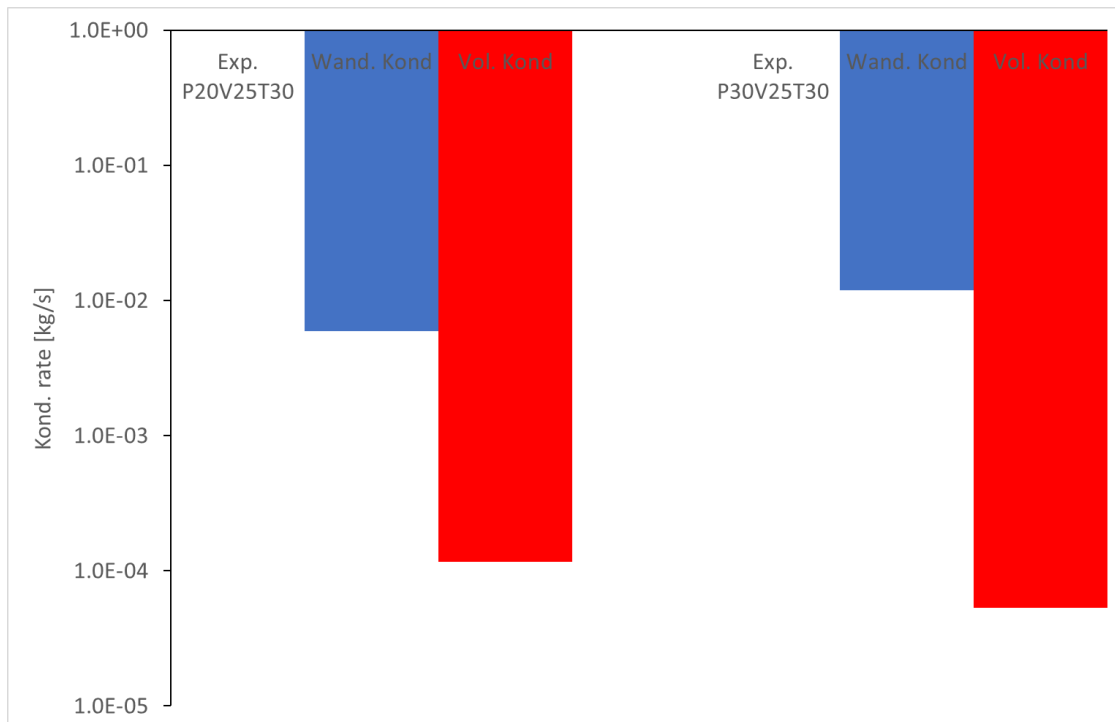


Abb. 2.144 Berechnete Wand- und Volumenkondensationsrate in den Experimenten P20T25V30 und P30V25T30

2.5.5.5 Zusammenfassung CONAN-Simulationen

Sowohl mit dem GRS-Solver chtMultiRegionSchmidtFOAM (mrs) als auch mit dem vom FZJ erstellten Solver containmentFOAM (cont) konnten die CONAN-Versuche erfolgreich nachgerechnet werden. Mit beiden Solvern konnte eine konvergente Lösung erzielt werden. Unter der Annahme einer Turbulenzintensität von 10 % am Einlass waren beide Solver in der Lage, die Wandkondensationsrate in guter Übereinstimmung mit den Experimenten P10T30V25 und P20T30V25 zu berechnen. Bei dem Versuch mit stärkster Kondensation überschätzten beide Solver die Kondensation; in diesem Fall wurden mit einer niedrigeren Einlassturbulenz von 5 % gute Ergebnisse erzielt. Das ablaufende Kondensat wurde nicht simuliert. Insbesondere bei hohen Kondensationsraten kann dies zu Abweichungen führen.

Eine Vergrößerung des CFD-Gitters hatte einen deutlichen Einfluss auf die Wandkondensation. Für eine mittlere Gitterauflösung ($d = 1$ mm, $y^+ \sim 5,4$) überschätzten beide Solver die Kondensation leicht (mrs etwas weniger stark), bei größter Gitterauflösung ($d = 2$ cm, $y^+ \sim 88$) wurde die Kondensationsrate deutlich unterschätzt. Hier war die Unterschätzung bei der containmentFOAM-Simulation aber geringer, da bei diesem Solver verbesserte Wandfunktionen verwendet werden.

Die Turbulenz am Einlass hatte einen signifikanten Einfluss auf die Wandkondensationsrate. Eine höhere Turbulenz führte zu einer stärkeren Wandkondensation. Mit einer Intensität der Turbulenz von 5 % – 10 % konnten die betrachteten CONAN-Experimente am besten simuliert werden, mit keiner Einlassturbulenz konnte aber für alle Experimente die Wandkondensationsrate genau simuliert werden.

Zwei CONAN-Versuche (P20V25T30 und P30V25T30) wurden erneut mit containmentFOAM-9 nachgerechnet. Dabei wurde auch die Strömung des Kühlwassers mit openFOAM simuliert. Mit dem Materialmodell *rPolynomial* wurden die Temperaturabhängigkeit der Dichte von Wasser berücksichtigt und geeignete Randbedingungen und numerischen Einstellungen identifiziert. Der hier getestete Ansatz konnte später auch in komplexeren Anwendungen wie der Wasserströmung in Gebäudekondensatoren (Abschnitt 2.4) zum Einsatz kommen. Es zeigte sich eine gute Übereinstimmung mit früheren Simulationen, insbesondere beim Versuch mit der geringeren Kondensationsrate (P20V25T30). Tendenziell führte die Simulation der Kühlmittelströmung zu etwas höheren Kondensationsraten als die Modellierung über Wärmeübergangskorrelationen, wie sie von den Experimentatoren vorgeschlagen wurde.

Erwartungsgemäß zeigten Simulationen bei Berücksichtigung von Volumenkondensation, dass deren Rate um 1 – 2 Größenordnungen kleiner war als die der Wandkondensation. Bei Berücksichtigung von Volumenkondensation verringerte sich die Wandkondensation sehr geringfügig.

2.5.6 Nachrechnung des Panda 4bis Experiments

2.5.6.1 Einleitung

Der Vergleich von containmentFOAM (cont) mit dem GRS-Solver chtMultiRegionSchmidtFOAM (mrs) erfolgte auch anhand des Panda-4bis-Experiments. Der Fokus des Vergleichs lag bei diesem Versuch auf den Kondensationsmodellen. Es wurden drei Simulationen (cont, mrs, CFX) miteinander verglichen, bei denen Volumenkondensation vernachlässigt wurde. In einer Variationsrechnung mit containmentFOAM (cont Vol.) wurde Volumenkondensation berücksichtigt. Bei der Simulation mit mrs wurde auf die Rechnung aus RS1562 /SCH 22b/ zurückgegriffen. Alle OpenFOAM-Simulationen wurden mit der Version 6 durchgeführt. Die CFX-Simulation wurde im Rahmen der Untersuchung zum Einfluss unterschiedlicher Wandfunktionen in RS1525 /SCH 17/

durchgeführt. Bei der hier verwendeten Rechnung kamen die Standardwandfunktionen aus CFX zu Einsatz.

2.5.6.2 Beschreibung des Experimentes

In Abb. 2.145 ist der Aufbau des Panda-4bis-Experimentes /ZBO 06/ schematisch dargestellt. Das Experiment bestand aus zwei Behältern, die über ein gekrümmtes Rohr (110°) miteinander verbunden sind. Am Anfang waren beide Behälter mit Luft gefüllt, sie hatten einen Druck von 1,3 bar und eine Gastemperatur von 76 °C. Der Druck wurde über ein Venting-Ventil im 2. Behälter (DW2) konstant gehalten. Über ein horizontales Rohr wurde in den 1. Behälter (DW1) Dampf eingespeist (107,8 °C / 54,16 g/s). Die Dauer der Einspeisung betrug 7200 s. Die Dampfkonzentration und die Temperaturen wurden an mehreren Stellen im Behälter gemessen. Weitere Details zum Experiment finden sich in /ZBO 06/.

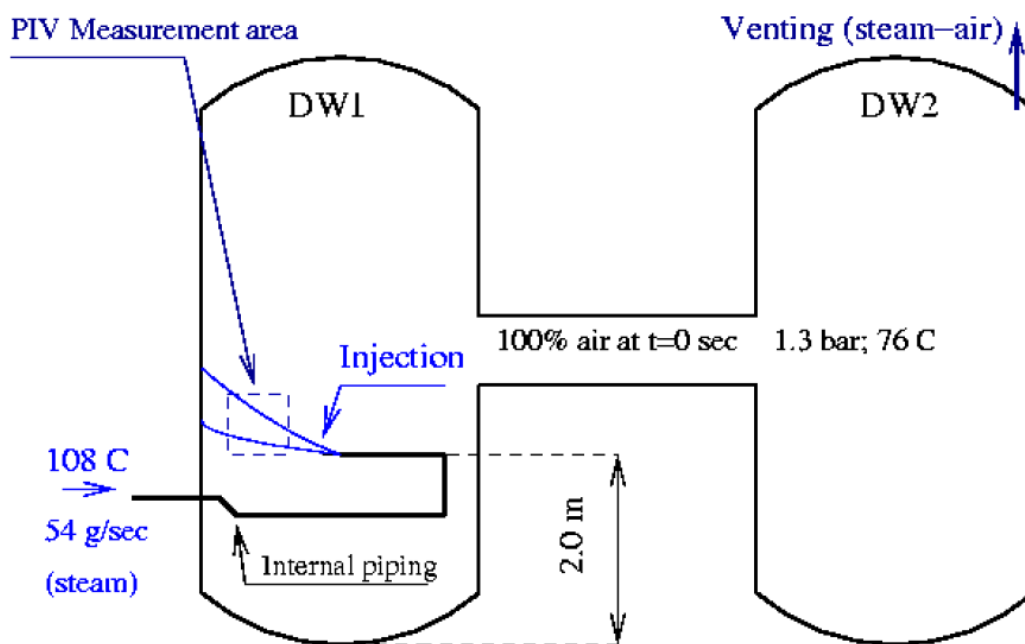


Abb. 2.145 Darstellung des Experimentes Panda 4bis /ZBO 06/

2.5.6.3 Setup der Simulationen

Der Versuch wurde u. a. mit dem Solver containmentFOAM basierend auf OpenFOAM-6 nachgerechnet. Für die Turbulenz wurde das cfkOmegaSST-Modell einschließlich Auftriebs-Turbulenzmodell SGDH verwendet. Dabei handelt es sich um eine erweiterte Version des k- ω -SST-Turbulenzmodells. Die Strahlung wurde mit dem P1-Modell berechnet. Die Absorptionskonstante von Dampf betrug $10 \text{ m}^{-1} \text{ bar}^{-1}$, für Luft wurde $0,1 \text{ m}^{-1} \text{ bar}^{-1}$

gewählt. In den containmentFOAM-Simulationen wurde das Wilke-Mischungsmodell gewählt und es wurden temperaturabhängige Materialeigenschaften angenommen.

Das containmentFOAM-Wandkondensationsmodell, welches mit diesem Versuch validiert werden sollte, wurde bei dieser Berechnung wie folgt verwendet:

```
velocityScale    blendedUStar;  
DtWallFunction  DtKader;  
Sct_wall        0,7;
```

In /KEL 21b/ ist eine detaillierte Beschreibung des Wandkondensationsmodell zu finden. In der containmentFOAM-Simulation cont Vol. war das Volumenkondensationsmodell aktiviert, bei den übrigen Simulationen wurde Volumenkondensation vernachlässigt:

```
solveBulkCondensation on;  
bulkCondensationModel VyskocilSchmidMacek;  
BrownianDiffusionModel StokesEinstein;
```

```
constantBrownianCoeffs  
{  
    D 3e-10; //diffusion coefficient;  
}  
driftModel Stokes;  
fog  
{  
    d 25e-06; // droplet diameter  
    rho 1000; // droplet density  
}
```

In der mrs-Simulation wurden ähnliche physikalische Modelle verwendet. Die Turbulenz wurde mit dem buoyantkOmegaSST-Modell berechnet; auch bei dieser Simulation wurde die Wärmestrahlung mit dem P1-Modell berechnet. Im Gegensatz zu den containmentFOAM-Simulationen wurde bei der mrs-Simulation die Mischung mit dem OpenFOAM-Standardmodell multiComponentMixture berechnet. Die Wandkondensation wurde in dieser Rechnung mit dem GRS-Wandkondensationsmodell berechnet. Weitere Details zu der Simulation mit dem Solver mrs können dem Abschlussbericht /SCH 22b/ entnommen werden. Bei der CFX-Simulation kamen die Standardmodelle zum Einsatz.

Die Turbulenz wird mit dem SST-Modell einschließlich buoyancy-Terme berechnet. Bei der Wärmestrahlung wurde das Discrete-Transfer-Modell genutzt. Details können dem Abschlussbericht /SCH 17/ entnommen werden.

Alle vier Simulationen wurden mit demselben CFD-Gitter durchgeführt. Das Gitter wurde mit Pointwise erstellt und hatte insgesamt 958.278 strukturierte Elemente. Die Dicke der 1. Gaszelle an der Wand betrug ca. 2 cm. Gegenüber der Geometrie im Experiment wurden geometrische Vereinfachungen vorgenommen; so wurden die Behälterdecken vereinfacht abgebildet. Das Gitter ist in Abb. 2.146 dargestellt.

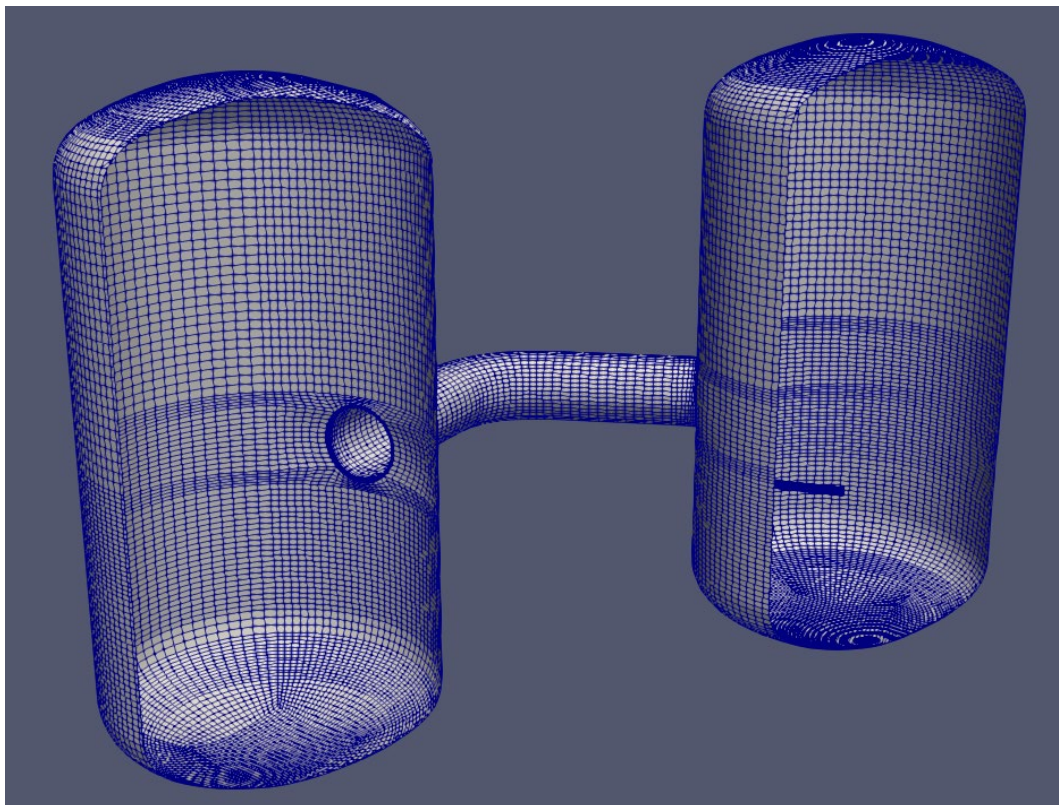


Abb. 2.146 Verwendete CFD-Gitter (rechts: Behälter 1 mit Einspeiserohr, links: Behälter 2)

2.5.6.4 Vergleich der Simulationsergebnisse

Die containmentFOAM-Simulationen konnten ohne Konvergenzprobleme durchgeführt werden. Es wurde ein adaptiver Zeitschritt gewählt, der über die maximale Courant-Zahl gesteuert wurde. Zu Beginn der Simulation wurde eine maximale Courant-Zahl von 0,2 vorgegeben, die schrittweise erhöht werden konnte. Nach wenigen Sekunden konnte die maximale Courant-Zahl auf 20 erhöht werden, was einem Zeitschritt von $\sim 0,01$ s – 0,02 s entsprach.

Die Simulation mit dem Solver mrs konvergierte bis ca. 350 s gut. Danach konnte keine konvergente Lösung mehr gefunden werden – außer der Zeitschritt wurde auf sehr kleine Werte ($\sim 1.0e-6$ s) reduziert, was aber nicht praktikabel war. Wegen der fehlenden Konvergenz sind die erzielten Ergebnisse mit Unsicherheiten behaftet. Zudem führten die Konvergenzprobleme dazu, dass die Rechenzeit um ein Vielfaches höher als bei den containmentFOAM-Simulationen war. Deshalb wurde auch keine Variationsrechnung zum Einfluss des Volumenkondensationsmodells durchgeführt.

Kondensationsrate

Im Experiment wurde die Kondensation nicht gemessen, deshalb erfolgt für diese Größe lediglich ein Code-zu-Code-Vergleich. Alle vier Simulationen berechneten einen ähnlichen Verlauf der Wandkondensationsrate (Abb. 2.147). Die containmentFOAM-Simulationen unterschieden sich nur geringfügig voneinander. Dies lässt sich darauf zurückführen, dass die integrale Volumenkondensation um mehr als eine Größenordnung kleiner war als die integrale Wandkondensationsrate (Abb. 2.148). Die containmentFOAM-Simulationen stimmten hinsichtlich der Wandkondensationsrate auch gut mit ANSYS CFX überein. Lediglich von 650 s – 1200 s ist die mit containmentFOAM berechnete Wandkondensationsrate etwas höher. Die Simulation mit dem OpenFOAM-Solver mrs zeigte von den anderen Simulationen die größte Abweichung. Bis ca. 1200 s war die von mrs berechnete Wandkondensationsrate höher. Danach stimmte bis ca. 3300 s die mit mrs berechnete Wandkondensationsrate gut mit den übrigen Simulationen überein, allerdings waren die mit mrs berechneten Oszillationen stärker. Ab ca. 3300 s sank die mit mrs berechnete Wandkondensationsrate stärker ab. Bei Betrachtung der integralen Volumenkondensationsrate (Abb. 2.149) ist zu berücksichtigen, dass neben Volumenkondensation auch die Verdunstung von Nebeltröpfchen auftreten kann, sobald diese in Gebiete mit hoher Temperatur und niedriger Dampfkonzentration gelangen. Dies erfolgte zum einen durch turbulenten Transport des Nebels mit der Strömung als auch durch die Sedimentation der Tröpfchen.

Dampfkonzentration

Der Dampfgehalt wurde im Behälter mit der Dampfeinspeisung DW1 von allen Simulationen ähnlich hoch berechnet (Abb. 2.150, Abb. 2.151). Der berechnete und der gemessene Dampf-Molenbruch stimmte gut mit dem Experiment überein. Bei der Simulation mit dem Solver mrs war der Dampf-Molenbruch in den ersten 2500 s am Messpunkt DW1B20 und auch bei DW1R20 etwas kleiner als in den übrigen Simulationen und

stimmte damit noch besser mit dem Experiment überein. Die Berücksichtigung von Volumen Kondensation/Verdunstung hatte in DW1 keinen signifikanten Einfluss auf den Dampf-Molenbruch. Die Werte für die Simulationen cont und cont Vol. unterscheiden sich kaum. Im 2. Behälter wurden größere Abweichungen zwischen Experiment und Simulation beobachtet. An der Messstelle DW2 B20 (Abb. 2.152), die im oberen Bereich des zweiten Behälters lag, verlangsamte sich der Anstieg des Dampf-Molenbruchs von 1000 s bis 2200 s signifikant. Dieses Verhalten wurde von keiner Simulation vorhergesagt, alle Simulationen berechneten deutlich höhere Dampf-Molenbrüche. Es wird davon ausgegangen, dass in den Simulationen nicht alle relevanten Prozesse und Randbedingungen ausreichend genau abgebildet wurden. So ist unklar, ob die Annahme gleicher initialer Wandtemperaturen und gleicher Wärmeverluste ausreichend genau war oder ob es Bereiche gab, in denen kältere Wandbereiche bzw. höhere Wärmeverluste zu einer stärkeren Wandkondensation führten und damit die Dampfkonzentration verringerten. Am Messpunkt DW2 R20 (Abb. 2.153) im unteren Bereich des 2. Behälters zeigte sich eine etwas andere Vermischung bei der CFX-Simulation gegenüber den OpenFOAM-Simulationen mrs und cont. CFX berechnete an diesem Punkt einen sehr kleinen Dampf-Molenbruch, während bei den OpenFOAM-Simulationen der Dampfgehalt höher war und damit besser zum Experiment passte. Er war verglichen mit dem Experiment aber immer noch deutlich zu niedrig. Bei Berücksichtigung der Volumen Kondensation/Verdunstung (cont Vol.) konnte dagegen der Dampf-Molenbruch in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden. Ab ca. 2500 s verdunsteten die in diesen Bereich transportierten Nebeltröpfchen. Dies erhöhte den Dampf-Molenbruch, wobei gleichzeitig die Temperatur verringert wurde.

Temperatur

Durch die Berücksichtigung der Volumen Kondensation (cont Vol.) wurde die Übereinstimmung mit dem Experiment auch an Messtellen im DW1 verbessert. Bis ca. 3000 s berechneten alle Simulationen ohne Volumen Kondensationsmodell (CFX, mrs, cont) an der Messstelle DW1 C20 (Abb. 2.154) eine etwas zu niedrige Temperatur. Die Berücksichtigung von Volumen Kondensation führte zu einer leichten Temperaturerhöhung und zu einer sehr guten Übereinstimmung mit dem Experiment. Dasselbe galt auch für die Temperatur im oberen Teil des 2. Behälters DW2. Im unteren Bereich der beiden Behälter DW1/DW2 R20 (Abb. 2.155, Abb. 2.157) berechnete CFX etwas unterschiedliche Temperaturen als OpenFOAM. In DW1 R20 war die Temperatur bei der CFX-Simulation etwas geringer als bei den OpenFOAM-Simulationen. Sie stimmte damit etwas besser mit dem Experiment überein. An diesem Punkt spielte Volumen Kondensation

sation/Verdunstung eine vernachlässigbare Rolle, die Simulationsergebnisse für cont und cont Vol. waren sehr ähnlich. Am Messpunkt DW2 R20 berechnete CFX einen deutlich stärkeren Temperaturanstieg als die OpenFOAM-Simulationen cont und mrs, die einen ähnlich leichten Temperaturanstieg berechneten. Erst bei Berücksichtigung von Volumencondensation/Verdunstung in cont Vol. konnte der Abfall der Temperatur im Experiment berechnet werden.

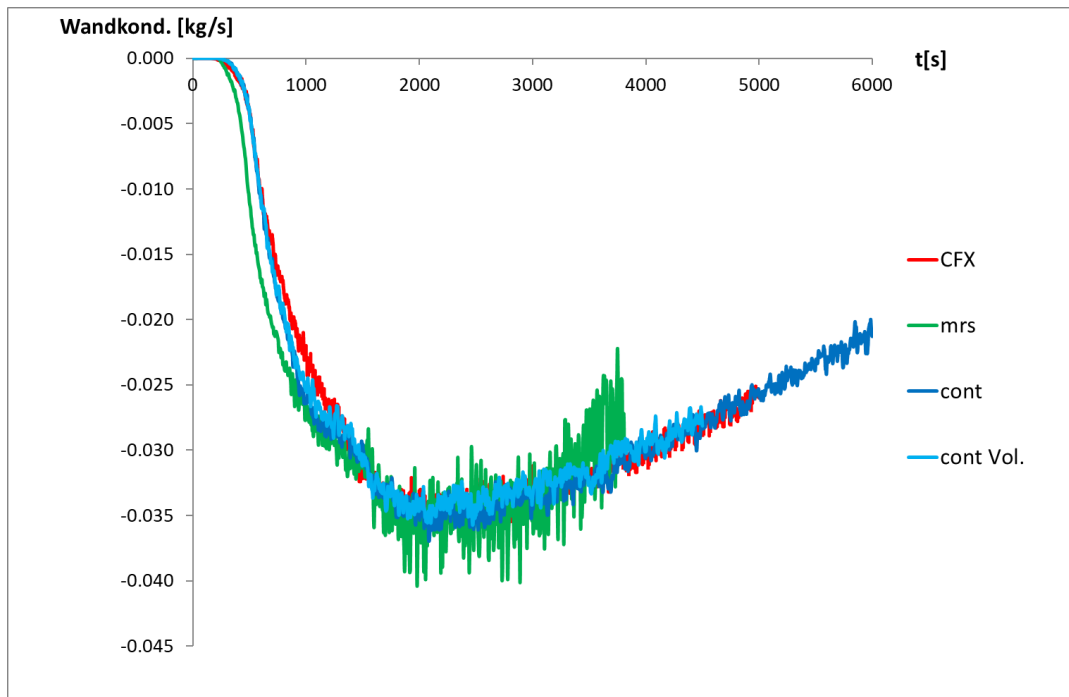


Abb. 2.147 Integrale Wandkondensationsrate bei den Simulationen CFX, mrs, cont und cont Vol.

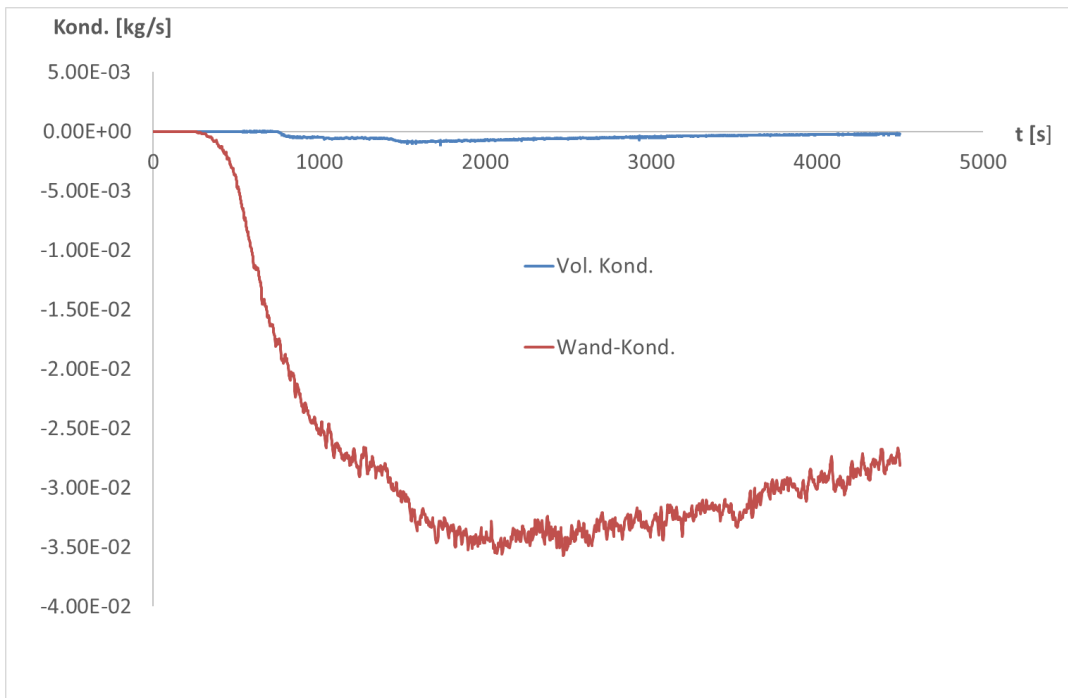


Abb. 2.148 Integrale Wand- und Volumenkondensationsrate bei der Simulation cont Vol.

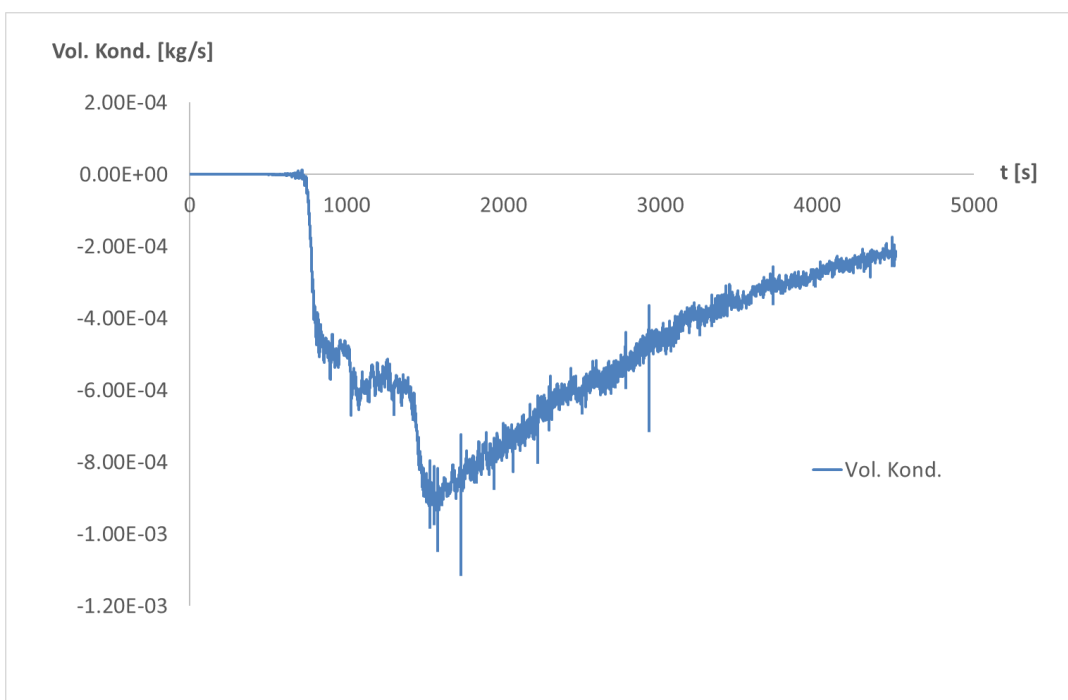


Abb. 2.149 Integrale Volumenkondensationsrate bei der Simulation cont Vol.

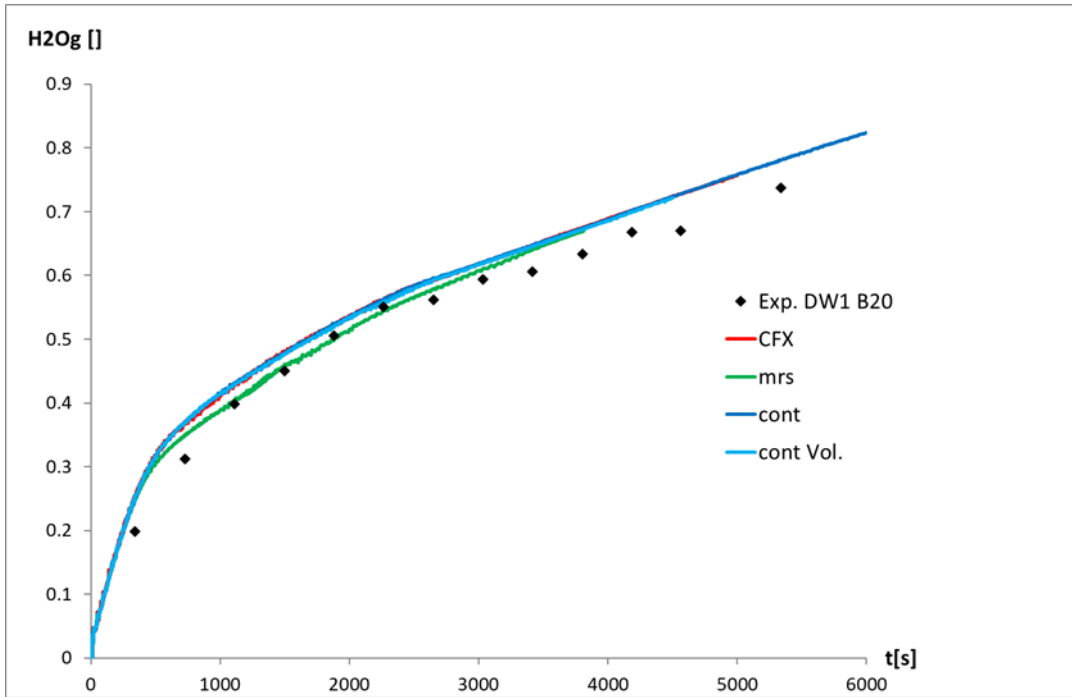


Abb. 2.150 Dampf-Molenbruch an der Messstelle B20 (Behältermitte, 7,48 m Höhe) im Behälter DW1

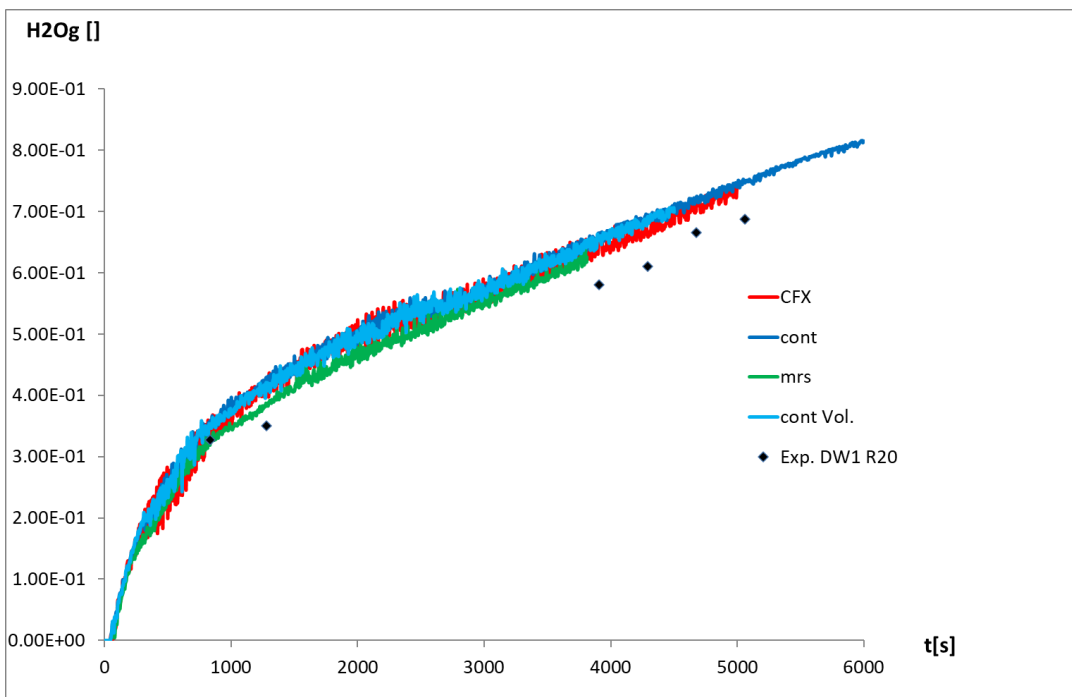


Abb. 2.151 Dampf-Molenbruch an der Messstelle R20 (Behältermitte, 1,73 m Höhe) im Behälter DW1

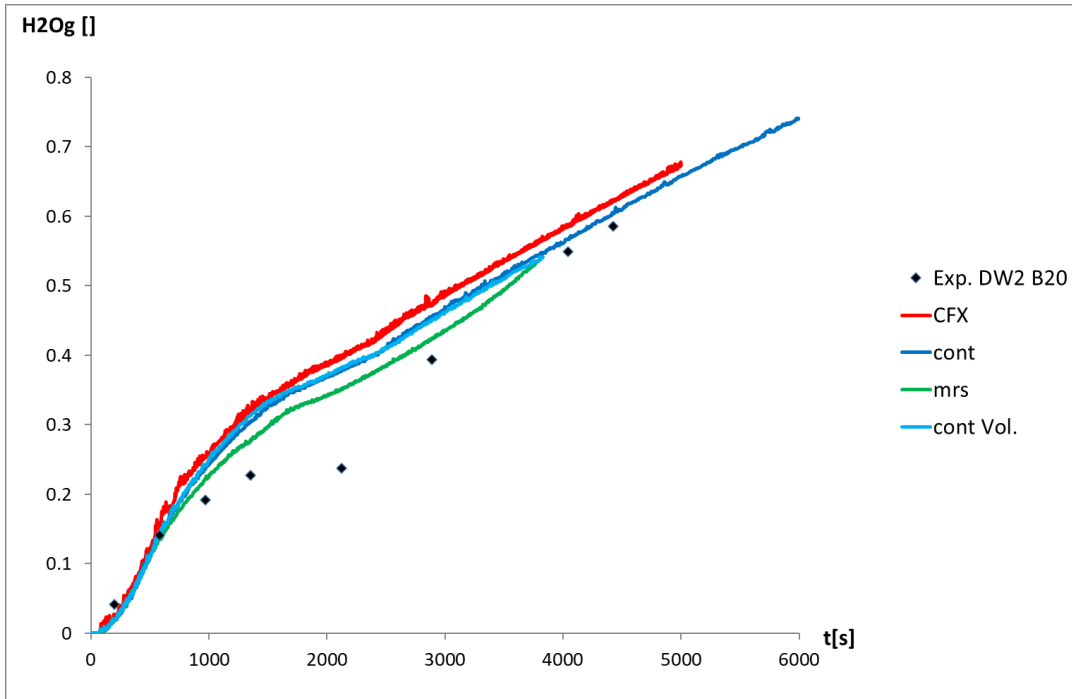


Abb. 2.152 Dampf-Molenbruch an der Messstelle B20 (Behältermitte, 7,48 m Höhe) im Behälter DW2

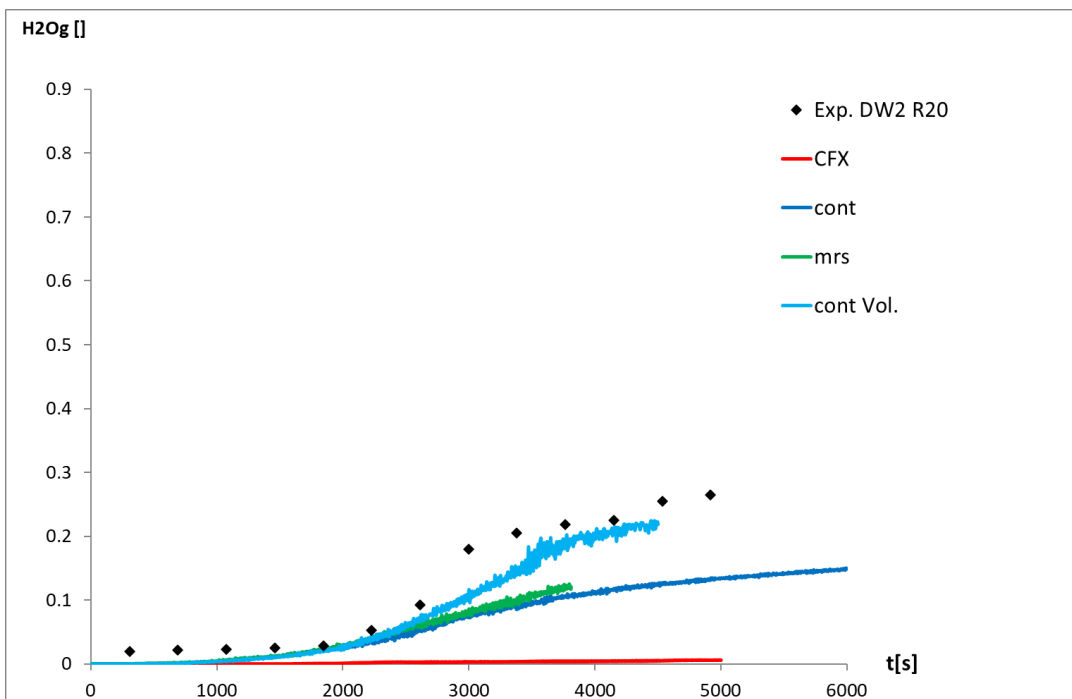


Abb. 2.153 Dampf-Molenbruch an der Messstelle R20 (Behältermitte, 1,73 m Höhe) im Behälter DW2

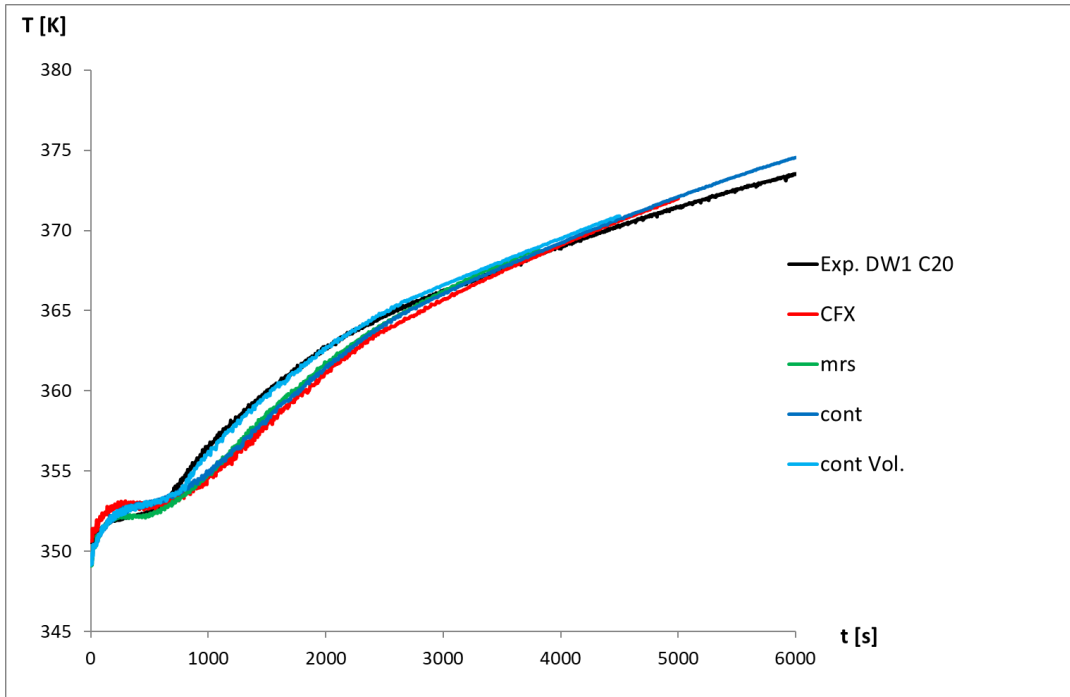


Abb. 2.154 Temperatur an der Messstelle C20 (Behältermitte, 6,93 m Höhe) im Behälter DW1

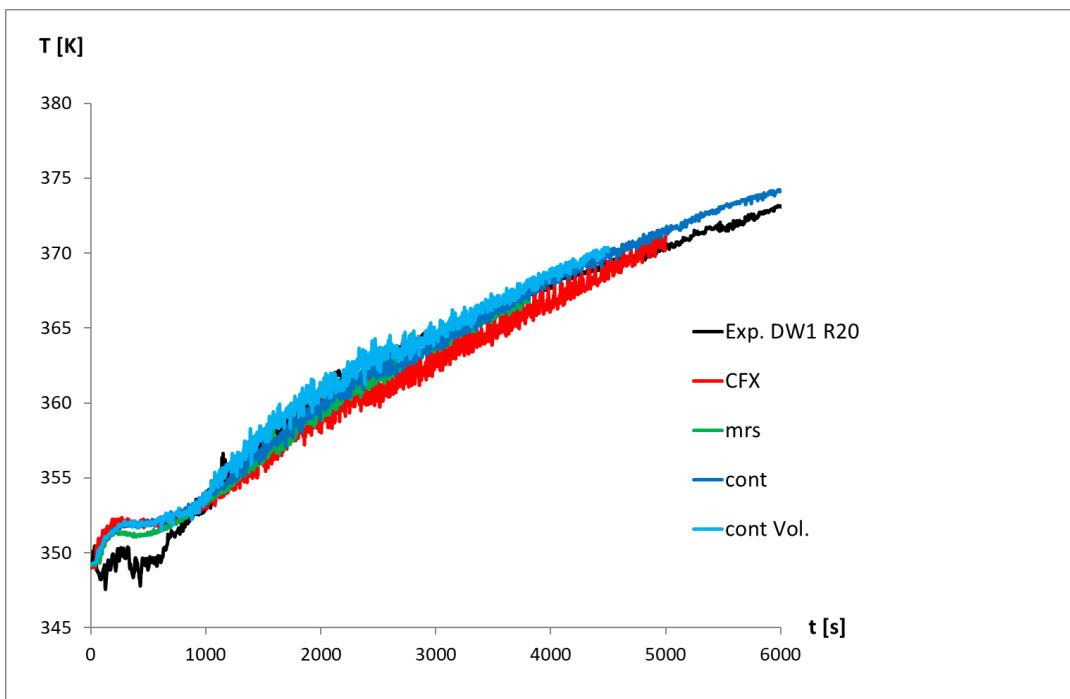


Abb. 2.155 Temperatur an der Messstelle R20 (Behältermitte, 1,73 m Höhe) im Behälter DW1

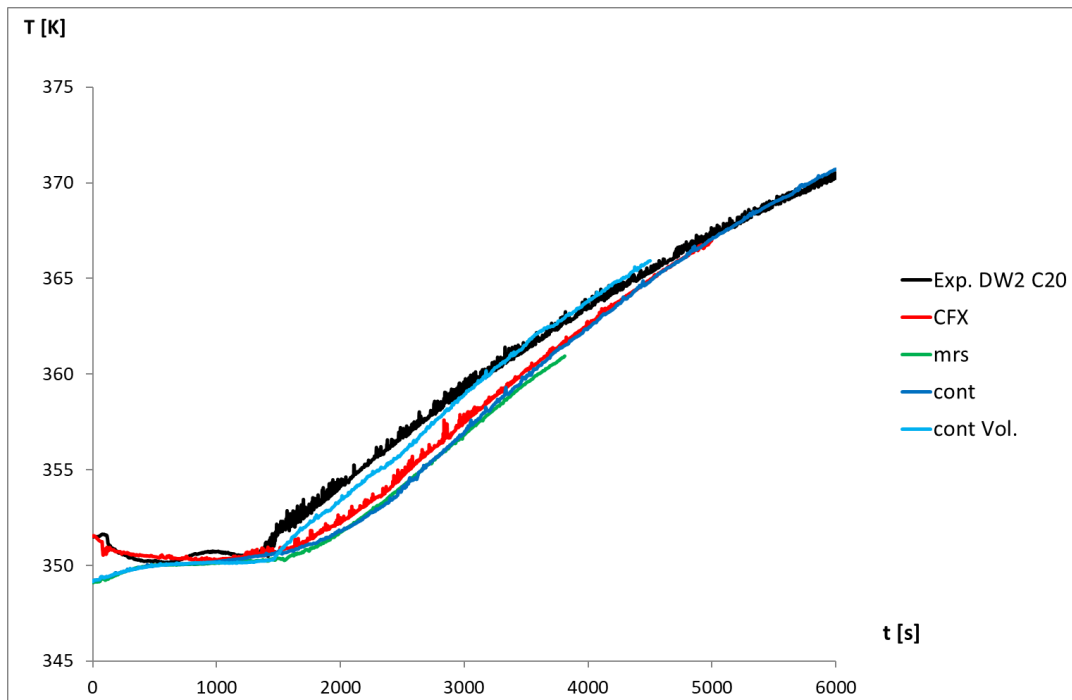


Abb. 2.156 Temperatur an der Messstelle C20 (Behältermitte, 6,93 m Höhe) im Behälter DW2

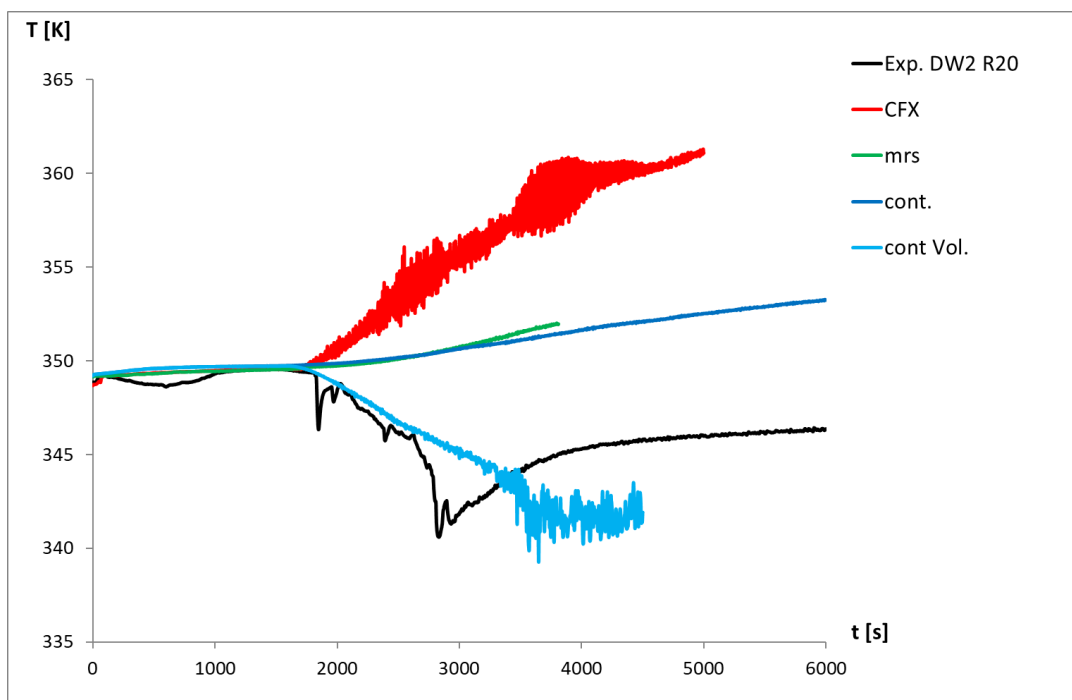


Abb. 2.157 Temperatur an der Messstelle R20 (Behältermitte, 1,73m Höhe) im Behälter DW2

2.5.6.5 Zusammenfassung Panda 4bis

Durch Nachrechnung des Panda-4bis-Experiments konnte der OpenFOAM-Solver `containmentFOAM` erfolgreich validiert werden. Der Fokus der Validierung lag auf der Kondensationsmodellierung. Eine `containmentFOAM`-Simulation wurde mit dem Wandkondensationsmodell und eine andere mit dem Wand- und dem Volumenkondensationsmodell durchgeführt. Beide Simulationen zeigten eine gute Konvergenz; im Gegensatz zur Simulation mit dem OpenFOAM-Solver `chtMultiRegionSchmidtFOAM`. Die fehlende Konvergenz ist auch ein Grund dafür, dass die Rechnung mit diesem Solver um ein Vielfaches länger gedauert hat als die Simulationen mit `containmentFOAM`, die auf 48 CPUs etwa 1 Woche benötigt hatten. Die beiden Simulationen ohne Volumenkondensationsmodell berechneten einen sehr ähnlichen Temperaturverlauf und auch die Dampfkonzentrationen wichen nur wenig voneinander ab. Die kleinen Abweichungen lassen sich durch die etwas schwächere Wandkondensation bei `containmentFOAM` erklären, die einer entsprechenden CFX-Simulation entspricht. Im ersten Behälter wurde bei beiden Simulationen meist eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt, im 2. Behälter wurde dagegen teilweise eine Abweichung vom Experiment beobachtet. Bei zusätzlicher Berücksichtigung von Volumenkondensationen konnte eine deutliche Verbesserung insbesondere für die Dampfkonzentration und die Temperatur im unteren Bereich des zweiten Behälters erzielt werden.

2.5.7 Nachrechnung des TH-24-Experimentes mit `containmentFOAM`

Anhand des THAI-Versuchs TH-24 sollte `containmentFOAM` – insbesondere das Wandkondensationsmodell – validiert und mit früheren Rechnungen verglichen werden. Im Folgenden wird für die Rechnung mit dem `containmentFOAM`-Solver (Stand 2022) des FZJ die Abkürzung „cont“ und für die Rechnung mit dem Solver `chtMultiRegionSchmidtFOAM` der GRS die Abkürzung „mrs“ verwendet.

2.5.7.1 Versuchsbeschreibung

Das TH-24-Experiment stellt eine Fortführung der Experimente TH-21 (Naturkonvektion) und TH-22 (Naturkonvektion und Auflösung einer Heliumschicht) dar. Im Experiment TH-24 kommt zusätzlich noch der Effekt der Kondensation hinzu. Abb. 2.158 zeigt die Konfiguration des TH-24-Experiments. Der untere und mittlere Teil wurden mit einem Wärmemantel auf etwa 100 °C erhitzt, während der Kühlmantel im oberen Bereich auf eine Temperatur von 60 °C eingestellt wurde. Nachdem sich der Behälter aufgeheizt

hatte, wurde Dampf im oberen Bereich (in 6,8 m Höhe) eingespeist. Dadurch kam es im oberen Bereich zur Ausbildung einer stabilen Dampfschichtung. Diese Dampfschicht wurde anschließend wieder durch den sich herausbildenden Naturumlauf im THAI-Behälter verteilt (Abb. 2.159). Weitere Details zum Versuch finden sich in /GUP 12/.

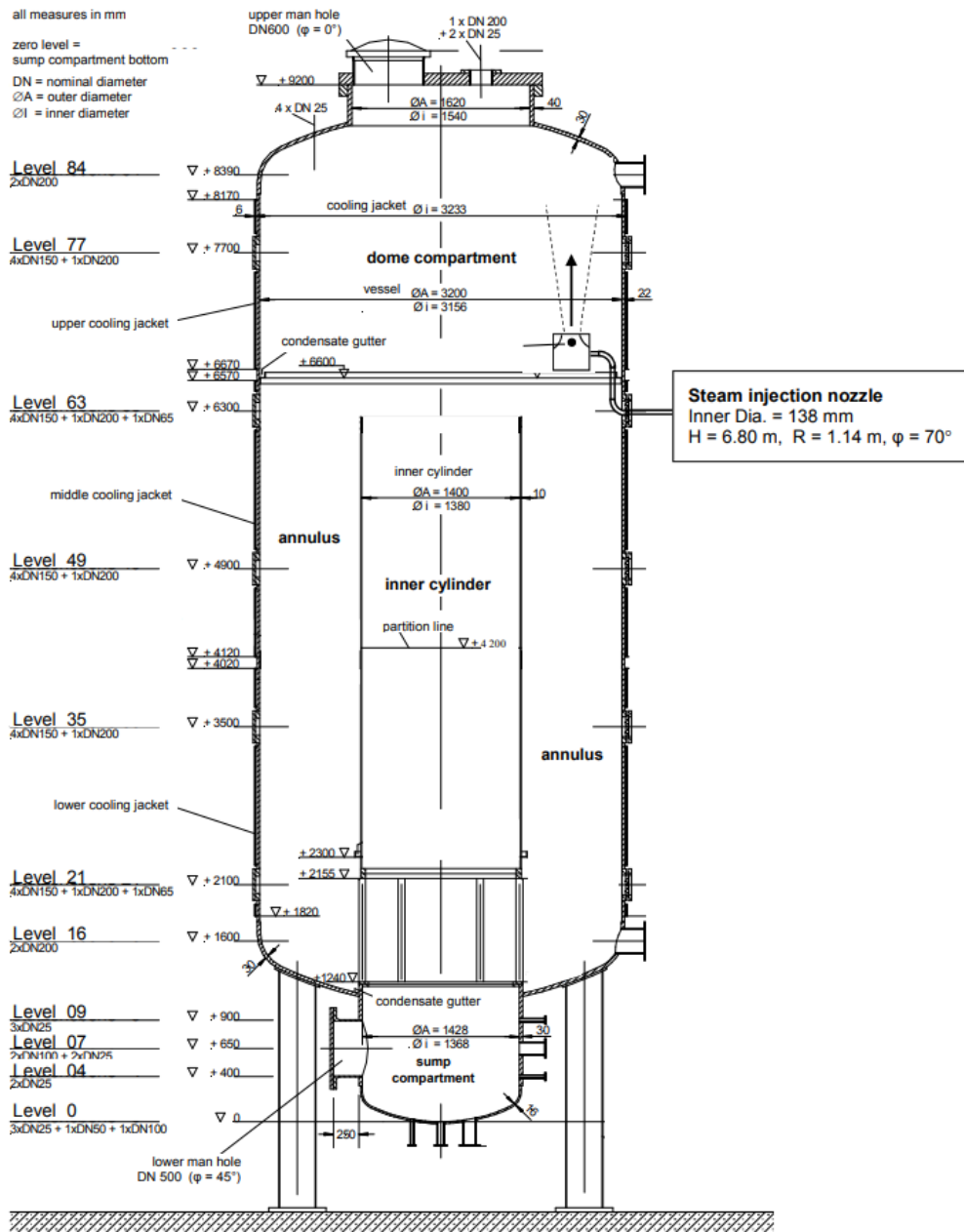


Abb. 2.158 Konfiguration des TH-24-Experimentes (Bildquelle: /GUP 12/)

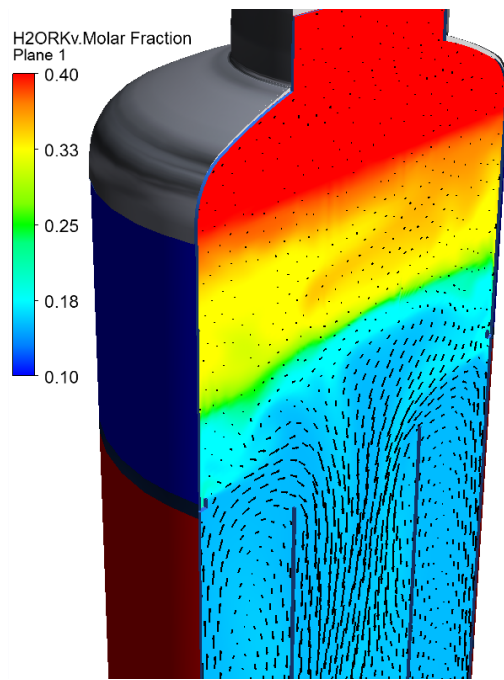
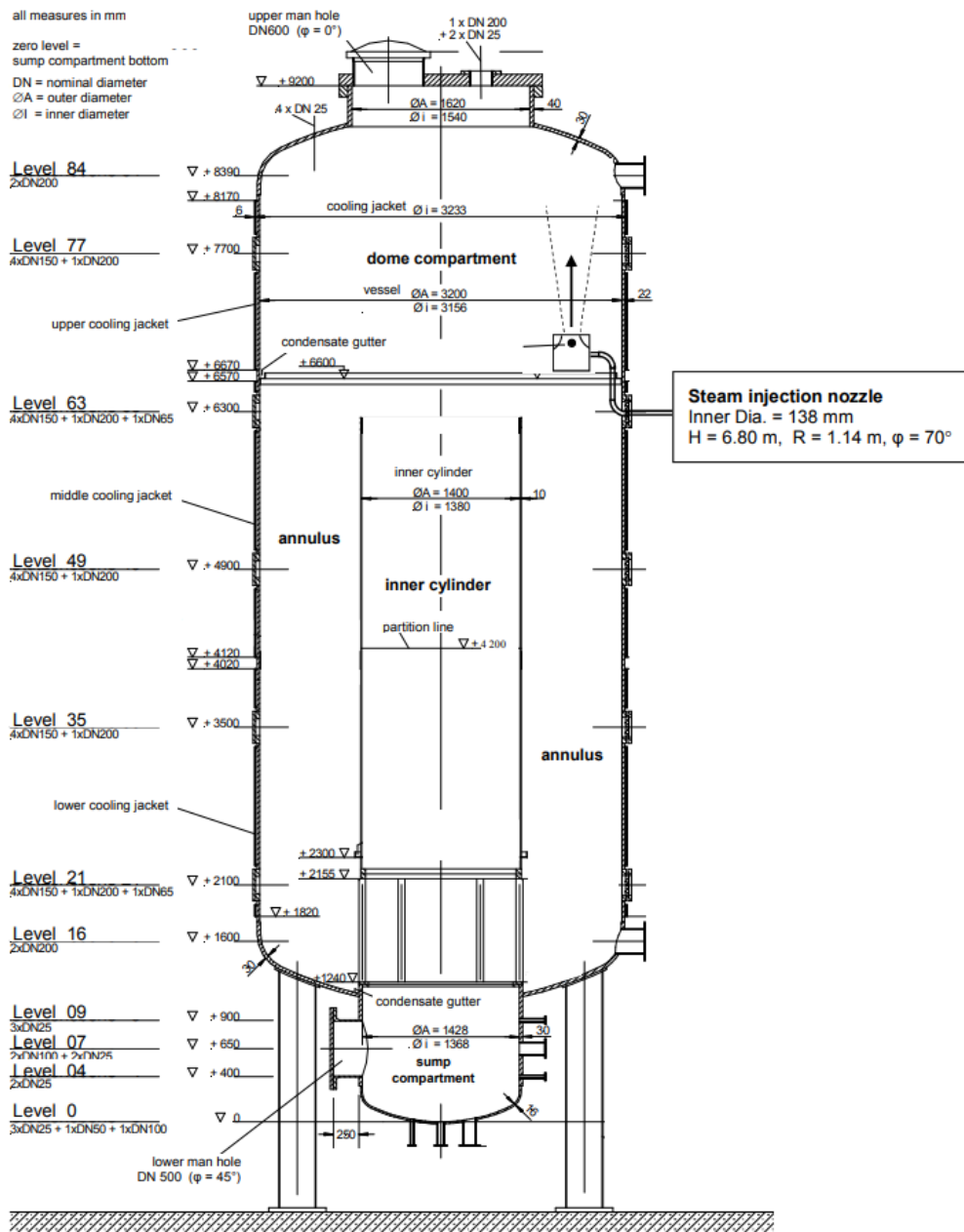


Abb. 2.159 Abbau einer Dampfschicht im TH-24-Experiment (Ergebnis einer CFX-Simulation)



2.5.7.2 OpenFOAM-Setup

In Abb. 2.160 ist das für den Versuch erstellte CFD-Gitter dargestellt. Im Bereich der Dampfeinspeisung ist das Gitter unstrukturiert. Ansonsten handelt es sich um ein strukturiertes Gitter, das in Wandnähe verfeinert wurde. Das Gitter hat insgesamt ca. 1,3 Millionen Elemente. Der Versuch wurde in den aktuellen Arbeiten mit OpenFOAM-6 und containmentFOAM nachgerechnet. Als Turbulenzmodell wurde das cfkOmegaSST-Modell verwendet. Die Wandkondensation an den gekühlten Wänden wurde berücksichtigt, aber es wurde kein Volumenkondensationsmodell verwendet. Für die Wärmestrahlung

wurde das P1-Modell verwendet. Weitere Details zu den Modellen und der Numerik finden sich in Tab. 2.12.

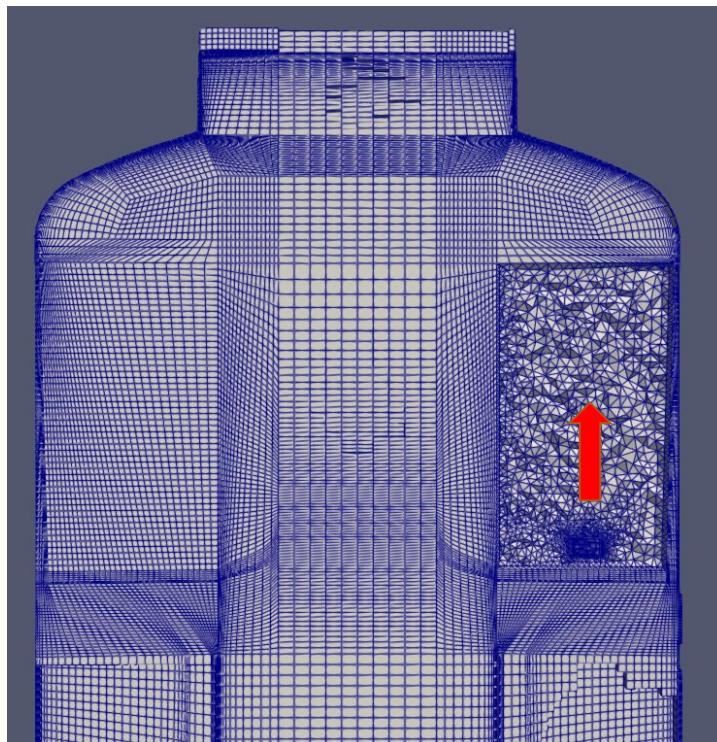


Abb. 2.160 CFD-Gitter für den TH-24 Versuch

Der rote Pfeil zeigt die Richtung der Dampfeinspeisung an.

Tab. 2.12 Infobox THAI-Experiment TH-24

Experiment	THAI-Experiment TH-24
Phänomene	Gasverteilung / Naturkonvektion / Schichtungs- auf- und -abbau / Wandkondensation
Materialien	Luft (AIR) und Dampf (H ₂ O)
Software / Version	OpenFOAM 6
Solver	Neue Rechnung: containmentFOAM (cont) (Alte Rechnung: chtMultiRegionSchmidtFOAM (mrs))
Zeitschritte	Variabel / Max. Courant: 10
Turbulenzmodell	cfkOmegaSST / SGDH
Kondensation	Mit Wandkondensationsmodell / Ohne Volumen- kondensation
Strahlungsmodell	P1, Absorptionskonstante Dampf: 10 (m bar) ⁻¹
Diffusionsmodell	twoSpecies / Fuller
Gittererstellung	Pointwise
Elementzahl	1 343 666

2.5.7.3 Diskussion der Ergebnisse

Druck

In Abb. 2.160 ist der Druckverlauf beim TH-24-Experiment dargestellt. Der mit containmentFOAM (cont) berechnete Druck passt in den ersten 500 s bis 700 s sehr gut zu den bisherigen Rechnungen mit dem GRS-OpenFOAM-Solver chtMultiRegionSchmidt-FOAM (mrs) und der CFX-Rechnung. Danach entspricht der Druck in etwa der CFX-Rechnung, während es von der GRS-Rechnung eine moderate Abweichung gibt. Allerdings liegen alle berechneten Druckwerte bei 500 s ca. 5 % unterhalb des experimentellen Drucks. Insbesondere der Druckanstieg wird durch alle Simulationen nicht richtig wiedergegeben. Möglicherweise wird die Kondensation des Dampfes an den kalten Wänden in den Simulationen überschätzt. Dieser Punkt wird weiter unten noch untersucht. Eine weitere mögliche Ursache für die Abweichungen zum Experiment ist, dass es experimentelle Unsicherheiten hinsichtlich der Menge des eingespeisten Dampfes gibt.

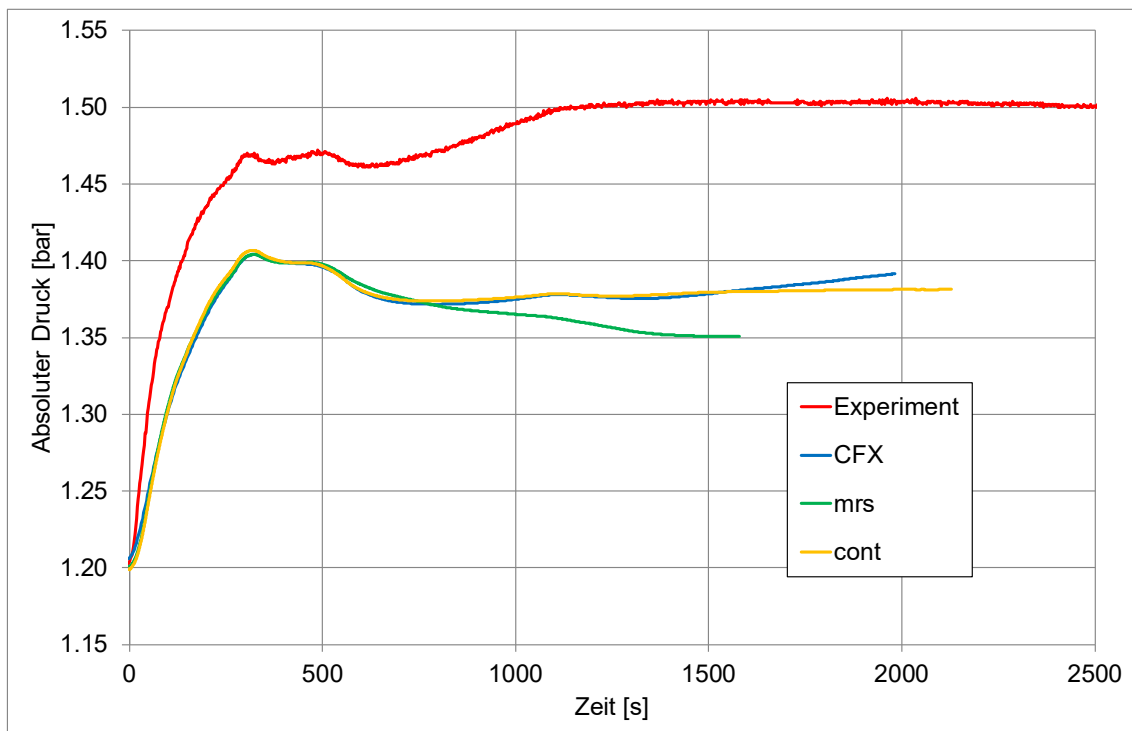


Abb. 2.161 Druckverlauf beim TH-24-Experiment

Dampfkonzentrationen

In Abb. 2.162 bis Abb. 2.165 ist die Dampfkonzentration an unterschiedlichen Messpunkten dargestellt. Es zeigt sich, dass die mit containmentFOAM (cont) berechnete Dampfkonzentration an den meisten Messpunkten etwa in der Mitte zwischen der CFX-Rechnung und der GRS-OpenFOAM-Rechnung (mrs) liegt. Die containmentFOAM-Rechnung überschätzt zu Beginn den Dampfanstieg im oberen THAI-Behälter (siehe Abb. 2.162 und Abb. 2.163). Bei den weiter unten liegenden Messpunkten wird der Dampfanstieg unterschätzt (Abb. 2.164 und Abb. 2.165). Die von containmentFOAM berechnete Abbauzzeit für die Schichtung passt gut zu den experimentellen Werten (siehe Abb. 2.162). Allerdings liegt nach dem Schichtungsabbau die Dampfkonzentration an allen Messpunkten unterhalb des Experimentes. Dies könnte ein Hinweis auf eine Überschätzung der Kondensationsrate an den kalten Wänden sein. Insgesamt passen die mit containmentFOAM berechneten Werte aber von allen Simulationen am besten zum Experiment.

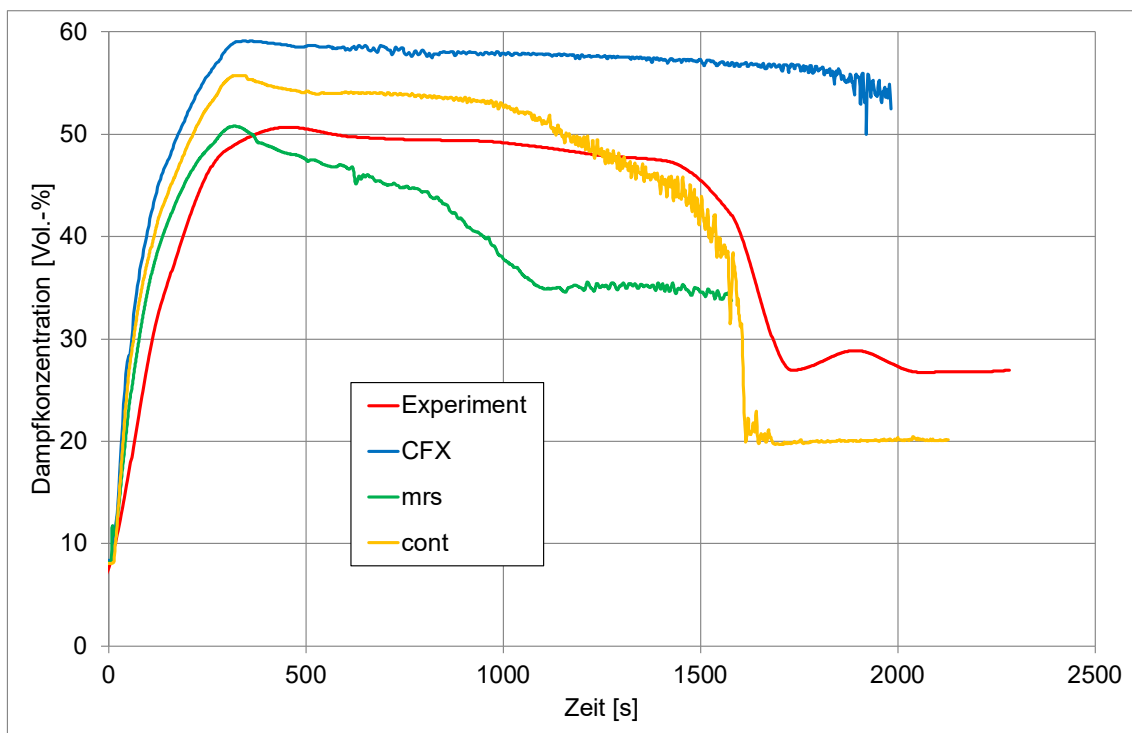


Abb. 2.162 Dampfkonzentration am Monitorpunkt DCH87M00 (Höhe: 8,7 m)

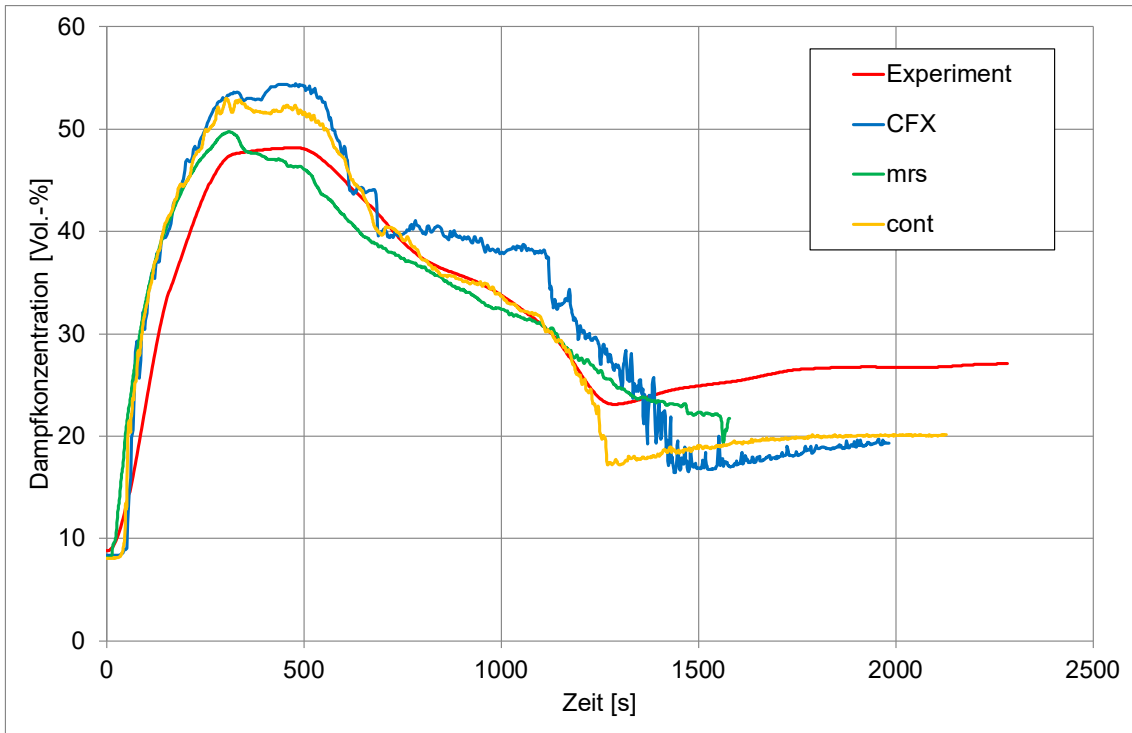


Abb. 2.163 Dampfkonzentration am Monitorpunkt DCH77M00 (Höhe: 7,7 m)

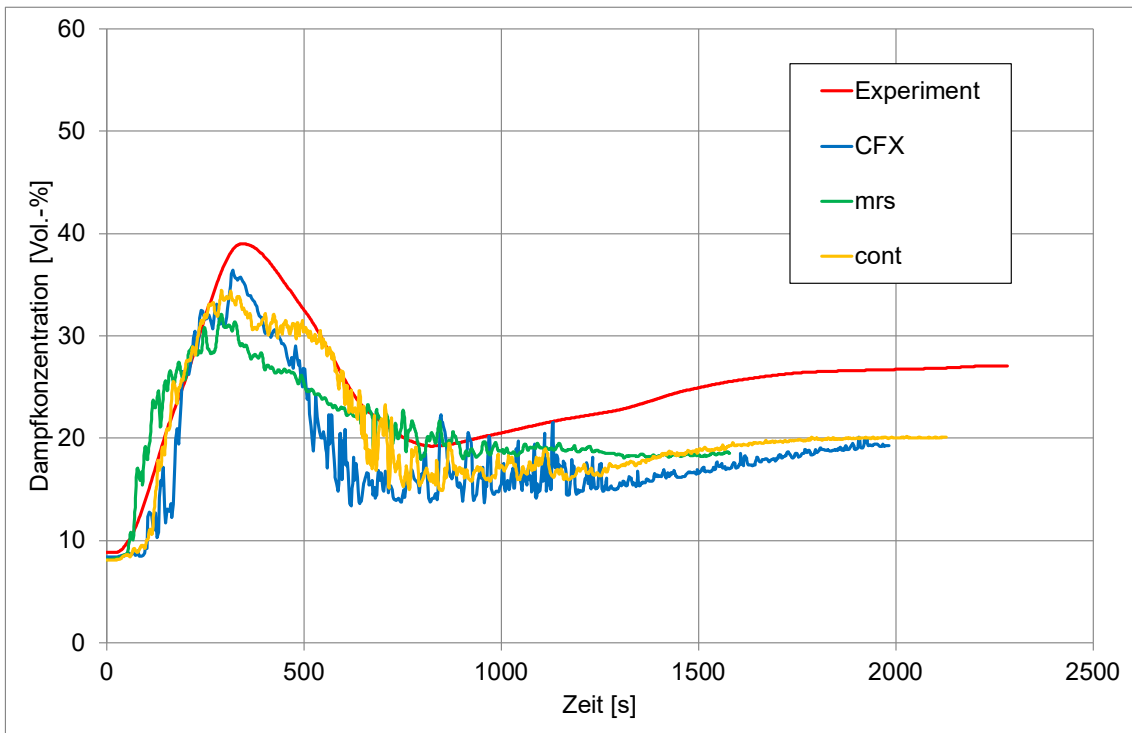


Abb. 2.164 Dampfkonzentration am Monitorpunkt DCH70M00 (Höhe: 7,0 m)

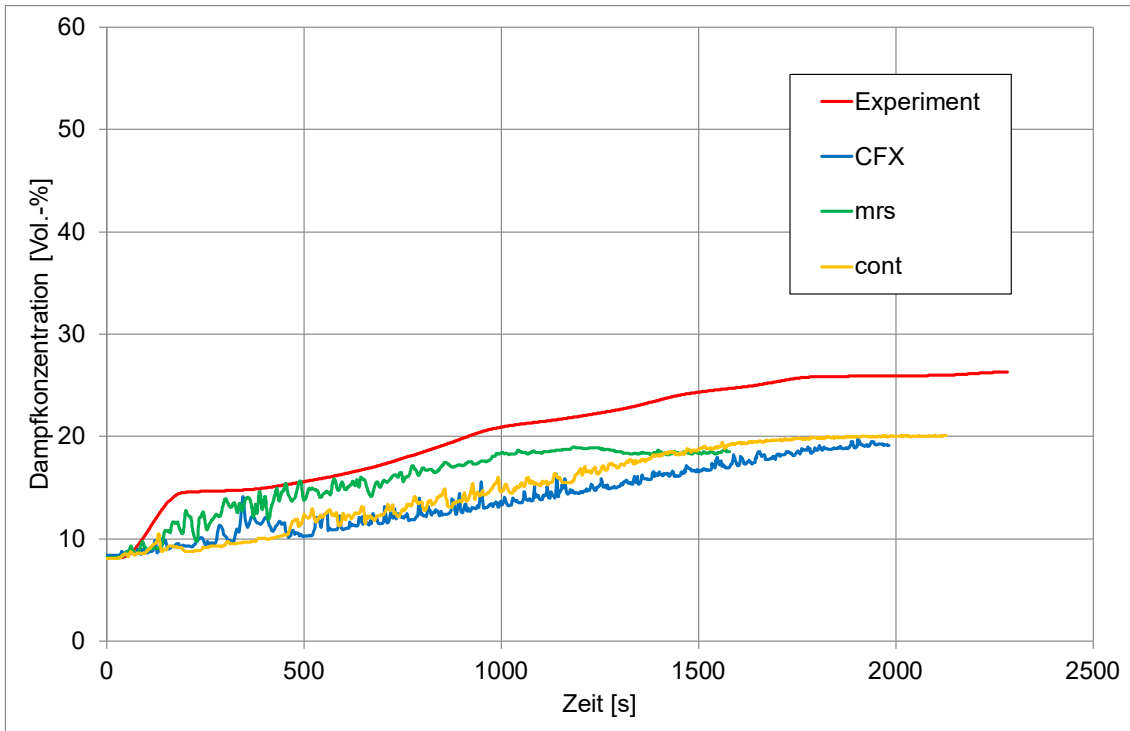


Abb. 2.165 Dampfkonzentration am Monitorpunkt DCH63M00 (Höhe: 6,3 m)

Temperaturen

In Abb. 2.166 bis Abb. 2.169 sind die Temperaturverläufe an unterschiedlichen Messpunkten dargestellt. Die mit containmentFOAM berechneten Temperaturen passen insgesamt von allen Rechnungen am besten zu den experimentellen Werten. Hier gibt es oft nur geringe Abweichungen von wenigen Grad. Die Verbesserungen könnten unter anderem darauf beruhen, dass bei der cont-Rechnung die Wärmestrahlung berücksichtigt wurde. Bei der mrs-Rechnung wurde sie noch nicht berücksichtigt.

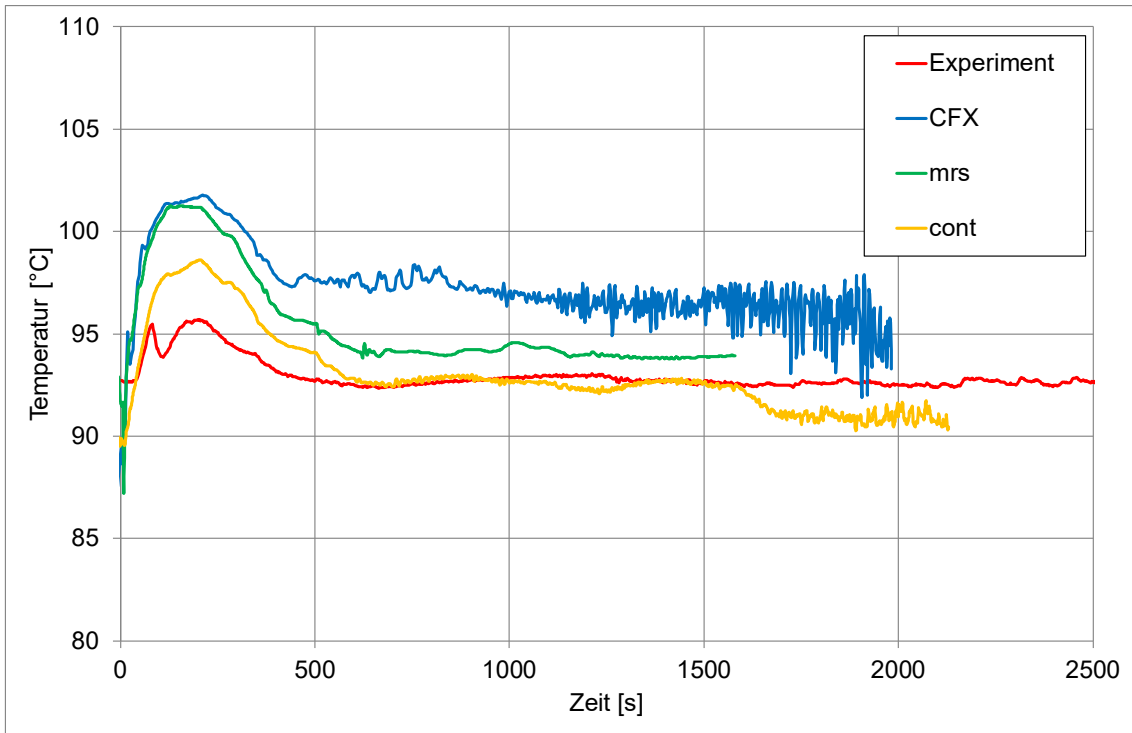


Abb. 2.166 Temperaturverlauf am Monitorpunkt DTF87M00 (Höhe: 8,7 m)

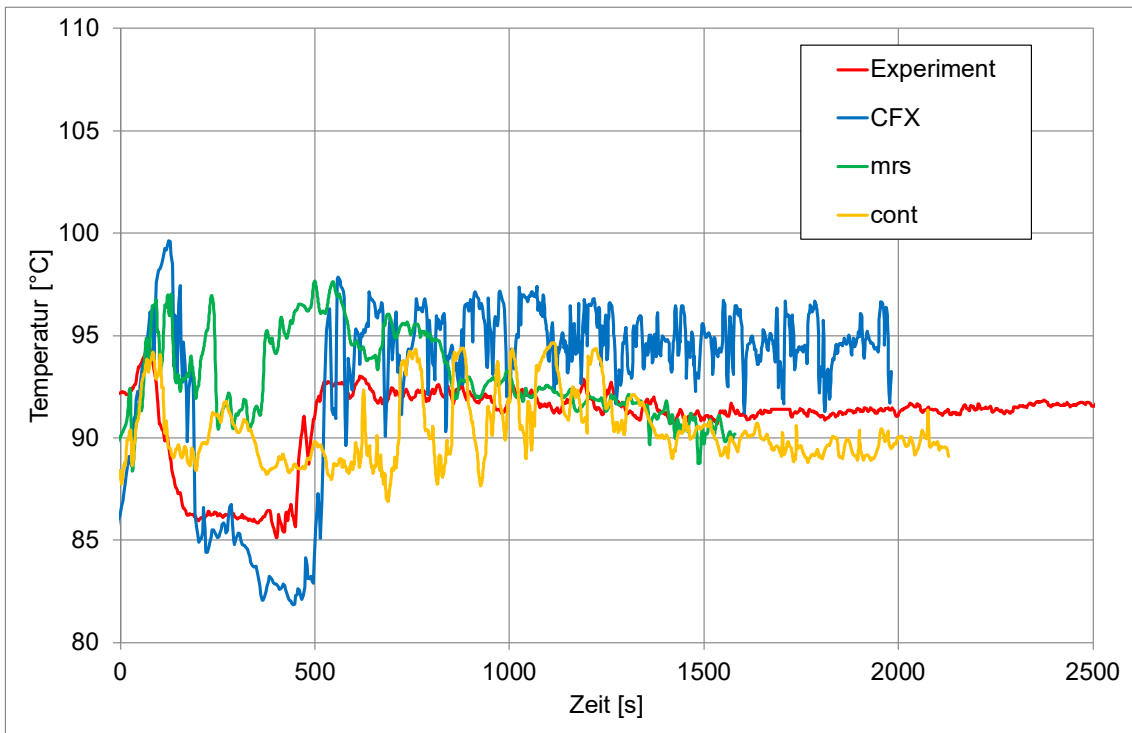


Abb. 2.167 Temperaturverlauf am Monitorpunkt DTF70H11 (Höhe: 7,0 m)

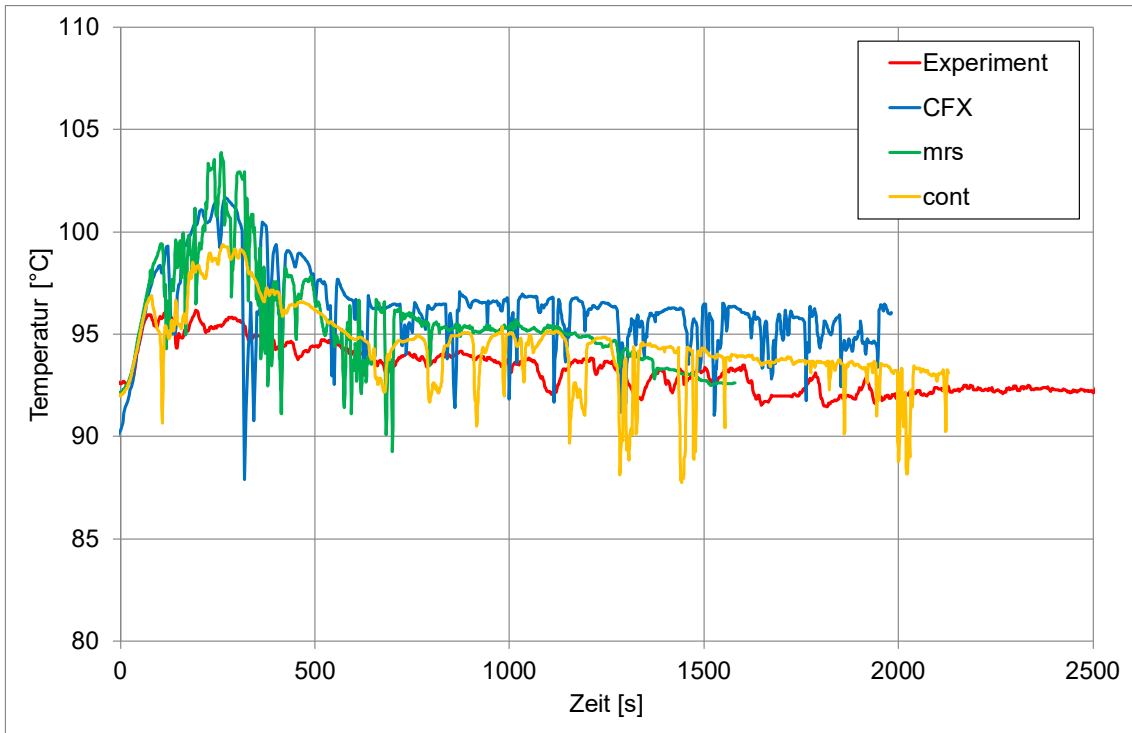


Abb. 2.168 Temperaturverlauf am Monitorpunkt DTF63H11 (Höhe: 6,3 m)



Abb. 2.169 Temperaturverlauf am Monitorpunkt DTF49M00 (Höhe: 4,9 m)

Wandkondensationsrate

In Abb. 2.170 ist der berechnete Verlauf der Wandkondensationsrate dargestellt. Hierfür gibt es keine experimentellen Vergleichswerte. Die cont-Rechnung berechnet ähnliche Werte wie die anderen beiden Simulationen. Sie liegt dabei etwas näher an der CFX-Rechnung als an der mrs-Rechnung. Wird hieraus die integrale Kondensatmasse berechnet, so ergibt sich der in Abb. 2.171 dargestellte Verlauf. Dieser ist wieder mit der im Experiment aufgefundenen Kondensatmasse vergleichbar. Hier zeigt sich, dass in allen Simulationen das Kondensat überschätzt wird. Es ist allerdings beim Vergleich zu berücksichtigen, dass es im Gegensatz zu den Simulationen eine nicht bekannte Zeit dauert, bis im Experiment entstandenes Kondensat aufgefangen und gemessen wird. Auch verbleibt ein Teil des Kondensats an Wänden als Tröpfchen/dünner Flüssigkeitsfilm. Eine Überschätzung der Wandkondensation in den Simulationen könnte auch die Ursache für die Unterschätzung des Drucks in den Simulationen sein (Abb. 2.161).

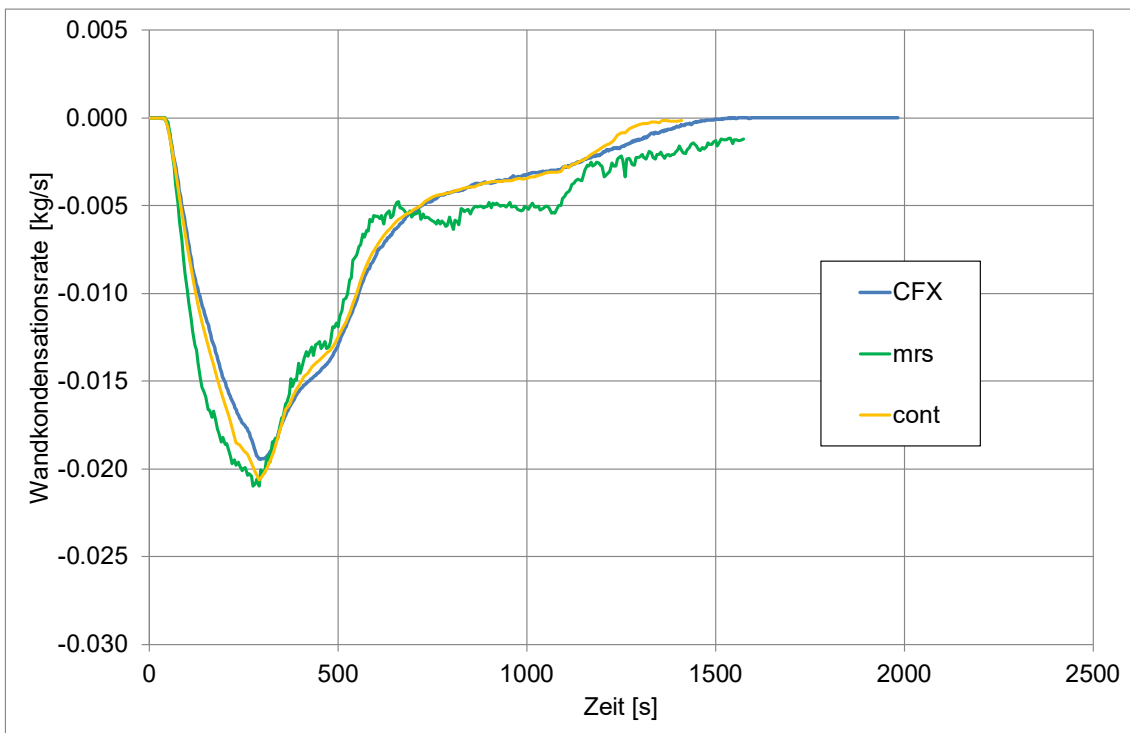


Abb. 2.170 Verlauf der Wandkondensationsrate

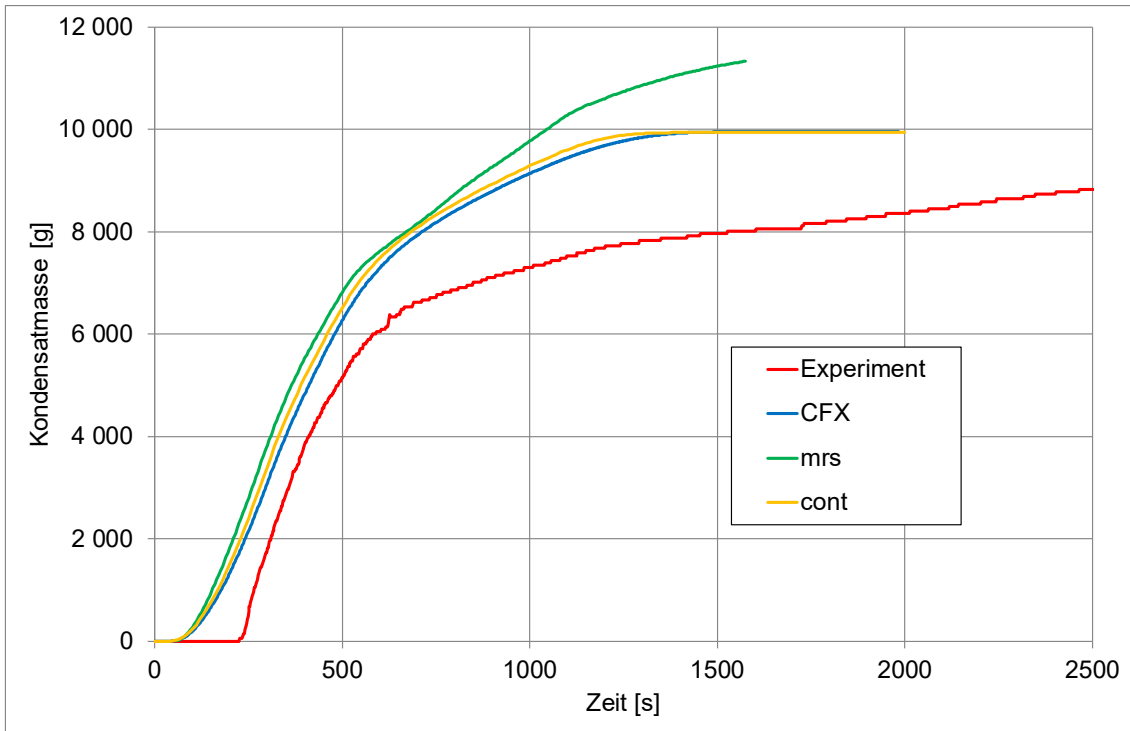


Abb. 2.171 Integrale Kondensatmasse beim TH24-Experiment

2.5.7.4 Zusammenfassung TH-24

Das Experiment TH-24 mit Gasverteilung, Naturkonvektion und Dampfkondensation konnte erfolgreich mit containmentFOAM nachgerechnet werden. Die hierbei erzielten Werte für Dampfkonzentrationen zeigen moderate Abweichungen, die Temperaturen passen dagegen gut zum Experiment. Die von containmentFOAM berechneten Werte für die Kondensationsrate und den Druck passen gut zu früheren Simulationen mit dem GRS-OpenFOAM-Solver und mit CFX. Die berechnete Kondensatmasse hingegen überschätzt das Experiment. Dies kann ein Hinweis auf eine Überschätzung der Wandkondensationsrate sein. Der Druck bei der containmentFOAM-Rechnung liegt unterhalb der experimentellen Werte. Die Ursache hierfür könnte in der Überschätzung der Wandkondensation liegen. Eine weitere Ursache für Abweichungen von Experiment und Simulationen liegt in einer ungenauen Versuchsspezifikation (Dampfeinspeisung, Wandtemperaturen ...). Es gibt die Aussage von Becker Technologies, dass die tatsächlich eingespeiste Dampfmenge möglicherweise von der Versuchsspezifikation abweicht. Primäres Ziel dieses Arbeitspunkts war der Vergleich containmentFOAM / chtMultiRegion-SchmidtFOAM zur Auswahl eines Solvers bzw. von Modellen für die Arbeiten in RS1603A. Deshalb wurde auf vertiefte Untersuchungen zu experimentellen Unsicherheiten und Modellierungsfragestellungen verzichtet.

2.5.8 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen aus AP1.4

Es wurden die Simulationsergebnisse aus unterschiedlichen Versuchen von containmentFOAM mit denen von chtMultiRegionSchmidtFOAM verglichen. Die Vergleichsrechnungen haben gezeigt, dass containmentFOAM gut zur Simulation unterschiedlicher containment-relevanter Anwendungen geeignet ist. In den meisten Fällen stimmen die grundlegenden Modellannahmen für die vom FZJ und von der GRS implementierten Modelle (Wand- und Volumen Kondensation, Diffusion) überein, die in containmentFOAM implementierten Modelle gehen aber oft über die in chtMultiRegionSchmidtFOAM implementierten Modelle hinaus. In beiden Solvoren sind mit dem Fick'schen Gesetz die grundlegenden Modellannahmen für die Diffusion gleich und beide Solver können Gemische aus zwei Stoffen konsistent beschreiben. In containmentFOAM besteht mit dem „effective Diffusivity“ Modell aber auch die Möglichkeit, Gemische aus drei oder mehr Komponenten effizient und hinreichend genau zu simulieren. Des Weiteren besteht die Möglichkeit, den Soret- und Dufour-Effekt zu berücksichtigen. Der Ansatz zur Beschreibung von Wandkondensation ist in beiden Solvoren sehr ähnlich. Entsprechend weichen die Simulationsergebnisse bei sehr feiner Gitterauflösung (Low Reynolds, $y^+ < 1$) nur wenig voneinander ab. In containmentFOAM wurden allerdings basierend auf mehreren Promotionen an der RWTH Aachen/FZ Jülich verbesserte Wandfunktionen bei Wandkondensation implementiert. Deshalb kann mit containmentFOAM eine bessere Übereinstimmung bei groben Gittern erzielt werden. Beim Volumen Kondensationsmodell kann in containmentFOAM zusätzlich der Transport von Nebel einschließlich der Sedimentation modelliert werden. Deshalb wird darauf verzichtet, die GRS-Modelle für Wand-, Volumen Kondensation und Diffusion in containmentFOAM zu implementieren. Das GRS-PAR-Modell unterscheidet sich grundlegend vom PAR-Modell des FZ Jülich RekoDirekt. RekoDirekt verfolgt einen mechanistischen Ansatz, bei dem der H_2/CO -Abbau des PARs durch physikalische Prozesse wie die Wärmebilanz, den Antrieb der auftreibenden Kaminströmung, die Diffusion von H_2/CO zu den katalytischen Platten etc. bestimmt wird. Das GRS-PAR-Modell beruht dagegen auf modifizierten AREVA-Gleichungen, bei denen die Abbaurate und Effizienz eines PARs durch Korrelationen beschrieben werden. Da es sich beim GRS-Modell um einen komplementären Ansatz handelt, wurde das PAR-Modell an containmentFOAM gekoppelt (siehe Abschnitt 6.2).

3 AP 2 Einsatz von OpenFOAM bei Hz bzw. Hz/CO-Verbrennungsvorgängen

3.1 AP 2.1 Auswahl/Erstellung und Validierung eines OpenFOAM-Solvers zur Simulation der Hz/CO/Dampf/Luft-Verbrennung (GRS)

Ziel dieses Arbeitspunktes ist die Erstellung und Validierung eines OpenFOAM-Referenzsolvers zur Simulation von H₂/CO/Dampf/Luft-Verbrennung. Hierzu wird auf einem Solver der TU-München (xDynFOAM) aufgesetzt. Die GRS hat mit diesem Solver mehrere unterschiedliche Versuche (THAI-Versuche HD-Serie (HD-7, HD-8, HD-10, HD-12), ENACCEF-2 und GraVent) nachgerechnet. Diese Validierungsrechnungen werden im Folgenden diskutiert. Des Weiteren hat sich die GRS mit xDynFOAM-Simulationen am Etson-AMHYCO-H₂/CO-Verbrennungsbenchmark beteiligt. Die experimentellen Daten waren zum Zeitpunkt der Berichtserstellung noch nicht frei verfügbar, deshalb können die Ergebnisse nur im nicht-öffentlichen zweiten Teil des Berichts ausführlich diskutiert werden.

3.1.1 THAI Experiment HD-7

Innerhalb der THAI-Anlage wurden mehrere Versuche zur H₂-Deflagration durchgeführt (HD-Serie). Ein Versuch dieser Serie ist der Versuch HD-7 /KAN 08/, der im Folgenden zur Validierung des Verbrennungssolvers genutzt werden soll. Beim Versuch HD-7 wurde der THAI-Behälter mit einer homogenen Mischung von 9,93 Vol.-% H₂ und Luft gefüllt. Der Startdruck lag bei 1,48 bar und die Starttemperatur bei 17 °C. Die Zündung des Gemisches erfolgt in einer Höhe von 0,5 m. Abb. 3.1 zeigt die Ausbreitung der Flammen, wie sie im Experiment gemessen wurden. Die Flamme breitet sich langsam nach oben hin aus. Im unteren Bereich des Behälters ist die Ausbreitung symmetrisch, im oberen Bereich ist eine Asymmetrie zu erkennen. Neben der Flammenankunft wurde auch der Druckverlauf im Behälter gemessen.

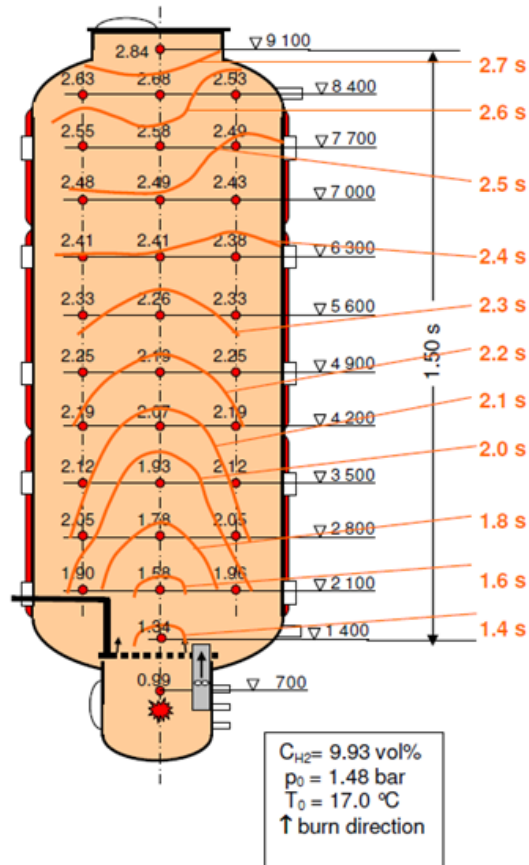


Abb. 3.1 Ausbreitung der Flammen im THAI-Experiment HD-7 /KAN 08/

3.1.2 OpenFOAM-Setup

Die OpenFOAM-Rechnungen wurden mit dem Solver xDynFOAM der TU-München durchgeführt. Dieser basiert auf OpenFOAM Version 10. Die ersten Rechnungen wurden mit dem Darrieus-Landau-Modell zur Flammenfaltung durchgeführt. Neben diesem Modell gibt es in xDynFOAM auch noch das Dinkelacker-Modell zur Flammenfaltung. Zu einem späteren Zeitpunkt wurde zusätzlich noch die Möglichkeit zur Kombination der beiden Modelle (im sogenannten Coupled-Modell) im Solver xDynFOAM von der TU-München eingefügt. In der in RS1603A verwendeten Version des Coupled-Modells wird die Verbrennungsgeschwindigkeit des Darrieus-Landau-Modells mit dem des Dinkelacker-Modells verglichen und der größere Wert für die Berechnung verwendet. Es wurden mehrere Rechnungen durch die GRS durchgeführt, um den Einfluss verschiedener Parameter (Zeitschritte, Gitter, Flammenfaltungsmodell etc.) zu untersuchen. Dieses wird in den folgenden Abschnitten erläutert.

Weiterhin wurden Rechnungen des HD-7-Experimentes mit den OpenFOAM-Solvern ddtHyCoFOAM und XiFOAM durchgeführt. ddtHyCoFOAM ist ein Verbrennungssolver der TU-München, basierend auf OpenFOAM Version 2. Dieser ist eher für schnelle Verbrennungen (DDT) geeignet und zeigte beim HD-7-Experiment keine plausiblen Ergebnisse. Die Rechnung war instabil und brach nach kurzer Zeit ab. Die Ergebnisse dieser Rechnungen werden hier deshalb nicht gezeigt. Der Solver XiFOAM ist ein frei verfügbarer Verbrennungssolver. Getestet wurde er in OpenFOAM Version 10. Grundsätzlich ist er für langsame Verbrennungen geeignet. Es fehlen jedoch Material- bzw. Modellparameter speziell für H₂-Verbrennungen. Auch die Ergebnisse mit diesem Solver werden deshalb hier nicht gezeigt bzw. weiter erläutert.

Tab. 3.1 Infobox zum THAI-Experiment HD-7

Experiment	THAI-Experiment HD-7
Phänomene	H ₂ -Verbrennung
Materialien	H ₂ / Luft
Software / Version	OpenFOAM 10
Solver	xDynFOAM
Flammenfaltung	Darrieus-Landau-Modell oder Coupled-Modell (Darrieus-Landau und Dinkelacker)
Zeitschritte	Variabel / Max. Courant: 0,25 oder 1,0
Turbulenzmodell	kOmegaSST oder kOmegaSSTSAS
Strahlungsmodell	fvDOM
Gittererstellung	Pointwise
Elementzahl	0,4 bis 1,2 Mio. / Strukturiert oder unstrukturiert

3.1.2.1 Einfluss der Zeitschrittweite (maximale Courant-Zahl)

Es wurden zwei Rechnungen mit unterschiedlicher maximaler Courant-Zahl und damit unterschiedlicher Zeitschrittweite durchgeführt. Eine Rechnung hatte die maximale Courant-Zahl 1,0 und die andere Rechnung die maximale Courant-Zahl 0,25. In Abb. 3.2 ist der Druckverlauf für beide Rechnungen dargestellt. Beide Kurven liegen exakt übereinander, insofern kann für die weiteren Arbeiten eine maximale Courant-Zahl von 1,0 verwendet werden. Durch die größere Zeitschrittweite ist diese Rechnung schneller.

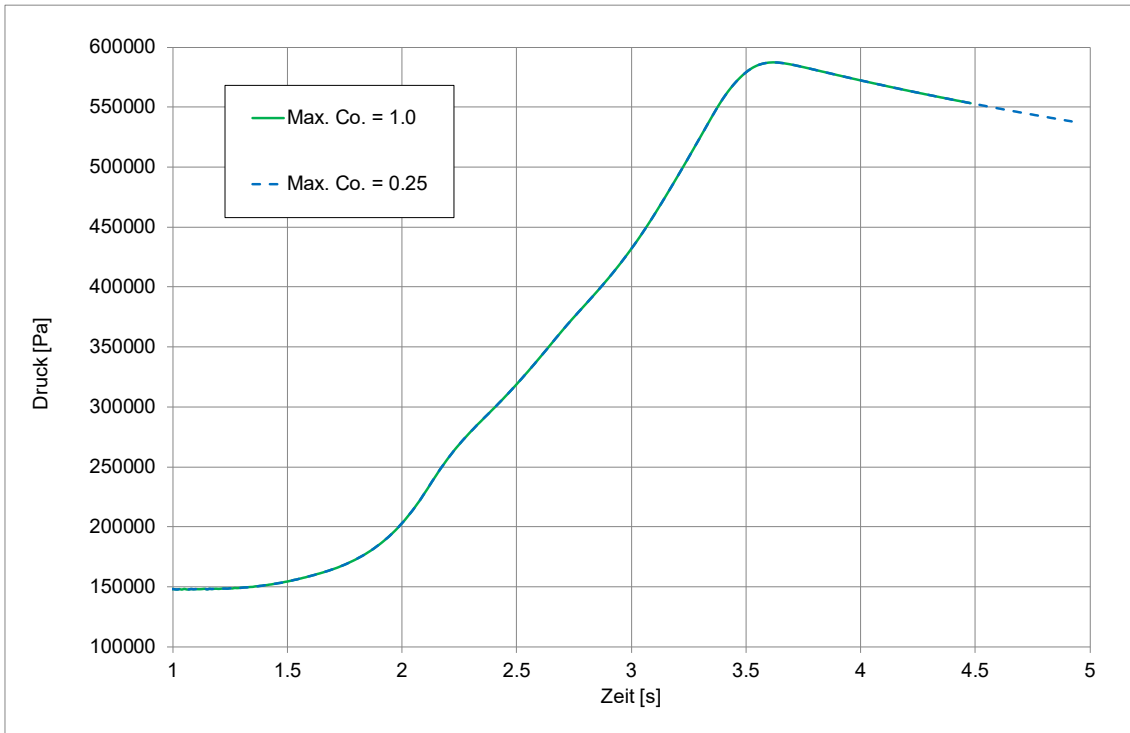


Abb. 3.2 Einfluss der Zeitschrittweite auf den Druckverlauf

3.1.2.2 Einfluss der Runge-Kutta-Iterationen

Der Solver xDynFOAM basiert auf dem Runge-Kutta-Iterationsverfahren. Innerhalb eines Rechenfalls kann die Zahl der Runge-Kutta-Iterationsstufen gewählt werden. Dieser Parameter wurde variiert und es wurden Rechnungen mit 3 und mit 6 Iterationen durchgeführt. Das Ergebnis ist in Abb. 3.3 dargestellt. Der Unterschied zwischen beiden Rechnungen ist sehr klein. Da die Rechnung mit 6 Iterationen deutlich länger dauert, werden im Folgenden für die weiteren Rechnungen nur 3 Iterationen verwendet.

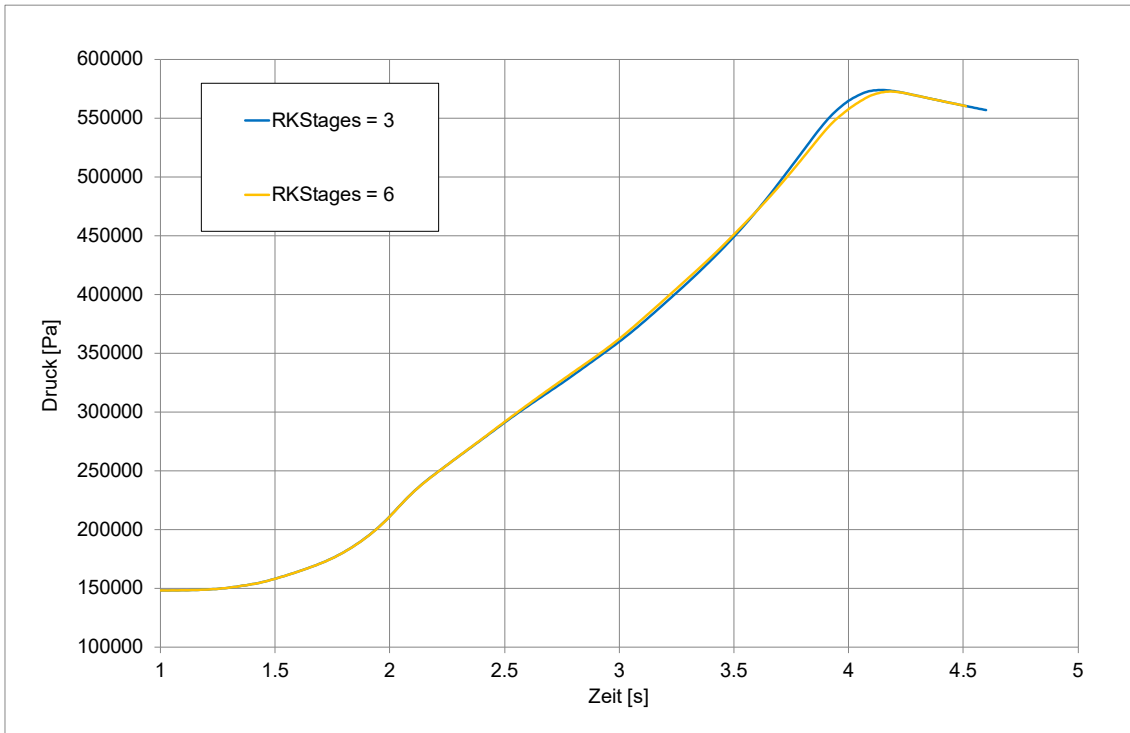


Abb. 3.3 Einfluss der Runge-Kutta-Iterationen auf den Druckverlauf

3.1.2.3 Einfluss des Turbulenz-Modells

Neben dem $k\Omega$ SST-Modell wurde auch das (von der TU-München vorgeschlagene) $k\Omega$ SSTSAS-Modell für die Turbulenz verwendet. Beim Druckverlauf des HD-7 Experimentes zeigte sich aber nur ein geringer Einfluss (siehe Abb. 3.4). Im Folgenden wird weiterhin das $k\Omega$ SST-Modell verwendet.

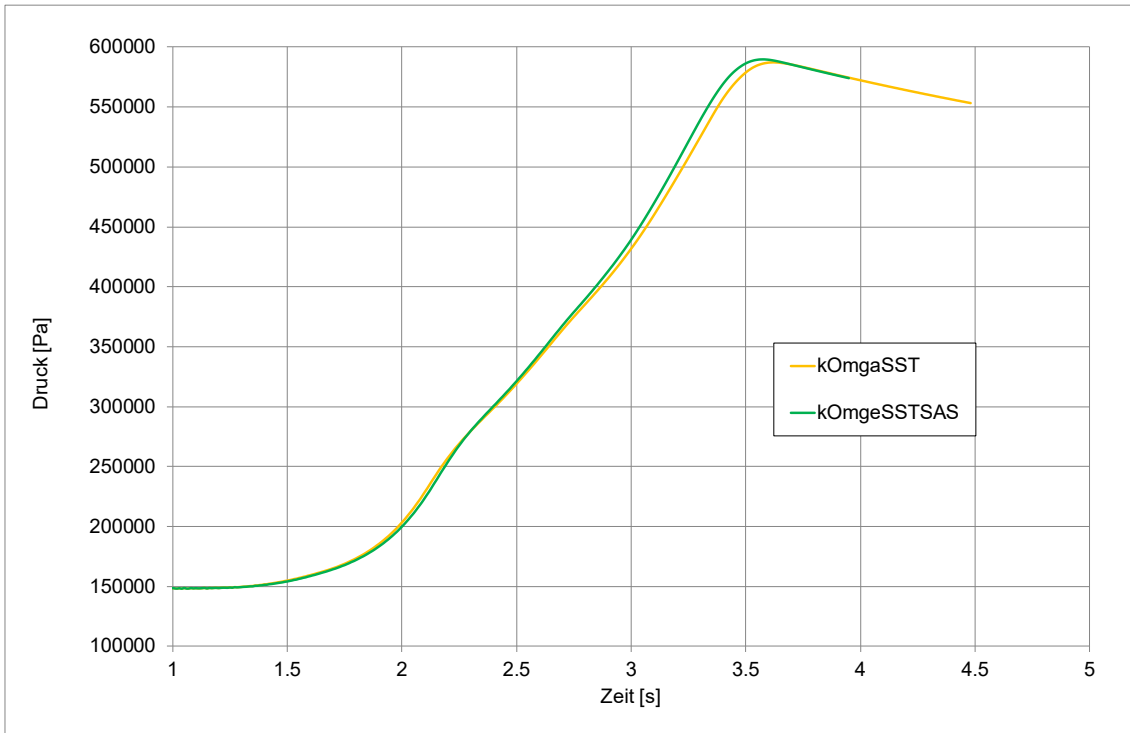


Abb. 3.4 Einfluss der Turbulenzmodells auf den Druckverlauf

3.1.2.4 Einfluss des Flammenfaltungs-Modells

Es wurden drei unterschiedliche Rechnungen durchgeführt, eine mit dem Darrieus-Landau-Modell, eine mit dem Dinkelacker-Modell und eine mit dem Coupled-Modell. Das Ergebnis ist in Abb. 3.5 dargestellt. Es zeigen sich kaum Unterschiede zwischen den Modellen Darrieus-Landau- und Coupled. Aufgrund der langsamen Verbrennung und der relativ schwachen Turbulenz wird auch beim Coupled-Modell fast ausschließlich die Verbrennungsgeschwindigkeit durch das Darrieus-Landau-Modell berechnet. Die xDyn-FOAM-Simulation mit dem Dinkelacker-Modell berechnet eine viel zu langsame Verbrennung. Das Dinkelacker-Modell, welches die Erhöhung der Verbrennungsgeschwindigkeit durch Turbulenz beschreibt, ist bei den hier untersuchten THAI-Verbrennungsversuchen nicht geeignet, die Verbrennung zu simulieren, da bei diesen Versuchen wenig Turbulenz vorliegt und Flammeninstabilitäten, wie die Darrieus-Landau-Flammeninstabilität, wichtig für die korrekte Simulation der Verbrennung sind.

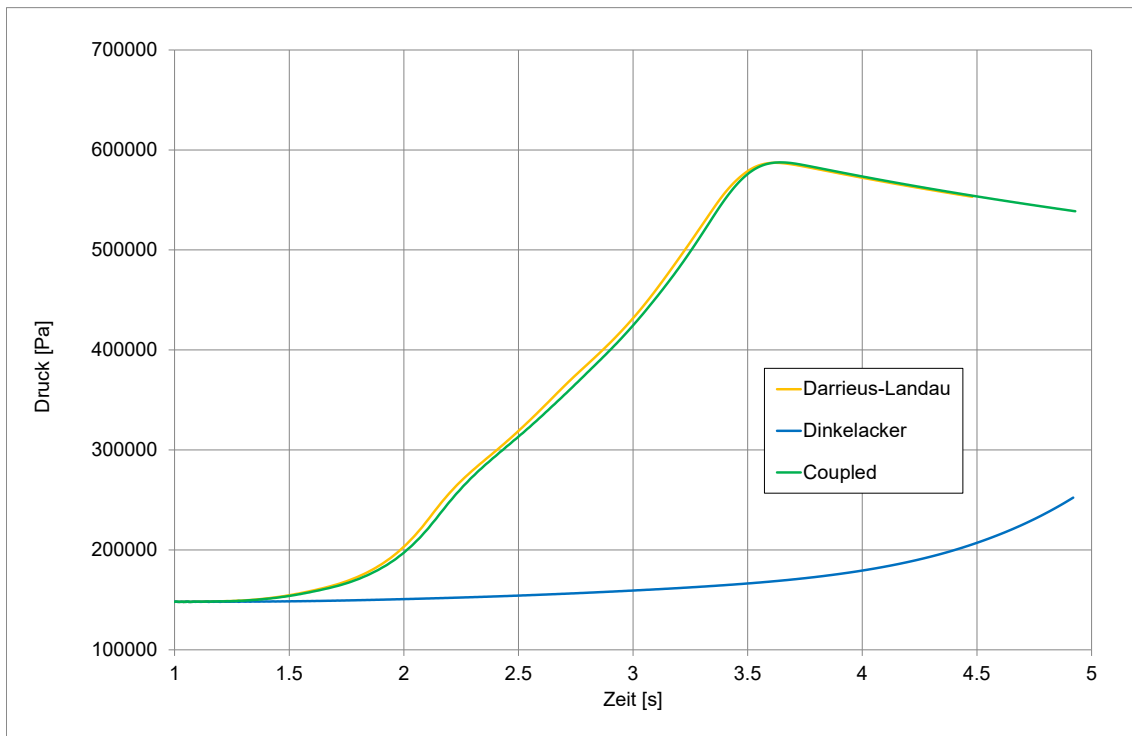


Abb. 3.5 Einfluss der Flammenfaltungmodellierung auf den Druckverlauf

3.1.2.5 Untersuchung des Gittereinflusses

Um den Einfluss des Gitters zu untersuchen, wurden sechs Rechnungen mit jeweils unterschiedlichen Gittern durchgeführt. Die verwendeten Gitter sind in Tab. 3.2 aufgelistet, in Abb. 3.6 sind drei der Gitter dargestellt. Rechnung Nr. 3 mit dem ganz feinen strukturierten Gitter (5,0 Mio. Elemente) lief so langsam, dass sie nicht zu Ende geführt werden konnte.

Tab. 3.2 Gitterstudie THAI-Experiment HD-7

Rechnung	Gittererstellung	Gittertyp	Elementzahl
1	GRS	Strukturiert	0,4 Millionen
2	GRS	Strukturiert	1,2 Millionen
3	GRS	Strukturiert	5,0 Millionen
4	GRS	Unstrukturiert	0,4 Millionen
5	GRS	Unstrukturiert	1,0 Millionen
6	TU-München	Unstrukturiert	1,0 Millionen

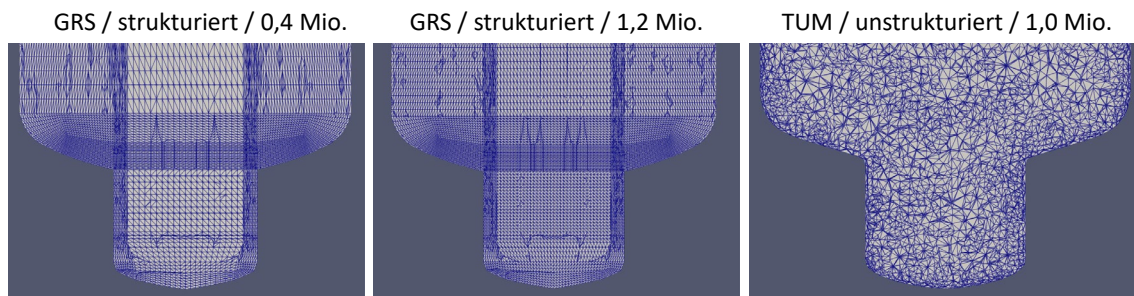


Abb. 3.6 Vergleich der unterschiedlichen Rechengitter (Ausschnitt unterer THAI-Behälter / Zündort)

Die Ergebnisse der Berechnungen finden sich in Abb. 3.7. Es zeigt sich, dass bei allen Simulationen der Druckverlauf ähnlich ist, allerdings variieren die Stärke des Druckanstiegs und der erreichte Maximaldruck. Bei den Simulationen wird keine Flammenverlöschung (Quenching) simuliert. Deshalb kommt es nach ausreichend Zeit in allen Simulationen zu einer vollständigen Verbrennung. Ohne Wärmeverluste wird sich deshalb in allen Rechnungen der AICC-Druck einstellen. Wärmeverluste führen zu einer Druckverringerung, wobei bei einer langsameren Verbrennung die Wärmeverluste bis zur kompletten Verbrennung tendenziell größer sind als bei einer schnellen Verbrennung.

Es konnte also in der Gittersensitivitätsstudie keine gitterunabhängige Lösung gefunden werden. Der Einfluss der Gitterverfeinerung auf den Druckverlauf ist nicht eindeutig. Bei den strukturierten Gittern führt eine Gitterverfeinerung zu einem langsameren Druckanstieg und einem niedrigeren Maximaldruck, bei den unstrukturierten Gittern ist es umgekehrt. Mit dem unstrukturierten Gitter der TUM konnte die beste Übereinstimmung erzielt werden. Es wurde deshalb für die weiteren Arbeiten verwendet.

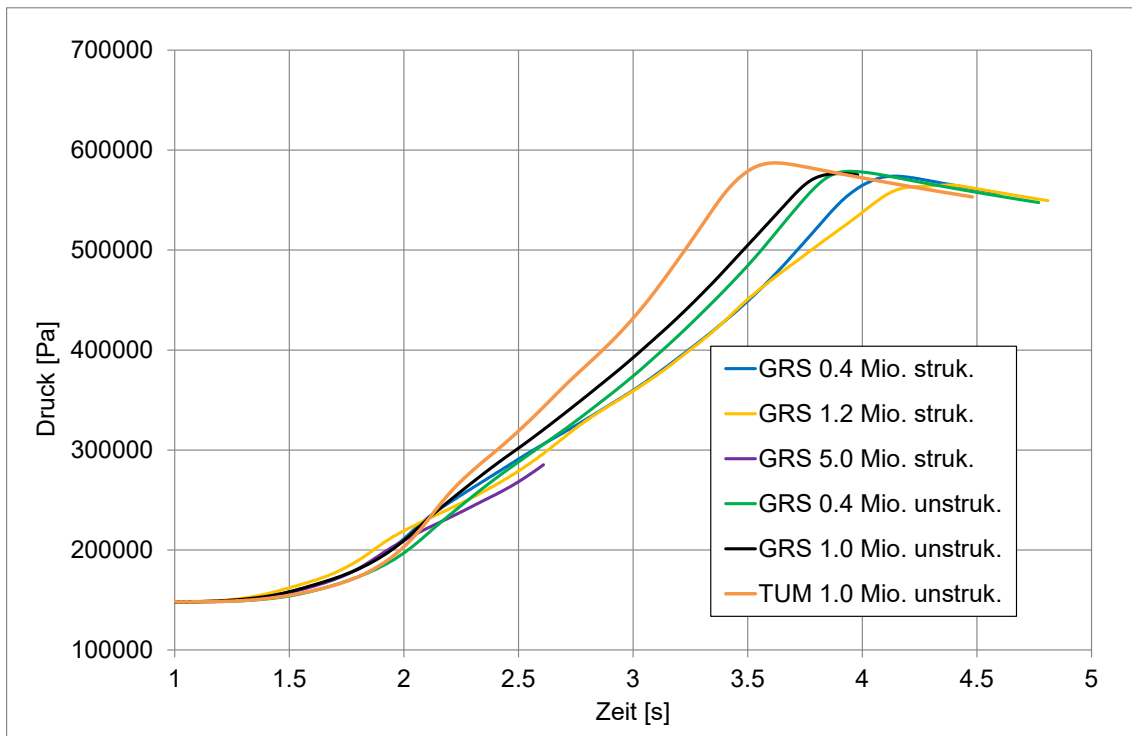


Abb. 3.7 Einfluss des Gitters auf den Druckverlauf

3.1.2.6 Vergleich mit dem Experiment und CFX

In Abb. 3.8 werden die xDynFOAM-Rechnungen mit dem Gitter der TUM mit dem Experiment und einer CFX-Rechnung verglichen. Bei der CFX-Rechnung wird die modifizierte Dinkelackerkorrelation aus RS1562 /SCH 22a/ mit den Modellparametern $A = 2$ und $B = 3$ verwendet. Dieses Modell wird bei allen CFX-Rechnungen in diesem Kapitel verwendet.

Es zeigt sich bei xDynFOAM ein etwas zu langsamer Druckanstieg und auch der Maximaldruck wird nicht ganz erreicht. Der Druckabfall nach der vollständigen Verbrennung des H_2 wird aber gut getroffen, was zeigt, dass die Modellierung der Wärmeverluste in guter Übereinstimmung mit dem Experiment erfolgt.

In der CFX-Rechnung findet der Druckanstieg in der Anfangsphase etwas zu schnell statt, später wird der Druckanstieg etwas unterschätzt und der Maximaldruck wird besser getroffen.

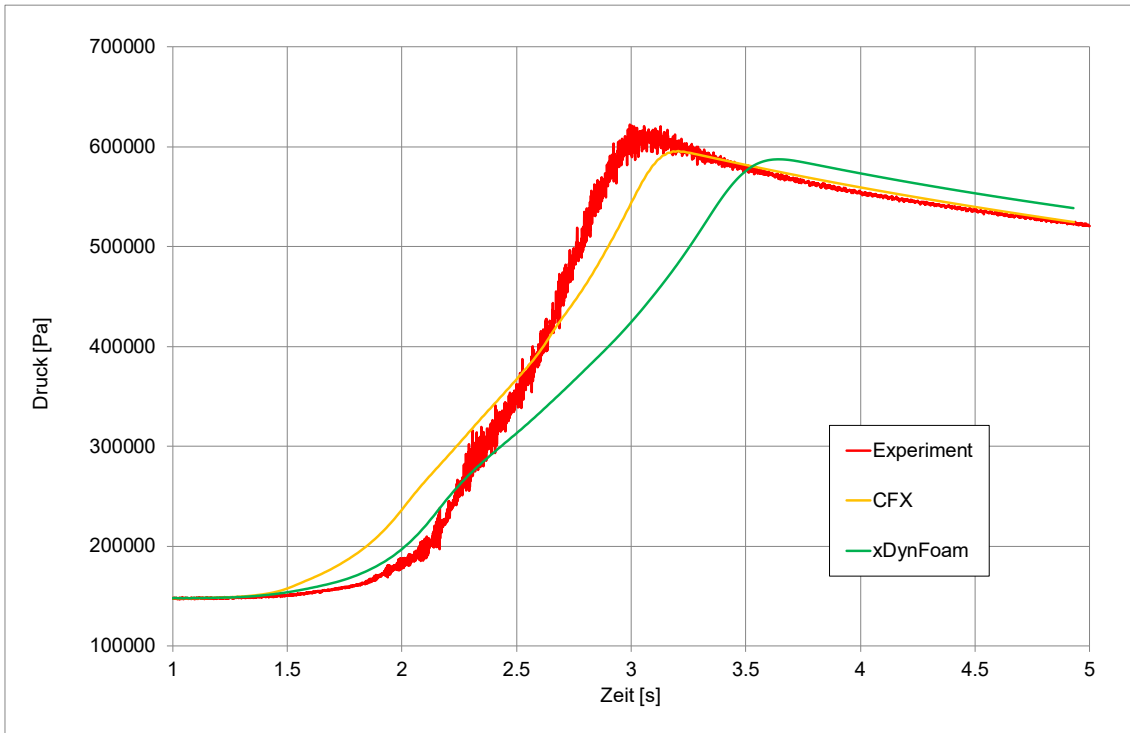


Abb. 3.8 Vergleich von simulierten und experimentellem Druckverlauf

In Abb. 3.9 werden die berechnete und die gemessene Flammenausbreitung entlang der Mittelachse miteinander verglichen. Bis zu einer Höhe von 4 m entspricht die Flammenausbreitung in xDynFOAM gut dem Experiment, danach ist sie etwas zu langsam. Bei der CFX-Rechnung wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit im mittleren Behälter etwas überschätzt, im oberen etwas unterschätzt. Insgesamt stimmt die CFX-Rechnung mit dem modifizierten Dinkelacker-Modell ($A = 2$, $B = 3$) besser mit dem Experiment überein.

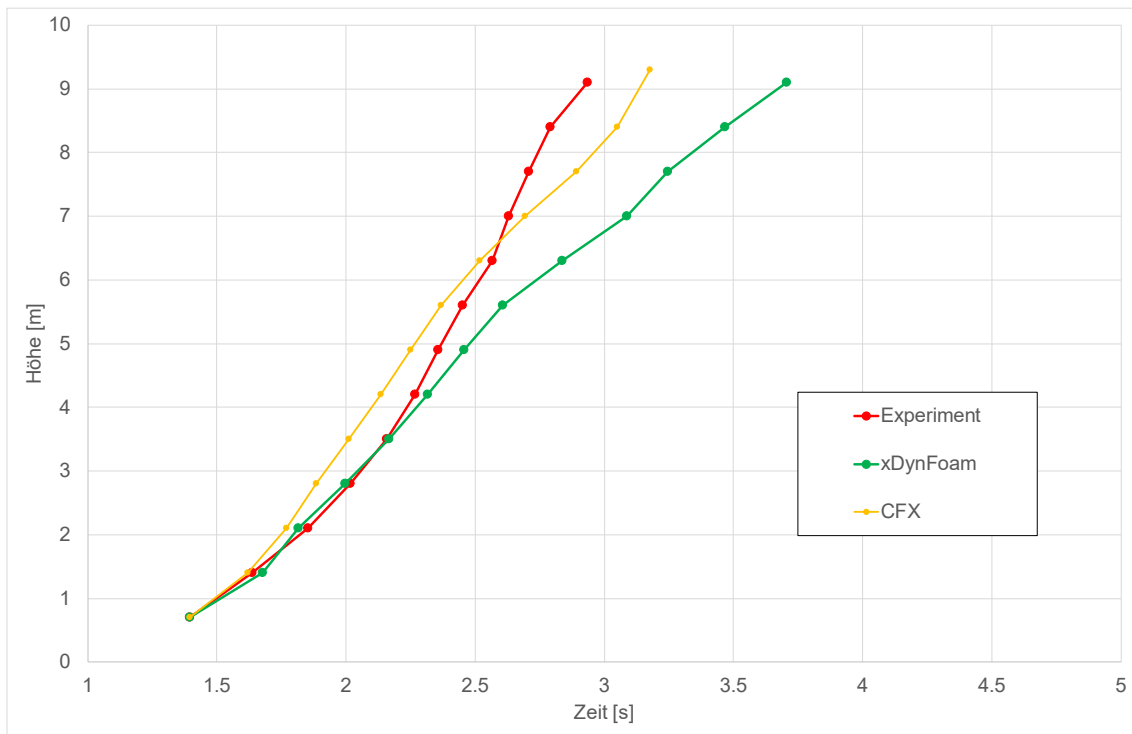


Abb. 3.9 Vergleich von simulierter und experimenteller Flammenausbreitung

3.1.3 THAI-Experiment HD-8

Das THAI-Experiment HD-8 hat ähnliche Startwerte wie das Experiment HD-7:

- H₂: 9,91 Vol.-%
- Druck: 1,487 bar
- Temperatur: 21,5 °C

Allerdings fand bei HD-8 die Zündung oben im Behälter (Höhe: 9,1 m) statt, und es liegt hier eine Flammenausbreitung nach unten vor. Für die xDynFOAM-Simulation der folgenden THAI-Experimente wurde das Coupled-Modell mit dem Maximum-Kriterium wie schon in HD-7 verwendet. Aufgrund der schlechten Übereinstimmung in HD-7 wurde auf die Anwendung des Dinkelacker-Modells verzichtet. Für die Nachrechnung mit xDynFOAM wurden die in Tab. 3.3 dargestellten Modellparameter verwendet. Diese hatten sich bei den Berechnungen zum HD-7 Experiment als gut herausgestellt.

Tab. 3.3 Infobox zum THAI-Experiment HD-8

Experiment	THAI-Experiment HD-8
Phänomene	H ₂ -Verbrennung
Materialien	H ₂ / Luft
Software / Version	OpenFOAM 10
Solver	xDynFOAM
Flammenfaltung	Coupled-Modell (Darrieus-Landau und Dinkelacker, Maximum-Kriterium)
Zeitschritte	Variabel / Max. Courant: 1,0
Turbulenzmodell	kOmegaSST
Strahlungsmodell	fvDOM
Gittererstellung	Pointwise
Elementzahl	1,0 Mio. unstrukturiert (TU-München)

Abb. 3.10 zeigt den Vergleich von berechnetem und gemessenem Druckverlauf. Im Experiment zeigt sich eine längere Phase der langsamen (laminaren) Flammenausbreitung, erst dann erfolgt ein deutlicher Druckanstieg. In der xDynFOAM-Rechnung erfolgt der Druckanstieg schneller. Von diesem Unterschied abgesehen ist der Druckanstieg in xDynFOAM ähnlich zum Experiment. Auch der Maximaldruck wird gut getroffen. Da dieser Versuch nicht mit CFX gerechnet wurde, kann an dieser Stelle auch kein Vergleich dazu durchgeführt werden. In Abb. 3.11 werden die berechnete und simulierte Flammenausbreitung entlang der Mittelachse miteinander verglichen. Insbesondere im oberen Bereich ist die Flammenausbreitung bei xDynFOAM deutlich schneller als im Experiment. Die Phase der langsamen Flammenausbreitung im oberen Bereich (9 m – 7 m Höhe) wird also nicht gut wiedergegeben. Für die tieferliegenden Messpunkte wird eine bessere Übereinstimmung erzielt.

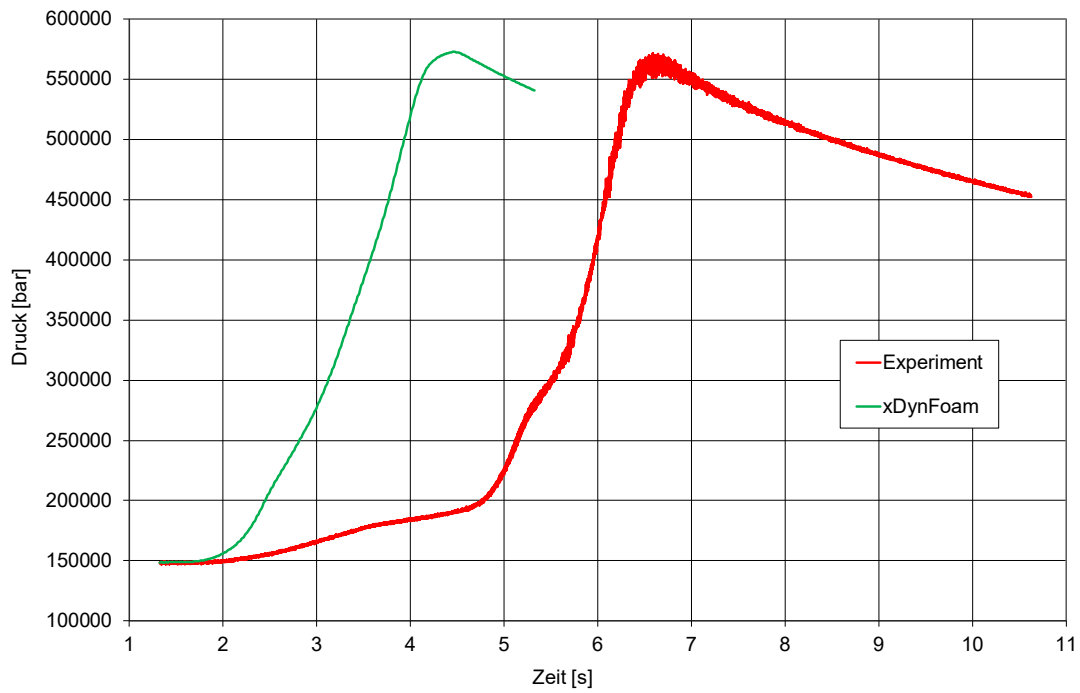


Abb. 3.10 Vergleich von simulierten und experimentellem Druckverlauf beim HD-8-Experiment

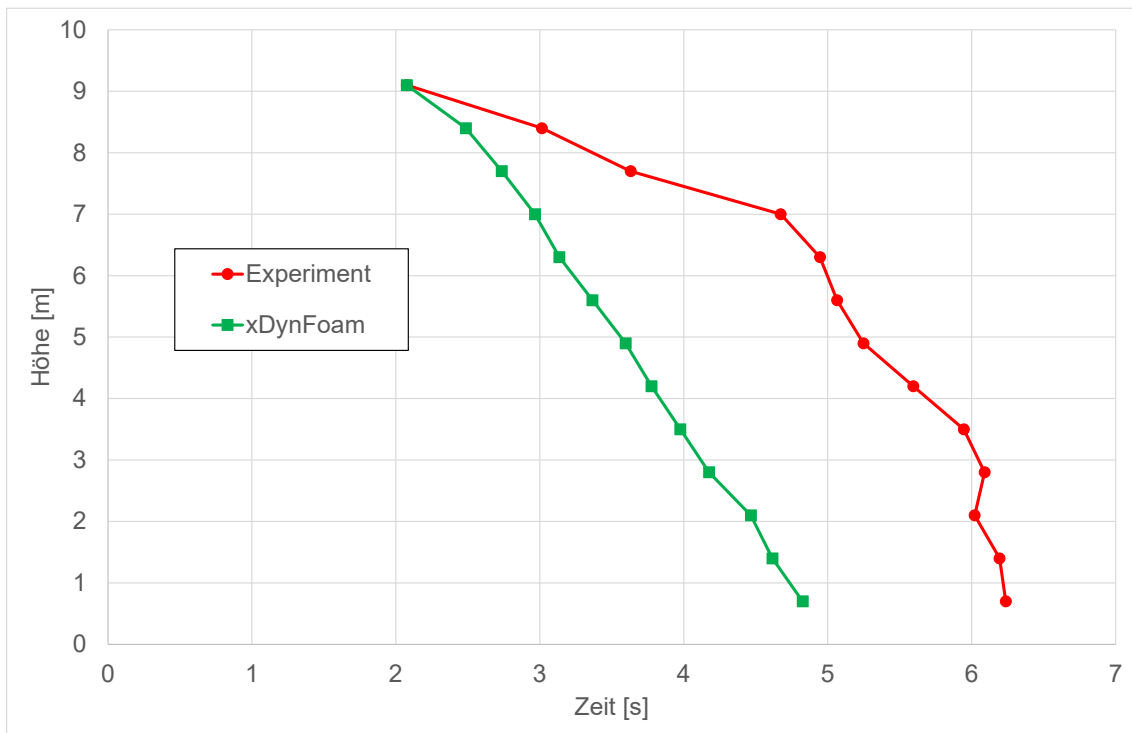


Abb. 3.11 Vergleich von simulierter und experimenteller Flammenausbreitung (HD-8)

3.1.4 THAI-Experiment HD-10

Das Experiment HD-10 hatte eine höhere H₂-Startkonzentration von 11,84 Vol.-% H₂, einen Anfangsdruck von 1,498 bar und eine Anfangstemperatur von 30,0 °C. Es wurde auch oben (in 9,1 m Höhe) im THAI-Behälter gezündet und die Flamme breitete sich von oben nach unten aus. In Tab. 3.4 finden sich die verwendeten Parameter für die xDynFOAM-Rechnung.

Tab. 3.4 Infobox zum THAI-Experiment HD-10

Experiment	THAI-Experiment HD-10
Phänomene	H ₂ -Verbrennung
Materialien	H ₂ / Luft
Software / Version	OpenFOAM 10
Solver	xDynFOAM
Flammenfaltung	Coupled-Modell (Darrieus-Landau und Dinkelacker, Maximum-Kriterium)
Zeitschritte	Variabel / Max. Courant: 1,0
Turbulenzmodell	kOmegaSST
Strahlungsmodell	fvDOM
Gittererstellung	Pointwise
Elementzahl	1,0 Mio. unstrukturiert (TU-München)

Abb. 3.12 zeigt den Vergleich von simuliertem und gemessenen Druckverlauf. Hier fällt auf, dass in den Rechnungen (xDynFOAM und CFX mit modifiziertem Dinkelacker-Modell) wie beim Versuch HD-8 die anfängliche Phase der langsamen Verbrennung und des langsamen Druckanstieges nicht richtig wiedergegeben wird. Insbesondere in der xDynFOAM-Rechnung kommt es zu einer schnelleren Flammenbeschleunigung und einem schnelleren Druckanstieg. Dieses führt auch zu einem etwas höheren Maximaldruck bei der xDynFOAM-Rechnung. Die CFX-Rechnung trifft den experimentellen Verlauf hier besser. Entsprechend zeigt sich auch beim Flammenfortschritt (siehe Abb. 3.13), dass die xDynFOAM-Rechnung eine zu schnelle Ausbreitung berechnet und dass die CFX-Rechnung hier besser zum Experiment passt.

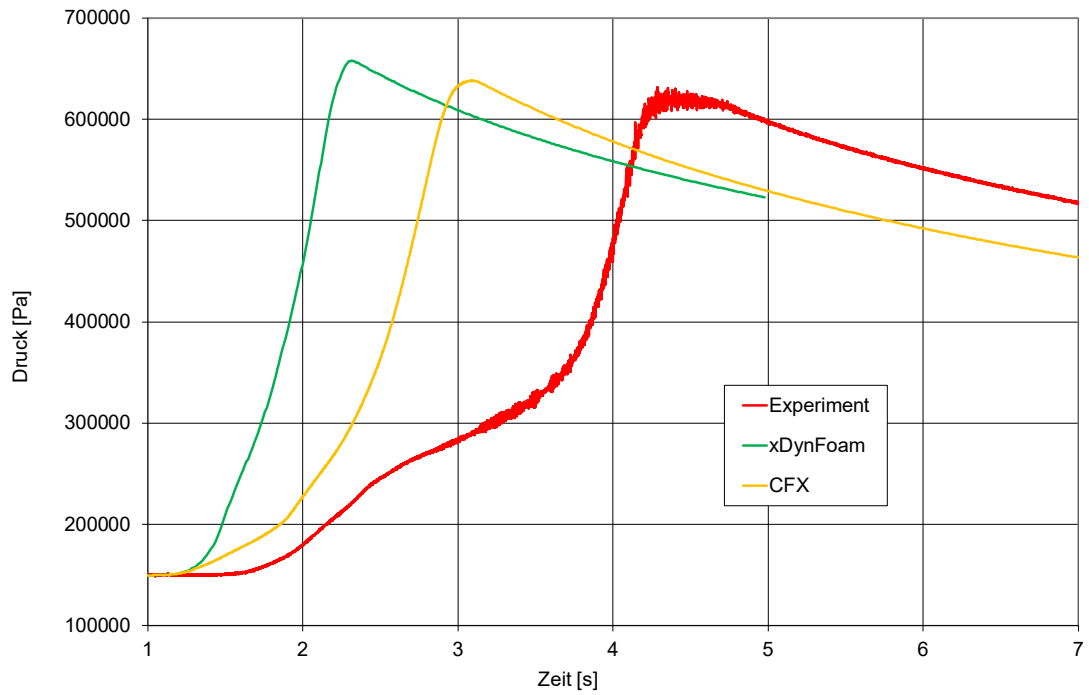


Abb. 3.12 Vergleich von simuliertem und experimentellem Druckverlauf beim HD-10-Experiment

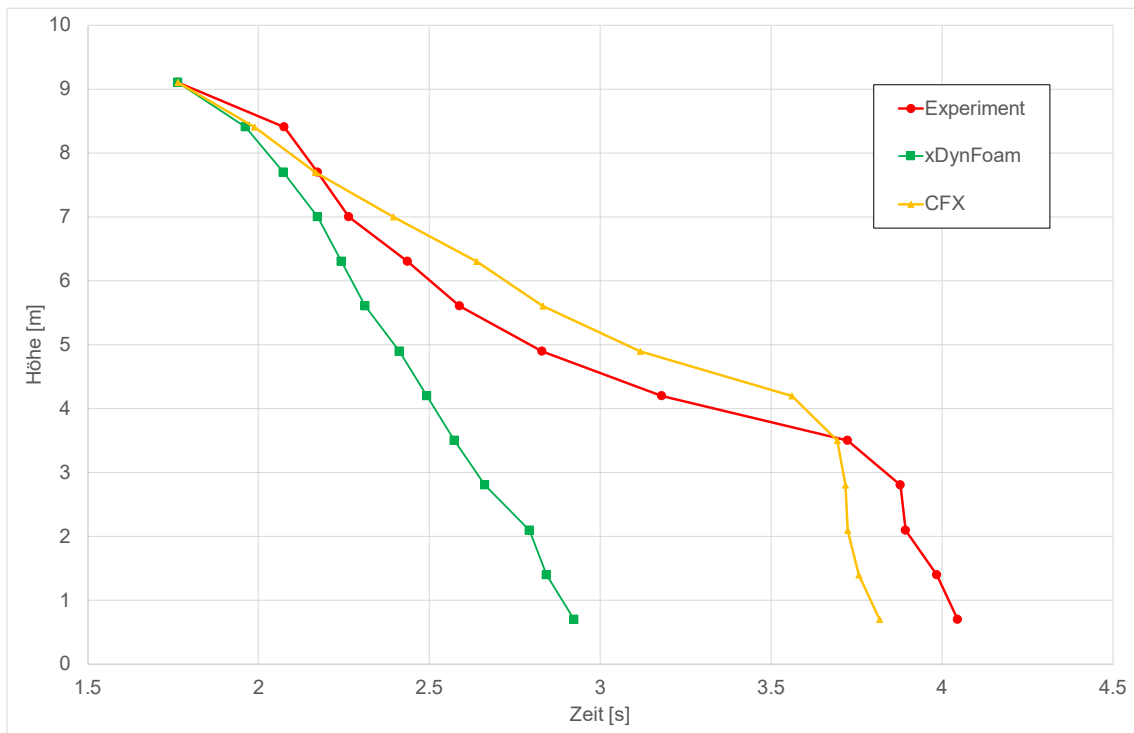


Abb. 3.13 Vergleich von simulierter und experimenteller Flammenausbreitung (HD-10)

3.1.5 THAI-Experiment HD-12

Beim Experiment HD-12 handelt es sich um ein weiteres Experiment mit einer Zündung unten (in 0,5 m Höhe), genau wie beim Experiment HD-7. Allerdings ist bei HD-12 die Anfangskonzentration von H₂ etwas geringer (hier: 7,98 Vol.-%). Der Startdruck lag bei 1,485 bar und die Starttemperatur bei 18 °C. Es gab ein weiteres Experiment, das mit sehr ähnlichen Bedingungen startete (HD-2R). Die Ergebnisse dieses Experimentes werden im Folgenden zusätzlich gezeigt. In Tab. 3.5 finden sich die Parameter für die xDynFOAM-Berechnung. Hier wurden wieder die gleichen Einstellungen wie bei den bisherigen Rechnungen gewählt (Coupled-Modell, kOmegaSST-Turbulenz, fvDOM-Strahlungsmodell, Max. Courant 1,0). Dieser Versuch wurde bisher nicht mit dem in RS1562 /SCH 22a/ entwickelten modifizierten Dinkelacker-Modell simuliert. Deshalb entfällt der Vergleich mit CFX.

Tab. 3.5 Infobox zum THAI-Experiment HD-12

Experiment	THAI-Experiment HD-12
Phänomene	H ₂ -Verbrennung
Materialien	H ₂ / Luft
Software / Version	OpenFOAM 10
Solver	xDynFOAM
Flammenfaltung	Coupled-Modell (Darrieus-Landau und Dinkelacker), Maximum-Kriterium
Zeitschritte	Variabel / Max. Courant: 1,0
Turbulenzmodell	kOmegaSST
Strahlungsmodell	fvDOM
Gittererstellung	Pointwise
Elementzahl	1,0 Mio. unstrukturiert (TU-München)

In Abb. 3.14 wird der berechnete Druckverlauf mit den experimentellen Werten verglichen. Der Druckanstieg beginnt etwas früher, ist aber insgesamt etwas langsamer als im Experiment. Dieses ist ähnlich wie beim Experiment HD-7, welches auch unten gezündet wurde und aufwärts brannte. Abb. 3.15 zeigt den Vergleich der Flammenausbreitung. Hier sieht man auch eine etwas langsamere Ausbreitung in der Simulation. Insgesamt passen aber sowohl Druckverlauf als auch Flammenausbreitung gut zu den experimentellen Werten.

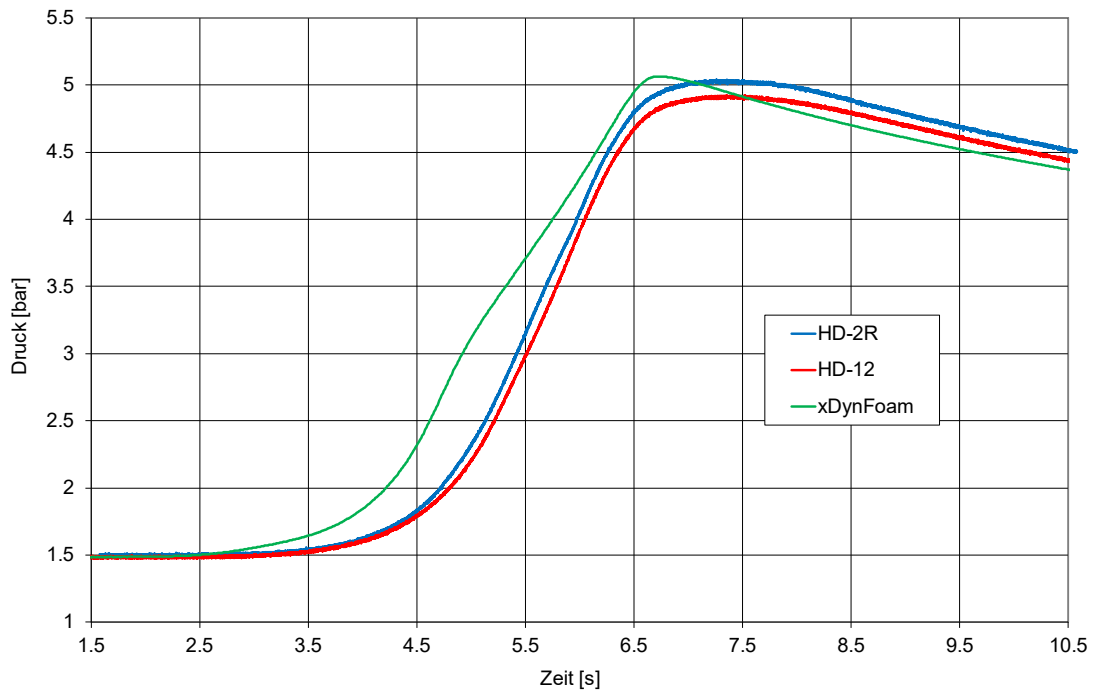


Abb. 3.14 Vergleich von simuliertem und experimentellem Druckverlauf beim HD-12-Experiment

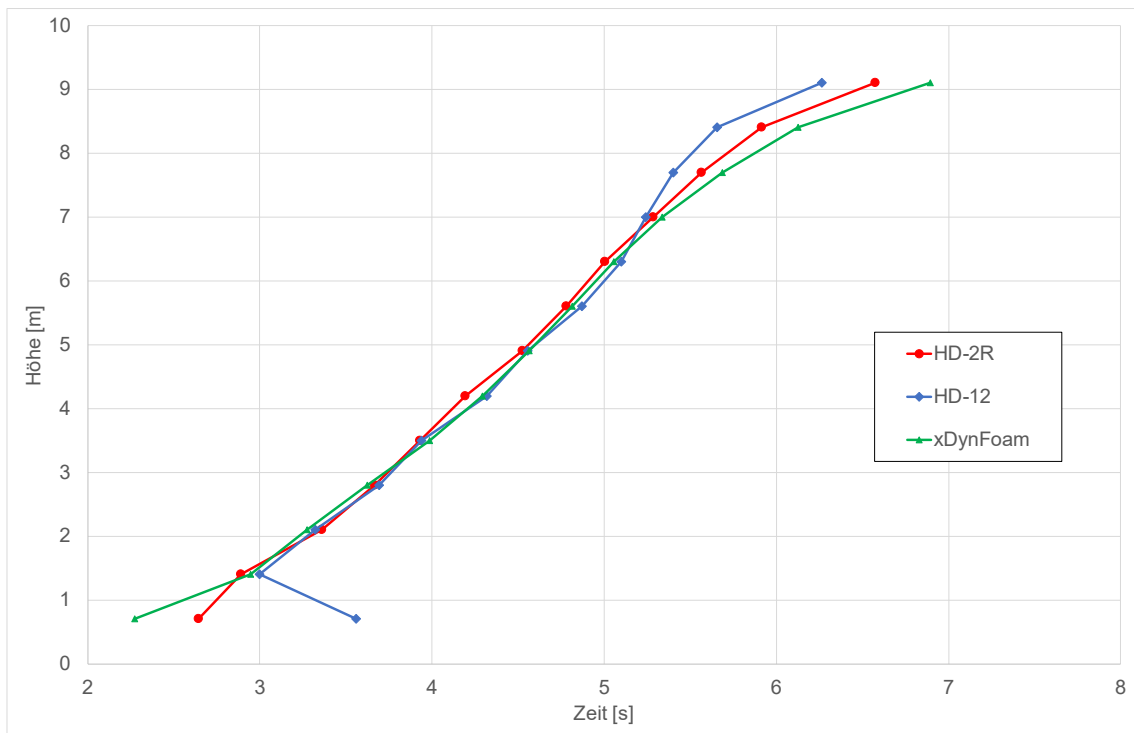


Abb. 3.15 Vergleich von simulierter und experimenteller Flammenausbreitung

3.1.6 ENACCEF-2-Experiment

3.1.6.1 Experimenteller Aufbau

ENACCEF-2 /BEN 18/ ist ein vertikales Beschleunigungsrohr mit einer Höhe von 7,65 m und einem Durchmesser von 0,23 m (siehe Abb. 3.16 links). Es enthält 9 ringförmige Hindernisse mit einer Blockage-Ratio von 0,63 (siehe Abb. 3.16 rechts). Das verwendete Experiment hatte eine Startkonzentration von 13 Vol.-% H₂ in Luft, einen Anfangsdruck von 1,0 bar und eine Anfangstemperatur von 20 °C. Gezündet wurde unten im Rohr. Im Bereich der Hindernisse kommt es zu einer Beschleunigung der Flammenausbreitung durch Turbulenz.

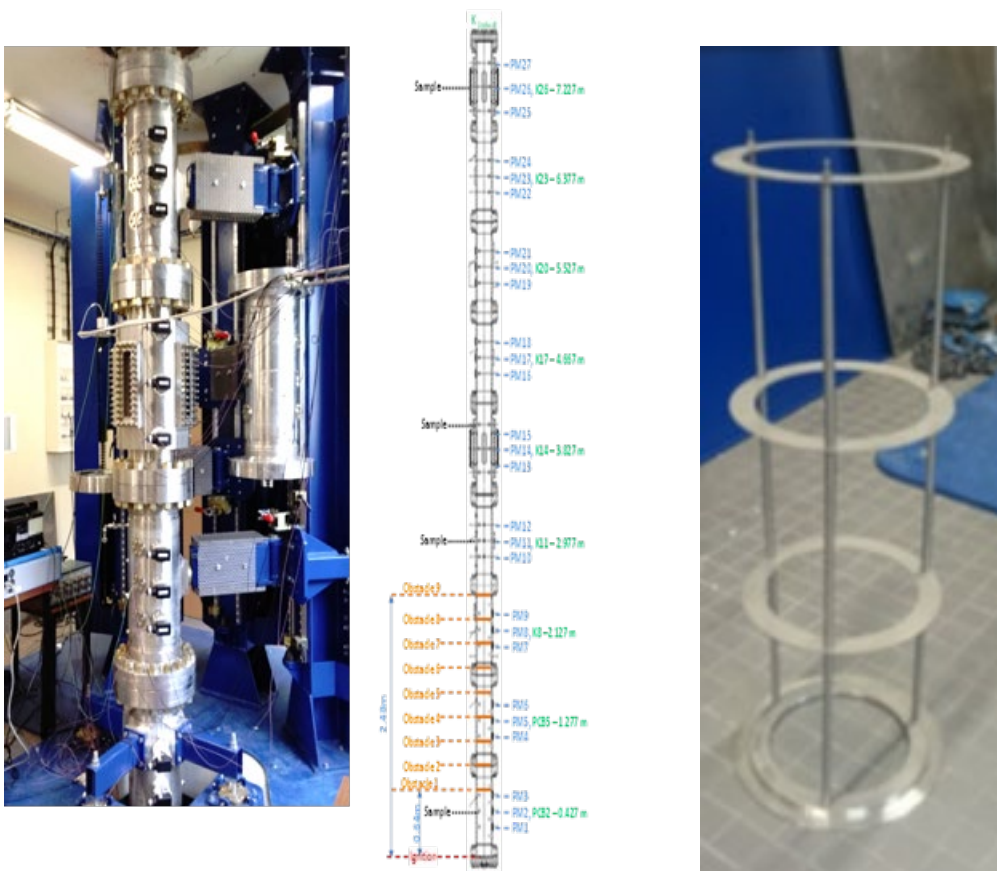


Abb. 3.16 Links: ENACCEF-2-Rohr, rechts: ringförmige Hindernisse

3.1.6.2 CFD-Gitter und Setup

Der ENACCEF-2-Versuch wurde wieder mit xDynFOAM nachgerechnet. Dabei wurde für die Flammenfaltung sowohl das Dinkelacker-Modell als auch das Coupled-Modell verwendet. Das Gitter war ein strukturiertes Gitter mit ca. 2,3 Millionen Elementen. Dieses wurde im Bereich der Strömungshindernisse verfeinert (siehe Abb. 3.17). Weitere Details zum Setup finden sich in Tab. 3.6.

Tab. 3.6 Infobox zum ENACCEF-2-Experiment

Experiment	ENACCEF-2
Phänomene	H ₂ -Verbrennung
Materialien	H ₂ / Luft
Software / Version	OpenFOAM 10
Solver	xDynFOAM
Flammenfaltung	Dinkelacker-Modell oder Coupled-Modell (Darrieus-Landau und Dinkelacker)
Zeitschritte	Variabel / Max. Courant: 1,0
Turbulenzmodell	kOmegaSST
Strahlungsmodell	fvDOM
Gittererstellung	Pointwise
Elementzahl	2 251 264 strukturierte Elemente

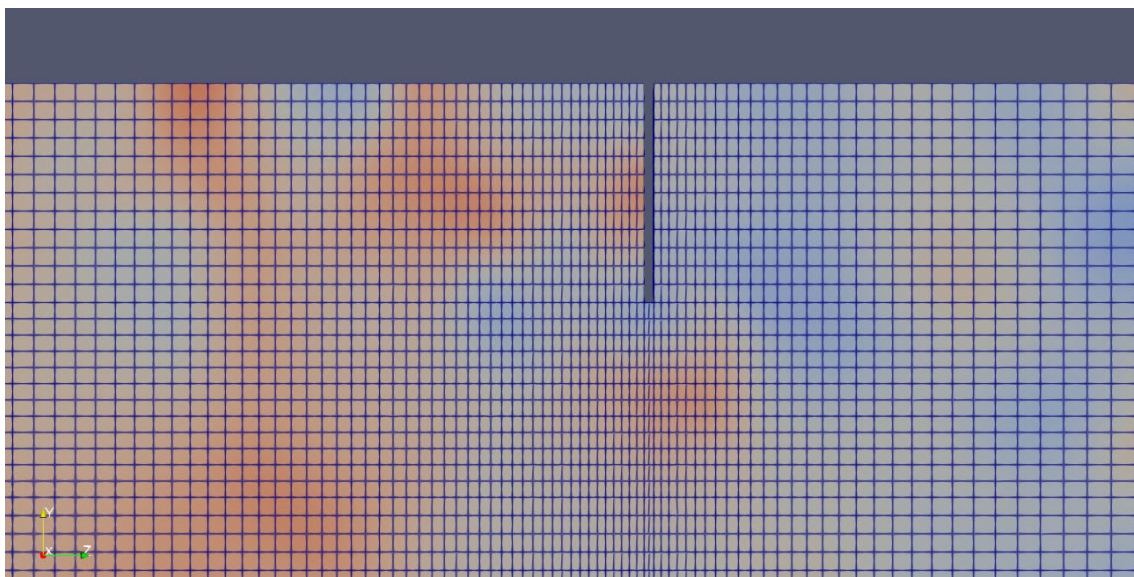


Abb. 3.17 CFD-Gitter(-Verfeinerung) an einem Hindernis

3.1.6.3 Vergleich mit CFX und experimentellen Werten

In Abb. 3.18 bis Abb. 3.21 wird der simulierte Druckverlauf an unterschiedlichen Messpositionen mit den experimentellen Werten verglichen. Vom Experiment werden zwei unterschiedliche Kurven (RUN63 und RUN64) gezeigt, die identische Wiederholungsexperimente darstellen. Beim ersten Messpunkt in 1,2 m Höhe zeigt sich ein zu langsamer, etwas zu schwacher erster Druckanstieg (siehe Abb. 3.18). Ansonsten passen die Druckverläufe insgesamt gut zu den experimentellen Werten. Die Rechnung mit dem Coupled-Modell zeigt teilweise etwas höhere Druckpeaks als die Rechnung mit dem Dinkelacker-Modell (siehe z. B. Abb. 3.20 oder Abb. 3.21), was etwas besser zu den experimentellen Werten passt. Die Druckverläufe sind ähnlich zu den mit CFX (modifiziertes Dinkelacker-Modell A = 2, B = 3) berechneten Verläufen. Insgesamt ist der Druck in den xDynFOAM-Rechnungen aber ab ca. 0,05 s etwas höher als der von CFX berechnete Druck.

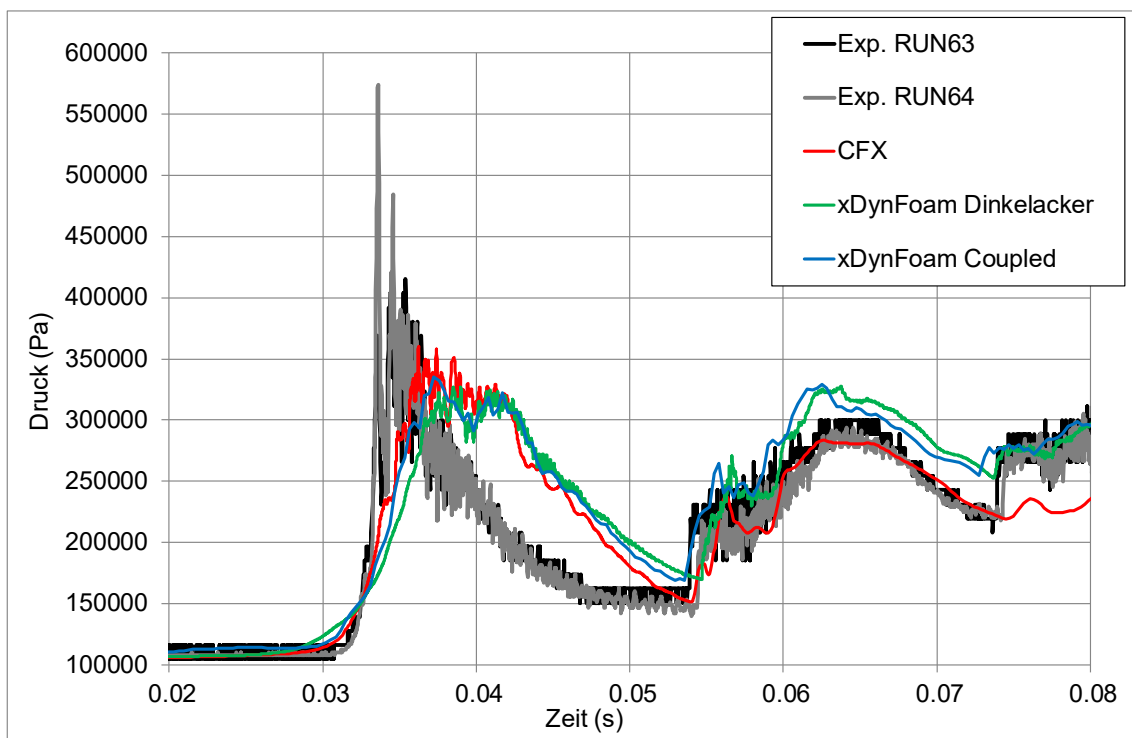


Abb. 3.18 Druckverlauf in 1,2 m Höhe

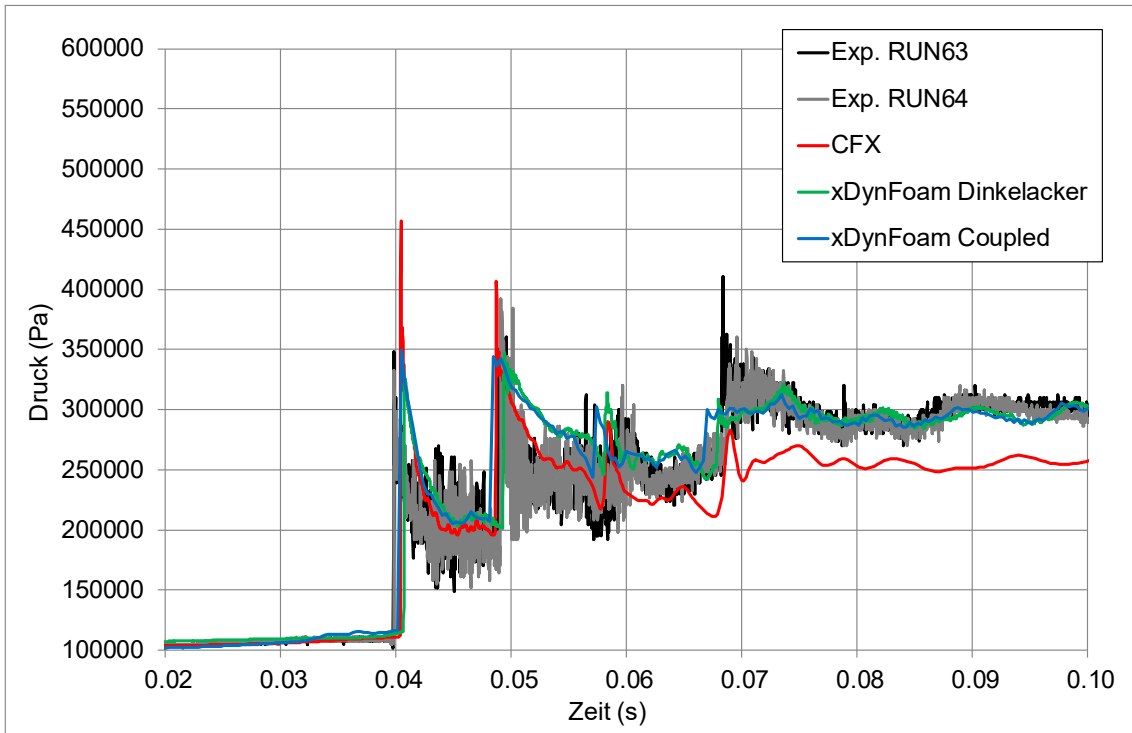


Abb. 3.19 Druckverlauf in 5,527 m Höhe

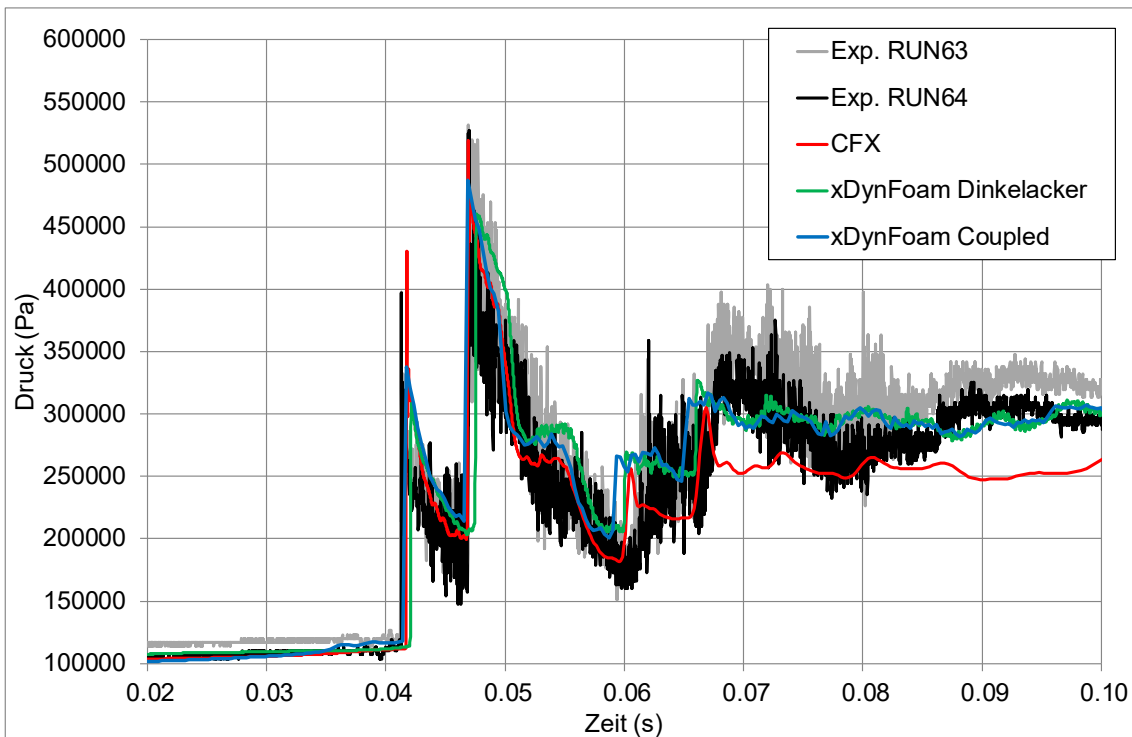


Abb. 3.20 Druckverlauf in 6,377 m Höhe

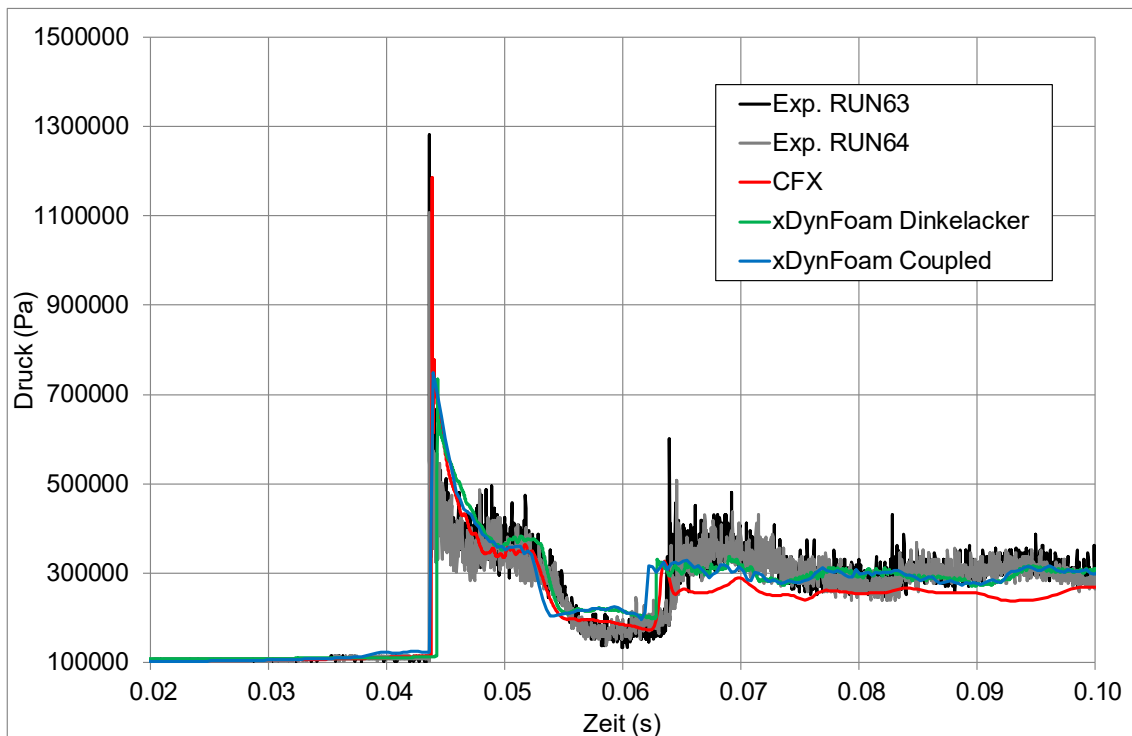


Abb. 3.21 Druckverlauf in 7,65 m Höhe

In Abb. 3.22 wird die Entwicklung der Flammengeschwindigkeit über der Höhe gezeigt. Der erste Anstieg in einer Höhe zwischen einem und zwei Metern wird besser von der Rechnung mit dem Coupled-Modell wiedergegeben. Beim Dinkelacker-Modell ist die Flammenbeschleunigung deutlich langsamer als im Experiment. Die berechnete Maximalgeschwindigkeit wird deutlich unterschätzt und die Position des Maximums ist etwas verschoben.

Beide xDynFOAM-Simulationen berechnen zu hohe Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten im Bereich 3 m – 4 m. Die Verlangsamung der Flammenausbreitung nach den Hindernissen wird von beiden Simulationen unterschätzt. Die CFX-Simulation mit dem modifizierten Dinkelacker-Modell zeigt in Hinblick auf die Beschleunigung der Flamme an den Hindernissen und im Hinblick auf die Verlangsamung der Flamme nach den Hindernissen eine etwas bessere Übereinstimmung als die xDynFOAM-Simulation mit dem Coupled-Modell. Die xDynFOAM mit dem Dinkelacker-Modell zeigt die schlechteste Übereinstimmung.

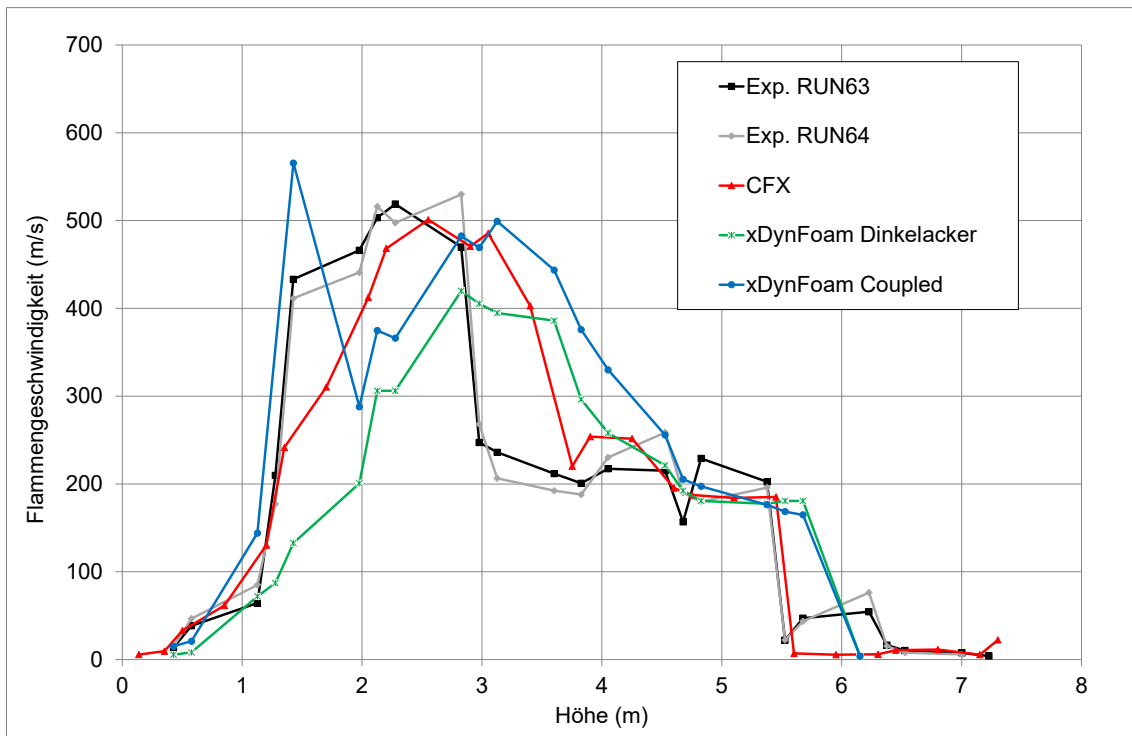


Abb. 3.22 Entwicklung der Flammengeschwindigkeit

3.1.7 GraVent-Experiment

Bei den GraVent-Experimenten /ETT 11/ wurden H_2 -Verbrennungen in einem rechteckigen Kanal durchgeführt. Unterschiedliche Hinderniskonfigurationen sorgten für Turbulenz- und Flammenbeschleunigung.

3.1.7.1 Experimenteller Aufbau

Der prinzipielle Aufbau der Anlage ist in Abb. 3.23 dargestellt. Abb. 3.24 zeigt eine schematische Darstellung des Explosionskanals mit den Hindernissen. Nach der Hindernisstrecke (2 m) kommt noch die Hauptkammer. Insgesamt hat der Kanal die Dimensionen 6 cm x 30 cm x 540 cm (Breite x Höhe x Länge). Untersucht wird hier das Experiment BR30hS100_25H2. Es handelt sich um ein Experiment mit anfänglich 25 Vol.-% H_2 und einer Blockage-Ratio von 30 % durch die Hindernisse. Diese hatten voneinander einen Abstand von 100 mm. Die Trennplatte zur Überströmkammer war vollständig geschlossen.

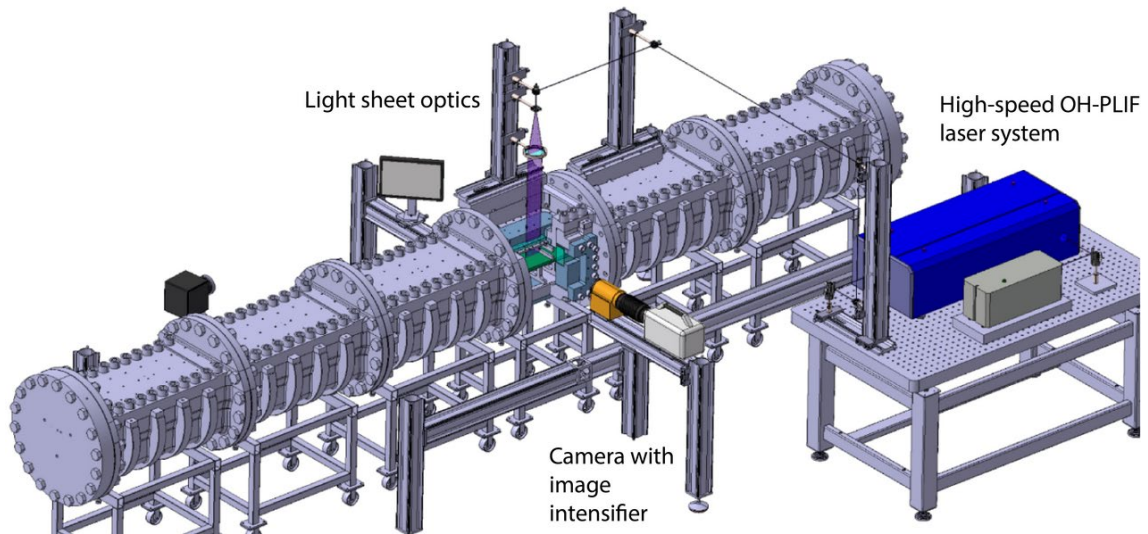


Abb. 3.23 Ansicht der GraVent-Anlage /DON 25/

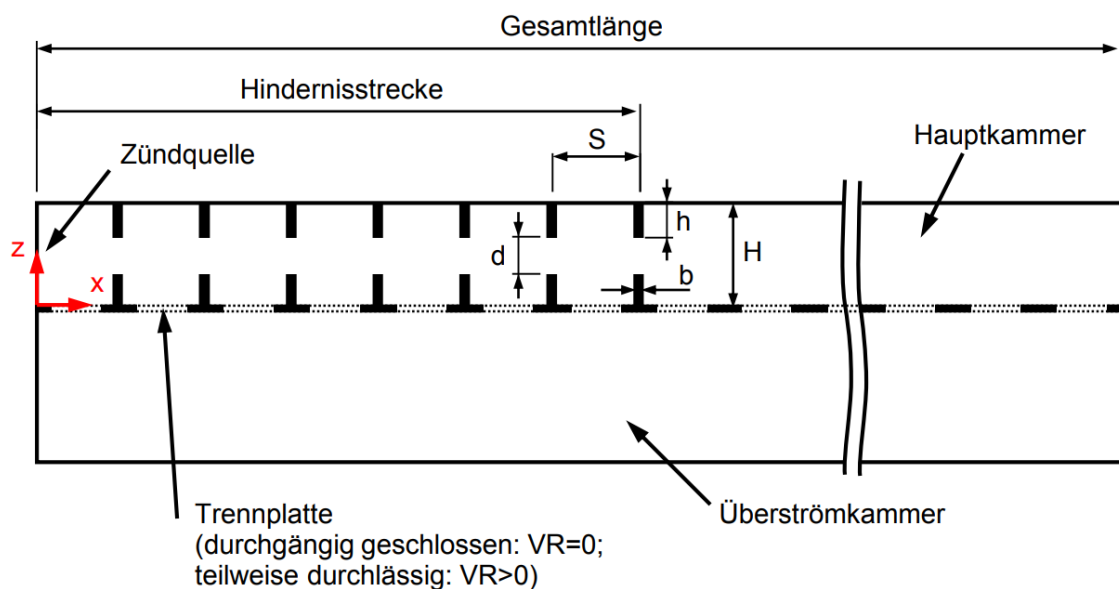


Abb. 3.24 Schematische Darstellung des Explosionskanals /VOL 15/

3.1.7.2 GraVent: CFD-Gitter und Setup

Die wichtigsten Berechnungsparameter für die Simulation mit xDynFOAM sind in Tab. 3.7 dargestellt. Es wurde, wie bei ENACCEF-2, das Coupled-Modell für die Flammenfaltung verwendet. Für die Turbulenz wurde das kOmegaSST-Modell verwendet und für die Strahlung das fvDOM-Modell. DDT wurde mit dem Heat-Release-Modell von Ettner /ETT 13/ simuliert.

Tab. 3.7 Infobox zum GraVent-Experiment

Experiment	GraVent BR30hS100_25H2
Phänomene	H ₂ -Verbrennung
Materialien	H ₂ / Luft
Software / Version	OpenFOAM 10
Solver	xDynFOAM
Flammenfaltung	Coupled-Modell (Darrieus-Landau und Dinkelacker)
DDT	DDT-Modell an Heat-Release-Modell: Ettner, Barfuss
Zeitschritte	Variabel / Max. Courant: 0,3
Turbulenzmodell	kOmegaSST
Strahlungsmodell	fvDOM
Gittererstellung	Pointwise
Elementzahl	96 000 bis 797 000 strukturierte Elemente

Zur Untersuchung des Gittereinflusses wurden drei Rechnungen mit 96 000, 265 000 und 797 000 Elementen durchgeführt. Das Ergebnis ist in Abb. 3.25 dargestellt. Zwischen der Rechnung mit 96 000 und der Rechnung mit 265 000 Elementen gibt es noch einen deutlichen Unterschied. Dieser wird kleiner beim Vergleich der Rechnungen mit 265 000 Elementen und 797 000 Elementen. Für alle weiteren Rechnungen wurde das feinste Gitter verwendet, hier ist der Diskretisierungsfehler am kleinsten. Bei dieser Gitterstudie wurde allerdings ein falscher Startdruck (70 bar statt 1 bar) angenommen. Die Aussagen über den Gittereinfluss sollten aber ähnlich sein. Im Folgenden wird dieser falsche Startdruck korrigiert, was aber zu niedrigeren Flammengeschwindigkeiten führt.

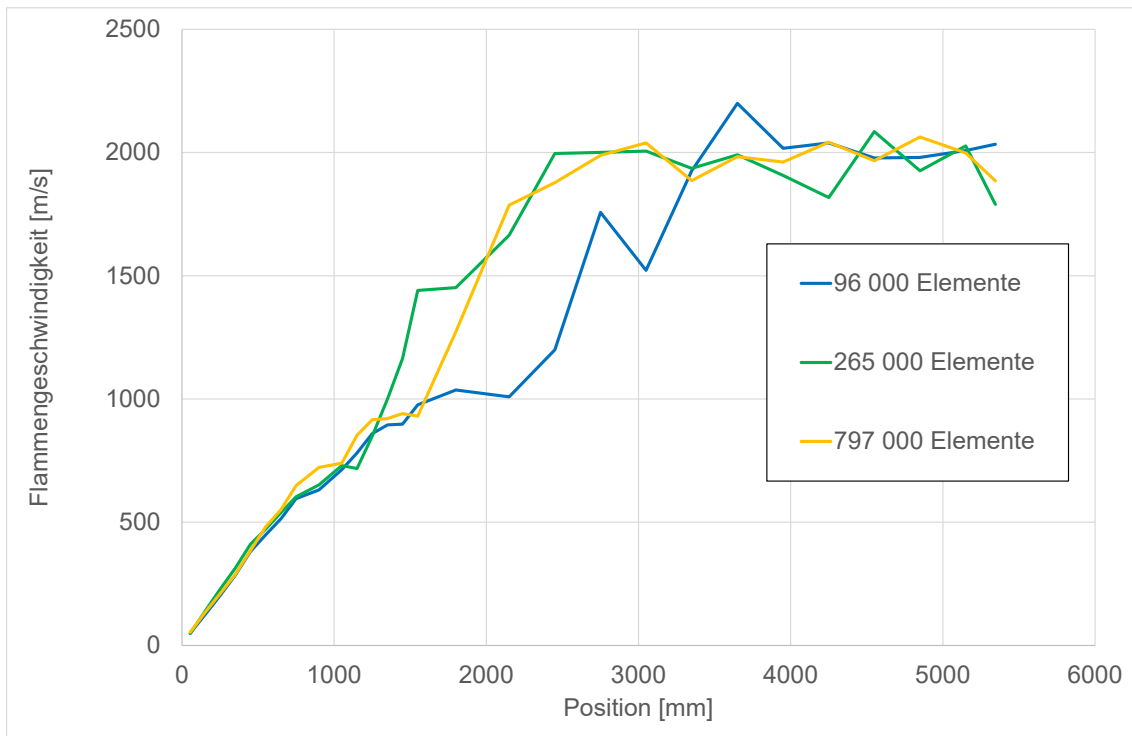


Abb. 3.25 Einfluss der Gitterfeinheit auf die Flammgeschwindigkeit

3.1.7.3 Einfluss des Heat-Release-Modells

In xDynFOAM gibt es die Option, zwischen unterschiedlichen Heat-Release-Modellen zu wählen. Für einen Vergleich wurde einmal mit dem Modell nach Ettner gerechnet und einmal mit dem Modell nach Barfuss. Diesmal wurde mit dem korrekten Startdruck von 1 bar gerechnet. Die Ergebnisse werden in Abb. 3.26 miteinander verglichen. Es zeigt sich nur ein sehr geringer Unterschied zwischen den beiden Modellen. Allerdings erfolgt bei den Simulationen im Gegensatz zum Experiment kein Übergang zu einer Detonation, so dass diese Simulationen nur bedingt geeignet sind, das Heat-Release-Modell zu testen.

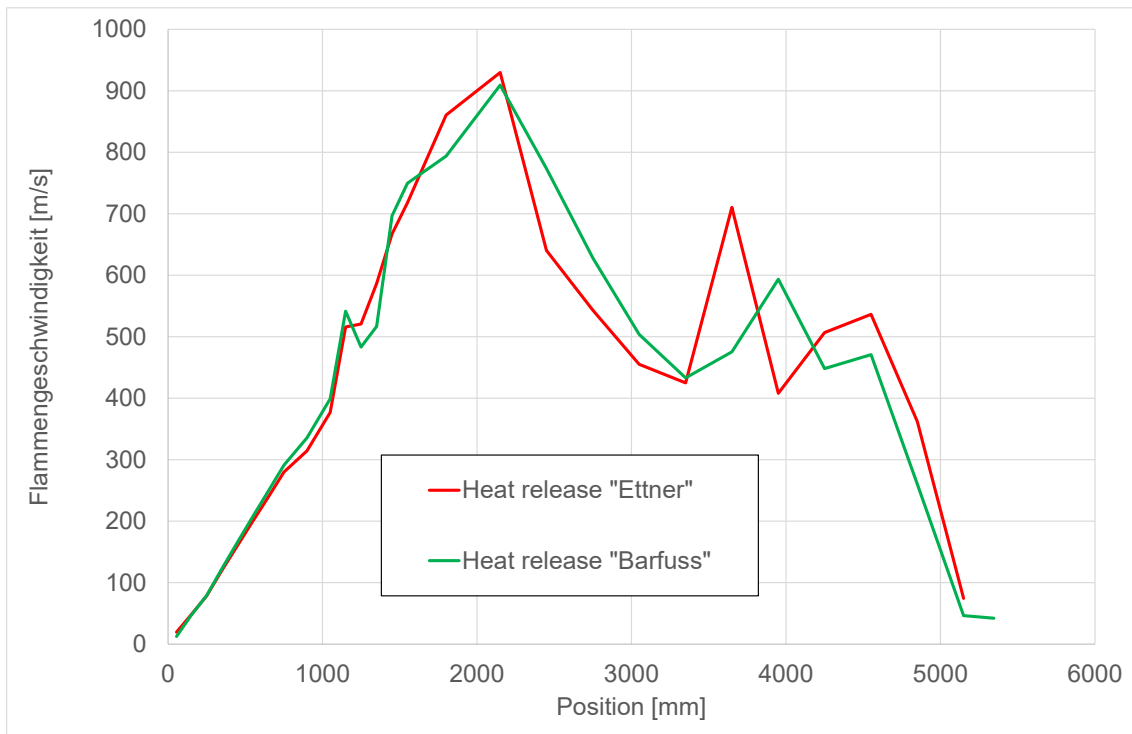


Abb. 3.26 Einfluss des Heat-Release-Modells auf die Flammengeschwindigkeit

3.1.7.4 Vergleich mit experimentellen Werten

Die Berechnung mit dem feinsten Gitter und dem korrigierten Startdruck (1 bar) wird in Abb. 3.27 mit den experimentellen Flammengeschwindigkeiten verglichen. Bis zur Position von ca. 500 mm stimmt der Verlauf gut mit dem Experiment überein. Danach berechnet xDynFOAM zu niedrige Flammengeschwindigkeiten. Insbesondere wird auch der Übergang zu detonativen Geschwindigkeiten zwischen 1000 und 2000 mm von der Simulation nicht wiedergegeben. Nach dem Ende der Beschleunigungsstrecke bei 2000 mm fällt die Flammengeschwindigkeit in der xDynFOAM-Berechnung ab.

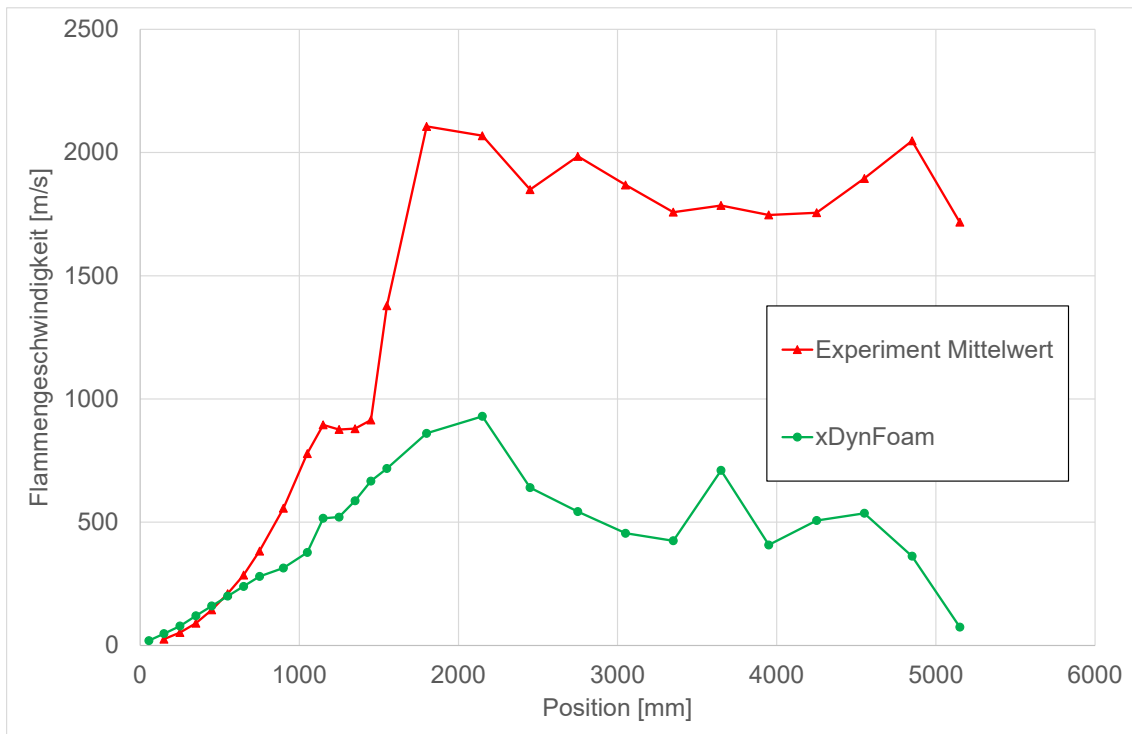


Abb. 3.27 GraVent: Vergleich mit experimentellen Werten

3.1.8 Zusammenfassung AP2.1 (OpenFOAM-Solver für H₂-Verbrennungen)

Ziel dieses Arbeitspunktes war die Erstellung und Validierung eines OpenFOAM-Referenzsolvers zur Simulation von H₂/CO/Dampf/Luft-Verbrennung. Hierzu wird auf einem Solver der TU-München (xDynFOAM) aufgesetzt. Die GRS hat mit diesem Solver mehrere unterschiedliche Versuche (THAI-Versuche HD-Serie (HD-7, HD-8, HD-10, HD-12), ENACCEF-2 und GraVent) nachgerechnet, die unterschiedliche Verbrennungsbereiche abdecken (langsame Verbrennung (THAI), schnelle turbulent-beschleunigte Verbrennung, (ENACCEF-2) und DDT/Detonation (GraVent)).

Insgesamt findet sich eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit den experimentellen Werten für langsame und turbulent-beschleunigte Verbrennung. Hierbei gibt es aber auch noch Bedarf für weitere Verbesserung, z. B. im Hinblick auf langsame abwärts gerichtete Verbrennung und turbulente Flammenbeschleunigung. Zudem konnte für die THAI-Experimente keine gitterunabhängige Lösung gefunden werden. DDT konnte für den ausgewählten GraVent-Versuch nicht berechnet werden, da die Flammenbeschleunigung unterschätzt wurde. Nachrechnungen mit einem deutlich höheren Druck zeigen aber, dass der Code prinzipiell in der Lage ist, DDT bzw. Detonation zu berechnen.

3.2 AP 2.2 Kopplung von CFD und CSM

3.2.1 Zielsetzung

Für die Durchführung von Multi-Physik-Analysen zur Fluid-Struktur-Interaktion (FSI) sind geeignete Kopplungen von OpenFOAM zu einem CSM-Programm erforderlich. In diesem Arbeitspaket wird eine Kopplung von OpenFOAM mit LS-DYNA durchgeführt. Hierzu sind die folgenden Arbeiten notwendig:

- Erstellung von Rechenmodellen für OpenFOAM und LS-DYNA
- Kopplung der beiden Rechenmodelle
- Überprüfung der Schnittstelle anhand von Versuchsnachrechnungen

Für die Versuche wurden ein HySEA-Experiment, Offermann-Versuche und ein Gra-Vent-Experiment verwendet. Die durchgeführten Arbeiten werden im Folgenden – beginnend mit dem HySEA-Experiment – erläutert.

3.2.2 Erstellung von Rechenmodellen für OpenFOAM und LS-DYNA

3.2.2.1 Versuchsbeschreibung

Zur Untersuchung der Fluid-Struktur-Wechselwirkung werden die sogenannten HySEA-Experimente verwendet /FIN 17a/, /FIN 17b/. Diese wurden im Rahmen des EU-Projektes "Improving Hydrogen Safety for Energy Applications (HySEA) through pre-normative research on vented deflagrations", (Projektnummer 671461) durchgeführt. Dabei wurden unter anderem H₂-Verbrennungen in einem kleinen Behälter durchgeführt und die Reaktion der Strukturen darauf untersucht. Der Behälter ist in Abb. 3.28 dargestellt, für ihn wird der Name „Small-scale enclosure (SSE)“ verwendet. Er hat die Maße 2,0 m x 0,92 m x 0,62 m (Höhe x Breite x Tiefe). Er soll damit einem typischen Behälter entsprechen, in dem einige H₂-Flaschen deponiert werden, z. B. als Flaschengehäuse, bei H₂-Zapfsäulen oder bei Notstromanlagen. An den vorderen zwei Platten wurde an unterschiedlichen Positionen mit Hilfe eines Lasers die Auslenkung der Platten während der H₂-Verbrennung im Inneren des Behälters gemessen. Im Inneren des SSE-Behälters wurde an zwei Positionen der Druckverlauf gemessen. Entsprechend der gedachten Anwendung wurden Versuche mit und ohne H₂-Flaschen im Inneren des Behälters durchgeführt. Diese wirken als Strömungshindernisse. An der oberen Seite gab es eine Berstscheibe, die bei zu hohem Druck öffnete.

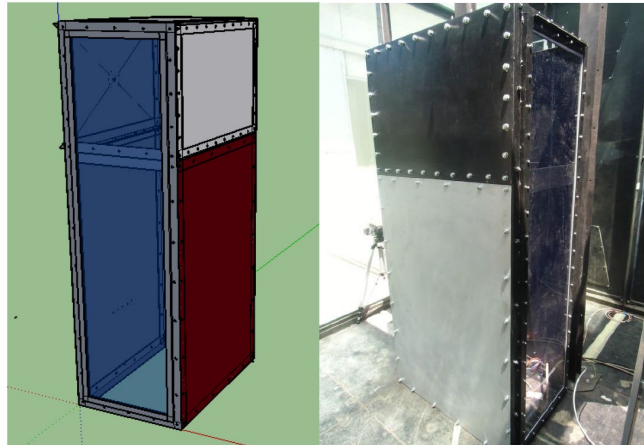


Abb. 3.28 Behälter „Small-scale enclosure (SSE)“ für die HySEA-Experimente
/FIN 17a/

In Tab. 3.8 werden die Parameter zu einem der HySEA-Experimente aufgeführt. Bei diesem Experiment (TP37) wurden 14,1 Vol.-% H_2 gezündet (in 0,5 m Höhe über dem Boden). Im Inneren des SSE gab es drei Gasflaschen als Hindernisse. Die Auslenkung der oberen Probenplatte wurde in deren Mitte gemessen. Diese Probenplatte war eine Stahlplatte mit einer Dicke von 5 mm. Bei diesem Experiment öffnete die Berstscheibe bei einem Druck von 225 mbar (gemessen am seitlichen Druckfühler), danach fiel der Druck im Behälter wieder ab. Der experimentelle Druckverlauf ist in Abb. 3.29 dargestellt. In Abb. 3.30 ist die daraus resultierende Auslenkung der Stahlplatte zu sehen.

Im Folgenden werden Rechenmodelle für die H_2 -Verbrennung (mit OpenFOAM) und die Reaktion der Stahlplatte (mit LS-DYNA) erstellt.

Tab. 3.8 Parameter für das HySEA-Experiment TP37

Test-ID	H_2 -Konzentration	Venting	Zündung	Hindernisse	Dicke Testplatte	Lasermessung
TP37	14,1 Vol.-%	Oben	Unten (0,5 m Höhe)	3 Flaschen	5 mm	Plattenmitte

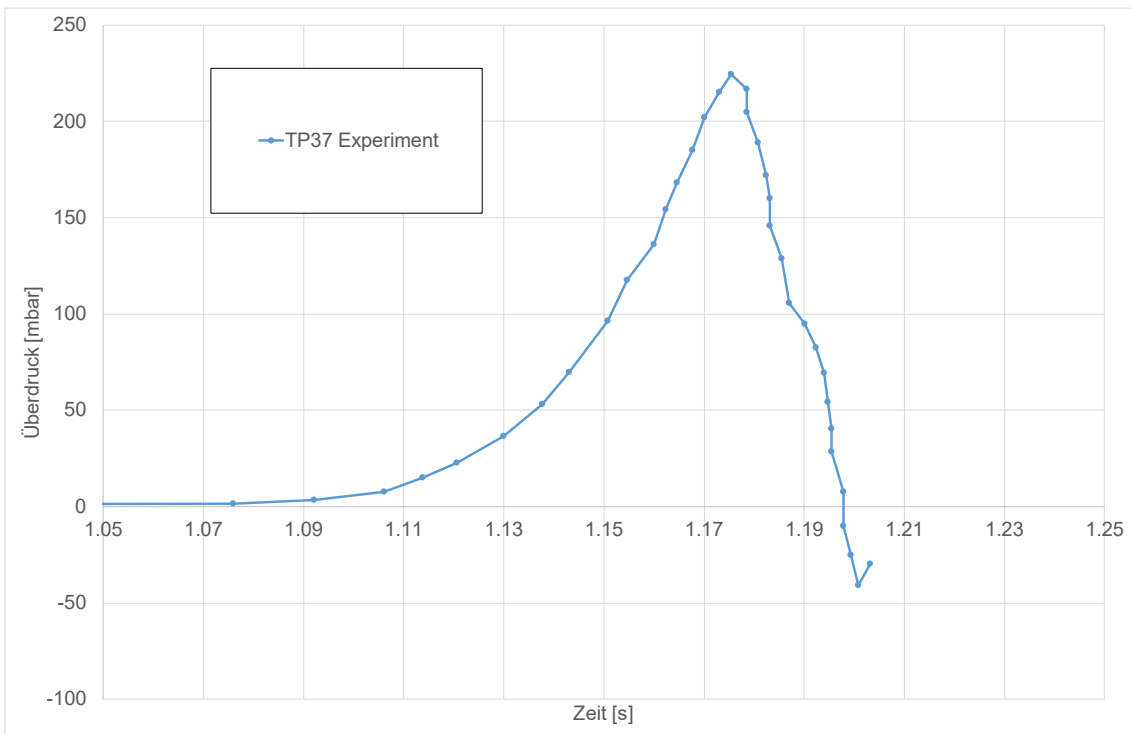


Abb. 3.29 Gemessener Druckverlauf beim HySEA-Experiment TP37

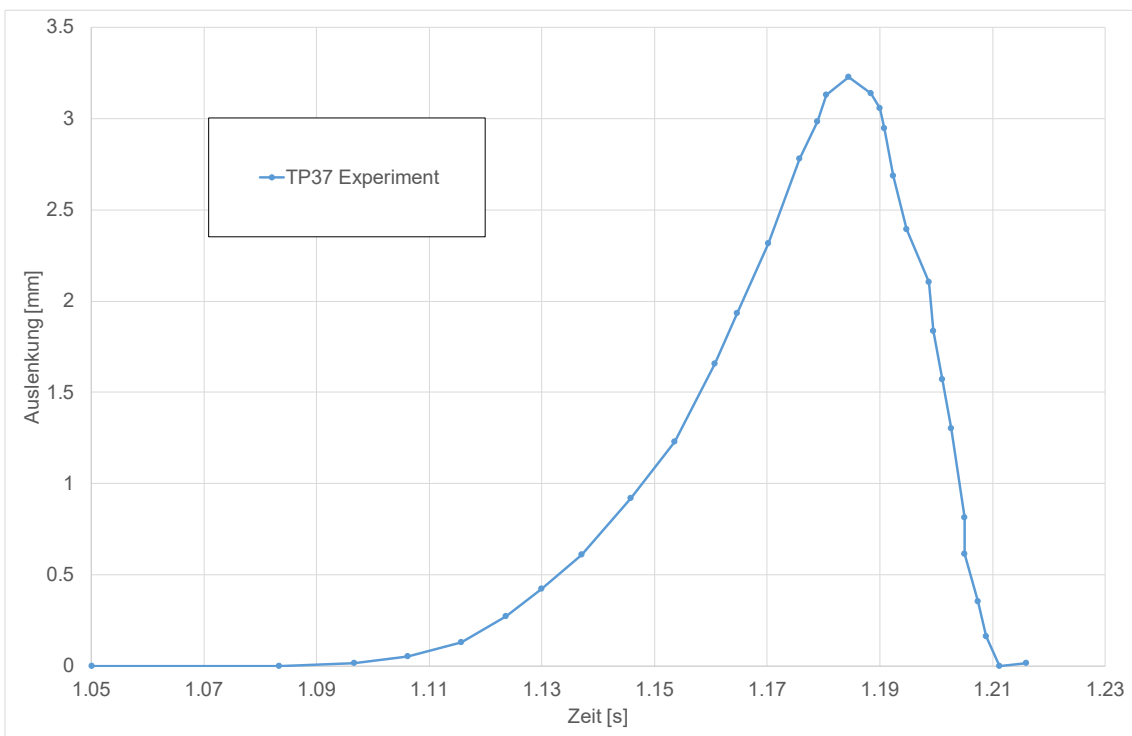


Abb. 3.30 Gemessene Auslenkung der Stahlplatte beim HySEA-Experiment TP37

3.2.2.2 Modellierung der H₂-Verbrennung mit OpenFOAM

Die H₂-Verbrennung im SSE wurde mit Hilfe des Solvers xDynFOAM der TU-München (basierend auf OpenFOAM-10) berechnet. In Abb. 3.31 sind die hierfür erstellte Geometrie und das zugehörige OpenFOAM-Gitter dargestellt. Die beim Versuch TP37 verwendeten Gasflaschen wurden vereinfacht in die Geometrie eingebracht. Das dargestellte Gitter hat ca. 46 000 Elemente.

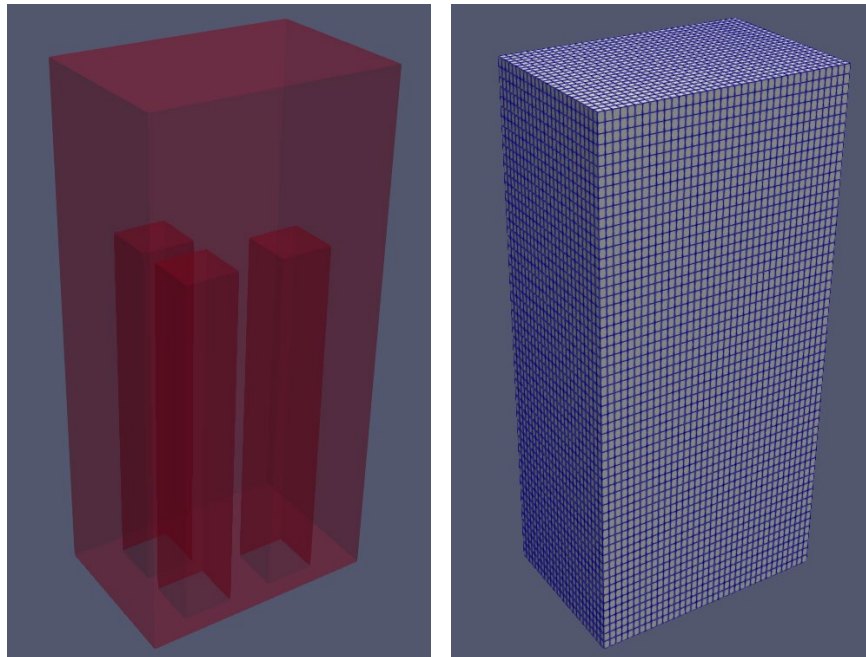


Abb. 3.31 HySEA-Experiment: OpenFOAM-Geometrie für das SSE mit drei Flaschen (links) und das zugehörige OpenFOAM-Gitter (rechts)

Im Solver xDynFOAM wurde für die Flammenfaltung das sogenannte Coupled-Modell (Kopplung der Modelle Darrieus-Landau und Dinkelacker) verwendet. Die Turbulenz wurde mit dem kOmegaSST-Modell und die Wärmestrahlung mit dem fvDOM-Modell berechnet. Die Zeitschrittweite war variabel mit einer maximalen Courant-Zahl von 0,2. Weitere Details zum Modell finden sich in Tab. 3.9. In Abb. 3.32 ist die Ausbreitung der Reaktion – berechnet mit OpenFOAM – im SSE-Volumen dargestellt. In Abb. 3.33 findet sich ein Vergleich des mit xDynFOAM berechneten Druckverlaufs mit den experimentellen Werten. Insgesamt steigt der Druck in xDynFOAM etwas schneller an als im Experiment. Bei ca. 225 mbar öffnete im Experiment die Berstscheibe. Beim Erreichen dieses Drucks wurde die xDynFOAM-Rechnung abgebrochen.

Tab. 3.9 Infobox zum HySEA-Experiment zur Fluid-Struktur-Wechselwirkung (OpenFOAM)

Experiment	HySEA-Experiment TP37
Phänomene	H ₂ -Verbrennung / Fluid-Struktur-Wechselwirkung
Materialien	H ₂ / Luft
Software / Version	OpenFOAM 10
Solver	xDynFOAM
Flammenfaltung	Coupled-Modell (Darrieus-Landau und Dinkelacker)
Zeitschritte	Variabel / Max. Courant: 0,2
Turbulenzmodell	kOmegaSST
Strahlungsmodell	fvDOM
Gittererstellung	Pointwise
Elementzahl	46 162

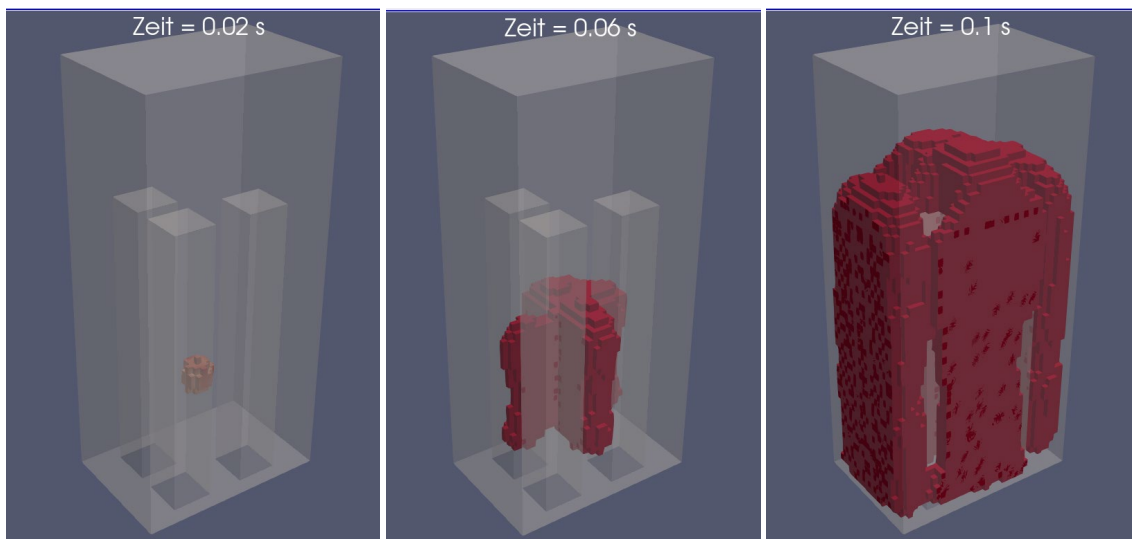


Abb. 3.32 Ausbreitung der Reaktionsfortschrittsvariable im SSE-Volumen (Iso-Surface 0,5)

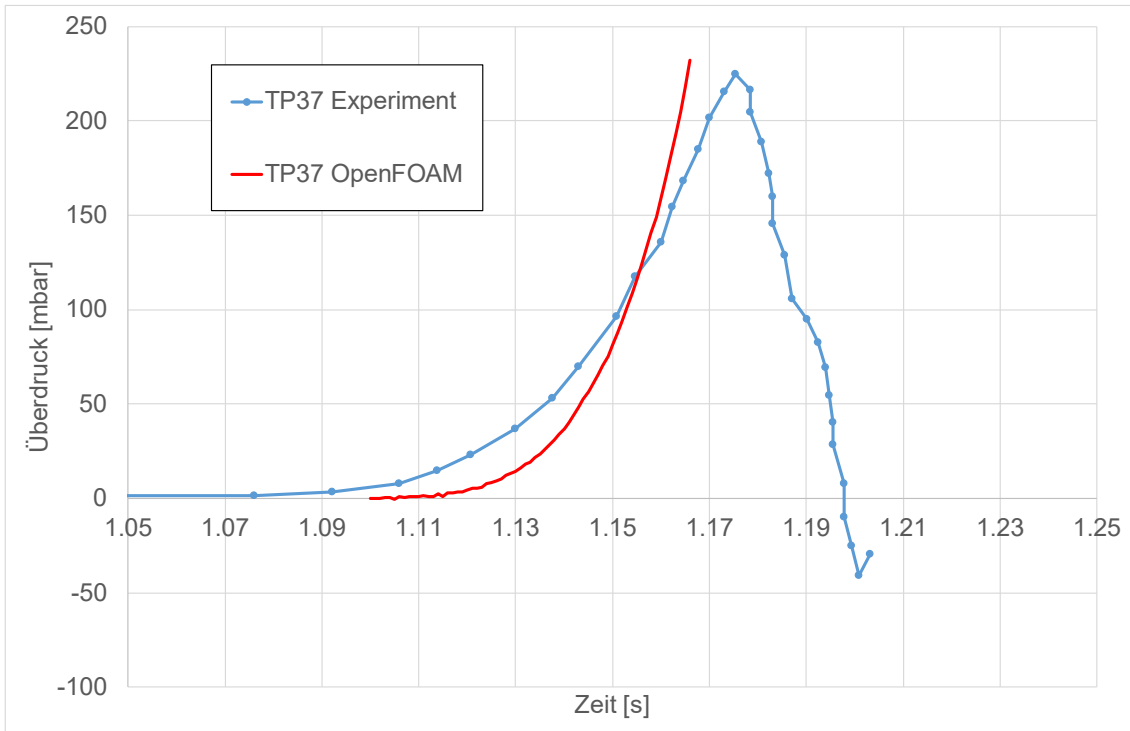


Abb. 3.33 Vergleich von (mit OpenFOAM) simuliertem und experimentellem Druckverlauf

3.2.2.3 Modellierung der Stahlstruktur mit LS-DYNA

Die Stahlplatte, deren Auslenkung betrachtet werden soll, wurde mit dem ANSYS-Solver LS-DYNA modelliert. Dazu wurde die Stahlplatte mit Shell-Elementen vernetzt (siehe Abb. 3.34). Für die Shell-Elemente wurde die Element-Formulation 16 gewählt und über die Dicke der Stahlplatte (5 mm) gab es 5 Integrationspunkte. Der Stahl (Typ S235) wurde mit dem Materialmodell 001_ELASTIC modelliert. Zusätzlich wurde eine Hourglass-Damping und ein GLOBAL_DAMPING verwendet (Details siehe Tab. 3.10). Das Hourglass-Damping zeigte keinen Einfluss auf die Rechenergebnisse, der Einfluss des GLOBAL_DAMPING wird weiter unten diskutiert. Bei den in diesem Abschnitt vorgestellten Ergebnissen wurde der experimentell gemessene Druck als Lastannahme verwendet.

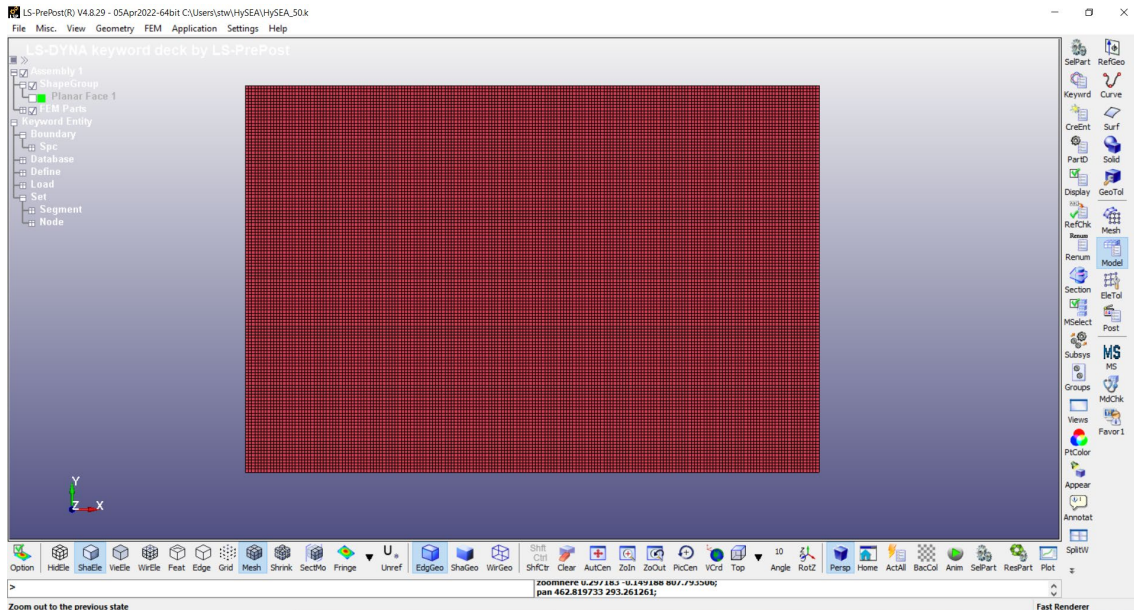


Abb. 3.34 Modellierung der Stahlplatte in LS-DYNA

Zunächst wurde mit einer numerischen Analyse der Einfluss der Gitterfeinheit untersucht. Dazu wurden drei Rechnungen mit unterschiedlicher Gitterfeinheit durchgeführt (siehe Tab. 3.11). Als Last-Zeit-Kurve wurde zunächst der experimentelle Druckverlauf verwendet (siehe Abb. 3.29). Der Einfluss der Elementzahl auf die berechnete maximale Auslenkung der Stahlplatte ist in Abb. 3.35 dargestellt. Zwischen dem groben und dem mittleren Gitter ist der Unterschied sehr groß. Zwischen dem mittleren und dem feinsten Gitter gibt es immer noch einen Unterschied, dieser ist jedoch kleiner. Für die weiteren Arbeiten wird das feinste Gitter verwendet, um den numerischen Einfluss klein zu halten.

Tab. 3.10 Infobox zum HySEA-Experiment zur Fluid-Struktur-Wechselwirkung (LS-DYNA)

Experiment	HySEA-Experiment TP37
Phänomene	H ₂ -Verbrennung / Fluid-Struktur-Wechselwirkung
Software / Version	ANSYS 2023 R1
Solver	LS-DYNA
Material	Stahl (Typ S235)
Materialmodell	001_ELASTIC
Elementformulation	ELFORM 16 (Fully integrated shell element)
Integration points	NIP = 5
Hourglass	IHQ = 8
Global Damping	VALDMP = 0.1
Elementzahl	864, 2262, 22816 (Shell elements)

Tab. 3.11 Durchführung einer Gitterstudie

Rechnung	Kantenlänge der Elemente [mm]	Anzahl der Elemente	Max. Auslenkung der Stahlplatte [mm]
1	26	864	8,12
2	16	2262	2,60
3	5	22816	2,33

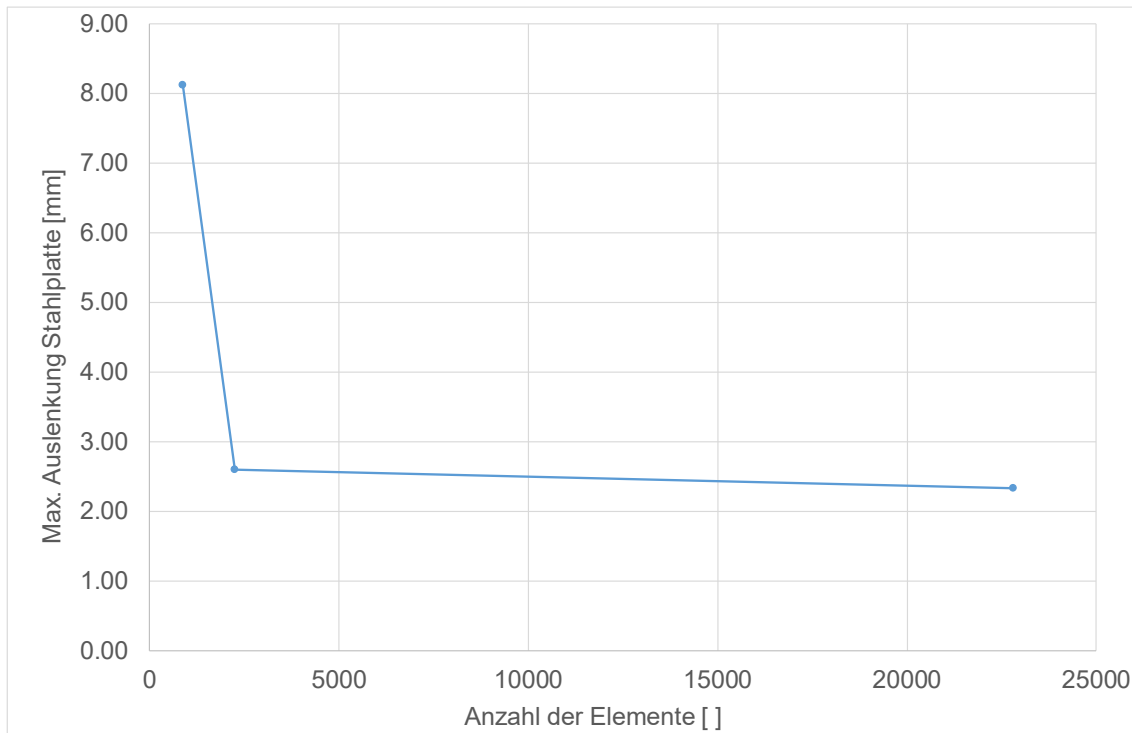


Abb. 3.35 Einfluss der Gitterfeinheit auf die maximale Auslenkung der Stahlplatte

In einer weiteren Parameterstudie wird der Einfluss des Keywords GLOBAL_DAMPING untersucht. Dieses wurde eingeführt, da im Zeitverlauf der berechneten Auslenkung eine zusätzliche Schwingung zu erkennen war, die im Experiment nicht beobachtet wurde. Diese Schwingung ist wahrscheinlich ein numerischer Effekt des expliziten Solvers. Eine Rechnung wurde mit einem globalen Dämpfungsfaktor (VALDAMP = 0,1) durchgeführt, die zweite Rechnung ohne eine Dämpfung (siehe Tab. 3.12). Der Zeitverlauf der Plattenauslenkung ist in Abb. 3.36 dargestellt. Es zeigt sich, dass der Dämpfungsfaktor zwar die Schwingungen reduziert, allerdings verringert er auch die maximale Auslenkung der Stahlplatte. In den folgenden Rechnungen wird die Dämpfung weggelassen.

Tab. 3.12 Parameterstudie „Dämpfung“

Rechnung	Dämpfungsfaktor (VALDAMP)	Max. Auslenkung der Stahlplatte [mm]
3	0,1	2,33
4	Ohne Dämpfung	2,45

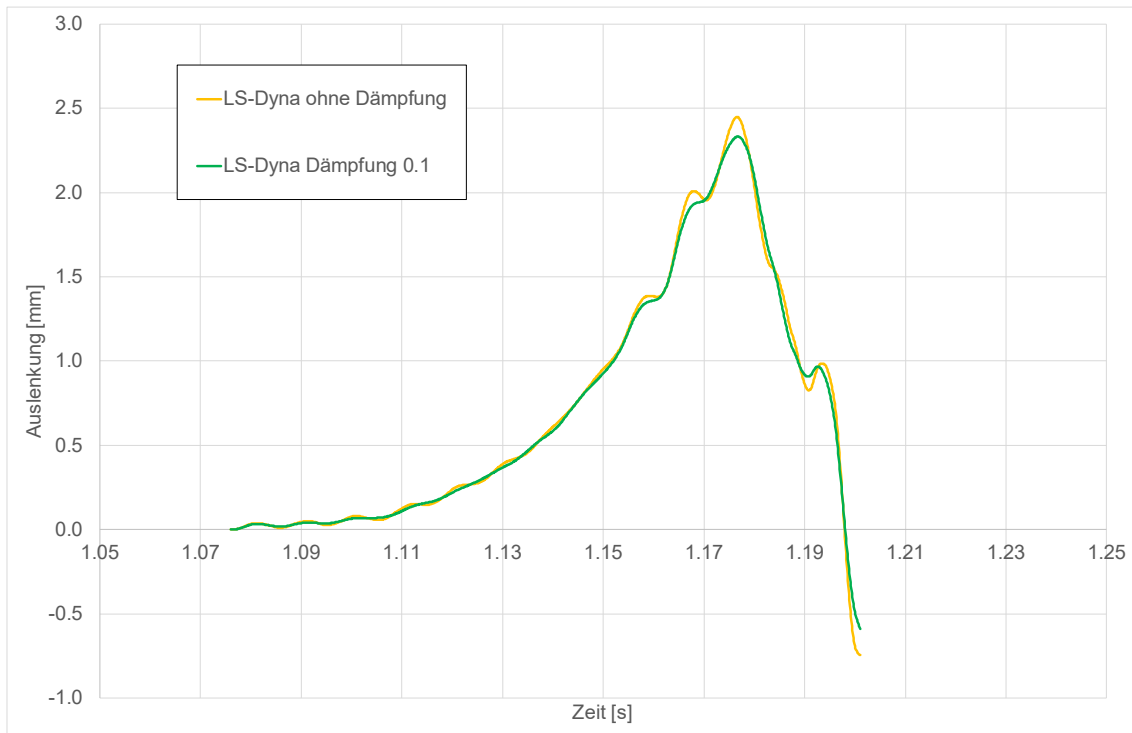


Abb. 3.36 Vergleich zweier LS-DYNA-Rechnungen mit und ohne Dämpfung

Bei den bisherigen Rechnungen wurde die Einspannung der Stahlplatte vereinfacht, indem der ganze Rand der Platte festgehalten wurde (siehe Abb. 3.37, links). In einer weiteren Rechnung wurde die Modellierung der Einspannung verbessert, indem die Stahlplatte (wie im Experiment) an den Positionen der Schrauben festgehalten wurde (siehe Abb. 3.37, rechts und Abb. 3.28). Im Fall „ganzer Rand“ beträgt die maximale Auslenkung der Stahlplatte 2,45 mm, im Fall „mit Schrauben“ beträgt die maximale Auslenkung 2,79 mm.

Tab. 3.13 Parameterstudie „Einspannung“

Rechnung	Art der Einspannung	Max. Auslenkung der Stahlplatte [mm]
4	Ganzer Rand	2,45
5	Mit Schrauben	2,79

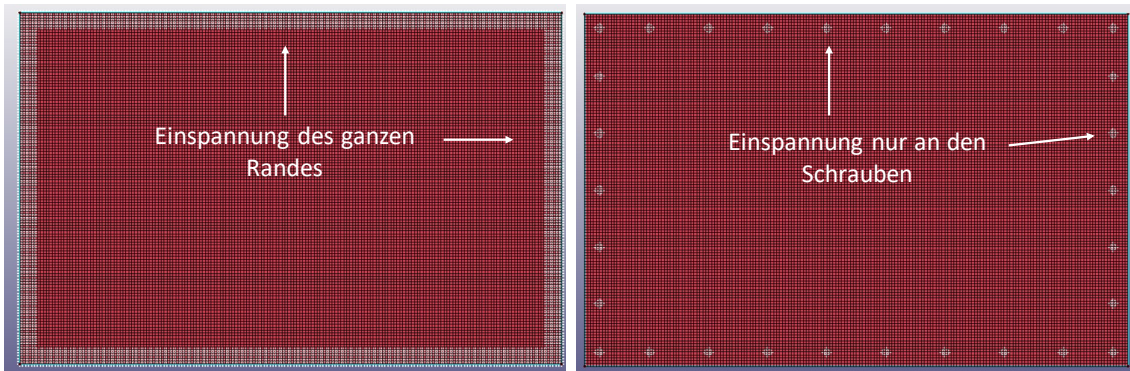


Abb. 3.37 Modellierung der Einspannung der Stahlplatte in LS-DYNA

Im Folgenden wird die Rechnung mit dem feinsten Gitter (5 mm Elementbreite), ohne Dämpfung und mit einer Einspannung durch Schrauben mit dem Experiment verglichen. Die Auslenkung ist in Abb. 3.38 dargestellt. Der zeitliche Verlauf ist bei der Simulation bis ca. 1,175 s ähnlich wie im Experiment. Allerdings gibt es in der Rechnung – wie schon erwähnt – Schwingungen, die im Experiment nicht beobachtet werden. In der Rechnung geht die Auslenkung ab 1,175 s zurück. Das ist der Zeitpunkt des maximalen Drucks. Im Experiment geht die Auslenkung noch etwas weiter (bis ca. 1,185 s) und erst ab dann geht sie wieder zurück. Neben der etwas längeren Auslenkphase ist auch die maximale Auslenkung im Experiment etwas größer (3,2 mm) als in der Simulation (2,8 mm).

Eine ähnliche Simulation wurde auch schon von Pini durchgeführt /PIN 17/. Hierbei wurde jedoch ein anderer FE-Solver (IMPETUS Afea) verwendet. Das Ergebnis ist in Abb. 3.39 dargestellt. Pini kommt auf einen ähnlichen Zeitverlauf und eine ähnliche maximale Auslenkung (2,9 mm) wie die hier vorliegende Arbeit mit LS-DYNA.

In Abb. 3.40 ist der Zusammenhang zwischen dem maximalen Überdruck und der maximalen Auslenkung dargestellt. Hier wurden nur Experimente ausgewählt, die den gleichen Messpunkt (Mittelpunkt der oberen Probeplatte) und die gleiche Anzahl an Hindernissen (drei Gasflaschen) hatten. Nimmt man einen linearen Zusammenhang an und legt fest, dass die Gerade durch den Nullpunkt (0, 0) gehen muss, so ergibt sich aus den experimentellen Punkten die orange Trendlinie. Neben dem genannten Experiment mit einem max. Überdruck von 225 mbar wurde noch ein weiteres Experiment mit einem max. Überdruck von 79 mbar mit LS-DYNA nachgerechnet. Die beiden Ergebnisse sind in Abb. 3.40 als grüne Punkte eingetragen. Hieraus ergibt sich die grüne Trendlinie. Diese ist ähnlich zu der experimentellen Geraden, liegt aber etwas niedriger, d. h., die Auslenkungen werden etwas unterschätzt.

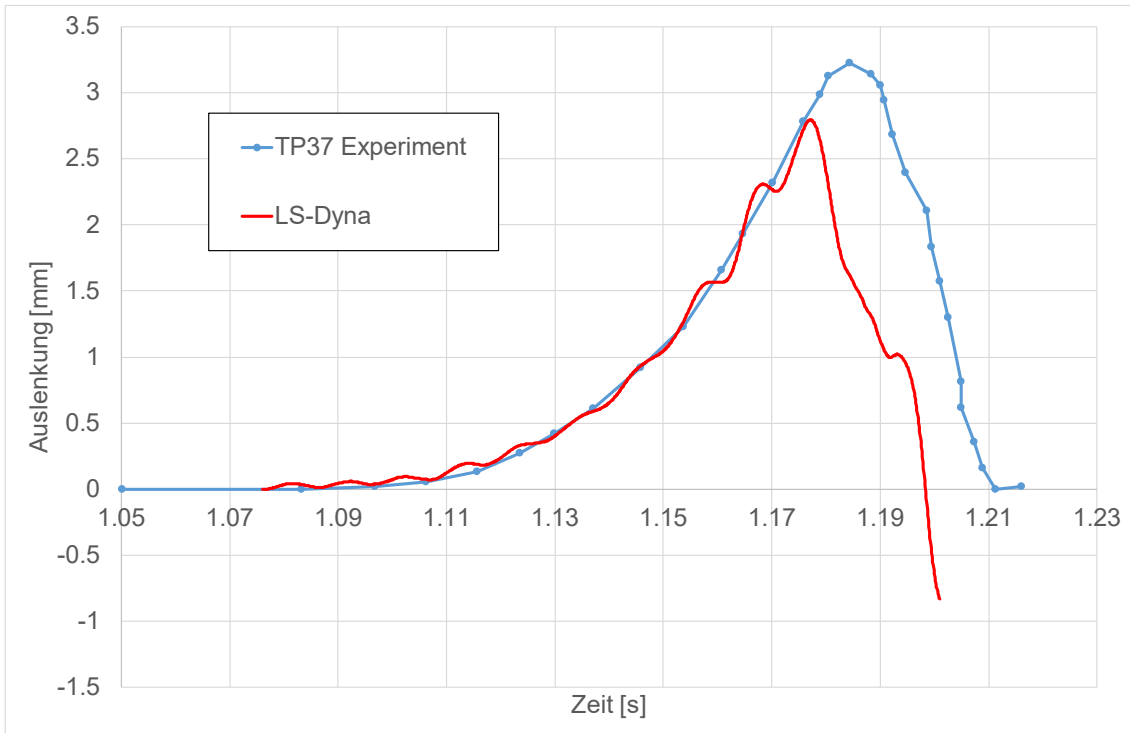


Abb. 3.38 Vergleich der berechneten und experimentellen Auslenkung der Stahlplatte durch die H₂-Verbrennung

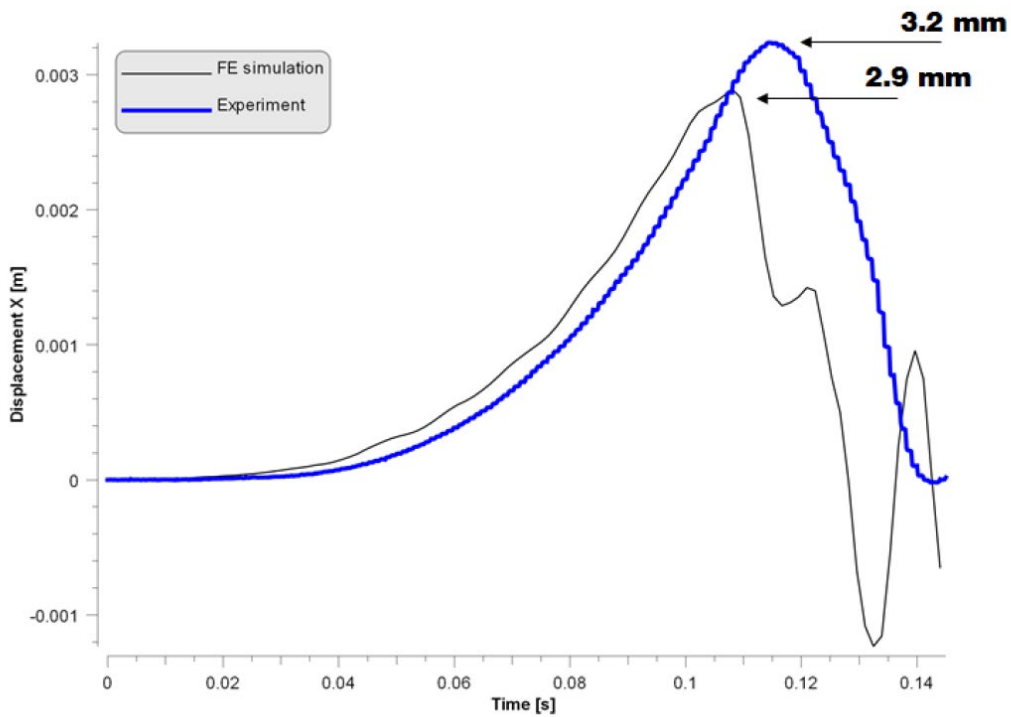


Abb. 3.39 Berechnung des Zeitverlaufs nach Pini mit dem IMPETUS Afea-Solver (Bild: /PIN 17/)

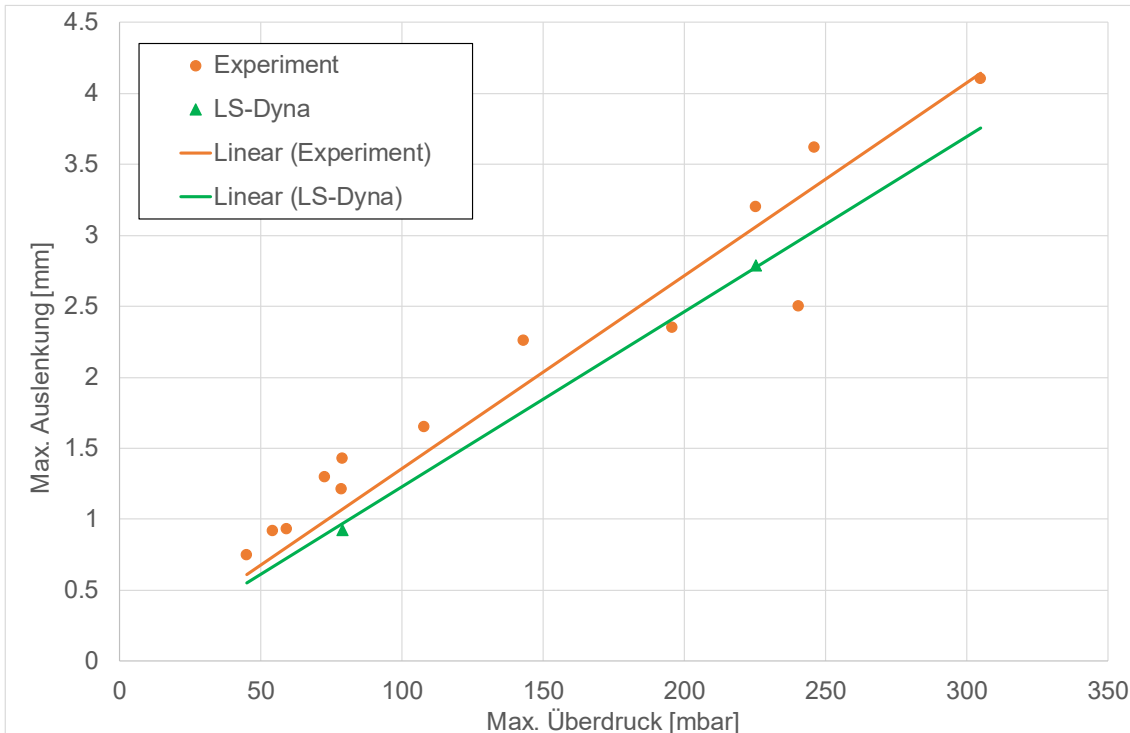


Abb. 3.40 Zusammenhang zwischen dem max. Überdruck und der max. Auslenkung der Stahlplatte

3.2.3 Kopplung von OpenFOAM und LS-DYNA

Im nächsten Schritt sollen mögliche Kopplungen zwischen dem CFD-Programm OpenFOAM und dem FE-Programm LS-DYNA untersucht werden.

- In einem einfachen Fall kann eine einfache Last-Zeit-Funktion mit OpenFOAM ermittelt und an LS-DYNA weitergegeben werden. Dieses Vorgehen wurde für das HySEA-Experiment durchgeführt und ist im folgenden Kapitel 3.2.4 beschrieben.
- In einem komplizierten Fall, z. B. bei komplexen Geometrien und unterschiedlichen Last-Zeit-Verläufen an verschiedenen Orten innerhalb der Geometrie ist die Zuordnung der Last-Zeit-Verläufe zu Oberflächenelementen nicht mehr einfach möglich und muss automatisiert werden. Die GRS hat hierfür deshalb das Kopplungsprogramm „FS-Converter“ (Fluid-Struktur-Konverter) entwickelt, das über eine einfache Bedienoberfläche gesteuert wird. Der FS-Converter berechnet den Zusammenhang zwischen OpenFOAM-Druckverläufen (Pressure-Probes) und LS-DYNA-Oberflächen-Segmenten (Segment-Sets). Die Ausgabe besteht in LS-DYNA-Keyword-Files, in denen die Oberfläche einer Geometrie in Segment-Sets aufgeteilt ist, denen Last-Zeit-Kurven aus OpenFOAM-Berechnungen

zugeordnet sind. Ein Test des FS-Converters an einem Experiment wurde mit den Rohrdetonationsversuchen von Offermanns (siehe Kapitel 3.2.5) und mit einem GraVent-Experiment (siehe Kapitel 3.2.6) durchgeführt.

3.2.4 Überprüfung der Schnittstelle anhand von Versuchsnachrechnungen (HySEA-Experiment)

Statt des experimentellen Druckverlaufs – wie für die Berechnung der Auslenkung der Stahlplatte im HySEA-Experiment (siehe Abb. 3.38) verwendet – kann auch der mit OpenFOAM berechnete Druckverlauf (siehe Abb. 3.33) genutzt werden. Statt der experimentellen Werte kann nun diese Kurve in den LS-DYNA-Preprocessor eingelesen werden. Dieses geschieht im Datenblatt zum Keyword DEFINE_CURVE. Die Daten werden aus einer Datei eingelesen, die ein bestimmtes Format voraussetzt.

Nach Durchführung der LS-DYNA-Berechnung ergibt sich der in Abb. 3.41 dargestellte Verlauf (grüne Kurve für OpenFOAM + LS-DYNA). Hier ist die Auslenkung etwas anders als beim experimentellen Druck. Der Unterschied erklärt sich aber leicht aus den Abweichungen zwischen experimentellem und simuliertem Druckverlauf.

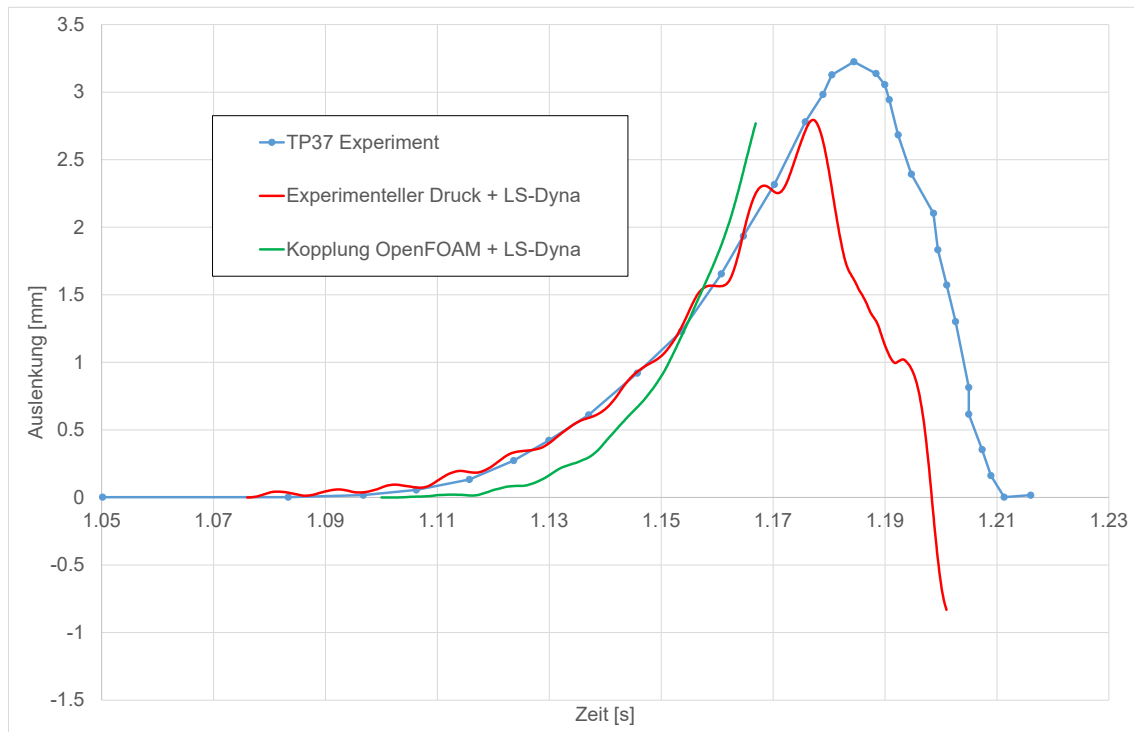


Abb. 3.41 Vergleich des Zeitverlaufs der Auslenkung

Für eine einfache Last-Zeit-Funktion, die sich aus einer OpenFOAM-Rechnung ergibt, ist dieses Vorgehen so gut durchführbar. Im Fall einer komplexen Geometrie mit unterschiedlichen Last-Zeit-Verläufen an unterschiedlichen Orten kann so nicht vorgegangen werden. Es kann gerade auch bei komplexeren Geometrien nicht so leicht der räumliche Zusammenhang zwischen den einzelnen Oberflächensegmenten und den Orten der Druckmessung (Pressure Probe) aus OpenFOAM ermittelt werden. Hierzu ist die Entwicklung eines automatisierten Berechnungsprogramms notwendig. Darauf wird im folgenden Kapitel eingegangen. Als Beispiele für kompliziertere 3D-Geometrien werden Experimente von Offermanns und GraVent-Experimente verwendet.

3.2.5 Überprüfung der Schnittstelle anhand von Versuchsnachrechnungen (Offermanns-Experiment)

Bei den Offermanns-Experimenten handelt es sich um Untersuchungen zum Verhalten von dünn- und dickwandigen Rohren bei Wasserstoff-Sauerstoff-Detonationen. In Abb. 3.42 ist der prinzipielle Versuchsaufbau der Offermanns-Versuche dargestellt. Abb. 3.43 zeigt die Verformungsfiguren von zwei unterschiedlichen Versuchen. Im Versuch V80E3 hat sich im rechten Bereich eine Aufweitung des Rohres ergeben, im Versuch V60E1 kam es zu einer Zerstörung des Rohres im rechten Bereich. Im Folgenden wird der Versuch V80E3 als Grundlage für die Arbeiten verwendet, weil dieser Versuch in der Arbeit von Offermanns besonders ausführlich beschrieben wird. Es handelt sich um einen Versuch mit einem Anteil $2 \text{ H}_2 + \text{O}_2$ von 80 Vol.-% und einem N_2 -Anteil von 20 Vol.-%. Damit weicht das O_2/N_2 -Verhältnis von dem in normaler Umgebungsluft ab. Das Rohr hatte bei diesem Versuch eine Länge von 3817 mm, einen Außendurchmesser von 113,86 mm und eine Rohrwanddicke von 5,88 mm. Die Rohrwand bestand aus einem austenitischen Stahl mit der Bezeichnung X10CrNiTi18-9 (Werkstoff-Nr.: 1.4541).



Abb. 3.42 Versuchsaufbau der Offermanns-Versuche

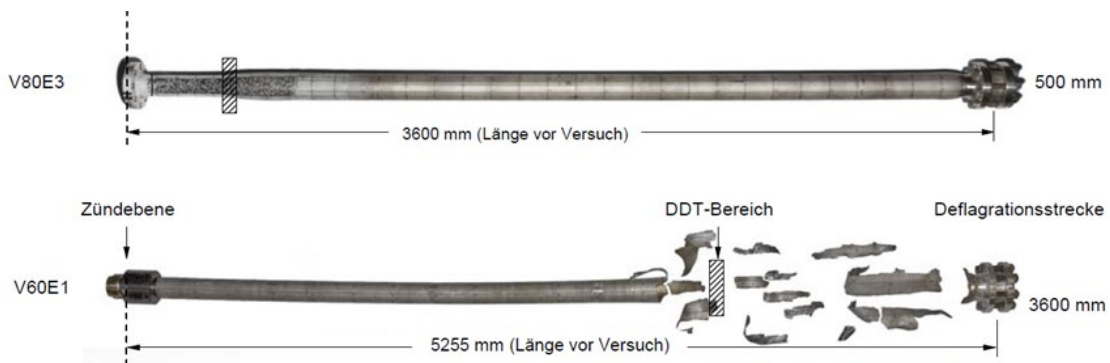


Abb. 3.43 Verformungsfiguren bei den Offermanns-Versuchen V80E3 (oben) und V60E1 (unten)

Dieser Versuch wurde mit Hilfe von xDynFOAM und LS-DYNA nachgerechnet. Bei der xDynFOAM-Berechnung wurde erstmalig das neu erstellte DDT-Modell verwendet, dabei wurde das Heat-Release-Modell von Ettner verwendet. Hierbei wurde ein H_2 -Anteil von 53,33 Vol.-% H_2 (2/3 von 80 Vol.-%) eingestellt (in der Datei YH2u, Angabe dort im Massenanteil = 0,073907652). In der Datei physicalProperties wurde der Anteil O_2 in Luft (YO2inAir) zu 0,566371352 (Massenbruch) gewählt. Allerdings können die Flamelet-Tabellen (Li2015_H2 und tIgnTableH2CO) nicht so einfach an das veränderte O_2/N_2 -Verhältnis angepasst werden. Dieses erfordert eine komplette Neuerstellung/-berechnung

der Tabellen mit einem entsprechenden Chemie-Simulationsprogramm (z. B. CANTERA, CHEMKIN), was den Rahmen der vorliegenden Arbeit überschreiten würde. In der vorliegenden Arbeit soll der Fokus auf der Kopplung von OpenFOAM und LS-DYNA liegen. Da nur die Flamelet-Tabellen für H₂/Luft verwendet werden können, wird bei dieser Berechnung eine Abweichung vom Experiment erwartet.

In Tab. 3.14 sind die weiteren Berechnungsparameter für die OpenFOAM-Rechnung dargestellt. Neu bei dieser Simulation ist die Verwendung eines DDT-Modells. Dieses wurde Anfang 2024 von der TU-München für xDynFOAM fertiggestellt und an die GRS übergeben.

Tab. 3.14 Infobox zum Offermanns-Experiment zur Fluid-Struktur-Wechselwirkung (OpenFOAM)

Experiment	Offermanns-Experiment V80E3
Phänomene	H ₂ -Verbrennung / Fluid-Struktur-Wechselwirkung
Materialien	H ₂ / O ₂ / N ₂
Software / Version	OpenFOAM 10
Solver	xDynFOAM
Flammenfaltung	Coupled-Modell (Darrieus-Landau und Dinkelacker)
DDT	Autoignition: on HeatReleaseModel: Ettner
Zeitschritte	Variabel / Max. Courant: 0,5
Turbulenzmodell	kOmegaSST
Strahlungsmodell	fvDOM
Gittererstellung	Pointwise
Elementzahl	468 160

Abb. 3.44 zeigt den mit xDynFOAM berechneten Reaktionsfortschritt bei dem Versuch V80E3. Innerhalb von ca. 2 ms ist die Reaktion durch das komplette Rohr gewandert. In Abb. 3.45 ist der berechnete Druckverlauf an unterschiedlichen Monitorpunkten dargestellt. In der Abbildung ist zu sehen, wie die Druckwelle nacheinander an den unterschiedlichen Positionen im Rohr ankommt. Nach dem Durchlaufen der Druckwelle flacht der Druck zunächst ab. Ein weiterer Druckanstieg erfolgt dann bei der zurücklaufenden reflektierten Welle. Zu den Druckverläufen liegen der GRS keine experimentellen Daten als Vergleich vor. Es gibt in der Arbeit von Offermanns nur die Angabe eines experimentell bestimmten Maximaldrucks, dieser lag bei 1480 bar (= 1,48E+08 Pa). Dieses entspricht auch dem theoretisch ermittelten Wert für den Chapman-Jouguet-Druck

(1455 bar). Bei der Messstelle bei 0,01 m (siehe Abb. 3.45) liegt der von xDynFOAM berechnete Druck in einer ähnlichen Größenordnung.

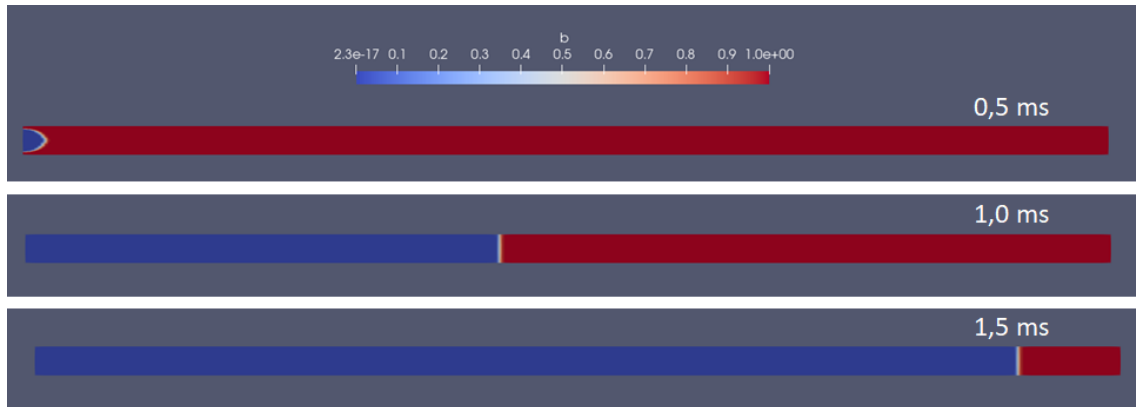


Abb. 3.44 Mit xDynFOAM berechneter Reaktionsfortschritt beim Offermanns-Experiment V80E3

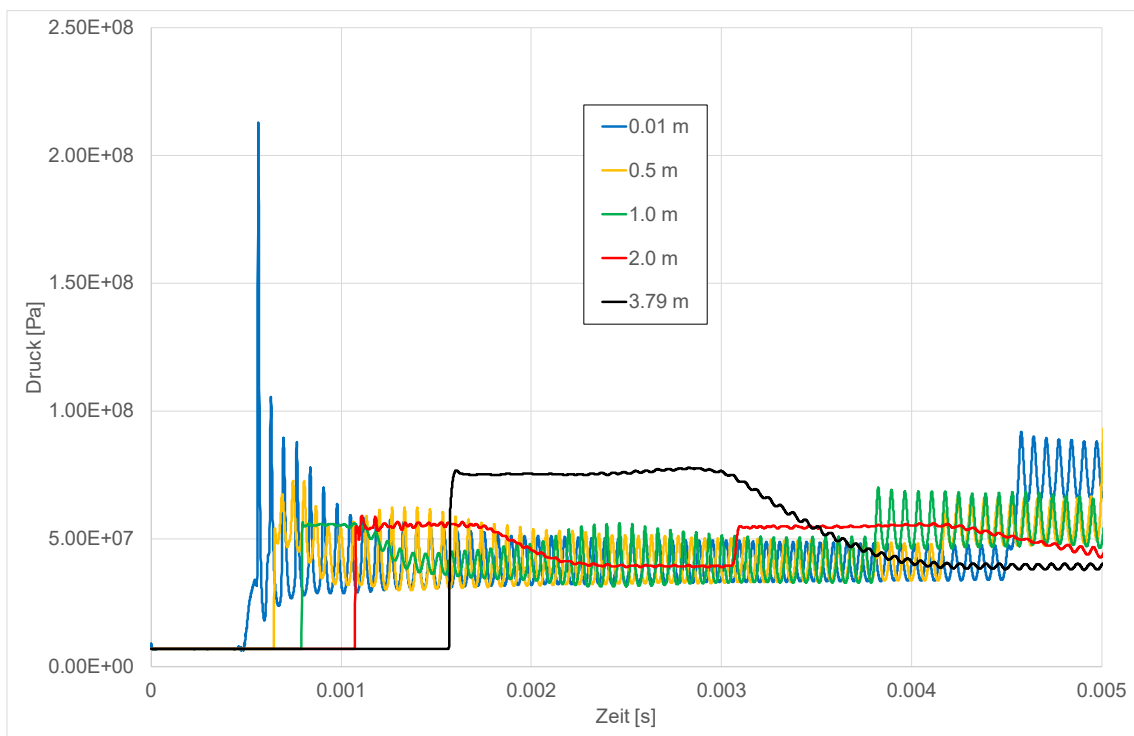


Abb. 3.45 Mit xDynFOAM berechneter Druckverlauf beim Offermanns-Experiment V80E3

Aus der Ankunftszeit der Druckwelle an den unterschiedlichen Messpunkten lässt sich eine Druckwellengeschwindigkeit berechnen. Das Ergebnis ist in Abb. 3.46 dargestellt. Im Experiment werden zwei Bereiche unterschieden. Von 0 mm bis 500 mm werden ansteigende Geschwindigkeiten beobachtet, hier liegt aber noch eine Deflagration vor. Bei

500 mm wurde im Experiment ein sprunghafter Anstieg der Druckwellengeschwindigkeit beobachtet, danach liegt eine Detonation vor. Die experimentell bestimmte Detonationsgeschwindigkeit wird im Mittel mit 2720 m/s angegeben. In der xDynFOAM-Rechnung gibt es auch einen Anstieg der Geschwindigkeiten, hier liegen jedoch schon ab der Zündstelle hohe Geschwindigkeiten (> 2500 m/s) vor. Nach dem schnellen Anstieg liegen dann Geschwindigkeiten von etwa 3500 m/s vor, dieses liegt deutlich oberhalb des Experimentes. Eine Fehlerquelle bei der xDynFOAM-Rechnung ist die Verwendung der falschen Flamelet-Tabellen und der falschen Detonationstabellen. Hier müssten neue Tabellen mit dem korrekten O_2/N_2 -Verhältnis erstellt und verwendet werden. Dieses würde aber den Rahmen der vorliegenden Arbeit übersteigen.

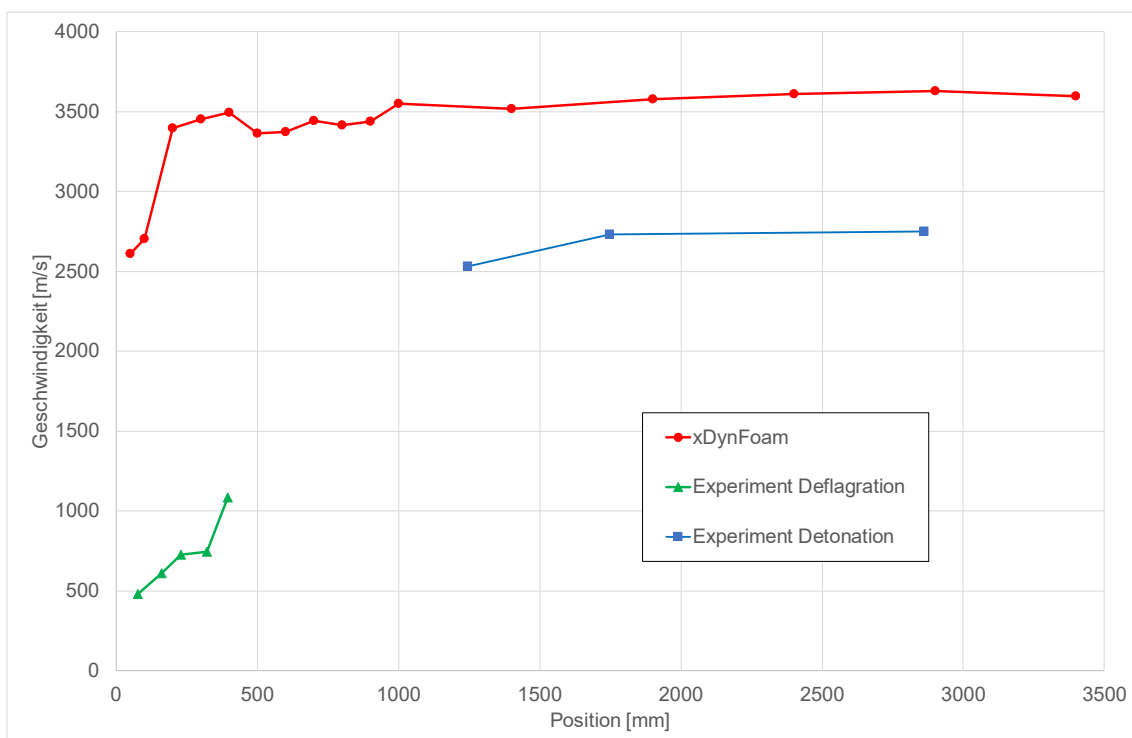


Abb. 3.46 Vergleich von experimentellen und mit xDynFOAM berechneten Druckwellengeschwindigkeiten

Bei diesem Experiment von Offermanns liegt nun eine dreidimensionale Geometrie mit unterschiedlichen Last-Zeit-Verläufen an verschiedenen Orten vor (siehe Abb. 3.45). Die Ergebnisse der OpenFOAM-Rechnung soll nun mit Hilfe des FS-Converters mit LS-DYNA gekoppelt werden.

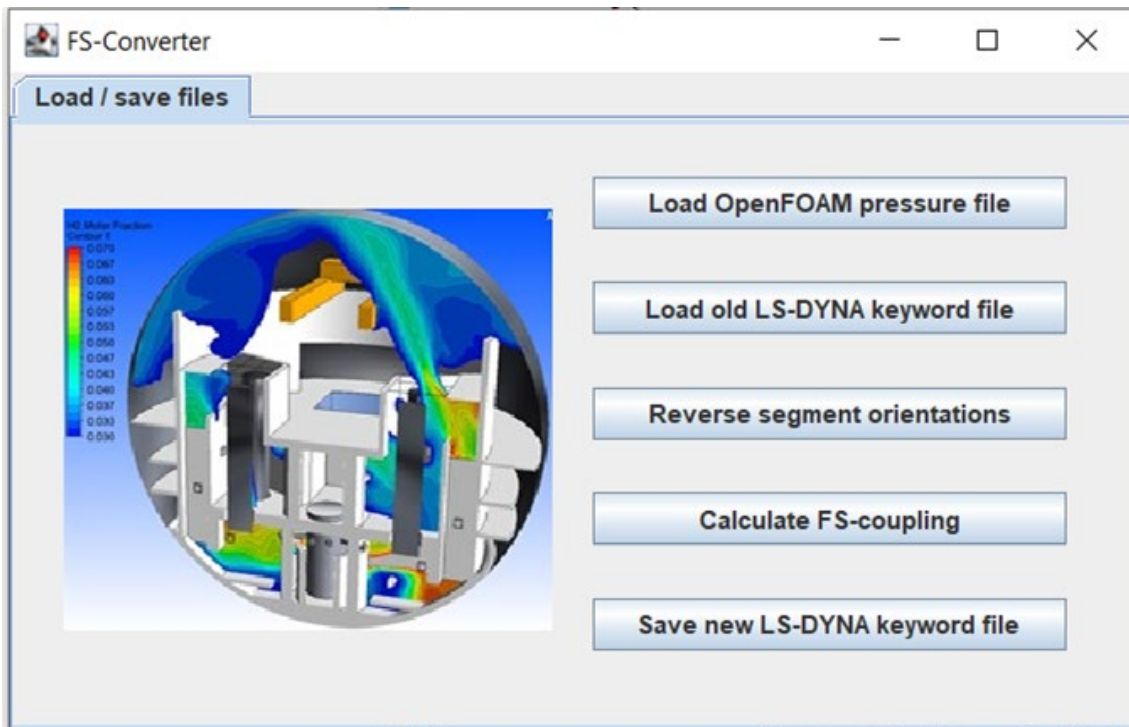


Abb. 3.47 Benutzeroberfläche des von der GRS entwickelten FS-Converters

Abb. 3.47 zeigt die Benutzeroberfläche des von der GRS entwickelten FS-Converters (Fluid-Structure-Converter) Die einzelnen Buttons entsprechen den unterschiedlichen Schritten bei der Konvertierung:

- Load OpenFOAM pressure file: Hier kann ein OpenFOAM postProcessing-File mit Pressure-Probes eingeladen werden. Der FS-Converter speichert die Position der Pressure-Probes und die Last-Zeit-Funktionen des jeweiligen Druckverlaufs.
- Load old LS-DYNA keyword file: In diesem LS-DYNA-File muss **ein** Segment-Set mit allen Oberflächensegmenten vorliegen. Der FS-Converter speichert alle Segmente mit den zugehörigen Knoten und deren Positionen.
- Reverse segment orientations: Durch die Reihenfolge der Knoten wird jedem Segment eine Orientierung vorgegeben. In dieser Richtung soll die Last wirken. In einigen Fällen muss die vorhandene Richtung umgedreht werden (z. B. bei dem Offermanns-Experiment mit Innendruck). Das kann mit diesem Button bewirkt werden.
- Calculated FS-coupling: Hier berechnet der FS-Converter eine Zuordnung von (LS-DYNA) Oberflächensegmenten zu (OpenFOAM) Pressure-Probes. Dazu sucht der FS-Converter für jedes Oberflächensegment die räumlich

nächstgelegene Pressure-Probe-Position. Die jeweils zu einer Probe gehörigen Segmente werden zu Segment-Sets versammelt.

- Save new LS-DYNA keyword file: Hier wird zuerst das alte LS-DYNA-Keyword-File aufgeräumt (das vorhandene Segment-Set und evtl. vorhandene Last-Zeit-Funktionen werden gelöscht). Dann werden die neuen Segment-Sets mit den jeweiligen Last-Zeit-Funktionen aus OpenFOAM in das File geschrieben und das File unter neuem Namen (mit dem Anhang „new“) abgespeichert.

Die mit xDynFOAM berechneten Druckverläufe entlang des Rohres im Offermanns-Ver-such wurden mit Hilfe des FS-Converters der Rohrgeometrie in LS-DYNA zugeordnet. In Abb. 3.48 werden zwei unterschiedliche Segment-Sets (weiß markiert auf dem roten Rohr) mit den jeweils zugehörigen Last-Zeit-Funktionen im LS-DYNA-Preprocessor ge-zeigt. Insgesamt wurden den 40 Pressure-Probes bei dieser OpenFOAM-Simulation 40 Segment-Sets mit jeweiligen Last-Zeit-Funktionen zugeordnet. Die räumliche Zuordnung mit dem FS-Converter hat hier gut funktioniert. Mit dem erstellten Keyword-File kann eine LS-DYNA-Simulation gestartet werden.

In Tab. 3.15 finden sich die weiteren verwendeten Berechnungsparameter für die LS-DYNA-Simulation. Als Materialmodell wird hier ein vereinfachtes Johnson-Cook-Modell verwendet. Offermanns hatte in seiner Arbeit die dazu notwendigen Materialparameter ermittelt. Das Rohr wird durch Schalenelemente repräsentiert. Über die Dicke (von 5,88 mm) gibt es jeweils 5 Integrationspunkte.

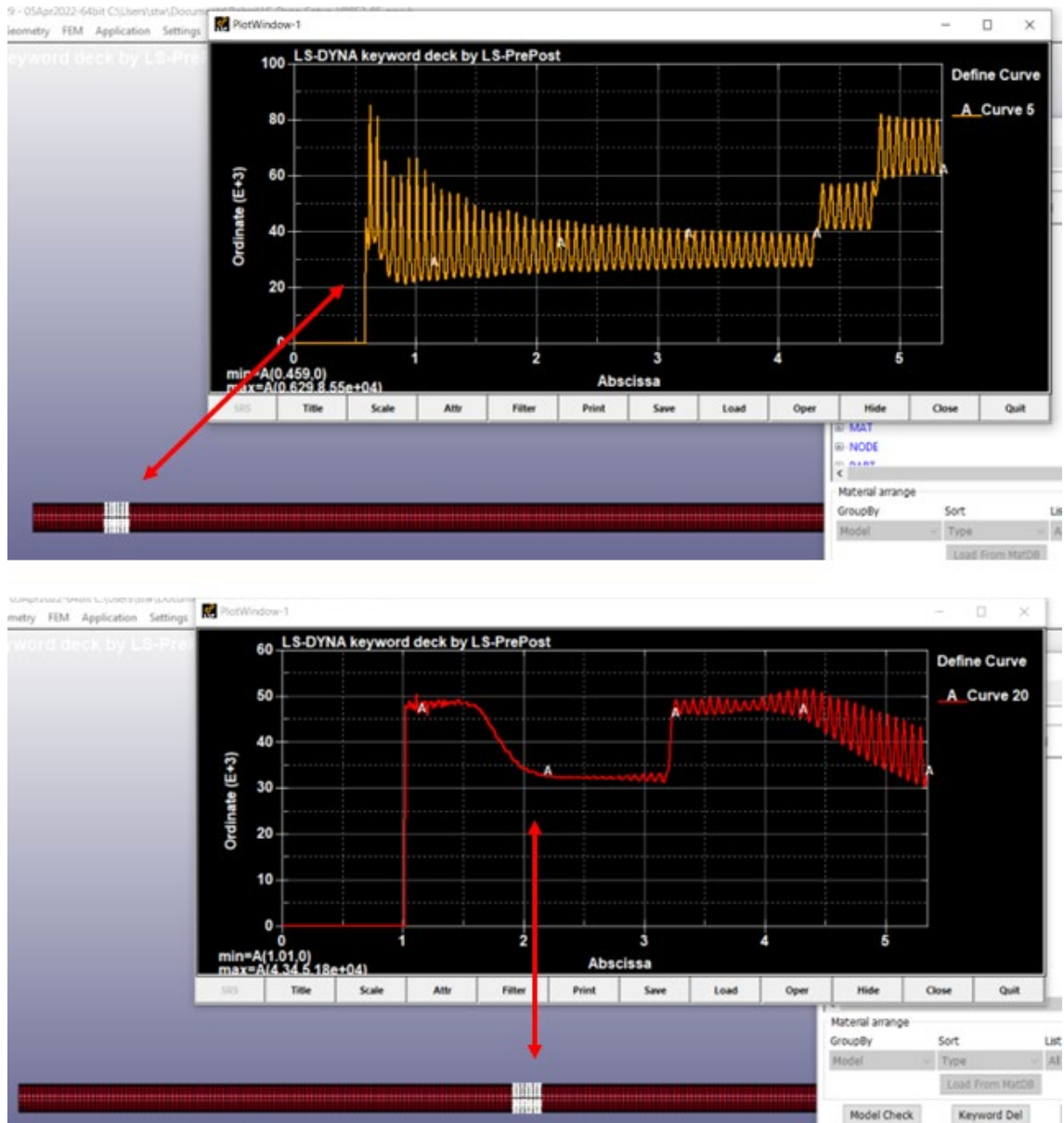


Abb. 3.48 Zwei unterschiedliche Segment-Sets mit den zugehörigen Last-Zeit Funktionen im LS-DYNA-Preprocessor (Offermanns-Experiment V80E3)

Tab. 3.15 Infobox zum Offermanns-Experiment zur Fluid-Struktur-Wechselwirkung (LS-DYNA)

Experiment	Offermanns / V80E3
Phänomene	H ₂ -Verbrennung / Fluid-Struktur-Wechselwirkung
Software / Version	ANSYS 2023 R1
Solver	LS-DYNA
Material	Edelstahl
Materialmodell	098_SIMPLIFIED_JOHNSON_COOK RO: 7,838, E: 2,12E8, PR: 0.28 A: 2,4E5, B: 1,22E6, N: 0,0298, PSFAIL: 1,0E17
Elementformulation	ELFORM 16 (Fully integrated shell element)
Integration points	NIP = 5
Hourglass	IHQ = 8
Elementzahl	5356 (Schalenelemente)

Abb. 3.49 zeigt die Aufweitung des Rohres zum Zeitpunkt 5 ms als Ergebnis der LS-DYNA-Simulation. Das Rohr wurde insbesondere am rechten Ende deformiert. Hier wurden die Schalenelemente maximal ca. 12 mm nach außen verschoben. Das entspricht einer Durchmessererweiterung von ca. 24 mm und damit einer Tangentialdehnung von etwa 21 %. In Abb. 3.50 werden die experimentellen und simulierten Tangentialdehnungen miteinander verglichen. In der Simulation liegen die berechneten Dehnungen unterhalb der experimentellen Werte. Nur am Rohranfang liegt die Dehnrage oberhalb des Experimentes. Ursache hierfür ist, dass im Experiment erst ab ca. 500 mm eine Detonation berechnet wurde, in der xDynFOAM-Simulation aber direkt vom Zündort an. Aufgrund der fehlerhaften Berechnung der H₂-Detonation kann keine quantitative Übereinstimmung erwartet werden. Es kann lediglich das Ergebnis im Hinblick auf Lauffähigkeit und Plausibilität geprüft werden.

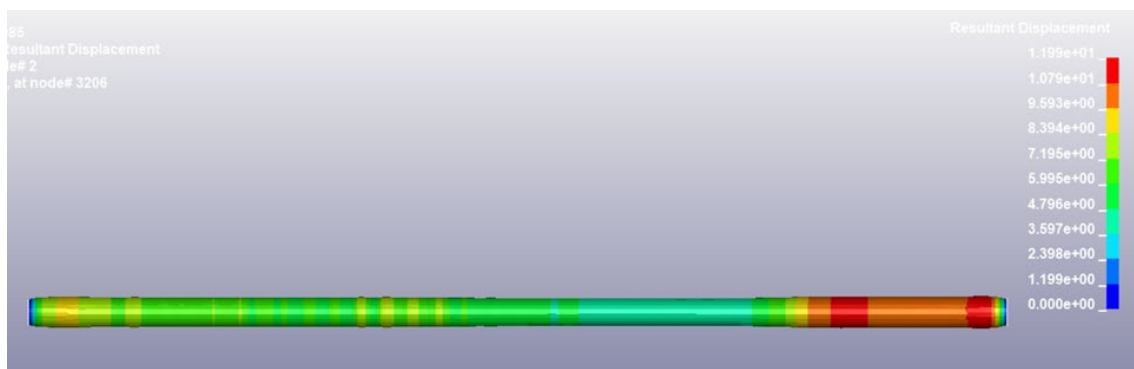


Abb. 3.49 Aufweitung des Rohres zum Zeitpunkt 5 ms, berechnet mit LS-DYNA

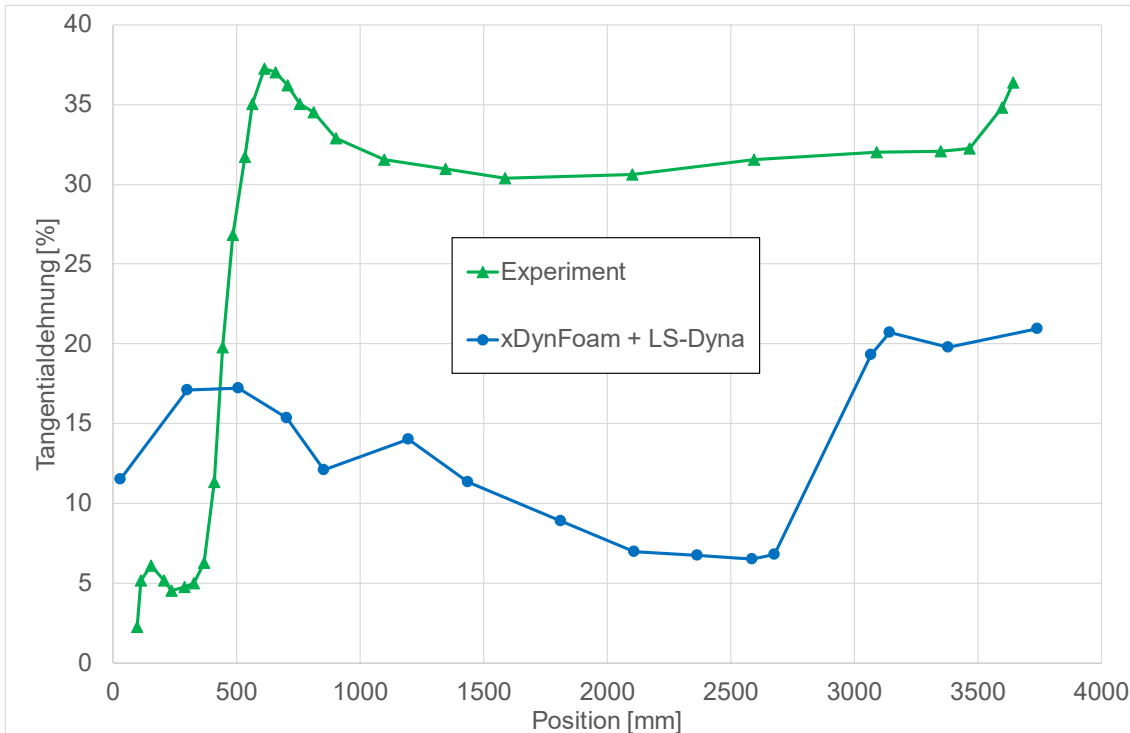


Abb. 3.50 Vergleich von experimenteller und simulierter Tangentialdehnung

3.2.6 Überprüfung der Schnittstelle anhand von Versuchsnachrechnungen (GraVent-Experiment)

Aufbauend auf den Detonationsrechnungen zur GraVent-Anlage sollte weiterhin eine FSI-Analyse durchgeführt werden, in der die Strukturbelastung und Verformung der Hindernisse im Beschleunigungsrohr untersucht wird. Der experimentelle Aufbau der GraVent-Anlage und die durchgeführten OpenFOAM-Rechnungen mit xDynFOAM werden in Kapitel 3.1.7 beschrieben. Für die GraVent-Anlage wurde mit der ANSYS-Workbench eine LS-DYNA-Geometrie der Strukturen erstellt. In Abb. 3.51 ist eine Übersicht der Geometrie mit den Hindernissen dargestellt, Abb. 3.52 zeigt ein Vernetzungsdetail der GraVent-Struktur mit zwei Hindernissen. Die Hindernisse sind geometrisch korrekt abgebildet (Dicke 12 mm), da der Einfluss der H₂-Explosion auf sie untersucht werden sollte. Die äußere Wand ist vereinfacht als 30 mm dicke Stahlplatte abgebildet, hier fehlen geometrische Details aus dem Experiment.

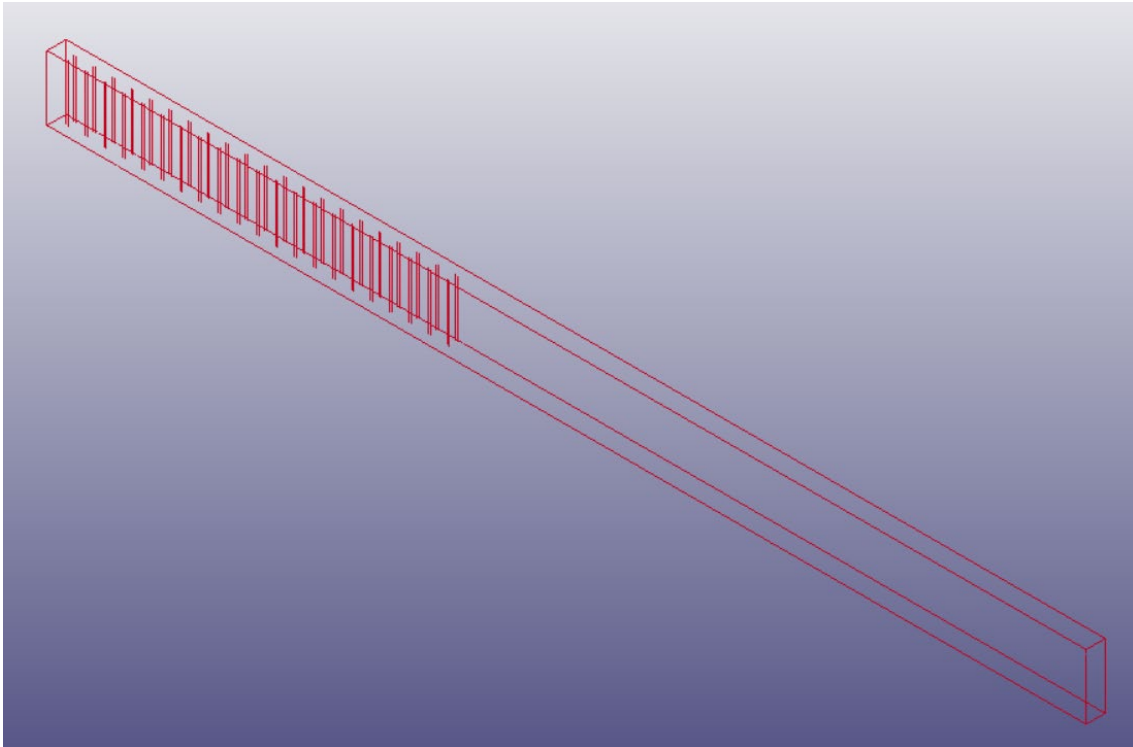


Abb. 3.51 Übersicht zur GraVent-Geometrie

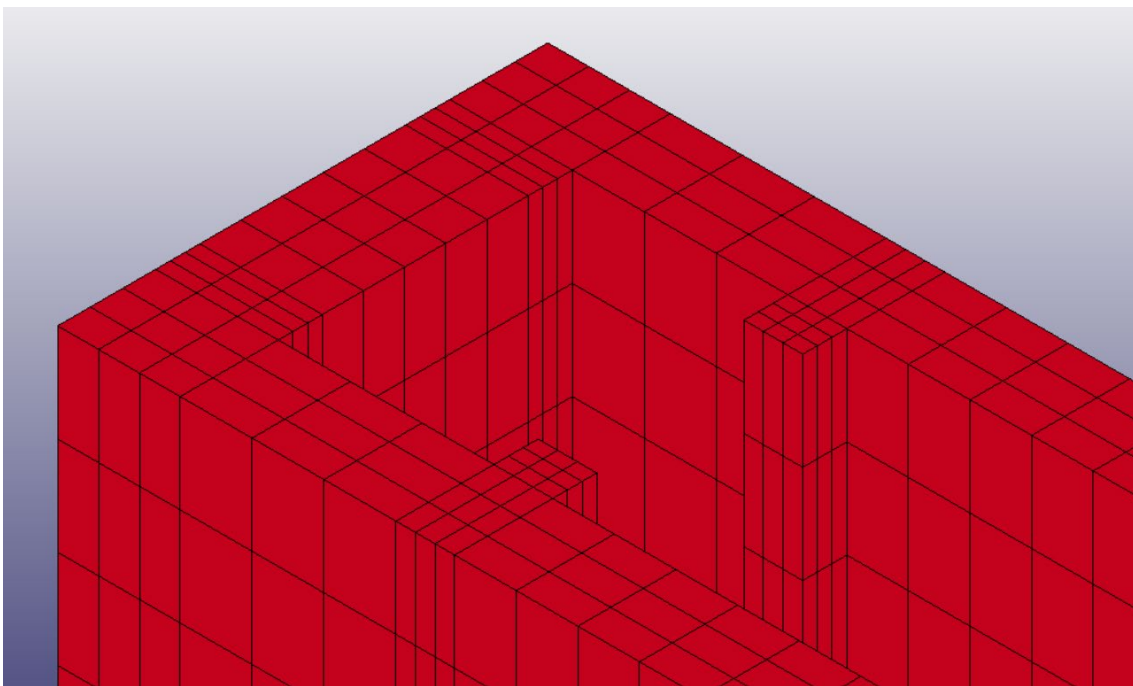


Abb. 3.52 Vernetzungsdetail der GraVent-Strukturen

Zunächst wurden die Druckwerte an 33 Positionen in der xDynFOAM-Simulation berechnet (20 Messpunkte jeweils zwischen den Hindernissen und weitere 13 in der Auslaufstrecke). Diese wurden dann mit dem FS-Converter auf die Strukturen übertragen (Segment-Sets an der GraVent-Innenseite). Abb. 3.53 zeigt den Druck an der Innenseite der

GraVent-Strukturen zum Zeitpunkt 10 ms. In Abb. 3.54 ist die sich daraus ergebende Verschiebung der Hindernisse (in Strömungsrichtung) dargestellt. Diese ist das Ergebnis der Berechnung mit LS-DYNA. In Abb. 3.55 ist exemplarisch der Zeitverlauf der Auslenkung des ersten Hindernisses dargestellt. Zunächst erhöht sich die Auslenkung mit dem ansteigenden Druck bis ca. 13 ms, danach kommt es zu einer Schwingung bzw. Vibration des Hindernisses. Rücklaufende Druckwellen und Reflektionen haben hier weiteren Einfluss auf die Auslenkung. Insgesamt sind die Auslenkungen jedoch sehr klein und es kommt zu keiner plastischen Verformung der Hindernisse. Experimentelle Messwerte hierzu gibt es nicht, die Ergebnisse erscheinen aber zumindest plausibel.

Als weitere Parameterstudie wurde die Anzahl der Pressure-Probes von 33 auf 95 erhöht. Hier ergaben sich jedoch nahezu identische Ergebnisse in der LS-DYNA-Rechnung.

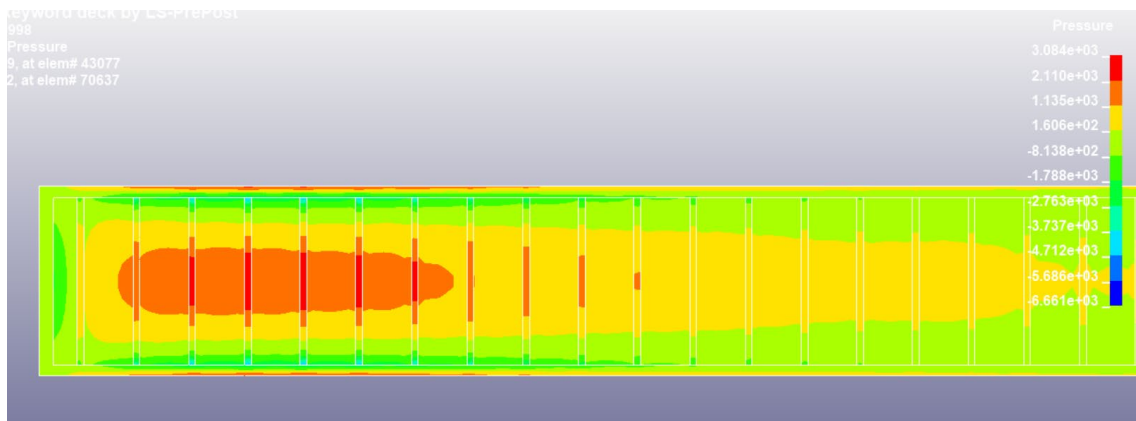


Abb. 3.53 Druck auf der Innenseite der GraVent-Strukturen (t = 10 ms)

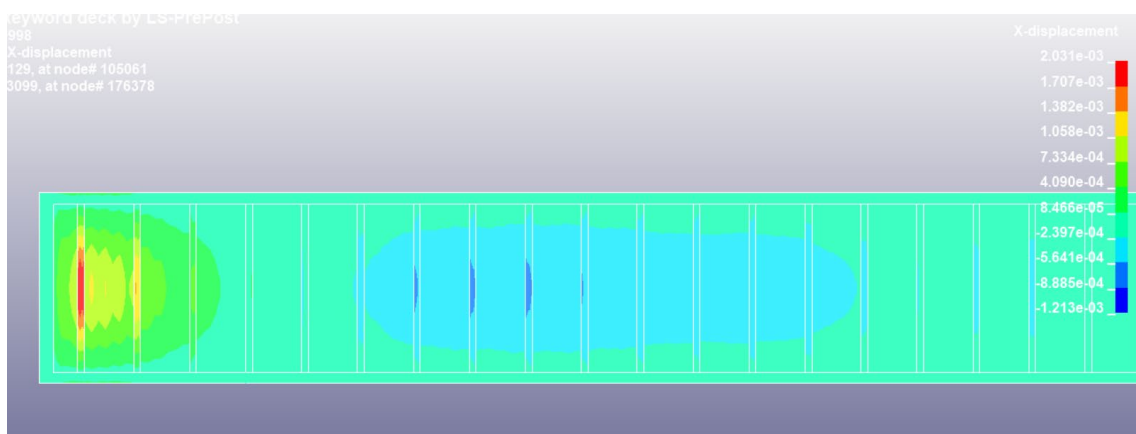


Abb. 3.54 Verschiebung der Hindernisse (t = 10 ms)

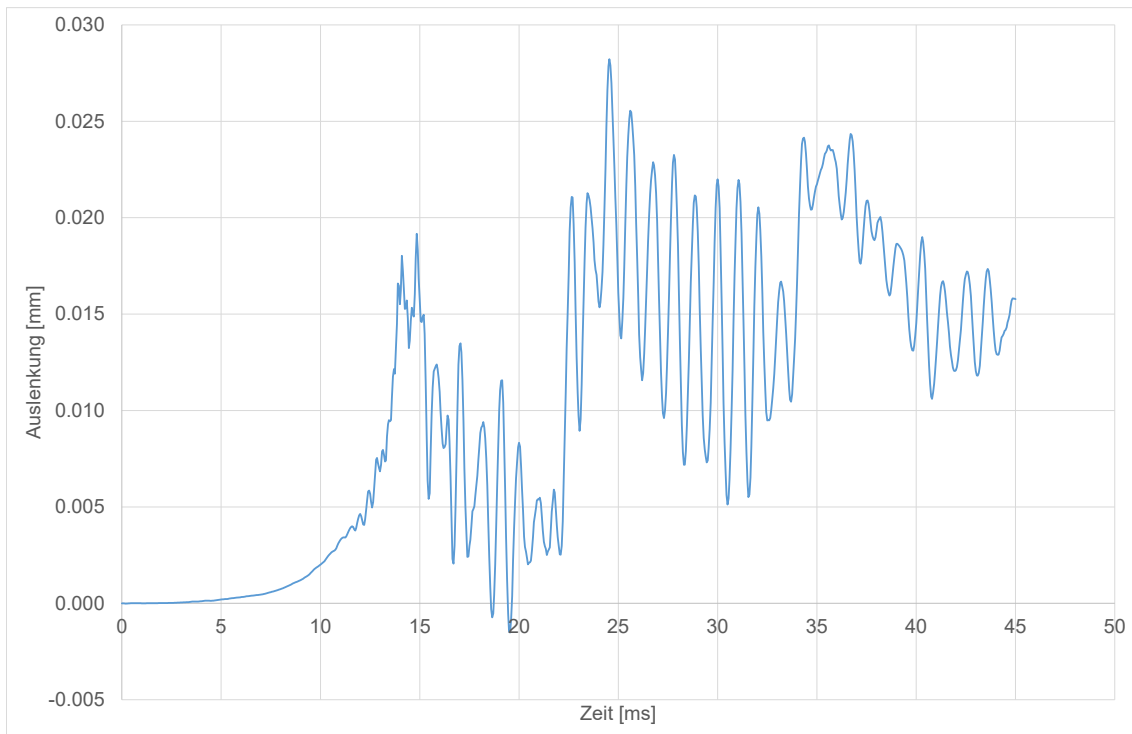


Abb. 3.55 Zeitverlauf der Auslenkung des ersten Hindernisses berechnet mit LS-DYNA

3.2.7 Zusammenfassung AP2.2 (Kopplung CFD und CSM)

Für die Durchführung von Multi-Physik-Analysen zur Fluid-Struktur-Interaktion (FSI) sind geeignete Kopplungen von OpenFOAM zu einem CSM-Programm erforderlich. In diesem Arbeitspaket wurde eine Kopplung von OpenFOAM mit LS-DYNA entwickelt. Dazu wurde ein Kopplungsprogramm (FS-Converter) von der GRS erstellt. Dieses wurde anhand unterschiedlicher Versuche erprobt (HySEA-Experiment, Offermanns-Versuche und ein GraVent-Experiment). Anhand der HySEA-Experimente konnte zudem gezeigt werden, dass mit Hilfe dieses Kopplungsansatzes der Einfluss von Drucklasten auf Strukturen quantitativ mit moderaten, erklärbaren Abweichungen berechnet werden kann.

Mit Hilfe des FS-Converters konnten auch räumlich verteilte Last-Zeit-Funktionen auf komplexere Geometrien wie z. B. die Innenseite der GraVent-Anlage übertragen werden. Die sich aus den Belastungen ergebenden Strukturdeformationen wurden mit LS-DYNA erfolgreich berechnet.

4 AP3 – Untersuchung zur Anwendbarkeit von OpenFOAM für komplexe Containment-Analysen

Ziel des AP3 ist die Überprüfung des in AP1 definierten Referenzsolvers an einem Beispiel aus der Anwendungspraxis. Hierzu soll die Gasverteilung eines ausgewählten Kühlmittelverluststörfalls in einem Konvoi-ähnlichen DWR simuliert werden.

4.1 Erstellung eines Rechenmodells mit OpenFOAM

Zunächst musste ein Rechengitter für die OpenFOAM-Rechnung erstellt werden. Hierzu wurde als erstes versucht, das von der GRS in RS1562 für CFX-Rechnungen genutzte Rechengitter zu verwenden. Dieses Gitter ist in Abb. 4.1 dargestellt. Es enthält sowohl strukturiert vernetzte Bereiche sowie unstrukturierte Bereiche. Unstrukturiert sind insbesondere Bereiche mit komplexer Geometrie (wie z. B. im Reaktorsumpf) wie auch Übergänge zwischen Zonen. Die unstrukturiert vernetzten Bereiche enthalten Zellen mit hoher Nicht-Orthogonalität. Bei ersten Tests mit OpenFOAM führte das zu regelmäßigen Programmabstürzen, da OpenFOAM höhere Anforderungen an die Netzqualität hat als CFX. Hier wurde der Versuch unternommen, mit Hilfe von Pointwise die Gitterqualität zu verbessern und an die Qualitätsanforderungen von OpenFOAM anzupassen. Dieses erwies sich aber aufgrund der Komplexität der Geometrie als nicht praktikabel.

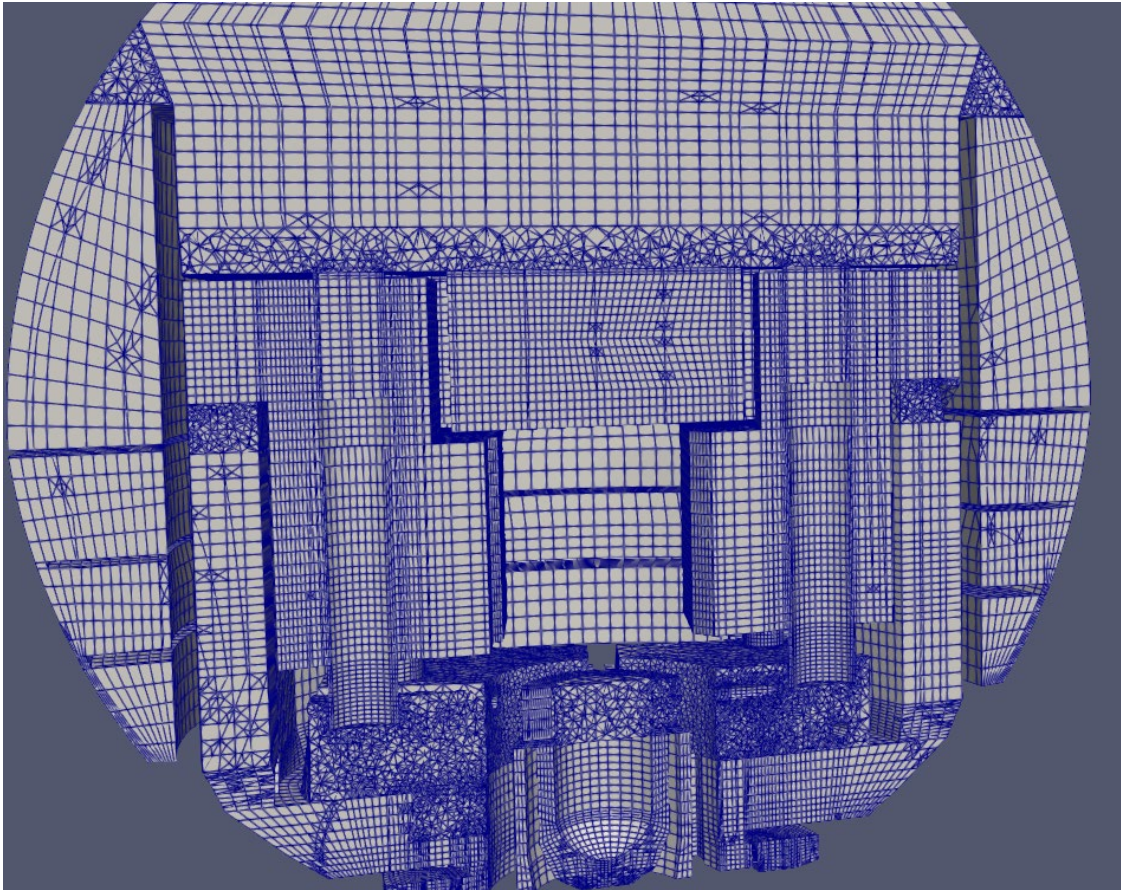


Abb. 4.1 CFX-Rechengitter für ein Konvoi-ähnlichen DWR

Alternativ zur Verwendung eines (angepassten) CFX-Gitters wurde ein eigenes OpenFOAM-Gitter mit Hilfe von SnappyHexMesh erstellt. Hierzu waren folgende Schritte notwendig:

- Zunächst wurden die Oberflächen der (CFX-)Geometrie mit Hilfe von Pointwise in STL-Oberflächen umgewandelt. Dabei gab es vier Bereiche: Atmosphäre, Beton, Stahlschale und Primärkreislauf (mit RDB, Dampferzeuger, Rohrleitungen ...). Weiterhin wurden die Flächen für die Gaseinspeisung am Leck (HKL(Hauptkühlmittelleitung)-Inlet und DH(Druck-Halter)-Inlet) definiert.
- Für SnappyHexMesh wurde ein Hintergrundgitter mit 1 x 1 x 1 m großen Blöcken mit Hilfe von BlockMesh (OpenFOAM-Funktion) erstellt.
- Entlang der STL-Oberflächen wurden dann die Zellen des Hintergrundgitters geteilt. In Wandnähe fand eine Gitterverfeinerung statt.
- Weitere Gitterverfeinerungen wurden durch Definition von refinementRegions in ausgewählten Bereichen erstellt (z. B. in schmalen Durchgängen wie an den Dampferzeugertürmen).

Grundsätzlich gibt es das Problem, dass in SnappyHexMesh keine richtungsabhängige Verfeinerung möglich ist. Deshalb ist immer eine Verfeinerung in drei Raumrichtungen notwendig. Dies führt teilweise zu großen Elementzahlen. Die Lösung hierbei war ein Kompromiss zwischen notwendiger Verfeinerung (z. B. in Wandnähe) und zu großen Elementzahlen. Das aktuelle Gitter hat folgende Elementzahlen:

- Atmosphäre: 7 288 292 Elemente / Freies Volumen: 70231 m³
- Beton: 4 693 910 / Wandfläche: 26734 m²
- Stahlschale 1 441 842 / Wandfläche: 7695 m²

Trotzdem ist das Netz (in Wandnähe) teilweise noch relativ grob. Das Gitter für die Atmosphäre ist in Abb. 4.2 dargestellt. Weitere Informationen zu den verwendeten Modellen finden sich in Tab. 4.1.

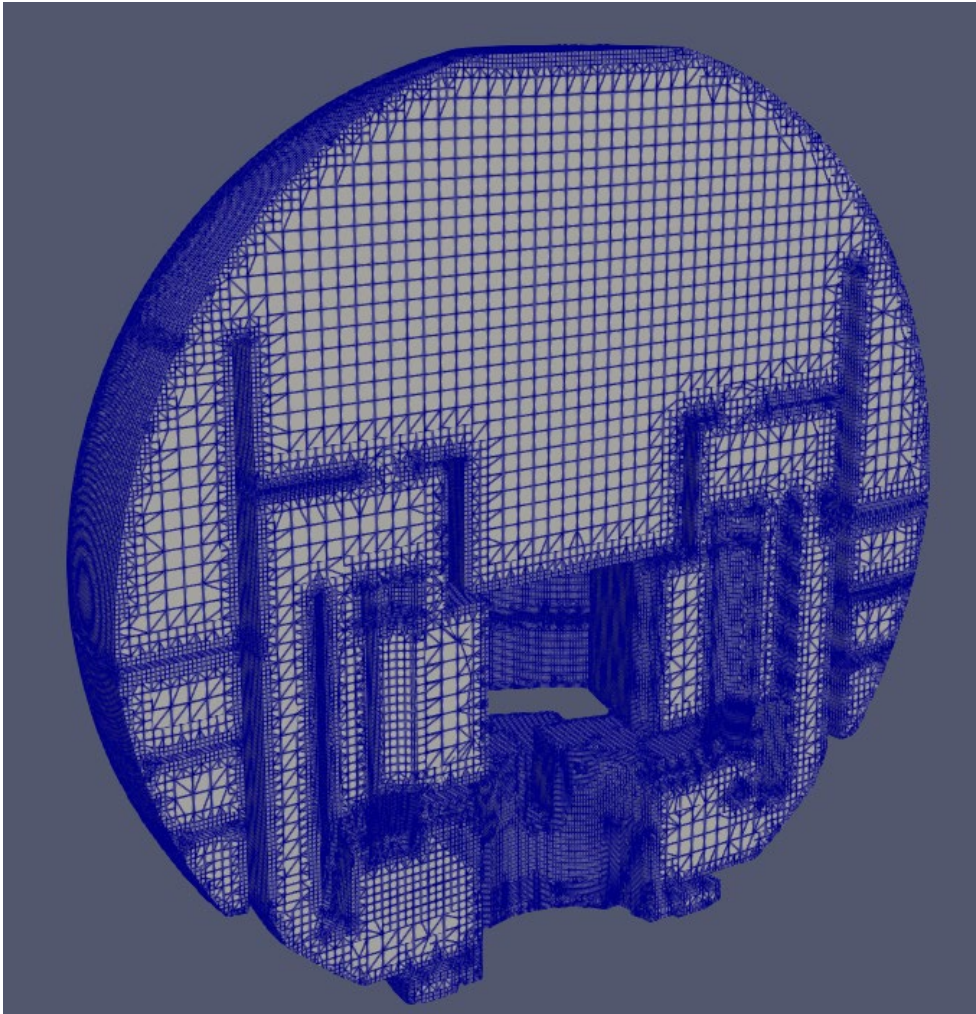


Abb. 4.2 Mit SnappyHexMesh erstelltes Gitter für die OpenFOAM-Rechnungen

Tab. 4.1 Infobox zur DWR-Unfall-Rechnung

Szenario	DWR Surge-Line-Bruch
Phänomene	Gasverteilung / Schichtungsauf- und -abbau / Wandkondensation
Materialien	Luft (AIR), Dampf (H ₂ O), Wasserstoff (H ₂)
Software / Version	OpenFOAM 11
Solver	containmentFOAM
Zeitschritte	Variabel / Max. Courant: 5
Turbulenzmodell	cfKOmegaSST / SGDH
Kondensation	Mit Wandkondensationsmodell / Ohne Volumenkondensation
Diffusionsmodell	Effective Diffusivity / Fuller
Gittererstellung	SnappyHexMesh
Elementzahl	Atmosphäre: 7 288 292, Beton: 4 693 910, Stahlschale: 1 441 842

4.2 Unfall-Szenario

In der vorliegenden Untersuchung wird exemplarisch das Szenario eines generischen Surge-Line-Bruchs betrachtet. Hierbei strömen Wasserdampf und Wasserstoff über den Bruch der Surge-Line in den Sicherheitsbehälter. Es wird unterschieden zwischen der Druckhalter-(DH)-Seite und der Hauptkühlmittelseite (HKL) des Bruchs. Die eingespeisten Massenströme und Temperaturen stammen aus einer MELCOR-Analyse und sind in Abb. 4.3 bis Abb. 4.7 dargestellt.

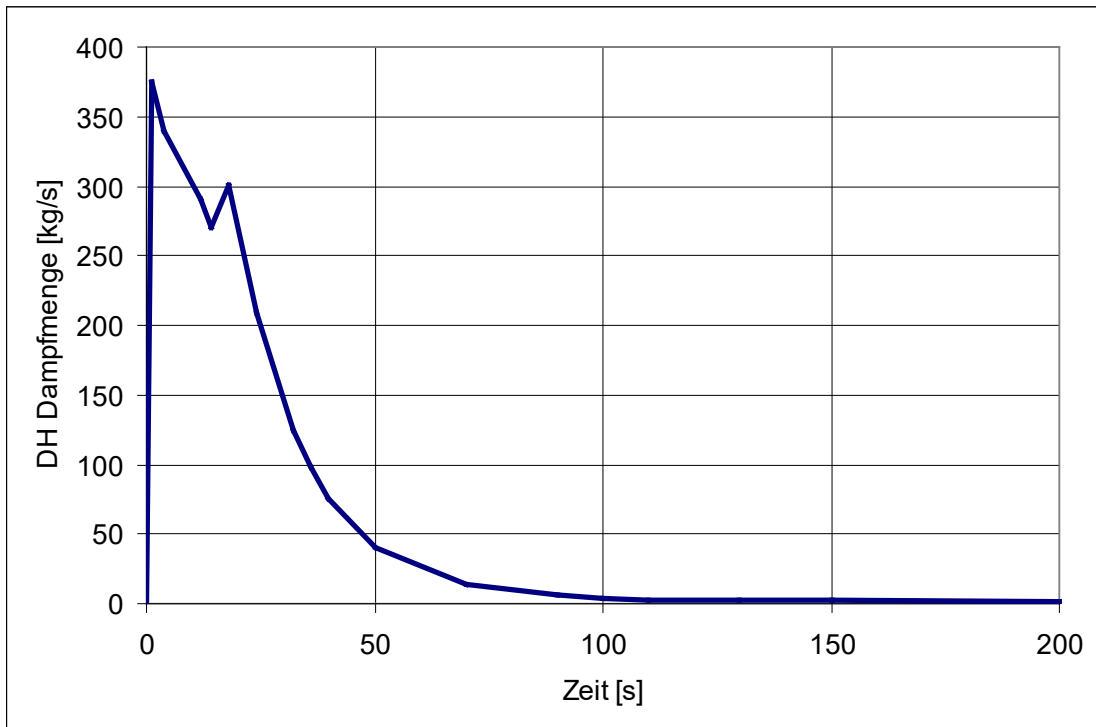


Abb. 4.3 Eingespeiste Dampfmenge aus dem Druckhalter (Randbedingung)

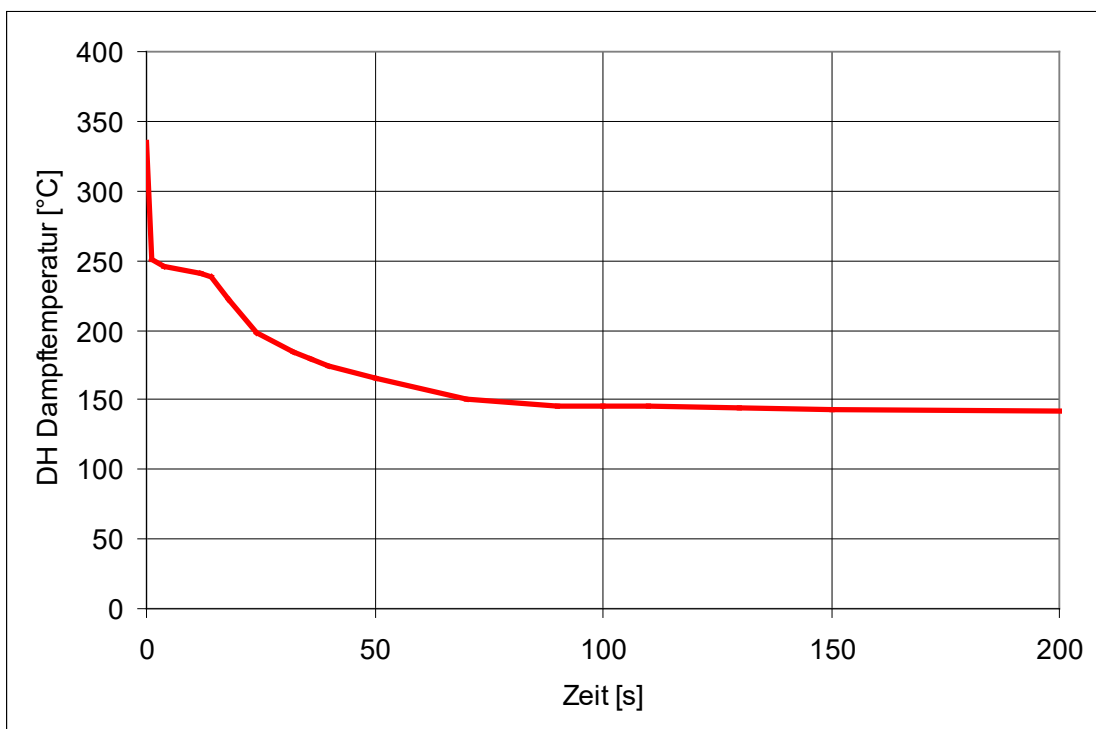


Abb. 4.4 Temperatur des eingespeisten Druckhalter-Dampfes (Randbedingung)

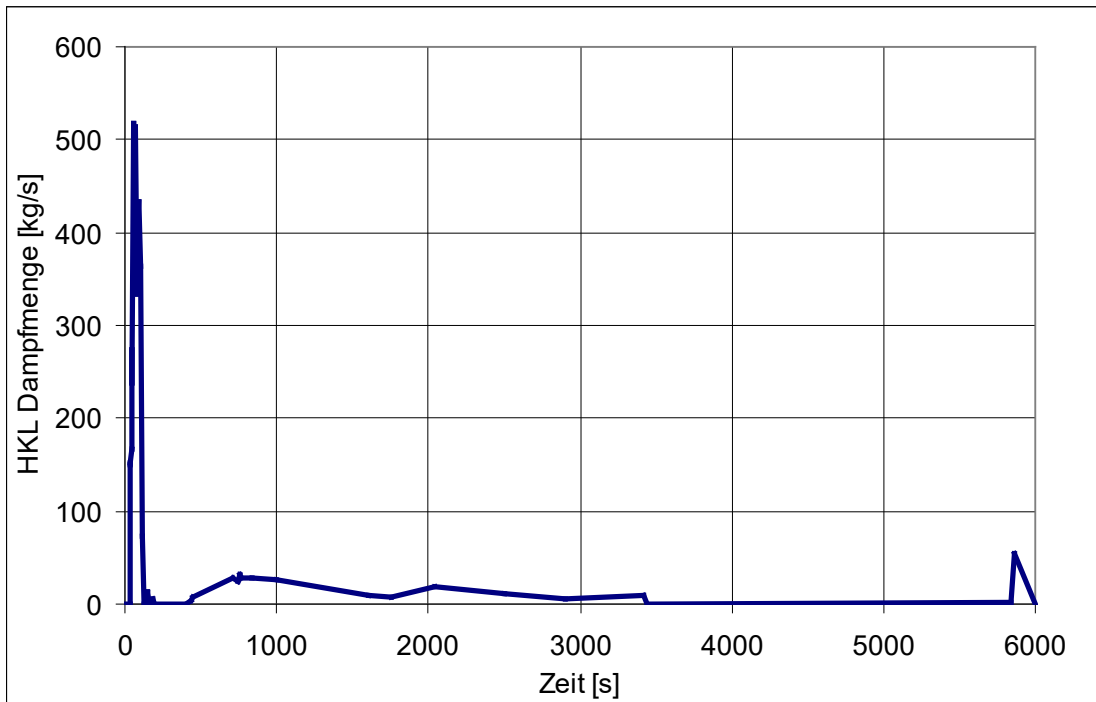


Abb. 4.5 Eingespeiste Dampfmenge aus der Hauptkühlmitteleitung (HKL-Randbedingung)

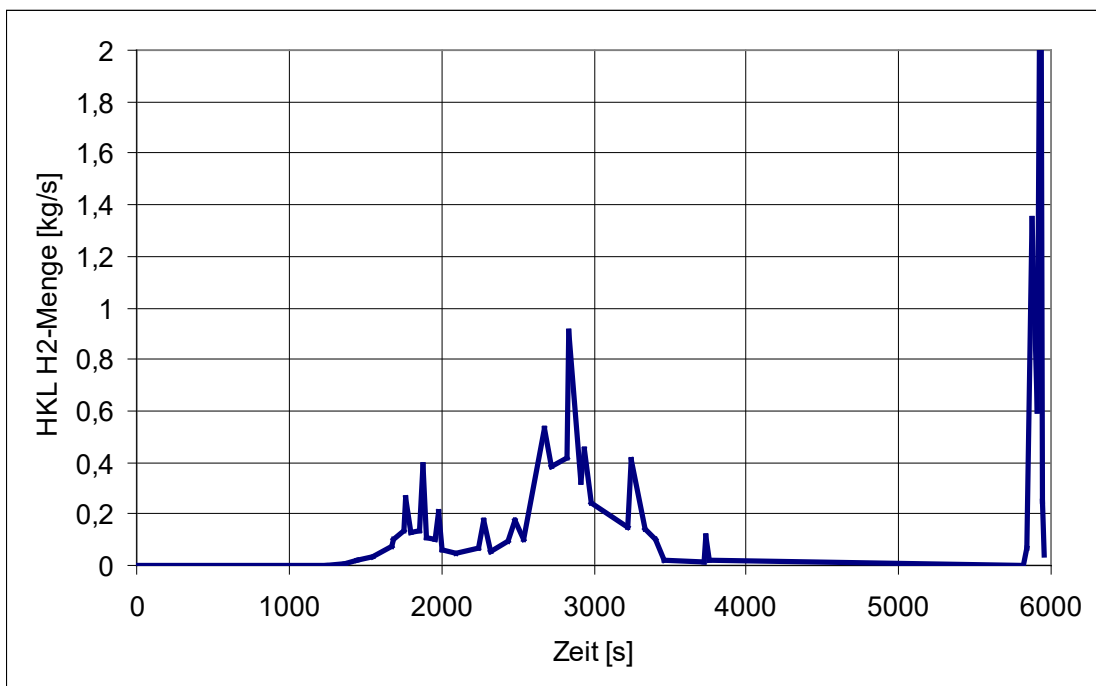


Abb. 4.6 Eingespeiste Wasserstoffmenge aus der Hauptkühlmitteleitung (HKL-Randbedingung)

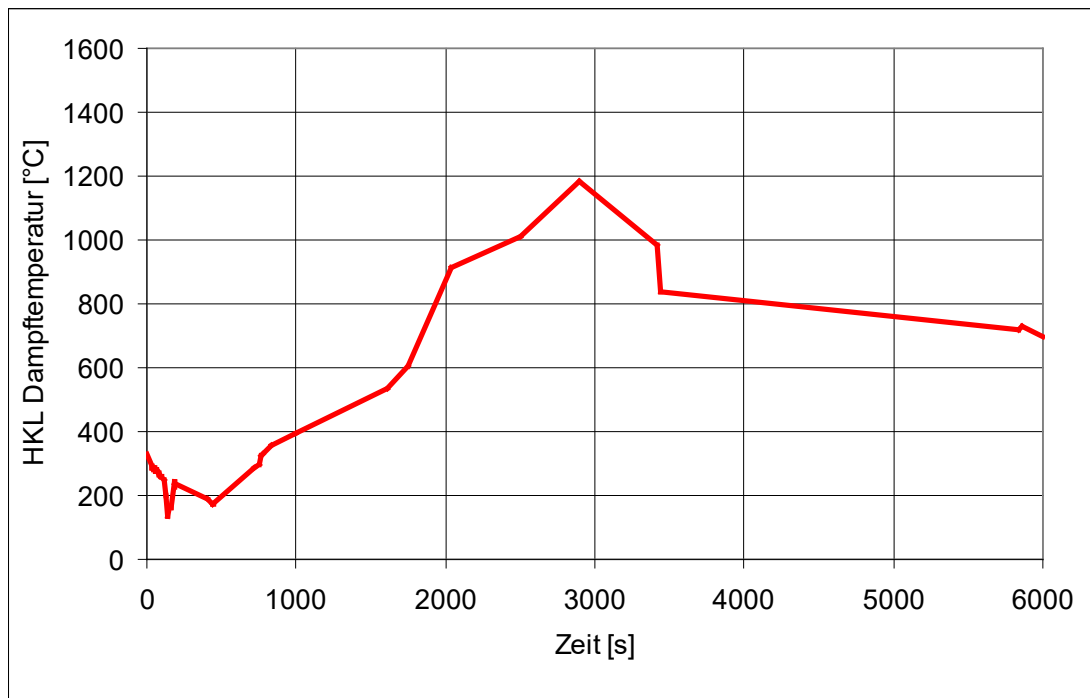


Abb. 4.7 Einspeisetemperaturen der HKL-Seite (Dampf und Wasserstoff)

Die hohen Einspeiseraten unmittelbar nach dem Bruch führten zu hohen Strömungsgeschwindigkeiten und sehr kleinen Zeitschritten. Eine Erhöhung der maximalen Courant-Zahl (über den Wert von etwa 5) führte zu Programmabstürzen und war nicht möglich. Da die Rechnung dadurch (zu) langsam für eine Simulation mit Variationsrechnungen (z. B. zur Wandkondensationsmodellierung) wurde, wurden als Lösung die Einlassflächen am Druckhalter (DH) und an der Hauptkühlmittelleitung (HKL) künstlich vergrößert (dieses ist in Abb. 4.8 dargestellt). Hierdurch werden der Impuls und die Richtung der eingespeisten Gase nicht korrekt wiedergegeben, dafür aber die eingespeisten Massenströme und die Gaszusammensetzung. Dieses ist vergleichbar mit der Einspeisung bei einem Lumped-Parameter-Code. Durch die künstliche Vergrößerung konnte die Berechnung in einem sinnvollen Zeitrahmen weitergeführt werden. Bei Durchführung der Simulation hat sich allerdings gezeigt, dass ein gleichmäßigeres Gitter im Einspeisebereich sinnvoll ist. In zukünftigen Simulationen sollte das Gitter im Einspeisebereich verbessert werden. Alternativ kommt auch eine Volumenquelle – wie sie vom FZJ in den AMYHYCO-Simulationen verwendet wurde – in Betracht.

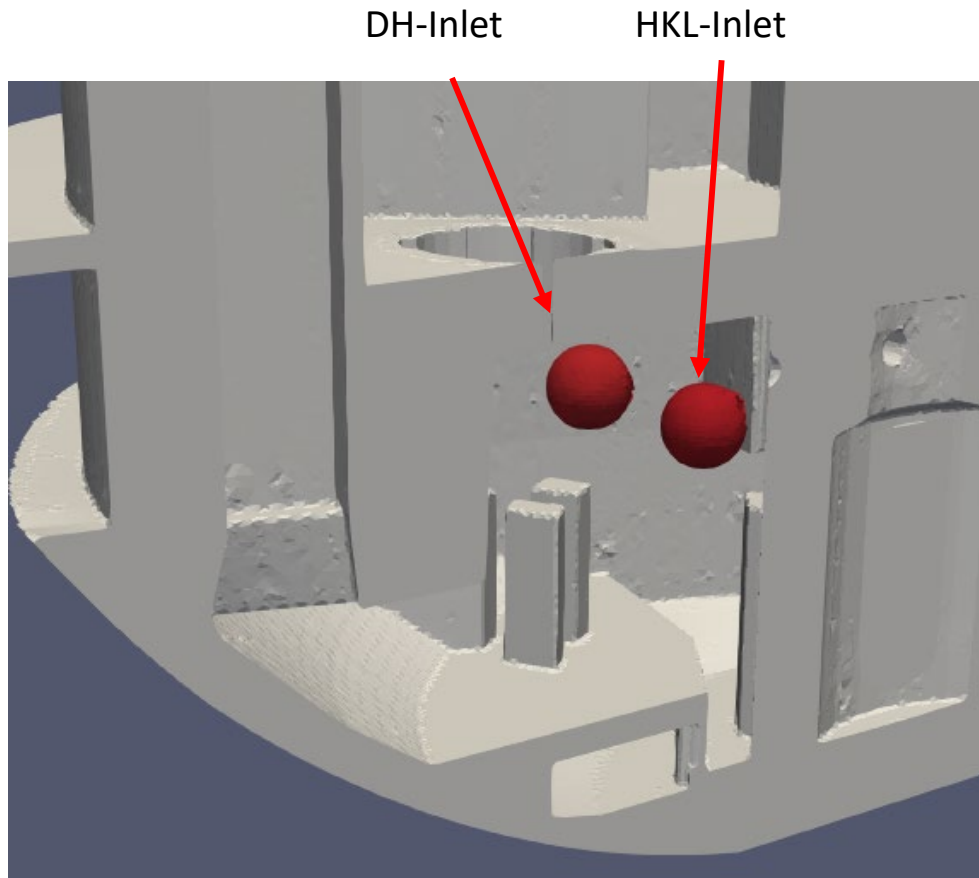


Abb. 4.8 Künstliche Vergrößerung der Einspeisestellen

Im weiteren Verlauf der Rechnung kam es wiederum zu neuen Programmabstürzen. Hierbei traten unrealistisch (hohe) Temperaturen an den Betonwänden auf. Als Ursache konnte identifiziert werden, dass es bei hohen Kondensationsraten und bei reinem Dampf (Konzentration bei nahezu 100 %) an der Wand zu numerischen Problemen beim Kondensationsmodell kam. Als pragmatische Lösung wurde dem eingespeisten Dampfstrahl eine kleine Menge H_2 (0,1 Mass.-%) beigemischt, so dass kein reiner Dampf an den Wänden vorlag. Diese Lösung ermöglichte es weiterzurechnen, ohne dass es erneut zu Programmabstürzen kam. Allerdings entsteht hierdurch ein Fehler bei der eingespeisten H_2 -Menge. Im Gespräch mit der GRS wurden vom FZJ verschiedene Lösungsansätze für dieses numerische Problem beim Wandkondensationsmodell entwickelt. (z. B. Begrenzung der lokalen Wandkondensationsrate). Als am erfolgreichsten hat sich eine Neu-Implementation des Wandkondensationsmodells gezeigt. Bis dahin wurde eine Pseudo-Konzentration (Dirichlet BC) an der Wand berechnet, um den Nettomassenstrom der nicht-kondensierbaren Gase durch die Wand auf null zu setzen. Damit gab es bei hohen Kondensationsraten numerische Probleme. Dies erfolgt nun (bei Auswahl der Option „latentHeatToSolidVolume true“ in der neuen containmentFOAM-Version) implizit

als Gradient und die Randbedingung nonCondensableGasMassFraction ist nun eine echte Neumann-Randbedingung. Bei Testfällen mit dem AMHYCO-Containment durch das FZJ hat sich gezeigt, dass die Probleme damit behoben wurden. Da die neue Version erst kurz vor Ende des Projektes (April 2025) vorlag, konnte sie nur zu einer weiteren Berechnung des Unfall-Szenarios genutzt werden. Weitere Tests und Parameterstudien waren nicht mehr möglich. Die Ergebnisse dieser Rechnung sollen im Folgenden diskutiert werden.

Abb. 4.9 zeigt im Überblick, wie sich das H₂ im Laufe der Zeit in den unterschiedlichen Räumen des Containments verteilt. Insgesamt erscheint diese Verteilung plausibel.

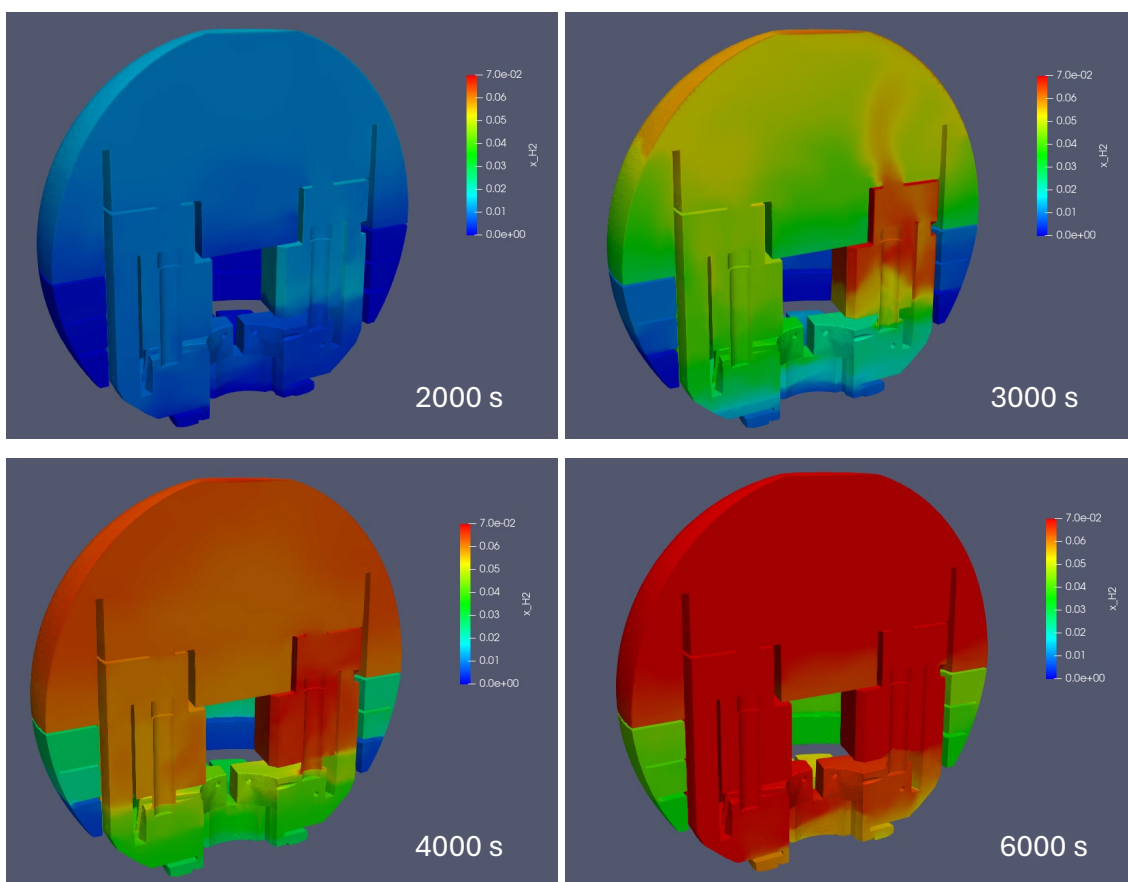


Abb. 4.9 Verteilung der H₂-Konzentration zu unterschiedlichen Zeitpunkten (die Farbskala geht jeweils von 0 – 7 Vol.-%)

4.3 Vergleich mit CFX und COCOSYS

In Abb. 4.10 wird der mit containmentFOAM berechnete Druckverlauf mit den Druckverläufen von CFX und COCOSYS verglichen. Der anfängliche Peak ist etwas niedriger als bei CFX und COCOSYS, danach passt der Verlauf zunächst gut. Ab etwa 1500 s liegt

der mit containmentFOAM berechnete Druck unterhalb der CFX- und der COCOSYS-Werte. Mögliche Ursache für die Unterschiede zwischen containmentFOAM und CFX bzw. COCOSYS ist insbesondere eine unterschiedliche Wandkondensationsrate. Abb. 4.11 zeigt die integrale Dampfmasse im Containment. Hier ist zu sehen, dass der niedrigere Druck (in Abb. 4.10) mit einer niedrigeren Dampfmasse korreliert. Durch das größere Gitter kann es in der containmentFOAM-Rechnung zu einer unterschiedlichen Wandkondensationsrate kommen. Damit SnappyHexMesh keine richtungsabhängige Verfeinerung möglich war, ist insbesondere das Gitter in Wandnähe (im Gas und in der Wand) gröber. Dies führt zu unterschiedlichem Wärmetransfer und zu unterschiedlichen Kondensationsraten. Dadurch ändert sich wahrscheinlich auch die Verteilung des Dampfes im Containment. Weiterhin führt ein unterschiedliches Gitter in engen Durchlässen (z. B. Ringspalt im Dampferzeugerraum) zu einer unterschiedlichen Durchströmungsrate. Das kann die globale Gasverteilung beeinflussen.

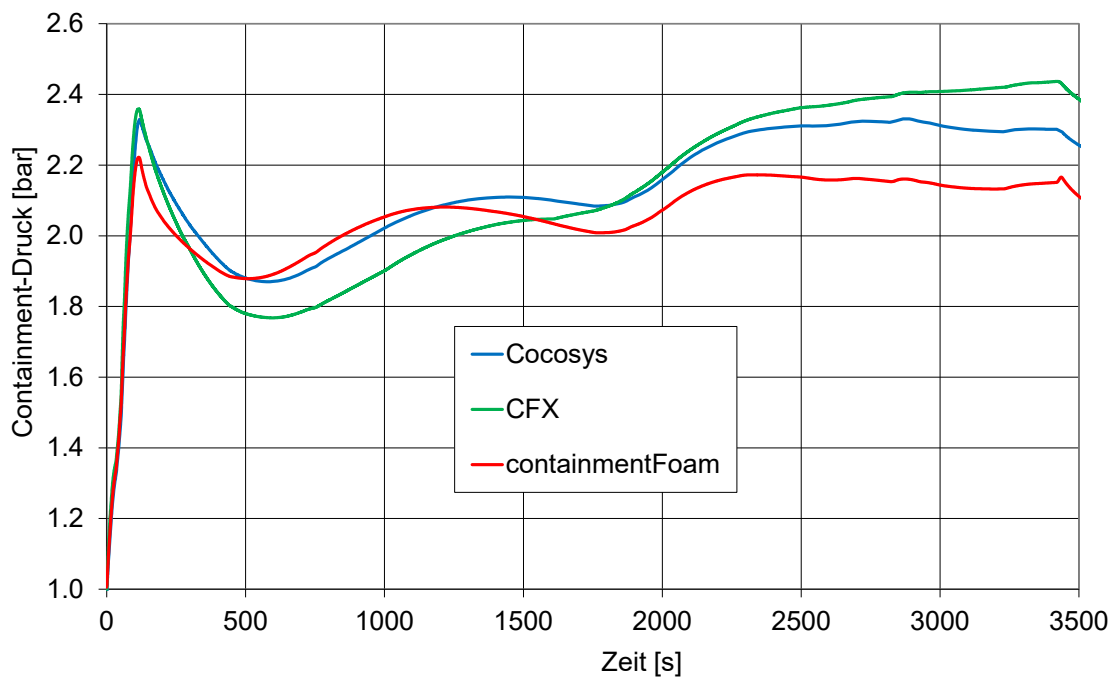


Abb. 4.10 Druckverlauf im Containment

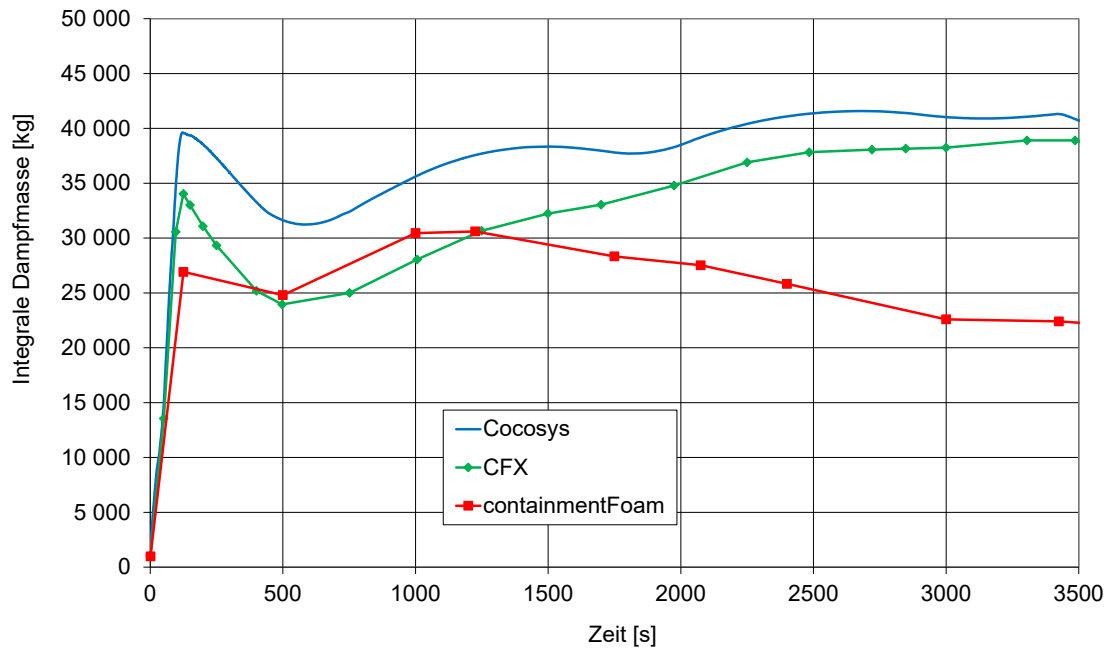


Abb. 4.11 Integrale Dampfmasse im Containment

Anhand zweier Monitorpunkte im Dampferzeugerturm wird in Abb. 4.12 gezeigt, dass in einzelnen Räumen zeitweise H_2 -Schichtungen auftreten können. Hier ist eine dreidimensionale Bewertung mit CFD-Programmen sinnvoll.

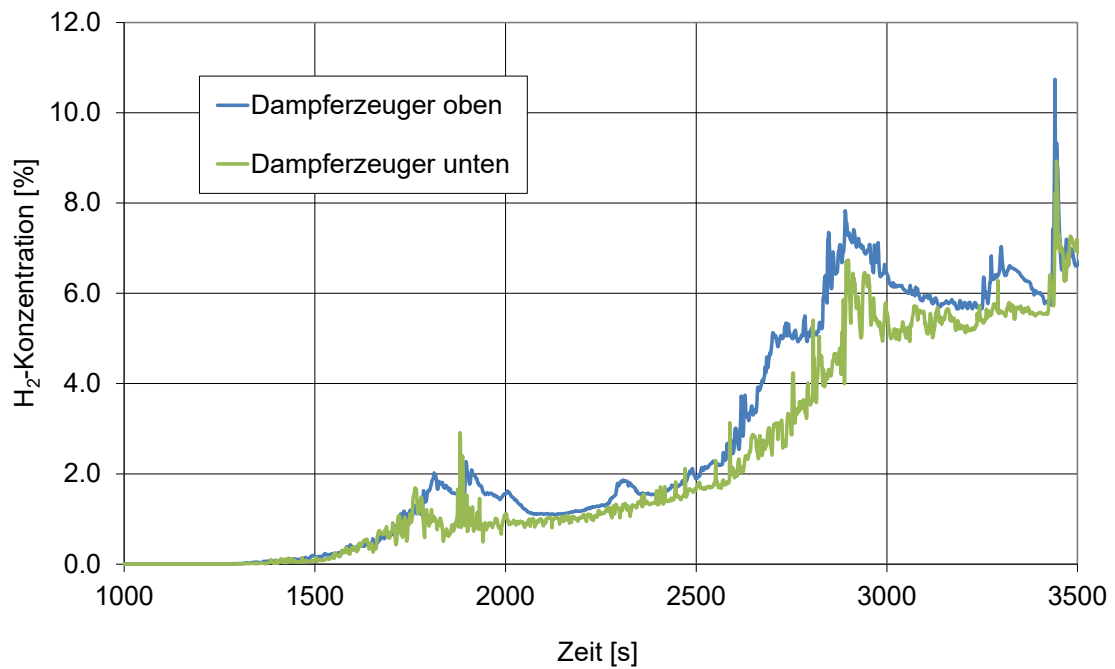


Abb. 4.12 H_2 -Konzentration im Dampferzeugerturm

Um einzelne Zonen (vergleichbar mit COCOSYS) im Containment auszuwerten und die Werte mit anderen Rechnungen (CFX, COCOSYS) zu vergleichen, müssen für die entsprechenden Bereiche mit OpenFOAM cellZones erzeugt werden. Im folgenden Beispiel werden die mittlere Temperatur, die H₂- und die Dampfkonzentration im Dom bestimmt (entspricht in COCOSYS Zone D50). Hierzu sind folgende Schritte notwendig:

1. Erstellung einer STL-Oberfläche für die Dom-Zone mit Pointwise (Cadence). Heraus schreiben in eine Datei D50.stl. Kopieren in das Fallverzeichnis.
2. Erstellung eines cellSets mit Hilfe von topoSet (Datei „topoSetDict“ im Verzeichnis system/Atmosphäre anlegen). Start über Kommandozeile mit „topoSet -region Atmosphäre“.

```
{
name      Dom;
type      cellSet;
action    new;
sourcesurfaceToCell;
sourceInfo
  {
    file "/GRS/sys/data/user/stw/OpenFOAMRuns/Konvoi/
          Konvoi_Rechnung_13/constant/triSurface/D50.stl";
    outsidePoints((0 0 30));
    includeCutfalse;
    includeInside true;
    includeOutside false;
    nearDistance -1;
    curvature 0.9;
  }
}
```

3. Umwandlung des cellSets in eine cellZone (Eingabe über Kommandozeile):
„setsToZones -region Atmosphäre“

4. Auswertung als function im controlDict:

```
type                volFieldValue;
functionObjectLibs  ("libfieldFunctionObjects.so");
region              Atmosphäre;
enabled              true;
log                  false;
writeFields          false;
executeControl       230imestep;
executeInterval      1;
writeControl         outputTime;
writeInterval        1;
operation            volAverage;
```

```

fields                (H2 H2O T);
regionType            cellZone;
name                  Dom;

```

Im Folgenden werden die so ermittelten Werteverläufe mit den Ergebnissen aus CFX und COCOSYS verglichen. In Abb. 4.13 wird der Temperaturverlauf im Dom verglichen. Der erste Anstieg passt gut zur CFX-Rechnung. Danach liegen die Werte insgesamt bis etwa 3500 s höher als die CFX- (und COCOSYS-Rechnung). Die möglichen Gründe für die Abweichung wurden schon weiter oben beim Druckverlauf diskutiert. Der Verlauf der Dampfkonzentration wird in Abb. 4.14 dargestellt. Hier steigt die Konzentration zunächst schneller an als in CFX und in COCOSYS. Zu einem späteren Zeitpunkt (etwa ab 2500 s) liegt die Dampfkonzentration unterhalb der anderen Simulationen. Hier scheint bei containmentFOAM durch die höhere Kondensationsrate und dem integral niedrigeren Dampfgehalt auch lokal weniger Dampf vorzuliegen.

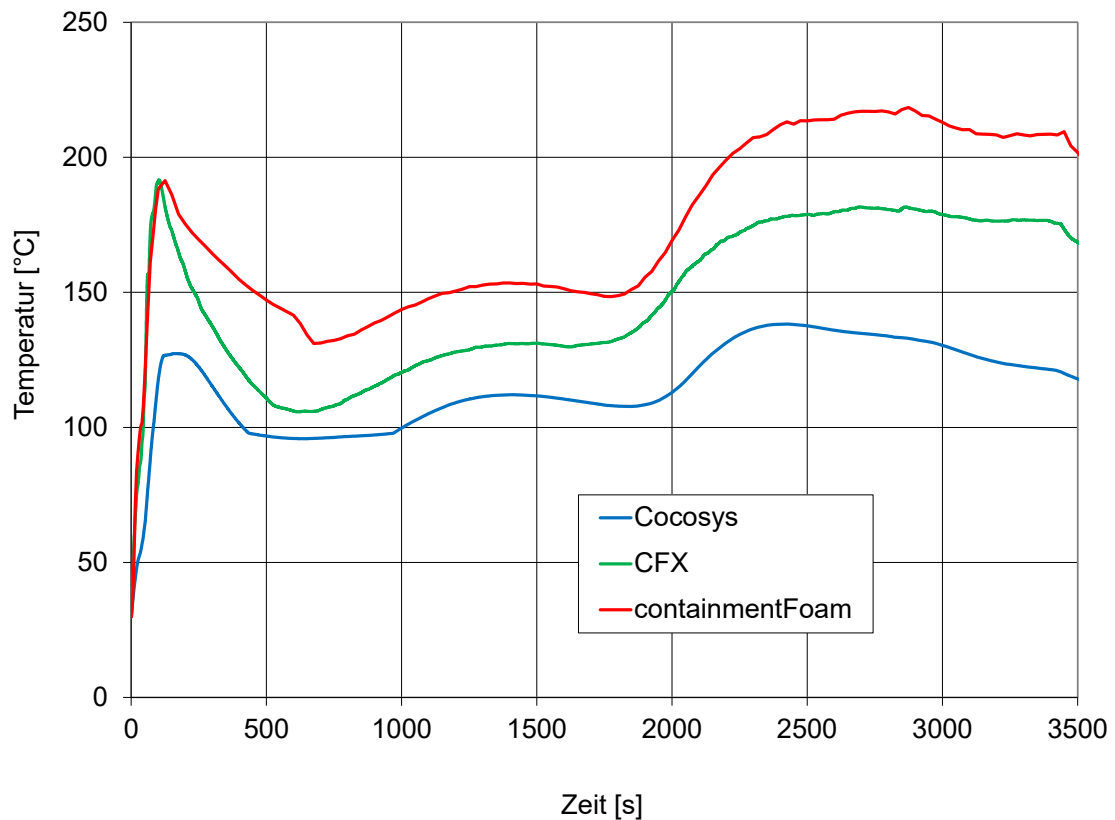


Abb. 4.13 Temperaturverlauf im Dom

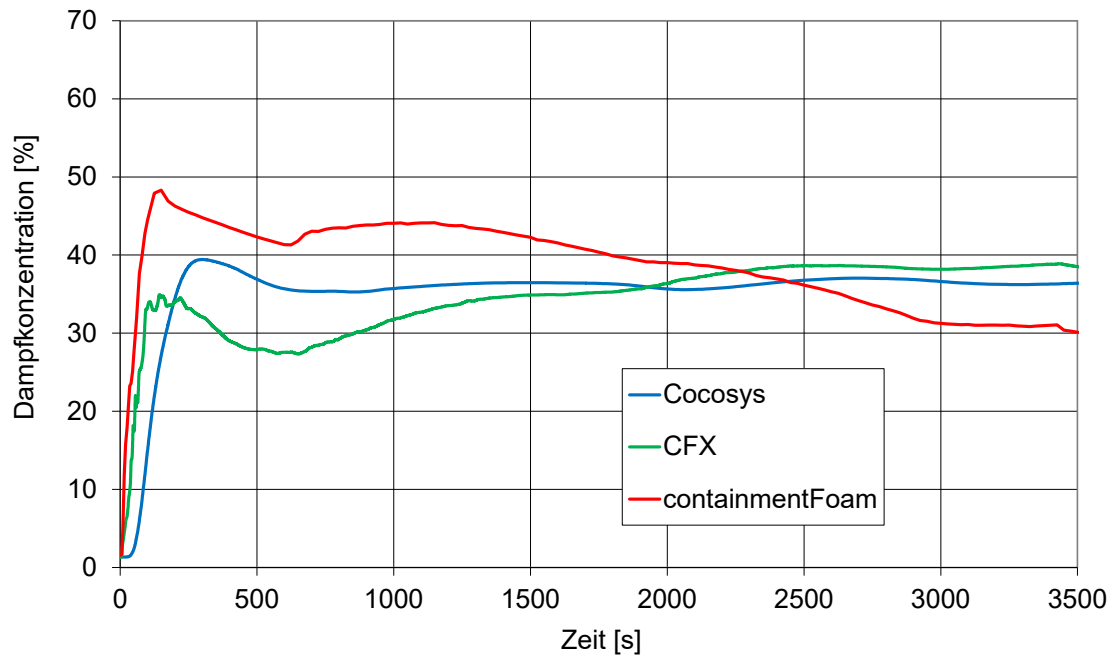


Abb. 4.14 Verlauf der Dampfkonzentration im Dom

Bei der H_2 -Konzentration im Dom (siehe Abb. 4.15) gibt es eine starke Abweichung zu den anderen Rechnungen. Integral stimmt die H_2 -Masse im Containment mit der eingespeisten Menge bis ca. 3500 s überein, dieses wird in Abb. 4.16 gezeigt. Zum Teil kann die Abweichung im Dom dadurch erklärt werden, dass es eine andere Kondensationsrate und einen anderen Dampfgehalt im Dom gibt (siehe Abb. 4.14). Eine weitere mögliche Ursache für die Abweichung kann eine andere Verteilung des H_2 auf die Räume des Containments sein.

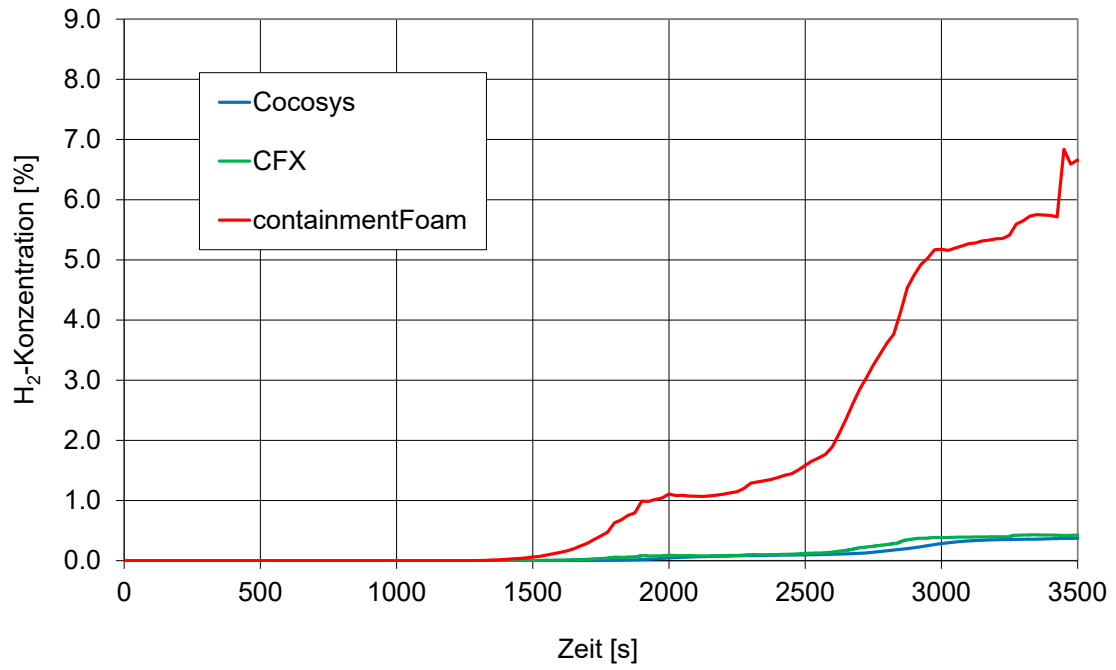


Abb. 4.15 Verlauf der H₂-Konzentration im Dom

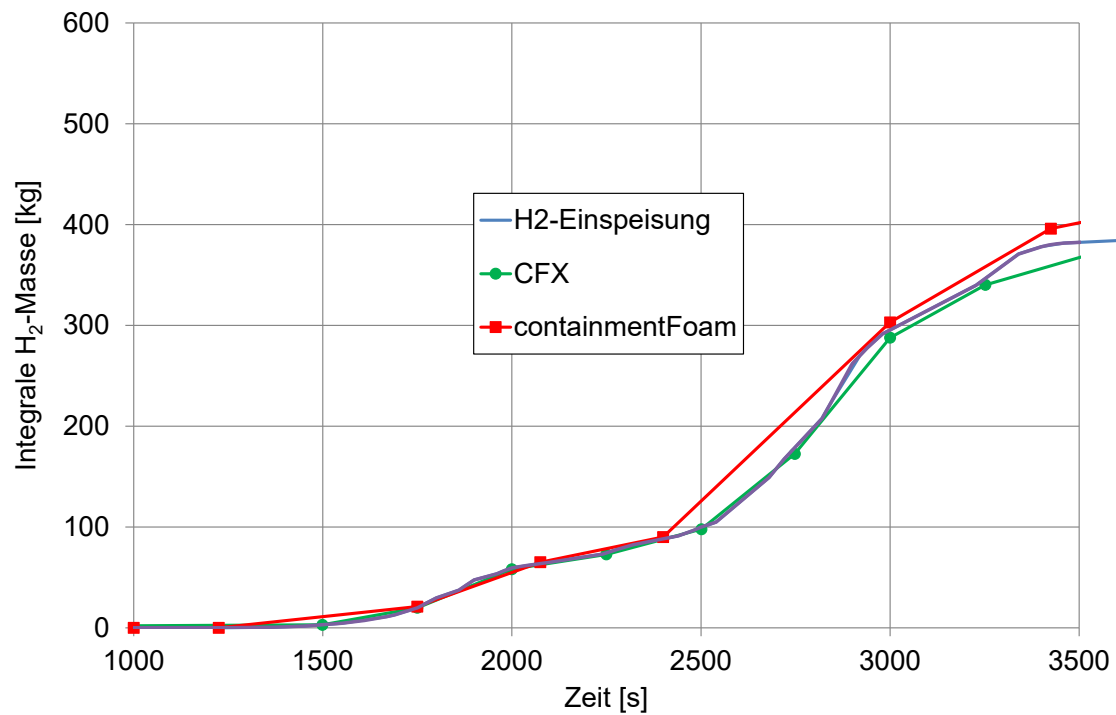


Abb. 4.16 Integrale H₂-Masse im Containment

4.4 Zusammenfassung und Fazit

In dem vorliegenden AP3 wurde durch die Simulation eines Kühlmittelverluststörfalls die Leistungsfähigkeit von containmentFOAM überprüft. Hierzu wurde ein Rechenmodell erstellt und am Fall eines Surge-Line-Bruchs getestet. Die Rechenzeit des gesamten Unfallszenarios betrug bei Verwendung von 96 CPUs etwa drei bis vier Wochen. Bei der Rechnung traten unterschiedliche Probleme auf. In Tab. 4.2 wird nochmals ein Überblick über diese Probleme und die (kurzfristig) entwickelten Lösungen gegeben. Mit der neuen Implementation des Wandkondensationsmodell konnte der Störfall mit containmentFOAM erfolgreich simuliert werden. Es wurde aber auch noch weitergehender Entwicklungsbedarf bzw. weitere Entwicklungsmöglichkeiten abgeleitet. Vorschläge hierzu sind in der rechten Spalte von Tab. 4.2 beigefügt. Die Berechnungsergebnisse mit containmentFOAM wurden mit älteren CFX- und COCOSYS-Ergebnissen verglichen. Es ergibt sich ein plausibler qualitativ ähnlicher Verlauf, es wurden aber auch Unterschiede identifiziert.

Tab. 4.2 Überblick über die Problemstellungen und Ableitung von Weiterentwicklungsbedarf

Problem	Lösung (kurzfristig)	Zukünftiges Weiterentwicklungspotential
Zu schlechte Gitterqualität (Nicht-Orthogonalität) des CFX-Gitters	Erstellung eines neuen (orthogonalen) Gitters mit Hilfe von SnappyHexMesh	Testen weiterer Vernetzungssoftware, z. B.: ESI-Version von SnappyHexMesh: ermöglicht richtungsabhängige Gitterverfeinerung /VIL 19/ cfMesh /CRE 25/: ermöglicht bessere Vernetzung von Gittern in Wandnähe
Zu grobes Gitter in Wandnähe	Kompromiss zwischen notwendiger Gitterfeinheit und Elementzahl	
Zu kleine Zeitschritte wegen hoher Strömungsgeschwindigkeiten in der Anfangsphase	Künstliche Erweiterung der Einlassquerschnitte	Evtl. gezielte Gittervergrößerung in Strahlrichtung (mit Pointwise)
Numerische Probleme des Wandkondensationsmodells bei hohen Kondensationsraten und hoher Dampfkonzentration an der Wand	Problem durch neue Implementation des Wandkondensationsmodells gelöst	Weitere Tests des verbesserten Wandkondensationsmodells des FZJ
Numerische Probleme durch Gitterqualität im Einlassbereich	Verbesserung der Vernetzung Verwendung einer Volumeneinspeisung	

5 AP 4 Nationale und internationale Zusammenarbeit bzgl. CFD-Anwendung

Die nationale und internationale Zusammenarbeit bzgl. CFD-Anwendung ist ein zentraler Punkt bei der Ermittlung und Weiterentwicklung des Stands von Wissenschaft und Technik. Im Rahmen dieses Arbeitspunkts hat sich die GRS an nationalen und internationalen Treffen/Konferenzen aktiv beteiligt. Die GRS hat das jährliche CFD-Verbund-Treffen organisiert. Dabei wurden regelmäßig GRS-Arbeiten zu Containment-Fragestellungen vorgestellt. Themen der vorgestellten Arbeiten waren:

- Koordination von OpenFOAM-Aktivitäten (Containment)
- Gasverteilung in einem generischen Containment
- Passive Wärmeabfuhr bei SMRs (THAI VII SMR)
- Wandkondensationsmodellierung mit unterschiedlichen OpenFOAM-Solvern (CONAN, PANDA 4bis)
- Simulation einer Gegenströmung mit containmentFOAM (THAI TH-35)
- Simulation von H₂-Verbrennung mit OpenFOAM (THAI HD-7, ENACCEF-2, HYSEA TP-37)
- Simulation von Gebäudekondensatoren (PANDA H2P6-1 und H2P6-2)

Die GRS hat an den Treffen des PRG des OECD/NEA-PANDA-Projekts teilgenommen. Bei den Treffen wurden die Versuchsdurchführung und Messinstrumentierung mit den Experimentatoren abgestimmt. Dadurch konnte sichergestellt werden, dass alle für die Validierung benötigten Daten verfügbar waren. Nach Abschluss der Versuche wurden die experimentellen Ergebnisse diskutiert. Es bestand auch die Möglichkeit, analytische Arbeiten auf den PRG-Treffen vorzustellen und mit den Experimentatoren und anderen Organisatoren zu besprechen. Dies war teilweise Ausgangspunkt für weitere Experimente, um noch experimentelle Unsicherheiten zu beseitigen (z. B. gemessener Druck in den HYMERES H2P2- Experimenten) oder es konnten Simulationen verbessert werden, in dem realistischere Randbedingungen oder Modelle gewählt wurden. In diesem Rahmen hat die GRS ausgewählte Arbeiten mit Bezug zu diesem Versuchsprogramm vorgestellt:

- Simulation von Wärmestrahlung mit OpenFOAM und CFX (H2P2)
- Simulation von Gebäudekondensatoren (H2P6-2)
- Simulation der Gasströmung in Mehrraumgeometrie (P1A1-3)

Die GRS hat sich mit offenen (Step 0) und blinden Simulationen (Step 1 und Step 2) am ETSON-AMHYCO-Verbrennungsbenchmark beteiligt. Im Rahmen des AMHYCO-Projekts wurde der ETSON-AMHYCO-Benchmark /BEN 24/ organisiert. In ihm wurde die H₂/CO-Verbrennung bei Bedingungen untersucht, die denen in der späten Phase (Ex-Vessel-Phase) eines schweren Unfalls entsprechen. In der ersten Phase des Benchmarks (Step 0) hatten die Teilnehmer Gelegenheit, anhand offener Nachrechnungen ihren Code an einer generischen Mischung zu testen (Tab. 5.1). In der blinden Phase (Step 1 und Step 2) wurde die Verbrennung in der ENACCEF-Versuchsanlage für Bedingungen simuliert, die denen im AMHYCO-Projekt berechneten kritischen Gasgemischen entsprechen (Tab. 5.1). Die GRS hat sich an beiden Versuchsphasen mit xDyn-FOAM-Simulationen beteiligt. Dabei kam das in AP2.1 (Abschnitt 3.1) getestete Coupled-Modell erstmals für H₂/CO-Verbrennung zum Einsatz. Offene Nachrechnungen zu Step 1 und Step 2 konnten im Rahmen von RS1603A nicht mehr durchgeführt werden. Es zeigte sich, dass die Flammenbeschleunigung teilweise signifikant unterschätzt wird, was dann auch zu einer Unterschätzung der Druckpeaks führte. An verschiedenen Stellen wurde Weiterentwicklungsbedarf identifiziert:

- Berechnung der laminaren Flammgeschwindigkeit bei H₂/CO-Gemischen
- Modellierung / Validierung des Einflusses von Flammeninstabilitäten bei H₂/CO-Verbrennung
- Berücksichtigung von CO₂ im unverbrannten Gas
- Wärmestrahlungsmodellierung und konvektive Wärmeverluste an den Wänden.

Eine detaillierte Darstellung der Ergebnisse im zweiten nicht öffentlichen Teil des Abschlussberichts zu finden.

Tab. 5.1 Startbedingungen im ETSON-AMHYCO Verbrennungsbenchmark

	H₂ [Vol.-%]	CO [Vol.-%]	H₂O [Vol.-%]	CO₂ [Vol.-%]	T [C°]	P [bar]
Step 0	12,6	12,58	30	0	100	1
Step 1	7,9	7,45	20,3	16,05	88	2,47
Step 2	9,92	1,3	21,9	0	83	1,71

6 Koordination der OpenFOAM-Aktivitäten zu Containment-fragestellungen

6.1 Bereitstellung einer Plattform zum Austausch von Code und Daten

Eine gemeinsame und koordinierte Entwicklung und Validierung von OpenFOAM-Solvern bzw. Modellen ist wichtig, um Doppelentwicklungen zu vermeiden und die qualitätsgesicherte Entwicklung möglichst effizient durchzuführen. Deshalb ist es notwendig, Modelle / Solver anderen Instituten zur Verfügung zu stellen und sie langfristig verfügbar zu halten. Dazu hat die GRS einen passwortgeschützten GitLab-Server eingerichtet. Nationale Partner des CFD-Verbunds erhalten nach Zustimmung zu den Nutzungsbedingungen des Servers Zugang zum passwortgeschützten Server und können dort Daten herunterladen. In Abstimmung mit der GRS besteht die Möglichkeit, eigene Solver / Modelle der Community über den GitLab-Server zur Verfügung zu stellen.

Die containmentFOAM-Entwicklung (Solver, Testbeispiele, Dokumentation) wird als Spiegel des entsprechenden Servers des FZ Jülich verfügbar gemacht.

Mitte 2024 hat die GRS den Verbrennungs-Solver xDynFOAM von der TU München übernommen, nachdem das entsprechende Forschungsvorhaben /ZIV 23/ und die Doktorarbeit von Herrn Zivkovic abgeschlossen waren und keine unmittelbar anschließende Weiterentwicklung an der TU-München vorgesehen war. xDynFOAM sowie das GRS-PAR-Modell sind ebenfalls über GitLab verfügbar. xDynFOAM wurde im Rahmen dieses Projekts in AP 2.1 (Abschnitt 3.1) einer Validierung unterzogen. Arbeiten zur Softwarepflege des GRS-PAR-Modells sind im Abschnitt 6.2 zu finden. Des Weiteren werden über einen GitLab-Server ausgewählte Validierungssimulationen zu unterschiedlichen Fragestellungen verfügbar gemacht (TH-35, CONAN, THAI-HR-5, H2P2-5). Diese Validierungsmatrix soll schrittweise erweitert werden.

6.2 Softwarepflege des GRS-PAR-Modells

6.2.1 Motivation

Im Rahmen des Vorhabens RS1181 /SCH 10/ wurde ein Modell für passive, autokatalytische Rekombinatoren für ANSYS CFX entwickelt und im Rahmen von Nachfolgevorhaben weiterentwickelt und validiert /SCH 14/, /SCH 17/. Das Modell basiert auf AREVA-

Gleichungen, die die Rekombination von Wasserstoff für AREVA-PARs beschreiben. Die Korrelationen wurden von der GRS anhand von Versuchsdaten weiterentwickelt (zusätzliche Korrelation für Effizienz, Modifizierung im Fall von Sauerstoffarmut). Dieses Rekombinator-Modell wurde nach OpenFOAM-6 portiert und an den GRS-Solver cht-MultiRegionSchmidtFOAM gekoppelt /SCH 22/. Mit dem vom FZ Jülich entwickelten Modell REKO-DIREKT steht ein mechanistisches Rekombinator-Modell in containmentFOAM zur Verfügung. Da Modelle, die auf den AREVA-Gleichungen basieren, weite Anwendung insbesondere bei Lumped-Parameter-Codes finden, wurde entschieden, das GRS-PAR-Modell neben REKO-DIREKT als weiteres Modell an den in AP1.4 ausgewählten Referenzsolver containmentFOAM zu koppeln. Dies ermöglicht eine detaillierte Untersuchung zum Einfluss der unterschiedlichen PAR-Modellierungen auf das Simulationsergebnis.

6.2.2 Vorgehensweise bei der Pflege des GRS-PAR-Modells

Das GRS-PAR-Modell wurde über „codedFixedValue“-Randbedingungen für Größen am Patch für den PAR-Einlass, den PAR-Auslass und die PAR-Wand implementiert. Es wird dabei auf gemittelte Größen am PAR-Einlass (Temperatur, Druck, Gaszusammensetzung) und an der PAR-Wand auf den integralen Wärmestrom zurückgegriffen. Diese Größen sind unabhängig vom verwendeten Solver, da keine solverspezifischen Funktionen oder Variablen genutzt werden. Deshalb war es problemlos möglich, das Modell auch mit dem Solver containmentFOAM zu nutzen. Bei Umstellung von containmentFOAM-6 auf containmentFOAM-9 waren bis auf allgemeine, nicht PAR-Modell spezifische Änderungen in den Setup-Dateien, keine größeren Änderungen notwendig. Anhand eines generischen Testbeispiels (Ein PAR in einem abgeschlossenen Raum mit initialer H₂-Konzentration) kann die Implementation des PAR-Modells im Hinblick auf Lauffähigkeit, Plausibilität und Abweichung bei einer neuen Code-Version getestet werden. Bei der Umstellung von containmentFOAM-6 auf containmentFOAM-9 wurde allerdings die Implementation des Modells überarbeitet. Deshalb wurde das PAR-Modell mit dem überarbeiteten Modell anhand des THAI-Versuchs HR-5 weitergehend validiert. Diese Validierung wird in den folgenden Abschnitten detailliert dokumentiert. Die OpenFOAM-Bibliotheken der Version 9 und der Version 11 unterschieden sich stark, da von der OpenFOAM-Foundation zwischenzeitlich der Code umstrukturiert wurde. Deshalb waren auch bei der Umstellung von containmentFOAM-9 auf containmentFOAM-11 Änderungen im PAR-Modell notwendig, da sich der Zugriff auf Größen wie den integralen Wärmestrom durch die PAR-Wand geändert hat.

6.2.3 Versuchsbeschreibung THAI HR-5

Die Implementation des PAR-Modells soll auch anhand des THAI-Versuchs HR-5 /KAN 09/ validiert werden. Zu Beginn des Experiments (Abb. 6.1) war der THAI-Behälter mit Luft gefüllt und es lag ein Startdruck von 2,934 bar vor. Die Starttemperatur des Gases betrug ca. 305 K. Im Zeitraum 0 min bis 34,7 min und 102 min bis 145 min wurde über eine ringförmige Einspeise-Geometrie im unteren THAI-Behälter H_2 injiziert (Abb. 6.3). Der Innenzylinder hat bei diesem Experiment eine Höhe von 2 m und an ihm ist der PAR angebracht. Es handelt sich um einen halben PAR von AREVA vom Typ FR-380 (Abb. 6.2). Für diesen PAR-Typ wurden von AREVA die Koeffizienten für die AREVA-Korrelation mit dem Versuchsbericht bereitgestellt /KAN 09/. Am bzw. im PAR wurden die Temperatur, die Gaszusammensetzung und die Strömungsgeschwindigkeit gemessen. Daraus lässt sich die Rekombinationsrate und die Effizienz des PARs bestimmen. Weiterhin wurden im THAI-Behälter an verschiedenen Positionen die H_2 -Konzentration und die Temperatur gemessen, um die sich bei aktivem PAR einstellende Schichtung zu bestimmen. Im Versuch HR-5 beginnt die Wasserstoffrekombination, sobald am PAR-Einlass eine H_2 -Konzentration von ca. 0,1 Vol.-% erreicht wird. Dies ist viel früher als der von AREVA als konservativ angegebene Wert von 2 Vol.-%. Um dieser Abweichung Rechnung zu tragen, wurden zwei Simulationen durchgeführt. Bei einer startet die Rekombination wie im Experiment bei 0,1 Vol.-% (containmentFOAM-9), bei der zweiten werden 2 Vol.-% (containmentFOAM-11) angenommen.

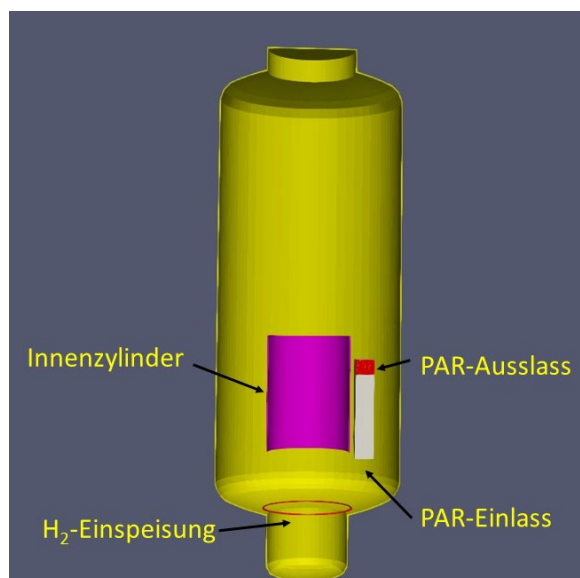


Abb. 6.1 Experimenteller Aufbau des THAI-Versuches HR-5

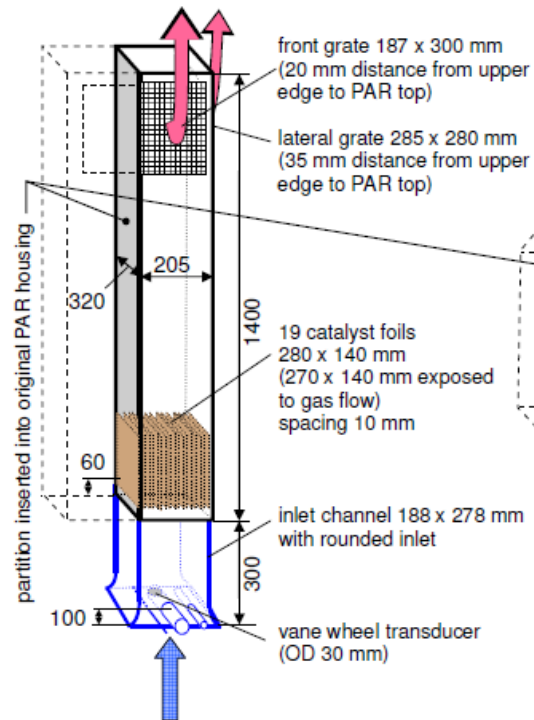


Abb. 6.2 Aufbau des PARs (Typ: AREVA / Siemens: 0.5*FR-380 size)

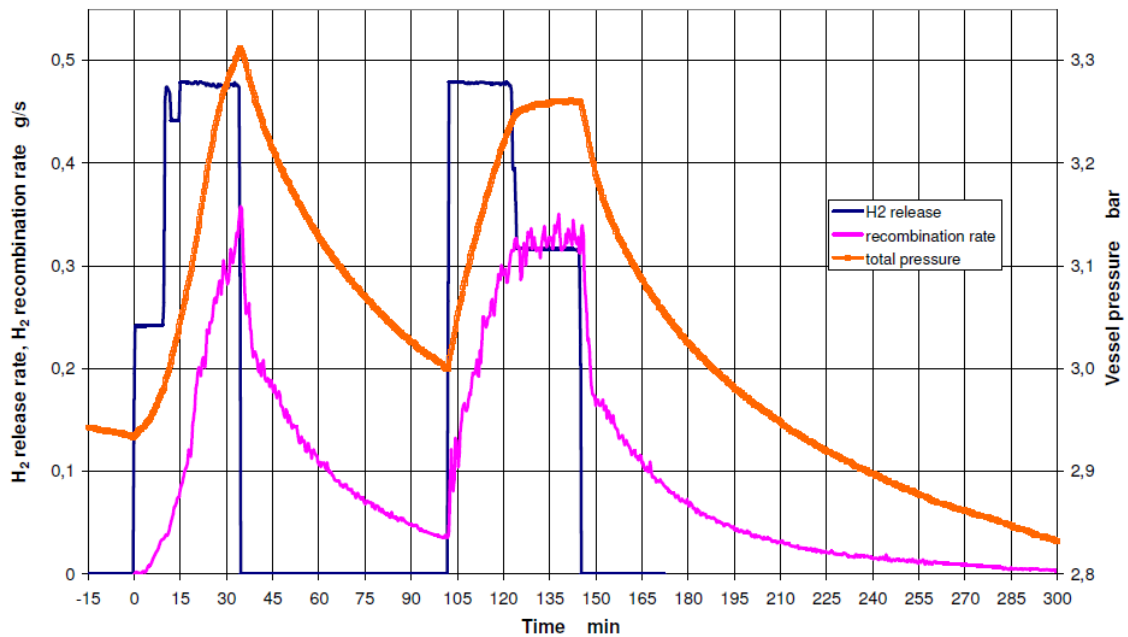


Abb. 6.3 H₂-Einspeiserate, Rekombinationsrate und Druck im Experiment /KAN 09/

6.2.4 Modellierung mit OpenFOAM

Die Nachrechnungen von HR-5 erfolgten mit containmentFOAM-9 bzw. containmentFOAM-11. Die Modellierung des PARs erfolgt mit dem zu validierenden GRS-PAR-Modell. Es wurden die Standardmodelle für Gasverteilungssimulationen verwendet, wie

sie auch in containmentFOAM-GUI den Voreinstellungen (Stand 2023) entsprechen. Die Turbulenz wird mit dem SST-Modell cfkOmegaSST-SGDH modelliert. Die Diffusion wird mit dem „effective Diffusivity“-Modell berechnet, da vier Komponenten (H_2 , O_2 , H_2O , N_2) vorliegen. Wärmestrahlung wird mit dem P1-Strahlungsmodell berücksichtigt. Der Absorptionskoeffizient von Dampf beträgt 10 (m bar)^{-1} . Um Wärmeverluste an der Isolierung zu berücksichtigen, wird ein Wärmeübergangskoeffizient von $1,5 \text{ W / (m}^2 \text{ K)}^{-1}$ bei einer Außentemperatur von 304,15 K angenommen. Dies entspricht der Temperatur des Gases im THAI-Behälter zu Beginn des Experiments. Es wurde ein CFD-Gitter bestehend aus 445000 strukturierten Zellen verwendet. Es basiert auf dem in RS1562 /SCH 22b/ verwendeten Gitter, das aber noch im Bereich des PARs verfeinert wurde. Die H_2 -Einspeisung erfolgt im Experiment über einen Ring mit 58 Öffnungen. In den Simulationen wird die Einspeisegeometrie vereinfacht, indem gleichmäßig über den gesamten Ring eingespeist wird. Das primäre Ziel dieser Arbeiten ist zu zeigen, dass das PAR-Modell korrekt implementiert wurde. Deshalb wurde auf eine Studie zum Einfluss des CFD-Gitters und auf eine Variation von Modellen verzichtet, lediglich der Startwert für die Rekombination bei kaltem PAR wurde variiert (2 Vol.-% bzw. 0,1 Vol.-%, (xstart2, xstart0.1)).

6.2.4.1 Vergleich der Simulationsergebnisse mit dem Experiment

H_2 -Abbau des PARs

Die Rekombination des PARs wird insgesamt gut von den Simulationen wiedergegeben (Abb. 6.7, Abb. 6.8). Beim Vergleich der Rekombinationsrate aufgetragen über dem H_2 -Molenbruch am PAR-Eintritt ist eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulationen zu erkennen (Abb. 6.8). Die H_2 -Eintrittskonzentration ist bei diesem Versuch in der betrachteten ersten und zweiten Versuchsphase die entscheidende Größe, die die Rekombinationsrate bestimmt. Vergleicht man die Änderung der Rekombinationsrate aufgrund des Druckanstiegs (Abb. 6.5), so beträgt sie im Experiment laut AREVA-Korrelation weniger als 12 %. Die im PAR-Modell implementierte Korrelation und die Modellkonstanten für den im Versuch genutzten Rekombinator sind in der Lage, den H_2 -Abbau in guter Übereinstimmung mit dem Experiment zu beschreiben. Bei Betrachtung des zeitlichen Verlaufs der Rekombinationsrate ist die Abweichung zum Experiment etwas größer, da die H_2 -Konzentration am PAR-Eintritt auch etwas vom experimentellen Wert abweicht (Abb. 6.4). Sobald der PAR in der Simulation mit der Rekombination beginnt, wird der H_2 -Molenbruch am PAR-Eintritt überschätzt, was zu einer etwas stärkeren Rekombination führt. Durch die H_2 -Einspeisung nimmt der H_2 -

Molenbruch am Eintritt weiter zu. Nach ca. 1400 s ist der H₂-Anstieg in den Simulationen schwächer als im Experiment, so dass eine geringere maximale Eintrittskonzentration erreicht wird. Dadurch erreichen die Simulationen eine etwas geringere maximale Abbaurrate als das Experiment. Nach ca. 2300 s stimmen der H₂-Molenbruch am PAR-Eintritt und auch die Rekombinationsrate wieder gut mit dem Experiment überein. Die Abweichungen bei der Rekombinationsrate sind also im Wesentlichen auf Abweichungen bei der Berechnung der H₂-Verteilung zurückzuführen. Als eine mögliche Ursache hierfür ist dabei die geometrisch vereinfachte Modellierung der H₂-Einspeisung zu nennen (siehe unten).

Die vom Modell berechnete Effizienz des PARs stimmt gut mit dem Versuch überein (Abb. 6.9). Beim Vergleich der Effizienz ist nur der Bereich relevant, bei dem auch ein H₂-Abbau stattfindet, für niedrige H₂-Konzentrationen können sie vernachlässigt werden. In der zweiten Phase des Experiments (nach 2100 s) ist die Effizienz in den Simulationen tendenziell etwas zu niedrig. Ursache ist die Überschätzung des Drucks, der zu einer etwas niedrigeren Effizienz führt.

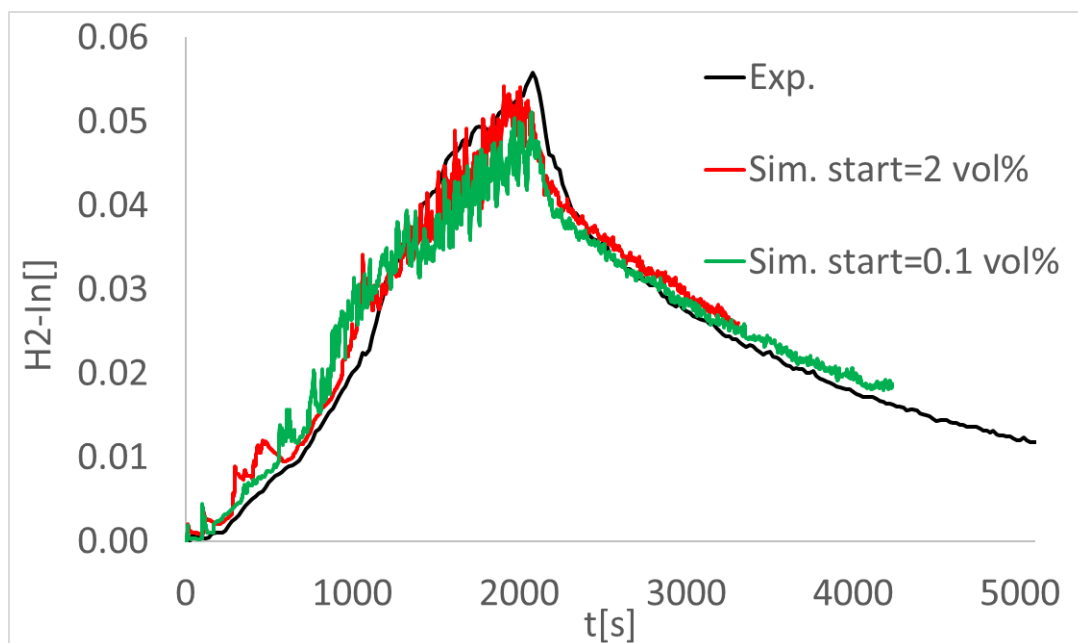


Abb. 6.4 H₂-Molenbruch am PAR-Eintritt

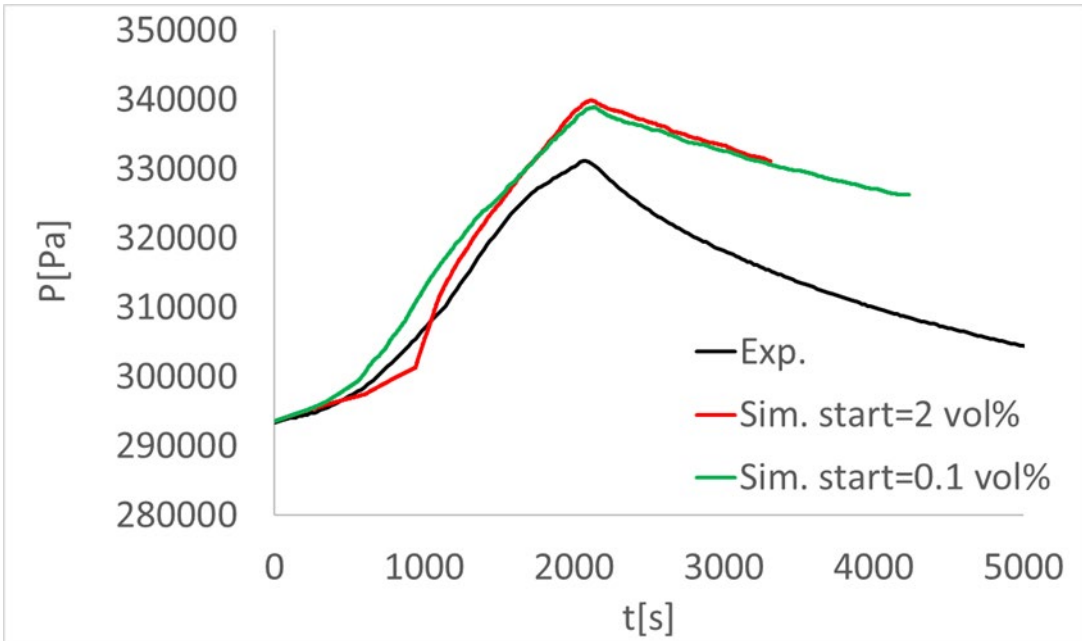


Abb. 6.5 Zeitlicher Verlauf des Drucks

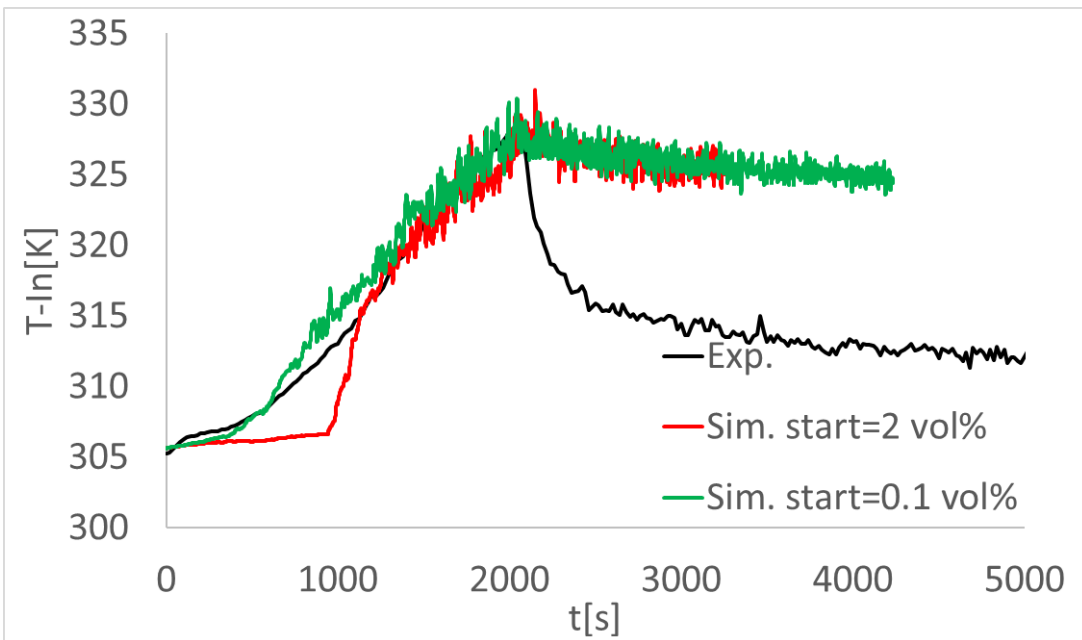


Abb. 6.6 Temperatur am PAR-Eintritt

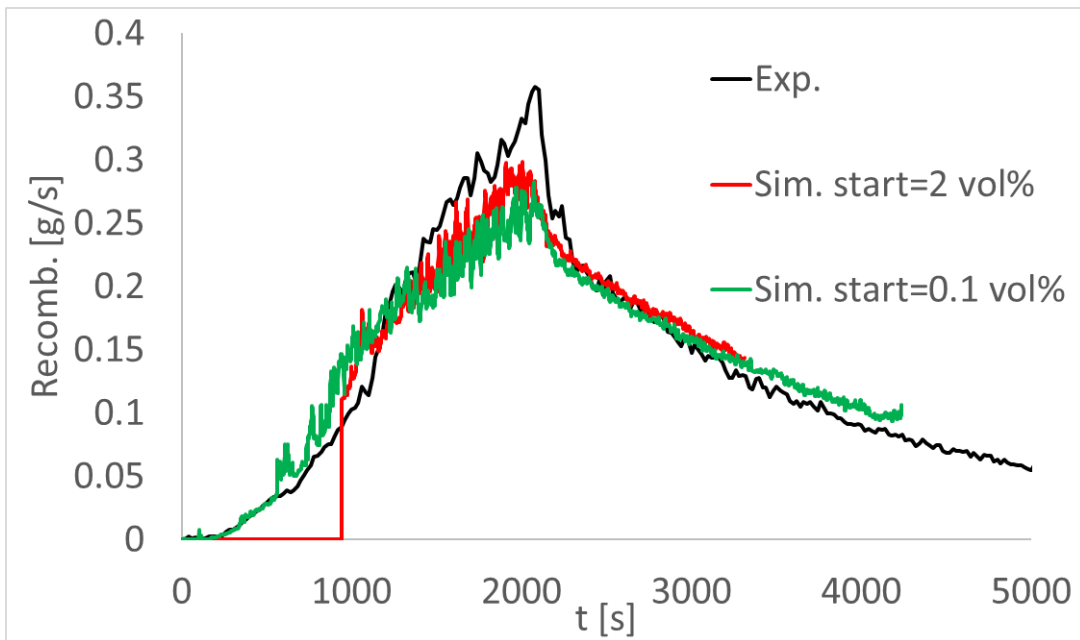


Abb. 6.7 Zeitlicher Verlauf der Rekombinationsrate des PARs

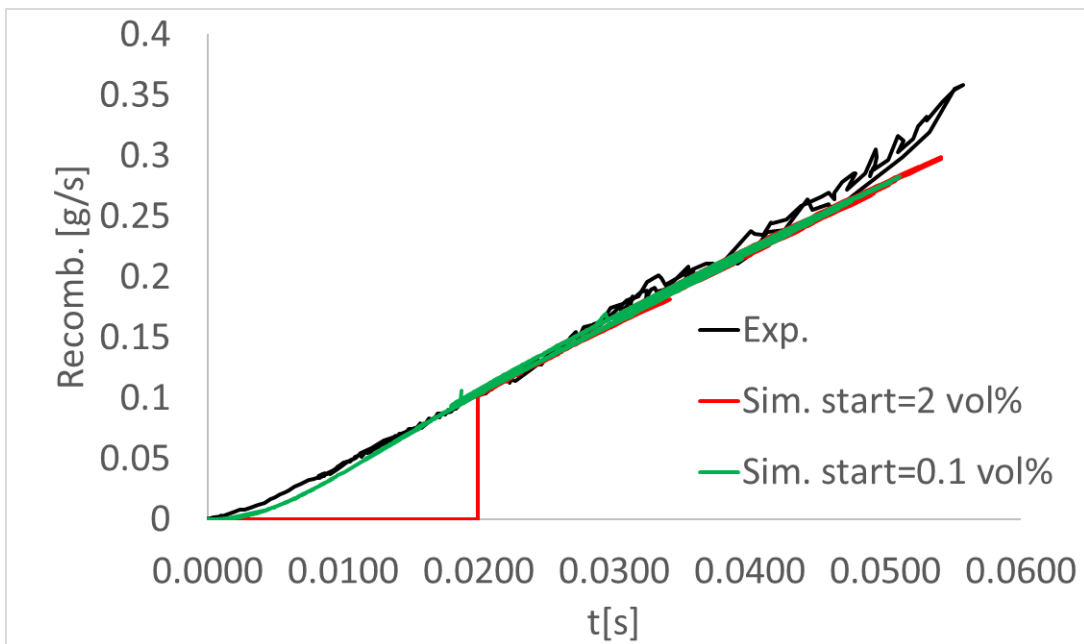


Abb. 6.8 Rekombinationsrate aufgetragen über den H₂-Molenbruch am PAR-Eintritt

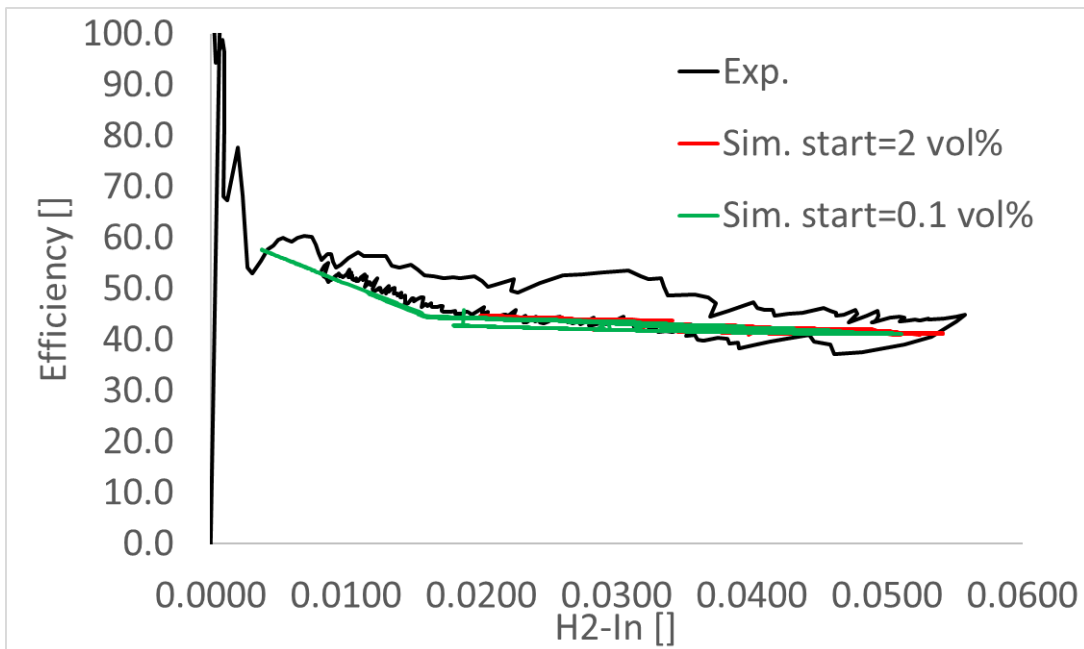


Abb. 6.9 PAR-Effizienz aufgetragen über den H₂-Molenbruch am PAR-Eintritt

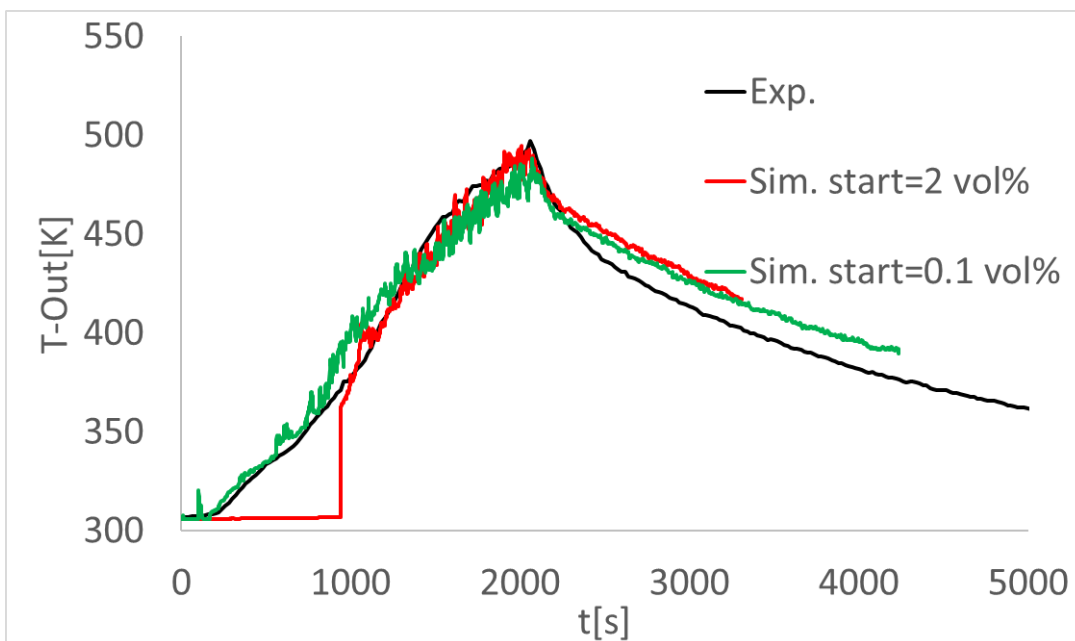


Abb. 6.10 Temperatur am PAR-Auslass

Wasserstoff- und Temperaturverteilung

Sowohl im Experiment als auch in den containmentFOAM-Simulationen bilden sich drei unterschiedliche stabile Schichten heraus (Abb. 6.11). Oberhalb vom PAR befindet sich eine Zone mit wärmerem H₂-armen Gas, da sich hier das aus dem PAR austretende heiße Gas sammelt. Oberhalb der H₂-Einspeisung und unterhalb vom PAR befindet sich ein Bereich mit kaltem H₂-reichen Gas. Unterhalb der H₂-Einspeisung befindet sich

kaltes H₂-armes Gas. Insbesondere die Simulation xstart0.1 mit dem im Experiment gemessenen Start für die H₂-Rekombination zeigt eine gute Übereinstimmung für die H₂-Konzentration oberhalb des PARs (3,8 m, Abb. 6.12 – Abb. 6.15). Der spätere Start des H₂-Abbaus bei xstart2 führt in diesem Bereich zu einer leichten Überschätzung des H₂-Molenbruchs für den Zeitbereich (600 s – 2400 s). Die H₂-Konzentration in 3,5 m Höhe innerhalb des Innenzylinders wird in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Lediglich das H₂-Maximum wird etwas unterschätzt (Abb. 6.16). Der H₂-Molenbruch am PAR-Einlass (Abb. 6.4) und in 1,7 m Höhe (Abb. 6.17) wird in der Anfangsphase leicht überschätzt. Der maximale H₂-Molenbruch bei t ~ 2100 s wird an beiden Messtellen unterschätzt (bis zu 0,4 Vol.-%). Ab t = 2400 s wird am PAR-Eintritt der H₂-Gehalt in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. In 1,7 m Höhe ist der H₂-Molenbruch allerdings um ca. 0,4 Vol.-% niedriger als im Experiment. Die größte Abweichung zwischen Simulation und Experiment besteht im Bereich des Sumpfes (0,7 m Höhe, Abb. 6.18). Im Experiment wird nur sehr langsam H₂ in diesen Bereich transportiert, während in den Simulationen an dieser Messtelle nur unwesentlich weniger H₂ als in 1,7 m Höhe zu finden ist. Die größere Abweichung beim H₂-Gehalt im unteren THAI-Behälter ist vermutlich auf die vereinfachte Modellierung der H₂-Einspeisung (Einspeisung über einen Ring statt 56 Düsen) zurückzuführen. Außerdem sollte im unteren Bereich das CFD-Gitter verbessert werden und untersucht werden, inwieweit die unbekannt Randbedingungen für die Turbulenz der Einspeisung eine Rolle spielen. Diese Untersuchungen gehen aber über die in diesem Projekt vorgesehene Anbindung des GRS-PAR-Modells an containmentFOAM hinaus und müssen zu einem späteren Zeitpunkt erfolgen.

Die qualitative Temperaturverteilung stimmt in den Simulationen mit dem Experiment überein (Abb. 6.19 – Abb. 6.24). Oberhalb vom PAR ist die Gastemperatur höher als im unteren Bereich, da sich das leichtere heiße Gas, das aus dem aktiven PAR ausströmt, im oberen Teil des Behälters sammelt. Allerdings steigt – sobald der PAR aktiv wird – die Temperatur in der Simulation stärker an als im Experiment. Dies ist gut bei der Simulation xstart0.1 zu sehen. Bei xstart2 erfolgt der Beginn der Rekombination deutlich später als im Experiment. Deshalb ist die Temperatur in der Anfangsphase deutlich niedriger als im Experiment. Nach ca. 1500 s unterscheiden sich die Temperaturen der beiden Simulationen nur noch wenig. Oberhalb des PARs stimmt die maximale Temperatur (t ~ 2100 s) gut mit dem Experiment überein (Abb. 6.19, Abb. 6.20), allerdings wird die H₂-Konzentration am PAR-Eintritt in dieser Phase unterschätzt, so dass die Abbauleistung und damit auch die Wärmefreisetzung niedriger ist, somit kompensieren sich Abweichungen.

Unterhalb des PARs wird auch in diesem Zeitraum die Temperatur überschätzt (Abb. 6.17, Abb. 6.18). Nach Ende der H₂-Einspeisung fällt die Temperatur im Experiment mit sinkender Abbauleistung des PARs aufgrund von Wärmeverlusten ab. In den Simulationen erfolgt ebenfalls ein Temperaturabfall, dieser ist allerdings deutlich langsamer als im Experiment. Da die Temperatur des Gases am PAR-Auslass gut mit dem Experiment übereinstimmt (Abb. 6.10), sofern man die H₂-Eintrittskonzentration (Abb. 6.4) berücksichtigt, ist die Ursache für die Überschätzung der Gastemperaturen vermutlich die Unterschätzung der Wärmeverluste in die Wände. Ursache hierfür können die Initialisierung der Wände mit derselben Temperatur wie das Gas (305,6 K) sein, was tendenziell zu hoch ist. Die Annahme von 305,6 K als Außentemperatur ist ebenfalls relativ hoch. Diese Größe geht bei der Berechnung der Wärmeverluste durch die Behälterisolierung in die Simulation ein. In der Wärmestrahlungsmodellierung wird die Emissivität der Wände mit 0,4 abgeschätzt. Um die Temperaturen in den Simulationen zu verbessern, sollte der Einfluss dieser unbekanntes Größe auf die Gastemperatur ebenfalls untersucht werden. Außerdem sollte auch die Gesamtmasse des THAI-Behälters in der Simulation geprüft und gegebenenfalls angepasst werden.

Die Überschätzung der Temperatur korrespondiert mit einem etwas höheren Druck in den Simulationen (Abb. 6.5). Dies hat auch einen moderaten Einfluss auf den berechneten H₂-Abbau und die Effizienz des PARs.

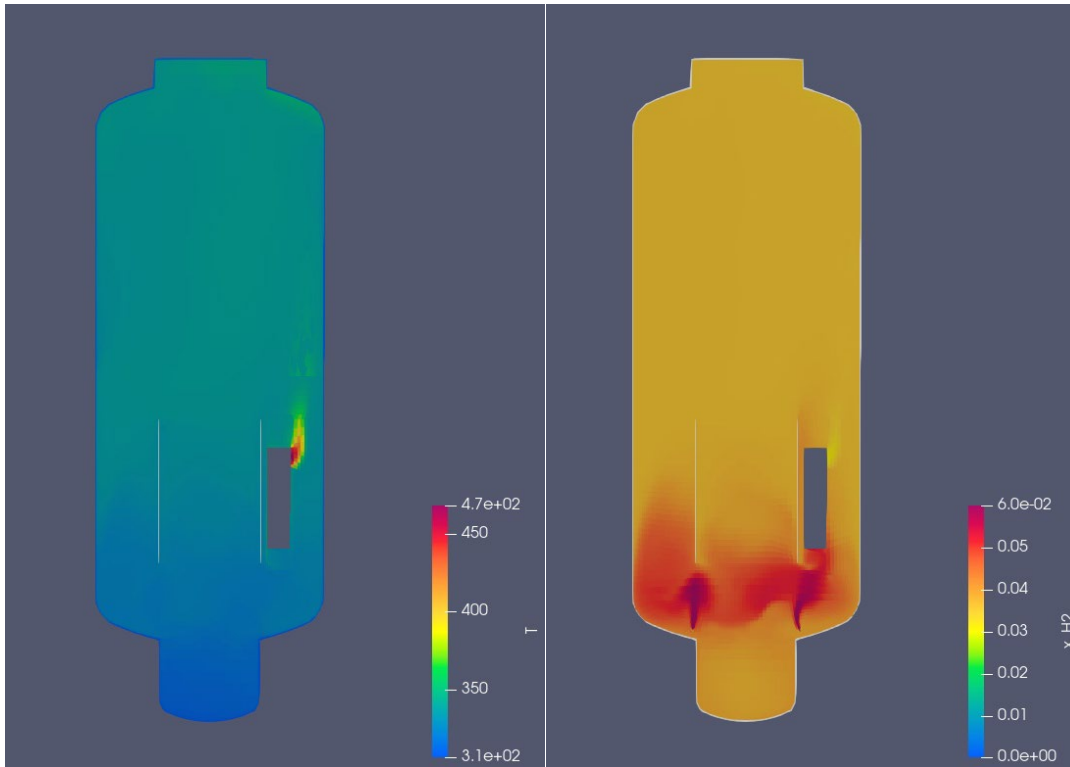


Abb. 6.11 Simulationsergebnisse der Simulation xstart0,1 nach 2000 s. Links: Temperatur, rechts H₂-Molenbruch (Maximum auf 0,06 begrenzt)

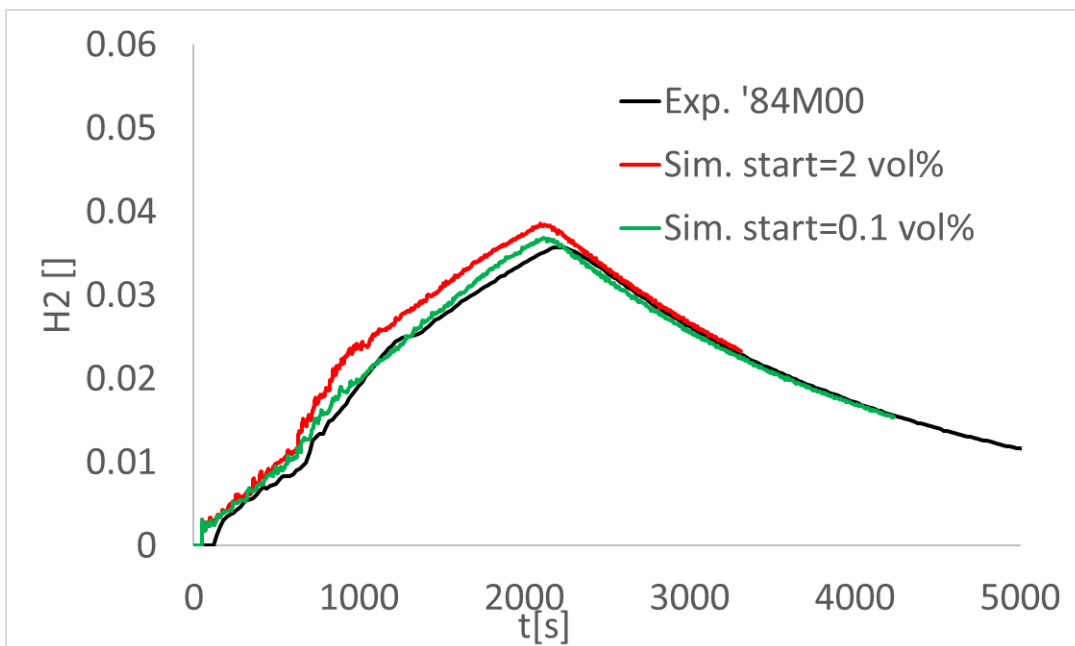


Abb. 6.12 H₂-Molenbruch in 8,4 m Höhe in der Behältermitte

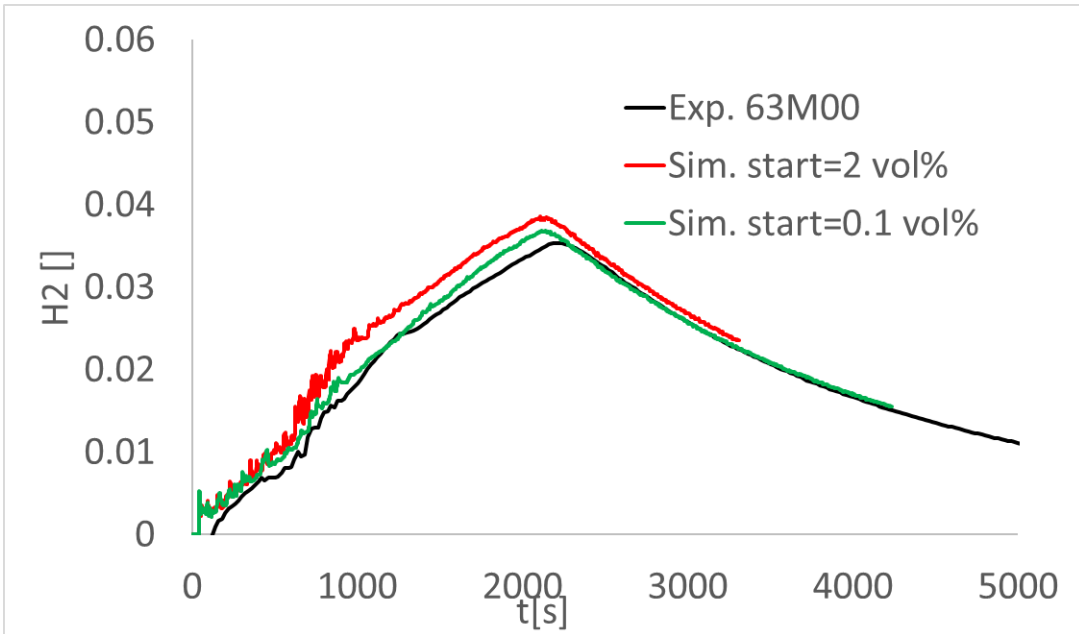


Abb. 6.13 H₂-Molenbruch in 6,3 m Höhe in der Behältermitte

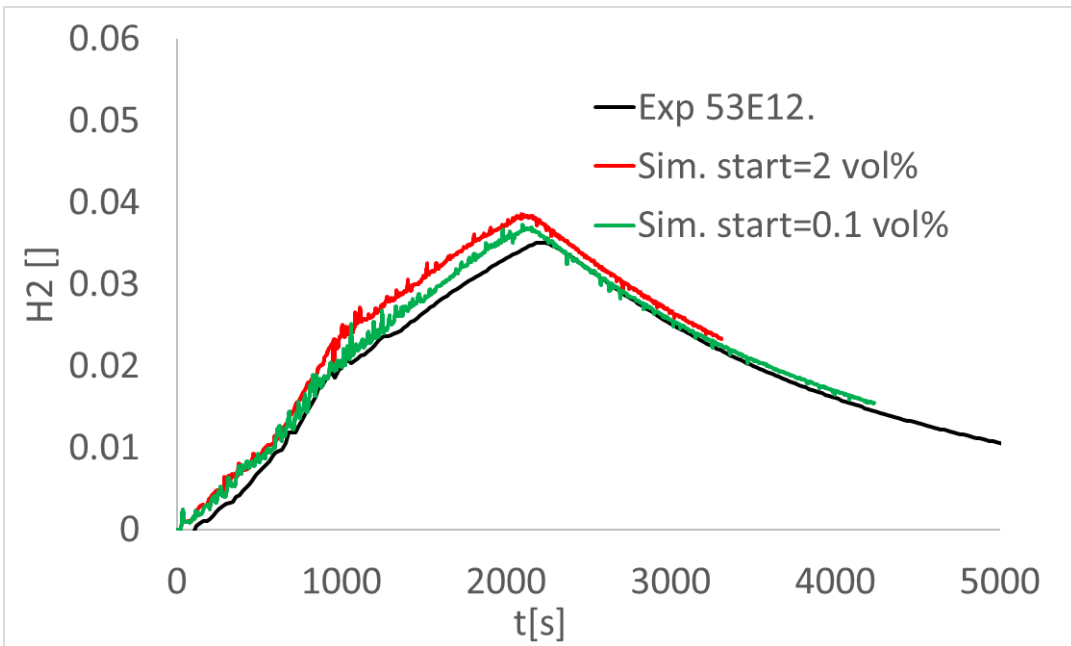


Abb. 6.14 H₂-Molenbruch in 5,3 m Höhe bei einem Radius von 1,2 m auf E-Line (oberhalb des PARs)

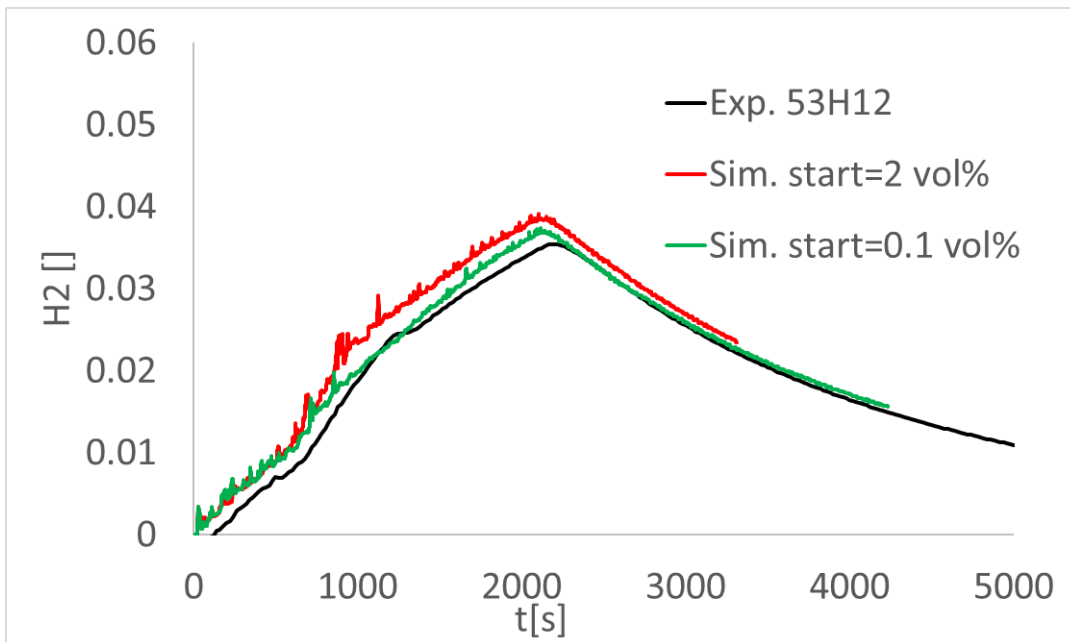


Abb. 6.15 H₂-Molenbruch in 5,3 m Höhe bei einem Radius von 1,2 m auf H-Line (gegenüber vom PAR)

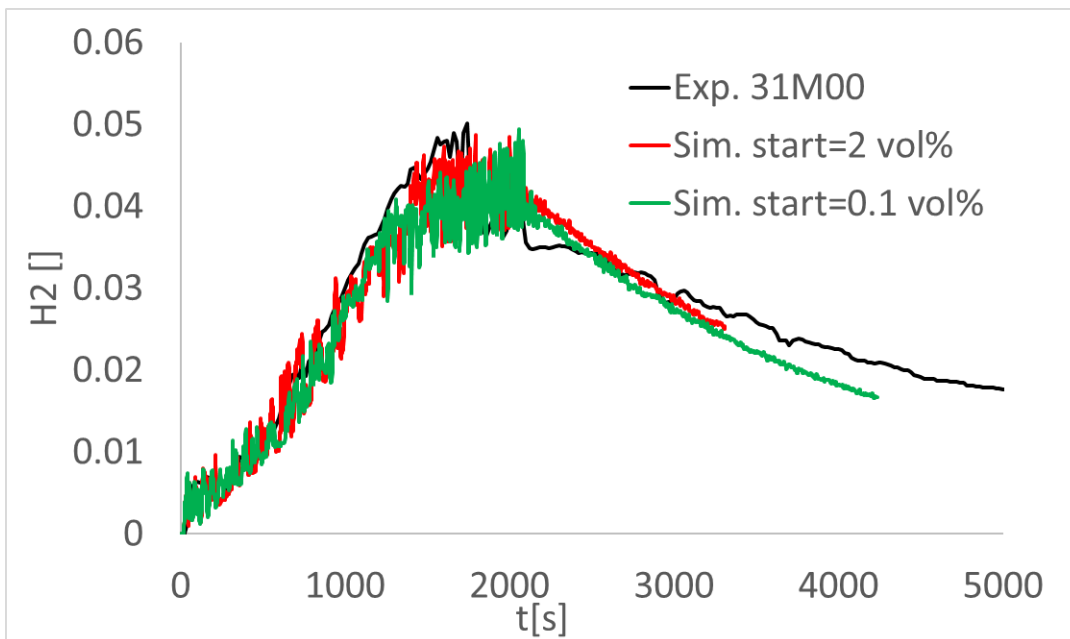


Abb. 6.16 H₂-Molenbruch in 3,1 m Höhe in der Behältermitte

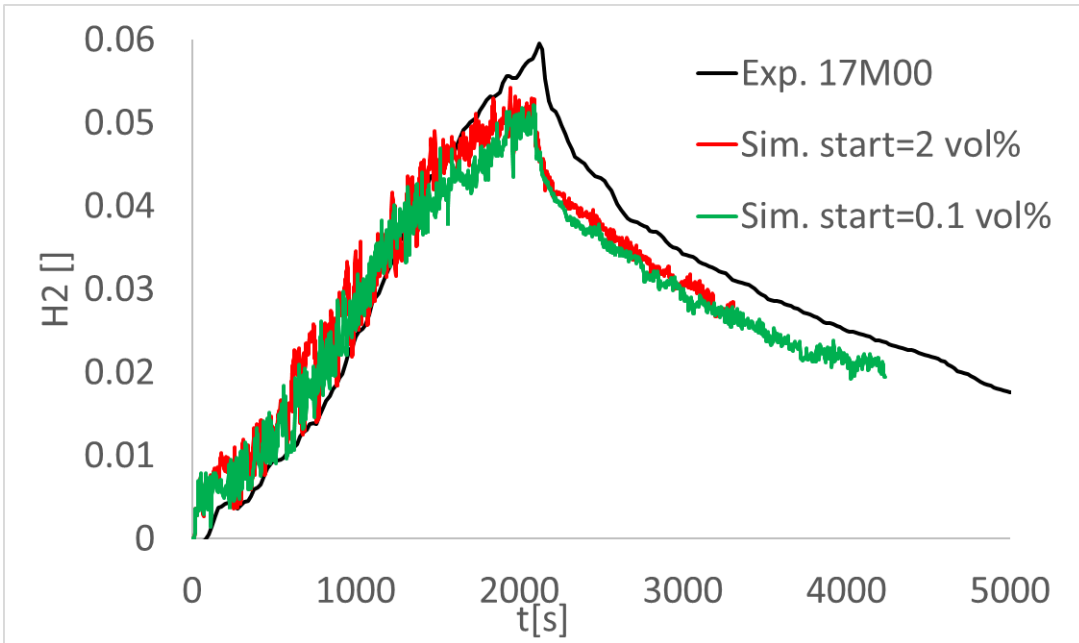


Abb. 6.17 H₂-Molenbruch in 1,7 m Höhe in der Behältermitte

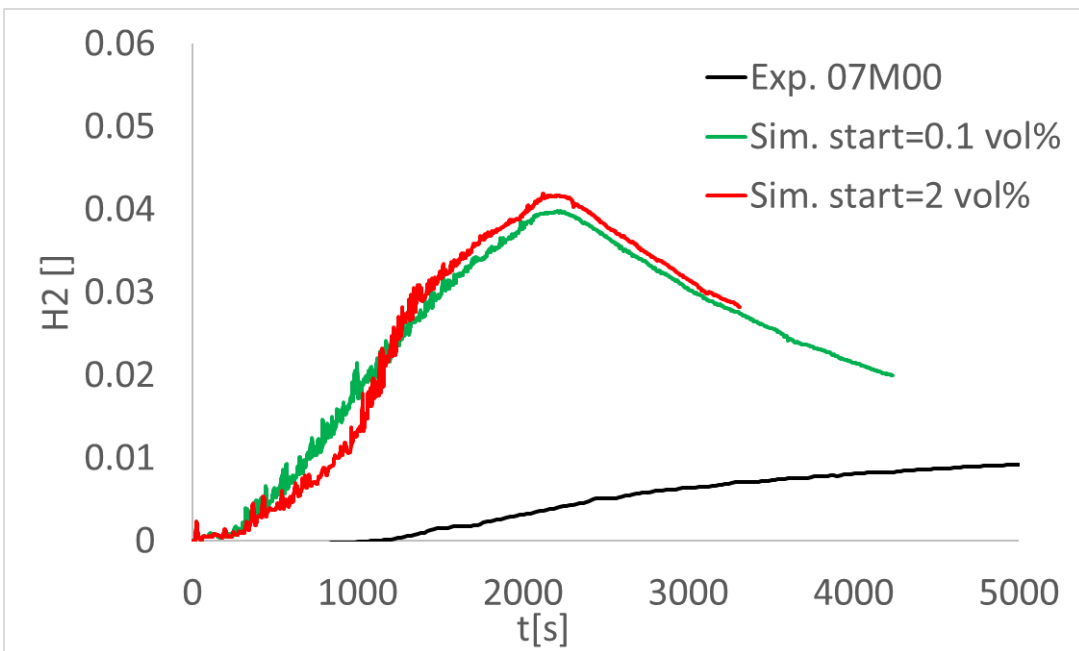


Abb. 6.18 H₂-Molenbruch in 0,7 m Höhe in der Behältermitte

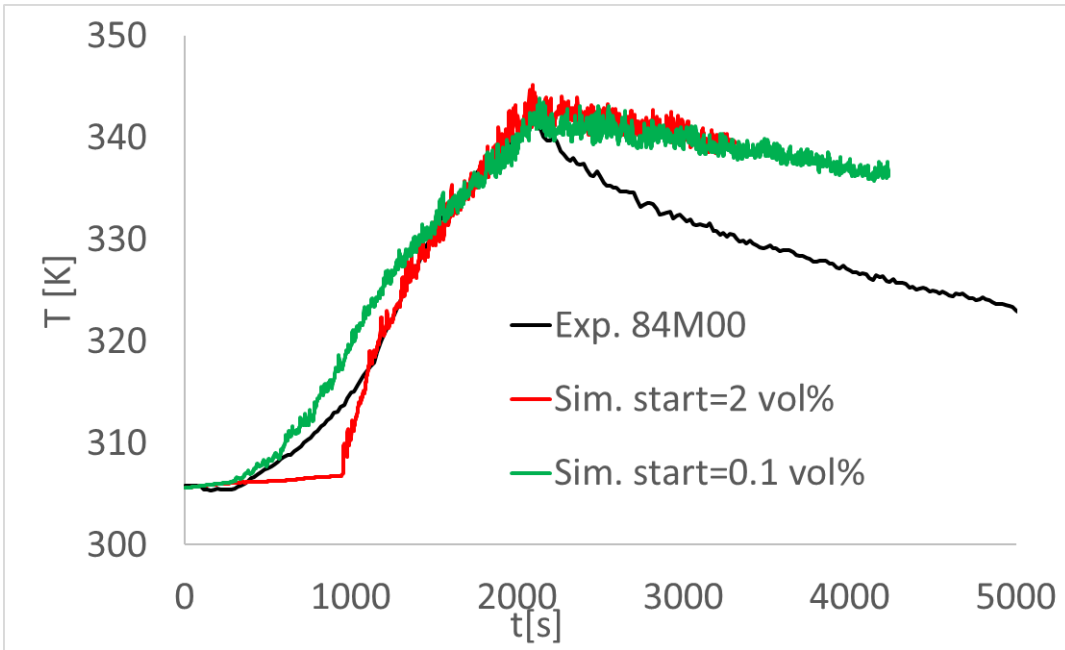


Abb. 6.19 Temperatur in 8,4 m Höhe in der Behältermitte

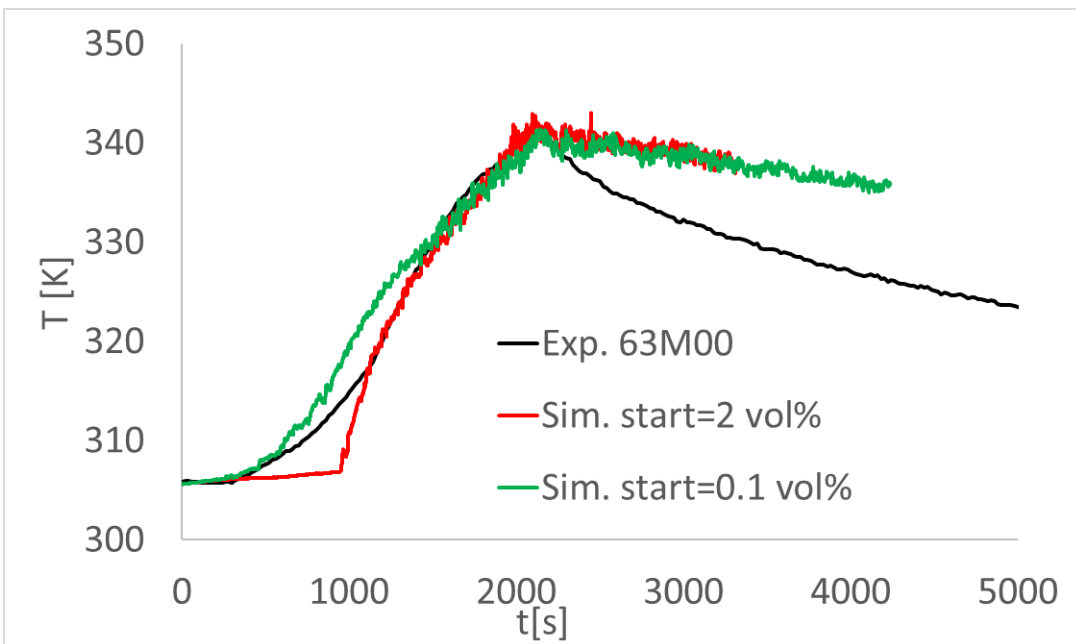


Abb. 6.20 Temperatur in 6,3 m Höhe in der Behältermitte

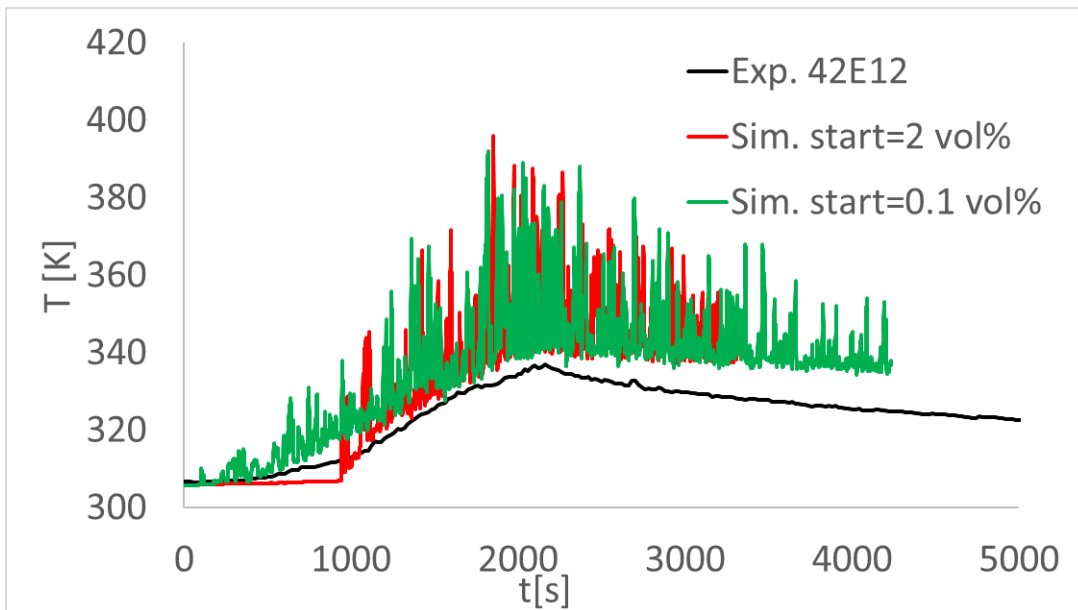


Abb. 6.21 Temperatur in 4,2 m Höhe bei einem Radius von 1,2 m auf der E-Line (oberhalb des PARs)

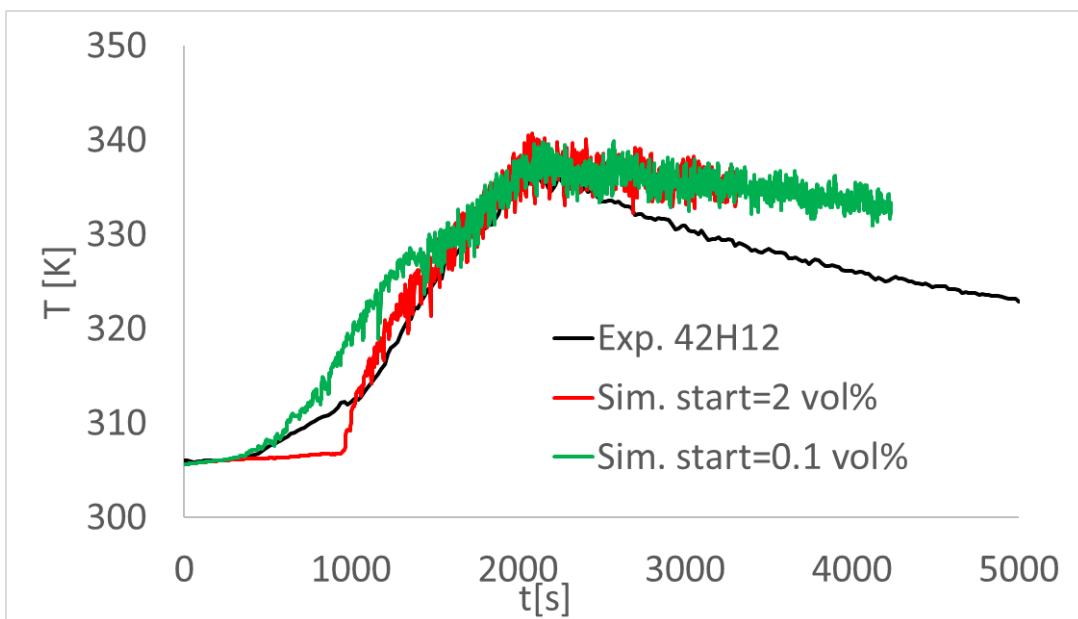


Abb. 6.22 Temperatur in 4,2 m Höhe bei einem Radius von 1,2 m auf der H-Line (gegenüber vom PAR)

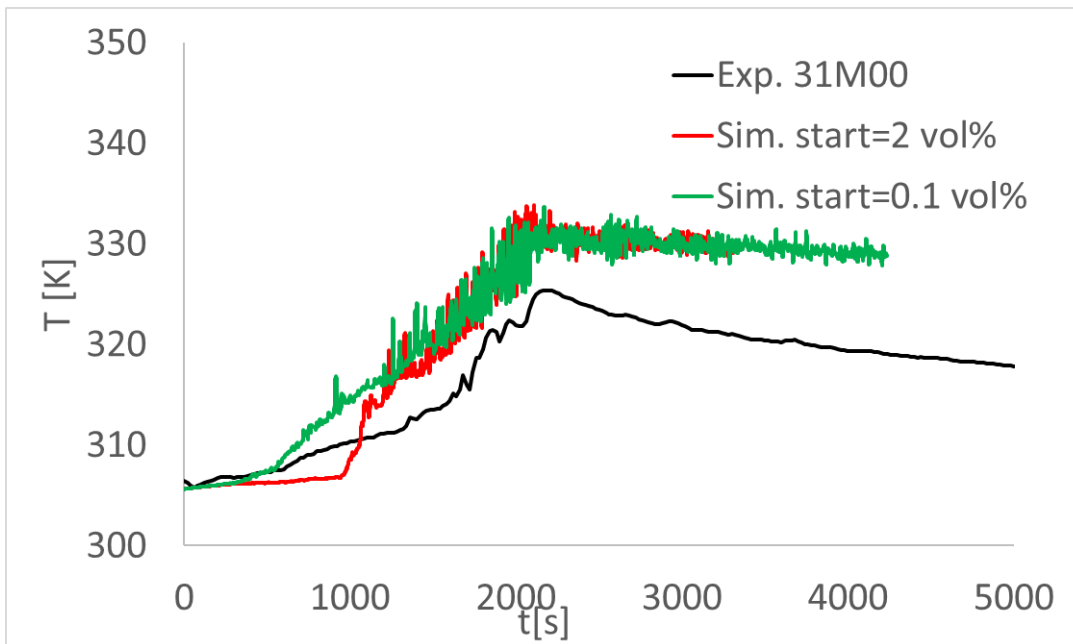


Abb. 6.23 Temperatur in 3,1 m Höhe in der Behältermitte

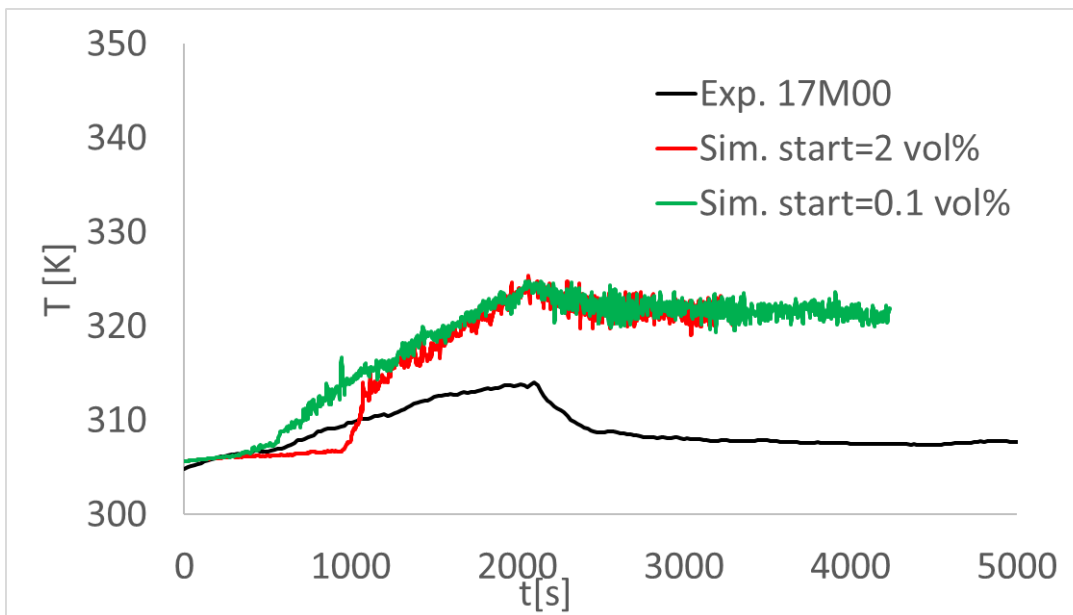


Abb. 6.24 Temperatur in 1,7 m Höhe in der Behältermitte

6.2.5 Zusammenfassung zu Nachrechnung HR-5

Das PAR-Modell wurde anhand des THAI-Versuchs HR-5 erfolgreich validiert. Der Versuch wurde mit zwei unterschiedlichen Startwerten für die Rekombination bei kaltem PAR nachgerechnet (experimenteller Wert von 0,1 Vol.-%, und Defaultwert von 2 Vol.-% nach AREVA)

Die H₂-Abbaurrate und die Effizienz des PARs stimmen insgesamt gut dem Experiment überein. Das zeigt, dass das Modell erfolgreich an containmentFOAM-9 und containmetnFOAM-11 angebunden wurde und dass die modifizierten AREVA-Gleichungen in der Lage sind, die Rekombination in diesem Versuch zu beschreiben. Allerdings wird die maximale Abbaurrate etwas unterschätzt, was auf den etwas niedrigeren H₂-Molenbruch am PAR-Eintritt zurückzuführen ist. Die Ausbildung von drei stabilen Schichtungen im THAI-Behälter wird von den Simulationen richtig vorhergesagt. Im unteren THAI-Behälter wird die H₂-Konzentration mit moderaten Abweichungen zum Experiment berechnet. Wahrscheinliche Ursache ist die geometrisch vereinfacht modellierte H₂-Einspeisung (Ring, statt 56 Einzeldüsen). Der H₂-Molenbruch oberhalb des PARs wird in guter Übereinstimmung mit dem Experiment vorhergesagt. Insbesondere in der 2. Hälfte des Experiments wird die Temperatur überschätzt. Als wahrscheinliche Ursache wurde eine Unterschätzung der Wärmeverluste an die Behälterwände identifiziert, die u. a. auf einen zu hohen Initialwert der Wandtemperatur zurückgeführt werden kann. Im Rahmen dieses Projektes waren keine vertieften Untersuchungen zur Simulation von PAR-Experimenten vorgesehen, daher müssen die verbesserte Modellierung der H₂-Einspeisung oder Untersuchungen zu Wärmeverlusten bei HR-5 zu einem späteren Zeitpunkt durchgeführt werden.

6.3 Portierung des Gebäudekondensatormodells von containmentFOAM-9 nach containmentFOAM-11

Bei der Simulation von Gebäudekondensatoren besteht neben der Simulation des Kühlwassers mit OpenFOAM die Möglichkeit, das Kühlwasser zu modellieren. Dazu wurde im Rahmen von AP1.3 (siehe Abschnitt 2.4) ein Modell erstellt, das die Funktion eines aktiven Gebäudekondensators über eine Temperaturrandbedingung an der Wand der Kühlrohre simuliert. Dabei erfolgt eine lineare Interpolation zwischen Eintritts- und Austrittstemperatur des Kühlwassers abhängig von der Höhe beim vertikalen Gebäudekondensator. Die Temperatur am Austritt wird dabei anhand der Energiebilanz berechnet. Die Versuchsnachrechnung erfolgte mit containmentFOAM-9, das Modell wurde auch nach containmentFOAM-11 portiert. Dazu musste der Zugriff auf die im Modell benötigten Wärmeströme an der Grenze Kondensatorrohr / modelliertes Kühlwasser modifiziert werden. Die Anfangsphase des Experiments H2P6-1 wurde mit containmentFOAM-11 erneut simuliert und es zeigt sich eine gute Übereinstimmung beim Druckabfall, der maßgeblich von der Modellierung des Gebäudekondensators abhängt.

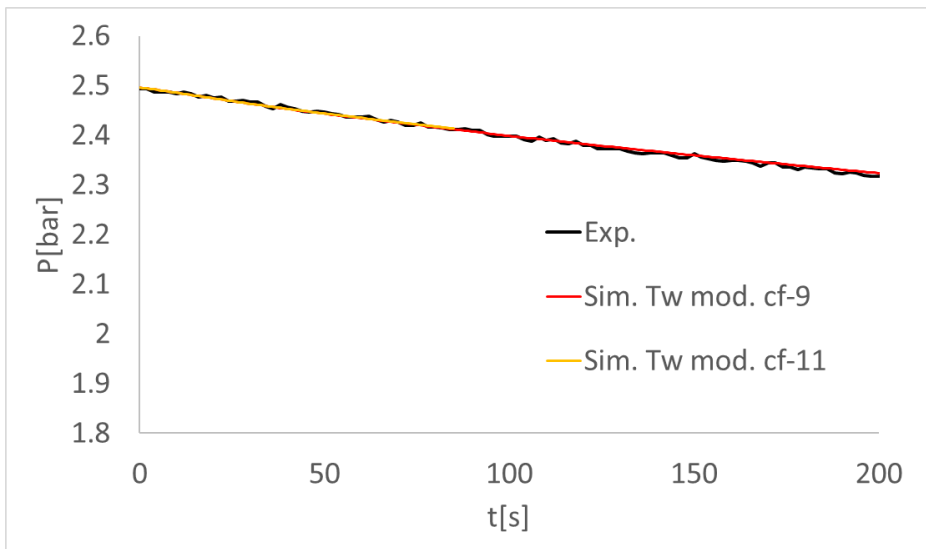


Abb. 6.25 Simulation von H2P6-1 mit containmentFOAM-9 und containmentFOAM-11

6.4 Unterstützung des FZ Jülich bei der Softwarepflege

Anhand zahlreicher Testfälle zu verschiedenen physikalischen Phänomenen erfolgt eine Überprüfung neuer containmentFOAM-Versionen durch das FZ Jülich. Daneben hat die GRS das FZ Jülich durch Nachrechnung von Validierungsversuchen mit unterschiedlichen containmentFOAM-Versionen bzw. durch das Testen neuer/modifizierter Modellversionen (z. B. Wandkondensationsmodell oder Volumenkondensationsmodell) unterstützt. Ein Überblick über die Validierungsversuche, die mit unterschiedlichen Versionen simuliert wurden und die jeweiligen containmentFOAM-Versionen ist in Tab. 6.1 zu finden. In den meisten Fällen wurde eine gute Übereinstimmung für die unterschiedlichen Codeversionen erzielt. In Fällen mit größeren Abweichungen wurden die Unterschiede zusammen mit dem FZ Jülich analysiert. In einigen wenigen Fällen wurde die containmentFOAM-Version angepasst. Anhand des PANDA-Versuchs P1A2-4 wird die Vorgehensweise im Folgenden aufgezeigt.

Tab. 6.1 Versuche, die mit unterschiedlichen containmentFOAM-Simulationen nachgerechnet wurden

Versuch	cf-6	cf-9	cf-11
CONAN	x	x	
OECD/NEA-Benchmark	x	x	
THAI HR-5	x	x	x
THAI-TH35	x	x	x
PANDA H2P2_5	x	x	
PANDA H2P6-1		x	x
PANDA P1A2-4		x	x

6.4.1 Test der Portierung des Monte-Carlo-SNBCK-Wärmestrahlungsmodells von der containmentFOAM-Version 9 zur Version 11

Die OpenFOAM-Version 9 unterscheidet sich grundlegend von der Version 11. Deshalb waren umfangreiche Anpassungen bei der Übertragung von Modellen zur Codeversion 11 notwendig. Im Rahmen einer Doktorarbeit /LIU 23/ wurde das Monte-Carlo-SNBCK-Wärmestrahlungsmodell in containmentFOAM-9 implementiert und anhand von Validierungsrechnungen erfolgreich getestet. Die Simulation der PANDA-Experimente P1A2-3 und P1A2-4 mit diesem Modell in containmentFOAM-11 zeigte deutlich größere Abweichungen als erwartet (AP1.2, Abschnitt 2.3). Deshalb sollte geprüft werden, ob die Abweichungen auf Fehler bei der Portierung des Modells nach der Version-11 zurückzuführen sind. Deshalb wurde die Anfangsphase des Versuchs P1A2-4 mit containmentFOAM-9 erneut nachgerechnet. Es zeigte sich an den meisten Messpunkten eine sehr gute Übereinstimmung der Simulationen (z. B. D20 Abb. 6.27 oder K20 Abb. 6.28). An einigen Messpunkten gab es kleinere Abweichungen (z. B. B20, Abb. 6.26). Diese Abweichungen lassen sich mit dem stochastischen Charakter der Monte-Carlo-Methode erklären. Die gute Übereinstimmung der Code-Versionen miteinander zeigt, dass eine fehlerhafte Portierung des Monte-Carlo-SNBCK-Modells nicht die Ursache für die Abweichung von der Temperatur im Experiment war.

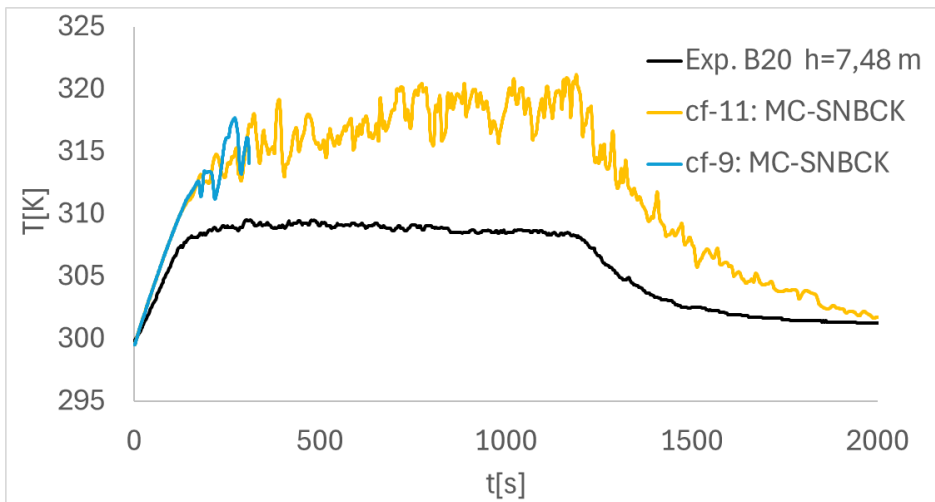


Abb. 6.26 P1A2-4: Temperatur am Messpunkt B20 (mittig, 7,48 m Höhe) bei Simulation mit containmentFOAM-9 und containmentFOAM-11

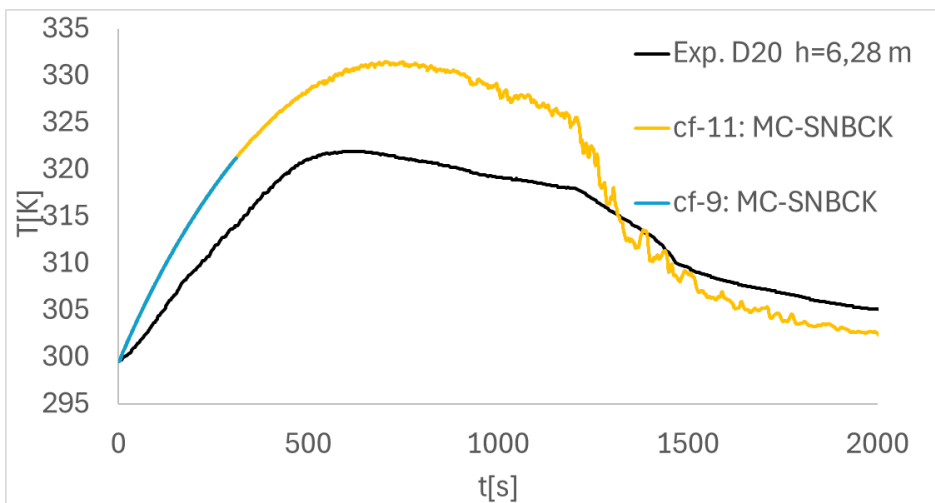


Abb. 6.27 P1A2-4: Temperatur am Messpunkt D20 (mittig, 6,28 m Höhe) bei Simulation mit containmentFOAM-9 und containmentFOAM-11

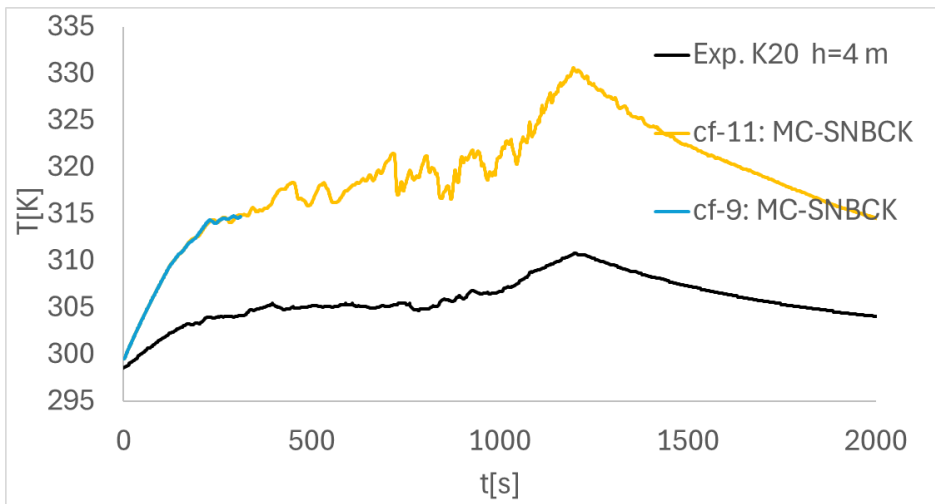


Abb. 6.28 P1A2-4: Temperatur am Messpunkt K20 (mittig, 4,0 m Höhe) bei Simulation mit containmentFOAM-9 und containmentFOAM-11

7 Zusammenfassung und Fazit

Zur Untersuchung von unfalltypischen Vorgängen im Sicherheitsbehälter von Kernkraftwerken erlangen CFD-Simulationstechniken eine immer stärkere Bedeutung. Seit vielen Jahren beteiligt sich die GRS an der Entwicklung, Validierung und Anwendung von CFD für Reaktorsicherheitsanalysen. In Abstimmung mit den Partnern im CFD-Verbund wird hierfür OpenFOAM eingesetzt. Ziel der im Vorhaben durchgeführten Arbeiten war die Weiterentwicklung, Validierung und Bereitstellung von qualitätsgesicherten OpenFOAM-Referenzsolvern für Containment-Fragestellungen für LWR.

Die Validierung von containmentFOAM wurde in **AP1.1** auf Versuche mit einer komplexen Mehrraum-Geometrie erweitert. Bei Nachrechnung des THAI-Versuchs TH-35 wurde u. a. die Simulation einer Gegenströmung validiert. Bei der Nachrechnung mit containmentFOAM kamen die Standardmodelle zum Einsatz und es wurden die vom containmentFOAM-GUI empfohlenen numerischen Einstellungen verwendet. Das standardmäßig verwendete strukturierte CFD-Gitter besteht aus 1,25 Millionen Hexaedern. Eine Gitterstudie zeigt, dass das verwendete CFD-Gitter ausreichend fein ist. Mit containmentFOAM konnten die Temperaturverteilung und die Strömung (insbesondere die Gegenströmung im Verbindungsrohr) qualitativ richtig berechnet werden. Die Temperatur im TTV oberhalb des Verbindungsrohrs wird in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Die Heizung der Wände und die Lufteinspeisung wurden erfolgreich modelliert. Im Verbindungsrohr zwischen TTV und PAD wird im Experiment eine Gegenströmung berechnet, bei der oben heiße Luft in den PAD strömt. Die Temperatur am obersten Messpunkt wird allerdings in der Simulation deutlich überschätzt. Die Überschätzung der Temperatur der Strömung in den PAD ist dafür verantwortlich, dass auch die Temperatur im PAD und in der Rückströmung vom PAD in den TTV etwas überschätzt werden. Die Geschwindigkeit der Gegenströmung im Verbindungsrohr wird qualitativ richtig vorhergesagt, allerdings ist die Strömung in Wandnähe etwas höher als im Experiment. Es wurden verschiedene Parameterstudien (Wärmestrahlungsmodellierung, Modellierung der Heizung etc.) durchgeführt. Der Grund für die Abweichungen konnte bisher aber nicht abschließend geklärt werden. Als wahrscheinlichste Ursache für die zu hohe Temperatur im oberen Verbindungsrohr wird angenommen, dass das Verbindungsrohr in der Simulation ein glattes Rohr ist. Im Experiment gibt es aber Strömungshindernisse wie die beiden Kompensatoren, Flansche und Messinstrumentierung. Die genaue Geometrie dieser Bauteile ist teilweise nicht bekannt und ihre Abbildung im CFD-Gitter ist sehr aufwendig. Deshalb konnte im Rahmen dieses Vorhabens hierzu keine Untersuchung vorgenommen werden. Eine weitere Quelle für Fehler ist die

Turbulenzmodellierung mit dem (U)RANS-2-Gleichungsmodell. Es geht von einer isotropen Turbulenzverteilung aus, was in einer Gegenströmung nicht der Fall ist.

In der P1A1-Serie wird in vereinfachter Form die Strömung durch einen Dampferzeugerturm in einem generischen DWR nachgebildet, die zu einer Schichtung im umgebenden Sicherheitsbehälter führt. Dazu wurde im unteren Bereich des PANDA-Behälters eine Kammer mit Öffnungen eingebracht, die den Dampferzeugerturm vereinfacht nachbilden soll. Die erste und zweite Versuchsphase des OECD-PANDA-Versuchs P1A1_3 (Dampf- und Helium-Einspeisung) sowie die erste Versuchsphase von P1A1_4 (Dampfeinspeisung) wurden erfolgreich mit containmentFOAM-11 nachgerechnet. Dabei kamen die Referenzmodelle zur Anwendung. Die Simulationen wurden mit einem CFD-Gitter bestehend aus ca. 2,5 Millionen Zellen nachgerechnet. Eine Gitterstudie zeigt, dass keine gitterunabhängige Lösung gefunden wurde und dass mit dem feineren Gitter eine stärkere Wandkondensation berechnet wird, die zu einer besseren Übereinstimmung beim Druck führt. Aufgrund der hohen Rechenzeit kann gegenwärtig das feinere Gitter nicht mit vertretbarem Aufwand genutzt werden. Da im Experiment die Messung der Gaskonzentration wegen starker Volumen Kondensation fehlgeschlagen ist, konnten nur Druck und Temperaturen verglichen werden. Es zeigt sich für beide Experimente eine gute qualitative Übereinstimmung bei Druck und Temperaturen. In der Anfangsphase wird der Druck in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Danach steigen die Temperaturen im Gas sowie der Druck in der Rechnung schneller an als im Experiment. Dabei spielt sicherlich die stärkere Aufheizung der PANDA-Behälterwände im Experiment eine Rolle. Diese führt zu einer schwächeren Wandkondensation und weniger Wärmetransfer in die Struktur. Ein Grund für die stärkere Erwärmung der Wände ist die Unterschätzung der Behältermasse aufgrund geometrischer Vereinfachung.

In **AP1.2** wurde die Wärmestrahlungsmodellierung mit OpenFOAM untersucht. Arbeiten in vorhergehenden Projekten haben gezeigt, dass Wärmestrahlung einen signifikanten Einfluss auf die Temperatur, aber auch die Gasverteilung haben kann. In OpenFOAM gibt es unterschiedliche Wärmestrahlungsmodelle, bei denen der Nutzer teilweise Modellparameter wie die Absorptionskonstanten wählen muss. Durch Simulation der PANDA-Experimente P1A2_3 bzw. P1A2_4 wurden geeignete Modelle ausgewählt und validiert. Zu Beginn befand sich in den Experimenten P1A2_3 und P1A2_4 Luft mit einem Dampfanteil von 0,7 Vol.-% bzw. 5 Vol.-% vor. Im oberen Bereich des PANDA-Behälters lag eine stabile Heliumschichtung vor. In der ersten Versuchsphase wurde das Gas komprimiert, indem Luft eingespeist wurde. Dadurch erhöhte sich die Temperatur abhängig von der lokalen Gaszusammensetzung unterschiedlich stark. Nach ca. 1200 s

endete die Lufteinspeisung. Es zeigte sich, dass Simulationen, welche die Wärmestrahlung mit dem P1- und dem fvDOM-Modell berechnen und die vom mittleren Planck'schen Absorptionskoeffizienten für Dampf oder einem festen Wert von 10 (m bar)^{-1} ausgehen, in der Lage sind, die Experimente mit moderaten Abweichungen bei der Temperatur zu berechnen. Insgesamt war keine der Modellierungen mit dem P1- und dem fvDOM-Modell in Bezug auf die Übereinstimmung mit dem Experiment eindeutig den anderen überlegen. Das P1-Modell benötigte allerdings deutlich weniger Rechenzeit. Die Strahlungsmodellierung mit dem Monte-Carlo-SNBCK-Modell ist für die meisten Containmentanwendungen (momentan) zu rechenzeitaufwendig. Obwohl dieses Modell die Wärmestrahlungsmodellierung am physikalisch genauesten simuliert, zeigte sich eine schlechtere Übereinstimmung mit dem Experiment. Die Ursache hierfür konnte nicht gesichert festgestellt werden.

In **AP1.3** wurde die Modellierung von Gebäudekondensatoren mit OpenFOAM untersucht. Gebäudekondensatoren kommen als passive Sicherheitssysteme in verschiedenen Reaktordesigns (z. B. WWER-1200, HPR1000) zum Einsatz. Ziel dabei ist die passive Wärmeabfuhr und die Begrenzung des Drucks im Sicherheitsbehälter. An der kalten Oberfläche des Gebäudekondensators wird aus der Gasphase Wärme abgeführt und es findet je nach Gaszusammensetzung verstärkt Kondensation statt. In den PANDA-Experimenten H2P6_1 bzw. H2P6_2 wird der Einfluss dreier Gebäudekondensatoren bzw. eines aktiven Gebäudekondensators auf eine stabile Heliumschichtung untersucht. Das Experiment H2P6_2 (ein Kondensator) wurde erfolgreich mit containmentFoam-9 berechnet. Im ersten Schritt wurde der Gebäudekondensator detailliert abgebildet und die Strömung des Kühlwassers wurde ebenfalls mit containmentFOAM simuliert. Die gekühlte Oberfläche des Zu- und Ablaufs zum/vom Gebäudekondensator darf nicht vernachlässigt werden. Dies wurde dadurch erreicht, dass der Gebäudekondensator so skaliert wurde, dass die gekühlte Oberfläche im Experiment mit der in der Simulation übereinstimmt. Der Rechenaufwand betrug allerdings mehrere Monate, deshalb wurde die Simulation des Kühlwassers mit containmentFOAM durch eine mittlere Wandtemperatur an der Rohrrinnenseite ersetzt. Es zeigte sich, dass diese Vereinfachung keinen signifikanten Einfluss auf das Simulationsergebnis hatte. Dadurch kam es zu einer moderaten Rechenzeiterparnis von ca. 20 %. Die Simulation mit skaliertem Gebäudekondensator war in der Lage, den Druckabfall in guter Näherung zu berechnen. Der Verlauf der Gaszusammensetzung und der Temperatur wurde qualitativ richtig vorhergesagt. Die größte Abweichung zum Experiment ergab sich daraus, dass die Vermischung in den Simulationen schneller erfolgte als im Experiment. Mögliche Ursachen für die Abweichung sind u. a. die geometrischen Vereinfachungen (z. B. Zu- und Abflussleitung

wurden nicht detailliert abgebildet), Turbulenzmodellierung mit dem URANS-2-Gleichungsmodell SST sowie experimentelle Unsicherheiten. Die Simulationen mit detaillierter Gebäudekondensatorgeometrie konnten zwar die Kondensation gut beschreiben, allerdings betrug die Rechenzeit mehrere Monate, was für praktische Anwendungen zu aufwendig ist. Deshalb wurde untersucht, ob Gebäudekondensatoren mit einer vereinfachten Geometrie (Quader, senkrechte Platten, Bündel mit 21 Rohren) hinreichend genau simuliert werden können. Zwar konnte mit vereinfachter Geometrie die Rechenzeit teilweise auf 1/20 reduziert werden, allerdings wurde die Kondensation deutlich unterschätzt. Hier besteht noch Weiterentwicklungsbedarf. Der Versuch H2P6_1 mit drei Gebäudekondensatoren wurde mit einer detaillierten, skalierten Kondensatorgeometrie nachgerechnet. Die Wasserkühlung wurde durch eine Temperaturrandbedingung an der Innenseite der Kühlrohre modelliert. Als Weiterentwicklung gegenüber H2P6_2 wurde linear zwischen Eintritts- und Austrittstemperatur des Kühlmittels interpoliert. Die Wasseraustrittstemperatur wurde aus der Wärmebilanz berechnet. Aufgrund von Modellvereinfachungen wich die Wasseraustrittstemperatur in der Anfangsphase ($t < 60$ s) deutlich vom Experiment ab, danach wurde eine gute Übereinstimmung erzielt. Der Druck wurde in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Wie schon bei H2P6_2 wurde auch bei diesem Experiment die Geschwindigkeit der Vermischung überschätzt. Sofern berücksichtigt wird, dass die Vermischung mit einem Abfall der Temperatur an den unterhalb der Gebäudekondensatoren gelegenen Messstellen einherging, wurde die Temperatur in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet.

In **AP1.4** wurden zu Beginn des Projektes ein Referenzsolver bzw. -modelle zur Berechnung der Gasverteilung ausgewählt. Hierfür wurden neben dem von der GRS in RS1562 erstellten OpenFOAM-Solver `chtMultiRegionSchmidtFOAM` insbesondere der vom FZJ erstellte Solver `containmentFOAM`, der als Basis für den Referenz-Solver dienen soll, berücksichtigt. Es wurden die Simulationsergebnisse der Solver zu unterschiedlichen Versuchen (OECD/NEA Benchmark, PANDA ST2.1, CONAN, Panda 4bis, THAI TH-24) verglichen. Es zeigte sich, dass `containmentFOAM` gut zur Simulation unterschiedlicher containment-relevanter Anwendungen geeignet ist. In den meisten Fällen stimmen die grundlegenden Modellannahmen für die vom FZJ und von der GRS implementierten Modelle (Wand- und Volumenkondensation, Diffusion) überein, die in `containmentFOAM` implementierten Modelle gehen aber oft über die in `chtMultiRegionSchmidtFOAM` implementierten Modelle hinaus. So besteht mit dem „effective Diffusivity“-Modell in `containmentFOAM` die Möglichkeit, Gemische aus drei oder mehr Komponenten effizient und hinreichend genau zu simulieren. Bei der Wandkondensation sind in `containmentFOAM` verbesserte Wandfunktionen implementiert, die bei gröberen Gittern eine genauere

Berechnung der Wandkondensation ermöglichen. Deshalb wird darauf verzichtet, die GRS-Modelle für Wand-, Volumenkondensation und Diffusion in containmentFOAM zu implementieren. Das GRS-PAR-Modell unterscheidet sich grundlegend vom PAR-Modell RekoDirekt des FZ Jülich. RekoDirekt verfolgt einen mechanistischen Ansatz, bei dem der H_2/CO Abbau des PARs durch physikalische Prozesse bestimmt wird. Das GRS-PAR-Modell beruht dagegen auf modifizierten AREVA-Gleichungen, bei denen die Abbaurrate und Effizienz eines PARs durch Korrelationen beschrieben werden. Da es sich beim GRS-Modell um einen komplementären Ansatz handelt, wurde das PAR-Modell an containmentFOAM gekoppelt.

Ziel des Arbeitspunktes **AP 2.1** war die Erstellung und Validierung eines OpenFOAM-Referenzsolvers zur Simulation von H_2/CO /Dampf/Luft-Verbrennung. Ausgangspunkt war der von der TU-München entwickelte Solver xDynFOAM. Die H_2 -Verbrennungsmodellierung mit xDynFOAM wurde anhand mehrerer Versuche zu unterschiedlichen Verbrennungsbereichen (langsam (THAI-HD-Versuche HD-7, HD-8, HD-10, HD-12), schnelle turbulent-beschleunigte Verbrennung (ENACCEF-2) und DDT/Detonation (GraVent)) validiert. Insgesamt wurde eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit den experimentellen Werten für langsame und turbulent-beschleunigte Verbrennung erzielt. Es gibt aber auch noch Bedarf für weitere Verbesserung z. B. im Hinblick auf langsame abwärts gerichtete Verbrennung und turbulente Flammenbeschleunigung. Außerdem konnte für die THAI-Experimente keine gitterunabhängige Lösung gefunden werden. Für den ausgewählten GraVent-Versuch wurde kein DDT simuliert, da die Flammenbeschleunigung unterschätzt wurde. Nachrechnungen mit einem deutlich höheren Druck zeigten aber, dass der Code prinzipiell in der Lage ist, DDT bzw. Detonation zu berechnen.

Ziel des **AP2.2** war die Durchführung von Multi-Physik-Analysen zur Fluid-Struktur-Interaktion (FSI). Dazu ist eine Kopplung von OpenFOAM zu dem CSM-Code LS-DYNA entwickelt worden. Es wurde ein Kopplungsprogramm (FS-Converter) von der GRS erstellt und anhand unterschiedlicher Versuche erprobt (HySEA-Experiment, Offermann-Versuche und ein GraVent-Experiment). Anhand der HySEA-Experimente konnte zudem gezeigt werden, dass mit Hilfe dieses Kopplungsansatzes der Einfluss von Drucklasten auf Strukturen quantitativ mit moderaten, erklärbaren Abweichungen berechnet werden kann. Der FS-Converter kann auch lokale zeitabhängige Drücke aus OpenFOAM als räumlich verteilte Last-Zeit-Funktionen für komplexere Geometrien wie z. B. die Innenseite der GraVent-Anlage übertragen. Die sich aus den Drucklasten ergebenden Strukturdeformationen wurden mit LS-DYNA erfolgreich berechnet.

In **AP3** wurde durch die Simulation eines Kühlmittelverluststörfalls (Surge-Line-Bruch) in einem generischen Containment (angelehnt an KONVOI) die Leistungsfähigkeit von containmentFOAM überprüft. Hierzu wurden ein CFD-Gitter und containmentFOAM-Setup erstellt. Bei der Rechnung traten unterschiedliche Probleme auf, die in Zusammenarbeit mit dem FZ Jülich gelöst wurden. Mit der neuen Implementation des Wandkondensationsmodell konnte der Störfall mit containmentFOAM erfolgreich simuliert werden. Die Berechnungsergebnisse mit containmentFOAM wurden mit älteren CFX- und COCOSYS-Ergebnissen verglichen. Es ergibt sich bei containmentFOAM ein plausibler qualitativ ähnlicher Verlauf, es wurden aber auch Unterschiede identifiziert. Es wurde aber noch weitergehender Entwicklungsbedarf bzw. weitere Entwicklungsmöglichkeiten insbesondere hinsichtlich der Gittererstellung abgeleitet.

Im Rahmen von **AP 4** hat sich die GRS an nationalen und internationalen Treffen/Konferenzen aktiv beteiligt. Die GRS hat das jährliche CFD-Verbund-Treffen organisiert und an den Treffen des PRG des OECD/NEA-PANDA-Projekts teilgenommen. Dabei wurden regelmäßig eigene Arbeiten vorgestellt. Die GRS hat sich mit offenen (Step 0) und blinden Simulationen (Step 1 und Step 2) am ETSO-AMHYCO-Verbrennungsbenchmark beteiligt, in dem die H₂/CO-Verbrennung bei Bedingungen untersucht wurde, die denen in der „ex-vessel“-Phase eines schweren Unfalls entsprechen. Bei den xDynFOAM-Simulationen kam das in AP2.1 getestete Coupled-Modell erstmals für H₂/CO-Verbrennung zum Einsatz. Es zeigte sich, dass die Flammenbeschleunigung teilweise signifikant unterschätzt wird, was dann auch zu einer Unterschätzung der Druckpeaks führte. Weiterentwicklungsbedarf wurde u. a. für die Berechnung der laminaren Flammgeschwindigkeit bei H₂/CO-Gemischen, die Modellierung von Flammeninstabilitäten bei H₂/CO-Verbrennung sowie die Möglichkeit, CO₂ im unverbrannten Gas zu simulieren, identifiziert.

In **AP 5** erfolgte die Koordinierung von OpenFOAM-Aktivitäten für Containment-Anwendungen. Dazu hat die GRS einen GitLab-Server bereitgestellt, auf den nationale Partner aus dem CFD-Verbund zugreifen können, um die Referenzsolver containmentFOAM und xDynFOAM einschließlich von Testbeispielen herunterzuladen. Außerdem besteht die Möglichkeit, OpenFOAM-Modelle über den Server auszutauschen. Weiterhin sind ausgewählte Validierungsfälle der GRS auf dem Server verfügbar. Die GRS hat die Implementation ihres PAR-Modells verbessert und an containmentFOAM gekoppelt. Es erfolgte eine Validierung anhand von THAI HR-5. Das GRS-PAR-Modell wurde an neue containmentFOAM-Versionen angepasst. Die GRS hat das FZ Jülich bei der Portierung

von containmentFOAM in neue OpenFOAM-Versionen durch Nachrechnung von Validierungsfällen mit unterschiedlichen Versionen unterstützt.

Insgesamt konnten die Vorhabensziele erfolgreich erreicht werden. Mit containmentFOAM steht ein für zahlreiche Anwendungen getesteter Solver zur Berechnung von Gasverteilungen und Aerosoltransport zur Verfügung, der auch für komplexe Anwendungsbeispiele erfolgreich getestet wurde. Die GRS hat den Verbrennungssolver xDynFOAM erfolgreich für die langsame und die schnelle turbulent-beschleunigte H₂-Verbrennung getestet. Bei der Teilnahme am ETSON-AMHYCO-Verbrennungsbenchmark zeigte sich aber, dass im Hinblick von H₂/CO-Verbrennung noch Verbesserungsbedarf besteht. Die GRS hat das Kopplungsprogramm „FS-Converter“ entwickelt, mit dem lokale, zeitabhängige Druck-Zeit-Verläufe aus OpenFOAM als lokale Last-Zeit-Funktionen LS-DYNA-verfügbar gemacht werden können. Mit Hilfe des FS-Converters konnten Multi-Physik-Analysen zur Fluid-Struktur-Interaktion für verschiedene Verbrennungsversuche mit xDynFOAM und LS-DYNA durchgeführt werden.

Literaturverzeichnis

- /ABE 20/ Abe, S., Studer, E., Ishigaki, M., Sibamoto, Y., Yonomoto, T.: Density stratification breakup by a vertical jet: Experimental and numerical investigation on the effect of dynamic change of turbulent schmidt number. Nuclear Engineering and Design, Bd. 368, Nr. 5, S. 110785, DOI 10.1016/j.nucengdes.2020.110785, 2020.
- /AMB 09/ Ambrosini, W., Bucci, M., Forgione, N., Oriolo, F., Paci, S.: SARNET-2 condensation benchmark No. 2, Data for a Numerical Benchmark on Condensation Modelling proposed in the frame of the SARNET-2 NoE. Universität Pisa, 2009.
- /AND 13/ Andreani, M.: OECD/NEA – PSI CFD Benchmark Specifications. Paul Scherrer Institute (PSI), 2013.
- /AND 19/ Andreani, M., Gaikwad, A. J., Ganju, S., Gera, B., Grigoryev, S., Herranz, L. E., Huhtanen, R., Kale, V., Kanaev, A., Kapulla, R., Kelm, S., Kim, J., Nishimura, T., Paladino, D., et al.: Synthesis of a CFD benchmark exercise based on a test in the PANDA facility addressing the stratification erosion by a vertical jet in presence of a flow obstruction. Nuclear Engineering and Design, Bd. 354, Nr. 4, S. 110177, DOI 10.1016/j.nucengdes.2019.110177, 2019.
- /ARZ 19/ ARZHANNIKOV, A. V., BEDENKO, S. V., Ivanov, A. A., MODESTOV, D. G., PRIKHODKO, V. V., Sinha, S. L., SHAMANIN, I. V., SHMAKOV, V. M.: Fuel Evolution in Hybrid Reactor Based on Thorium Subcritical Assembly with Open Trap as Fusion Neutron Source (Computer Simulations). Plasma and Fusion Research, Bd. 14, Nr. 0, S. 2402101, DOI 10.1585/pfr.14.2402101, 2019.
- /BAM 20/ Bambauer, M., Hasslberger, J., C. N., Klein M.: Vortex Dynamics and Fractal Structures in Reactive Richtmyer-Meshkov Instability, 13th International Symposium on Hazards, Prevention and Mitigation of Industrial Explosions. 2020.

- /BAR 22/ Barfuß, C., Heilbronn, D., Sattelmayer, T.: Verbundvorhaben: Entwicklung von Verbrennungsmodellen und Kriterien für H₂-CO-Luft-Schichten bei partiellem Einschluss, Abschlussbericht. Lehrstuhl für Thermodynamik, EPC, SoED der TUM, FKZ 1504515A, 2022.
- /BAR 23/ Barfuß, C. J.: Efficient Mult-Scale Simulation of Deflagration-to-Detonation Transition in Stratified H₂-CO-Air Mixtures. Dissertation, TU München (TUM): München, 2023.
- /BAU 92/ Baukal, W., Geiß, M., Gramatte, W., Kanzleiter, T., Rischbieter, F.: 1992-04_Fortführung der Untersuchung zu zukünftigen Containment-bezogenen Forschungsarbeiten. Hrsg.: Battelle Institut e.V., 255 S.: Frankfurt am Main, 1992-04;
- /BEN 18/ Bentaib, A., Chaumeix, N., Grosseuvres, R., Bleyer, A., Gastaldo, L., Maas, L., Jallais, S., Vyazmina, E., Kudriakov, S., Studer, E., Dehbi, A., Schramm, B., Veikko, T., Frankova, M., et al.: ETSON-MITHYGENE benchmark on simulations of upward flame propagation experiment in the ENACCEF2 experimental facility. In: Chinese Nuclear Society (CNS), State Power Investment Corporation Limited (SPIC) (Hrsg.): NUTHOS-12, 12th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics, Operation and Safety. Qingdao, China, 14. - 18. Oktober 2018, 2018.
- /BEN 24/ Bentaib, A., Chaumeix, N.: ETSON AMHYCO benchmark exercise on hydrogen-carbon monoxide flame propagation under conditions representative of severe accident late phases, Specification report. IRSN/ICARE, 30. Oktober 2024.
- /CAM 23/ Cammiade, L., Kelm, S.: SETCOM-2: DATA-DRIVEN BOUNDARY LAYER MODELLING AND EXPERIMENTAL PERSPECTIVES. Präsentation, CFD network meeting: Garching, 14. März 2023.
- /CHA 24a/ Chae, M.-S., Kapulla, R., Del Carpio, S. A., Gabicagogeasca-Cuesta, C., Suter, S., Hug, C., Paladino, D.: Jets or plumes impacting complex compartments – P1A1 series report, OECD/NEA Panda series report. Paul Scherrer Institute (PSI): Villigen, 2024.

- /CHA 24b/ Chae, M. S., Kapulla, R., Del Carpio, S. A., Gabicagogeascoa-Cuesta, C., Suter, S., Hug, C., Paladino, D.: OECD/NEA PANDA Project: Jets or plumes impacting complex compartments, P1A1 series report. Hrsg.: Paul Scherrer Institute (PSI), TM-41-24-17 V.0, 2024.
- /CRE 25/ Creative Fields Holding Ltd: Introduction to cfMesh. Stand vom 15. Mai 2025, erreichbar unter <https://cfmesh.com/welcome/>, 2025.
- /DEH 20/ Dehbi, A.: Correcting for tube curvature effects on condensation in the presence of a noncondensable gas in laminar regimes. Hrsg.: International Journal of Heat and Mass Transfer, Paul Scherrer Institut, 151. Aufl., 2020.
- /DEH 23/ Dehbi, A., Kapulla, R.: CFD analyses of large-scale tests highlighting the effects of thermal radiation in steam-containing atmospheres. Nuclear Engineering and Design, Bd. 415, 2023.
- /DEH 24/ Dehbi, A., Kapulla, R.: CFD simulations of helium layer erosion in one PANDA vessel following cooler activation. Nuclear Engineering and Design, Bd. 422, S. 113154, DOI 10.1016/j.nucengdes.2024.113154, 2024.
- /DON 25/ Dongsheng Wen: GraVent-Anlage. Technische Universität München (TUM), erreichbar unter <https://www.epc.ed.tum.de/td/forschung/ddt/experimental-setup/>, abgerufen am 9. Mai 2025.
- /ETT 11/ Ettner F., Vollmer K.G., Sattelmayer T.: Einfluss von Mischungsgradienten und seitlichem Massenverlust auf die Flammenbeschleunigung und die Detonation in Kanälen, Abschlussbericht Vorhaben-Nr. 1501338. Technische Universität München (TUM), 2011.
- /ETT 13/ Ettner, F.: Effiziente numerische Simulation des Deflagrations–Detonations–Übergangs. Dissertation, Institut für Energietechnik, Lehrstuhl für Thermodynamik, Technische Universität München (TUM): München, 8. Januar 2013.
- /FIN 17a/ Fineschi, F., Schiavatti, M., Pini, T.: Small-scale enclosure, Dimensions and design. 28 S., 2017.

- /FIN 17b/ Fineschi, F., Landucci, G., Schiavatti, M., Pini, T.: Small-scale enclosure, Experimental campaign of hydrogen deflagrations for homogeneous H₂ concentrations. 287 S., 2017.
- /FRE 22/ Freitag, M., Schmidt, E.: Counter-current flows in multi-compartment containments Tests TH-35, Benchmark Specification Report. Becker Technologies GmbH, 1501630-SR-TH-35, 2022.
- /FRE 23/ Freitag, M., Laufenberg, B. von, Colombet, M., Schmidt, E., Dieter, K.: Counter-current flows in multi-compartment containments Tests TH-35-36. Hrsg.: Becker Technologies GmbH, 2023.
- /GEO 23/ George, A., Kelm, S., Xu, C.: Two-phase modeling of wall and bulk condensation by hybrid VOF-mixture approach for containment applications. Forschungszentrum Jülich GmbH, 2023.
- /GEO 25/ George, A.: Exploring the Influence of Bulk Condensation and Fog Transport on Containment Atmosphere using CFD. Dissertation, Fakultät für Maschinenbau, Karlsruher Institut für Technologie (KIT): Karlsruhe, 2025.
- /GUP 12/ Gupta, S., Schmidt-Naujok, E. W., Balewski, B., Langer, G.: Auflösung einer Dampf-Luft Schichtung durch Naturkonvektion, Versuchsserie TH24 (CV5). August 2012.
- /HAß 17/ Haßlberger, J.: Numerical Simulation of Deflagration-to-Detonation Transition on Industry Scale, Dissertation. Technische Universität München (TUM): München, 2017.
- /JIR 24/ Ji R.: Development and evaluation of a methodology for investigation of uncertainties in URANS-based CFD simulations. Universität der Bundeswehr München, 2024.
- /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.

- /KAP 21a/ Kapulla, R., Paladino, D., Paranjape, S., Fehlmann, M., Suter, S.: Interacting pattern of coolers Panda H2P6 Test Series and Data Report, Series Report. Paul Scherrer Institute (PSI), 2021.
- /KAP 21b/ Kapulla, R., Paranjape, S., Fehlmann, M., Suter, S., Paladino, D.: Thermal radiation effects PANDA H2P2 Test Series and Data Report, OECD/NEA HYMERES-2 PROJECT. 54 S., 12. Juli 2021.
- /KEL 20/ Kelm, S.: Status of containmentFOAM for Analysis of H2 mixing and mitigation, CFD Verbund Treffeb. Garching, 2020.
- /KEL 21a/ Kelm, S., Kampili, M., Liu, X., George, A., Schumacher, D., Druska, C., Struth, S., Kuhr, A., Ramacher, L., Allelein, H.-J., Prakash, K. A., Kumar, G. V., Cammiade, L. M. F., Ji, R.: The Tailored CFD Package 'containmentFOAM' for Analysis of Containment Atmosphere Mixing, H2/CO Mitigation and Aerosol Transport. Fluids, Bd. 6, Nr. 3, S. 100, DOI 10.3390/fluids6030100, 2021.
- /KEL 21b/ Kelm, Stephan, et. al.: The Tailored CFD Package 'containmentFOAM' for Analysis of Containment Atmosphere Mixing, H2/CO Mitigation and Aerosol Transport. Hrsg.: Fluids 2021, 6(3), 100, 2021.
- /KEL 25/ Kelm, S., Schumacher, D., George, A., Ji, R., Lui, X.: Unterstützung bei der Integration und Anwendung von containmentFOAM im nationalen CFD-Referenzpaket für das Forschungsfeld Sicherheitseinschluss, Ergebnisbericht Fkz , 1501633B. Forschungszentrum Jülich GmbH, 2025.
- /KIM 19/ Kim, D., Kim, J.: Numerical method to simulate detonative combustion of hydrogen-air mixture in a containment. Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics, Bd. 13, Nr. 1, S. 938–953, DOI 10.1080/19942060.2019.1660219, 2019.
- /KIM 22/ Kim S., K. J.: Effect of radiation model on simulation of water vapor - hydrogen premixed flame using flamelet combustion model in OpenFOAM. Nuclear Engineering and Technology, 2022.

- /LIU 23/ Liu, X.: Modeling of Gas Radiation Heat Transfer for the CFD Analysis of Containment Atmosphere Mixing. PhD thesis, Fakultät für Maschinenwesen, RWTH Aachen, 17. März 2023.
- /MAN 96/ Manninen, M., Taivassalo, V., Kallio, S.: On the Mixture Model for Multi-phase Flow. Hrsg.: VTT Publications: Finland, 1996.
- /MIG 09/ Mignot, G., Erkan, N., Kapulla, R., Paladino, D., Zboray, R., Fehlmann, M.: OECD/SETH-2 PANDA Test ST2_1, Quick-Look Report. Hrsg.: Paul Scherrer Institute (PSI), September 2009.
- /OEC 24/ OECD/NEA: CSNI Technical Opinion Paper No. 20, Use of Computational Fluid Dynamics for Nuclear. 2024.
- /PIN 17/ Pini, T. (Hrsg.): EXPERIMENTAL MEASUREMENTS OF STRUCTURAL DISPLACEMENT DURING HYDROGEN VENTED DEFLAGRATIONS FOR FE MODEL VALIDATION. VIIth ICHS- International Conference on Hydrogen Safety, 2017, 12 S., 2017.
- /POV 21/ Povilaitis Mantas, J. J.: flameFoam: An open source CFD solver for turbulent premixed combustion. Nuclear Engineering and Design, 2021.
- /RIV 24/ Rivera, Y., Kapulla, R., Ghendour, N., Paranjape, S., Chae, M., Suter, S., Hug, C., Paladino, D.: OECD/NEA PANDA project: Radiative Heat Transfer, PANDA P1A2 Test Series Report. Hrsg.: Paul Scherrer Institute (PSI), TM-41-24-30: Villigen, Switzerland, 2024.
- /SCH 10/ Schramm, B. A., 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. A., Stewering, J., Sonnenkalb, M.: Erprobung und Validierung von CFD-Codes für die Simulation von unfalltypischen Phänomenen im Sicherheitseinschluss, Abschlussbericht RS1500. GRS-Bericht, GRS-324: Köln, 2014.

- /SCH 17/ Schramm, B. A., 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-Bericht, 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/ Schramm, B., Stewering Jörn, et al.: Ertüchtigung von CFD-Codes für die Simulation von störfalltypischen Phänomenen im Containment, Abschlussbericht RS1562. GRS, 2021.
- /SCH 22a/ Schramm, B., Stewering, J., Herb, J., Mistry, H., Wielenberg, A., Sievers, J.: CFDCONT - Ertüchtigung von CFD-Codes für die Simulation von störfalltypischen Phänomenen im Containment, Abschlussbericht. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-Bericht, Bd. 652, GRS-652, 437 S., ISBN 978-3-949088-42-1, DOI RS1562, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, Mai 2022.
- /SCH 22b/ Schramm, B. A., 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. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH (GRS), 2022.
- /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.

- /ULL 20/ Ullah, S., Yim, M.-S.: Evaluation of an aerodynamic barrier approach to limit the dispersion of fission products in the event of containment failure. *Progress in Nuclear Energy*, Bd. 118, S. 103120, DOI 10.1016/j.pnucene.2019.103120, 2020.
- /MIL 19/ Vulfayeu, S.: Latest meshing development in OpenFOAM. ESI Group, erreichbar unter https://www.foamacademy.com/wp-content/uploads/2019/03/2019-02-27-SVU-CFD-RE-GOFUN_vulfayeu.pdf, abgerufen am 15. Mai 2025.
- /VOL 15/ Vollmer, K. G.: Einfluss von Mischungsgradienten auf die Flammenbeschleunigung und die Detonation in Kanälen. Dissertation, Lehrstuhl für Thermodynamik, Technische Universität München (TUM): München, 2015.
- /VYS 14/ Vyskocil, L., Schmid, J., Macek, J.: CFD simulation of air–steam flow with condensation. *Nuclear Engineering and Design*, Nr. 279, S. 147–157, 2014.
- /WAN 17/ Wang, C. J., Wen, J. X.: Numerical simulation of flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in hydrogen-air mixtures with concentration gradients. *International Journal of Hydrogen Energy*, Bd. 42, Nr. 11, S. 7657–7663, DOI 10.1016/j.ijhydene.2016.06.107, 2017.
- /WEN 24/ Wenig, P. J., Kelm, S., Klein, M.: CFD Uncertainty Quantification using PCE–HDMR: Exemplary Application to a Buoyancy-Driven Mixing Process. *Flow, Turbulence and Combustion*, Bd. 112, Nr. 1, S. 191–216, DOI 10.1007/s10494-023-00467-6, 2024.
- /WIL 13/ Wilkening, H., Ammirabile, L.: Simulation of helium release in the Battelle Model Containment facility using OpenFOAM. *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 265, Nr. 4, S. 402–410, DOI 10.1016/j.nucengdes.2013.08.070, 2013.
- /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.

/ZIV 23/ Zivkovic D., S. T.: Entwicklung von ddtHyCoCentralFoam als Analysewerkzeug reaktorsicherheitsrelevanter Verbrennungsphänomene (KEK), Abschlussbericht. TU München, 2023.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Schematischer Versuchsaufbau TH-35.....	10
Abb. 2.2	Verbindungsrohr mit Messinstrumentierung /FRE 22/.....	11
Abb. 2.3	Gemessene mittlere Heizleistung und berechneter integraler Wärmestrom an der Außenseite der Wände in der Simulation.....	13
Abb. 2.4	Berechnete Heizleistung der unteren elektrischen Heizung bei fest vorgegebener Wandaußentemperatur von 413 K	14
Abb. 2.5	Vorgegebene initiale Temperatur	14
Abb. 2.6	Verwendetes CFD-Gitter bestehend aus 1,25 Millionen Zellen	15
Abb. 2.7	Temperaturverteilung nach 2000 s, oben; THAI+-Behälter, unten: Verbindungsrohr	18
Abb. 2.8	Gastemperatur im TTV, oben: 8,4 m Höhe, unten: 5,6 m Höhe	19
Abb. 2.9	Gastemperatur im PAD, oben: 8,4 m Höhe, unten: 5,6 m Höhe.....	20
Abb. 2.10	Temperatur im TTV-Sumpf	21
Abb. 2.11	Temperaturen im Verbindungsrohr in der Nähe des TTV ($y = 1,1$ m).....	21
Abb. 2.12	Temperaturen im Verbindungsrohr in der Nähe des PAD ($y = 3,45$ m)	22
Abb. 2.13	Temperatur im unteren PAD	22
Abb. 2.14	Geschwindigkeit im THAI+-Behälter nach 2000 s	24
Abb. 2.15	y-Komponente v_y der Geschwindigkeit im Verbindungsrohr nach 2000 s.....	24
Abb. 2.16	Simulierte Geschwindigkeit im Verbindungsrohr zu unterschiedlichen Zeitpunkten.....	25
Abb. 2.17	Geschwindigkeit im Verbindungsrohr.....	25
Abb. 2.18	Temperatur im TTV (oben) und im PAD (unten) in 5,6 m Höhe bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter	27
Abb. 2.19	Temperatur im TTV-Sumpf bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter	28
Abb. 2.20	Temperatur im Verbindungsrohr nahe TTV bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter.....	28
Abb. 2.21	Temperatur im Verbindungsrohr nahe PAD bei unterschiedlich feinem CFD-Gitter.....	29

Abb. 2.22	Temperatur im TTV, oben: 8,4 m Höhe, unten: 5,6 m Höhe.....	32
Abb. 2.23	Temperatur im Sumpf des TTV, oben: 0,8 m Höhe, unten: 0,6 m Höhe.....	33
Abb. 2.24	Temperatur im PAD, oben: 8,4 m Höhe, unten: 5,6 m Höhe	34
Abb. 2.25	Temperatur im PAD, oben: 0,65 m Höhe, unten: 0,2 m Höhe	35
Abb. 2.26	Temperatur im Verbindungsrohr nahe TTV, oben: 0,875 m Höhe, unten: 0,725 m Höhe	36
Abb. 2.27	Temperatur im Verbindungsrohr nahe TTV, oben: 0,575 m Höhe, unten: 0,425 m Höhe	37
Abb. 2.28	Temperatur im Verbindungsrohr nahe PAD, oben: 0,875 m Höhe, unten: 0,425 m Höhe	38
Abb. 2.29	Mittlere Geschwindigkeit (v_y) im Verbindungsrohr	39
Abb. 2.30	Temperatur im Verbindungsrohr an der obersten Messstelle (Höhe 0,875 m), oben in TTV-Nähe, unten in PAD-Nähe	42
Abb. 2.31	Wandtemperatur im Verbindungsrohr nahe dem TTV, oben in 0,9 m Höhe, unten in 0,4 m Höhe	43
Abb. 2.32	Wandtemperatur im Verbindungsrohr nahe dem PAD, oben in 0,9 m Höhe, unten in 0,4 m Höhe	44
Abb. 2.33	Mittleres Geschwindigkeitsprofil (v_y) mit Standardabweichung im Verbindungsrohr	45
Abb. 2.34	Temperatur im TTV in 5,6 m Höhe.....	46
Abb. 2.35	Temperatur im PAD in 5,6 m Höhe	47
Abb. 2.36	Temperatur im Verbindungsrohr nahe PAD auf 0,875 m Höhe	47
Abb. 2.37	Links: Schematische Darstellung der Experimente H2P6_1 und H2P6_2	53
Abb. 2.38	Geometrie bei detaillierter Abbildung des Gebäudekondensators.....	56
Abb. 2.39	CFD-Gitter bei detaillierter Abbildung des Kondensators (Sim. detailliert), rechts: Ausschnitt im Bereich des Kondensators (rot: Gas, blau: Wasser und Rohrwände).....	56
Abb. 2.40	Druck bei detaillierter Geometrie der Gebäudekondensatoren.....	58
Abb. 2.41	Integrale Wandkondensationsrate	59

Abb. 2.42	Angefallenes Kondensat.....	59
Abb. 2.43	Temperatur (links) und Helium-Massenbruch (rechts) in „Sim. detail.“ nach 50 s.....	61
Abb. 2.44	Vertikalgeschwindigkeit (links) und Dichte (rechts) in „Sim. detail.“ nach 50 s.....	61
Abb. 2.45	Helium-Molenbruch im Experiment H2P6-2	62
Abb. 2.46	Berechneter Helium-Molenbruch in Sim. detail.	62
Abb. 2.47	Berechneter Helium-Molenbruch in Sim. skal. Tw.....	62
Abb. 2.48	Helium-Molenbruch an der Position B20 (Mitte, 7,48 m Höhe).....	63
Abb. 2.49	Helium-Molenbruch an der Position C20 (Mitte, 6,9 m Höhe)	63
Abb. 2.50	Helium-Molenbruch an der Position F20 (Mitte, 6 m Höhe).....	63
Abb. 2.51	Helium-Molenbruch an der Position GH20 (Mitte, 5,3 m Höhe).....	64
Abb. 2.52	Helium-Molenbruch an der Position K20 (Mitte, 4,0 m Höhe).....	64
Abb. 2.53	Helium-Molenbruch an der Position L20 (Mitte, 3,68 m Höhe)	64
Abb. 2.54	Helium-Molenbruch an der Position M20 (Mitte, 3,03 m Höhe)	65
Abb. 2.55	Helium-Molenbruch an der Position O20 (Mitte, 2,1 m Höhe)	65
Abb. 2.56	Helium-Molenbruch an der Position T20 (Mitte, 0,54 m Höhe).....	65
Abb. 2.57	Temperatur an der Position C20 (Mitte, 6,93 m Höhe).....	66
Abb. 2.58	Temperatur an der Position GH20 (Mitte, 5,3 m Höhe)	67
Abb. 2.59	Temperatur an der Position H20 (Mitte, 4,98 m Höhe).....	67
Abb. 2.60	Temperatur an der Position K20 (Mitte, 4,0 m Höhe).....	67
Abb. 2.61	Temperatur an der Position L20 (Mitte, 3,68 m Höhe)	68
Abb. 2.62	Temperatur an der Position M20 (Mitte, 3,03 m Höhe).....	68
Abb. 2.63	Temperatur an der Position T20 (Mitte, 0,54 m Höhe)	68
Abb. 2.64	Vereinfachte Geometrien: Oben links: Quader, oben rechts: 2 Platten, unten: 21 Rohre.....	70
Abb. 2.65	Druckverlauf bei den Simulationen mit vereinfachter Geometrie	72
Abb. 2.66	Integrale Wandkondensationsrate	73

Abb. 2.67	Angefallenes Kondensat.....	73
Abb. 2.68	Helium-Molenbruch bei „Sim. Quader“	74
Abb. 2.69	Helium-Molenbruch bei „Sim. 21 Rohre“	74
Abb. 2.70	Helium-Molenbruch an der Position B20 (Mitte, 7,48 m Höhe).....	75
Abb. 2.71	Helium-Molenbruch an der Position H20 (Mitte, 4,98 m Höhe).....	75
Abb. 2.72	Helium-Molenbruch an der Position M20 (Mitte, 3,03 m Höhe)	76
Abb. 2.73	Helium-Molenbruch an der Position T20 (Mitte, 0,54 m Höhe).....	76
Abb. 2.74	Temperatur an der Position C20 (Mitte, 6,93 m Höhe).....	77
Abb. 2.75	Temperatur an der Position C26 (6,93 m Höhe, Radius 1,43 m).....	77
Abb. 2.76	Temperatur an der Position H20 (Mitte, 4,98 m Höhe).....	78
Abb. 2.77	Temperatur an der Position H26 (4,98 m Höhe, Radius 1,43 m).....	78
Abb. 2.78	Temperatur an der Position M20 (Mitte, 3,03 m Höhe).....	79
Abb. 2.79	Anordnung der Gebäudekondensatoren in H2P6_1.....	81
Abb. 2.80	Kühlwassertemperatur des ersten Gebäudekondensators bei Austritt aus Kondensator im Experiment und in Sim. „Tw mod.“.....	82
Abb. 2.81	Druckverlauf im Experiment und bei den Simulationen	83
Abb. 2.82	Gesamte Kondensationsrate aller drei Gebäudekondensatoren in den beiden Simulationen	84
Abb. 2.83	Zeitlicher Verlauf der angefallenen Kondensatmasse	84
Abb. 2.84	Helium-Molenbruch im Experiment H2P6-1	85
Abb. 2.85	Helium-Molenbruch in der Simulation „Tw linear“	86
Abb. 2.86	Helium-Molenbruch an der Position B20 (Mitte, 7,48 m Höhe).....	86
Abb. 2.87	Helium-Molenbruch an der Position C20 (Mitte, 6,93 m Höhe).....	86
Abb. 2.88	Helium-Molenbruch an der Position F20 (Mitte, 6 m Höhe).....	87
Abb. 2.89	Helium-Molenbruch an der Position GH20 (Mitte, 5,03 m Höhe).....	87
Abb. 2.90	Helium-Molenbruch an der Position K20 (Mitte, 4 m Höhe).....	87
Abb. 2.91	Helium-Molenbruch an der Position L20 (Mitte, 3,68 m Höhe)	88
Abb. 2.92	Helium-Molenbruch an der Position M20 (Mitte, 3,03 m Höhe)	88

Abb. 2.93	Helium-Molenbruch an der Position O20 (Mitte, 2,1 m Höhe)	88
Abb. 2.94	Helium-Molenbruch an der Position T20 (Mitte, 0,54 m Höhe).....	89
Abb. 2.95	Temperatur am Messpunkt C20 (Mitte, 6,93 m Höhe).....	89
Abb. 2.96	Temperatur am Messpunkt C26 (6,93 m Höhe, Radius 1,43 m)	90
Abb. 2.97	Temperatur am Messpunkt GH20 (Mitte, 5,3 m Höhe).....	90
Abb. 2.98	Temperatur am Messpunkt H20 (Mitte, 4,98 m Höhe).....	90
Abb. 2.99	Temperatur am Messpunkt H26 (4,98 m Höhe, Radius 1,43 m)	91
Abb. 2.100	Temperatur am Messpunkt K20 (Mitte, 4 m Höhe).....	91
Abb. 2.101	Temperatur am Messpunkt M20 (Mitte, 3,03 m Höhe).....	91
Abb. 2.102	Temperatur am Messpunkt T20 (Mitte, 0,54 m Höhe).....	92
Abb. 2.103	Links: Schematische Darstellung des Experiments /AND 19/ /AND 13/.....	96
Abb. 2.104	Links: CAD-Daten, die zur Erzeugung des CFD-Gitters genutzt werden, rechts: Schnitt durch CFD-Gitter	97
Abb. 2.105	Helium-Molenbruch am obersten Messpunkt MS9.....	99
Abb. 2.106	Helium-Molenbruch an der Messstelle MS9 (Behältermitte in 7,99 m Höhe).....	101
Abb. 2.107	Helium-Molenbruch an der Messstelle MS1 (oberhalb der Einspeisung in 7,48 m Höhe).....	102
Abb. 2.108	Helium-Molenbruch an der Messstelle MS2 (oberhalb der Einspeisung in 6,71 m Höhe).....	102
Abb. 2.109	Helium-Molenbruch an der Messstelle MS4 (oberhalb der Einspeisung in 6,0 m Höhe).....	103
Abb. 2.110	Helium-Molenbruch an der Messstelle MS12 (nahe der Behälterwand in 6,0 m Höhe).....	103
Abb. 2.111	Helium-Molenbruch an der Messstelle MS15 (nahe der Behälterwand in 3,68 m Höhe).....	104
Abb. 2.112	Temperatur an der Messstelle TC3 (oberhalb der Einspeisung in 3,68 m Höhe).....	104
Abb. 2.113	Temperatur an der Messstelle TC5 (seitlich der Einspeisung in 3,68 m Höhe).....	105

Abb. 2.114	Vertikalgeschwindigkeit entlang einer vertikalen Linie oberhalb der Einspeisung zum Zeitpunkt ~111 s	105
Abb. 2.115	Vertikalgeschwindigkeit entlang einer horizontalen Linie auf der Höhe 5,9 m zum Zeitpunkt ~1213 s.....	106
Abb. 2.116	Helium-Molenbruch an der Messstelle MS9 (Behältermitte, 7,99 m Höhe).....	107
Abb. 2.117	Helium-Molenbruch an der Messstelle MS4 (oberhalb der Einspeisung, 6,0 m Höhe).....	107
Abb. 2.118	Temperatur an der Messstelle TC3 (oberhalb der Einspeisung, 3,68 m Höhe).....	108
Abb. 2.119	Temperatur an der Messstelle TC5 (seitlich der Einspeisung, 3,68 m Höhe).....	108
Abb. 2.120	Vertikalgeschwindigkeit entlang einer horizontalen Linie auf der Höhe 5,9 m zum Zeitpunkt ~1213 s.....	109
Abb. 2.121	Helium-Molenbruch an der Messstelle MS9 (Behältermitte in 7,99 m Höhe).....	110
Abb. 2.122	Helium-Molenbruch an der Messstelle MS2 (oberhalb der Einspeisung in 6,71 m Höhe).....	110
Abb. 2.123	Versuchsführung beim SETH-2-Versuch ST2_1 (Bild: /MIG 09/)	112
Abb. 2.124	PANDA-Geometrie und molare Helium-Konzentration zum Zeitpunkt $t = 10$ s.....	114
Abb. 2.125	Position der Monitorpunkte (und Temperatur zum Zeitpunkt $t = 500$ s) ..	115
Abb. 2.126	Helium-Molenbruch am Monitorpunkt MCG_D1A (Höhe: 8,03 m).....	116
Abb. 2.127	Helium-Molenbruch am Monitorpunkt MCG_D1C (Höhe: 6,926 m).....	116
Abb. 2.128	Helium-Molenbruch am Monitorpunkt MCG_D1F (Höhe: 6,0 m).....	117
Abb. 2.129	Verlauf der Temperaturen am Monitorpunkt MTG_D1A (Höhe: 8,03 m)	118
Abb. 2.130	Verlauf der Temperaturen am Monitorpunkt MTG_D1D (Höhe: 6,276 m)	118
Abb. 2.131	Verlauf der Temperaturen am Monitorpunkt MTG_D1H (Höhe: 4,976 m)	119

Abb. 2.132	Versuchsaufbau für die CONAN-Experimente (SARNET-2-Benchmark Bild: /AMB 09/)	121
Abb. 2.133	Zeitlicher Verlauf der Wandkondensationsrate bei der containmentFOAM-Simulation unter Verwendung des feinsten CFD-Gitters	123
Abb. 2.134	Bei der Nachrechnung von CONAN verwendetes CFD-Gitter (Nr. 3)	125
Abb. 2.135	Kondensationsrate bei Verwendung unterschiedlich feiner CFD-Gitter	126
Abb. 2.136	Kondensationsrate bei Simulation unterschiedlicher CONAN-Versuche	128
Abb. 2.137	Wandkondensationsrate bei unterschiedlicher Turbulenzintensität am Einlass für das Experiment P20T30V25	129
Abb. 2.138	Wandkondensationsrate bei unterschiedlicher Turbulenzintensität am Einlass für das Experiment P30T30V25	129
Abb. 2.139	CFD-Gitter bei Nachrechnung der CONAN-Versuche einschließlich der Strömung der Wasserkühlung	132
Abb. 2.140	Kondensationsrate beim Versuch P20V25T30 mit und ohne Simulation des Kühlwassers bei unterschiedlicher Gitterverfeinerung	133
Abb. 2.141	Kondensationsrate beim Versuch P30V25T30 mit und ohne Simulation des Kühlwassers bei unterschiedlicher Gitterverfeinerung	134
Abb. 2.142	Oben: Temperatur beim CONAN-Experiment P20V25T30, unten: Temperatur am Ende des Kühlwasserkanals	135
Abb. 2.143	Wandkondensationsrate mit und ohne Berücksichtigung von Volumen Kondensation in den Simulationen	136
Abb. 2.144	Berechnete Wand- und Volumenkondensationsrate in den Experimenten P20T25V30 und P30V25T30	137
Abb. 2.145	Darstellung des Experimentes Panda 4bis /ZBO 06/	139
Abb. 2.146	Verwendete CFD-Gitter (rechts: Behälter 1 mit Einspeiserohr, links: Behälter 2)	141
Abb. 2.147	Integrale Wandkondensationsrate bei den Simulationen CFX, mrs, cont und cont Vol.	144
Abb. 2.148	Integrale Wand- und Volumenkondensationsrate bei der Simulation cont Vol.	145

Abb. 2.149	Integrale Volumenkondensationsrate bei der Simulation cont Vol.	145
Abb. 2.150	Dampf-Molenbruch an der Messstelle B20 (Behältermitte, 7,48 m Höhe) im Behälter DW1	146
Abb. 2.151	Dampf-Molenbruch an der Messstelle R20 (Behältermitte, 1,73 m Höhe) im Behälter DW1	146
Abb. 2.152	Dampf-Molenbruch an der Messstelle B20 (Behältermitte, 7,48 m Höhe) im Behälter DW2	147
Abb. 2.153	Dampf-Molenbruch an der Messstelle R20 (Behältermitte, 1,73 m Höhe) im Behälter DW2	147
Abb. 2.154	Temperatur an der Messstelle C20 (Behältermitte, 6,93 m Höhe) im Behälter DW1	148
Abb. 2.155	Temperatur an der Messstelle R20 (Behältermitte, 1,73 m Höhe) im Behälter DW1	148
Abb. 2.156	Temperatur an der Messstelle C20 (Behältermitte, 6,93 m Höhe) im Behälter DW2	149
Abb. 2.157	Temperatur an der Messstelle R20 (Behältermitte, 1,73m Höhe) im Behälter DW2	149
Abb. 2.158	Konfiguration des TH-24-Experimentes (Bildquelle: /GUP 12/)	151
Abb. 2.159	Abbau einer Dampfschicht im TH-24-Experiment (Ergebnis einer CFX-Simulation)	152
Abb. 2.160	CFD-Gitter für den TH-24 Versuch	154
Abb. 2.161	Druckverlauf beim TH-24-Experiment	155
Abb. 2.162	Dampfkonzentration am Monitorpunkt DCH87M00 (Höhe: 8,7 m)	156
Abb. 2.163	Dampfkonzentration am Monitorpunkt DCH77M00 (Höhe: 7,7 m)	157
Abb. 2.164	Dampfkonzentration am Monitorpunkt DCH70M00 (Höhe: 7,0 m)	157
Abb. 2.165	Dampfkonzentration am Monitorpunkt DCH63M00 (Höhe: 6,3 m)	158
Abb. 2.166	Temperaturverlauf am Monitorpunkt DTF87M00 (Höhe: 8,7 m)	159
Abb. 2.167	Temperaturverlauf am Monitorpunkt DTF70H11 (Höhe: 7,0 m)	159
Abb. 2.168	Temperaturverlauf am Monitorpunkt DTF63H11 (Höhe: 6,3 m)	160
Abb. 2.169	Temperaturverlauf am Monitorpunkt DTF49M00 (Höhe: 4,9 m)	160

Abb. 2.170	Verlauf der Wandkondensationsrate	161
Abb. 2.171	Integrale Kondensatmasse beim TH24-Experiment	162
Abb. 3.1	Ausbreitung der Flammen im THAI-Experiment HD-7 /KAN 08/.....	166
Abb. 3.2	Einfluss der Zeitschrittweite auf den Druckverlauf.....	168
Abb. 3.3	Einfluss der Runge-Kutta-Iterationen auf den Druckverlauf.....	169
Abb. 3.4	Einfluss der Turbulenzmodells auf den Druckverlauf	170
Abb. 3.5	Einfluss der Flammenfaltungsmodellierung auf den Druckverlauf	171
Abb. 3.6	Vergleich der unterschiedlichen Rechengitter (Ausschnitt unterer THAI-Behälter / Zündort).....	172
Abb. 3.7	Einfluss des Gitters auf den Druckverlauf	173
Abb. 3.8	Vergleich von simulierten und experimentellem Druckverlauf	174
Abb. 3.9	Vergleich von simulierter und experimenteller Flammenausbreitung.....	175
Abb. 3.10	Vergleich von simulierten und experimentellem Druckverlauf beim HD-8-Experiment	177
Abb. 3.11	Vergleich von simulierter und experimenteller Flammenausbreitung (HD-8).....	177
Abb. 3.12	Vergleich von simuliertem und experimentellem Druckverlauf beim HD-10-Experiment	179
Abb. 3.13	Vergleich von simulierter und experimenteller Flammenausbreitung (HD-10).....	179
Abb. 3.14	Vergleich von simuliertem und experimentellem Druckverlauf beim HD-12-Experiment	181
Abb. 3.15	Vergleich von simulierter und experimenteller Flammenausbreitung.....	181
Abb. 3.16	Links: ENACCEF-2-Rohr, rechts: ringförmige Hindernisse	182
Abb. 3.17	CFD-Gitter(-Verfeinerung) an einem Hindernis	183
Abb. 3.18	Druckverlauf in 1,2 m Höhe	184
Abb. 3.19	Druckverlauf in 5,527 m Höhe.....	185
Abb. 3.20	Druckverlauf in 6,377 m Höhe.....	185
Abb. 3.21	Druckverlauf in 7,65 m Höhe	186

Abb. 3.22	Entwicklung der Flammengeschwindigkeit.....	187
Abb. 3.23	Ansicht der GraVent-Anlage /DON 25/.....	188
Abb. 3.24	Schematische Darstellung des Explosionskanals /VOL 15/	188
Abb. 3.25	Einfluss der Gitterfeinheit auf die Flammengeschwindigkeit.....	190
Abb. 3.26	Einfluss des Heat-Release-Modells auf die Flammengeschwindigkeit ...	191
Abb. 3.27	GraVent: Vergleich mit experimentellen Werten	192
Abb. 3.28	Behälter „Small-scale enclosure (SSE)“ für die HySEA-Experimente /FIN 17a/.....	194
Abb. 3.29	Gemessener Druckverlauf beim HySEA-Experiment TP37	195
Abb. 3.30	Gemessene Auslenkung der Stahlplatte beim HySEA-Experiment TP37	195
Abb. 3.31	HySEA-Experiment: OpenFOAM-Geometrie für das SSE mit drei Flaschen (links) und das zugehörige OpenFOAM-Gitter (rechts).....	196
Abb. 3.32	Ausbreitung der Reaktionsfortschrittsvariable im SSE-Volumen (Iso- Surface 0,5).....	197
Abb. 3.33	Vergleich von (mit OpenFOAM) simuliertem und experimentellem Druckverlauf	198
Abb. 3.34	Modellierung der Stahlplatte in LS-DYNA	199
Abb. 3.35	Einfluss der Gitterfeinheit auf die maximale Auslenkung der Stahlplatte.....	200
Abb. 3.36	Vergleich zweier LS-DYNA-Rechnungen mit und ohne Dämpfung	201
Abb. 3.37	Modellierung der Einspannung der Stahlplatte in LS-DYNA.....	202
Abb. 3.38	Vergleich der berechneten und experimentellen Auslenkung der Stahlplatte durch die H ₂ -Verbrennung.....	203
Abb. 3.39	Berechnung des Zeitverlaufs nach Pini mit dem IMPETUS Afea- Solver (Bild: /PIN 17/)	203
Abb. 3.40	Zusammenhang zwischen dem max. Überdruck und der max. Auslenkung der Stahlplatte	204
Abb. 3.41	Vergleich des Zeitverlaufs der Auslenkung	205
Abb. 3.42	Versuchsaufbau der Offermanns-Versuche	207

Abb. 3.43	Verformungsfiguren bei den Offermanns-Versuchen V80E3 (oben) und V60E1 (unten).....	207
Abb. 3.44	Mit xDynFOAM berechneter Reaktionsfortschritt beim Offermanns-Experiment V80E3.....	209
Abb. 3.45	Mit xDynFOAM berechneter Druckverlauf beim Offermanns-Experiment V80E3.....	209
Abb. 3.46	Vergleich von experimentellen und mit xDynFOAM berechneten Druckwellengeschwindigkeiten	210
Abb. 3.47	Benutzeroberfläche des von der GRS entwickelten FS-Converters	211
Abb. 3.48	Zwei unterschiedliche Segment-Sets mit den zugehörigen Last-Zeit Funktionen im LS-DYNA-Preprocessor (Offermanns-Experiment V80E3)	213
Abb. 3.49	Aufweitung des Rohres zum Zeitpunkt 5 ms, berechnet mit LS-DYNA ..	214
Abb. 3.50	Vergleich von experimenteller und simulierter Tangentialdehnung	215
Abb. 3.51	Übersicht zur GraVent-Geometrie.....	216
Abb. 3.52	Vernetzungsdetail der GraVent-Strukturen	216
Abb. 3.53	Druck auf der Innenseite der GraVent-Strukturen (t = 10 ms).....	217
Abb. 3.54	Verschiebung der Hindernisse (t = 10 ms).....	217
Abb. 3.55	Zeitverlauf der Auslenkung des ersten Hindernisses berechnet mit LS-DYNA.....	218
Abb. 4.1	CFX-Rechengitter für ein Konvoi-ähnlichen DWR.....	220
Abb. 4.2	Mit SnappyHexMesh erstelltes Gitter für die OpenFOAM-Rechnungen	221
Abb. 4.3	Eingespeiste Dampfmenge aus dem Druckhalter (Randbedingung).....	223
Abb. 4.4	Temperatur des eingespeisten Druckhalter-Dampfes (Randbedingung).....	223
Abb. 4.5	Eingespeiste Dampfmenge aus der Hauptkühlmittelleitung (HKL-Randbedingung)	224
Abb. 4.6	Eingespeiste Wasserstoffmenge aus der Hauptkühlmittelleitung (HKL-Randbedingung).....	224
Abb. 4.7	Einspeisetemperaturen der HKL-Seite (Dampf und Wasserstoff).....	225

Abb. 4.8	Künstliche Vergrößerung der Einspeisestellen.....	226
Abb. 4.9	Verteilung der H ₂ -Konzentration zu unterschiedlichen Zeitpunkten (die Farbskala geht jeweils von 0 – 7 Vol.-%)	227
Abb. 4.10	Druckverlauf im Containment.....	228
Abb. 4.11	Integrale Dampfmasse im Containment	229
Abb. 4.12	H ₂ -Konzentration im Dampferzeugerturm	229
Abb. 4.13	Temperaturverlauf im Dom	231
Abb. 4.14	Verlauf der Dampfkonzentration im Dom	232
Abb. 4.15	Verlauf der H ₂ -Konzentration im Dom	233
Abb. 4.16	Integrale H ₂ -Masse im Containment	233
Abb. 6.1	Experimenteller Aufbau des THAI-Versuches HR-5.....	239
Abb. 6.2	Aufbau des PARs (Typ: AREVA / Siemens: 0.5*FR-380 size)	240
Abb. 6.3	H ₂ -Einspeiserate, Rekombinationsrate und Druck im Experiment /KAN 09/	240
Abb. 6.4	H ₂ -Molenbruch am PAR-Eintritt.....	242
Abb. 6.5	Zeitlicher Verlauf des Drucks	243
Abb. 6.6	Temperatur am PAR-Eintritt.....	243
Abb. 6.7	Zeitlicher Verlauf der Rekombinationsrate des PARs.....	244
Abb. 6.8	Rekombinationsrate aufgetragen über den H ₂ -Molenbruch am PAR- Eintritt	244
Abb. 6.9	PAR-Effizienz aufgetragen über den H ₂ -Molenbruch am PAR-Eintritt	245
Abb. 6.10	Temperatur am PAR-Auslass	245
Abb. 6.11	Simulationsergebnisse der Simulation xstart0,1 nach 2000 s. Links: Temperatur, rechts H ₂ -Molenbruch (Maximum auf 0,06 begrenzt)	248
Abb. 6.12	H ₂ -Molenbruch in 8,4 m Höhe in der Behältermitte	248
Abb. 6.13	H ₂ -Molenbruch in 6,3 m Höhe in der Behältermitte	249
Abb. 6.14	H ₂ -Molenbruch in 5,3 m Höhe bei einem Radius von 1,2 m auf E-Line (oberhalb des PARs)	249

Abb. 6.15	H ₂ -Molenbruch in 5,3 m Höhe bei einem Radius von 1,2 m auf H-Line (gegenüber vom PAR)	250
Abb. 6.16	H ₂ -Molenbruch in 3,1 m Höhe in der Behältermitte	250
Abb. 6.17	H ₂ -Molenbruch in 1,7 m Höhe in der Behältermitte	251
Abb. 6.18	H ₂ -Molenbruch in 0,7 m Höhe in der Behältermitte	251
Abb. 6.19	Temperatur in 8,4 m Höhe in der Behältermitte	252
Abb. 6.20	Temperatur in 6,3 m Höhe in der Behältermitte	252
Abb. 6.21	Temperatur in 4,2 m Höhe bei einem Radius von 1,2 m auf der E-Line (oberhalb des PARs).....	253
Abb. 6.22	Temperatur in 4,2 m Höhe bei einem Radius von 1,2 m auf der H-Line (gegenüber vom PAR)	253
Abb. 6.23	Temperatur in 3,1 m Höhe in der Behältermitte	254
Abb. 6.24	Temperatur in 1,7 m Höhe in der Behältermitte	254
Abb. 6.25	Simulation von H2P6-1 mit containmentFOAM-9 und containmentFOAM-11.....	256
Abb. 6.26	P1A2-4: Temperatur am Messpunkt B20 (mittig, 7,48 m Höhe) bei Simulation mit containmentFOAM-9 und containmentFOAM-11	258
Abb. 6.27	P1A2-4: Temperatur am Messpunkt D20 (mittig, 6,28 m Höhe) bei Simulation mit containmentFOAM-9 und containmentFOAM-11	258
Abb. 6.28	P1A2-4: Temperatur am Messpunkt K20 (mittig, 4,0 m Höhe) bei Simulation mit containmentFOAM-9 und containmentFOAM-11	259

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Lufteinspeisung in TH35	11
Tab. 2.2	CFD-Gitter für Simulation (Sim. detailliert) des Versuchs H2H6_2.....	55
Tab. 2.3	CFD-Gitter für Simulation (Sim. skaliert) des Versuchs H2H6_2.....	56
Tab. 2.4	Vergleich der CFD-Gitter mit vereinfachter Gebäudekondensatorgeometrie.....	71
Tab. 2.5	CFD-Gitter H2P6_1	81
Tab. 2.6	Verwendete Start- und Randbedingungen	112
Tab. 2.7	Berechnungsparameter für Versuch SETH-2 ST2_1	113
Tab. 2.8	Randbedingungen bei den nachgerechneten CONAN-Versuchen.....	121
Tab. 2.9	In den Simulationen verwendete CFD-Gitter.....	124
Tab. 2.10	Wassertemperatur am Auslass ($T_{\text{Wasser,Auslass}}$) und Erwärmung des Wassers (dT_{Wasser}) im Experiment P20T30V25	134
Tab. 2.11	Wassertemperatur am Auslass ($T_{\text{Wasser,Auslass}}$) und Erwärmung des Wassers (dT_{Wasser}) im Experiment P30T30V25	134
Tab. 2.12	Infobox THAI-Experiment TH-24.....	154
Tab. 3.1	Infobox zum THAI-Experiment HD-7.....	167
Tab. 3.2	Gitterstudie THAI-Experiment HD-7.....	171
Tab. 3.3	Infobox zum THAI-Experiment HD-8.....	176
Tab. 3.4	Infobox zum THAI-Experiment HD-10.....	178
Tab. 3.5	Infobox zum THAI-Experiment HD-12.....	180
Tab. 3.6	Infobox zum ENACCEF-2-Experiment.....	183
Tab. 3.7	Infobox zum GraVent-Experiment.....	189
Tab. 3.8	Parameter für das HySEA-Experiment TP37	194
Tab. 3.9	Infobox zum HySEA-Experiment zur Fluid-Struktur-Wechselwirkung (OpenFOAM).....	197
Tab. 3.10	Infobox zum HySEA-Experiment zur Fluid-Struktur-Wechselwirkung (LS-DYNA).....	199
Tab. 3.11	Durchführung einer Gitterstudie	200

Tab. 3.12	Parameterstudie „Dämpfung“	201
Tab. 3.13	Parameterstudie „Einspannung“	201
Tab. 3.14	Infobox zum Offermanns-Experiment zur Fluid-Struktur- Wechselwirkung (OpenFOAM)	208
Tab. 3.15	Infobox zum Offermanns-Experiment zur Fluid-Struktur- Wechselwirkung (LS-DYNA).....	214
Tab. 4.1	Infobox zur DWR-Unfall-Rechnung	222
Tab. 4.2	Überblick über die Problemstellungen und Ableitung von Weiterentwicklungsbedarf.....	234
Tab. 5.1	Startbedingungen im ETSON-AMHYCO Verbrennungsbenchmark	236
Tab. 6.1	Versuche, die mit unterschiedlichen containmentFOAM-Simulationen nachgerechnet wurden	257

**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

ISBN 978-3-911727-25-9