

**Qualifizierung von CFX  
für die Simulation der  
Thermohydraulik im  
Sicherheitseinschluss**

Vorhaben RS1181

## **Abschlussbericht/ Final Report**

Reaktorsicherheitsforschung-  
Vorhabens Nr.:/  
Reactor Safety Research-Project No.:  
RS1181

Vorhabensitel / Project Title:  
Qualifizierung von CFX für die  
Simulation der Thermohydrau-  
lik im Sicherheitseinschluss

Qualification of CFX for con-  
tainment applications

Autor / Author:  
Dr. B. Schramm  
Dr. J. Stewering  
Dr. M. Sonnenkalb

Berichtszeitraum / Publication Date:  
Juli 2010

### Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde lie-  
gende F&E-Vorhaben wurde im  
Auftrag des Bundesministeriums  
für Wirtschaft und Technologie  
(BMWi) unter dem Kennzeichen  
RS1181 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt  
dieser Veröffentlichung liegt beim  
Auftragnehmer.



## Abstrakt

Im Rahmen der Fachgruppe „Sicherheitseinschluss“ des CFD-Verbundes erbringt die GRS einen wichtigen Beitrag zur Qualifizierung und Anwendung von CFX für die Simulation der Gasverteilung im Sicherheitseinschluss eines KKW und zur Validierung anhand repräsentativer Experimente. Der vorliegende Abschlussbericht beschreibt den erreichten Stand der Arbeiten der GRS im Vorhaben RS1181.

Anhand der Versuche THAI TH-2, VANAM M3 und PANDA-4bis wurden CFX-11 Modelle zur Simulation von Wand- und Volumenkondensationsvorgängen validiert. Die Versuchsnachrechnungen haben gezeigt, dass diese Modelle in der Lage sind, die Kondensationsrate und die dabei freiwerdende Kondensationswärme hinreichend genau zu simulieren. Für eine hinreichend genaue Modellierung der Wandkondensation ist eine sehr feine Diskretisierung an der Grenzschicht Gas/Wand notwendig. Zudem wird bei der gegenwärtigen Modellierung das Kondensat vernachlässigt, wodurch z. B. Verdampfungsvorgänge nicht modelliert werden können.

Ein Modell zur Simulation von autokatalytischen Rekombinatoren zum Abbau von Wasserstoff aus der Containmentatmosphäre wurde basierend auf Abbaugleichungen von AREVA in CFX-11 implementiert und an den THAI-Versuchen HR-2, HR-5, und HR-12 validiert. Es zeigt sich, dass das Modell in der Lage ist, die H<sub>2</sub>-Abbauraten und die durch den Rekombinator bei den Versuchen induzierte H<sub>2</sub>-Schichtung zu simulieren.

Die Simulation des Wärmetransports aus der Atmosphäre in Wände ist für viele physikalische Vorgänge mitbestimmend. Untersuchungen zeigen den Einfluss der Feinheit des Berechnungsgitters sowie des Gittertyps (strukturiert oder unstrukturiert) auf diesen Vorgang. Insbesondere in Betonwänden ist eine feine Diskretisierung in der Nähe der Oberfläche notwendig. Die Nachrechnung des Versuchs TH-21 hat gezeigt, dass CFX bei geeigneter Diskretisierung in der Lage ist, den Wärmetransport in Wände und Strukturen richtig zu simulieren.

Die Untersuchung zu einer adäquaten Turbulenzmodellierung in CFX ist ein weiterer Schwerpunkt des Vorhabens. Dazu wurden verschiedene Versuche (PANDA-4, TH-18, TH-20, HM-2) mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen (SST, k- $\epsilon$ , RNG-k- $\epsilon$ , SSG-Reynolds-Stress) nachgerechnet. Teilweise konnte dabei eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment erreicht werden (z. B. PANDA-4/PANDA-4). Insbesondere bei der Auflösung von

stabilen Leichtgasschichtungen (TH-20) haben sich aber noch Defizite bei der Modellierung gezeigt. Für den Versuch HM-2 wurde ein Vergleich von CFX-Simulationsergebnissen mit Ergebnissen des vom Forschungszentrum Karlsruhe entwickelten Programms GASFLOW durchgeführt.

Im Vorhaben wurde die Validierung von H<sub>2</sub>-Verbrennungsprozessen fortgesetzt. Dazu wurden verschiedene Versuche (HYCOM-13, HYCOM-14, IX-2 und mehrere ENACCEF-Experimente) mit dem Eddy-Dissipation-Modell und dem Burning-Velocity-Modell nachgerechnet. Die Versuche unterscheiden sich hinsichtlich der Geometrie, der Größenskala der Versuchsanlage und der Wasserstoffkonzentration. In diesem Vorhaben wurden ausschließlich Verbrennungen in trockener Luft simuliert. Die Versuchsnachrechnungen haben gezeigt, dass das Burning-Velocity-Modell bessere Simulationsergebnisse für die Simulation von turbulent beschleunigten Verbrennungsprozessen liefert als das Eddy-Dissipation-Modell. Neben der Validierung der Modellierung von turbulent beschleunigten H<sub>2</sub>-Verbrennungen mit CFX wurden auch erste Tests des vom Forschungszentrum Karlsruhe entwickelten Verbrennungscodes COM3D durchgeführt und mit Ergebnissen aus CFX-Simulationen verglichen. Bei Wahl ähnlicher Randbedingungen kamen dabei die beiden Programme zu ähnlichen Ergebnissen bei der Simulation des HYCOM-13 Experiments.

Für einen DWR vom Typ KONVOI wurde ein CFD-Gitter mit 3,8 Mio. Gitterzellen erstellt, das neben allen Raumbereichen auch die Wände und Hauptkomponenten enthält. Mit diesem Gitter wurde die lokale Luft/Dampf/H<sub>2</sub>-Verteilung im KONVOI-Containment für einen exemplarischen Störfall durchgeführt und die Simulationsergebnisse mit einer COCOSYS-Rechnung verglichen. Der Vergleich der beiden Berechnungen zeigt eine gute qualitative Übereinstimmung der Simulationsergebnisse für weite Zeitbereiche. Speziell in der Anfangsphase der Einspeisung zeigen sich teilweise deutliche quantitative Unterschiede bzgl. Druck, Dampfkonzentrationen und Temperaturen. Im weiteren zeitlichen Verlauf findet eine stärkere Annäherung der Kurvenverläufe statt.

## Abstract

Within the framework of the subsection „Containment System“ of the CFD-network, GRS makes an important contribution towards the qualification and application of CFX for the simulation of gas distribution in the containment system of a nuclear power plant and to the validation based on representative experiments. The report describes the work status achieved by GRS in the project RS1181.

CFX-11 models for the simulation of wall- and volume condensation processes were validated on the basis of the experiments TH-2, VANAM M3 and PANDA-4bis. The results show, that these models have the ability to model the condensation rate with sufficient accuracy, but a very fine mesh is needed at the interface gas/wall. Currently the condensate is neglected, therefore no evaporation processes can be simulated.

A model for the simulation of autocatalytic recombiners for the hydrogen reduction in the containment atmosphere - based on the reduction equations of AREVA - was implemented in CFX-11 and validated on several THAI experiments (HR-2, HR-5, HR-12). The validations show that the model is able to simulate the H<sub>2</sub> recombination rate and the H<sub>2</sub> stratification induced by the recombiner correctly.

The simulation of the heat transfer from the atmosphere into walls is decisive for many physical processes. Studies show the influence of the fineness of the calculation-grid as well as the grid type (structured or unstructured) on this process. The simulation of the TH-21 experiment proves that CFX has the ability to simulate the heat transfer into walls correctly, if an adequate fine mesh is used.

The study of turbulence modelling in CFX is a further focal point of the project. For this purpose various tests (PANDA-4, TH-18, TH-20, HM-2) were post-calculated with differing success. Different turbulence models (SST, k-ε, RNG-k-ε, SSG-Reynolds-Stress) were used for these simulations. In some experiments good agreement with experimental results was achieved (e. g. PANDA-4), but especially the erosion of stable light gas stratification could not be modelled sufficiently accurate.

The validation of H<sub>2</sub>-deflagration processes was continued within the project. Several experiments (HYCOM-13 HYCOM-14, IX-2 and several ENACCEF experiments) were calculated using the Eddy-Dissipation-Model and the Burning-Velocity-Model. The validation shows that the Burning-Velocity-Model has a greater ability to model turbulent accelerated

combustion processes. In this project only H<sub>2</sub>-combustion processes were investigated. Besides the validation of the modelling of turbulent accelerated H<sub>2</sub>-deflagration with CFX the deflagration code COM3D developed by the research centre Karlsruhe was also tested. These results were compared with the results of the CFX-simulations. Using the same boundary condition both codes deliver similar results for the HYCOM-13 experiment.

A CFD-grid with 3,8 mio. grid cells was prepared for a KONVOI-type PWR which includes besides the flow volume of the containment also the walls and main components. Using this mesh the H<sub>2</sub> and steam distribution was calculated for an exemplary severe accident with hydrogen release. The results were compared with a corresponding COCOSYS simulation. Both calculations show a good qualitative agreement for long time periods, but especially at the beginning larger quantitative deviations occur in regards to pressure, steam concentration and temperatures. Later on the differences between the two simulations decrease.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b> .....	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Wand- und Volumen Kondensation</b> .....	<b>3</b>
2.1	Nachrechnung des Versuchs TH2.....	3
2.1.1	Zielsetzung.....	3
2.1.2	Geometrie und Randbedingungen.....	4
2.1.3	Durchführung einer Gitterstudie.....	11
2.1.4	Analyse des Einflusses von Berechnungsparametern.....	15
2.1.5	Bestimmung von Modellfehlern.....	29
2.1.6	Zusammenfassung und Fazit.....	33
2.2	Nachrechnung des Versuches VANAM M3.....	35
2.2.1	Zielsetzung.....	35
2.2.2	Geometrie und Randbedingungen.....	35
2.2.3	Vergleich von Spezifikation und Messung.....	39
2.2.4	Berechnung des Druckverlaufs.....	40
2.2.5	Analyse des Temperaturverlaufs.....	43
2.2.6	Vergleich der Geschwindigkeiten in den Überströmöffnungen.....	50
2.2.7	Analyse der Abweichungen zwischen Simulation und Experiment.....	53
2.2.8	Zusammenfassung und Fazit.....	55
2.3	Simulation des PANDA-4bis-Versuches.....	57
2.3.1	Zielsetzung.....	57
2.3.2	Geometrie und Randbedingungen.....	57
2.3.3	Modelle in den CFX-Simulationen.....	60
2.3.4	Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten.....	60
2.3.5	Untersuchung zur Gitterabhängigkeit der Simulationen.....	68
2.3.6	Simulation des Dampfes als reales Gas.....	73
2.3.7	Zusammenfassung.....	77
2.4	Fazit aus den Validierungsrechnungen für Wand- und Volumenkondensationsmodell.....	78

<b>3</b>	<b>Modellierung von autokatalytischen Wasserstoffrekombinatoren .....</b>	<b>79</b>
3.1	Zielsetzung.....	79
3.2	Beschreibung des Rekombinatormodells .....	80
3.2.1	Abbildung eines Rekombinators im CFD-Gitter .....	80
3.2.2	Korrelationen zur Beschreibung der Rekombinationsrate .....	81
3.2.3	Implementation des Rekombinatormodells in CFX-11.....	85
3.3	Simulation des HR-2 Experiments .....	86
3.3.1	Kurze Beschreibung des HR-2-Experiments .....	86
3.3.2	Modellierung des HR-2-Experiments mit CFX.....	87
3.3.3	Diskussion der Simulationsergebnisse .....	88
3.3.4	Sensitivitätsstudien für Modellparameter .....	98
3.3.5	Zusammenfassung der Simulationsergebnisse für den HR-2 Versuch ...	108
3.4	Nachrechnung des Versuchs HR-5 .....	109
3.4.1	Das HR-5 Experiment.....	109
3.4.2	Modellierung mit CFX .....	109
3.4.3	Simulationsergebnisse.....	110
3.4.4	Einfluss des Beginns der Reaktion bei kaltem Rekombinator .....	116
3.5	Nachrechnung des Versuches HR-12 .....	121
3.5.1	Zielsetzung.....	121
3.5.2	Geometrie und Randbedingungen.....	121
3.5.3	Vergleich mit experimentellen Ergebnissen.....	123
3.5.4	Analyse der Rekombinationsrate .....	126
3.5.5	Zusammenfassung .....	131
3.6	Fazit aus den Validierungsrechnungen für das Rekombinatormodell.....	132
<b>4</b>	<b>Wärmetransport in Wände und andere Strukturen.....</b>	<b>133</b>
4.1	Untersuchung des Gittereinflusses auf die Simulation des Wärmetransports in die Wände anhand eines einfachen Testbeispiels ..	133
4.1.1	Zielsetzung.....	133
4.1.2	Geometrie und Randbedingungen.....	134
4.1.3	Simulationen .....	136
4.1.4	Diskussion der Ergebnisse .....	138

4.1.5	Fazit .....	145
4.2	Simulation von TH-21 .....	146
4.2.1	Zielsetzung.....	146
4.2.2	Geometrie und Randbedingungen.....	146
4.2.3	Auswertung der Simulationsergebnisse.....	148
4.2.4	Einfluss der Gitterfeinheit auf die Berechnungsgrößen .....	150
4.2.5	Einfluss der Randbedingungen auf die Ergebnisse .....	152
4.2.6	Vergleich der Simulationsergebnisse mit den experimentellen Daten Druckverlauf.....	154
4.2.7	Fazit und offene Fragen.....	159
4.3	TH-22 .....	161
4.3.1	Zielsetzung.....	161
4.3.2	Geometrie und Randbedingungen.....	161
4.3.3	Stationäre Berechnung (Aufwärmphase).....	165
4.3.4	Analyse von Diskretisierungsfehlern.....	167
4.3.5	Transiente Berechnung (Ende der 1. Phase, Heliumeinspeisung und Schichtauflösung) .....	169
4.3.6	Zusammenfassung TH-22 .....	174
4.4	Fazit zur Validierung des Wärmetransports in Wände und andere Strukturen .....	174
<b>5</b>	<b>Vergleichende Tests unterschiedlicher Modellansätze für die Turbulenz.....</b>	<b>175</b>
5.1	Simulation des Versuchs TH-18 .....	175
5.1.1	Zielsetzung.....	175
5.1.2	Geometrie und Randbedingungen.....	177
5.1.3	Auswertung der Simulationen .....	182
5.1.4	Analyse des Diskretisierungsfehlers .....	184
5.1.5	Vergleich der CFD-Simulationen mit experimentellen Daten.....	189
5.1.6	Einfluss der Turbulenzintensität am Gebläseaustritt.....	193
5.1.7	Einfluss des Turbulenzmodells .....	198
5.1.8	Druckdifferenz über die Kondensatwanne .....	204
5.1.9	Untersuchung der Rechenzeiten .....	204

5.1.10	Zusammenfassung .....	206
5.2	Simulation des Experiments TH-20-2 .....	208
5.2.1	Kurze Beschreibung des Experiments TH-20-2.....	208
5.2.2	CFD-Gitter und Randbedingungen .....	209
5.2.3	Blinde Vorausrechnung der Experimente TH-20 .....	210
5.2.4	Untersuchung des Einflusses der Turbulenzmodellierung.....	211
5.2.5	Untersuchung der Gitterabhängigkeit .....	212
5.2.6	Modellierung des Jets am Gebläseaustritt.....	213
5.2.7	Zusammenfassung und Ausblick.....	215
5.3	Nachrechnung PANDA-4-Experiment.....	217
5.3.1	Randbedingungen des Versuchs.....	217
5.3.2	Verwendetes Gitter .....	218
5.3.3	Verwendete Modelle .....	219
5.3.4	Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten.....	220
5.3.5	Benötigte Rechenzeit und Untersuchung der Gitterabhängigkeit der Simulationen .....	222
5.3.6	Einfluss des Turbulenzmodells .....	224
5.3.7	Modifikation der turbulenten Schmidt-Zahl .....	228
5.3.8	Einfluss der Turbulenzintensität am Einlass auf die Dampfkonzentration	229
5.3.9	Modellierung der Wärmeverluste an den Wänden.....	230
5.3.10	Zusammenfassung .....	231
5.4	Simulation des Experiments HM-2.....	233
5.4.1	Kurze Beschreibung des Experiments HM-2 .....	233
5.4.2	CFD-Gitter und verwendete Modelle .....	233
5.4.3	Rechenzeit und Konvergenz.....	234
5.4.4	Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten.....	238
5.4.5	Einfluss des Turbulenzmodells .....	250
5.4.6	Untersuchung zur Gitterabhängigkeit .....	253
5.4.7	Zusammenfassung .....	255
5.5	Fazit zur Untersuchung der Turbulenzmodellierung .....	256
<b>6</b>	<b>Vergleich von GASFLOW und CFX .....</b>	<b>258</b>

6.1	Vergleich anhand von Simulationen des Versuchs HM-2 .....	258
6.1.1	Einleitung .....	258
6.1.2	Vergleich der CFD-Codes anhand verschiedener Parameter .....	259
6.1.3	Zusammenfassung .....	265
<b>7</b>	<b>Nachrechnung von H<sub>2</sub>-Verbrennungsversuchen mit CFX .....</b>	<b>266</b>
7.1	Einleitung .....	266
7.2	Beschreibung der verwendeten Verbrennungsmodelle .....	266
7.2.1	Eddy-Dissipation-Verbrennungsmodell mit Erweiterung um den Said-Borghi-Faktor .....	266
7.2.2	Modellierung der Zündung .....	268
7.2.3	Burning-Velocity-Modell .....	269
7.3	Nachrechnung des Experiments HYCOM13 .....	271
7.3.1	Kurze Beschreibung des Experiments .....	271
7.3.2	Ergebnisse der Simulation mit dem Eddy-Dissipation-Modell .....	273
7.3.3	Ergebnisse der Simulation mit dem Burning-Velocity-Modell .....	276
7.4	Nachrechnung des Experiments HYCOM14 .....	282
7.4.1	Kurze Beschreibung des Experiments .....	282
7.4.2	Ergebnisse der Simulation mit dem Eddy-Dissipation-Modell .....	282
7.4.3	Ergebnisse der Simulation mit dem Burning-Velocity-Modell .....	283
7.5	Zusammenfassung der Ergebnisse der Nachrechnungen der Experimente HYCOM13 und HYCOM14 .....	285
7.6	Simulation des Experiments Ix2 am Battelle-Modell-Containment .....	286
7.6.1	Kurze Beschreibung des Experiments .....	286
7.6.2	Diskretisierung und Modellierung des Versuchs Ix2 .....	288
7.6.3	Simulationsergebnisse der Rechnungen mit dem Eddy-Dissipation-Modell .....	289
7.6.4	Simulationsergebnisse mit dem Burning-Velocity-Modell .....	292
7.6.5	Zusammenfassung der Ix2- Versuchsnachrechnungen .....	300
7.7	Beteiligung an der 2. Phase des ISP-49 (ENACCEF-Versuche) .....	301
7.7.1	Versuchsanordnung beim ENACCEF-Versuch mit H <sub>2</sub> -Gradienten (RUN 736 und RUN 733) .....	301
7.7.2	Anfangskonzentration bei RUN736 .....	302

7.7.3	Modellierung mit CFX .....	303
7.7.4	Gitterstudie für RUN736.....	303
7.7.5	Vergleich mit experimentellen Daten RUN736 .....	305
7.7.6	Vergleich mit experimentellen Daten RUN733 .....	309
7.7.7	Zusammenfassung .....	311
7.8	Beteiligung an einem Verbrennungsbenchmark im Rahmen von SARNET-2 .....	312
7.8.1	Zielsetzung.....	312
7.8.2	Simulation der Versuche mit BR = 0,63.....	313
7.8.3	Simulation der Versuche mit BR = 0,33.....	316
7.8.4	Simulation der Versuche mit BR = 0.....	318
7.9	Zusammenfassung .....	321
<b>8</b>	<b>Vergleich der Verbrennungsrechnungen von COM3D und CFX .....</b>	<b>322</b>
8.1	Zielsetzung.....	322
8.2	Geometrie und Randbedingungen.....	322
8.3	Auswertung der Simulationsergebnisse.....	324
8.4	Einfluss der initialen Turbulenz auf die Flammenausbreitung .....	325
8.5	Vergleich der COM3D Ergebnisse mit einer CFX Rechnung .....	329
8.6	Zusammenfassung und offene Fragen .....	331
<b>9</b>	<b>Erstellung eines Datensatzes für den Sicherheitsbehälter einer KONVOI-Anlage.....</b>	<b>332</b>
9.1	Netzherstellung .....	332
9.2	CFD-Gitter für ein generisches KONVOI Containment.....	334
9.3	Simulation eines Störfalls und Vergleich mit COCOSYS.....	337
9.3.1	Start- und Randbedingungen.....	338
9.3.2	Benötigte Rechenzeiten und Rechnerkapazitäten.....	343
9.3.3	Vergleich der CFX-Berechnung mit einer COCOSYS-Berechnung.....	343
9.3.4	Parameterstudie bzgl. des Kondensationsprozesses .....	357
9.3.5	Parameterstudie - Vergleich mit COCOSYS.....	364
9.3.6	Verfeinerung des CFX-Wandgitters im KONVOI-Containment.....	366
9.3.7	Analyse von lokalen Schichtungsphänomenen mit CFX .....	371

9.4	Fazit und Ausblick.....	376
<b>10</b>	<b>Zusammenfassung .....</b>	<b>379</b>
<b>11</b>	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>384</b>
<b>12</b>	<b>Verteiler .....</b>	<b>389</b>

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1-1	Das Geometriemodell des THAI-Behälters mit unterschiedlicher Gitterfeinheit (von links: 309.452, 76.512 und 32.538 Elemente) .....5
Abb. 2.1-2	Das Geometriemodell mit 130.107 Elementen im Querschnitt (links) und eine Vergrößerung (rechts) .....5
Abb. 2.1-3	Dampfeinspeisung beim TH-2 Experiment (links: Einspeiserohr /KAN 03/, rechts: Schnitt durch den THAI-Behälter) .....6
Abb. 2.1-4	Eingespeister Dampfmengestrom in Experiment und Simulation .....7
Abb. 2.1-5	Temperatur des eingespeisten Dampfes in Experiment und Simulation .....7
Abb. 2.1-6	Ergebnis einer CFX-Simulation und Darstellung Messstellen im THAI-Behälter .....10
Abb. 2.1-7	Einfluss der Elementzahl auf den berechneten Druckverlauf .....11
Abb. 2.1-8	Einfluss der Elementzahl auf den berechneten Temperaturverlauf in 8,4 m Höhe .....13
Abb. 2.1-9	Einfluss der Elementzahl auf die Berechnungsdauer der ersten 400 s des Experiments .....14
Abb. 2.1-10	Vergleich der Berechnungsdauer mit dem relativen Diskretisierungsfehler für die Zielgröße Druck .....15
Abb. 2.1-11	Zeitlicher Verlauf des Drucks im THAI-Behälter .....16
Abb. 2.1-12	Einfluss des Gasmodells auf den berechneten Druck .....17
Abb. 2.1-13	Einfluss des Gasmodells auf das berechnete Temperaturprofil zum Zeitpunkte $t = 3000$ s .....18
Abb. 2.1-14	Einfluss der Modellierung der Wärmeabgabe auf den berechneten Druckverlauf .....19
Abb. 2.1-15	Einfluss der Modellierung der Wärmeabgabe auf das berechnete Temperaturprofil .....20
Abb. 2.1-16	Einfluss der Diffusion auf den berechneten Druckverlauf .....21
Abb. 2.1-17	Einfluss der Diffusion auf das berechnete Temperaturprofil ( $t = 3000$ s) .....21
Abb. 2.1-18	Einfluss der Referenzdichte auf das berechnete Temperaturprofil .....23

Abb. 2.1-19	Vergleich des von CFX und von COCOSYS berechneten Druckverlaufes .....	24
Abb. 2.1-20	Temperaturverlauf in 8,4 m Höhe (Messstelle DTF84H07) .....	25
Abb. 2.1-21	Temperaturverlauf in 7,0 m Höhe (Messstelle DTF70H07) .....	25
Abb. 2.1-22	Temperaturverlauf in 6,3 m Höhe (Messstelle CTF63H07) .....	26
Abb. 2.1-23	Temperaturverlauf in 5,6 m Höhe (Messstelle CTF56H03) .....	27
Abb. 2.1-24	Temperaturverlauf in 4,9 m Höhe (Messstelle CTF49H03) .....	28
Abb. 2.1-25	Vergleich der von CFX und von COCOSYS berechneten Temperaturprofile zum Zeitpunkte $t = 3000$ s .....	28
Abb. 2.1-26	Vergleich der Modellfehler bei der Berechnung des Druckes .....	30
Abb. 2.1-27	Vergleich der Modellfehler bei der Berechnung der Temperaturen .....	32
Abb. 2.2-1	Geometrie und Raumaufteilung im Battelle Modellcontainment .....	36
Abb. 2.2-2	Gitter des Battelle-Modell-Containments .....	37
Abb. 2.2-3	Vergleich des spezifizierten und gemessenen Massenstroms in Raum R5 .....	40
Abb. 2.2-4	Dampfkonzentration zum Zeitpunkt $t = 2,27$ h .....	41
Abb. 2.2-5	Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Druckverlauf .....	42
Abb. 2.2-6	Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R9 (Dom).....	44
Abb. 2.2-7	Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R2.....	44
Abb. 2.2-8	Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R9 (Ringraum).....	45
Abb. 2.2-9	Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R6.....	46
Abb. 2.2-10	Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R8.....	46
Abb. 2.2-11	Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R5 (Einspeiseort für den Dampf).....	47
Abb. 2.2-12	Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R7 .....	48

Abb. 2.2-13	Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R1 .....	49
Abb. 2.2-14	Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R3 .....	49
Abb. 2.2-15	Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R4 .....	50
Abb. 2.2-16	Vergleich der Geschwindigkeiten in Überströmöffnung U59B .....	51
Abb. 2.2-17	Vergleich der Geschwindigkeiten in Überströmöffnung U79B .....	52
Abb. 2.2-18	Vergleich der Geschwindigkeiten in Überströmöffnung U78A und U78B .....	53
Abb. 2.2-19	Abweichung der berechneten von den gemessenen Temperaturen .....	54
Abb. 2.2-20	Mittlere Abweichungen zwischen Simulation und Experiment bei den berechneten Geschwindigkeiten in den Überströmöffnungen .....	55
Abb. 2.3-1	Geometrie beim PANDA-4-Versuch.....	59
Abb. 2.3-2	Messstellen im Behälter D1 .....	59
Abb. 2.3-3	Wasserdampfkonzentration in Experiment und Simulation.....	63
Abb. 2.3-4	Temperaturverteilung in Experiment und Simulation .....	64
Abb. 2.3-5	Massenstrom aus 2. PANDAbehälter (links) und Dampfkonzentration im Verbindungsrohr (rechts) .....	64
Abb. 2.3-6	Vergleich der Dampfkonzentration an verschiedenen Messstellen .....	65
Abb. 2.3-7	Vergleich der Temperatur an verschiedenen Messstellen .....	66
Abb. 2.3-8	Wasserdampfverteilung nach 100 s, 500 s, 1000 s und 3000 s .....	67
Abb. 2.3-9	Oberflächentemperatur der Behälterwände nach 3000 s & 6000 s .....	67
Abb. 2.3-10	Oben: Räumliche Diskretisierung beim Standardgitter ( $\Delta x_{\text{wand}} \sim 5$ cm) rechts: horizontaler Schnitt durch einen der PANDAbehälter. Unten horizontaler Schnitt durch einen Behälter bei Verfeinerung des Gitters in der Nähe der Behälterwand (links: $\Delta x_{\text{wand}} \sim 2$ cm , rechts: $\Delta x_{\text{wand}} \sim 1$ mm) .....	70
Abb. 2.3-11	Dampfkonzentration an verschiedenen Messstellen bei unterschiedlicher Diskretisierung in Wandnähe .....	71
Abb. 2.3-12	Temperatur an verschiedenen Messstellen bei unterschiedlicher Diskretisierung in Wandnähe .....	72
Abb. 2.3-13	Massenstrom aus 2. PANDAbehälter .....	73

Abb. 2.3-14	Y <sup>+</sup> -Werte an der Behälterwand nach 1000 s. Links: Standard-Gitter( $\Delta x_{\text{wand}} \sim 5 \text{ cm}$ ) ; rechts Gitter mit $\Delta x_{\text{wand}} \sim 1 \text{ mm}$ .....	73
Abb. 2.3-15	Dampfkonzentration an verschiedenen Messstellen.....	75
Abb. 2.3-16	Temperatur an verschiedenen Messstellen .....	76
Abb. 2.3-17	Massenstrom aus 2. PANDAbehälter .....	77
Abb. 3.2-1	Rekombinatoremodell für CFX; rot: Rekombinatoreintritt, grün: Rekombinatoreintritt, blau: Rekombinatorwand .....	81
Abb. 3.3-1	Aufbau des HR-2 Experiments und der Rekombinatoren FR-380 ½ /HIL 03/.....	86
Abb. 3.3-2	Verwendete Diskretisierung in CFX; grün: Rekombinatorwände, rot: obere Rekombinatoröffnungen, blau: Ring mit H <sub>2</sub> -Einspeisung .....	88
Abb. 3.3-3	Vergleich der experimentellen Daten mit der AREVA-Korrelation /KAN 09/ (oben) und gemessene Rekombinatoreffizienz (unten).....	89
Abb. 3.3-4	Oben: H <sub>2</sub> -Konzentration und Temperatur am Rekombinatoreintritt; Unten: Abbaurrate des Rekombinators (links) und Wasserstoffkonzentration am Rekombinatoreintritt (rechts) .....	92
Abb. 3.3-5	Links: Gemessene und berechnete Wasserstoffabbaurrate; Rechts: H <sub>2</sub> -Konzentration am Rekombinatoreintritt.....	95
Abb. 3.3-6	Wasserstoffkonzentrationen an verschiedenen Messstellen auf der Behälterachse im Experiment und in der Simulation .....	95
Abb. 3.3-7	H <sub>2</sub> -Konzentration und Temperatur an verschiedenen Zeitpunkten .....	96
Abb. 3.3-8	H <sub>2</sub> -Konzentrationen an verschiedenen Messstellen.....	97
Abb. 3.3-9	Temperatur an verschiedenen Messstellen .....	98
Abb. 3.3-10	H <sub>2</sub> -Konzentrationen an Messstellen auf der Behälterachse.....	100
Abb. 3.3-11	H <sub>2</sub> -Konzentration am Rekombinatoreintritt und H <sub>2</sub> -Abbaurrate .....	100
Abb. 3.3-12	Temperatur an zwei Messstellen .....	101
Abb. 3.3-13	H <sub>2</sub> -Konzentration am Rekombinatoreintritt über H <sub>2</sub> -Konzentration am Eintritt bei $f_{\text{eff}}=0,5$ (links) und $f_{\text{eff}}=0,75$ .....	101
Abb. 3.3-14	Wasserstoffkonzentrationen auf verschiedenen Höhen entlang der Behälterachse .....	103
Abb. 3.3-15	H <sub>2</sub> -Konzentration am Rekombinatoreintritt und H <sub>2</sub> -Abbaurrate .....	104
Abb. 3.3-16	Temperatur an zwei Messstellen .....	104

Abb. 3.3-17	Temperatur am Rekombinatoraustritt über H <sub>2</sub> - Eintrittskonzentration für $f_{\text{wand}}=0,15$ (links) und $f_{\text{wand}}=0,35$ (rechts).....	105
Abb. 3.3-18	Mittlere Temperatur der Rekombinatorwände und Wasserstoffkonzentration an verschiedenen Messstellen .....	107
Abb. 3.3-19	Wasserstoffkonzentration am Rekombinatoreintritt und Rekombinationsrate .....	107
Abb. 3.3-20	Temperatur an 2 Messstellen.....	108
Abb. 3.4-1	Wasserstoffkonzentration (links) und Temperatur (rechts) an der Rekombinatorausströmöffnung aufgetragen über der Wasserstoffkonzentration an der Rekombinatoreinströmöffnung .....	111
Abb. 3.4-2	Abbaurrate des Rekombinators (links) und Wasserstoffkonzentration am Rekombinatoreintritt (rechts) .....	111
Abb. 3.4-3	Gemessene und berechnete Wasserstoffabbaurrate; Rechts: H <sub>2</sub> - Konzentration am Rekombinatoreintritt.....	113
Abb. 3.4-4	Wasserstoffkonzentrationen auf verschiedenen Höhen entlang der Behälterachse .....	113
Abb. 3.4-5	H <sub>2</sub> -Konzentrationen an verschiedenen Messstellen.....	114
Abb. 3.4-6	Temperatur an verschiedenen Messstellen .....	115
Abb. 3.4-7	Temperatur an verschiedenen Messstellen .....	116
Abb. 3.4-8	Wasserstoffkonzentration am Rekombinatoreinlass und Auslass .....	118
Abb. 3.4-9	Wasserstoffabbaurrate in Abhängigkeit von der Wahl der Startbedingungen für die Rekombination.....	118
Abb. 3.4-10	Wasserstoffkonzentrationen an verschiedenen Messstellen in Abhängigkeit von der Wahl der Startbedingungen für die Rekombination .....	119
Abb. 3.4-11	Startkonzentration bei kalten Rekombinator bei verschiedenen Versuchen in Abhängigkeit vom Druck /KAN 09/.....	120
Abb. 3.4-12	Startkonzentration bei kalten Rekombinator bei verschiedenen Versuchen in Abhängigkeit von der zeitlichen Abfolge der Versuche /KAN 09/.....	120
Abb. 3.5-1	Temperaturprofil zum Beginn des Experiments HR-12.....	122
Abb. 3.5-2	Druckverlauf im THAI-Behälter .....	123
Abb. 3.5-3	Temperaturverlauf in 8,4 m Höhe .....	124
Abb. 3.5-4	H <sub>2</sub> -Konzentration in 8,4 m Höhe.....	125

Abb. 3.5-5	H <sub>2</sub> -Konzentration in 3,15 m Höhe.....	125
Abb. 3.5-6	Höhenprofil der H <sub>2</sub> -Konzentration bei t = 30 min.....	126
Abb. 3.5-7	Rekombinationsrate im Vergleich zur H <sub>2</sub> -Konzentration am Reko- Einlass.....	127
Abb. 3.5-8	H <sub>2</sub> -Konzentration am Reko-Einlass.....	128
Abb. 3.5-9	Zeitlicher Verlauf der Rekombinationsrate .....	129
Abb. 3.5-10	Temperatur am Reko-Auslass im Vergleich zur H <sub>2</sub> -Konzentration am Reko-Einlass.....	130
Abb. 3.5-11	Vergleich der H <sub>2</sub> -Konzentration von Ein- und Auslass .....	131
Abb. 4.1-1	Perspektivische Darstellung der Versuchsgeometrie.....	134
Abb. 4.1-2	Verfeinerung des Gitters in der Nähe der Trennebene .....	135
Abb. 4.1-3	Unstrukturiertes Gitter in der Wand.....	135
Abb. 4.1-4	Hybrides Gitter in der Wand.....	136
Abb. 4.1-5	Abhängigkeit des berechneten integralen Wärmestroms in die Betonwand vom Knotenabstand in der Luft .....	141
Abb. 4.1-6	Abhängigkeit des berechneten integralen Wärmestroms in die Betonwand vom Knotenabstand im Beton.....	141
Abb. 4.1-7	Abhängigkeit des berechneten Temperaturanstiegs in der Betonwand vom Knotenabstand in der Luft .....	142
Abb. 4.1-8	Abhängigkeit des Temperaturanstiegs im Beton vom Knotenabstand im Beton.....	142
Abb. 4.1-9	Abhängigkeit des berechneten Temperaturabfalls in der Luft vom Knotenabstand in der Luft.....	143
Abb. 4.1-10	Abhängigkeit des berechneten Temperaturabfalls in der Luft vom Knotenabstand im Beton.....	143
Abb. 4.1-11	Fehler durch unzureichende Diskretisierung des Luftraums: Prozentuale Abweichung vom Mittelwert der feinsten drei Gitter.....	144
Abb. 4.1-12	Fehler durch unzureichende Diskretisierung des Betons: Prozentuale Abweichung vom Mittelwert der feinsten drei Gitter.....	144
Abb. 4.1-13	Einfluss des Gittertyps auf die Berechnungsergebnisse .....	145
Abb. 4.2-1	Darstellung des offenen THAI-Versuchsbehälters mit Heizmantel (rot) und Kühlmantel (blau) .....	148

Abb. 4.2-2	Temperaturverteilung (links) und Geschwindigkeitsverteilung (rechts) zum Zeitpunkt $t = 11,3$ h .....	149
Abb. 4.2-3	Einfluss der Gitterfeinheit auf den berechneten Druck.....	151
Abb. 4.2-4	Einfluss der Gitterfeinheit auf die berechnete Temperatur.....	151
Abb. 4.2-5	Einfluss der Gitterfeinheit auf die berechnete Geschwindigkeit .....	152
Abb. 4.2-6	Einfluss der Randbedingungen auf den berechneten Druckverlauf (an Messstelle DPA77H16).....	153
Abb. 4.2-7	Einfluss der Randbedingung auf den Temperaturverlauf (an Messstelle DTF63H11) .....	153
Abb. 4.2-8	Zeitlicher Verlauf des Drucks im THAI-Behälter (DPA77H16) .....	154
Abb. 4.2-9	Zeitlicher Verlauf der Temperatur im THAI-Behälter (an Messstelle DTF84H11) .....	155
Abb. 4.2-10	Temperaturprofil über die Behälterhöhe beim Radius $r = 1,15$ m .....	156
Abb. 4.2-11	Vergleich von berechneten und gemessenen mittleren Temperaturen für $t > 10,2$ h .....	157
Abb. 4.2-12	Zeitlicher Verlauf der Vertikalgeschwindigkeit im THAI-Behälter (an Messstelle CVT58M00).....	158
Abb. 4.2-13	Vergleich von berechneten und gemessenen vertikalen Strömungs-geschwindigkeiten für Phase 2 ( $t > 7,5$ h / Absolutwert)....	159
Abb. 4.3-1	Konfiguration des TH-22 Experimentes ( $180^\circ$ Halbmodell) .....	162
Abb. 4.3-2	Massenstrom und Temperatur des eingespeisten Heliums .....	164
Abb. 4.3-3	Temperaturverteilung am Ende von Phase 1 ( $t = 24,1$ h) .....	166
Abb. 4.3-4	Abhängigkeit des berechneten Drucks von der Elementzahl.....	167
Abb. 4.3-5	Abhängigkeit des berechneten Temperaturverlaufs von der Elementzahl .....	168
Abb. 4.3-6	Abhängigkeit der berechneten Heliumkonzentration von der Elementzahl .....	168
Abb. 4.3-7	Abhängigkeit der berechneten Geschwindigkeiten von der Elementzahl .....	169
Abb. 4.3-8	Vertikales Temperaturprofil am Ende der Aufwärmphase (bei $t = 24,1$ h / Radius $r = 1,14$ m).....	170
Abb. 4.3-9	Horizontales Profil der Vertikalgeschwindigkeiten am Ende der Aufwärmphase (bei $t = 24,1$ h / in $6,4$ m Höhe).....	170

Abb. 4.3-10	Zeitlicher Verlauf des Drucks im THAI-Behälter.....	171
Abb. 4.3-11	Temperaturverläufe an den unterschiedlichen Messpositionen im Behälter.....	172
Abb. 4.3-12	Zeitlicher Verlauf der Vertikalgeschwindigkeiten.....	173
Abb. 4.3-13	Zeitlicher Verlauf der Heliumkonzentration an unterschiedlichen Messpositionen im THAI-Behälter.....	173
Abb. 5.1-1	THAI Versuchsbehälter (links schematische Zeichnung /FIS 07/, rechts CFD-Gitter).....	178
Abb. 5.1-2	Schematische Zeichnung der Kondensatwanne /FIS 07/ .....	179
Abb. 5.1-3	Geschwindigkeitsprofile am Gebläseaustritt .....	182
Abb. 5.1-4	Berechnete Vertikalgeschwindigkeitsverteilung im THAI-Behälter .....	183
Abb. 5.1-5	Schematische Darstellung der Berechnung von Mittelwerten und Standardabweichungen aus mehreren Zeitschritten.....	184
Abb. 5.1-6	Vertikalgeschwindigkeit bei 6,5 m (Rechnungen S7 und S8) .....	185
Abb. 5.1-7	Vertikalgeschwindigkeit bei 8,0 m (Rechnungen S7 und S8) .....	186
Abb. 5.1-8	Vertikalgeschwindigkeit über H (4,9 m) (Rechnungen S7 und S8).....	186
Abb. 5.1-9	Vertikalgeschwindigkeit über D (4,9 m) (Rechnungen S7 und S8).....	187
Abb. 5.1-10	Vertikalgeschwindigkeit unter D (3,5 m) (Rechnungen S7 und S8).....	187
Abb. 5.1-11	Vertikalgeschwindigkeit unter H (3,5 m) (Rechnungen S7 und S8).....	188
Abb. 5.1-12	Abhängigkeit des absoluten Diskretisierungsfehlers $F_{\text{Diskret}}$ von der Position im THAI-Behälter.....	188
Abb. 5.1-13	Abhängigkeit des absoluten Diskretisierungsfehlers $F_{\text{Diskret}}$ von der Elementzahl $N_{\text{Element}}$ .....	189
Abb. 5.1-14	Vertikalgeschwindigkeit bei 6,5 m (Rechnung S9).....	190
Abb. 5.1-15	Vertikalgeschwindigkeit bei 8,0 m (Rechnung S9).....	190
Abb. 5.1-16	Vertikalgeschwindigkeit über H (4,9 m) (Rechnung S9) .....	191
Abb. 5.1-17	Vertikalgeschwindigkeit über D (4,9 m) (Rechnung S9) .....	191
Abb. 5.1-18	Vertikalgeschwindigkeit unter D (3,5 m) (Rechnung S9) .....	192
Abb. 5.1-19	Vertikalgeschwindigkeit unter H (3,5 m) (Rechnung S9) .....	192
Abb. 5.1-20	Vertikalgeschwindigkeit bei 6,5 m (Rechnung S9 und S10) .....	194
Abb. 5.1-21	Vertikalgeschwindigkeit bei 8,0 m (Rechnung S9 und S10) .....	194
Abb. 5.1-22	Vertikalgeschwindigkeit über D (4,9 m) (Rechnung S9 und S10).....	195
Abb. 5.1-23	Vertikalgeschwindigkeit unter D (3,5 m) (Rechnung S9 und S10).....	195

Abb. 5.1-24	Vertikalgeschwindigkeit über H (4,9 m) (Rechnung S9 und S10).....	196
Abb. 5.1-25	Vertikalgeschwindigkeit unter H (3,5 m) (Rechnung S9 und S10).....	196
Abb. 5.1-26	Abhängigkeit des absoluten Modellfehlers $F_{\text{Modell}}$ von der Turbulenzintensität am Gebläseaustritt.....	197
Abb. 5.1-27	Abhängigkeit des Korrelationskoeffizient R von der Turbulenzintensität am Gebläseaustritt.....	197
Abb. 5.1-28	Vertikalgeschwindigkeit bei 6,5 m (Rechnungen S8, S9 und S11).....	199
Abb. 5.1-29	Vertikalgeschwindigkeit bei 8,0 m (Rechnungen S8, S9 und S11).....	200
Abb. 5.1-30	Vertikalgeschwindigkeit über D (4,9 m) (Rechnungen S8, S9 und S11).....	200
Abb. 5.1-31	Vertikalgeschwindigkeit über H (4,9 m) (Rechnungen S8, S9 und S11).....	201
Abb. 5.1-32	Vertikalgeschwindigkeit unter D (3,5 m) (Rechnungen S8, S9 und S11).....	201
Abb. 5.1-33	Vertikalgeschwindigkeit unter H (3,5 m) (Rechnungen S8, S9 und S11).....	202
Abb. 5.1-34	Flügelradmessung im Innenzylinder (Rechnungen S8, S9 und S11).....	202
Abb. 5.1-35	Abhängigkeit des absoluten Modellfehlers $F_{\text{Modell}}$ vom Turbulenzmodell.....	203
Abb. 5.1-36	Abhängigkeit des Korrelationskoeffizient R vom Turbulenzmodell .....	203
Abb. 5.1-37	Vergleich des simulierten und gemessenen Druckverlaufs über die Kondensatwanne .....	204
Abb. 5.1-38	Einfluss der Elementzahl $N_{\text{Element}}$ auf die benötigte Rechenzeit $t_{\text{CPU}}$ .....	205
Abb. 5.1-39	Einfluss des Turbulenzmodells auf die Rechenzeit $t_{\text{CPU}}$ .....	206
Abb. 5.1-40	Gegenüberstellung des mittleren absoluten Diskretisierungsfehlers und der Rechenzeit für den Versuch TH-18.....	208
Abb. 5.2-1	Helium-Schichtung zu Beginn der Simulation .....	209
Abb. 5.2-2	Links: Gebläseeintritt (rot), Gebläseaustritt (grün); Rechts: CFD- Gitter .....	210
Abb. 5.2-3	Gemessene und berechnete He-Molenbrüche an zwei Messpunkten.....	212
Abb. 5.2-4	Simulation des TH-20-2 Experiments mit unterschiedlich feinen CFD-Gittern.....	213

Abb. 5.2-5	Geschwindigkeiten im Strahl auf verschiedenen Höhen .....	215
Abb. 5.3-1	Geometrie beim PANDA-4-Versuch.....	217
Abb. 5.3-2	Messstellen im Behälter D1 .....	218
Abb. 5.3-3	CFD-Gitter bei der Simulation des Versuchs PANDA-4.....	219
Abb. 5.3-4	Molare Dampfkonzentrationen im Experiment und in der Simulation in den beiden Behältern .....	221
Abb. 5.3-5	Molare Dampfkonzentrationen im Experiment und in der Simulation im Verbindungsrohr .....	221
Abb. 5.3-6	Wasserdampfverteilung nach 500 s.....	222
Abb. 5.3-7	Untersuchung zur Gitterabhängigkeit der Lösung.....	224
Abb. 5.3-8	Untersuchung zur Gitterabhängigkeit der Lösung (Messstellen im Verbindungsrohr zwischen den Behältern) .....	224
Abb. 5.3-9	Einfluss des Turbulenzmodells auf die berechneten Dampfkonzentrationen .....	226
Abb. 5.3-10	Vergleich der gemessenen und der mit verschiedenen Turbulenzmodellen berechneten Dampfkonzentration an verschiedenen Messstellen in beiden Behältern .....	227
Abb. 5.3-11	Einfluss der turbulenten Schmidt-Zahl .....	229
Abb. 5.3-12	Dampfkonzentration in Behälter 1 und 2 in Abhängigkeit von der Turbulenzintensität am Einlass. Einfluss der Wärmeverluste an den Wänden.....	230
Abb. 5.3-13	Einfluss der Modellierung der Wärmeverluste an den Wänden auf die Dampfkonzentration .....	231
Abb. 5.4-1	Verwendetes CFD-Gitter.....	233
Abb. 5.4-2	Konvergenz für die Geschwindigkeitskomponenten u,v,w und für den Druck.....	235
Abb. 5.4-3	Gesamtmasse N <sub>2</sub> und relativer Fehler bei der N <sub>2</sub> -Masse.....	236
Abb. 5.4-4	H <sub>2</sub> -Konzentration zum Zeitpunkt 2800 s und 2850 s.....	236
Abb. 5.4-5	Strömungsgeschwindigkeit nach 2800 s bzw. 2850 s bei unterschiedlicher Geschwindigkeitsskala (oben: 0 – 2 m/s, unten: 0 – 0,05 m/s) .....	237
Abb. 5.4-6	Wasserstoffkonzentration zu verschiedenen Zeitpunkten.....	242
Abb. 5.4-7	Geschwindigkeit im THAI-Behälter .....	243

Abb. 5.4-8	Dampfkonzentration nach 4500 s und 4800 s.....	244
Abb. 5.4-9	Temperatur nach 4500 s und 4800 s .....	244
Abb. 5.4-10	Vergleich der H <sub>2</sub> -Konzentrationen entlang der Höhenlinie in der Behältermitte .....	245
Abb. 5.4-11	Vergleich der H <sub>2</sub> -Konzentrationen entlang der Höhenlinie (1,08 m, 0 m, Höhe) .....	245
Abb. 5.4-12	Vergleich der H <sub>2</sub> -Konzentrationen entlang der Höhenlinie (0 m, 1.08 m, Höhe) .....	246
Abb. 5.4-13	H <sub>2</sub> -Konzentration an verschiedenen Messstellen.....	248
Abb. 5.4-14	Druck im THAI-Behälter .....	249
Abb. 5.4-15	Temperatur an verschiedenen Messstellen .....	250
Abb. 5.4-16	H <sub>2</sub> -Konzentration entlang der Mittelachse.....	252
Abb. 5.4-17	Druckverlauf beim HM-2 Experiment .....	252
Abb. 5.4-18	Temperatur an verschiedenen Messstellen .....	253
Abb. 5.4-19	Abhängigkeit der H <sub>2</sub> -Konzentration von der räumlichen Diskretisierung .....	254
Abb. 5.4-20	Abhängigkeit des Drucks von der räumlichen Diskretisierung .....	255
Abb. 6.1-1	Vergleich des Druckverlaufs im THAI-Behälter.....	259
Abb. 6.1-2	Druckverlauf in Phase 2.....	260
Abb. 6.1-3	Höhenprofil der H <sub>2</sub> -Konzentration am Ende von Phase 1 (t = 4000 s, x = y = 0 m) .....	261
Abb. 6.1-4	Vergleich des H <sub>2</sub> -Konzentration in 6,0 m Höhe (Messstelle CCH60M00) .....	262
Abb. 6.1-5	Zeit bis zum Einsetzen der globalen Naturkonvektion .....	262
Abb. 6.1-6	Vergleich des H <sub>2</sub> -Konzentration in 8,7 m Höhe (Messstelle DCH87M00) .....	263
Abb. 6.1-7	Vergleich des Temperaturverlaufs in 1,6 m Höhe (Messstelle BTF16H11).....	264
Abb. 6.1-8	Vergleich des Temperaturverlaufs in 7,2 m Höhe (Messstelle DTF72M00).....	265
Abb. 7.3-1	Geometrie bei den Versuchen HYCOM13 und HYCOM14.....	272

Abb. 7.3-2	Links: Geometrie der RUT-Anlage bei HYCOM13 und HYCOM14; rot: Position der Messline 2; Rechts: Experimentell bestimmte Flammenankunftszeiten entlang Messline 2 bei HYCOM013.....	272
Abb. 7.3-3	Gemessene Flammenfronten im „Canyon“ im HYCOM13-Experiment.....	274
Abb. 7.3-4	Druck und Flammenankunftszeiten in der Simulation des HYCOM13- Experiments mit dem EDM + SST + Discrete-Transfer-Modell.....	274
Abb. 7.3-5	Temperaturen an den Sensoren entlang der Messlinie 2 im Bereich $37\text{ m} < x < 47\text{ m}$ , bei Simulation mit dem EDM + SST +Disc.-Transfer-Modell mit $A_E = 21,0$ .....	275
Abb. 7.3-6	Ausbreitung der Flammenfront (Isolinie mit Temperatur = 800 K) bei HYCOM13 (EDM-Modell).....	275
Abb. 7.3-7	Druck und Flammenankunftszeiten in der Simulation des HYCOM13-Experiments mit dem BVM + SST + Discrete-Transfer-Modell.....	277
Abb. 7.3-8	Ausbreitung der Flammenfront (Isolinie mit $\text{H}_2$ -Molenbruch $x_{\text{H}_2} = 0,01$ ) bei HYCOM013 (BVM-Modell).....	278
Abb. 7.3-9	Druck (links) und Flammenankunftszeiten in Abhängigkeit von turbulenter kinetischer Energie $k$ zu Simulationsbeginn .....	280
Abb. 7.3-10	Verlauf der Flammenfront (rot): links: $k_{\text{ini}} = 3\text{ m}^2/\text{s}^2$ ; rechts: $k_{\text{ini}} = 1.0\text{ e-}4\text{ m}^2/\text{s}^2$ .....	281
Abb. 7.4-1	Flammenankunftszeiten im Experiment HYCOM14.....	283
Abb. 7.4-2	Druck und Flammenankunftszeiten in der Simulation des HYCOM14- Experiments mit dem EDM + SST + Discrete-Transfer-Modell.....	283
Abb. 7.4-3	Druck und Flammenankunftszeiten in der Simulation des HYCOM14- Experiments mit dem BVM + SST + Discrete-Transfer-Modell.....	284
Abb. 7.4-4	Druck in Abhängigkeit von der Startturbulenz ( $k_{\text{ini}}$ und $\epsilon_{\text{ini}}$ ) .....	285
Abb. 7.5-1	Druck im HYCOM13- und HYCOM14-Experiment.....	286
Abb. 7.6-1	Schematische Darstellung der Geometrie und des Zündortes .....	287
Abb. 7.6-2	Geometrie und CFD-Gitter beim lx2-Experiment .....	287

Abb. 7.6-3	Vergleich des Druckverlaufs im Raum R7 im Experiment und in der Simulation mit dem erweiterten Eddy-Dissipation-Modell unter Verwendung verschiedener Vorfaktoren .....	291
Abb. 7.6-4	Vergleich des Druckverlaufs im Raum R5 im Experiment und in der Simulation mit dem erweiterten Eddy-Dissipation-Modell unter Verwendung verschiedener Vorfaktoren .....	291
Abb. 7.6-5	Vergleich des Druckverlaufs im Raum R9 im Experiment und in der Simulation mit dem erweiterten Eddy-Dissipation-Modell unter Verwendung verschiedener Vorfaktoren .....	292
Abb. 7.6-6	Vergleich des Druckverlaufs in Raum R5 (links) und R7 (rechts) im Experiment und in der Simulation mit dem Burning-Velocity-Modell unter Verwendung verschiedener Vorfaktoren .....	293
Abb. 7.6-7	Vergleich des Druckverlaufes im Raum R9 im Experiment und in der Simulation mit dem Burning Velocity-Modell unter Verwendung verschiedener Vorfaktoren .....	294
Abb. 7.6-8	Unphysikalische Flammenfronten (rechts, rot) nach Auftreten einer Zündung aufgrund von numerischen Fehlern .....	297
Abb. 7.6-9	Druckverlauf im Raum R5 und R7 bei Simulation mit dem modifizierten Ausdruck für $v_{lam}$ .....	299
Abb. 7.6-10	Links: Druckverlauf in R9 bei Simulation mit dem modifizierten Ausdruck für $v_{lam}$ ; rechts: $H_2$ -Masse in $1x2$ in der Simulation mit dem BVM .....	299
Abb. 7.7-1	Links: Skizze des ENACCEF-Versuchsstands mit Position der Messstellen. Rechts: Geometrie der Hindernisse, die ins Beschleunigungsrohr eingebracht wurden.....	301
Abb. 7.7-2	Wasserstoffanfangskonzentration bei Beginn der Verbrennung; Links: RUN 736; Rechts RUN733 .....	302
Abb. 7.7-3	Links: Verwendetes CFD-Gitter; Rechts: CFD-Gitter im Bereich der Hindernisse .....	304
Abb. 7.7-4	Untersuchung zur Gitterabhängig; Links: Druckverlauf; Rechts: Flammenausbreitungsgeschwindigkeit .....	304
Abb. 7.7-5	Druckverlauf (links) und Flammengeschwindigkeit (rechts) bei RUN736 (neg. Gradient) .....	307

Abb. 7.7-6	Vergleich der beiden ENACCEF-Versuche mit negativen Gradienten RUN765 (offen) und RUN736 (blind). Links: Anfangskonzentration; Rechts: Flammengeschwindigkeit.....	308
Abb. 7.7-7	Vergleich der Drücke bei den beiden ENACCEF-Versuche mit negativen Gradienten RUN765 (offen) und RUN736 (blind).....	308
Abb. 7.7-8	Mischungsbruch zu verschiedenen Zeitpunkten. In schwarz ist die Position der Flammenfront eingezeichnet.....	309
Abb. 7.7-9	H <sub>2</sub> -Konzentration zu Beginn des Versuchs RUN733 .....	311
Abb. 7.7-10	Druck (links) und Flammengeschwindigkeit (rechts) beim Versuch RUN733 .....	311
Abb. 7.8-1	Druck und Flammengeschwindigkeit bei unterschiedlicher Diskretisierung .....	314
Abb. 7.8-2	Druck und Flammengeschwindigkeit bei BR=0,63.....	315
Abb. 7.8-3	Druck (links), Temperatur (Mitte) und Reaktionsfortschritt (rechts) nach 0,074 s.....	316
Abb. 7.8-4	Druck und Flammengeschwindigkeit bei unterschiedlicher Diskretisierung .....	317
Abb. 7.8-5	Druck und Flammengeschwindigkeit bei BR = 0,33.....	318
Abb. 7.8-6	Druck und Flammengeschwindigkeit bei BR=0.....	319
Abb. 7.8-7	Vergleich der berechneten Flammengeschwindigkeit mit BR=0 (rot) und BR=0,01 (grün) mit den Messwerten.....	320
Abb. 8.2-1	Experimenteller Aufbau des HYCOM-13 Versuchs /SCHO 04/ .....	322
Abb. 8.3-1	Ausbreitung der Flammen im HYCOM-Experiment; berechnet mit COM3D /YAN 10/.....	324
Abb. 8.3-2	Positionen der drei Messlinien im RUT-Versuch (gestrichelt) /SCHO 04/.....	325
Abb. 8.4-1	Position der Flammenfront zu festgelegten Zeitpunkten /SCHO 04/ ...	326
Abb. 8.4-2	Einfluss der initialen Turbulenzintensität auf die Flammenankunftszeiten entlang der unteren Linie .....	327
Abb. 8.4-3	Einfluss der initialen Turbulenzintensität auf die Flammenankunftszeiten entlang der mittleren Linie.....	328
Abb. 8.4-4	Einfluss der initialen Turbulenzintensität auf die Flammenankunftszeiten entlang der oberen Linie .....	328
Abb. 8.4-5	Einfluss der initialen Turbulenzintensität auf den Druckverlauf.....	329

Abb. 8.5-1	Vergleich der Flammenankunftszeiten entlang der oberen Linie für COM3D, CFX und Experiment.....	330
Abb. 8.5-2	Vergleich der mit COM3D und CFX berechneten Druckverläufe.....	331
Abb. 9.1-1	Vorgehensweise bei der Netzerstellung für CFX für eine KONVOI-Anlage .....	333
Abb. 9.2-1	Vertikaler Schnitt durch das KONVOI-Gitter .....	335
Abb. 9.2-2	Horizontaler Schnitt durch das KONVOI-Gitter .....	335
Abb. 9.2-3	Screenshots des KONVOI-Datensatzes; unten mit Gasfreisetzung bei einem unterstellten Störfall.....	337
Abb. 9.3-1	Eingespeiste Dampfmenge aus dem Druckhalter (Randbedingung) ...	340
Abb. 9.3-2	Temperatur des eingespeisten Dampfes aus dem Druckhalter .....	340
Abb. 9.3-3	Eingespeiste Dampfmenge aus dem Leck an der HKL .....	341
Abb. 9.3-4	Eingespeiste Wasserstoffmenge aus dem Leck an der HKL .....	341
Abb. 9.3-5	Temperaturen (Dampf und Wasserstoff) an der HKL-Seite .....	342
Abb. 9.3-6	Räumliche Verteilung von Wasserdampf im Containment (t ~ 200 s).....	344
Abb. 9.3-7	Räumliche Wasserstoffverteilung im Containment (t = 2865 s) .....	344
Abb. 9.3-8	In der vorliegenden Analyse betrachtete Zonen .....	346
Abb. 9.3-9	Vergleich des Containment-Drucks.....	347
Abb. 9.3-10	Vergleich der mittleren Dampfkonzentration in Zone R08B .....	348
Abb. 9.3-11	Vergleich der mittleren Dampfkonzentration in Zone R09B (Leckraum).....	348
Abb. 9.3-12	Vergleich der mittleren Dampfkonzentration in Zone R10A .....	349
Abb. 9.3-13	Vergleich der mittleren Dampfkonzentration in Zone D50 (Dom) .....	349
Abb. 9.3-14	Vergleich der mittleren Temperatur in Zone R08B.....	351
Abb. 9.3-15	Vergleich der mittleren Temperatur in Zone R09B (Leckraum) .....	351
Abb. 9.3-16	Vergleich der mittleren Temperatur in Zone R10A.....	352
Abb. 9.3-17	Vergleich der mittleren Temperatur in Zone RD50 (Dom) .....	352
Abb. 9.3-18	Vergleich der mittleren H <sub>2</sub> -Konzentration in Zone R08B .....	353
Abb. 9.3-19	Vergleich der mittleren H <sub>2</sub> -Konzentration in Zone R09B (Leckraum)...	354
Abb. 9.3-20	Vergleich der mittleren H <sub>2</sub> -Konzentration in Zone R10A.....	354
Abb. 9.3-21	Vergleich der mittleren H <sub>2</sub> -Konzentration in Zone D50 (Dom).....	355

Abb. 9.3-22	Vergleich der integralen Dampfmasse im Containment.....	356
Abb. 9.3-23	Vergleich der integralen H <sub>2</sub> -Masse im Containment .....	357
Abb. 9.3-24	Einströmbedingungen beim Testbeispiel .....	359
Abb. 9.3-25	Einfluss der Parametervariation auf den Druckverlauf.....	361
Abb. 9.3-26	Einfluss der Berechnungsparameter auf den Druck .....	362
Abb. 9.3-27	Einfluss der Berechnungsparameter auf die integrale Dampfmasse ...	363
Abb. 9.3-28	Einfluss der Berechnungsparameter auf den integralen Wärmestrom.....	363
Abb. 9.3-29	Vergleich des integralen Wärmestroms in die Betonwand im Testbeispiel .....	365
Abb. 9.3-30	Vergleich des Druckverlaufs im Testbeispiel .....	365
Abb. 9.3-31	Vergleich der Gastemperaturen im Testbeispiel .....	366
Abb. 9.3-32	Links: Unstrukturiertes Betongitter (grob), Mitte: Feiner aufgelöstes Wandgitter, Rechts: Strukturiertes Gasgitter.....	367
Abb. 9.3-33	Bereiche mit verfeinerter Wandstruktur im Containmentgitter .....	368
Abb. 9.3-34	Einfluss der Wandverfeinerung auf den Druck in der Containment- Berechnung.....	369
Abb. 9.3-35	Einfluss der Wandverfeinerung auf die mittlere Temperatur in Zone R09B (Einspeisezone) .....	370
Abb. 9.3-36	Einfluss der Wandverfeinerung auf die mittlere Dampfkonzentration in Zone D50 (Domkuppel).....	371
Abb. 9.3-37	H <sub>2</sub> -Schichtungen bilden sich unter anderem auch an der Dampferzeuger-Raumdecke und im RDB-Stützenraum (t = 2714,5 s) .....	372
Abb. 9.3-38	Wasserstoffschichtung (oben) und Dampfschichtung (unten) in Zone R09B zum Zeitpunkt t = 2865 s.....	373
Abb. 9.3-39	Unterschiedliche lokale H <sub>2</sub> -Konzentrationen in Zone R09B .....	374
Abb. 9.3-40	Berücksichtigung der lokalen Dampfkonzentrationen. ....	375
Abb. 9.3-41	Lokale Auswertung der Entflammbarkeits- und Flammbeschleunigungskriterien (t = 2865 s). ....	376

## Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1-1	Start- und Randbedingungen für die CFX-Simulation .....	4
Tab. 2.1-2	Eingabewerte für die Simulation der Dampfeinspeisung .....	8
Tab. 2.1-3	Übersicht zu allen Berechnungen mit den unterschiedlichen Parametervariationen.....	9
Tab. 2.1-4	Analyse der Diskretisierungsfehler für die Zielgröße Druck .....	12
Tab. 2.1-5	Start- und Randbedingungen für die CFX-Simulation. Analyse der mittleren Diskretisierungsfehler für die Zielgröße Temperatur im Zeitintervall von 0 s bis 400 s .....	13
Tab. 2.1-6	Parameter der einzelnen Simulationsrechnungen .....	30
Tab. 2.1-7	Vergleich der absoluten Modellfehler für unterschiedliche Modellannahmen.....	33
Tab. 2.2-1	Details der verwendeten Geometrie.....	37
Tab. 2.2-2	Start- und Randbedingungen für die CFX-Simulation .....	38
Tab. 2.2-3	Dampfeinspeisung in Raum R5 .....	39
Tab. 2.2-4	Luftentnahme aus Raum R9 (Ringraum) .....	39
Tab. 2.2-5	Luftleckage aus Raum R9 (Ringraum).....	39
Tab. 2.2-6	Mittlerer Abweichung bei der Druckberechnung .....	42
Tab. 2.2-7	Überströmöffnungen im Battelle-Modellcontainment .....	50
Tab. 2.2-8	Abweichungen bei der Berechnung von Druck, Temperaturen und Geschwindigkeiten. Es wurde jeweils über alle oben genannten Messpositionen gemittelt.....	55
Tab. 3.2-1	Konstanten $k_1$ und $k_2$ für verschiedene Rekombinatormodelle .....	83
Tab. 3.5-1	Wahl der Modellparameter für die Nachrechnung von Versuch HR- 12 .....	121
Tab. 3.5-2	H <sub>2</sub> - und Dampfeinspeisemassen.....	122
Tab. 4.1-1	Versuchsplan für die CFX-Simulationen .....	137
Tab. 4.2-1	Geometrie und Startbedingungen für die CFX-Simulation .....	147
Tab. 4.2-2	Zeitabhängige Randbedingungen .....	147
Tab. 4.2-3	Einfluss der Gitterfeinheit auf die Rechendauer.....	150

Tab. 4.2-4	Einfluss der Gitterfeinheit auf die Berechnungsgrößen Druck, Temperatur und Vertikalgeschwindigkeit .....	150
Tab. 4.2-5	Mittlere Temperaturen für $t > 10,2$ h.....	156
Tab. 4.2-6	Mittlere Vertikalgeschwindigkeiten in Phase 2 ( $t > 7,5$ h).....	159
Tab. 4.3-1	Start- und Randbedingungen für die Berechnung von Phase 1 (0 h - 24,1 h).....	163
Tab. 4.3-2	Start- und Randbedingungen für die transiente Simulation (24,1 h - 25,79 h).....	163
Tab. 5.1-1	Untersuchte Zielgrößen.....	177
Tab. 5.1-2	In den Simulationen verwendete Modelle und Randbedingungen .....	180
Tab. 5.1-3	Plan der durchgeführten Simulationen.....	181
Tab. 5.1-4	Geschwindigkeitsprofile am Gebläseaustritt .....	182
Tab. 5.1-5	Kennwerte zur Charakterisierung der Modellfehler .....	193
Tab. 5.1-6	Kennwerte zur Charakterisierung der Modellfehler .....	199
Tab. 5.2-1	Versuchsrandbedingungen .....	210
Tab. 7.8-1	Versuchsbedingung der $H_2$ -Verbrennungsversuche .....	313
Tab. 8.2-1	Start und Randbedingungen für die COM3D-Berechnung.....	323
Tab. 8.3-1	Position der Sensorlinien .....	325
Tab. 8.4-1	Variation der initialen Turbulenz in den COM3D-Rechnungen .....	326
Tab. 9.2-1	Netzumfang des KONVOI-Datensatzes.....	336
Tab. 9.3-1	Start- und Randbedingungen für das untersuchte Szenario .....	339
Tab. 9.3-2	Start- und Randbedingungen des Testbeispiels .....	360
Tab. 9.3-3	Parametervariation des Testbeispiels .....	360



# 1 Einleitung

Im Rahmen der Fachgruppe „Sicherheitseinschluss“ des CFD-Verbundes erbringt die GRS einen wichtigen Beitrag zur Qualifizierung von CFX für die Simulation der Gasverteilung im Sicherheitseinschluss und wendet CFX exemplarisch für die Simulation der Gasverteilung in einem Sicherheitseinschluss bei einem schweren Störfall an.

Der Arbeitsplan des Vorhabens RS1181 sieht drei zentrale Schwerpunkte vor:

1. Beitrag zur gezielten Erweiterung der Möglichkeiten von CFX und zu seiner Validierung für die Simulation der Gasverteilung im Sicherheitseinschluss.
2. Stuserhebung der H<sub>2</sub>-Verbrennungsmodellierung in CFX.
3. Erstellung generischer Datensätze für den Sicherheitsbehälter einer KONVOI Anlage.

Zeitlich parallel werden durch die Partner im CFD-Verbund Arbeiten zur gezielten Weiterentwicklung von CFX für die Anwendung im Sicherheitseinschluss (Schwerpunkt: Turbulenzmodellierung) vom IKE der Universität Stuttgart und dem CFX-Entwickler ANSYS durchgeführt. Zur Verbesserung der H<sub>2</sub>-Verbrennungsmodellierung in CFX und der FZK-Codefamilie werden experimentelle Arbeiten in der Karlsruher H<sub>2</sub>-Versuchsanlage und im Labor bei der TU München durchgeführt, die in konkrete Modellverbesserungen münden sollen.

Der vorliegende Abschlussbericht zum Vorhaben beschreibt den erreichten Stand der Arbeiten der GRS im Vorhaben RS1181. Mit den in diesem Projekt durchgeführten Arbeiten bringt die GRS einen Beitrag zur Qualifizierung von CFX für die Simulation der Gasverteilung im Sicherheitseinschluss sowie von H<sub>2</sub>-Verbrennungsvorgängen ein und trägt dazu bei, das Anwendungsspektrum von CFX gezielt zu erweitern.

Ein Schwerpunkt des Vorhabens war die Validierung eines Modells zur Simulation von Wand- und Volumenkondensationsvorgängen (Kap. 2). Dazu wurden verschiedene Versuche (TH-2, PANDA-4bis, VANAM M3) mit dem bei der GRS entwickelten Modell nachgerechnet.

In Kap. 3 wird der Stand der Arbeiten zur Entwicklung und Validierung eines einfachen Modells zur Simulation von autokatalytischen Rekombinatoren zum Abbau von Wasserstoff aus der Containmentatmosphäre beschrieben. Ein Modell basierend auf Abbaugleichungen von AREVA wurde in CFX-11 implementiert und an mehreren Versuchen (HR-2, HR-5, HR-12)

validiert. Diese Versuche unterscheiden sich insbesondere hinsichtlich des Druckes und der Dampfkonzentration.

Einen weiteren Schwerpunkt des Vorhabens bilden die Untersuchungen zur Simulation des Wärmetransports aus der Atmosphäre in Wände. Kap. 4 beschreibt den Stand der Arbeiten, die zunächst darauf ausgerichtet waren festzustellen, welchen Einfluss die Feinheit des Berechnungsgitters sowie des Gittertyps (strukturiert oder unstrukturiert) auf die Berechnung des Wärmetransports in die Wände haben. Die daraus gewonnen Erkenntnisse wurden bei der Nachrechnung verschiedener Versuche (TH-21, TH-22, VANAM M3) angewendet.

Ausgehend von den Erfahrungen beim ISP-47 wurde die Turbulenzmodellierung in CFX intensiv an verschiedenen Experimenten untersucht. Dazu wurden die Versuche (PANDA-4, TH-18, TH-20, HM-2) simuliert. Details sind in Kap. 5 beschrieben.

Die in CFX-11 vorhandenen Verbrennungsmodelle wurden bereits im Rahmen anderer Projekte für die Simulation von H<sub>2</sub>-Verbrennungen in einem Sicherheitsbehälter angewendet und anhand von Versuchsnachrechnungen einer ersten Validierung der Modelle unterzogen. Die fortgesetzte, vertiefte Validierung im Vorhaben umfasst neben der Validierung der Modellierung von turbulent beschleunigten H<sub>2</sub>-Verbrennungen mit CFX (HYCOM-13 HYCOM-14, IX-2, und verschiedener an der ENACCEF-Versuchsanlage durchgeführter Versuche) auch erste Tests des vom Forschungszentrum Karlsruhe entwickelten Verbrennungscodes COM3D. Diese Ergebnisse wurden mit Ergebnissen aus CFX-Simulationen verglichen. Ergebnisse beider Arbeiten werden in den Kap. 7 und Kap. 8 beschrieben.

Letztlich verfolgt die GRS mit der Erstellung eines CFD-Gitters für einen Sicherheitsbehälter eines DWR vom Typ KONVOI die Absicht, in Zukunft die Gasverteilung im Containment bei schweren Störfällen mit CFX zu berechnen. Der Status der Arbeiten beschreibt Kap. 9. Der größte Arbeitsaufwand ist dabei zunächst mit der Erstellung des Gitters verbunden. Wegen der Komplexität der Aufgabe werden z. Z. die wichtigsten Komponenten und die Hauptkonturen der Strukturen (Wände, Decken) und Räume abgebildet. Mit dem erstellten Gitter sind prinzipiell CFD-Analysen für verschiedene Szenarien möglich. Das erstellte CFD-Gitter wurde durch die Simulation der Gasverteilung bei einem schweren Störfall mit H<sub>2</sub>-Freisetzung einem ersten Test unterzogen. Die CFD-Simulationsergebnisse wurden mit den Ergebnissen einer mit dem Lumped-Parameter-Code COCOSYS durchgeführten Analyse verglichen.

## **2 Wand- und Volumenkondensation**

Im Verlauf von Stör- und Unfällen werden u.a. größere Mengen an Wasserdampf in den Sicherheitsbehälter freigesetzt. Dieser kann sowohl an Strukturen (z. B. Wänden) als auch im Volumen selbst kondensieren. Eine adäquate Simulation ist auch ein zentraler Punkt bei der Anwendung von CFX. In CFX besteht prinzipiell die Möglichkeit, im Rahmen einer mehrphasigen Simulation Phasenübergänge (Dampf - Wasser) zu simulieren, eine solche Simulation ist aber extrem rechenzeitintensiv. Die Erhaltungsgleichungen werden sowohl für das Gas als auch für das Fluid gelöst. An der Grenzschicht Gas/Fluid wird dabei lokal der Phasenübergang simuliert, wozu ein sehr feines Rechengitter notwendig ist. Eine solche lokale Betrachtung, bei der der Phasenübergang an einzelnen Tropfen simuliert wird, ist für die Simulation der Zustände in einem Sicherheitsbehälter jedoch nicht geeignet. Vereinfachend wurde daher in der Vergangenheit der Schwerpunkt zunächst auf die Berechnung des Wärmeübertrags in die Wände aufgrund der Kondensation und die Änderung der Gaszusammensetzung sowie der Gastemperatur gelegt. Verbesserungen versprach ein im Auftrag der GRS von ANSYS in CFX integriertes vereinfachtes Kondensationsmodell, das sogenannte "User Defined Function" nutzt. Das Modell simuliert die Änderung der Gaszusammensetzung und der Temperatur aufgrund von Volumen- und Oberflächenkondensation. Im Vorhaben erfolgte eine vertiefte Validierung anhand der Nachrechnung:

- des Versuchs THAI TH2
- des Versuchs VANAM M3 am Battelle Modellcontainment
- des Versuchs PANDA-4bis aus dem SETH I Versuchsprogramm.

### **2.1 Nachrechnung des Versuchs TH2**

#### **2.1.1 Zielsetzung**

Nachfolgend wird die Validierung des GRS-Kondensationsmodells durch Nachrechnung des THAI-Versuchs TH-2 beschrieben. Da der Kondensationsprozess insbesondere den zeitlichen Verlauf von Druck und Temperatur beeinflusst, wurde insbesondere die Übereinstimmung dieser beiden Parameter mit experimentellen Daten überprüft. Es wurden sowohl Berechnungen mit Kondensationsmodell als auch ohne Kondensationsmodell durchgeführt, um den Effekt dieses Modells auf die Zielgrößen Druck und Temperatur analysieren zu können. Weiterhin wurde der Einfluss unterschiedlicher Simulationsparameter (Randbedingungen, Gasmodell, Referenzwerte) auf die Berechnung analysiert.

## 2.1.2 Geometrie und Randbedingungen

In Abb. 2.1-1 ist das Berechnungsgitter für die THAI-Versuchsanlage dargestellt. Eine genaue Beschreibung der Versuchsgeometrie und weitere Details zum Experiment TH-2 finden sich bei /KAN 03/. Für das Geometriemodell wurden vier unterschiedlich feine Gitter verwendet (309.452, 130.107, 76.512 und 32.538 Elemente), die jeweils den THAI-Behälter als 360°-Modell darstellen. Hierbei wurde das Gitter in Wandnähe verfeinert, um den Wärmeübergang von Fluid an den Festkörper richtig wiederzugeben (siehe Abb. 2.1-2). In dem nachgerechneten Versuch wurde im oberen Bereich des THAI-Behälters Wasserdampf über ein torusförmiges Rohr, in dem sich insgesamt 19 Bohrungen befanden, eingespeist (mittig in 6,7 m Höhe, siehe Abb. 2.1-3). Der sich ausbildende nach oben steigende Freistrahlf befindet sich vollständig in dem Bereich mit unstrukturiertem Gitter (siehe Abb. 2.1-2).

In Tab. 2.1-1 finden sich die Start- und Randbedingungen für die CFX-Simulation. Die transiente Simulation wurde mit einer Zeitschrittweite von 0,02 s durchgeführt. Als Turbulenzmodell wurde das SST Modell verwendet, weil es sich bei der TH-18 Simulation als gutes und schnell rechnendes Turbulenzmodell gezeigt hat (siehe Abschnitt 5 über Turbulenzmodelle). Das Konvergenzkriterium war  $RMS < 1,2 \text{ E-}4$ .

Tab. 2.1-1 Start- und Randbedingungen für die CFX-Simulation

Elementzahl	32.538, 76.512, 130.107 und 309.452 Elemente
Zeitschrittweite	0,02 s
Turbulenzmodell	Shear Stress Transport (SST)
Startwerte	1,009 bar, 24 °C, 98,7 % Luft, 1,3 % Dampf
Konvergenzkriterium	$RMS < 1,2 \text{ E-}4$

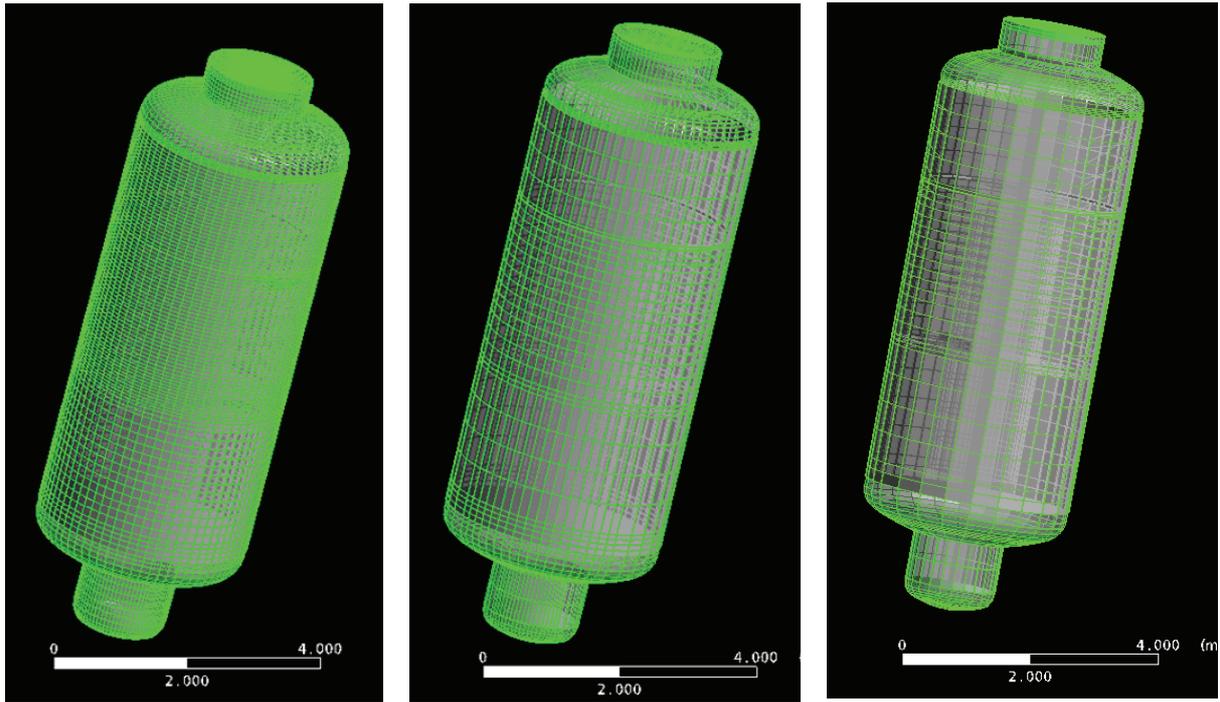


Abb. 2.1-1 Das Geometriemodell des THAI-Behälters mit unterschiedlicher Gitterfeinheit (von links: 309.452, 76.512 und 32.538 Elemente)

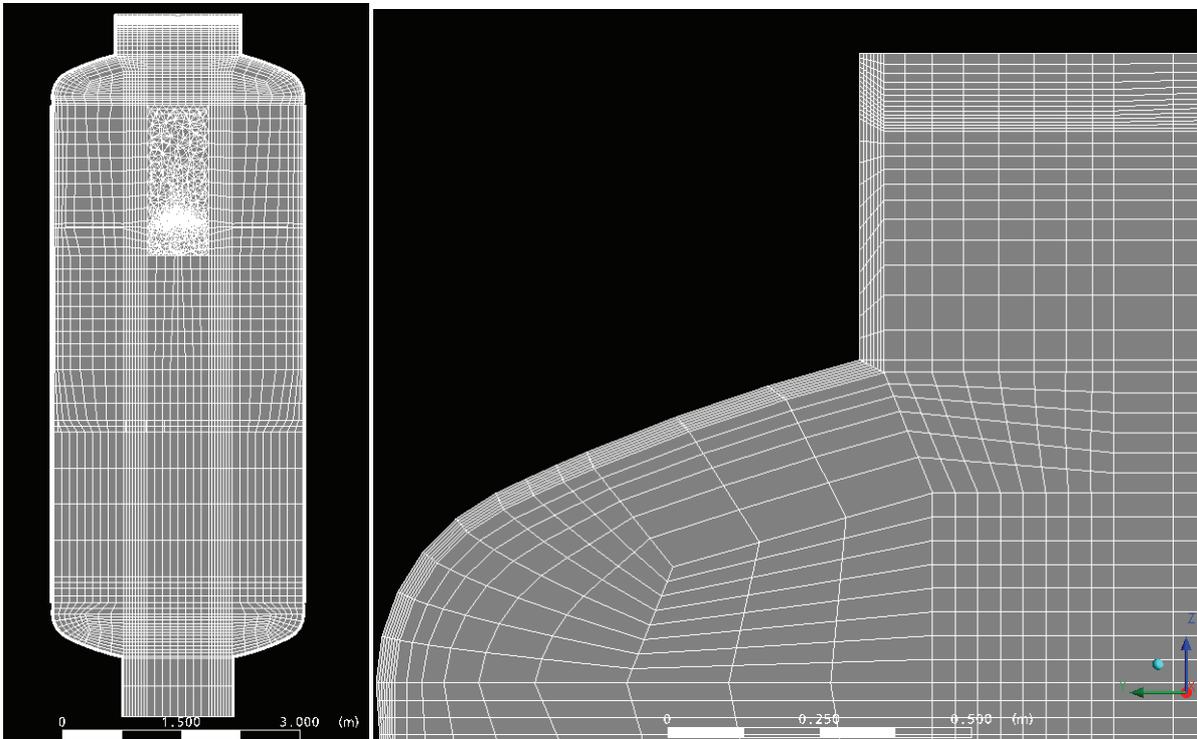


Abb. 2.1-2 Das Geometriemodell mit 130.107 Elementen im Querschnitt (links) und eine Vergrößerung (rechts)

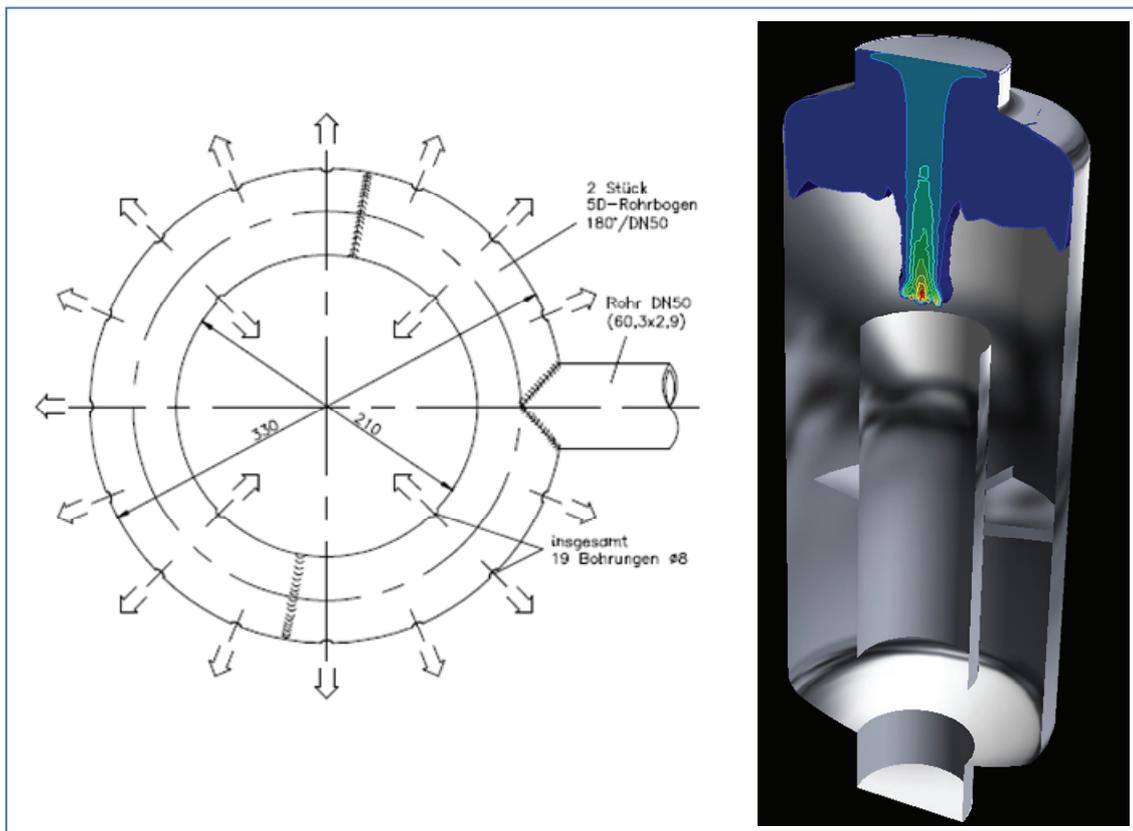


Abb. 2.1-3 Dampfeinspeisung beim TH-2 Experiment (links: Einspeiserohr /KAN 03/, rechts: Schnitt durch den THAI-Behälter)

In den Abb. 2.1-4 und Abb. 2.1-5 sind der Dampfstrom und die Dampftemperatur für den Versuch und für die CFX-Simulation dargestellt. Die experimentell gemessene Dampfmenge und die Dampftemperatur wurden durch Funktionen approximiert, die dann für die CFX-Berechnung verwendet wurden (siehe Tab. 2.1-2). Integral wurden so im Experiment 135,3 kg Dampf eingespeist und in der Simulation waren es 133,4 kg (in den ersten 4000 Sekunden).

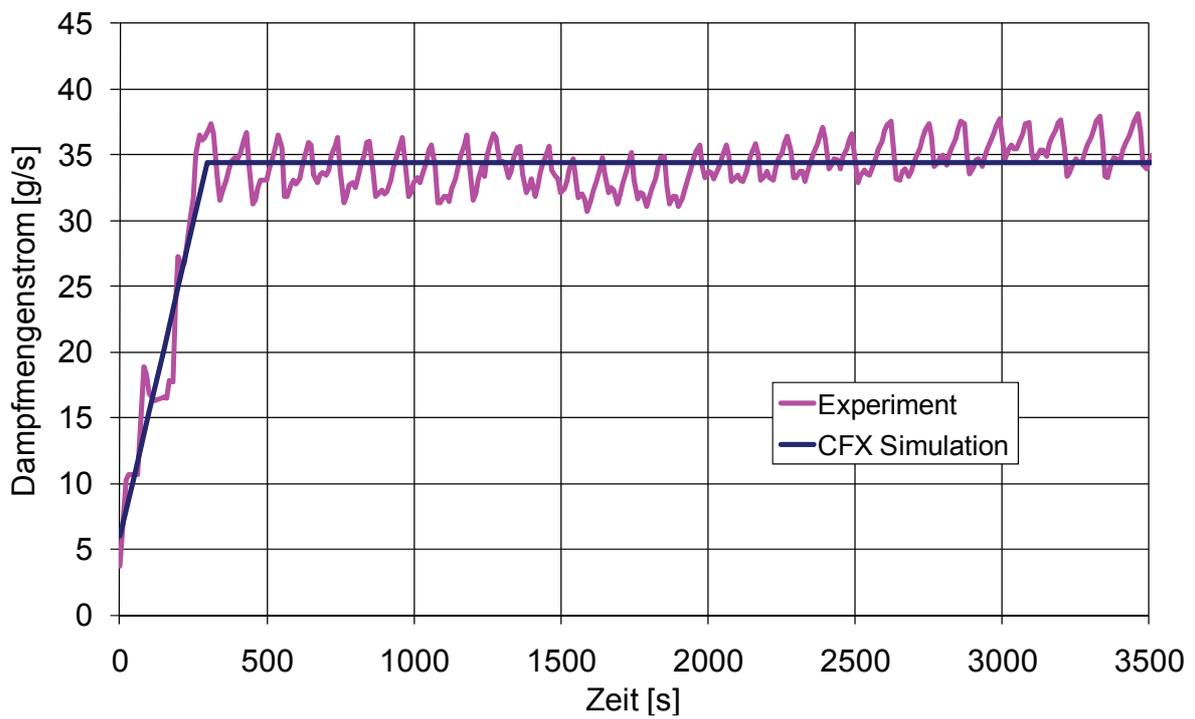


Abb. 2.1-4 Eingespeister Dampfmenstrom in Experiment und Simulation

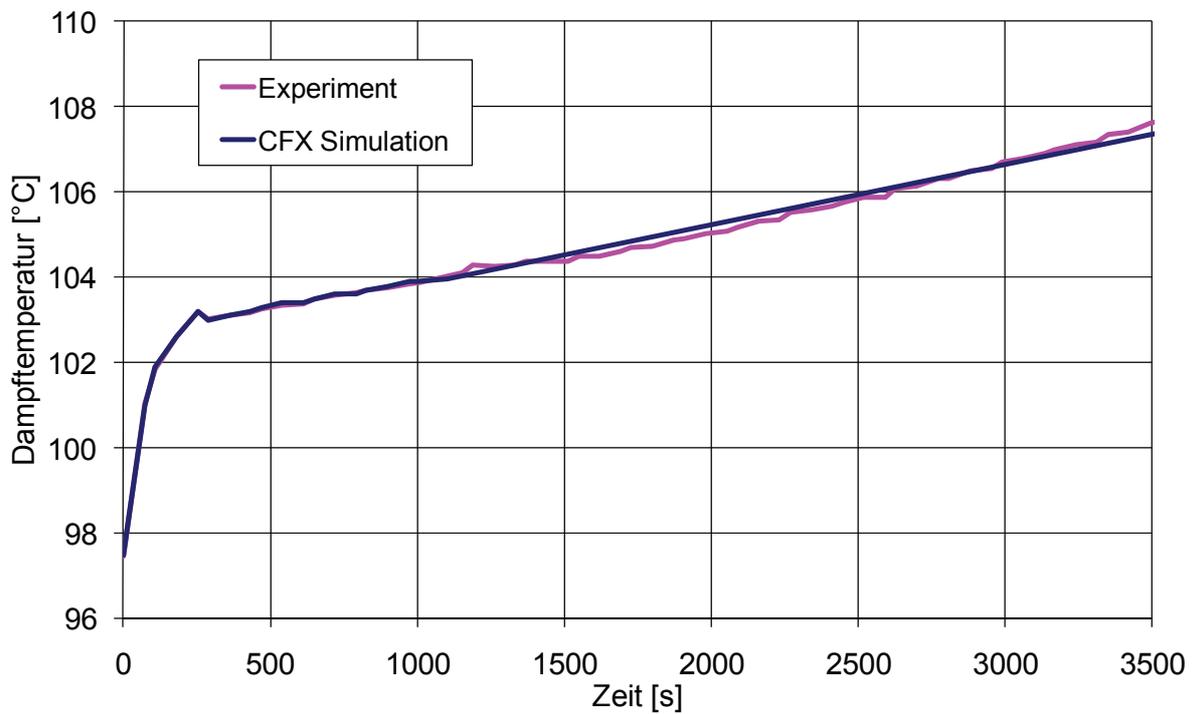


Abb. 2.1-5 Temperatur des eingespeisten Dampfes in Experiment und Simulation

Tab. 2.1-2 Eingabewerte für die Simulation der Dampfeinspeisung

Zeit [s]	Temperatur [°C]	Zeit [s]	Temperatur [°C]
0	97,5	828	103,7
72	101,0	900	103,8
108	101,9	972	103,9
180	102,6	1000	103,9
252	103,2	Über 1000	$0,001416 \frac{K}{s} \cdot t + 102,4 K$
288	103,0		
360	103,1		
432	103,2	Zeit [s]	Dampfmenge [g/s]
468	103,3	0	6,00
540	103,4	50	10,75
612	103,4	100	15,50
648	103,5	150	20,25
720	103,6	200	25,00
792	103,6	Über 299	34,40

In Tab. 2.1-3 wird eine Übersicht zu den verschiedenen Berechnungen gegeben. Hierbei wurden unterschiedliche Berechnungsparameter variiert (z.B. die Gasmodellierung oder die Elementzahl), um den Einfluss dieser Berechnungsparameter auf den Druck und die Temperaturen im THAI-Behälter zu untersuchen. Die Namen in der ersten Spalte bezeichnen die jeweilige Berechnung. Unter diesem Namen sind die Berechnungen auch in den Diagrammen dargestellt.

Tab. 2.1-3 Übersicht zu allen Berechnungen mit den unterschiedlichen Parametervariationen

Name	Gasmodellierung	Wärmeübergang	Diffusionskoeffizient	Referenzdichte	Elementzahl	Netzauflösung in Wandnähe
CFX grob	Ideales Gas	Adiabatisch	0 m <sup>2</sup> /s	1 kg/m <sup>3</sup>	32.538	Grob
CFX mittel	Ideales Gas	Adiabatisch	0 m <sup>2</sup> /s	1 kg/m <sup>3</sup>	76.512	Grob
CFX fein	Ideales Gas	Adiabatisch	0 m <sup>2</sup> /s	1 kg/m <sup>3</sup>	309.452	Grob
CFX ideal	Ideales Gas	Adiabatisch	0 m <sup>2</sup> /s	1 kg/m <sup>3</sup>	130.107	Fein
CFX Redl.-Kwong	Redlich-Kwong	Adiabatisch	0 m <sup>2</sup> /s	1 kg/m <sup>3</sup>	130.107	Fein
CFX Alpha	Redlich-Kwong	$\alpha = 5 \text{ W/Km}^2$	0 m <sup>2</sup> /s	1 kg/m <sup>3</sup>	130.107	Fein
CFX Diffusion	Redlich-Kwong	$\alpha = 5 \text{ W/Km}^2$	Nach Schirmer (siehe Gleichung 3)	1 kg/m <sup>3</sup>	130.107	Fein
CFX Ref.-Density	Redlich-Kwong	$\alpha = 5 \text{ W/Km}^2$	0 m <sup>2</sup> /s	0,02 kg/m <sup>3</sup>	130.107	Fein

In Abb. 2.1-6 ist das Ergebnis einer CFX-Simulation dargestellt. Im oberen Bereich wird Wasserdampf in den THAI-Behälter eingelassen, so dass sich dort eine Dampfschicht bildet. Weiterhin sind in der Abbildung die Messstellen eingezeichnet, an denen der Druck oder die Temperatur gemessen werden. In der vorliegenden Untersuchung wird der Zeitverlauf dieser Messwerte zwischen Simulation und Experiment verglichen. Im Folgenden wird zunächst die Untersuchung zur Gitterunabhängigkeit der CFX-Simulation diskutiert.

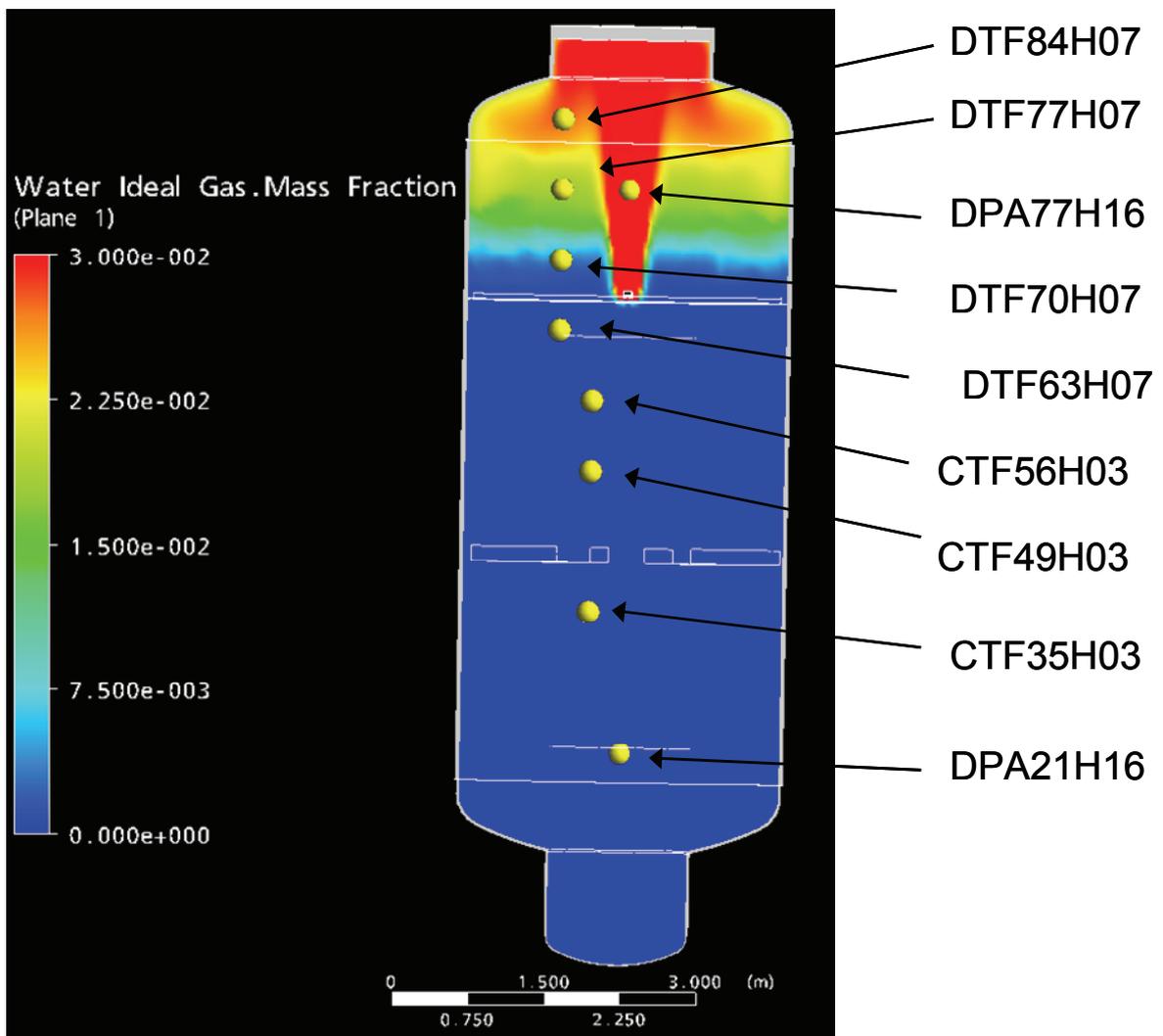


Abb. 2.1-6 Ergebnis einer CFX-Simulation und Darstellung Messstellen im THAI-Behälter

### 2.1.3 Durchführung einer Gitterstudie

Zur Analyse der Diskretisierungsfehler wurden drei Berechnungen mit unterschiedlicher Elementzahl durchgeführt (32.538, 76.512 und 309.452 Elemente, siehe Abb. 2.1-1). Diese werden im Folgenden erläutert.

#### 2.1.3.1 Diskretisierungsfehler bei der Druckberechnung

In Abb. 2.1-7 ist dargestellt, welchen Einfluss die Elementzahl auf den berechneten Druck im THAI-Behälter hat. Es zeigt sich, dass die Unterschiede für die drei Berechnungen gering sind. Die Berechnungen mit 76.512 und 32.538 Elementen weichen zum Zeitpunkt  $t = 400$  s um 0,01 bar bzw. 0,02 bar von der Berechnung mit maximaler Elementzahl ab (siehe auch Tab. 2.1-3). Die Berechnung des Drucks zeigt also eine geringe Sensitivität auf Veränderungen der Elementzahl.

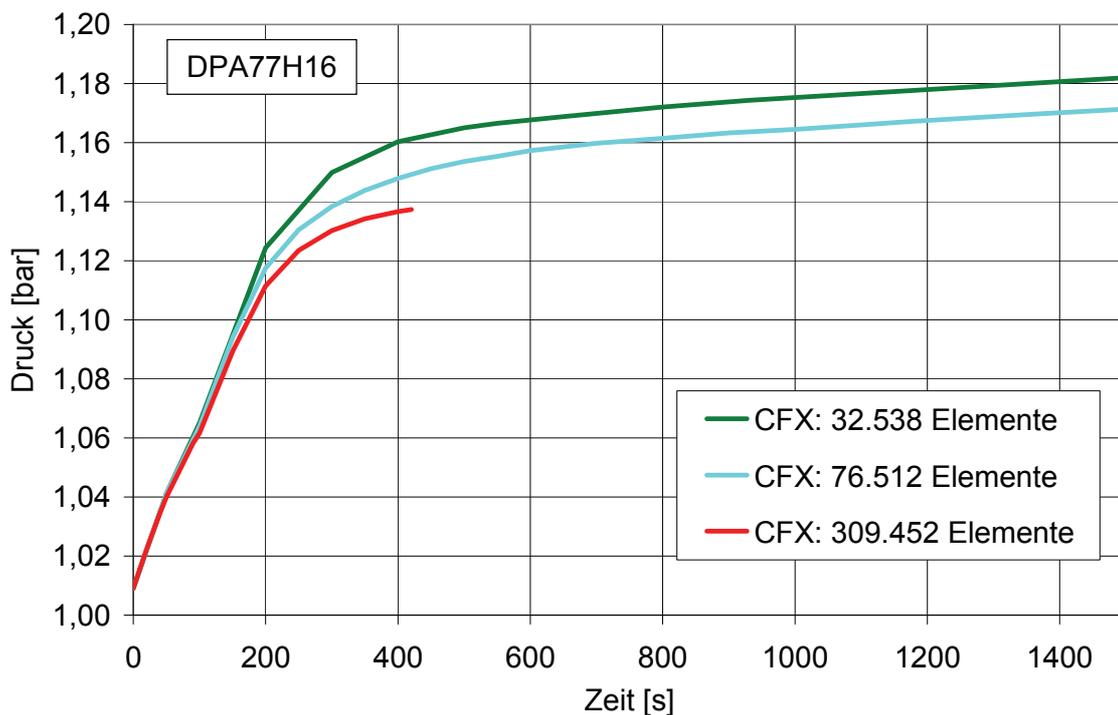


Abb. 2.1-7 Einfluss der Elementzahl auf den berechneten Druckverlauf

Tab. 2.1-4 Analyse der Diskretisierungsfehler für die Zielgröße Druck

Druck (DPA77H16)	309.452 Elemente	76.512 Elemente	32.538 Elemente
Absoluter Diskreti- sierungsfehler	0 bar (per Definition)	0,01 bar	0,02 bar

### 2.1.3.2 Diskretisierungsfehler bei der Temperaturberechnung

In den Abb. 2.1-8 sind die berechneten Temperaturverläufe in einer Höhe von 8,4 m für die drei unterschiedlichen Gitterfeinheiten dargestellt. Insgesamt zeigen sich geringe Unterschiede bei den berechneten Temperaturen. Die Berechnungen mit 32.538 und 76.512 Elementen weichen im Mittel um 0,8 °C bzw. 1,6 °C von der Berechnung mit 309.452 Elementen ab (siehe auch Tab. 2.1-4). Hierbei wurden über 4 verschiedene Messpunkte (in 8,4 m / 7,0 m / 5,6 m und 3,5 m Höhe) und zwei Zeitpunkte (200 s und 400 s) gemittelt. Damit zeigt die Berechnung der Temperatur genau wie beim Druck eine geringe Sensitivität auf die Gitterfeinheit. Für die im Folgenden geschilderte Untersuchung der Modellfehler wird aus diesem Grund eine mittlere Netzfeinheit von 76.512 Elementen als ausreichend erachtet.

Im weiteren Verlauf der Analysen wurde trotzdem noch eine Verfeinerung dieses Gitters in der Nähe der Wände vorgenommen, um den Wärmeübergang zwischen Behälteratmosphäre und Behälterwand richtig wiederzugeben. Diese Verfeinerung führte letztendlich zu einem Gitter mit insgesamt 130.107 Elementen (siehe auch Abb. 2.1-2), welches für die im Folgenden beschriebenen Analysen verwendet wurde.

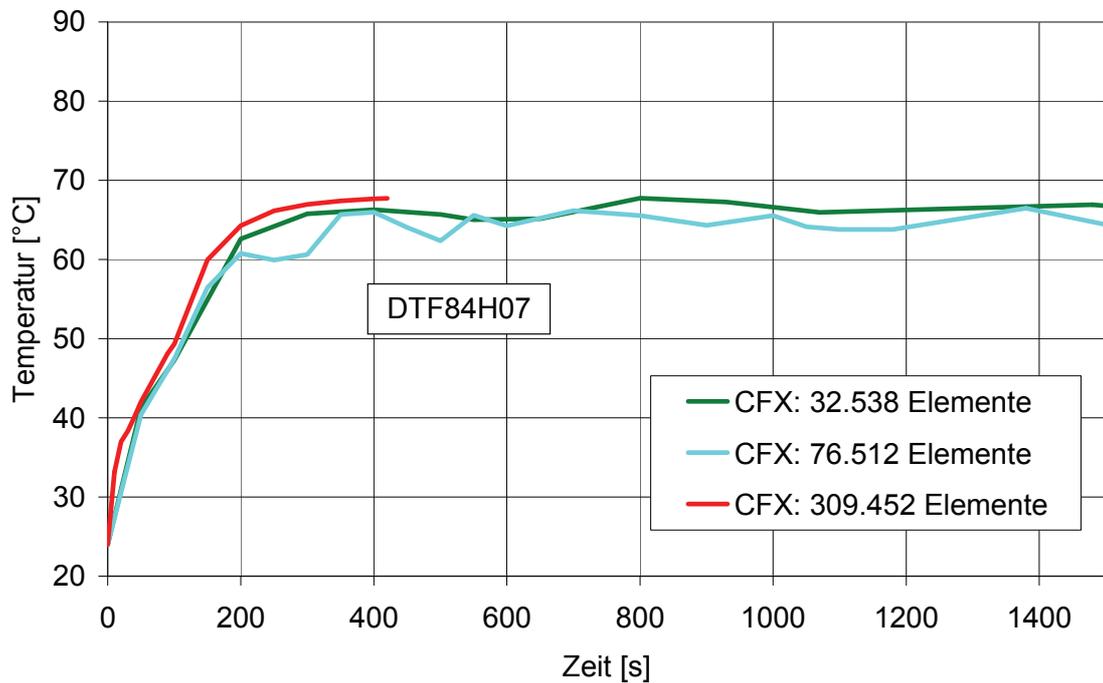


Abb. 2.1-8 Einfluss der Elementzahl auf den berechneten Temperaturverlauf in 8,4 m Höhe

Tab. 2.1-5 Start- und Randbedingungen für die CFX-Simulation. Analyse der mittleren Diskretisierungsfehler für die Zielgröße Temperatur im Zeitintervall von 0 s bis 400 s

Temperatur	309.452 Elemente	76.512 Elemente	32.538 Elemente
Absoluter Diskretisierungsfehler	0 °C (per Definition)	0,83 °C	1,57 °C

### 2.1.3.3 Analyse der Berechnungsdauer

In Abb. 2.1-9 ist der Einfluss der Elementzahl auf die Berechnungsdauer dargestellt. Hierbei können die ersten 400 Sekunden der Simulation bewertet werden, da die Rechnung mit 309.452 Elementen sehr hohe Berechnungszeiten hatte. Wie sich zeigt, so steigt die benötigte Rechenzeit linear mit der Elementzahl an. Während die Berech-

nung mit 32.538 Elementen 6,0 CPU-Tage für 400 s Versuchszeit benötigt, so braucht die Berechnung der gleichen Versuchszeit mit dem Modell mit 309.452 Elementen schon 59,8 CPU-Tage.

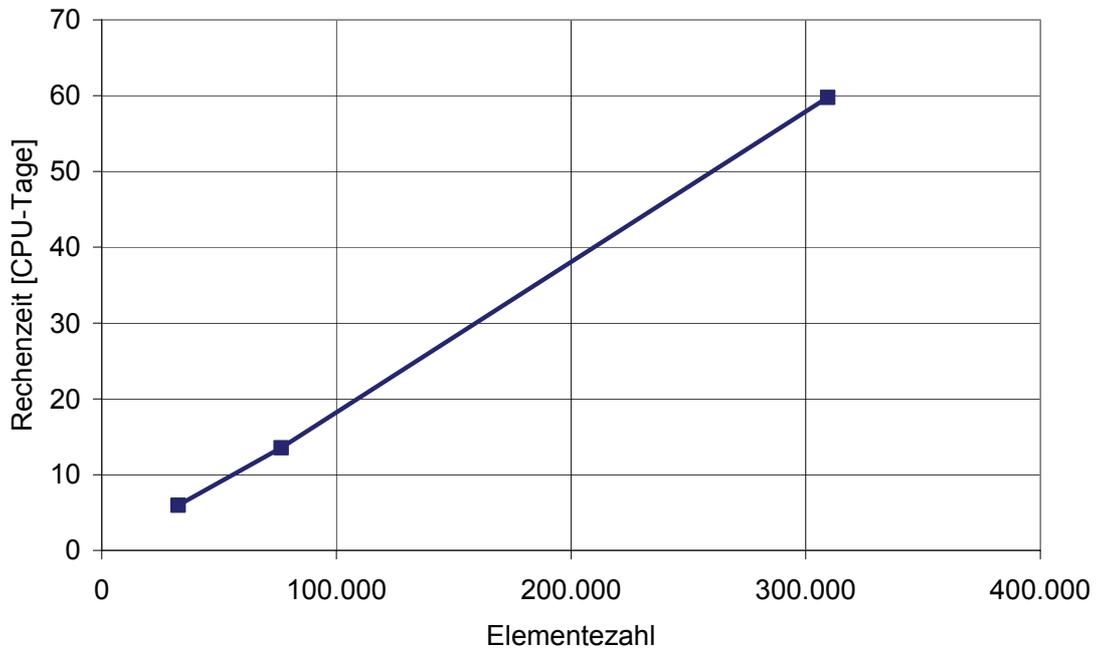


Abb. 2.1-9 Einfluss der Elementzahl auf die Berechnungsdauer der ersten 400 s des Experiments

In Abb. 2.1-10 wird die benötigte Rechenzeit dem ermittelten relativen Diskretisierungsfehler der Zielgröße Druck gegenübergestellt. Hier zeigt sich, dass dieser schon bei kleinen Elementzahlen gering ist, so dass aufgrund dieses Diskretisierungsfehlers auch keine zwingende Notwendigkeit für die Verwendung einer größeren Elementzahl besteht. Dieses müsste auch durch eine deutliche Erhöhung der Berechnungsdauer erkauft werden.

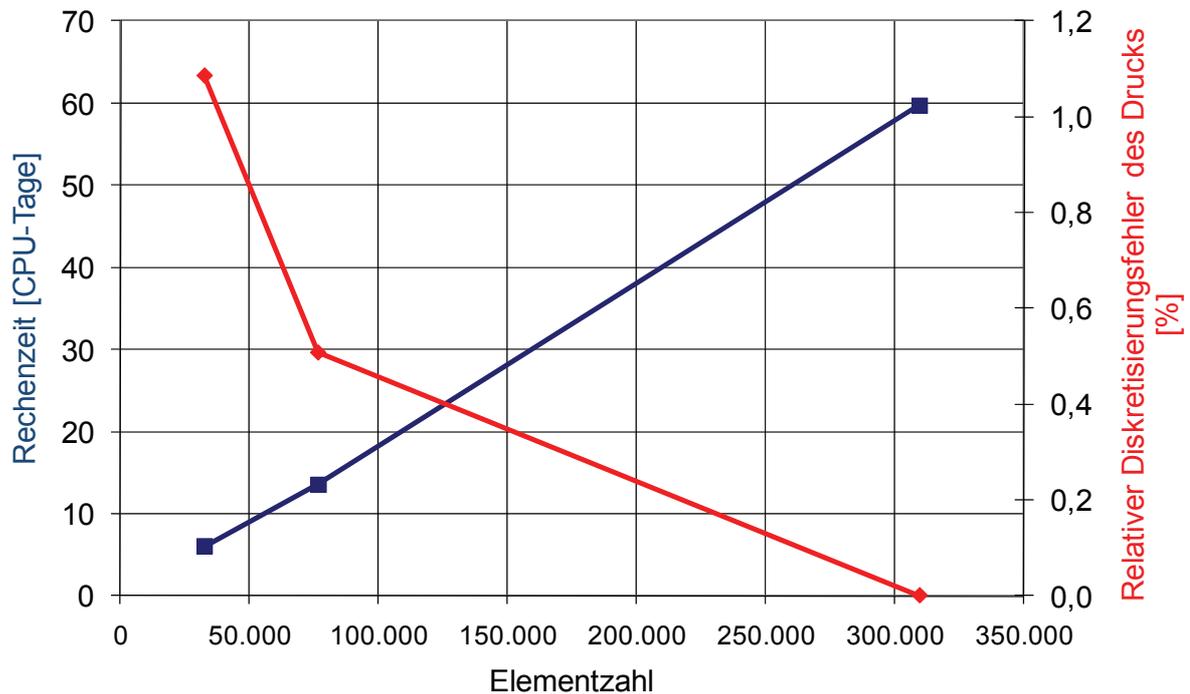


Abb. 2.1-10 Vergleich der Berechnungsdauer mit dem relativen Diskretisierungsfehler für die Zielgröße Druck

#### 2.1.4 Analyse des Einflusses von Berechnungsparametern

In den folgenden Abschnitten wird der Einfluss des GRS-Kondensationsmodells, des Gasmodells, des Wärmeübergangskoeffizienten an der Behälteraußenseite und der Referenzdichte untersucht.

##### 2.1.4.1 Einfluss des Kondensationsmodells

Um den Einfluss des Kondensationsmodells zu untersuchen, wurden zwei Berechnungen mit und ohne das GRS-Kondensationsmodell durchgeführt. Eine ausführliche Beschreibung dieses GRS-Kondensationsmodells findet sich in /HET 05/.

In Abb. 2.1-11 ist das Ergebnis dieser Berechnungen dargestellt und wird mit den experimentellen Ergebnissen verglichen. Hier zeigt sich, dass in der Berechnung ohne Kondensationsmodell der Druck im THAI-Behälter sehr schnell ansteigt und wesentlich über dem experimentell ermittelten Druck liegt. Ursache für diesen Druckanstieg ist das

Fehlen der Druckabsenkung durch die Kondensation des Wasserdampfes. Der Kondensationsprozess hat also einen wesentlichen Einfluss auf die vorliegende Problemstellung. Wie sich in der Abbildung zeigt, liegt der Druck bei der Berechnung mit dem GRS-Kondensationsmodell deutlich näher an den experimentellen Werten als bei der Berechnung ohne Kondensationsmodell. Die mittlere Dicke des ersten Fluid-Elements an den Behälterwänden beträgt bei dem verwendeten Gitter (das mit 130.107 Elementen) etwa 2 cm. Für diese Start- und Randbedingungen scheint die Berechnung des Kondensationsprozesses mit dem GRS-Modell zu plausiblen Ergebnissen zu führen. Bevor auf eine genaue quantitative Analyse der Modellfehler eingegangen wird, wird im Folgenden zunächst der qualitative Einfluss von weiteren Simulationsparametern auf die Berechnung untersucht.

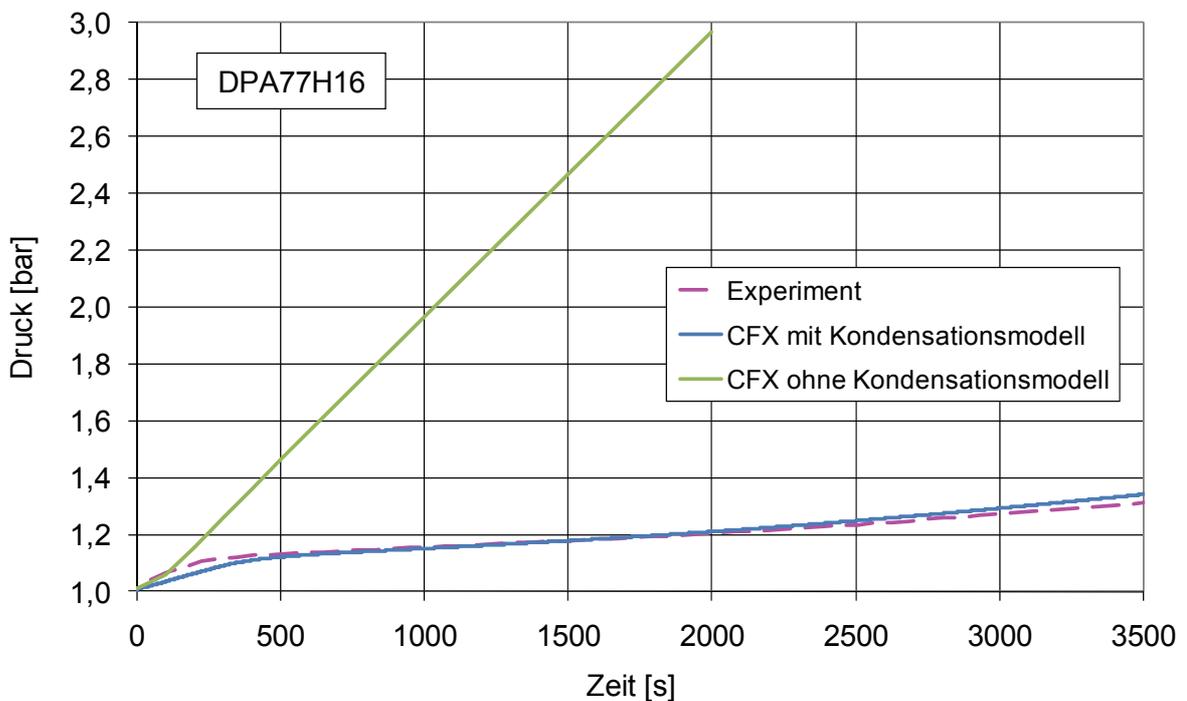


Abb. 2.1-11 Zeitlicher Verlauf des Drucks im THAI-Behälter

#### 2.1.4.2 Einfluss der Gasmodellierung

Einer der analysierten Simulationsparameter ist das verwendete Gasmodell. Um den Einfluss dieses Gasmodells auf die Berechnung der Zielgrößen Druck und Temperatur zu ermitteln, wurden zwei Berechnungen mit unterschiedlichen Gasmodellen durchgeführt. Bei einer Berechnung wurde angenommen, dass der Dampf ein ideales Gas ist

(siehe Gleichung 1). Da diese Annahme das reale Verhalten von Wasserdampf nicht ganz korrekt wiedergibt, wurde bei einer weiteren Berechnung das Redlich-Kwong-Modell als Ansatz für ein reales Gas verwendet (siehe Gleichung 2).

$$\text{Ideales Gasgesetz: } p \cdot V = n \cdot R \cdot T \quad (1)$$

$$\text{Zustandgleichung nach Redlich-Kwong: } \left( p + \frac{a}{\sqrt{T}V(V+b)} \right) \cdot (V - b) = R \cdot T \quad (2)$$

Für die im THAI-Behälter vorhandene Luft wurde ausschließlich das ideale Gasgesetz verwendet, da diese Annahme das Verhalten von Luft mit hinreichender Genauigkeit beschreibt. Ansonsten waren alle weiteren Parameter in den beiden Berechnungen gleich (siehe Tab. 2.1-1 und Tab. 2.1-2).

In Abb. 2.1-12 ist der Einfluss des verwendeten Gasmodells auf den berechneten Druck dargestellt. Es zeigt sich, dass die mit dem Redlich-Kwong Ansatz berechneten Druckwerte insgesamt etwas kleiner sind als die mit dem idealen Gasgesetz berechneten Werte. Die Werte des realen Gases liegen damit auch näher an der Kurve der experimentellen Daten.

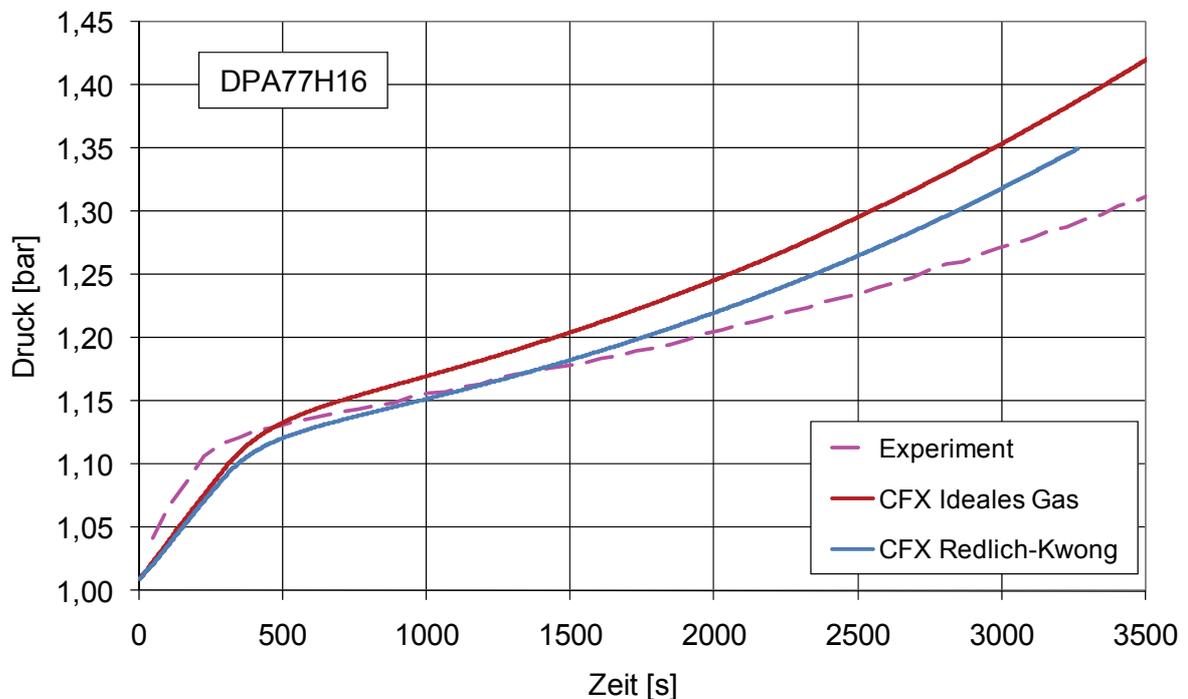


Abb. 2.1-12 Einfluss des Gasmodells auf den berechneten Druck

In Abb. 2.1-13 ist der Einfluss des verwendeten Gasmodells auf das berechnete Temperaturprofil zum Zeitpunkt  $t = 3000$  s dargestellt. Hierbei ist die lokale Temperatur gegen die Höhe der Messstelle im THAI-Behälter aufgetragen. Die Temperaturwerte des Redlich-Kwong-Gases liegen insgesamt leicht unterhalb der Werte für das ideale Gas. Im Vergleich zu den experimentellen Daten bleiben die Unterschiede jedoch groß.

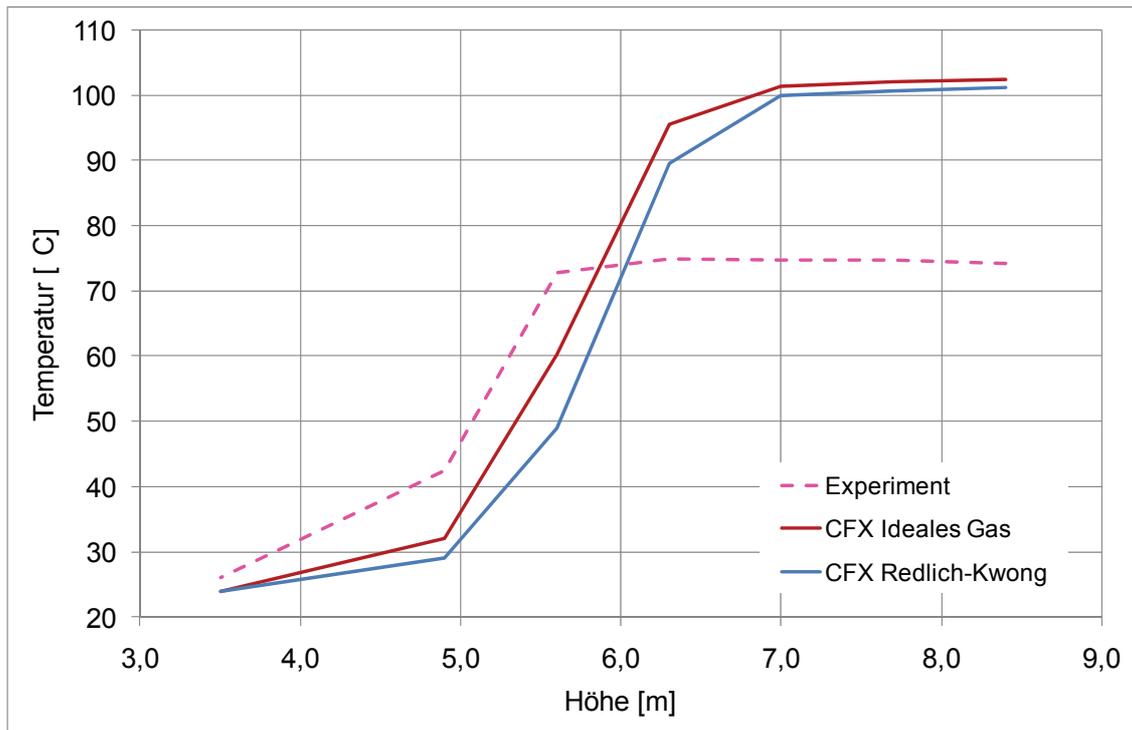


Abb. 2.1-13 Einfluss des Gasmodells auf das berechnete Temperaturprofil zum Zeitpunkte  $t = 3000$  s

### 2.1.4.3 Einfluss des Wärmeübergangskoeffizienten

In den bisherigen Analysen wurde von adiabaten Randbedingungen ausgegangen. Dieses entspricht der Annahme, dass die Isolierung um den THAI-Behälter perfekt ist und keinerlei Wärme nach außen verloren geht. Im Experiment wurde jedoch ein Wärmeverlust aus dem THAI-Behälter festgestellt, dessen Höhe jedoch nicht exakt quantifiziert werden konnte. Basierend auf einer COCOSYS-Analyse wurde der mittlere Wärmeverlust mit einem Wärmeübergangskoeffizienten  $\alpha = 5$  W/Km<sup>2</sup> beschrieben. Der Wert wurde eher klein gewählt, um den Effekt der Wärmeabgabe nicht zu überschätzen.

In Abb. 2.1-14 werden die Berechnung mit adiabatischen Randbedingungen und die Berechnung mit Wärmeverlusten miteinander verglichen. Wie zu erwarten liegt die Druckkurve mit Wärmeverlusten unterhalb der Kurve mit adiabaten Randbedingungen. Der Abstand beider Kurven wächst im Laufe der Zeit und zwar mit zunehmender Temperatur an der Behälteraußenseite. Die Kurve mit einem Wärmeübergangskoeffizienten von  $\alpha = 5 \text{ W/Km}^2$  liegt näher an den experimentellen Ergebnissen als die Kurve mit den adiabatischen Randbedingungen.

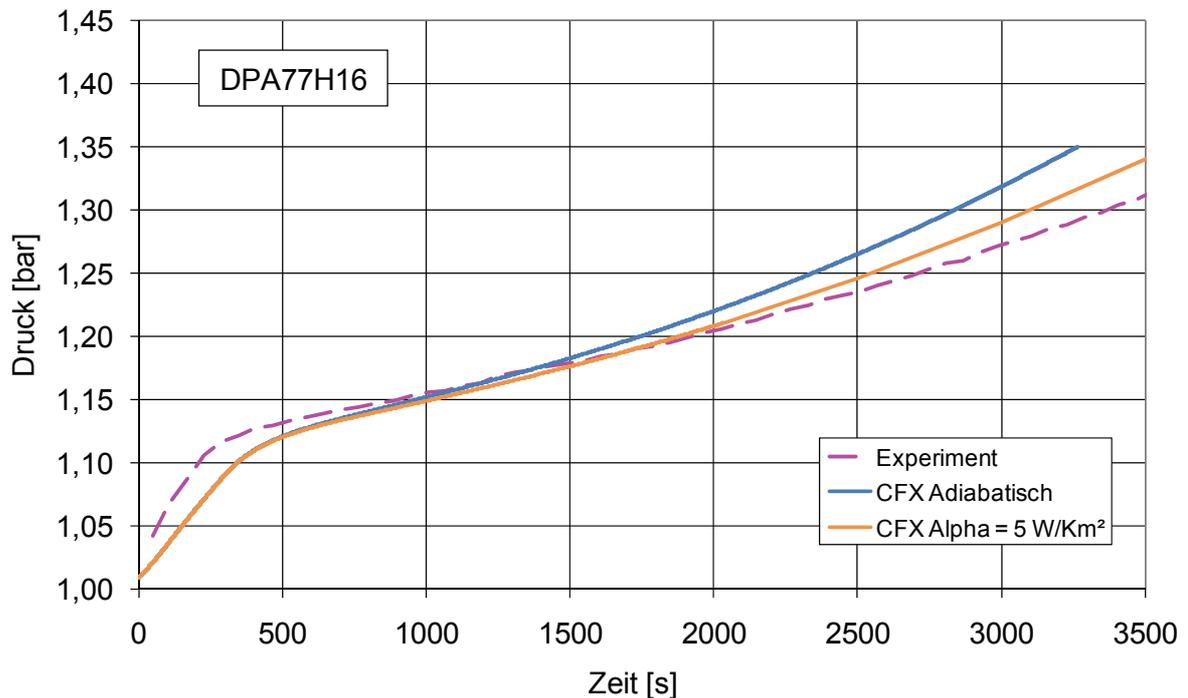


Abb. 2.1-14 Einfluss der Modellierung der Wärmeabgabe auf den berechneten Druckverlauf

In Abb. 2.1-15 werden die Temperaturprofile der beiden Berechnungen miteinander verglichen. Hier zeigt es sich, dass die Berechnung mit Wärmeübergang insgesamt zu etwas niedrigeren Temperaturen führt. Hieraus ergibt sich aber weder eine deutlich Verbesserung der Übereinstimmung noch eine Verschlechterung.

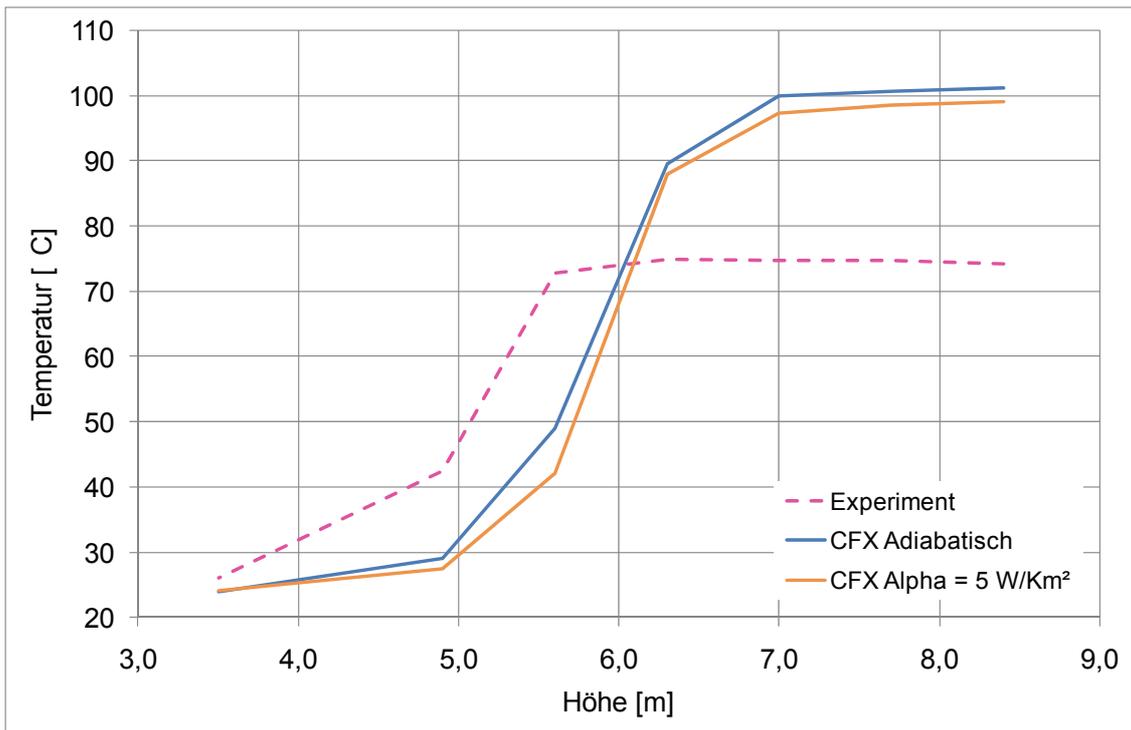


Abb. 2.1-15 Einfluss der Modellierung der Wärmeabgabe auf das berechnete Temperaturprofil

#### 2.1.4.4 Einfluss von Diffusionsprozessen

Auch die Diffusion von Dampf durch die Luft der Behälteratmosphäre kann einen Einfluss auf die Verteilung des Dampfes haben. Nach Schirmer /SCHI 38/ ist der Diffusionskoeffizient für Wasserdampf in Luft abhängig von der Temperatur:

$$D(T) = 2,3 \cdot 10^{-5} \frac{m^2}{s} \left( \frac{T}{273,15 K} \right)^{1,81} \quad (3)$$

Um den Einfluss der Diffusion auf die berechneten Ergebnisse zu prüfen, wurden zwei Berechnungen durchgeführt, eine ohne Diffusion ( $D = 0 \text{ m}^2/\text{s}$ ) und eine mit dem Diffusionskoeffizienten nach Schirmer. In Abb. 2.1-16 wird der Einfluss der Diffusion auf den berechneten Druckverlauf dargestellt. Es zeigt sich, dass der Druck bei der Berechnung mit Diffusion leicht unter der Berechnung ohne Diffusion liegt. Ursache hierfür könnte sein, dass der Dampf durch die Diffusion schneller an die kalten Behälterwände gelangt als ohne Diffusion. Entsprechend zeigt sich in Abb. 2.1-17, dass auch die Temperaturen bei der Berechnung mit Diffusion etwas niedriger sind als bei der Be-

rechnung ohne Diffusion. Die geänderten Temperaturwerte liegen dabei hauptsächlich in Höhe der Luft/Dampf-Grenze zwischen 5 m und 7 m.

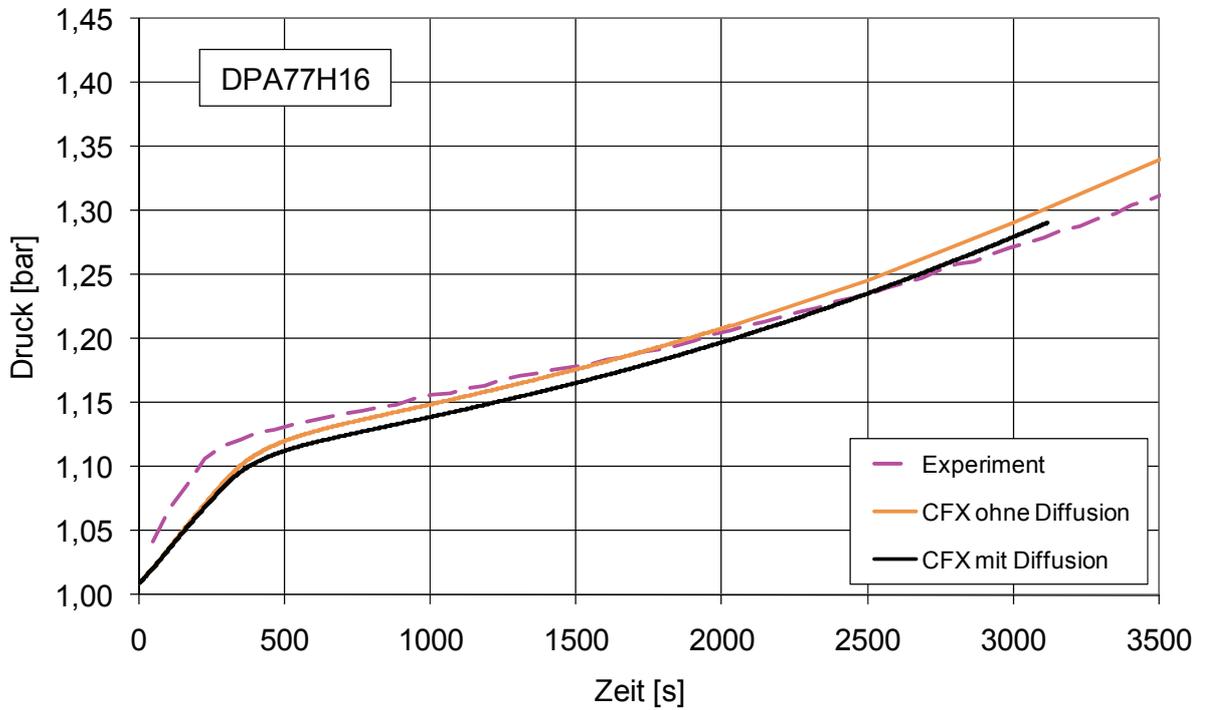


Abb. 2.1-16 Einfluss der Diffusion auf den berechneten Druckverlauf

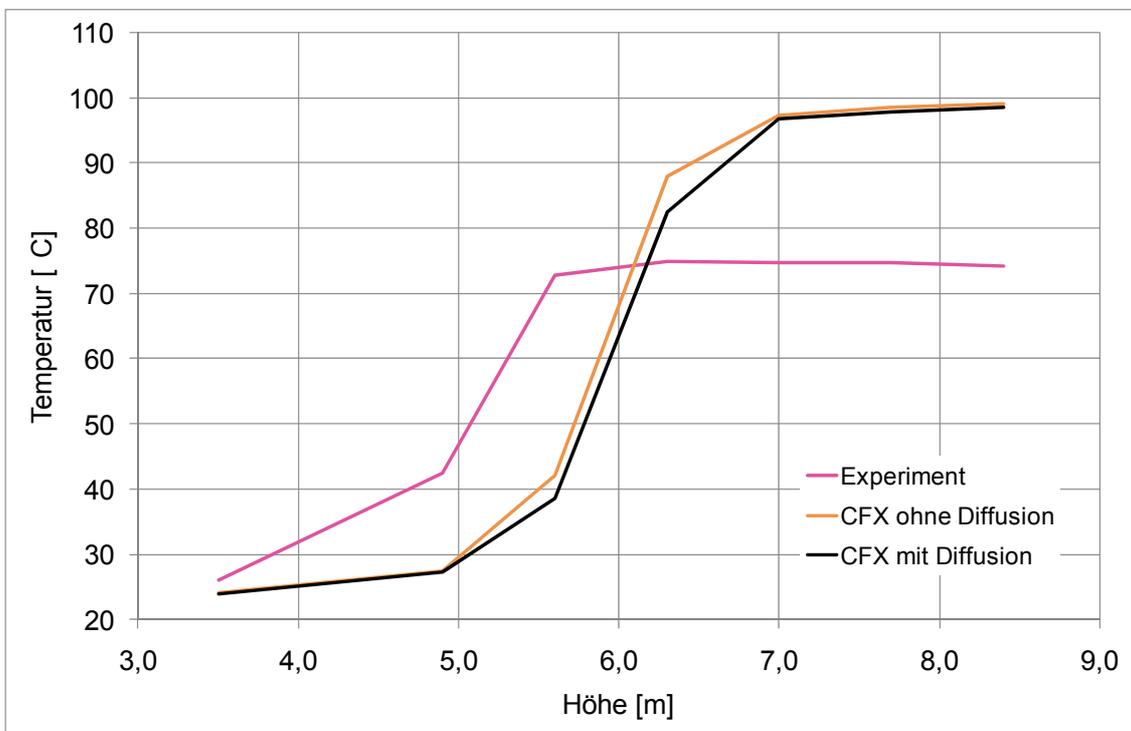


Abb. 2.1-17 Einfluss der Diffusion auf das berechnete Temperaturprofil (t = 3000 s)

#### 2.1.4.5 Einfluss von Referenzwerten

Bei den bisherigen Berechnungen konnte zwar der Druckverlauf, nicht aber das Temperaturprofil durch CFX korrekt wiedergegeben werden. Hier scheint noch ein Problem in der Berechnung der Auftriebskräfte zu bestehen. Ein Simulationsparameter, der in die Berechnung der Auftriebskraft einfließt, ist die so genannte Referenzdichte  $\rho_{ref}$ . Diese fließt sowohl als Quellterm in die Impulsgleichung als auch in die Druckberechnung mit ein:

$$\text{Quellterm in der Impulsgleichung: } S_{M,buoy} = (\rho - \rho_{ref})g \quad (4)$$

$$\text{Druckberechnung: } p_{abs} = p + p_{ref} + \rho_{ref}g(r - r_{ref}) \quad (5)$$

Um die Sensitivität der Berechnungsergebnisse auf diesen Simulationsparameter zu untersuchen, wurden zwei Berechnungen mit unterschiedlicher Referenzdichte ( $1,0 \text{ kg/m}^3$  und  $0,02 \text{ kg/m}^3$ ) durchgeführt. Von den beiden genannten Werten liegt der Wert  $1,0 \text{ kg/m}^3$  nahe an der mittleren Dichte im THAI-Behälter, der zweite Wert entspricht dem der Dichte von Dampf in Sättigung bei niedrigen Temperaturen (ca.  $24 \text{ }^\circ\text{C}$ ). Nach Angaben von Ansys ist die Wahl der Referenzdichte nahe der mittleren Dichte ( $1,0 \text{ kg/m}^3$ ) besser. Da die Referenzdichte kein physikalischer Wert ist, sondern ein numerischer Parameter, kann dieses nicht überprüft werden. Das Ergebnis der Berechnung ist in Abb. 2.1-18 dargestellt. Eine Verringerung der Referenzdichte von  $1,0 \text{ kg/m}^3$  auf  $0,02 \text{ kg/m}^3$  führt zu einem etwas flacheren Temperaturgradienten. Die Werte dieser Berechnung liegen etwas näher an den experimentellen Temperaturwerten. Es besteht also eine gewisse Sensitivität auf diesen Berechnungsparametern bei der Temperaturberechnung. Da der Wert  $0,02 \text{ kg/m}^3$  eher unphysikalisch klein ist, muss die gezeigte Sensitivität vorsichtig bewertet werden. Auf den berechneten Druckverlauf zeigt die Referenzdichte jedoch keinen Einfluss.

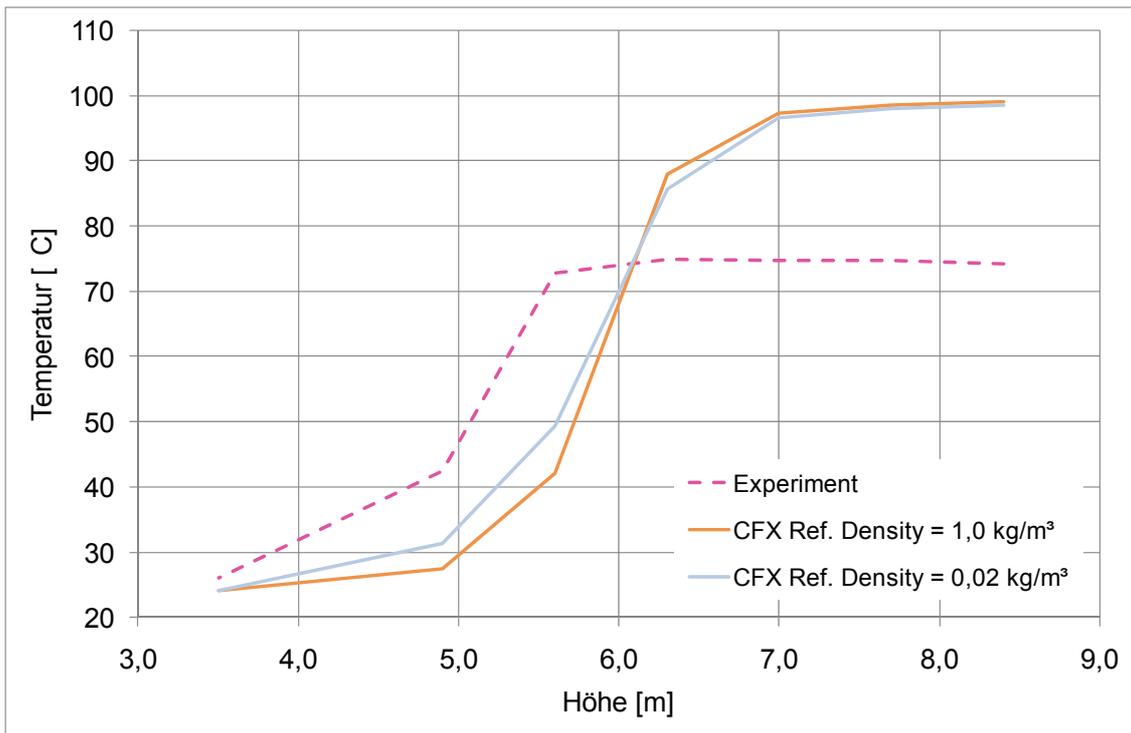


Abb. 2.1-18 Einfluss der Referenzdichte auf das berechnete Temperaturprofil

#### 2.1.4.6 Detaillierter Vergleich mit experimentellen Daten und einer COCOSYS Simulation

Im folgenden Abschnitt werden die mit CFX berechneten Werte detailliert mit den experimentellen Daten und mit einer COCOSYS-Rechnung verglichen. Hierzu wird die Rechnung verwendet, die sich in den vorausgegangenen Parameteranalysen als beste Berechnung erwiesen hat. Es handelt sich hierbei um die Berechnung mit einem Gitter mit 130.107 Elementen, mit dem Kondensationsmodell, mit der Zustandsgleichung von Redlich-Kwong, mit einer Referenzdichte von  $1,0 \text{ kg/m}^3$ , ohne Diffusion und mit einem Wärmeverlust des THAI-Behälters von  $\alpha = 5 \text{ W/Km}^2$ . Weiterhin werden die Daten noch mit einer COCOSYS-Rechnung verglichen.

In Abb. 2.1-19 findet sich zunächst ein Vergleich des CFX-Druckverlaufes mit experimentellen Daten und mit der COCOSYS-Berechnung. Hier zeigt sich eine gute Übereinstimmung der CFX-Berechnung mit den experimentellen Daten. Ähnlich gut wiedergegeben wird der Druckverlauf auch durch die COCOSYS-Berechnung.

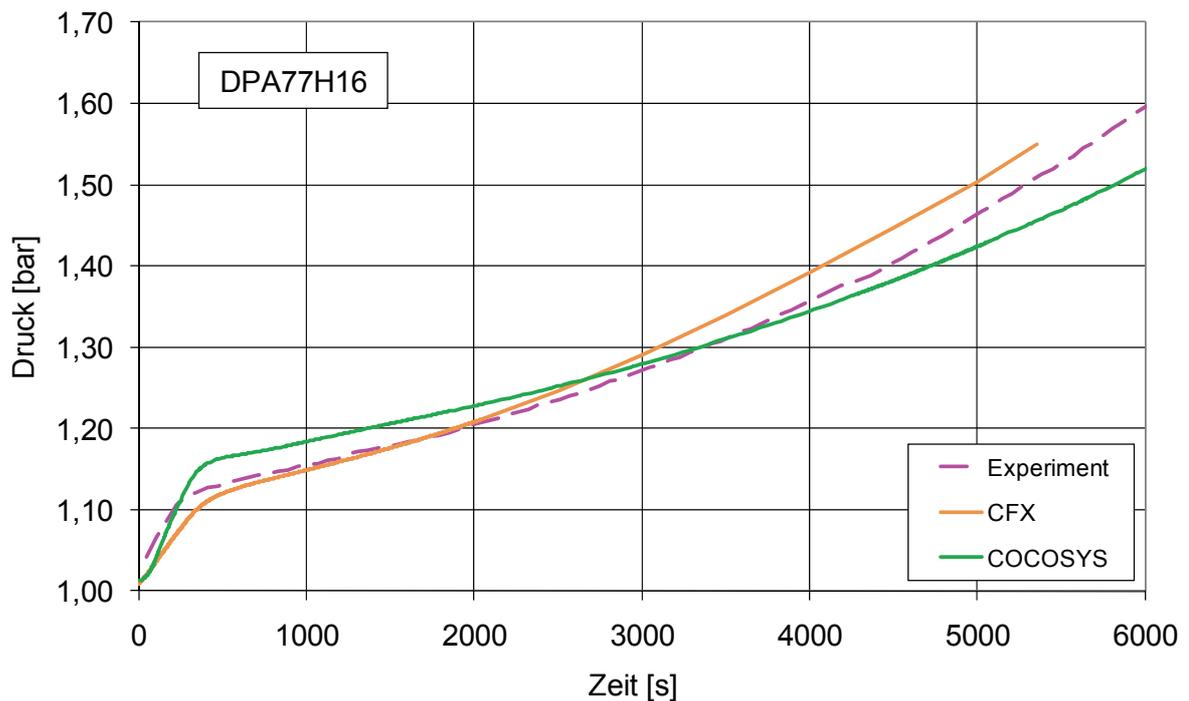


Abb. 2.1-19 Vergleich des von CFX und von COCOSYS berechneten Druckverlaufes

In Abb. 2.1-20 ist der Temperaturverlauf in 8,4 m Höhe dargestellt. Es zeigt sich, dass sich hier im oberen Behälter aus der CFX-Berechnung deutlich höhere Temperaturen ergeben, als sie experimentell gemessen werden. Insgesamt liegt hier ein Offset von über 20 °C gegenüber den experimentellen Werten vor. Auch die COCOSYS-Berechnung ermittelt im Vergleich zum Experiment zu hohe Temperaturen, liegt aber an dieser Messstelle deutlich näher an den experimentellen Daten als die CFX-Berechnung. Ein ähnliches Bild ergibt der Temperaturverlauf in 7,0 m Höhe. Dieser ist in Abb. 2.1-21 dargestellt.

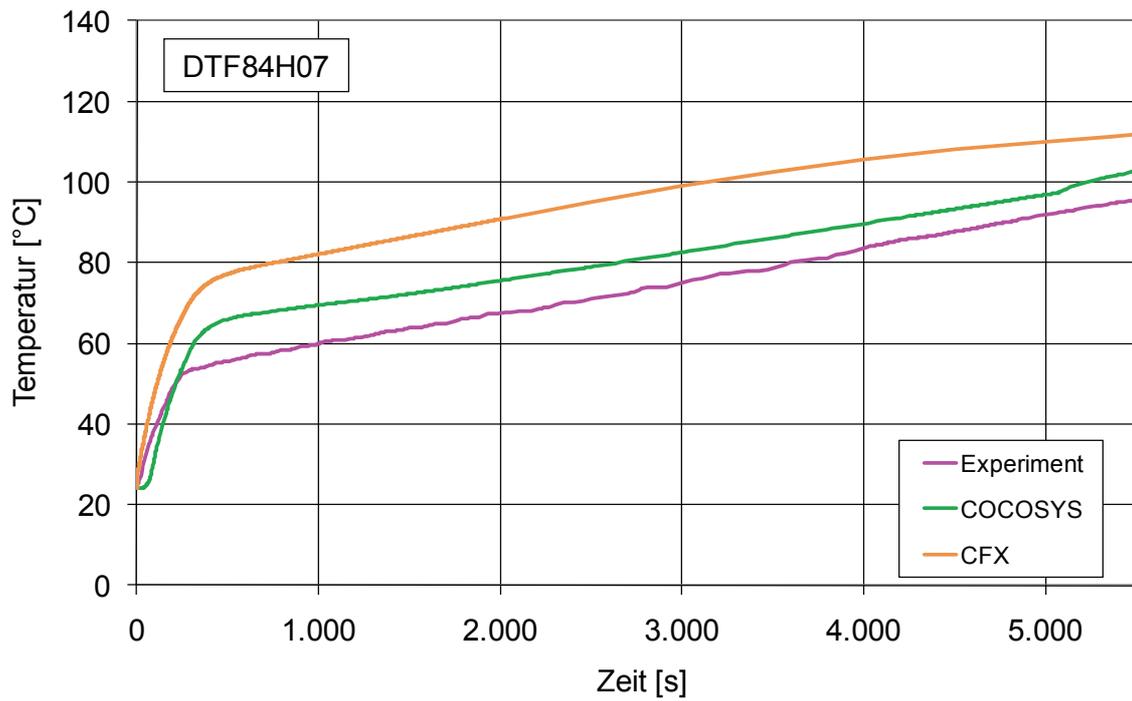


Abb. 2.1-20 Temperaturverlauf in 8,4 m Höhe (Messstelle DTF84H07)

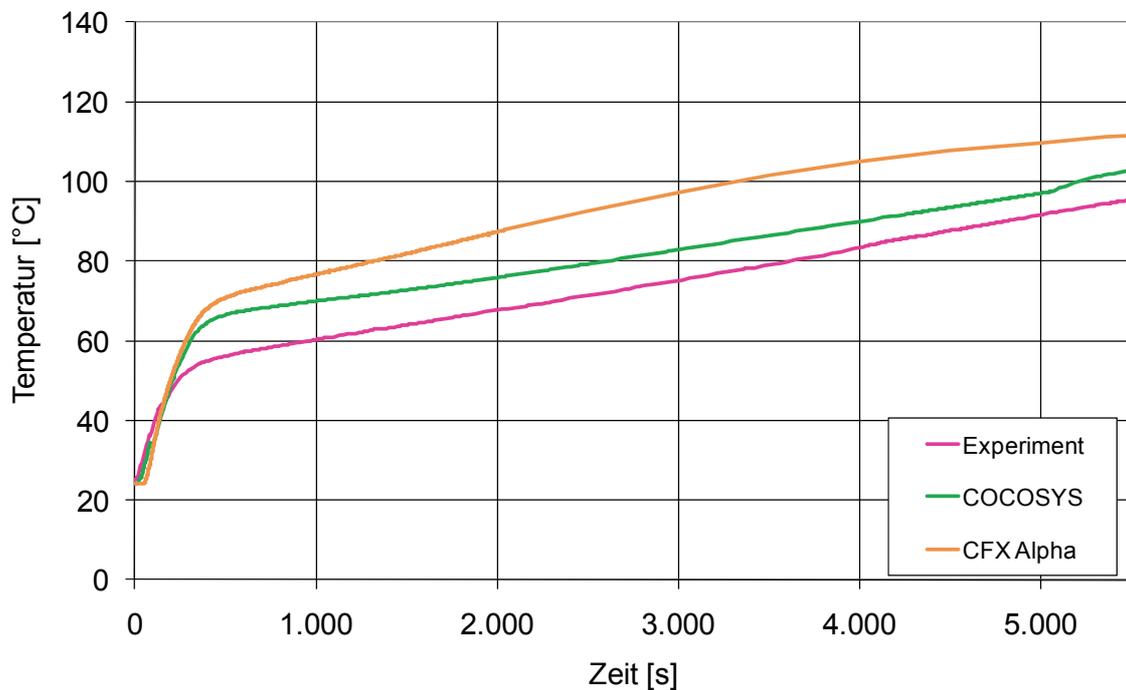


Abb. 2.1-21 Temperaturverlauf in 7,0 m Höhe (Messstelle DTF70H07)

In Abb. 2.1-22 ist der Temperaturverlauf in 6,3 m Höhe dargestellt. Es zeigt sich bis zum Zeitpunkt von  $t = 2000$  s eine relativ gute Übereinstimmung zwischen der CFX-

Berechnung und den experimentellen Daten. Für  $t > 2000$  s steigt die von CFX berechnete Temperatur an dieser Messstelle steiler an als die experimentellen Temperaturwerte. Die COCOSYS-Berechnung gibt den experimentellen Kurvenverlauf qualitativ gut wieder, liegt jedoch insgesamt etwa  $10$  °C unterhalb der experimentellen Werte.

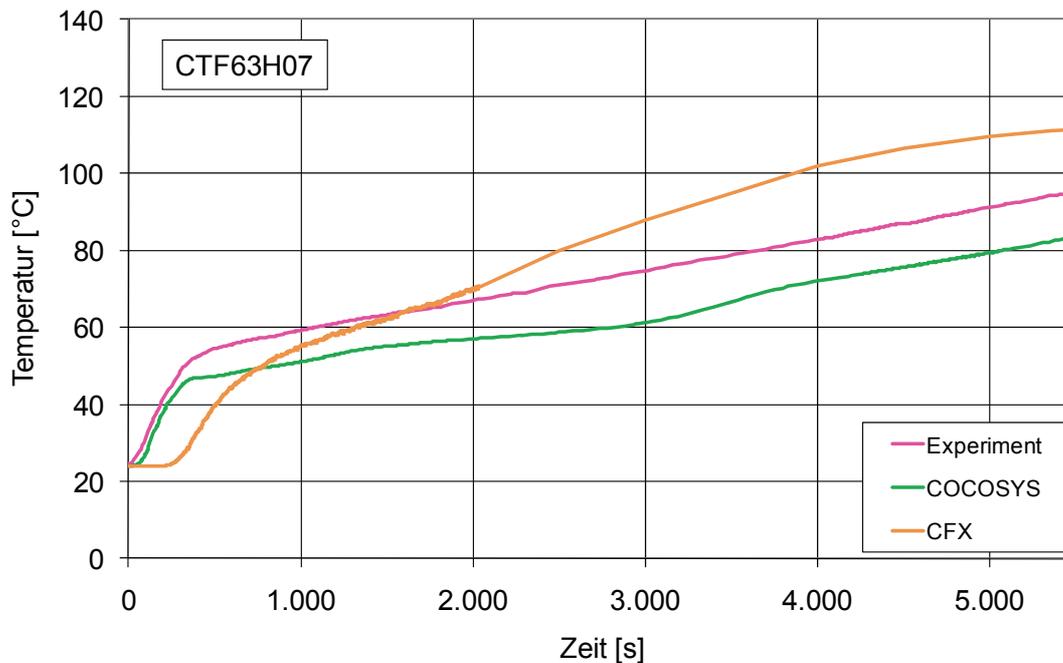


Abb. 2.1-22 Temperaturverlauf in 6,3 m Höhe (Messstelle CTF63H07)

Der Anstieg der Temperatur in 5,6 m Höhe wird weder von CFX noch von COCOSYS korrekt wiedergegeben (siehe Abb. 2.1-23). Die mit CFX berechneten Temperaturen steigen im Vergleich zu den experimentellen Werten verzögert an, erreichen aufgrund des steileren Temperaturanstiegs bei etwa 4500 s das Temperaturniveau des Experiments. Die von COCOSYS in dieser Höhe berechneten Temperaturwerte liegen deutlich zu niedrig im Vergleich zu den experimentellen Daten. Bei 5000 s liegt die Abweichung COCOSYS/Experiment in einer Größenordnung von etwa  $50$  °C.

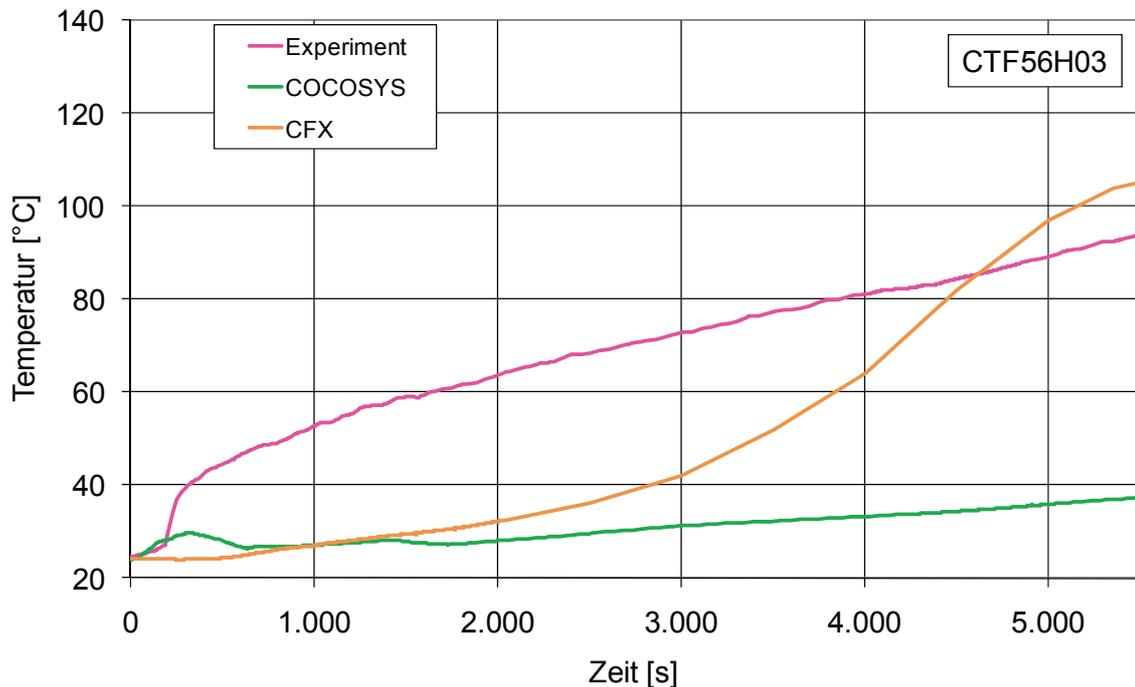


Abb. 2.1-23 Temperaturverlauf in 5,6 m Höhe (Messstelle CTF56H03)

In Abb. 2.1-24 ist der Temperaturverlauf in 4,9 m Höhe dargestellt. Hier liegen sowohl die CFX- als auch die COCOSYS-Berechnung unterhalb der experimentellen Werte. Die durch CFX berechnete Kurve liegt insgesamt jedoch noch näher an der experimentellen Kurve.

In Abb. 2.1-25 werden die von CFX und COCOSYS berechneten Temperaturprofile zu einem festen Zeitpunkt ( $t = 3000$  s) mit den experimentellen Daten verglichen. Hierzu wird die Temperatur gegen die Messposition (Höhe im THAI-Behälter) aufgetragen. Es zeigt sich, dass sowohl CFX als auch COCOSYS das Temperaturprofil nicht richtig wiedergeben. Die von CFX berechneten Temperaturwerte liegen im oberen Behälterbereich ( $z > 6$  m) deutlich zu hoch, während sie im unteren Behälter ( $z < 6,0$  m) zu niedrig sind. Die COCOSYS-Werte zeigen im oberen Behälterbereich eine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Daten, dafür ist ihre Abweichung im unteren Behälterbereich größer als bei der CFX-Berechnung.

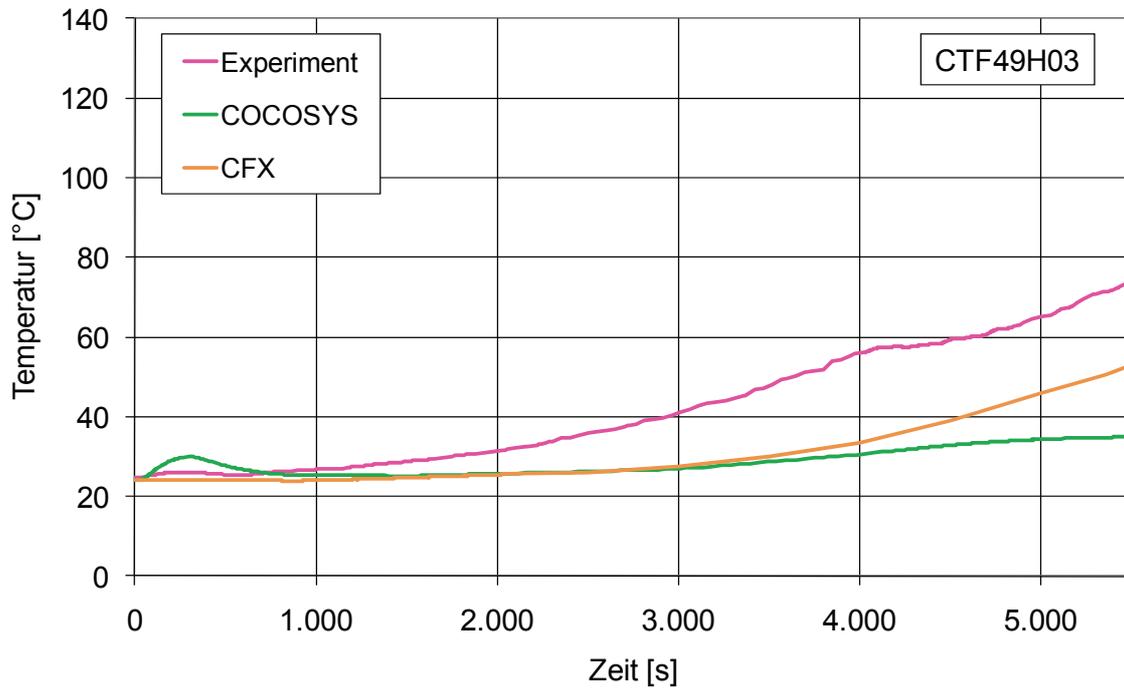


Abb. 2.1-24 Temperaturverlauf in 4,9 m Höhe (Messstelle CTF49H03)

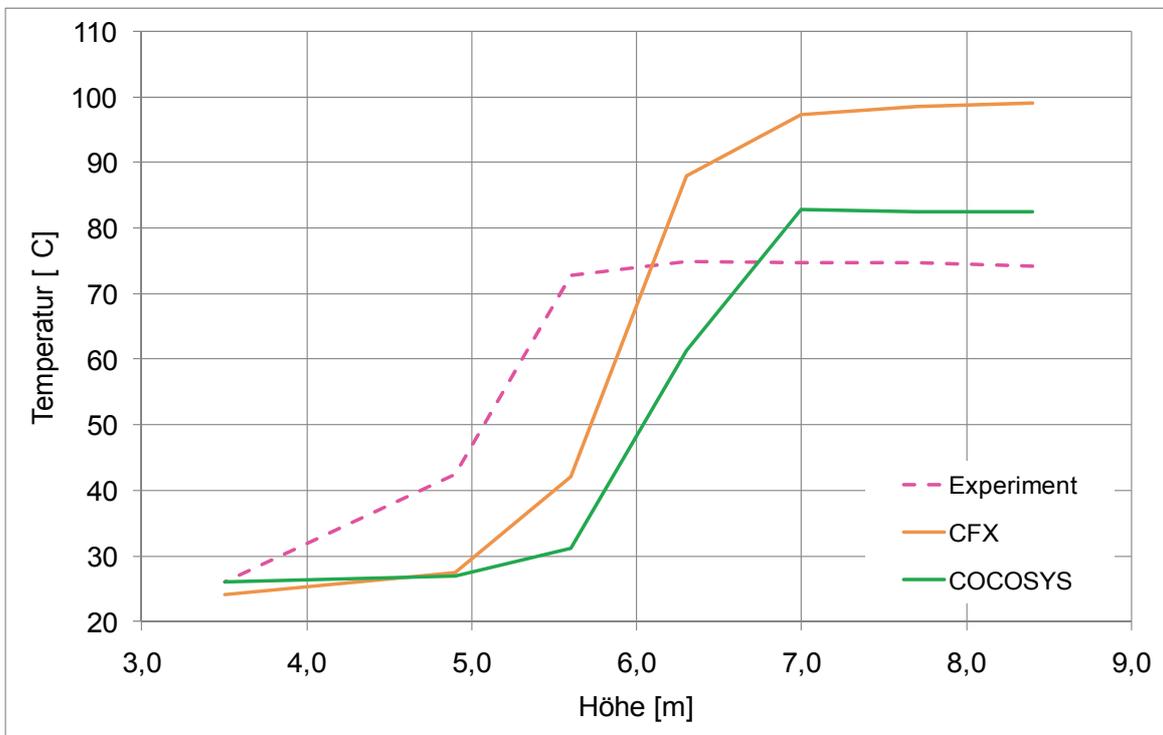


Abb. 2.1-25 Vergleich der von CFX und von COCOSYS berechneten Temperaturprofile zum Zeitpunkte  $t = 3000$  s

### 2.1.5 Bestimmung von Modellfehlern

Um die Abweichung zwischen den Simulationen mit unterschiedlichen Modellannahmen quantitativ zu bewerten, werden für die Größen Druck und Temperatur die gemittelten absoluten Modellfehler bestimmt. Der gemittelte absoluter Modellfehler  $F_{\text{Modell}}$  kann nach der Minimierung des Diskretisierungsfehlers aus der Differenz der Simulationsergebnisse zu den experimentellen Daten bestimmt werden.

$$\text{Für den Druck gilt: } \langle F_{\text{Modell}} \rangle = \frac{\sum |p_{\text{Modell}} - p_{\text{Experiment}}|}{N_{\text{Mess}}} \quad (6)$$

$$\text{Für die Temperatur gilt: } \langle F_{\text{Modell}} \rangle = \frac{\sum |T_{\text{Modell}} - T_{\text{Experiment}}|}{N_{\text{Mess}}} \quad (7)$$

Hierbei ist  $p_{\text{Modell}}$  der berechnete Druck und  $p_{\text{Experiment}}$  der experimentell ermittelte Druck. Das Gleiche gilt für die Temperaturen  $T$ .  $N_{\text{Mess}}$  bezeichnet die Anzahl an zu Grunde gelegten Messpunkten. Beim Druck sind dies sechs Messpunkte bei 500, 1000, 1500, 2000, 2500 und 3000 Sekunden. Bei der Temperatur werden die sieben Messstellen bei 3,5 m, 4,9 m, 5,6 m, 6,3 m, 7,0 m, 7,7 m und 8,4 m für die Bestimmung des Modellfehlers ausgewertet. In Tab.2.1-6 finden sich die Parameter der unterschiedlichen Modellannahmen für die der absoluten Modellfehler berechnet wird.

In Abb. 2.1-26 wird der Modellfehler des Druckes für die unterschiedlichen Berechnungen dargestellt und miteinander verglichen. Es zeigt sich, dass der Modellfehler bei allen Berechnungen des Druckes eher klein ist und unterhalb von 0,04 bar liegt. Die größte Abweichung zu den experimentellen Daten zeigt die Berechnung „CFX ideal“ mit  $F_{\text{Modell}} = 0,035$  bar und die beste Übereinstimmung mit dem Experiment zeigt die Berechnung „CFX Alpha“ mit einem Fehler von  $F_{\text{Modell}} = 0,008$  bar. Der Modellfehler für die COCOSYS-Berechnung liegt mit  $F_{\text{Modell}} = 0,020$  bar im mittleren Bereich.

Tab. 2.1-6 Parameter der einzelnen Simulationsrechnungen

Name	Gasmodellierung	Wärmeübergang	Diffusionskoeffizient	Referenzdichte
CFX ideal	Ideales Gas	Adiabatisch	0 m <sup>2</sup> /s	1 kg/m <sup>3</sup>
CFX Redl.-Kwong	Redlich-Kwong	Adiabatisch	0 m <sup>2</sup> /s	1 kg/m <sup>3</sup>
CFX Alpha	Redlich-Kwong	$\alpha = 5 \text{ W/Km}^2$	0 m <sup>2</sup> /s	1 kg/m <sup>3</sup>
CFX Diffusion	Redlich-Kwong	$\alpha = 5 \text{ W/Km}^2$	Nach Schirmer (siehe Gleichung 3)	1 kg/m <sup>3</sup>
CFX Ref.-Density	Redlich-Kwong	$\alpha = 5 \text{ W/Km}^2$	0 m <sup>2</sup> /s	0,02 kg/m <sup>3</sup>

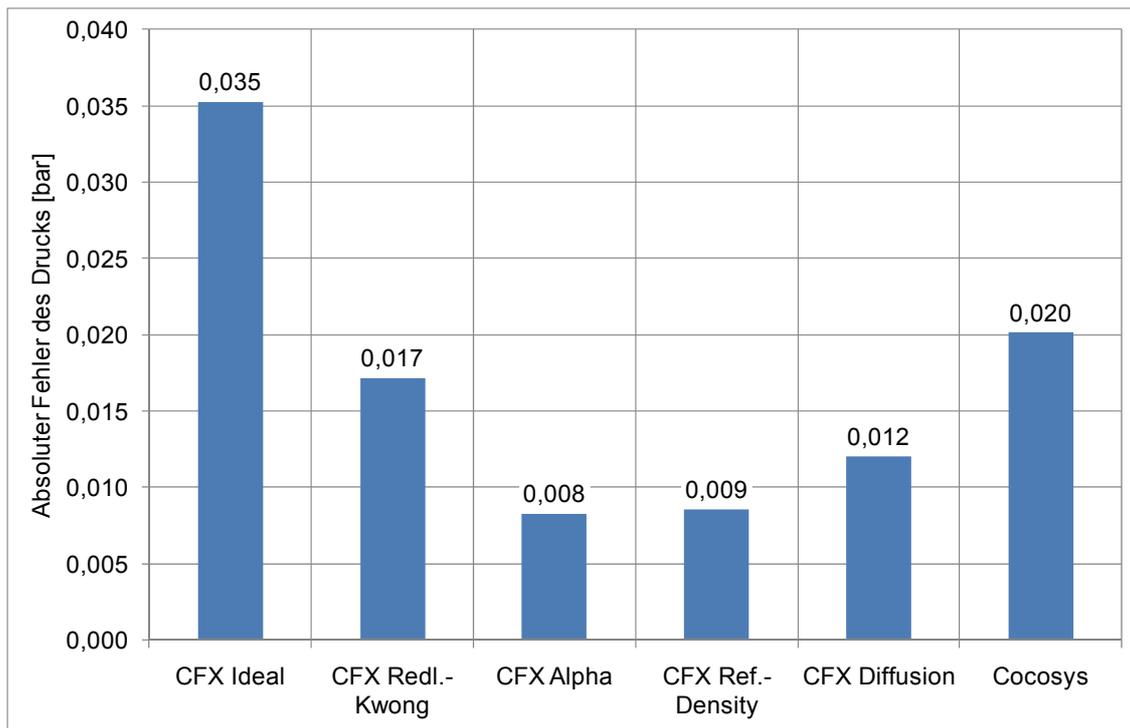


Abb. 2.1-26 Vergleich der Modellfehler bei der Berechnung des Druckes

In Abb. 2.1-27 werden die Modellfehler für die Berechnungsgröße Temperatur miteinander verglichen. Es zeigt sich, dass es bei allen Berechnungen eine große Abweichung zwischen den Simulationen und den experimentellen Ergebnissen gibt. Der mitt-

lere absolute Modellfehler liegt bei allen Berechnungen über 10 °C. Im Gegensatz zum Druckverlauf wird die Temperaturschichtung also nicht so gut wiedergegeben. Die COCOSYS-Berechnung zeigt mit  $F_{\text{modell}} = 13,6 \text{ °C}$  noch die geringste Abweichung zu den experimentellen Werten. Bei den CFX-Berechnungen haben die Berechnungen „CFX-Redlich-Kwong“ und „CFX-Alpha“ den größten Modellfehler ( $F_{\text{modell}} = 18,8 \text{ °C}$ ). Die beste CFX-Berechnung ist noch diejenige mit der geänderten Referenzdichte ( $F_{\text{modell}} = 16,7 \text{ °C}$ ). Insgesamt scheint bei allen Simulationen noch ein Problem bei der Berechnung von Auftrieb und Schichtungen zu bestehen.

Tab. 2.1-6 fasst noch mal alle wichtigen Berechnungsparameter und Modellfehler zusammen.

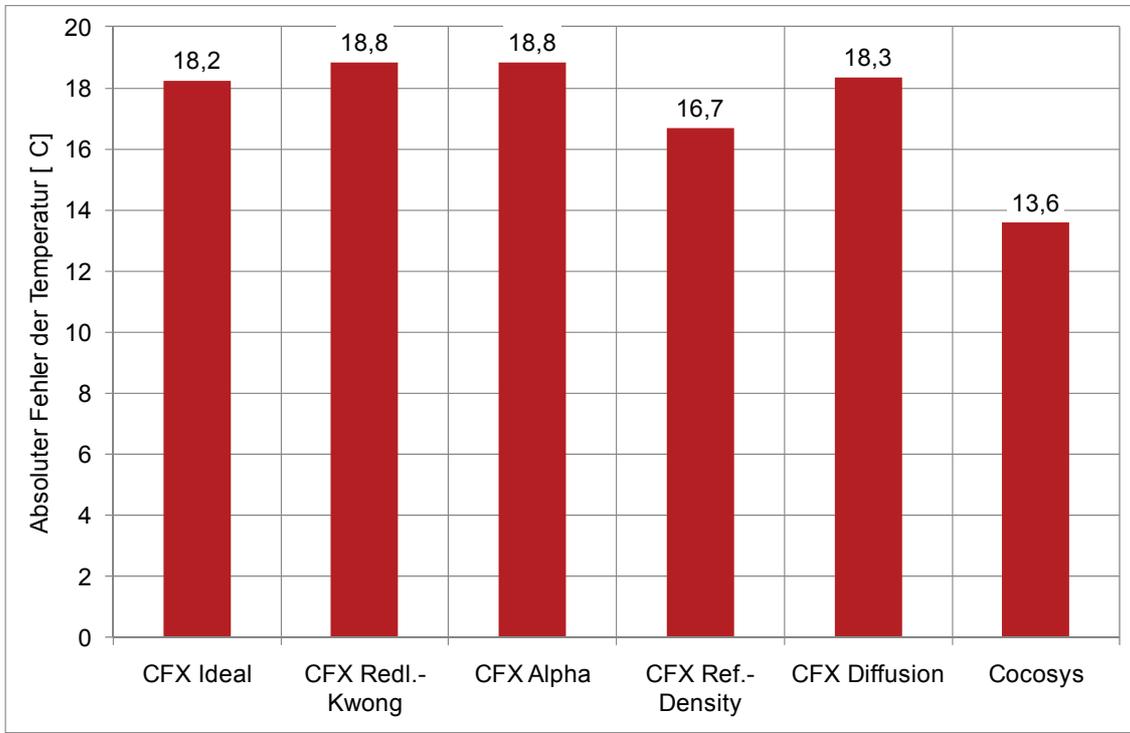


Abb. 2.1-27 Vergleich der Modellfehler bei der Berechnung der Temperaturen

Tab. 2.1-7 Vergleich der absoluten Modellfehler für unterschiedliche Modellannahmen

Modell	Mittlerer absoluter Fehler des Druckes [bar]	Mittlerer absoluter Fehler der Temperatur [°C]
CFX: <b>Ideales Gas</b> , adiabatisch, ohne Diffusion, Ref. Density = 1 kg/m <sup>3</sup>	0,035	18,2
CFX: <b>Redlich-Kwong</b> , adiabatisch, ohne Diffusion, Ref. Density = 1 kg/m <sup>3</sup>	0,017	18,8
CFX: Redlich-Kwong, <b>Alpha = 5 W/Km<sup>2</sup></b> , ohne Diffusion, Ref. Density = 1 kg/m <sup>3</sup>	0,008	18,8
CFX: Redlich-Kwong, Alpha = 5 W/Km <sup>2</sup> , <b>mit Diffusion</b> , Ref. Density = 1kg/m <sup>3</sup>	0,012	18,3
CFX: Redlich-Kwong, Alpha = 5 W/Km <sup>2</sup> , ohne Diffusion, <b>Ref. Density = 0,02 kg/m<sup>3</sup></b>	0,009	16,7
COCOSYS	0,020	13,6

### 2.1.6 Zusammenfassung und Fazit

Zur Validierung des GRS-Kondensationsmodells wurde der THAI-Versuch TH-2 nachgerechnet. Im Rahmen einer Gitterstudie wurde gezeigt, dass eine mittlere Anzahl von etwa 77.000 Elementen ausreicht, um die Diskretisierungsfehler bei der Druck- und Temperaturberechnung klein zu halten. Die Gitterstudie zeigt aber auch, dass mit zunehmender Elementzahl die Berechnungsdauer drastisch ansteigt und sehr detaillierte Berechnungen aus rein praktischen zeittechnischen Gründen unmöglich werden. Möglicherweise wurde bei der vorliegenden Gitterstudie noch eine Sensitivität der berechneten Dampfschichtdicke auf die Gitterfeinheit übersehen. Dieses ist in einer weiteren Analyse zu einem späteren Zeitpunkt noch zu prüfen.

Die Verwendung des GRS-Kondensationsmodells zur Berechnung des TH-2 Experiments führt insgesamt zu einer guten Wiedergabe des experimentellen Druckverlaufes. Dieses ist ein eindeutiger Hinweis darauf, dass die mit dem GRS-Modell berechnete Kondensationsrate richtig ist. Die Abbildung des experimentellen Temperaturprofils

durch die CFX-Berechnung zeigt im Vergleich zum Experiment noch gewisse Schwächen. So werden insbesondere die Temperaturen im oberen Bereich des THAI-Behälters überschätzt, während die CFX-Temperaturen im unteren Bereich zu niedrig sind. Hierfür sind unterschiedliche Ursachen denkbar:

- Vernachlässigung der Nebeltröpfchen (höhere Dichte) und/oder Vernachlässigung des Kondensatfilms an den Wänden im GRS-Kondensationsmodell. Eine Modellierung des Nebels und/oder des Kondensats könnte zu einem Transport von Energie von oben (im THAI-Behälter) nach unten führen.
- Vernachlässigung des Mannlochs im Deckelbereich: Die detaillierte Darstellung des Mannlochs hatte bei der Nachrechnung des TH-18 Experiments kaum Einfluss auf die Strömung gezeigt, deshalb wurde es auch bei den vorliegenden TH-2 Berechnungen vernachlässigt. Möglicherweise hat aber der damit verbundene höhere Wärmeübergangskoeffizient im Deckel des THAI-Behälters einen Einfluss auf das Temperaturprofil.
- Diskretisierungsfehler: Die Sensitivität des (räumlichen) Temperaturprofils auf die Gitterfeinheit in vertikaler Richtung ist noch nicht ausreichend aufgeklärt.

Im Rahmen der vorliegenden Analyse wurde der Einfluss unterschiedlicher Berechnungsparameter auf die Ergebnisse geprüft. Hierzu gehören das Gasmodell, die Wärmeabgabe des THAI-Behälters nach außen und die Referenzdichte. Es zeigt sich, dass die Berechnungen mit einem realen Gasmodell (Redlich-Kwong) und mit Berücksichtigung der Wärmeabgabe besser zu den experimentellen Daten passen. Auch die Einstellung der Referenzdichte und der Diffusion hat einen sichtbaren Einfluss auf das berechnete Temperaturprofil. Die Referenzdichte wurde in einem nicht-physikalischen Bereich variiert.

Für die unterschiedlichen Berechnungen wurde jeweils der gemittelte absolute Modellfehler bestimmt. Damit liegt auch ein quantitatives Maß zur Bewertung der verschiedenen Modellannahmen vor. Weiterhin ergeben sich aus den bisherigen Arbeiten noch die folgenden offenen Fragen:

- Warum werden das Temperaturprofil und damit auch die Dampfschichtung durch CFX (ähnlich wie auch bei COCOSYS) noch mit starken Abweichungen zum Experiment berechnet? Hier müssten die einzelnen, oben genannten möglichen Ursachen noch geprüft werden.

- Hat die verwendete Gitterfeinheit in vertikaler Richtung möglicherweise noch einen Einfluss auf die Temperaturschichtung und das Temperaturprofil bei diesen experimentellen Randbedingungen? Hierzu wäre eine noch detailliertere Gitterstudie notwendig.
- Welchen Einfluss hat das Turbulenzmodell auf die Berechnungsergebnisse? Erste vorläufige Analysen zeigen hier einen eher geringen Einfluss.

Diese Fragen gehen über die geforderten Arbeiten deutlich hinaus, sollten aber zu einem späteren Zeitpunkt untersucht werden.

## **2.2 Nachrechnung des Versuches VANAM M3**

### **2.2.1 Zielsetzung**

Ziel der Arbeiten in diesem Arbeitspunkt war eine weitere Validierung des GRS-Wand- und Volumenkondensationsmodells. Hierzu wurde das internationale Standardproblem ISP37 mit CFX nachgerechnet. Im dem Experiment wurde in einer größeren Mehrraumgeometrie, dem Battelle-Modell-Containment, eine Dampfeinspeisung ähnlich den Vorgängen in einem realen Containment durchgeführt /KAN 93/. Das Experiment wurde bereits 1992 durchgeführt und die Anlage ist inzwischen bereits rückgebaut. Damit sind auch keine Nachfragen mehr zu den Randbedingungen der Durchführung des Experiments möglich. Der Versuch wurde als internationales Standardproblem spezifiziert und dokumentiert /FIR 97/. Die Simulation und der Vergleich der CFX-Ergebnisse sowohl mit experimentellen Ergebnissen als auch mit einer COCOSYS-Rechnung zeigen inwieweit sich CFX (bei Anwendung des GRS-Kondensationsmodells) für eine Simulation von thermohydraulischen Vorgängen in einem Mehrraum-Containment eignet. Zur Bewertung der Ergebnisse wurde zusätzlich eine quantitative Analyse der Abweichungen zwischen Simulation und Experiment durchgeführt.

### **2.2.2 Geometrie und Randbedingungen**

Nachfolgend werden die verwendete Geometrie und die Randbedingungen für den Versuch VANAM M3 erläutert. In Abb. 2.2-1 ist ein Schnitt durch die mit Gridgen erstellte Geometrie des Battelle-Containments dargestellt. Bei dem für CFX-11 erstellten

Netz handelt es sich um ein hybrides Gitter (strukturiert und unstrukturiert) mit etwa 1,2 Millionen Elementen (siehe auch Abb. 2.2-2). Genaue Details zur verwendeten Geometrie finden sich in Tab. 2.2-1.

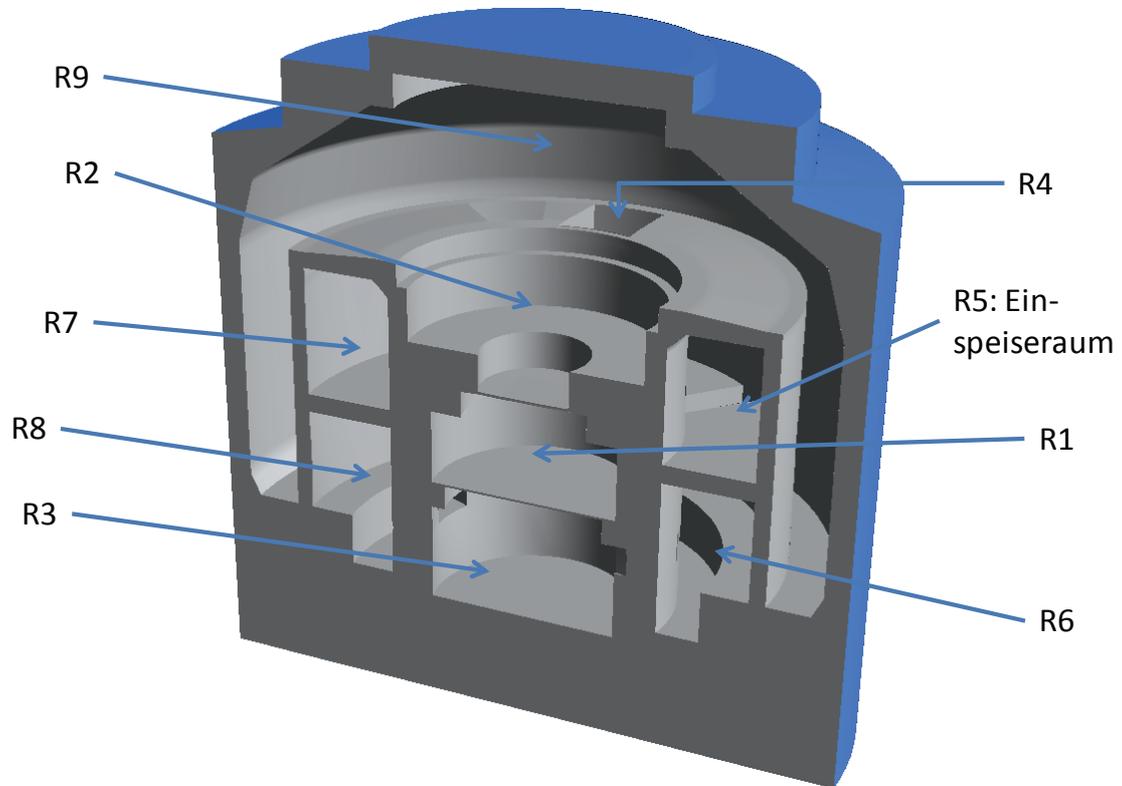


Abb. 2.2-1 Geometrie und Raumaufteilung im Battelle Modellcontainment

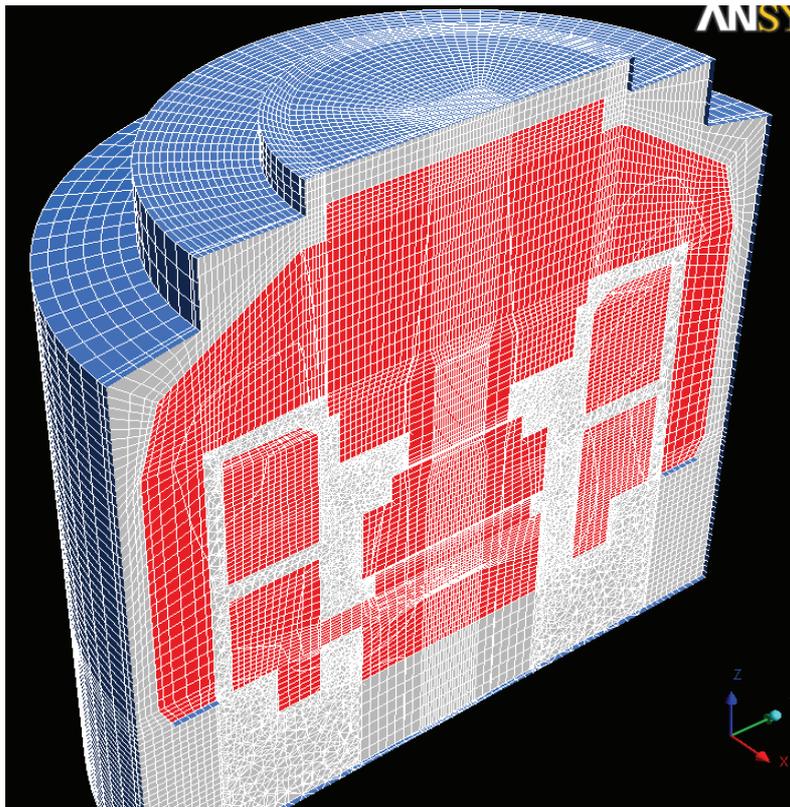


Abb. 2.2-2 Gitter des Battelle-Modell-Containments

Tab. 2.2-1 Details der verwendeten Geometrie

Domäne	Elementzahl	Volumen CFX-Rechnung
Fluid	283.167 Elemente	612,5 m <sup>3</sup>
Beton	898.449 Elemente	692,5 m <sup>3</sup>
Fluid/Beton Grenzfläche:		1062,6 m <sup>2</sup>

Für das Modellcontainment wurden zum Startzeitpunkt der Analyse bei  $t = 1,13$  h die Bedingungen entsprechend der Spezifikation gewählt. Der Druck betrug 1 bar und die mittlere Temperatur 25 °C. In der Simulation wurde das SST-Turbulenzmodell, für den Dampf ein (reales) Gasmodell nach Redlich-Kwong und für die Dampfdiffusion ein Diffusionskoeffizient nach Schirmer gewählt. Diese Eingabe nutzt die Erfahrungen aus der Simulation von TH-2.

Tab. 2.2-2 Start- und Randbedingungen für die CFX-Simulation

Startdruck	1 bar
Starttemperatur	25 °C
Turbulenzmodell	SST
Dampfmodell	Redlich-Kwong-Gas
Dampfdiffusionskoeffizient	Nach Schirmer: $D(T) = 2,3 \cdot 10^{-5} \frac{m^2}{s} \left( \frac{T}{273,15 K} \right)^{1,81}$
Simulationszeit	4100 s
Minimale Zeitschrittweite	0,01 s
Konvergenzkriterium	RMS < 1,0E-4

In Abb. 2.2-1 werden weiterhin auch die Bezeichnungen für die einzelnen Räume innerhalb des Modellcontainments dargestellt. Alle Einzelräume stehen durch Verbindungen untereinander in Kontakt. Raum 5 ist der Einspeiseraum, in den über ein Rohr Dampf in das Containment eingespeist wurde.).

Raum 9 kann in zwei Bereiche unterteilt werden; das sind der Dom im oberen Bereich und der Ringraum im seitlichen unteren Bereich. Im Experiment wurde hier im Ringraum Luft entnommen, um den Containmentdruck auf einen konstanten Wert zu regeln (siehe Tab. 2.2-4).

Bei ansteigendem Druck entwich im Experiment zusätzlich noch Luft durch einen Spalt in der Containmenthülle in die Umgebung. Diese Luftleckage wurde experimentell gemessen und auch sie wurde bei der Simulation berücksichtigt (siehe Tab. 2.2-5). Diese Randbedingungen in der CFX-Simulation entsprechen damit sowohl für die Dampf-einspeisung wie auch für die Luftentnahme bzw. Luftleckage der Versuchsspezifikation. Der exakte Ort und die genaue Menge der Leckage sind unbekannt.

Tab. 2.2-3 Dampfeinspeisung in Raum R5

<b>Zeit</b>		<b>Massenstrom R5</b>	<b>Enthalpie R5</b>	<b>Temperatur R5</b>
[h]	[s]	[kg/s]	[kJ/kg]	[°C]
1.13	0	0.000	2680	104
1.20	252	0.400	2680	104
1.50	1332	0.375	2703	119
1.51	1368	0.310	2703	119
2.00	3132	0.305	2696	114
2.20	3852	0.420	2714	127
2.50	4932	0.280	2714	127

Tab. 2.2-4 Luftentnahme aus Raum R9 (Ringraum)

<b>Zeit</b>		<b>Massenstrom R9</b>
[h]	[s]	[kg/s]
1.75	2232	0.000
1.80	2412	0.025
2.75	5832	0.024

Tab. 2.2-5 Luftleckage aus Raum R9 (Ringraum)

<b>Zeit</b>		<b>Massenstrom R9</b>
[h]	[s]	[kg/s]
1.13	0	0.000000
1.20	252	0.014840
2.74	5796	0.014840

### 2.2.3 Vergleich von Spezifikation und Messung

In der Simulation wurden – wie vorgesehen – die spezifizierten Werte aus dem ISP37 verwendet. In Abb. 2.2-3 ist ein Vergleich des spezifizierten und dem gemessenen Massenstroms in Raum R5 dargestellt. Hier zeigt sich, dass die Spezifikation von dem (durch eine Durchflussmessung an der Dampfleitung) gemessenen Massenstrom abweicht. Insbesondere beginnt die Dampfeinspeisung schon vor dem in der Spezifikation festgelegten Zeitpunkt ( $t = 1,13$  h). Dieses führt zu einer Abweichung zwischen den in der Simulation verwendeten Randbedingungen und den tatsächlich vorhandenen Bedingungen. Diese Abweichung wird bei der im Folgenden beschriebenen Analyse berücksichtigt und erläutert.

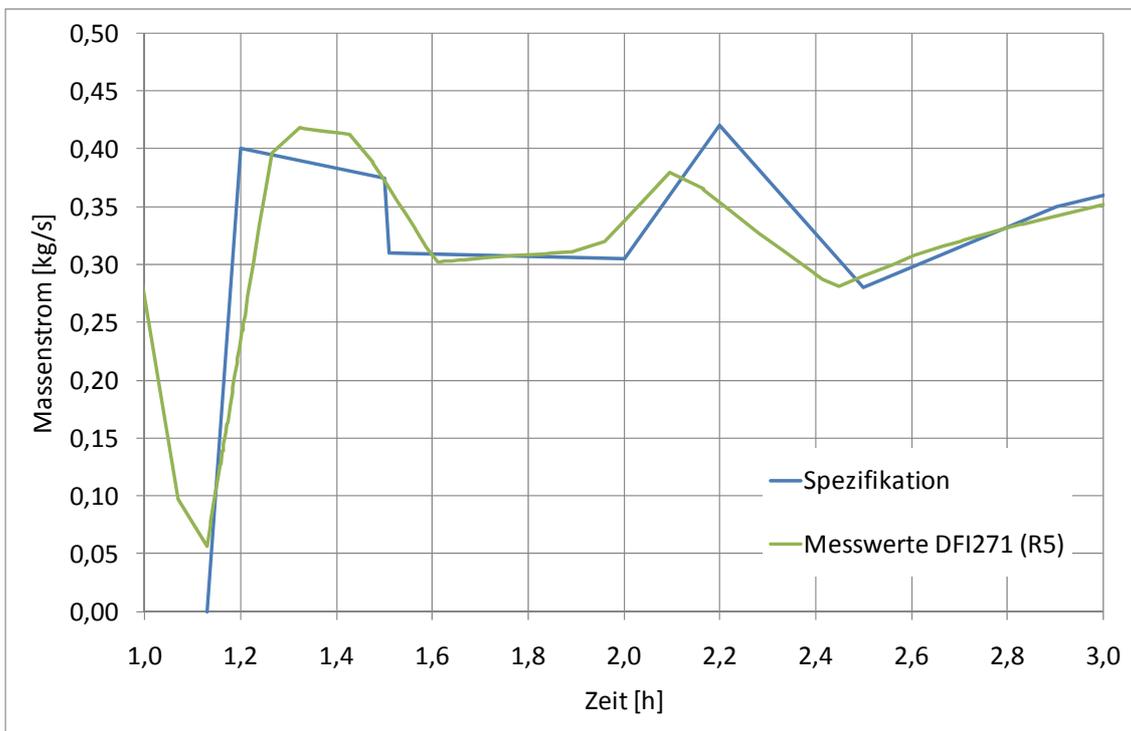


Abb. 2.2-3 Vergleich des spezifizierten und gemessenen Massenstroms in Raum R5

#### 2.2.4 Berechnung des Druckverlaufs

In Abb. 2.2-4 ist zunächst die Dampfkonzentration zum Zeitpunkt  $t = 2,27$  h dargestellt, der den Endpunkt der CFX Simulation darstellt. Durch die kontinuierliche Dampfeinspeisung im Einspeiseraum R5 sind sowohl im Einspeiseraum als auch insbesondere im Dom (Raum R9) die Dampfkonzentration und damit die Temperatur angestiegen. Hierdurch hat sich (trotz gleichzeitiger Luftentnahme) der Gesamtdruck des Modellcontainers erhöht.

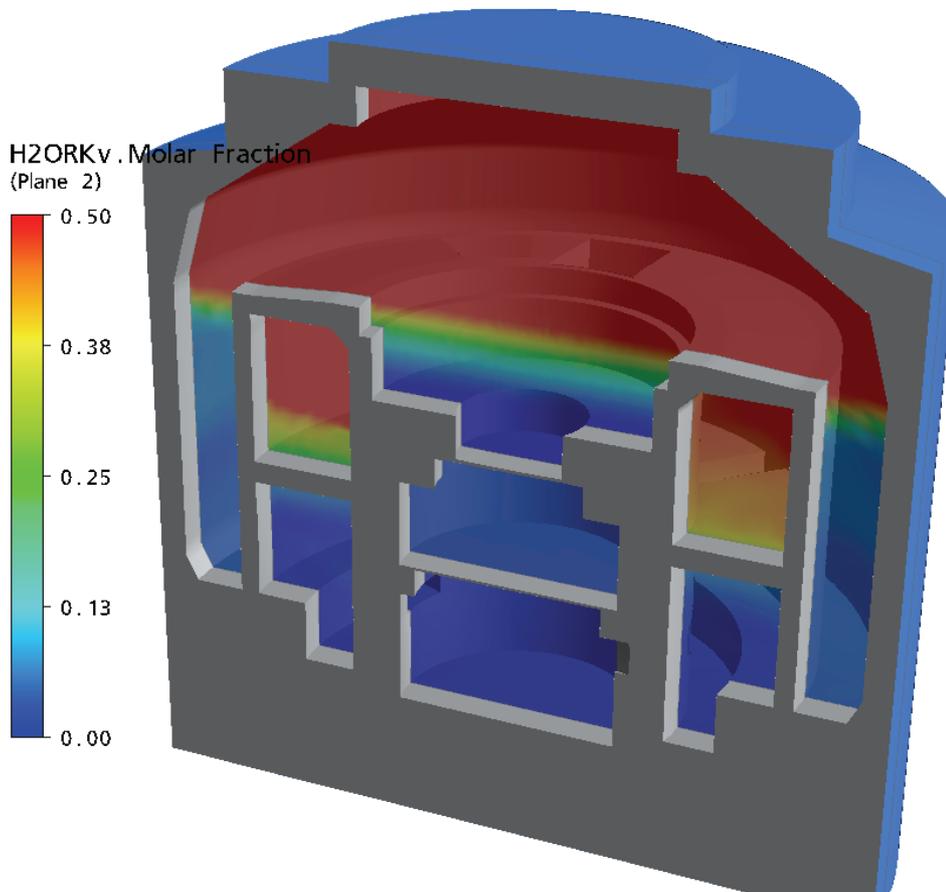


Abb. 2.2-4 Dampfkonzentration zum Zeitpunkt  $t = 2,27$  h

In Abb. 2.2-5 ist der mit CFX berechnete zeitliche Druckverlauf dargestellt und er wird dort mit den experimentellen Daten und auch mit einer COCOSYS-Rechnung verglichen (zur COCOSYS-Rechnung siehe auch /SCH 99/). Prinzipiell wird der experimentelle Verlauf von beiden Simulationsrechnungen qualitativ richtig wiedergegeben. Es zeigt sich hier, dass die experimentellen Werte offensichtlich nicht der genannten Versuchsspezifikation entsprechen. In der Versuchsspezifikation beginnt die Dampfeinspeisung zum Zeitpunkt  $t = 1,13$  h und der Startdruck zu diesem Zeitpunkt soll 1 bar betragen. In der Abbildung ist sehen, dass der experimentelle Wert zu diesem Zeitpunkt schon bei 1,05 bar liegt. Der Grund hierfür ist die bereits diskutierte Abweichung zwischen der Versuchsspezifikation im Rahmen des ISP37 und dem tatsächlichen Verlauf der Dampfeinspeisung.

Im weiteren Verlauf zeigt sich, dass der mit CFX berechnete Druck insgesamt etwas oberhalb der experimentellen Werte liegt. Das gleiche gilt auch für die COCOSYS-Berechnung; hier ist die Abweichung noch größer. Anhand von 11 Stützstellen im Zeit-

raum  $1,2 \text{ h} < t < 2,2 \text{ h}$  wurde die mittlere Abweichung zwischen den Simulationen und den experimentellen Werten berechnet:

$$\langle F_{Modell} \rangle = \frac{\sum |p_{Modell} - p_{Experiment}|}{N_{Mess}} \quad (1)$$

Dieser Wert ist ein quantitatives Maß zur Bewertung der Übereinstimmungen zwischen Simulation und Experiment. Er liegt für CFX bei 0,023 bar und ist somit als eher klein einzuschätzen (siehe auch Tab. 2.2-6).

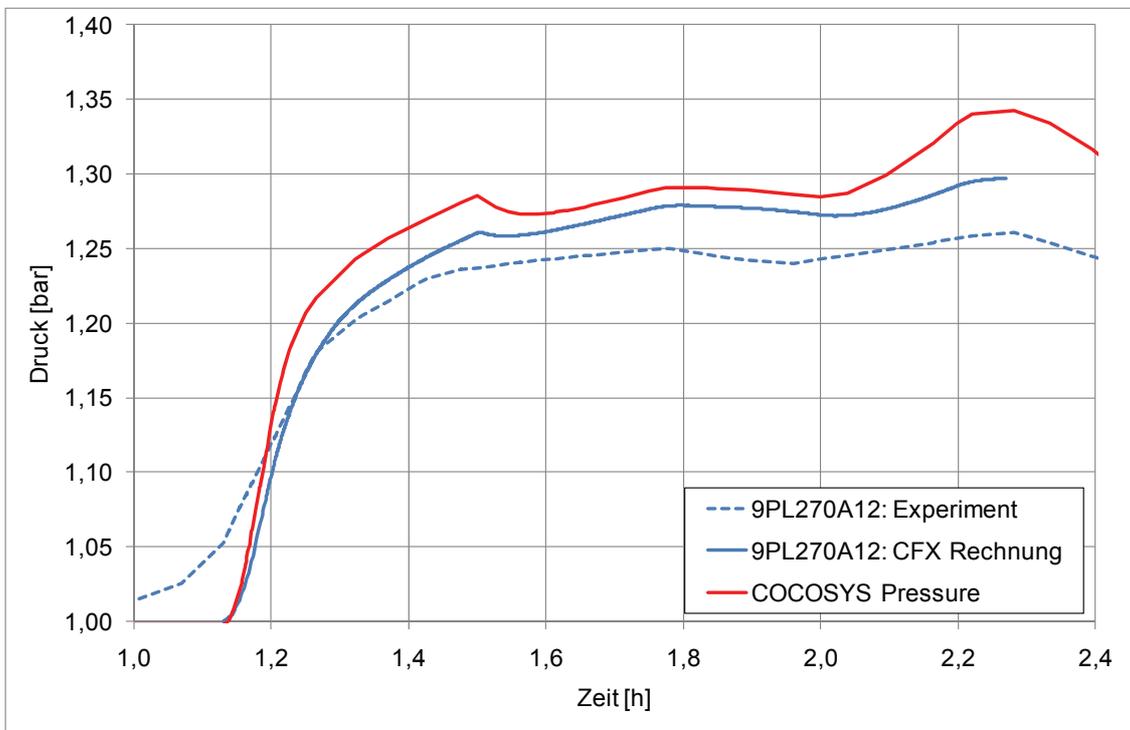


Abb. 2.2-5 Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Druckverlauf

Tab. 2.2-6 Mittlerer Abweichung bei der Druckberechnung

Simulation	Mittlere Abweichung
CFX	0,023 bar
COCOSYS	0,039 bar

### 2.2.5 Analyse des Temperaturverlaufs

Im Folgenden wird der mit CFX berechnete Temperaturverlauf sowohl mit experimentellen Daten, als auch mit der COCOSYS-Berechnung verglichen. Hierbei ist zu unterscheiden zwischen Temperaturmessstellen in der Containmentatmosphäre und Messstellen in den (Beton-)Strukturen des Containments. In diesem Abschnitt sollen zunächst einmal die Temperaturen in der Containmentatmosphäre verglichen werden. Abb. 2.2-6 zeigt den Vergleich der Temperaturen in Raum R9 im oberen Dombereich des Modellcontainments. Insgesamt zeigt sich hier eine gute qualitative Übereinstimmung zwischen den Simulationsdaten und dem experimentellen Temperaturverlauf. Ähnlich wie schon beim Druck so zeigen auch hier die experimentellen Werten einen Temperaturanstieg schon vor dem spezifizierten Zeitpunkt der Dampfeinspeisung ( $t = 1,13$  h). Auch hier liegt die Ursache darin, dass die tatsächliche Dampfeinspeisung schon vor  $t = 1,13$  h begann. Ungeachtet dessen zeigt sich im weiteren Temperaturverlauf eine gute Übereinstimmung. Dieses gilt sowohl für die CFX-Berechnung, als auch für die Berechnung mit COCOSYS.

Direkt unterhalb des Doms befindet sich Raum R2, der mit dem Dombereich durch eine große atmosphärische Öffnung verbunden ist. In Abb. 2.2-7 ist der Temperaturverlauf in Raum R2 dargestellt. Es zeigt sich, dass die mit CFX berechneten Temperaturen etwas später, dafür aber schneller ansteigen als die experimentellen Temperaturen. Im Gegensatz zu CFX liegen die Werte der COCOSYS-Berechnung etwas zu niedrig.

Ähnliches wie für den Verlauf in Raum R2 gilt für den Temperaturverlauf im Ringraum (unterer Teil von R9). Dieser Verlauf ist in Abb. 2.2-8 dargestellt. Es zeigt sich, dass die Temperaturen in der CFX-Berechnung in diesem Bereich schon ansteigen, während sie im Experiment (und in COCOSYS) noch niedrig bleiben.

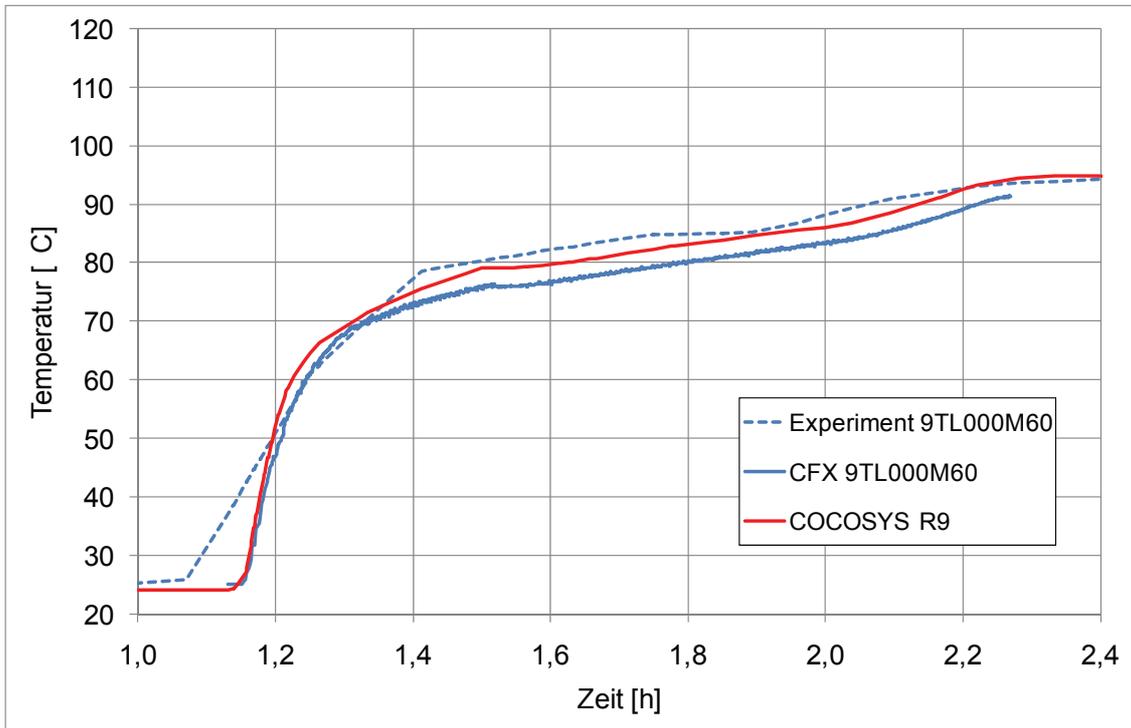


Abb. 2.2-6 Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R9 (Dom)

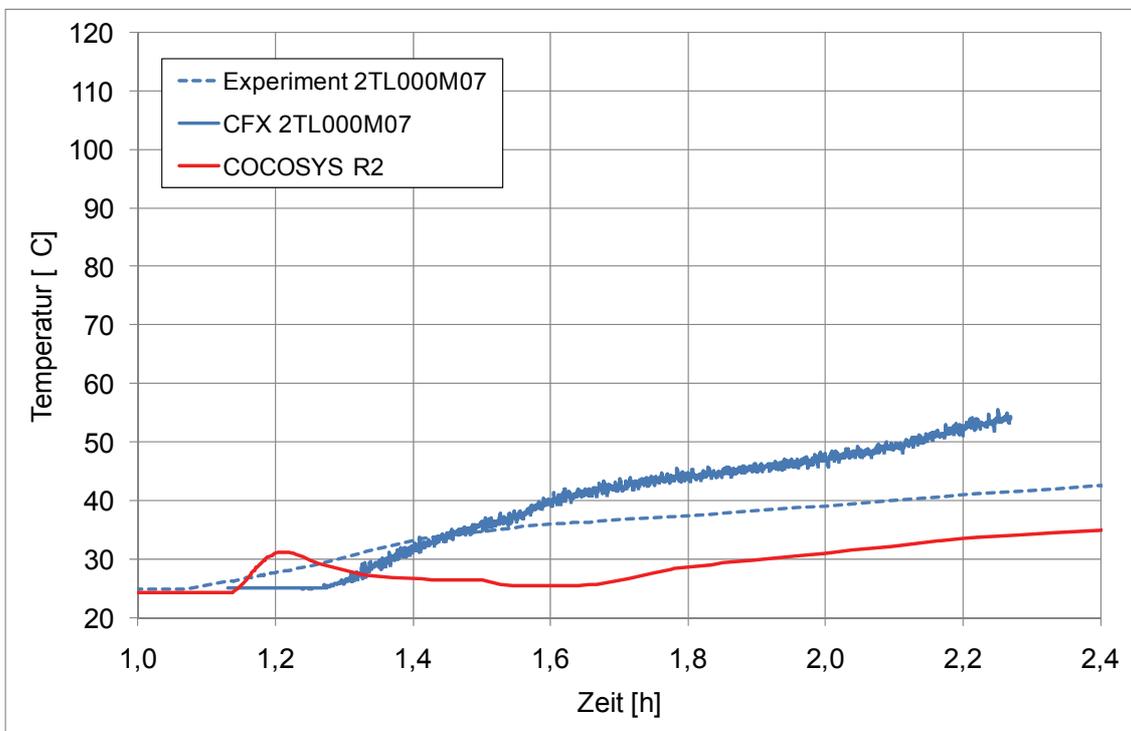


Abb. 2.2-7 Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R2

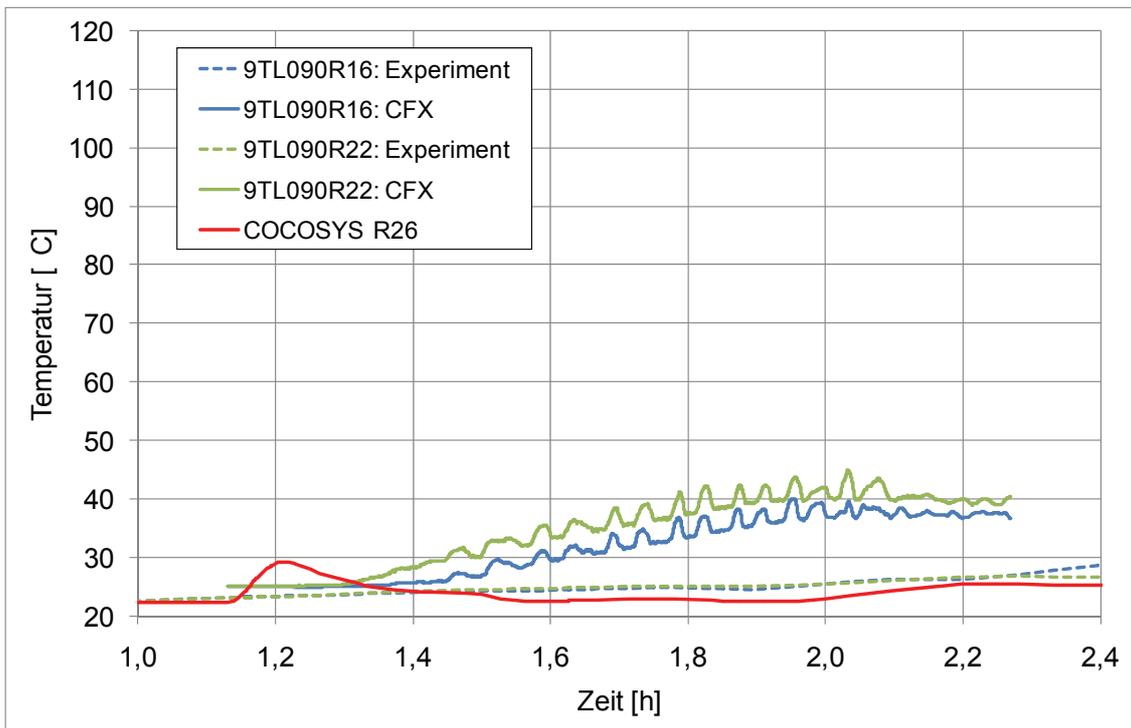


Abb. 2.2-8 Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R9 (Ringraum)

Abb. 2.2-9 und Abb. 2.2-10 zeigen den Temperaturverlauf in den Räumen R6 und R8. Beide Räume liegen auf einer Ebene (siehe Abb. 2.2-1) und in beiden zeigt sich ein vergleichbarer Temperaturverlauf. Die Werte der CFX-Berechnung liegen hier etwas oberhalb der experimentellen Werte. Bei  $t = 2,2$  h gibt es in CFX einen Temperaturanstieg, der in den experimentellen Daten nicht erkennbar ist. Bei der COCOSYS-Berechnung gibt es bei  $t = 1,3$  h einen unrealistisch hohen Temperaturanstieg, später ist die Übereinstimmung mit den experimentellen Werten besser.

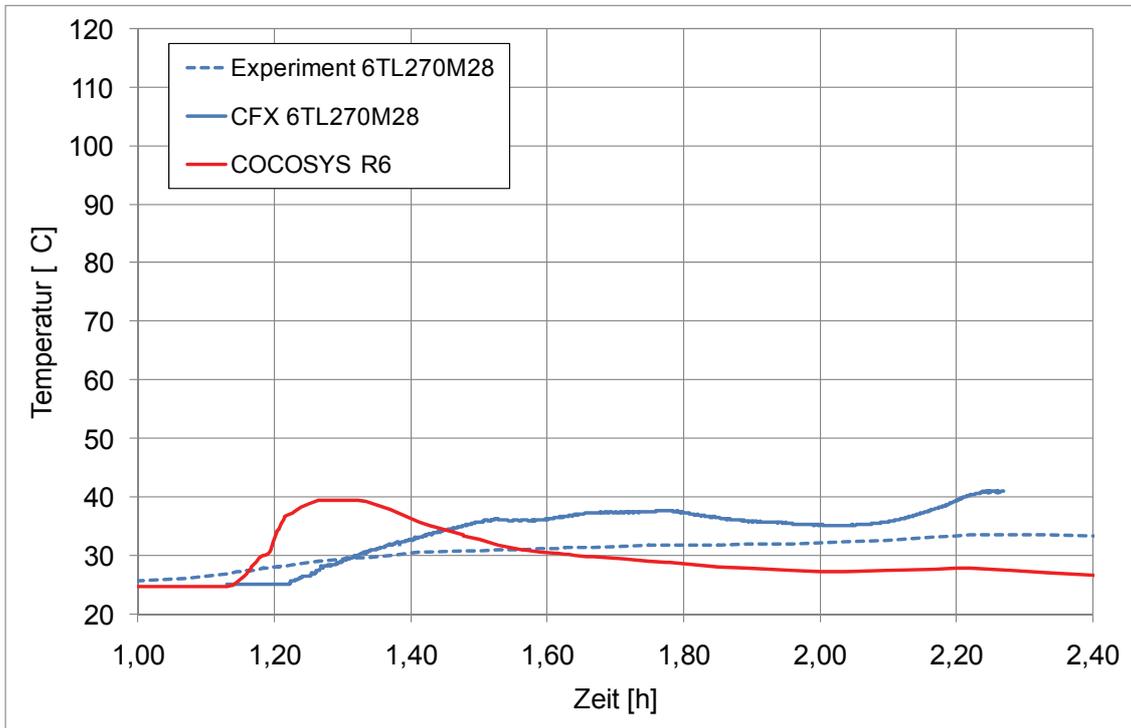


Abb. 2.2-9 Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R6

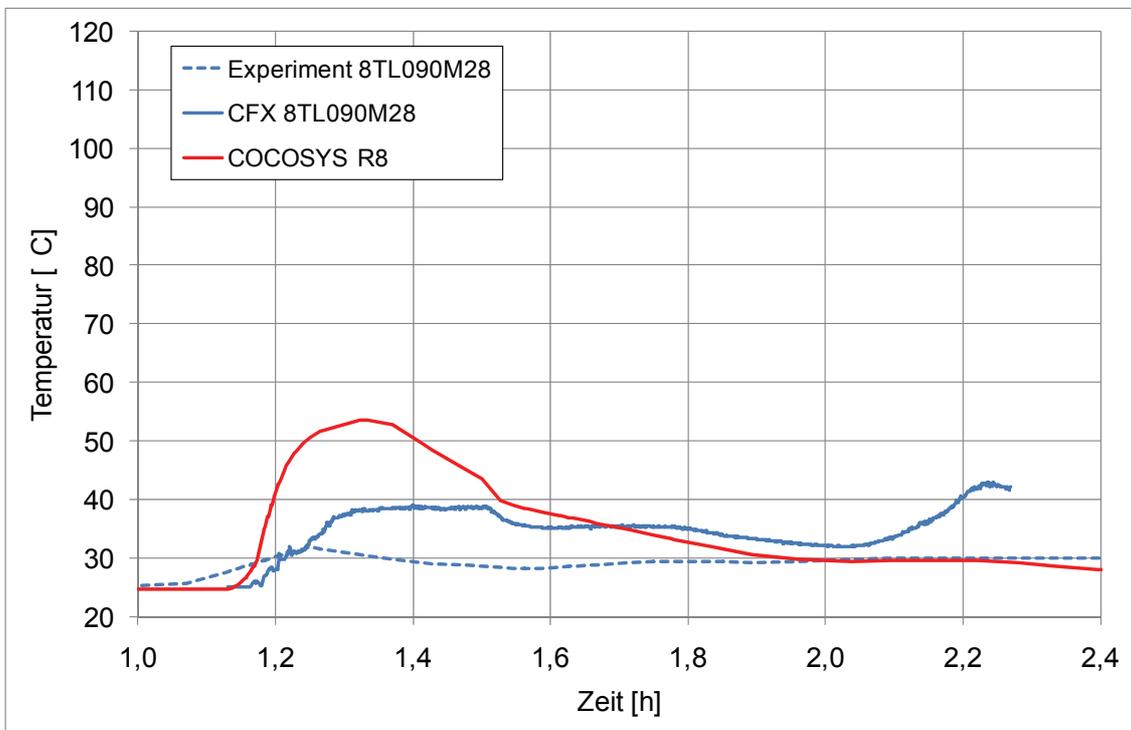


Abb. 2.2-10 Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R8

In den Abb. 2.2-11 und Abb. 2.2-12 ist der Temperaturverlauf in den Räumen R5 und R7 dargestellt. Auch diese beiden Räume befinden sich auf einer Höhe (siehe Abb. 2.2-1). Bei Raum R5 handelt es sich um den Einspeiseraum, er ist in Abb. 2.2-11 dargestellt. Hier findet sich - insbesondere für den Zeitbereich ab 1,4 h - eine sehr gute Übereinstimmung zwischen CFX und den experimentellen Daten. Ähnlich ist es bei der COCOSYS-Berechnung, auch wenn die Werte insgesamt etwas höher liegen. Vergleichbar mit Raum R5 ist der Temperaturverlauf in Raum R7 in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Werten (siehe Abb. 2.2-12).

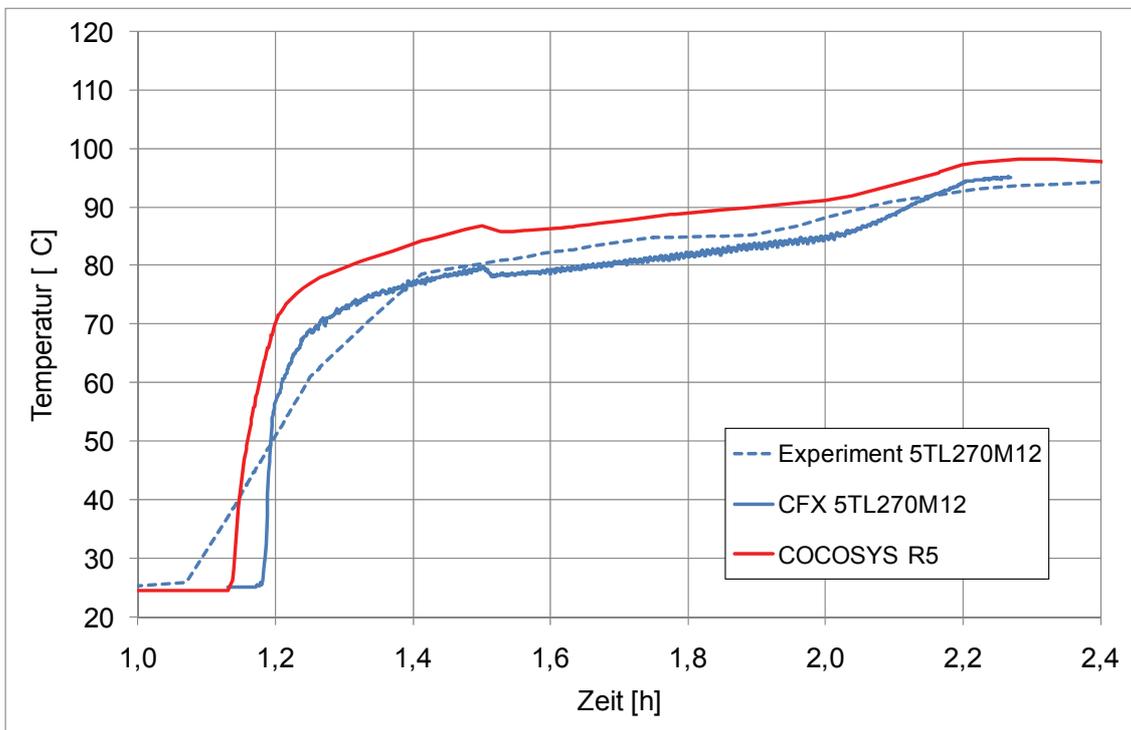


Abb. 2.2-11 Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R5 (Einspeiseort für den Dampf)

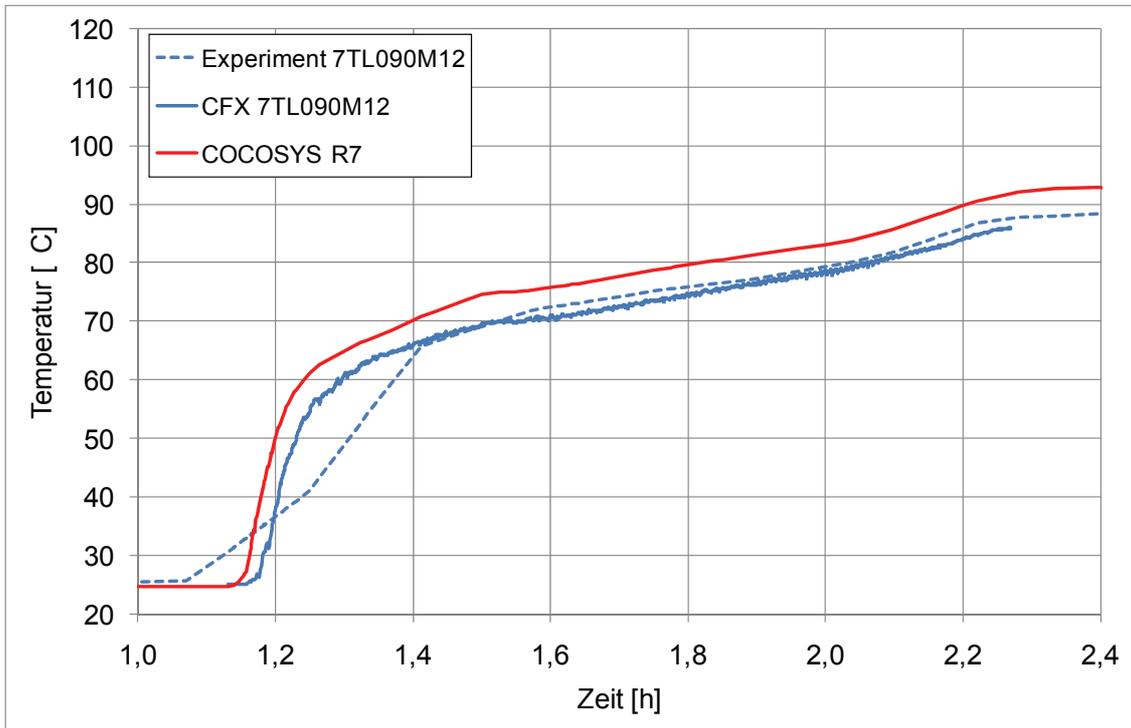


Abb. 2.2-12 Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R7

In die Räume R1, R3 und R4 dringt innerhalb der ersten Stunde relativ wenig Dampf ein und es finden geringe Temperaturanstiege statt (siehe Abb. 2.2-13, Abb. 2.2-14 und Abb. 2.2-15). Ursache hierfür sind die niedrige Position der Räume im Containment bzw. kleine atmosphärische Verbindungen zu diesen Räumen. Dieses Verhalten wird im Wesentlichen durch die CFX-Berechnung wiedergegeben. Auffällig ist, dass Raum R1 im Experiment von Anfang an 5 °C wärmer ist als alle anderen Räume. Ob hier ein Messfehler vorliegt oder eine andere Ursache ist unklar. Ähnlich wie bei CFX ist es bei der COCOSYS-Berechnung. In Raum R3 findet sich in der COCOSYS-Berechnung ein unphysikalischer Temperaturanstieg bei  $t = 1,3$  h (siehe Abb. 2.2-14).

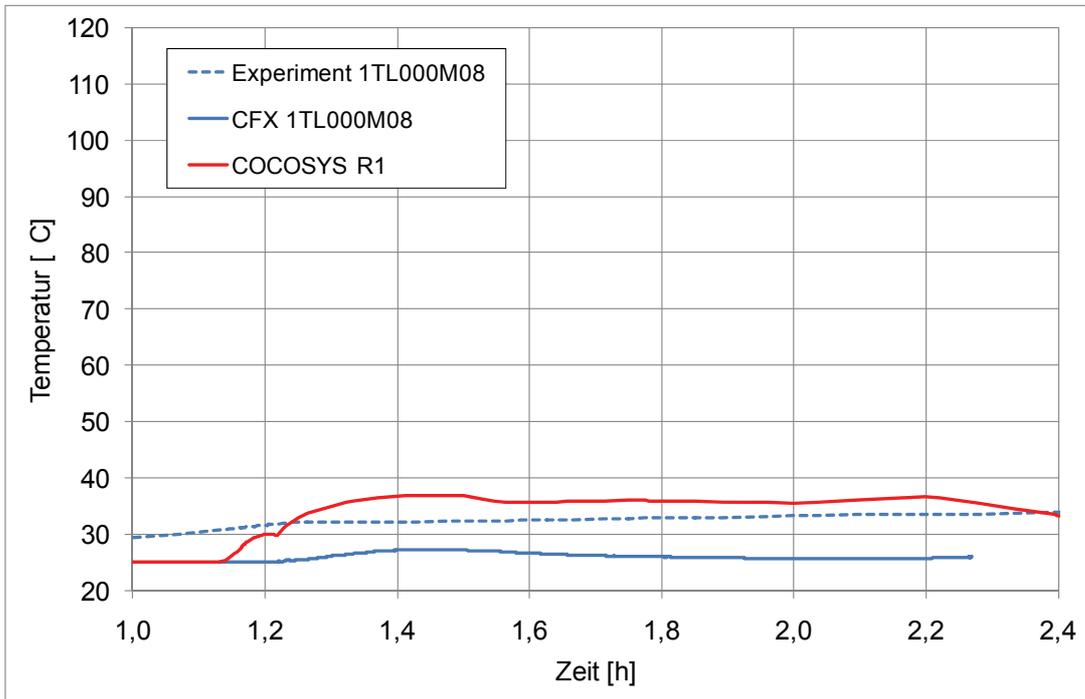


Abb. 2.2-13 Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R1

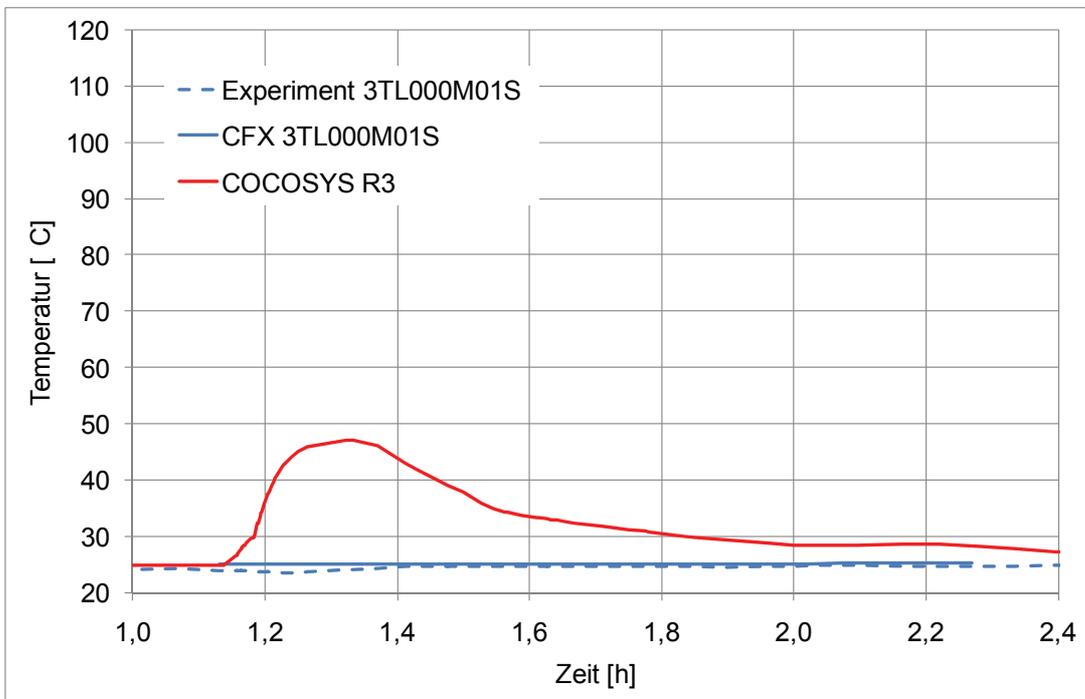


Abb. 2.2-14 Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R3

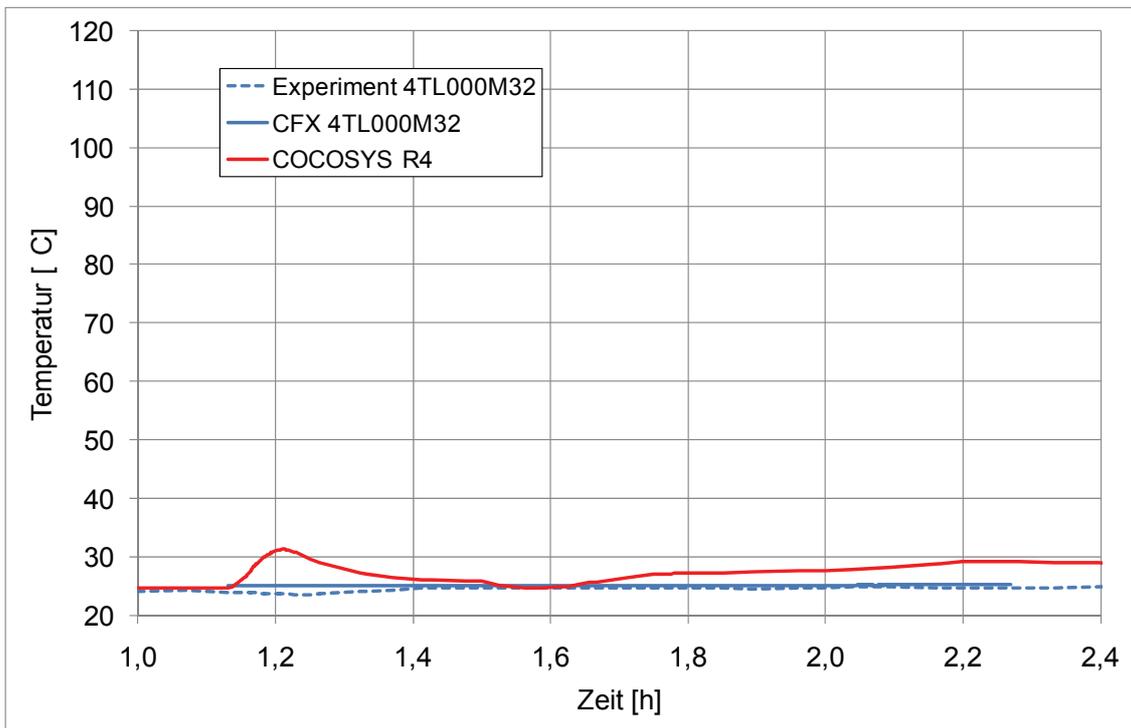


Abb. 2.2-15 Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Temperaturverlauf in Raum R4

### 2.2.6 Vergleich der Geschwindigkeiten in den Überströmöffnungen

In der vorliegenden Analyse wurden die Strömungsgeschwindigkeiten in den Überströmöffnungen U59B, U78A/B und U79B untersucht. In Tab. 2.2-7 findet sich die Information welche Räume durch diese Überströmöffnungen miteinander verbunden werden und welche experimentelle Messstelle zu der entsprechenden Öffnung gehört.

Tab. 2.2-7 Überströmöffnungen im Battelle-Modellcontainment

Bezeichnung der Öffnung	Experimentelle Messstelle	Öffnung verbindet die Räume
U59B	5VT325U28	R5 mit R9
U78A	8VT046U32	R7 mit R8
U78B	8VT148U32	
U79B	7VT163U28	R7 mit R9

In Abb. 2.2-16 wird die mit CFX berechnete Strömungsgeschwindigkeit mit den experimentellen Daten und auch mit einer COCOSYS-Rechnung verglichen. Auch hier zeigt sich, dass der qualitative Verlauf der experimentellen Daten gut wiedergegeben wird. Auch die Startgeschwindigkeit der experimentellen Daten zum Zeitpunkt  $t = 1,13$  h entspricht nicht der Spezifikation ( $v = 0$  m/s), ähnlich wie es beim Druck und bei den Temperaturen der Fall war. In den Rechnungen steigen die Geschwindigkeiten erst später an als im Experiment, dafür aber steiler. Die Ursache liegt vermutlich in der ungenauen Spezifikation der Dampfeinspeisung. Grundsätzlich lässt sich jedoch festhalten, dass die mit CFX berechneten Geschwindigkeiten etwas oberhalb der experimentellen Daten liegen. Die COCOYS-Kurve zeigt ein ähnliches Verhalten, passt jedoch etwas besser zu den experimentellen Daten.

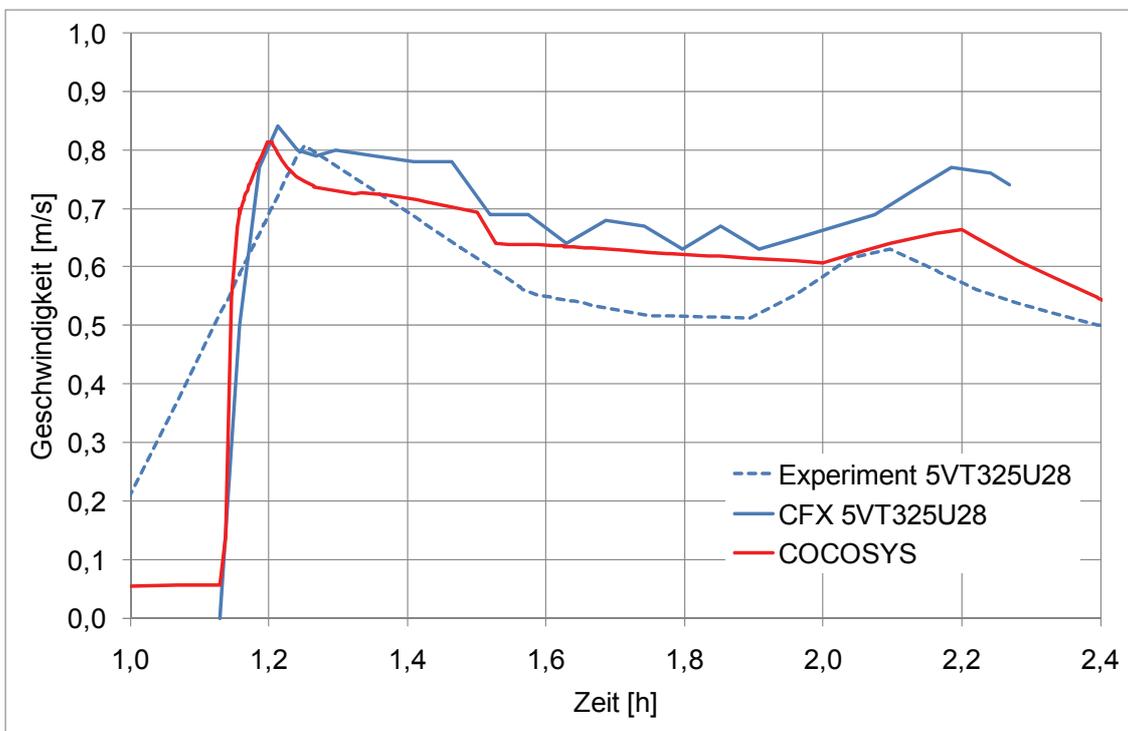


Abb. 2.2-16 Vergleich der Geschwindigkeiten in Überströmöffnung U59B

Ein vergleichbares Bild ergibt sich auch für Überströmöffnung U79B (siehe Abb. 2.2-17). Der erste Peak wird in diesem Fall jedoch durch CFX etwas besser wiedergegeben als durch die COCOSYS-Rechnung. Gründe für den Abfall der Geschwindigkeit ab 2.1 h im Experiment sind nicht bekannt. Dieser wird von beiden Rechnungen nicht wiedergegeben.

In Abb. 2.2-18 sind die Geschwindigkeiten in den Überströmöffnungen 78A und 78B dargestellt. Auch hier weichen die experimentellen Daten von der Spezifikation ab, was zu einem verfrühten Anstieg der Strömungsgeschwindigkeiten führt. Die absolute Höhe der Strömungsgeschwindigkeiten wird von CFX gut wiedergegeben, während diese von COCOSYS überschätzt wird.

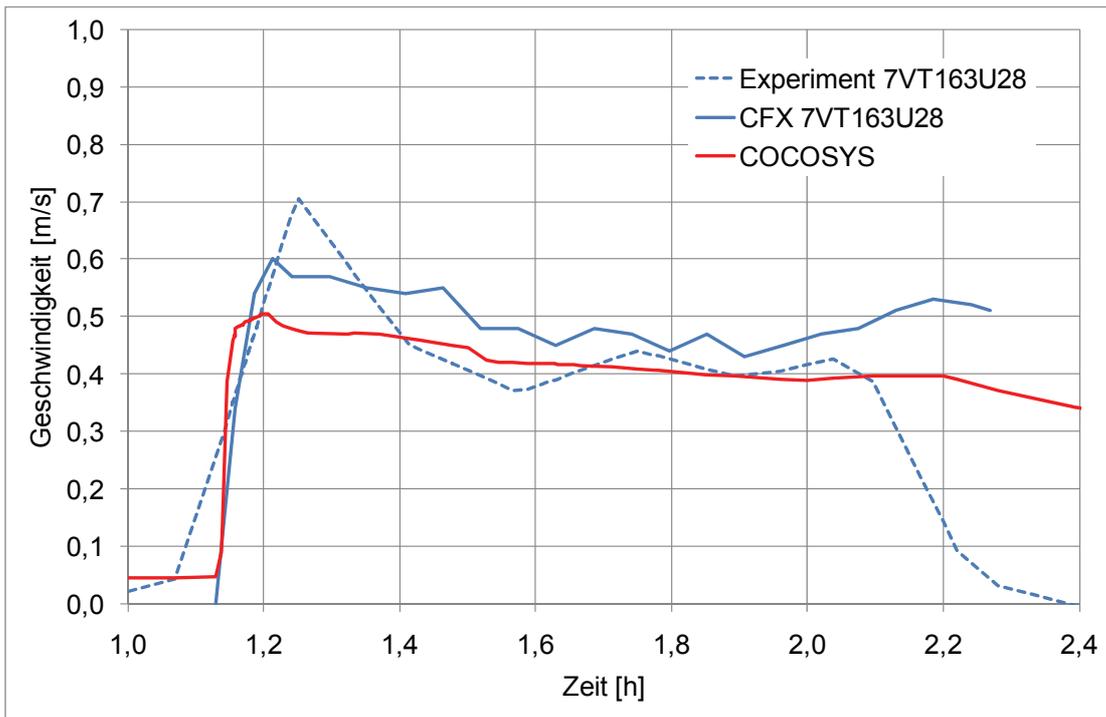


Abb. 2.2-17 Vergleich der Geschwindigkeiten in Überströmöffnung U79B

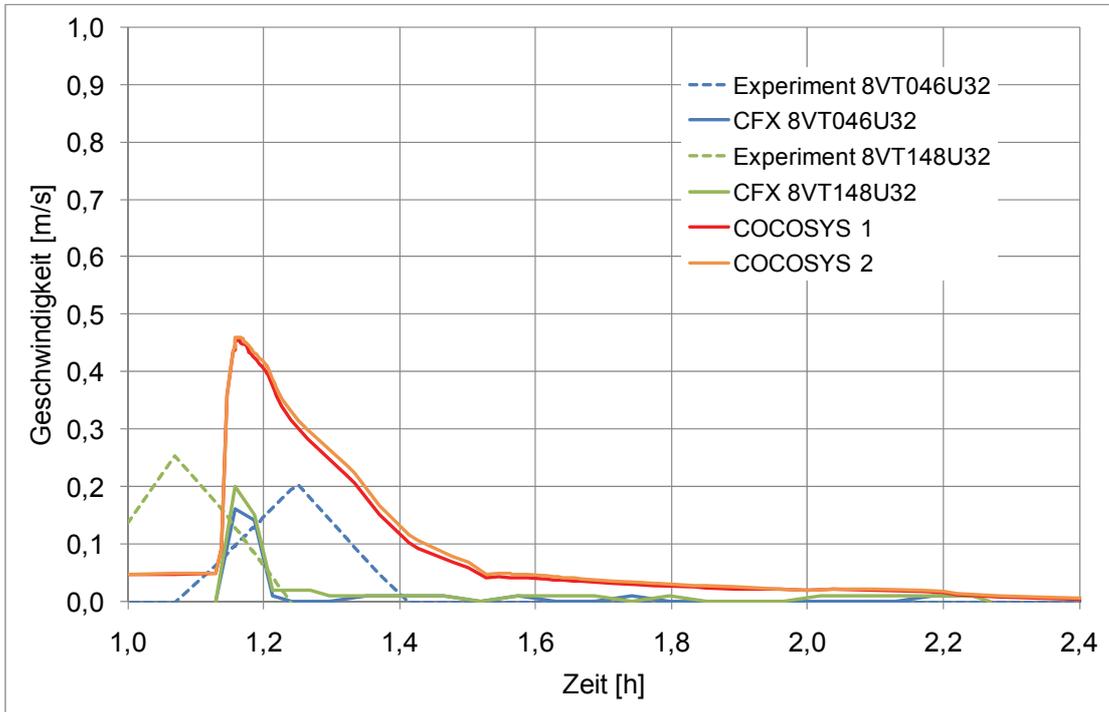


Abb. 2.2-18 Vergleich der Geschwindigkeiten in Überströmöffnung U78A und U78B

### 2.2.7 Analyse der Abweichungen zwischen Simulation und Experiment

Um die Abweichungen zwischen den Simulationswerten und den experimentellen Daten quantitativ zu bewerten, wurde für jede der zuvor beschriebenen Messstellen im Zeitraum  $1,2 \text{ h} < t < 2,2 \text{ h}$  die mittlere Abweichung zwischen den Simulationen und den experimentellen Werten berechnet. Dieses wurde für die Druckwerte, die Temperaturen und auch für die Geschwindigkeiten durchgeführt und die folgenden mittleren Abweichungen berechnet:

$$\langle F_{Modell} \rangle = \frac{\sum |p_{Modell} - p_{Experiment}|}{N_{Mess}} \quad \text{für den Druck} \quad (2)$$

$$\langle F_{Modell} \rangle = \frac{\sum |T_{Modell} - T_{Experiment}|}{N_{Mess}} \quad \text{für die Temperaturen} \quad (3)$$

$$\langle F_{Modell} \rangle = \frac{\sum |v_{Modell} - v_{Experiment}|}{N_{Mess}} \quad \text{für die Geschwindigkeiten} \quad (4)$$

Der Stichprobenumfang für die Mittelung betrug dabei jeweils  $N_{\text{Mess}} = 11$  Mess- bzw. Simulationenwerte. Die Abweichung des Drucks vom Experiment wurde schon weiter oben diskutiert. Die Abweichungen für die Temperaturen sind in Abb. 2.2-19 dargestellt. Es zeigt sich, dass diese Abweichungen je nach betrachteter Messstelle deutlich schwanken. Für die CFX-Rechnung liegen die mittlere Abweichung zwischen  $0,5$  °C und  $6,5$  °C. Hierbei ist insbesondere die Abweichung im Ringraum recht groß. Die mittlere Abweichung über alle Messstellen beträgt für die CFX-Rechnung  $3,73$  °C und ist damit als eher klein einzuschätzen. Die Abweichungen der COCOSYS-Berechnung sind zum Vergleich aufgetragen. Sie sind im Mittel etwas höher ( $5,25$  °C).

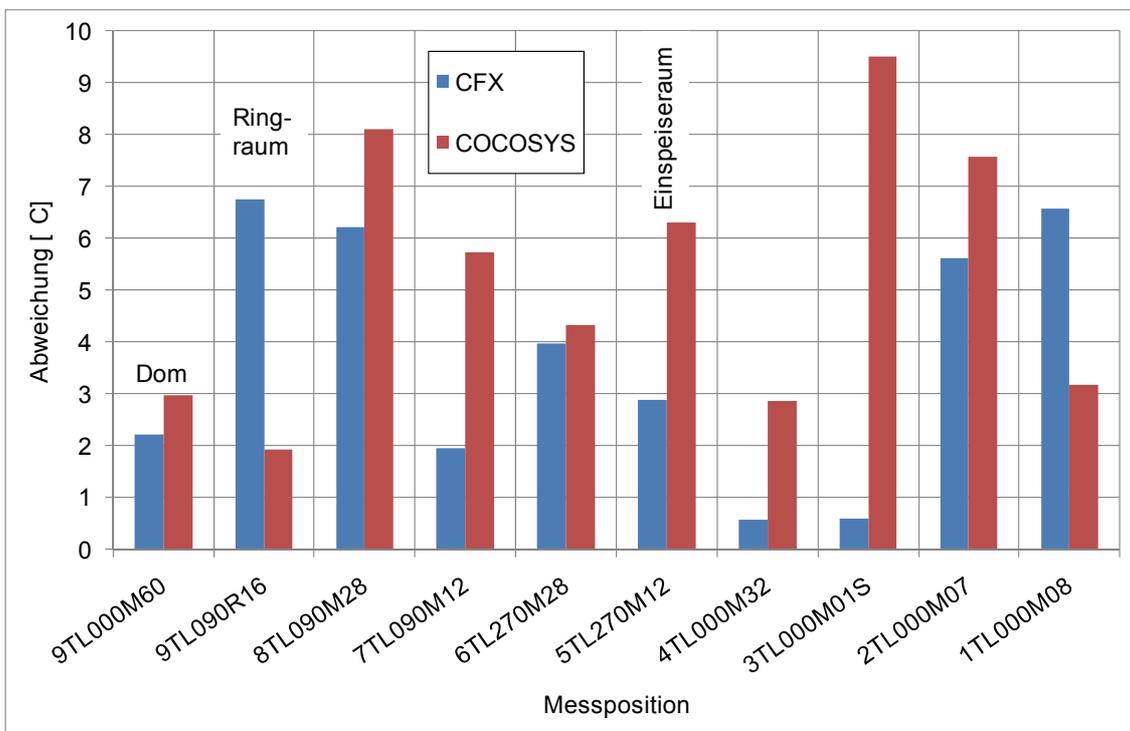


Abb. 2.2-19 Abweichung der berechneten von den gemessenen Temperaturen

Die Abweichungen für die Strömungsgeschwindigkeiten sind in Abb. 2.2-19 dargestellt. Insgesamt sind diese sowohl für die CFX-Berechnung als auch für die COCOSYS-Berechnung relativ klein. Für CFX liegt der Mittelwert über alle Messstellen bei  $0,06$  m/s und für COCOSYS liegt die mittlere Abweichung bei  $0,07$  m/s. Die Strömungsgeschwindigkeiten werden also mit beiden Programmen recht gut wiedergegeben. In Tab. Tab. 2.2-8 findet sich noch einmal eine Übersicht über die gemittelten Abweichungen. Hierbei ist zu berücksichtigen, dass die experimentellen Daten nicht den

Versuchsspezifikationen entsprechen. Diese experimentellen Ungenauigkeiten sind in die in Tab. 2.2-8 dargestellten Abweichungen mit eingeflossen.

Tab. 2.2-8 Abweichungen bei der Berechnung von Druck, Temperaturen und Geschwindigkeiten. Es wurde jeweils über alle oben genannten Messpositionen gemittelt.

	<b>CFX</b>	<b>COCOSYS</b>
Abweichungen Druck	0,023 [bar]	0,039 [bar]
Abweichungen Temperatur	3,73 °C	5,25 °C
Abweichungen Geschwindigkeit	0,06 m/s	0,07 m/s

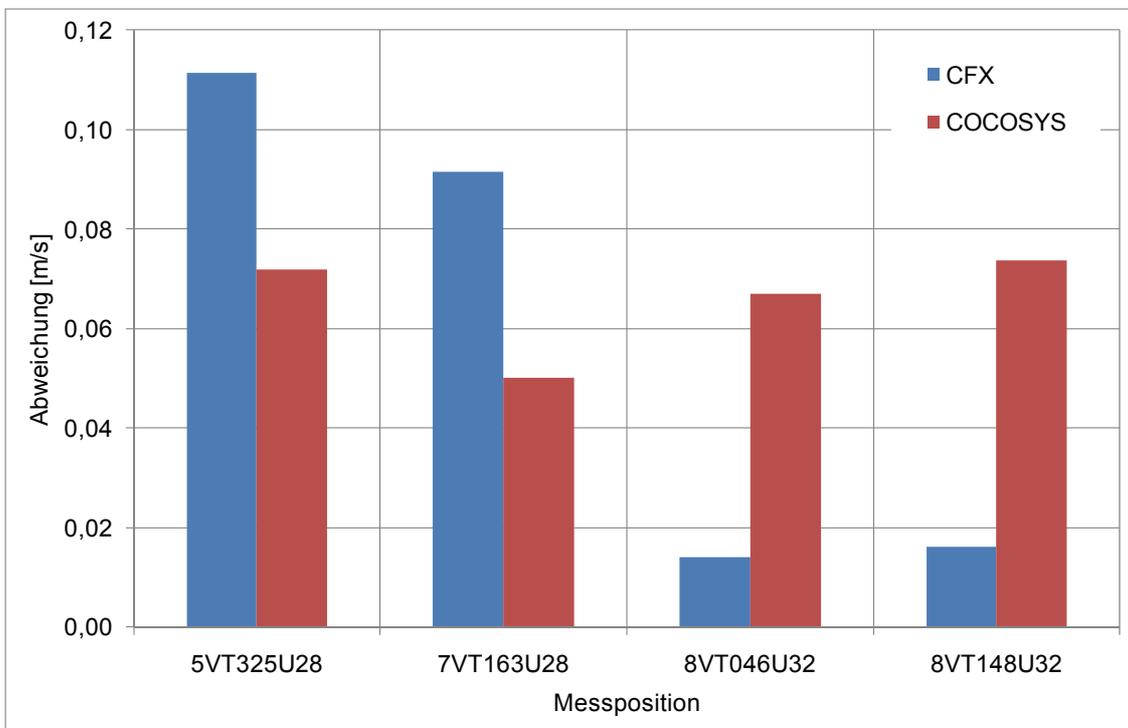


Abb. 2.2-20 Mittlere Abweichungen zwischen Simulation und Experiment bei den berechneten Geschwindigkeiten in den Überströmöffnungen

## 2.2.8 Zusammenfassung und Fazit

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass die Nachrechnung des VANAM M3-Experiments mit CFX gut gelungen ist. Sowohl bei der Berechnung des Drucks und der Temperaturen als auch bei den Strömungsgeschwindigkeiten konnte der Verlauf der experimentellen Kurven qualitativ gut wiedergegeben werden. Etwas problematisch ist

der Umstand, dass die experimentellen Werte offensichtlich nicht exakt den Versuchsspezifikationen entsprechen, insbesondere was die Startwerte für Druck, Temperatur und Geschwindigkeiten angeht. Dies lässt einen etwas früheren Beginn der Dampfeinspeisung mit u. U. veränderten Gradienten in der Anfangsphase vermuten.

Durch die Berechnung der Abweichungen zwischen Simulation und Experiment konnte eine quantitative Beurteilung der CFX-Simulation durchgeführt werden. Diese Abweichungen fallen für alle berechneten Größen klein aus, die quantitative Übereinstimmung zwischen den CFX-Berechnungen und dem Experiment ist somit also hoch. Ein zusätzlicher Vergleich mit einer COCOSYS-Berechnung zeigt, dass die Abweichungen bei beiden Simulationstypen in einer vergleichbaren Größenordnung liegen. Aus den bisherigen Analysen ergeben sich jedoch noch einige offene Fragen bzw. noch zu untersuchende Teilaspekte:

- Es gibt noch kleinere geometrische Unterschiede zwischen dem CFX-Containment und dem realen Containment (Gesamtvolumen/Wandfläche). Eine maßgebliche Änderung der Ergebnisse wird daraus nicht erwartet.
- Die Netzauflösung in Wandnähe entspricht nicht den Best-Practice-Guidelines. Hier könnte im Rahmen einer Gitterstudie der Einfluss der Gitterfeinheit auf den Wärmeübergang an die (Beton-)Strukturen noch untersucht werden.
- Die im realen Containment vorhandene relative Luftfeuchte zum Startzeitpunkt ( $t = 1,13 \text{ h}$ ) betrug 50 %. Dieses wurde in der bisherigen Simulation noch nicht berücksichtigt.

Die Berücksichtigung der drei genannten Teilaspekte sollte grundsätzlich eine druckabsenkende Wirkung hervorrufen. Damit wäre zu vermuten, dass bei einer solchen Simulation die CFX-(Druck-)Werte sich noch weiter den experimentellen Werten annähern. Dieses wäre in einer weiteren Untersuchung zu prüfen. Generell erscheint aber der nicht mehr klärbare Unterschied zwischen Versuchsspezifikation und Versuchsdurchführung der maßgeblichere Einflussfaktor zu sein.

## **2.3 Simulation des PANDA-4bis-Versuches**

### **2.3.1 Zielsetzung**

Für die Validierung des GRS-Wand- und Volumenkondensationsmodells eignet sich auch das im Rahmen des SETH-Versuchsprogramms am Paul Scherer Institute in der Schweiz durchgeführte PANDA-4bis-Experiment. Der Versuchsstand im PANDA-4bis Experiment besteht aus zwei Behältern, im Gegensatz zu einem bei THAI und mehreren Räumen beim Modellcontainment. Im dem Experiment erfolgt die Dampfeinspeisung in einen der beiden miteinander verbundenen Behälter. Dieser Versuch wurde als dritter Versuch zur Validierung gewählt.

### **2.3.2 Geometrie und Randbedingungen**

Der Versuchsstand im PANDA-4bis-Experiment besteht aus zwei Behältern (D1 und D2), die durch ein Rohr miteinander verbunden sind (Abb. 2.3-1). Dieses Rohr ist um  $110^\circ$  gekrümmt, so dass die Behälter nicht in einer Ebene liegen. In den Behälter D1 strömt horizontal Dampf mit einem mittleren Massenstrom von  $54,16 \text{ g/s}$  ein. Die Temperatur des Dampfes beträgt  $107,8 \text{ }^\circ\text{C}$  und liegt damit knapp unter der Sättigungstemperatur des Wassers bei  $1,3 \text{ bar}$  Druck. Das Rohr, durch das der Dampf einströmt, befindet sich in einer Höhe von  $2 \text{ m}$  über dem Behälterboden und endet in der Mitte des Behälters. Die Dauer der Einspeisung beträgt  $7200 \text{ s}$ .

In der oberen Kuppel des Behälters D2 befindet sich ein Ventil, mit dem der Druck in den Behältern auf konstant  $1,3 \text{ bar}$  gehalten wird. Zu Beginn des Versuches befindet sich trockene Luft mit einer Temperatur von  $76 \text{ }^\circ\text{C}$  im Versuchsstand. Die Außenwände werden ebenfalls auf  $76 \text{ }^\circ\text{C}$  gehalten. Bei diesen Start- und Randbedingungen ist mit Kondensationsvorgängen zu rechnen.

Die Dampfkonzentration wurde an mehreren Messstellen in den beiden Behältern und im Verbindungsrohr gemessen. Die Konzentrationsmessungen in den Behältern D1 und D2 wurden in der Behältermitte an verschiedenen Höhen durchgeführt (Abb. 2.3-2). Im Experiment wurde die Konzentration mit einer geringen zeitlichen Auflösung gemessen. Typischerweise wurden für die Zeit bis  $5000 \text{ s}$  Versuchsdauer  $10\text{-}15$  Messungen an einer gegebenen Messstelle durchgeführt. An einigen Messstellen liegen

sogar weniger als 10 Messungen über die gesamte Versuchsdauer vor. Nach 5000 s wurden keine Konzentrationsmessungen mehr durchgeführt. Aufgrund dieser geringen zeitlichen Auflösung können keine schnellen Konzentrationsänderungen genau abgebildet werden, zudem werden sich Messfehler und kurzzeitige Fluktuationsänderungen bei der Auswertung deutlich bemerkbar machen. Die Messgenauigkeit für eine Konzentrationsmessung wurde von den Experimentatoren mit  $\pm 1,5\%$  angegeben /CAC 07/.

Neben der Gaszusammensetzung wurden auch die Temperaturen gemessen. Die Temperaturmessung erfolgt mit einer deutlich höheren zeitlichen Auflösung (ca.  $\sim 2$  s). Die Messgenauigkeit bei der Temperaturmessung wurde von den Experimentatoren mit  $\pm 1,16\text{ °C}$  abgeschätzt /AUB 05/.

Im Rahmen dieses Vorhabens wurde neben dem PANDA-4bis-Experiment auch das PANDA-4-Experiment simuliert (siehe Abschnitt 5.3). Das PANDA-4-Experiment unterscheidet sich im Wesentlichen von PANDA-4bis durch die Temperatur des einströmenden Gases und die Anfangstemperaturen (Behälterwände, Gas). Beim PANDA-4-Experiment wurden die Temperaturen so hoch gewählt, dass keine Kondensation auftritt, während beim PANDA-4bis-Versuch die Temperaturen so niedrig sind, dass Wand- und Volumen Kondensation auftreten können. Durch Vergleich der Simulationsergebnisse der beiden Experimente kann untersucht werden, welche Abweichungen auf das Kondensationsmodell zurückgeführt werden müssen und welche Fehler durch andere Modelle (z. B. Turbulenz) und die Numerik verursacht werden.

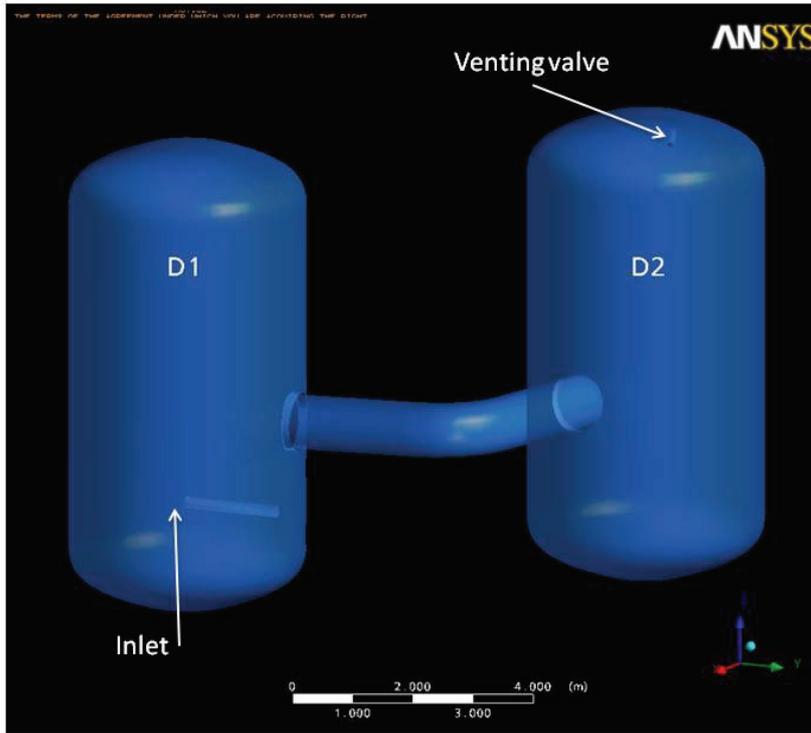


Abb. 2.3-1 Geometrie beim PANDA-4-Versuch

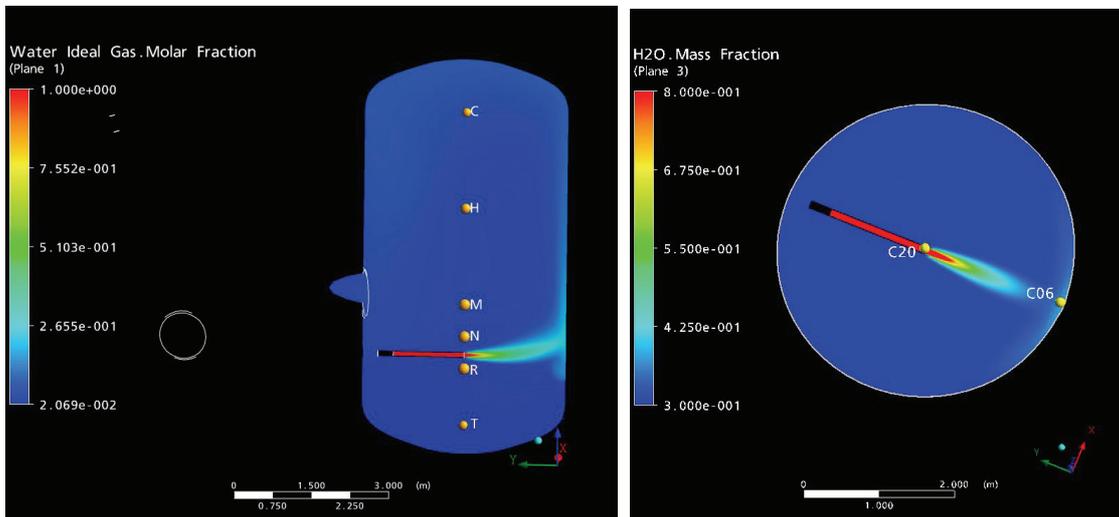


Abb. 2.3-2 Messstellen im Behälter D1

### **2.3.3 Modelle in den CFX-Simulationen**

Die Simulationen des PANDA-4bis Experiments wurden mit CFX-11 durchgeführt. Die Turbulenz wurde mit dem SST-Modell berechnet. Am Einlass werden der Massenstrom und die Temperatur des Dampfes vorgegeben; es wird von einer mittleren Turbulenzintensität (5 %) ausgegangen. Als kinematische Diffusivität von Wasserdampf wurde  $2.5e-5 \text{ m}^2/\text{s}$  angenommen.

Die Wandkondensation ist beim PANDA-4bis Experiment einer der entscheidenden physikalischen Prozesse. Um die Kondensationsrate richtig zu berechnen, muss die Oberflächentemperatur der Wände genau bekannt sein. Deshalb werden die Wände als Festkörper in das CFD-Gitter integriert und die Wärmeleitung in den Wänden dreidimensional von CFX berechnet. Die Stoffdaten für die Wände wurden der Beschreibung der PANDAversuchsanlage entnommen /AUB 05/. Der Einfluss der räumlichen Diskretisierung in den Wänden und im Gas in Wandnähe wird in Abschnitt 2.3.5 untersucht.

Die Zeitkonstante im Volumenkondensationsmodell muss in Abhängigkeit vom Zeitschritt gewählt werden, da sonst Konvergenzprobleme auftreten können /HET 05/. Um besser reproduzierbare Ergebnisse zu erhalten, wurde mit einer festen Zeitschrittweite gerechnet. Diese muss so klein gewählt werden, dass für alle Zeitschritte eine konvergente Lösung gefunden wird. Für die meisten Rechnungen wurde ein Zeitschritt von 0,1 s verwendet.

### **2.3.4 Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten**

In der Simulation erfolgt bis ca. 1000 s ein steiler Anstieg der Dampfkonzentration auf ca. 45 vol.% im 1. PANDAbehälter. Danach flacht der Anstieg aufgrund der Kondensation etwas ab. Nach 6000 s wird eine Dampfkonzentration von ca. 80 % erreicht (Abb. 2.3-3). Dies entspricht dem experimentellen Verlauf. Allerdings wird die Dampfkonzentration um ca. 5 vol.% - 10 vol.% überschätzt. Die Dampfkonzentration ist im Behälter D1 relativ homogen verteilt (Abb. 2.3-3, Abb. 2.3-8). Allerdings werden im Experiment stärkere Konzentrationsschwankungen zwischen den einzelnen Messstellen gemessen. Im oberen Teil des Behälters lässt sich daraus keine eindeutige Schichtung rekonstruieren (C20-L20, Abb. 2.3-2). In der Simulation wird für diese Messstellen eine

räumlich homogene Konzentration berechnet. Im unteren Teil des Behälters beginnt der Anstieg der Dampfkonzentration mit einer zeitlichen Verzögerung. In diesem Bereich ist der Dampfgehalt meist um 5 - 10 vol.% niedriger als im oberen Teil. Dieses Phänomen wird in der Simulation qualitativ richtig vorhergesagt.

Nach ca. 200 s hat sich oberhalb des Verbindungsrohres im Behälter D1 dampfreiches heißes Gas ausgebreitet, das über das Verbindungsrohr in den Behälter D2 strömt. Durch die untere Hälfte des Verbindungsrohres strömt aus dem Behälter D2 dampfarmes kaltes Gas zurück in den Behälter D1. Aufgrund der höheren Dichte sinkt es dort nach unten und sorgt damit für die etwas niedrigere Dampfkonzentration im unteren Teil des Behälters D1. Dieses Strömungsmuster bleibt in der Simulation über die gesamte Versuchsdauer bestehen und entspricht der im Experiment (Abb. 2.3-5, Abb. 2.3-6).

Oberhalb des Verbindungsrohres steigt die Dampfkonzentration im Behälter D2 in der Simulation ebenfalls über die gesamte Versuchsdauer an und beträgt nach 6000 s 70 % - 75 %. Im Experiment erfolgt für die obere Hälfte des Behälters D2 ebenfalls ein Dampfanstieg. Die Dampfkonzentration ist um ca. 10 % niedriger und der Anstieg erfolgt weniger kontinuierlich. Bei der Auswertung der experimentellen Daten ist zu beachten, dass im Experiment aufgrund der geringen zeitlichen Auflösung der Konzentrationsmessung (typischerweise 10 - 15 Messungen für 5000 s) Messfehler und zeitliche Fluktuationen die Messdaten deutlich beeinflussen können. Für den Bereich unterhalb des Verbindungsrohres wird in der Simulation eine Schicht mit einer sehr geringen Dampfkonzentration vorhergesagt, die sich sehr langsam auflöst. Für diesen Bereich werden im Experiment wesentlich höhere Dampfkonzentrationen gemessen. Der Grund für die großen Abweichungen ist, dass im Experiment aufgrund der Schwerkraft Kondensat in den unteren Teil des Behälters transportiert wird, wo es teilweise wieder verdampft /CAC 07/. In der Simulation wird das Kondensat nicht bilanziert. Deshalb kann eine Verdampfung des Kondensats nicht simuliert werden. Eine Verbesserung der Simulationsergebnisse in diesem Bereich ist durch eine Modellerweiterung (Modellierung des Kondensats) und die Simulation von Verdampfungsvorgängen möglich.

Der Dampf wird über ein mehrere Meter langes Rohr, das teilweise durch den ersten PANDA-Behälter verläuft, transportiert bevor es in den Gasraum einströmt. Es kann davon ausgegangen werden, dass zumindest der Teil des Rohres, der im PANDA-Behälter liegt, am Versuchsanfang die Temperatur des Gasraumes von ca. 76 °C be-

sitzt. Damit ist in der Anfangsphase mit Kondensationsvorgängen an den Rohrwänden und mit einer Temperaturreduzierung des einströmenden Gases zu rechnen. Es wird also effektiv weniger Dampf in den PANDA-Behälter einströmen als die gemessenen 64 g/s an der Messstelle außerhalb des Behälters. In den Versuchsnachrechnungen wurde dieser Effekt vernachlässigt, die Rohrwände wurden als adiabat angenommen. Damit wird die in den ersten Behälter eingespeiste Dampfmenge überschätzt. Dies ist eine mögliche Ursache für die Überschätzung der Dampfkonzentration, die schon in der Anfangsphase des Versuchs zu beobachten ist. Ebenso könnte dies die Abweichungen zwischen gemessenen und berechneten Ventingmassenstrom in den ersten 500-1000s (Abb. 2.3-5) erklären. (Eine andere Erklärung wäre die Unterschätzung der Kondensationsrate in der Anfangsphase.)

Um diesen Effekt zu modellieren, wurden auch Simulationen durchgeführt, bei denen die Wandkondensation an den Rohrwänden berücksichtigt wurde. Diese Simulationen sind aber mit einem numerischen Fehler abgebrochen. Das Wandkondensationsmodell ist nicht in der Lage, die Durchströmung eines Rohres mit reinem Dampf zu simulieren. Es ist für die Simulation von Kondensationsvorgängen im Beisein eines nicht kondensierbaren Gases geeignet. Auch bei einer angenommenen Dampfkonzentration von 99 vol.% kam es zu einem Programmabbruch.

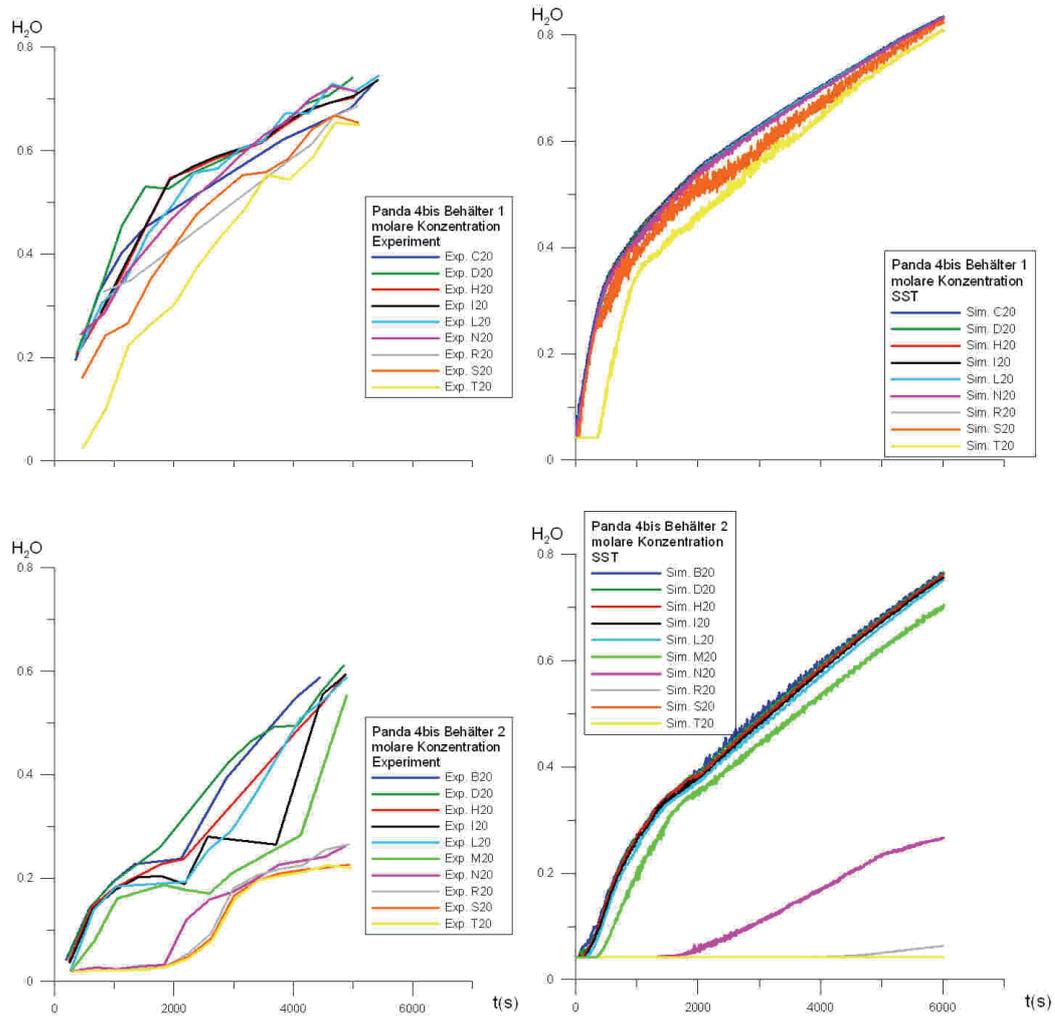


Abb. 2.3-3 Wasserdampfkonzentration in Experiment und Simulation

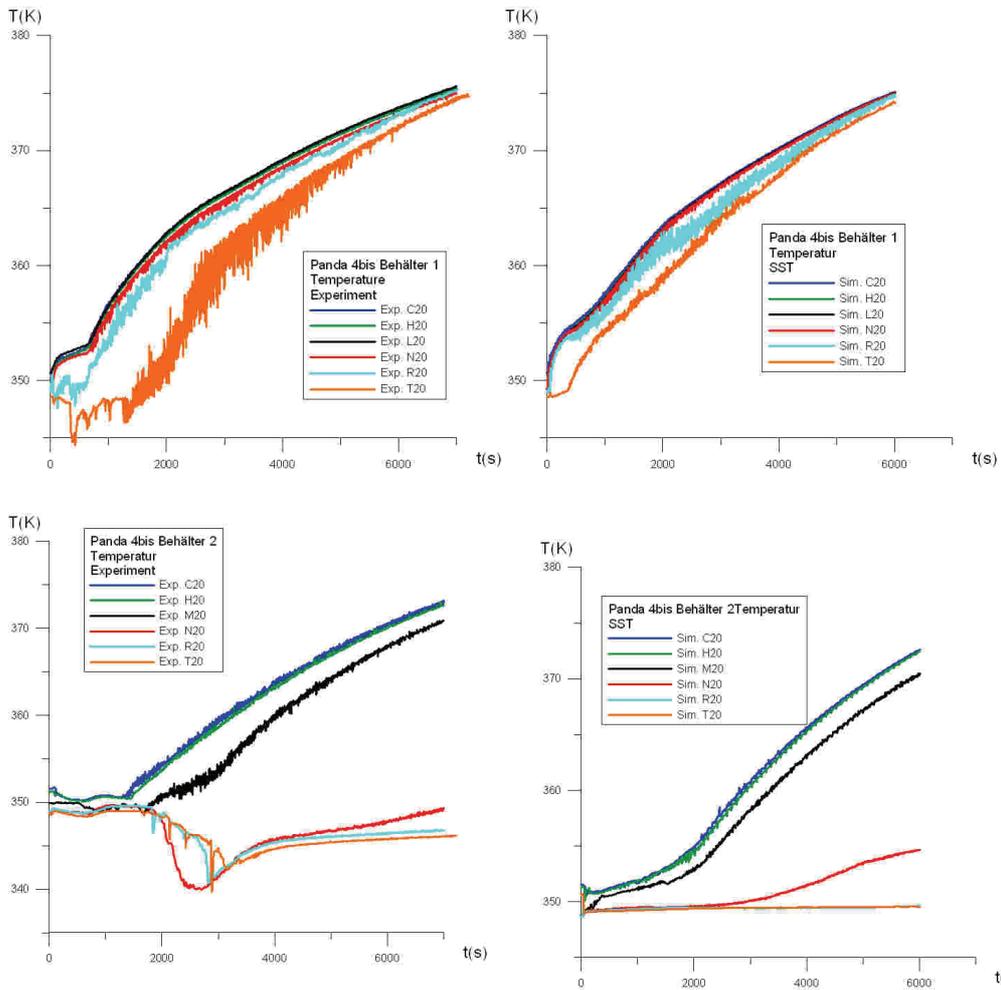


Abb. 2.3-4 Temperaturverteilung in Experiment und Simulation

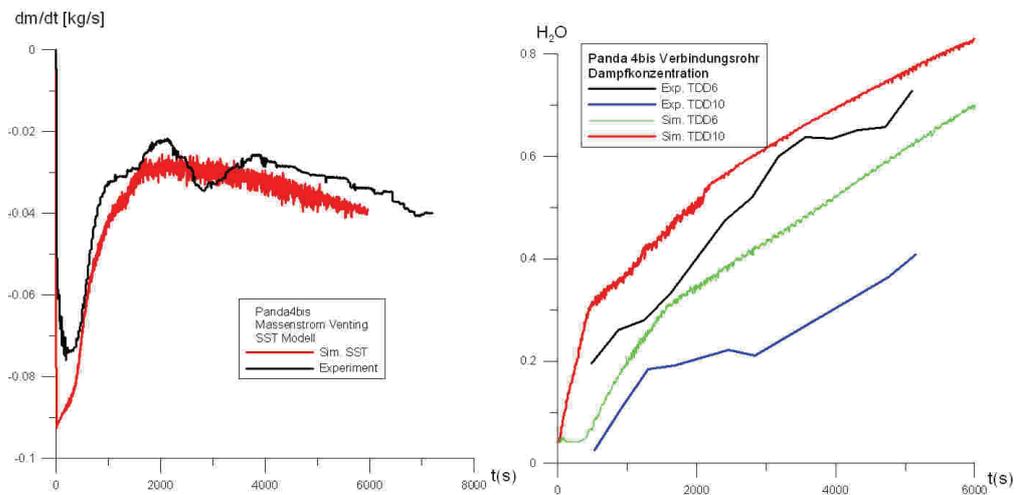


Abb. 2.3-5 Massenstrom aus 2. PANDAbehälter (links) und Dampfkonzentration im Verbindungsrohr (rechts)

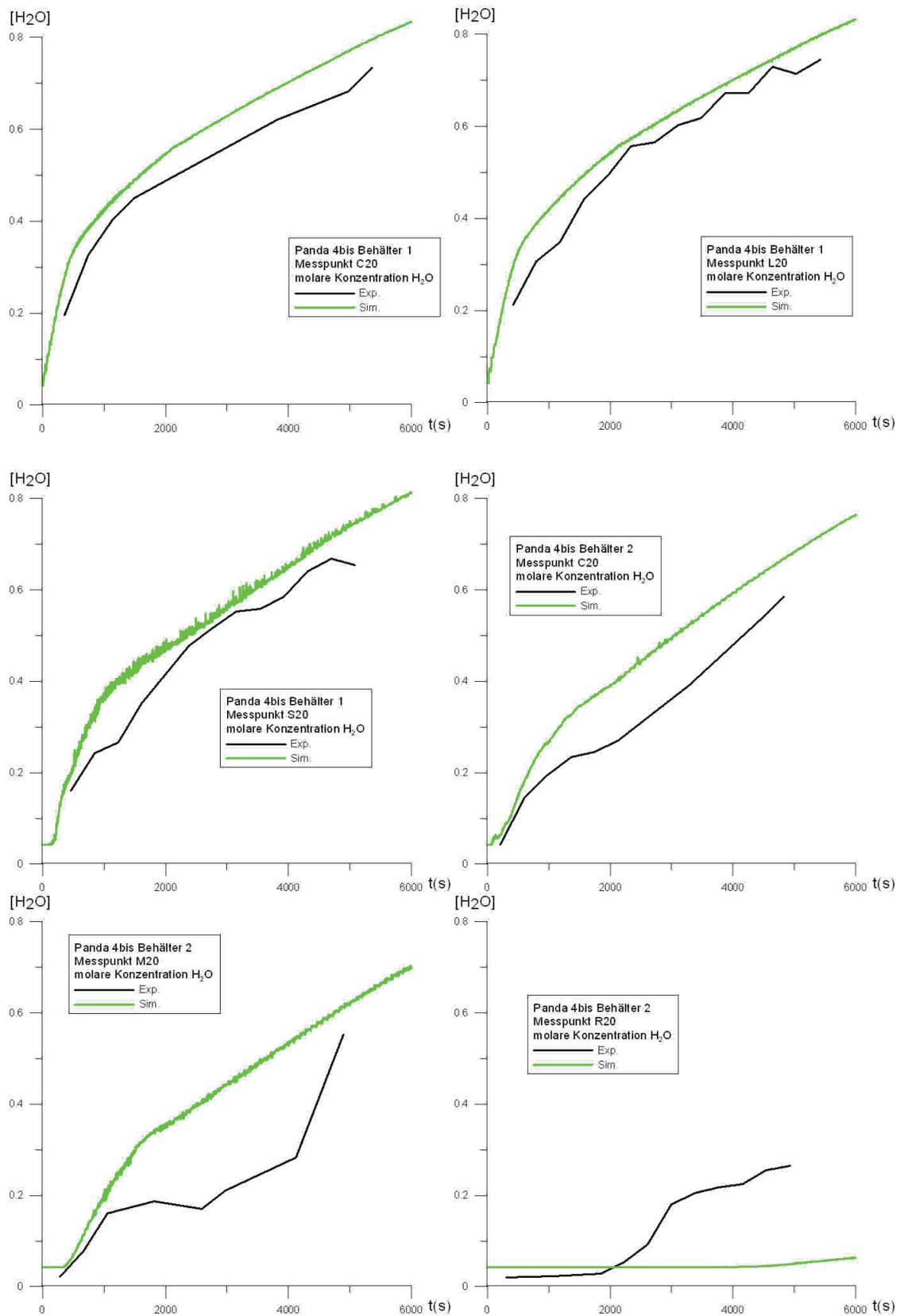


Abb. 2.3-6 Vergleich der Dampfkonzentration an verschiedenen Messstellen

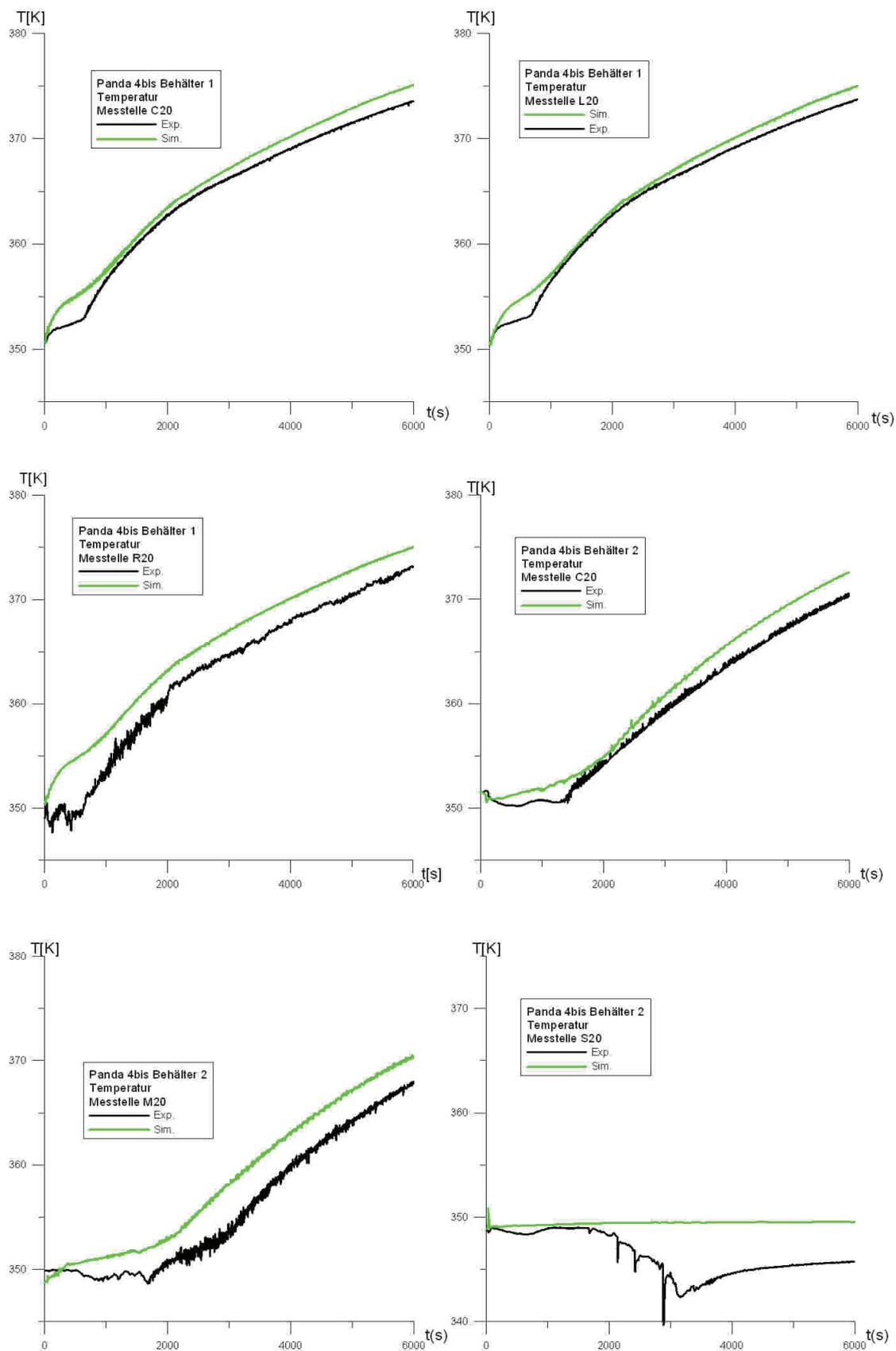


Abb. 2.3-7 Vergleich der Temperatur an verschiedenen Messstellen

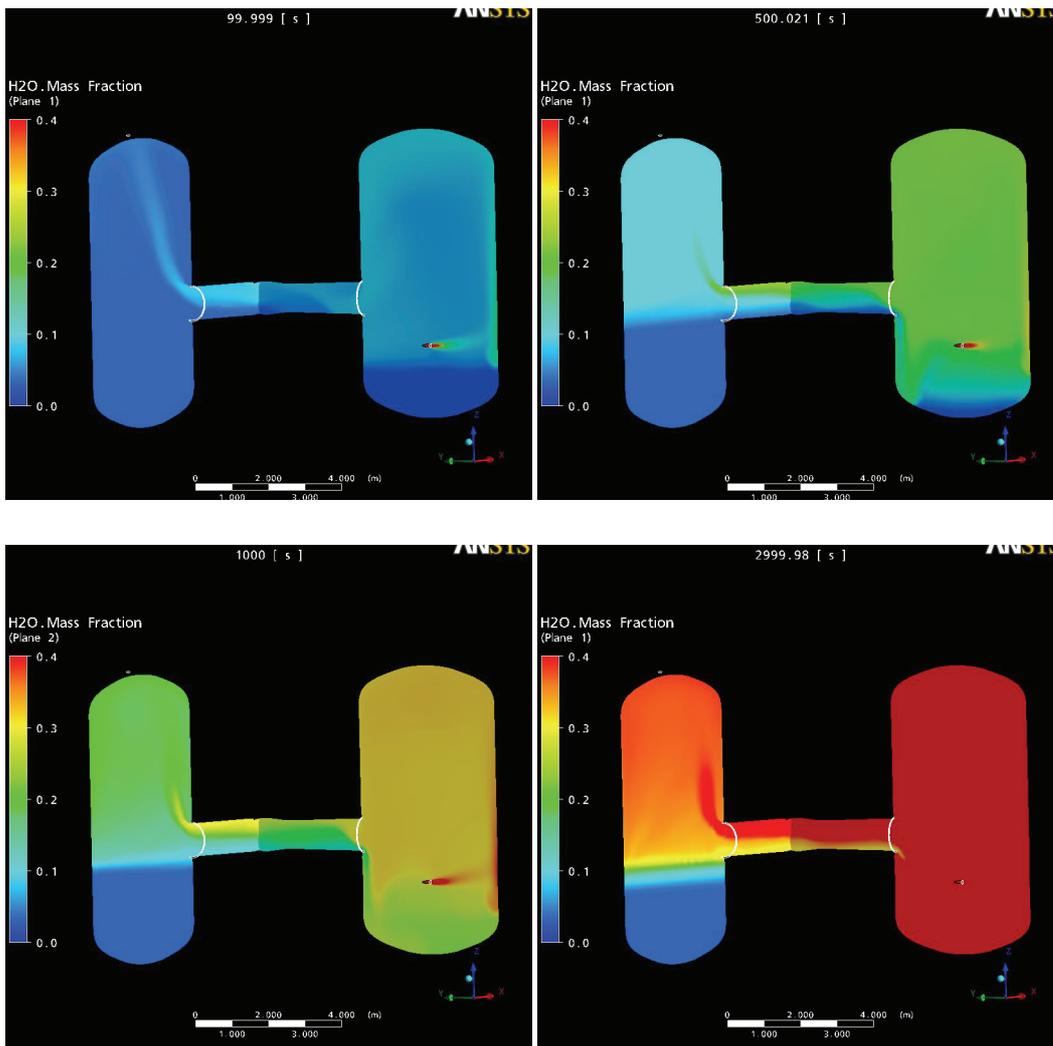


Abb. 2.3-8 Wasserdampfverteilung nach 100 s, 500 s, 1000 s und 3000 s

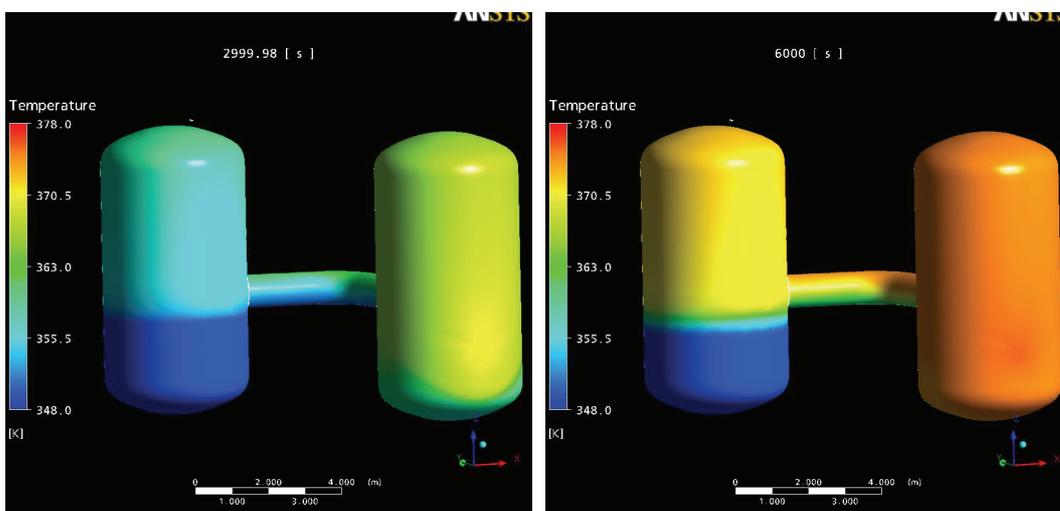


Abb. 2.3-9 Oberflächentemperatur der Behälterwände nach 3000 s & 6000 s

### 2.3.5 Untersuchung zur Gitterabhängigkeit der Simulationen

Das für die Simulationen standardmäßig verwendete Gitter besteht aus 261.000 strukturierten Zellen. im Bereich der Ausströmöffnung im Behälter D2 wurde ein unstrukturiertes Gitter mit ca. 4000 Zellen verwendet. Das in PANDA-4bis verwendete Gitter für den Gasraum entspricht in leicht modifizierter Form der Diskretisierung, die bei der Simulation des PANDA-4 zum Einsatz kam (siehe Abschnitt 5.3.2). Bei der Simulation des PANDA-4-Experiments wurde gezeigt, dass das dort verwendete Gitter ausreichend fein ist, um die Dampfverteilung in PANDA-Behältern bei ähnlicher Dampfzehrung zu simulieren. Bei Verwendung von 2-Gleichungsturbulenzmodellen wie z. B. dem SST-Modell wird der Wärmestrom in die Wände über Wandfunktionen berechnet. Dadurch wird erreicht, dass die Grenzschicht Festkörper/Fluid nicht im CFD-Gitter aufgelöst werden muss. Die Wandfunktionen sind vom verwendeten Turbulenzmodell abhängig und erfordern eine unterschiedlich feine räumliche Diskretisierung. Die in CFX implementierte Wandfunktion für das SST-Modell ist in der Lage, den konvektiven Wärmetransfer zwischen Fluid/Festkörper für  $y^+ < 100-300$  hinreichend genau zu beschreiben.

$$y^+ = \frac{\rho \Delta y \left( \frac{\tau_w}{\rho} \right)^{0.5}}{\mu}$$

$\rho$  ist die Gasdichte,  $\tau_w$  die Scherspannung an der Wand  $\mu$  die Viskosität. Bei SST-Turbulenzmodell ist  $\Delta y$  der Abstand zwischen erstem und zweitem Gitterpunkt (im Fluid) an der Wand.

Aus früheren Untersuchungen ist bekannt, dass die Gitterfeinheit in Wändnähe einen Einfluss auf die Wandkondensation haben kann. Deshalb wurde die Netzfeinheit in Wandnähe lokal verfeinert um den Effekt der räumlichen Diskretisierung auf die Simulation der Wandkondensation zu untersuchen (Abb. 2.3-10). Im standardmäßig für die Simulationen verwendeten Gitter ist die Dicke der ersten Zelle ( $\Delta x_{\text{wand}} \approx$  Ausdehnung der Zelle orthogonal zur Wandoberfläche) im Gasraum ca. 5 cm. Im ersten Verfeinerungsschritt wurde die Zelldicke auf ca. 2 cm verringert (Gitter fein1). Beim dritten Gitter betrug die Zelldicke noch ca. 1 mm (Gitter fein2). Diese Werte gelten für den überwiegenden Teil der Grenzschicht Gas-Wand. An Ecken und Krümmungen wie am Verbindungsrohr kann die Zelldicke von obigen Werten abweichen. Bei dem standardmä-

Big verwendeten Gitter ( $\Delta x_{\text{wand}} \sim 5 \text{ cm}$ ) beträgt der  $y^+$ -Wert an den Wänden teilweise über 100 und liegt damit an der oberen Grenze des Gültigkeitsbereichs der Wandfunktionen. Bei Verwendung des SST Turbulenzmodells sind die Wandfunktionen für  $y^+$  Werte bis zu 100 - 300 gültig. Bei Verwendung des feinsten Gitters ( $\Delta x_{\text{wand}} \sim 1 \text{ mm}$ ) liegen die  $y^+$  Werte fast überall unter 15 und damit im Gültigkeitsbereich des SST- Modells.

Die Wandkondensationsrate ist stark abhängig von der Wandoberflächentemperatur. Die Erwärmung der Wände im Laufe des Experiments muss deshalb berücksichtigt werden. Der Wärmetransport in den Wänden wird von CFX mittels 3-dimensionaler Wärmeleitung simuliert. Dazu werden die Behälterwände in das CFD-Gitter integriert. Die Dicke der Wandzellen beträgt in allen verwendeten CFD-Gittern ca. 5 mm.

Ein Vergleich der Simulationsergebnisse bei unterschiedlicher Verfeinerung des Gitters in Wandnähe zeigt einen schwachen Einfluss dieser Größe auf das Simulationsergebnis (Abb. 2.3-11, Abb. 2.3-12). Daraus kann geschlossen werden, dass auch das größte Gitter nahezu gitterunabhängig ist. Die Abweichungen zwischen Experiment und Simulationen sind viel größer als die Abweichungen bei unterschiedlich feiner Diskretisierung. Daher ist davon auszugehen, dass eine unzureichend feine Diskretisierung nicht der Hauptgrund für die Abweichungen zwischen Experiment und Simulation sein kann.

Eine Gitterverfeinerung in Wandnähe hat einen starken Einfluss auf das Konvergenzverhalten. Bei den Simulationen mit den Zelldicken 5 cm bzw. 2 cm konnten Zeitschritte von 0,1 s verwendet werden. Bei sehr feiner Auflösung der Grenzschicht (1 mm) musste der Zeitschritt dagegen auf 0,025 s verringert werden. Das hat einen entsprechend höheren Rechenaufwand zur Folge. Der deutlich höhere Rechenaufwand, insbesondere bei der feinsten Diskretisierung, ist der Grund, weshalb ein Teil des Experiments in der Gitterstudie nachgerechnet werden konnte.

Bei Verwendung des GRS-Kondensationsmodells geht der Zeitschritt  $\Delta t$  über die Beziehung  $\tau = 1,3 \Delta t$  in die Zeitkonstante des Volumenkondensationsmodells ein. Die Zeitkonstante bestimmt wie schnell die Kondensation abläuft und sich Sättigungsbedingungen einstellen. Bei der Simulation des feinsten Gitters musste der Zeitschritt reduziert werden (0,1 s  $\rightarrow$  0,025 s), um die Konvergenz sicherzustellen. Da auch bei Reduzierung des Zeitschritts keine merkliche Abweichung festzustellen war, kann daraus

indirekt geschlossen werden, dass der in den Simulationen verwendete Zeitschritt hinreichend klein war. Eine detailliertere Untersuchung zum Einfluss dieser Größe auf das Simulationsergebnis war auf Grund der begrenzten Rechenkapazität nicht möglich.

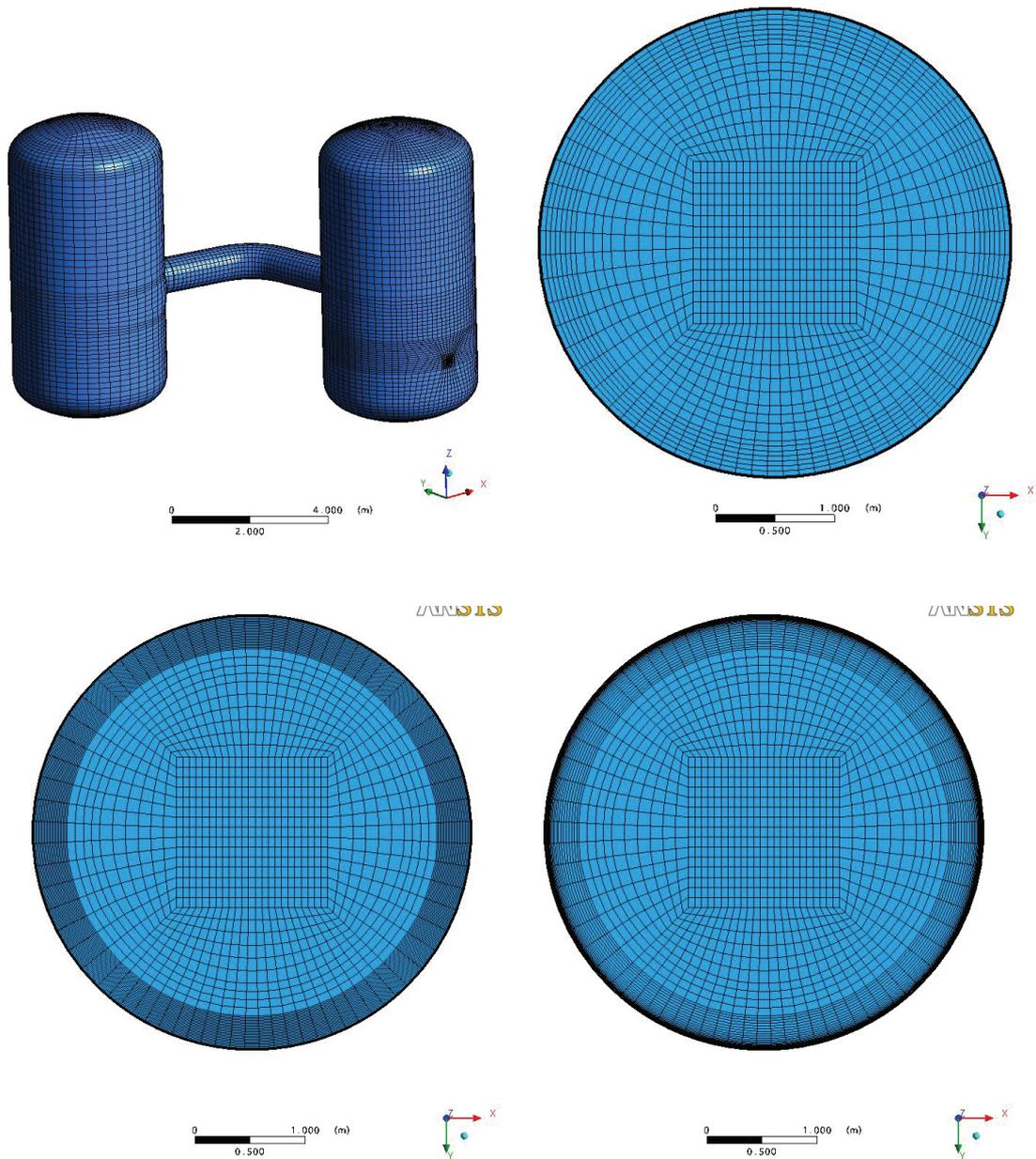


Abb. 2.3-10 Oben: Räumliche Diskretisierung beim Standardgitter ( $\Delta x_{\text{wand}} \sim 5 \text{ cm}$ )  
 rechts: horizontaler Schnitt durch einen der PANDAbehälter. Unten horizontaler Schnitt durch einen Behälter bei Verfeinerung des Gitters in der Nähe der Behälterwand (links:  $\Delta x_{\text{wand}} \sim 2 \text{ cm}$ , rechts:  $\Delta x_{\text{wand}} \sim 1 \text{ mm}$ ).

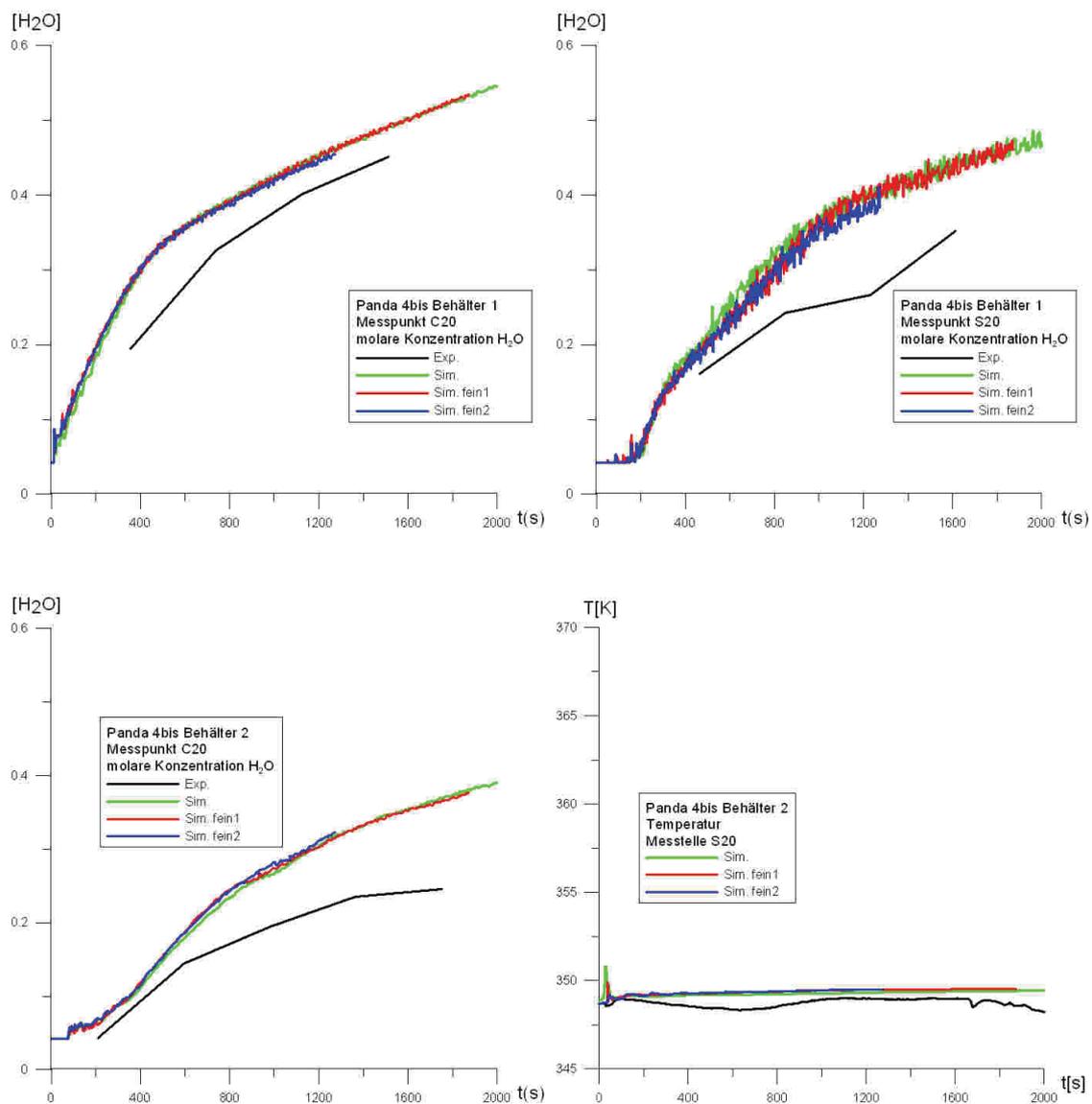


Abb. 2.3-11 Dampfkonzentration an verschiedenen Messstellen bei unterschiedlicher Diskretisierung in Wandnähe

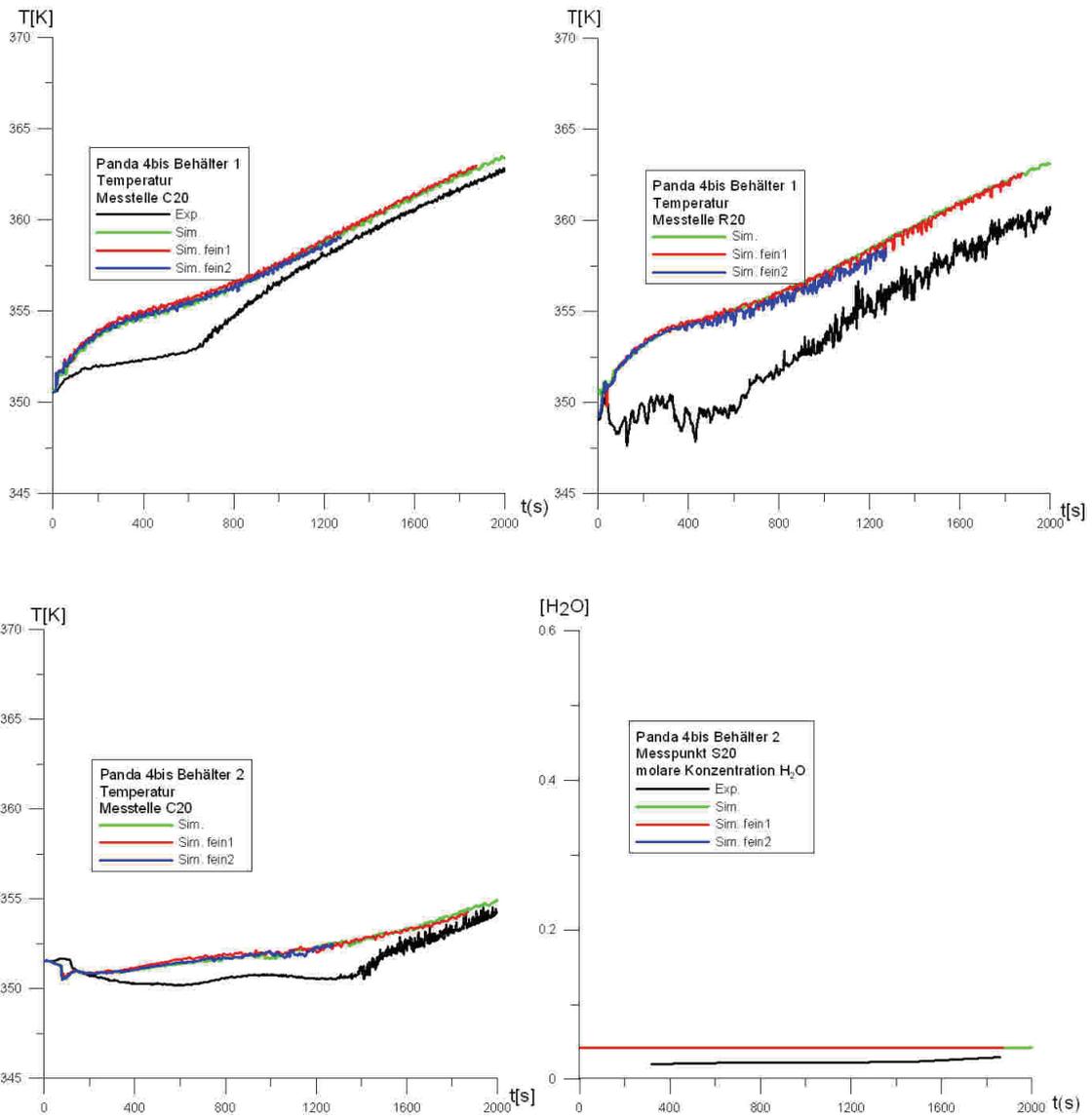


Abb. 2.3-12 Temperatur an verschiedenen Messstellen bei unterschiedlicher Diskretisierung in Wandnähe

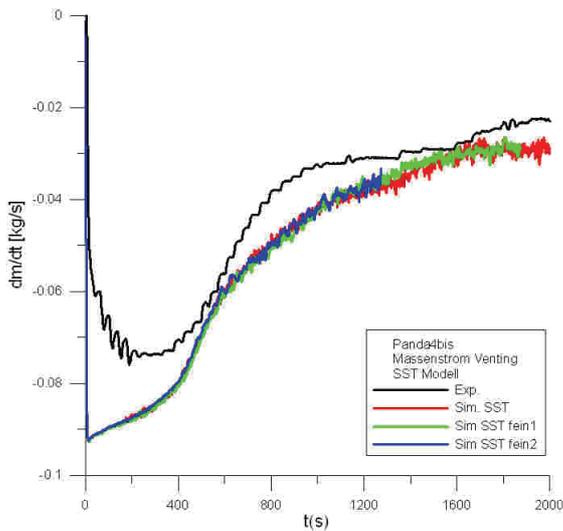


Abb. 2.3-13 Massenstrom aus 2. PANDAbehälter

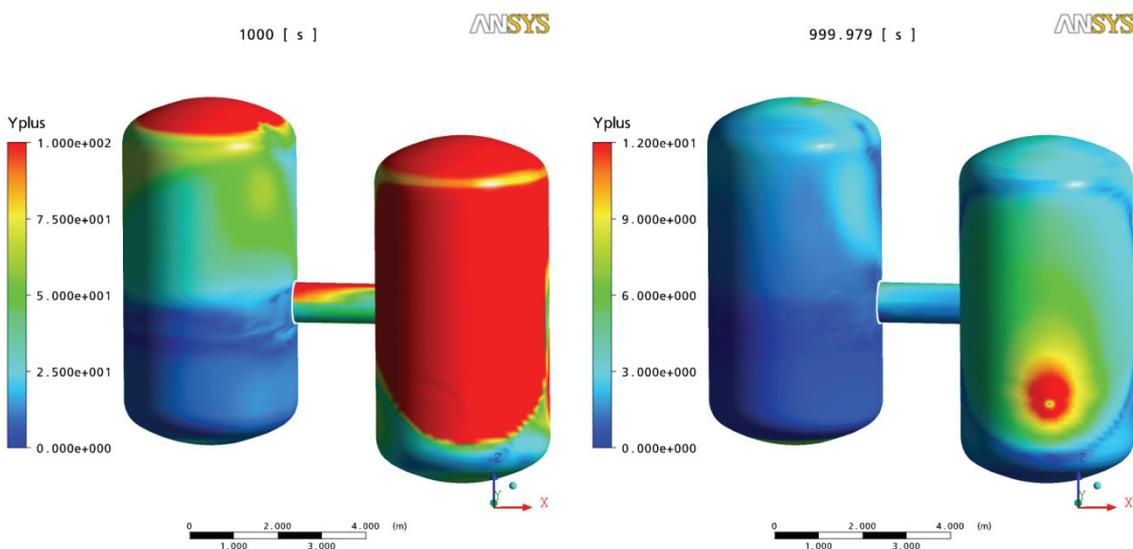


Abb. 2.3-14  $Y^+$ -Werte an der Behälterwand nach 1000 s. Links: Standard-Gitter( $\Delta x_{wand} \sim 5$  cm) ; rechts Gitter mit  $\Delta x_{wand} \sim 1$  mm

### 2.3.6 Simulation des Dampfes als reales Gas

Bei verschiedenen Versuchsnachrechnungen (z. B. TH-2, VANAM M3) konnte durch die Simulation von Dampf als reales Gas die Übereinstimmung mit dem Experiment verbessert werden. Darum wurde auch beim PANDA-4bis-Experiment der Dampf als reales Gas mit dem Redlich-Kwong-Modell simuliert.

Ein Vergleich der Simulationsergebnisse zeigt, dass diese Modelländerung einen geringen Einfluss auf die Simulationsergebnisse hat. Beim Vergleich der Dampfkonzentrationen ist an allen Messstellen ein zu vernachlässigender Einfluss des Gasmodells für Wasserdampf zu sehen (Abb. 2.3-15). Auch bei der Temperatur sind die Änderungen sehr gering (Abb. 2.3-16). Im 1. PANDAbehälter ist die Temperatur in den ersten 1000 s geringfügig niedriger (Änderung kleiner als 1 K) bei Simulation mit dem Modell für ein reales Gas. Damit liefert das Realgasmodell etwas bessere Simulationsergebnisse, allerdings ist die Verbesserung klein gegenüber der weiterhin vorhandenen Abweichung zum Experiment. Im 2. PANDA-Behälter (insbesondere in der unteren Hälfte) und für spätere Zeitpunkte ist der Einfluss des Gasmodells von Dampf noch kleiner. Auch für den Ventingmassenstrom aus dem Behälter D2 liefert das Modell von Redlich-Kwong einen geringfügig kleineren Massenstrom als das Idealgasmodell (Abb. 2.3-17). Insgesamt liefert das Realgasmodell für Dampf tendenziell bessere Ergebnisse für den PANDA-4bis-Versuch, allerdings sind die Verbesserungen, die hierdurch erzielt werden, gering.

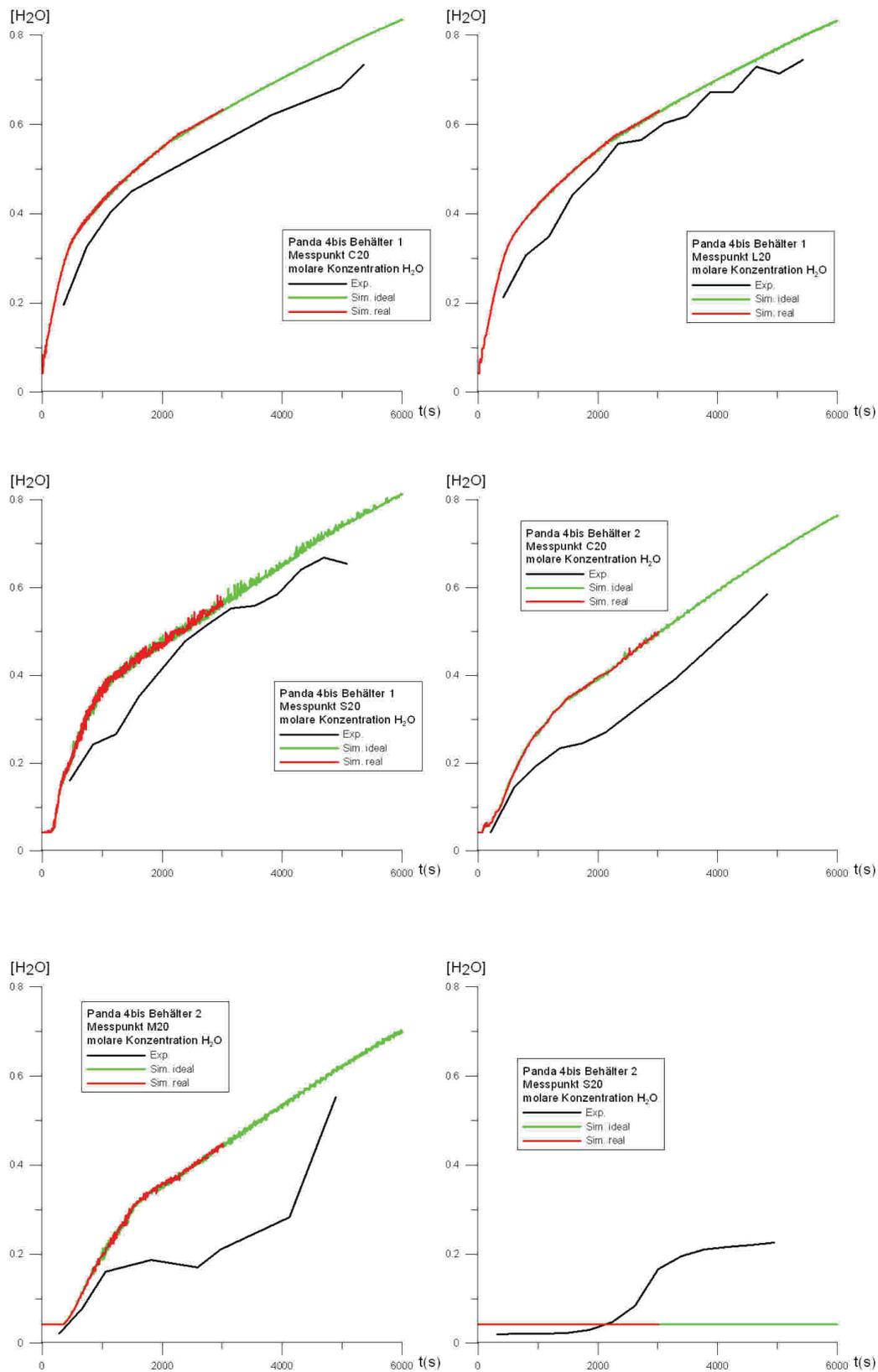


Abb. 2.3-15 Dampfkonzentration an verschiedenen Messstellen

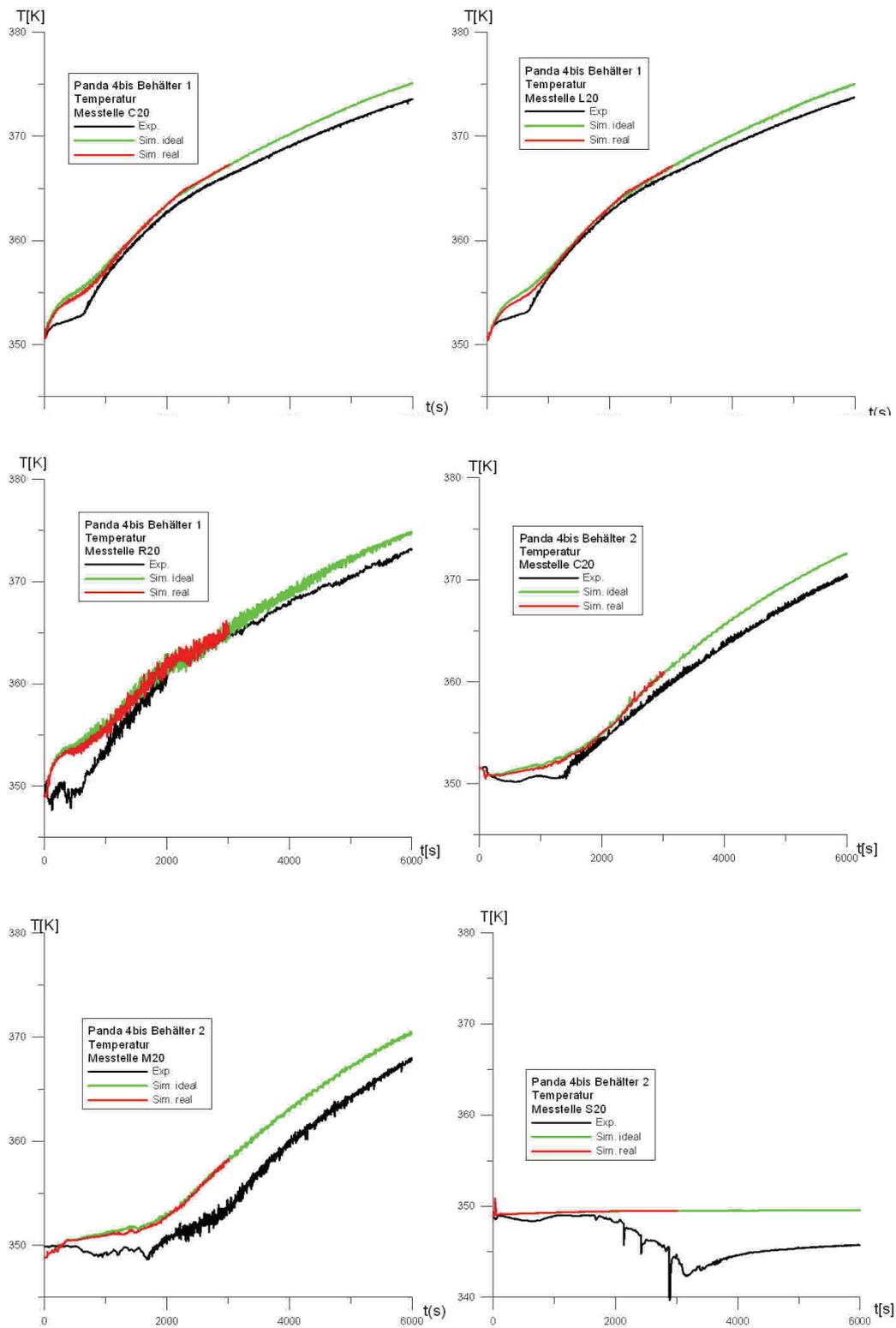


Abb. 2.3-16 Temperatur an verschiedenen Messstellen

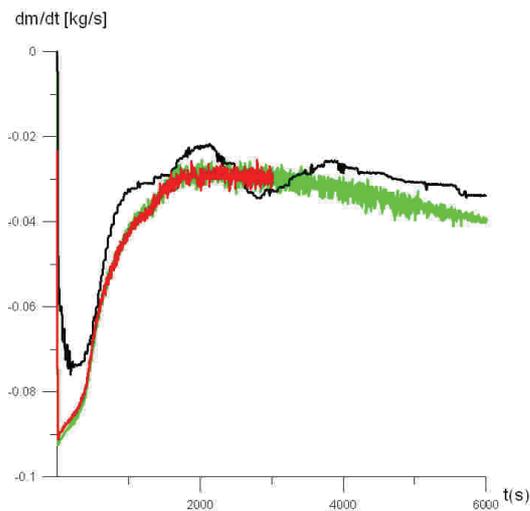


Abb. 2.3-17 Massenstrom aus 2. PANDAbehälter

### 2.3.7 Zusammenfassung

Der PANDA-4bis-Versuch wurde mit CFX-11 und dem Wand- und Volumenkondensationsmodell der GRS nachgerechnet. Durch eine Gitterstudie wurde der Einfluss der räumlichen Diskretisierung auf das Simulationsergebnis untersucht.

Der prinzipielle Verlauf der Strömung konnte qualitativ richtig berechnet werden. Wie auch im Experiment herrscht im ersten Behälter und in der oberen Hälfte des Behälters D2 eine nahezu homogene Verteilung, während unterhalb des Verbindungsrohres eine geschichtete Dampfkonzentration vorherrscht. Quantitativ wird die Dampfkonzentration im Behälter D1 und in der oberen Hälfte des Behälters D2 überschätzt ( $\sim 5 - 10$  vol %). Auch der Temperaturverlauf wird für diese Raumbereiche qualitativ richtig vorhergesagt. Quantitativ liegen die Abweichungen unter 5 K.

Einige physikalische Prozesse konnten bei der Simulation wegen Modellschwächen des Kondensationsmodells nicht modelliert werden. Aufgrund numerischer Probleme konnte die Kondensation im Einströmrohr nicht simuliert werden. Dadurch wird der Dampfmassenstrom, der in den Behälter D1 einströmt, in der Anfangsphase überschätzt. Dies kann eine Ursache für die zu hohen Dampfkonzentrationen sein. Da im Kondensationsmodell das Kondensat nicht modelliert wird, konnte das Abfließen des Kondensats in die untere Hälfte des Behälters D2 und die dadurch auftretenden Verdampfungsvorgänge nicht simuliert werden. Mit dieser Modellschwäche lässt sich die

größere Abweichung zwischen Rechnung und Experiment in der unteren Hälfte des Behälters D2 erklären. Es wurde auch eine Simulation durchgeführt, bei der der Dampf als reales Gas behandelt wurde. Diese Rechnung liefert geringfügig bessere Ergebnisse für die Temperaturen im Behälter D1 und für den Ventingmassenstrom in den ersten 1000 s. Die Verbesserungen sind aber gegenüber der Abweichung zum Experiment zu vernachlässigen.

## **2.4 Fazit aus den Validierungsrechnungen für Wand- und Volumenkondensationsmodell**

Die Versuchsnachrechnungen anhand TH-2, VANAM M3 und PANDA-4bis mit CFX-11 haben gezeigt, dass dieses Modell in der Lage ist, die Kondensationsrate und die dabei freiwerdende Kondensationswärme hinreichend genau zu simulieren. Für eine hinreichend genaue Modellierung der Wandkondensation ist eine sehr feine Diskretisierung an der Grenzschicht Gas/Wand notwendig.

Gegenwärtig wird das bei der Kondensation gebildete Wasser bei der Simulation nicht weiterverfolgt, d. h. die Massenerhaltung ist nicht gewährleistet und die Ausbildung von Wasserpools kann nicht simuliert werden. Das ist auch der Grund, weshalb es gegenwärtig nicht möglich ist, Verdampfungsvorgänge in solchen Wasservorlagen zu simulieren. Hierzu wäre die Information erforderlich, ob und wie viel Kondensat sich angesammelt hat und welcher thermodynamische Zustand im Wasserpool vorliegt. Dies hat zum Beispiel bei der Nachrechnung des Versuches PANDA-4bis zu größeren Abweichungen bei der Berechnung der Dampfkonzentration in der unteren Hälfte des 2. Behälters geführt. Des Weiteren kann durch den Transport von Kondensat auch Energie transportiert werden, z. B. wenn heißes Kondensat entlang von kalten Wänden nach unten fließt. Auch dieser Effekt kann die Temperatur- und Gasverteilung beeinflussen und darf deshalb nicht vernachlässigt werden. Eine Erweiterung dieses Modells um ein Modell für das bei der Kondensation gebildete Kondensat erscheint notwendig und ist für das Nachfolgevorhaben geplant.

### **3 Modellierung von autokatalytischen Wasserstoffrekombinatoren**

In deutschen Kernkraftwerken werden passive autokatalytische Rekombinatoren zur Verhinderung großräumiger Wasserstoff-Verbrennungen oder Detonationen eingesetzt. Um eine realistische Vorhersage der Wasserstoffkonzentrationen im Sicherheitsbehälter bei einem schweren Störfall mit H<sub>2</sub>-Freisetzung treffen zu können, muss bei der Simulation der Einfluss der H<sub>2</sub>-Rekombinatoren berücksichtigt werden können. Bei dem von der GRS entwickelten Modell für die H<sub>2</sub>-Rekombinatoren in CFX werden die Rekombinatoren nicht im Detail simuliert, vielmehr wird ihre Funktion nachgebildet. Die Validierung des Modells erfolgt durch die Nachrechnung von 3 verschiedenen, neuen Versuchen an der THAI-Anlage für AREVA Rekombinatoren. Eine Validierung an älteren Versuchen der Gx-Serie am Battelle-Modell-Containment wurde verworfen, da nicht mehr genügend Details verfügbar waren.

#### **3.1 Zielsetzung**

In einem Sicherheitsbehälter befindet sich eine große Anzahl an Rekombinatoren (typischerweise 50-60). Zur Begrenzung des Rechenaufwands werden die einzelnen Rekombinatoren bei Simulation der Gasverteilung in einem Sicherheitsbehälter mit CFX i. d. R. nicht detailliert abgebildet. Soll dagegen das Strömungsfeld im Rekombinator bzw. in dessen näherer Umgebung detailliert untersucht werden, so besteht prinzipiell die Möglichkeit, den Rekombinator mit seinen katalytischen Platten im CFD-Gitter abzubilden und so detailliertere Informationen zu dessen Verhalten zu erhalten /HET 00/.

Aus experimentellen Daten wurden von AREVA-Korrelationen für die von ihnen hergestellten Rekombinatoren unterschiedlicher Bauart abgeleitet. Mit Hilfe dieser Korrelationen wurde ein einfaches Rekombinatormodell für CFX entwickelt und in CFX-11 implementiert. Anhand der Nachrechnung von drei an der THAI-Versuchsanlage durchgeführten Versuchen wurde dieses Rekombinatormodell einer ersten Validierung unterzogen.

## **3.2 Beschreibung des Rekombinatormodells**

### **3.2.1 Abbildung eines Rekombinators im CFD-Gitter**

Bei dem hier beschriebenen Modell wird der Rekombinator vereinfacht abgebildet (Abb. 3.2-1). Das Innere des Rekombinators wird nicht ins CFD-Gitter integriert. Die untere Öffnung des Rekombinators, in die das Gas in den Rekombinator einströmt, wird als Outlet-Randbedingung in das CFD-Gitter integriert. Die obere Öffnung des Rekombinators wird als Inlet-Randbedingung in CFX modelliert. Geometrische Details werden hierbei bezüglich der Lage und Fläche der Öffnungen berücksichtigt, damit der Impuls des ein/ausströmenden Gases realistisch simuliert wird.

Ein Teil der bei der katalytischen Reaktion freigesetzten Energie wird über Strahlung oder konvektiven Wärmetransport zur Temperaturerhöhung der Rekombinatorwände führen. Wird in der Simulation die gesamte freigesetzte Energie zur Temperaturerhöhung des Gases verwendet, so wird die Gastemperatur am Rekombinaturaustritt stark überschätzt, was zu einer fehlerhaften Berechnung der Gasverteilung führen kann. Deshalb werden die Rekombinatorwände ins CFD-Gitter als „Solid-Blocks“ integriert und ihnen wird ein Teil der freigesetzten Energie zugeführt. Als Vereinfachung wird dabei ein räumlich homogener Wärmestrom in die Innerseite der Wände angenommen. Die Validierungsrechnungen zeigen aber, dass diese Vereinfachung keinen signifikanten Einfluss auf die Gasverteilung im THAI-Behälter hatte.

Bei den Validierungsrechnungen wurde der Rekombinator ganz bewusst mit einem relativ groben Gitter abgebildet, da auch bei der späteren Anwendung - der Simulation eines Containments - für die Rekombinatoren eine grobe Diskretisierung möglich sein wird.

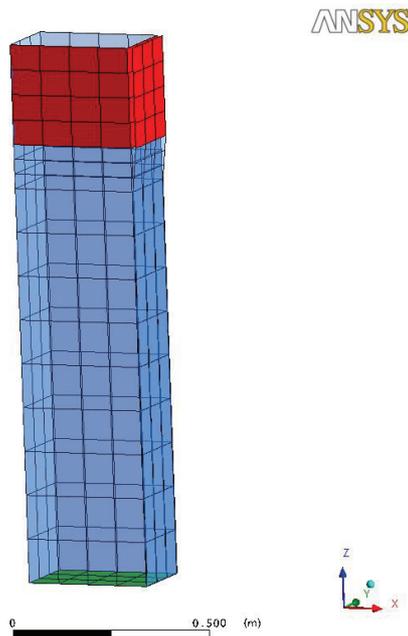


Abb. 3.2-1 Rekombinatormodell für CFX; rot: Rekombinatoraustritt, grün: Rekombinatoreintritt, blau: Rekombinatorwand

### 3.2.2 Korrelationen zur Beschreibung der Rekombinationsrate

Von AREVA wurden für verschiedene Rekombinatortypen anhand von experimentellen Daten empirische Korrelationen hergeleitet, die die Menge an umgesetzten Wasserstoff angeben /HIL 03/. Die im Folgenden beschriebenen Korrelationen sind in Abwesenheit von CO gültig. Für Gasmische, die CO enthalten, sind ähnliche Korrelationen vorhanden, die aber nicht in das Rekombinatormodell implementiert wurden.

Ein kalter Rekombinator beginnt mit der Entfernung von  $H_2$  aus der Atmosphäre erst, wenn ein Schwellenwert  $x_{H_2,Start}$  von 2 vol.% überschritten wird.

$$x_{H_2,Start} = 2 \text{ vol. \%}$$

Da im Experimenten  $x_{H_2,Start}$  von diesem Wert oft stark abweicht, wird dieser Parameter in der CFX-Definitionsdatei gesetzt. Die Uservariable lautet:

$$\text{StartH2}=2.0$$

Bei einem Neustart einer unterbrochenen CFX-Simulation wird anhand der Wandtemperatur des Rekombinators entschieden, ob er bereits in Betrieb war und damit, ob  $x_{H_2,Start}$  oder der Schwellenwert für einen warmen Rekombinator (0,5 vol.%) als Kriteri-

um zur Anwendung kommt. Die Grenztemperatur zur Entscheidung warmer/kalter Rekombinator wird mittels der Uservariablen

$$\text{StartTemp} = 320$$

gesetzt.

Die H<sub>2</sub> Rekombination endet, wenn das in den Rekombinator einströmende Gas eine zu geringe H<sub>2</sub>- oder O<sub>2</sub>-Konzentration besitzt:

$$x_{H_2,stop} = 0,5 \text{ vol. \%}$$

$$x_{O_2,stop} = 0,25 \text{ vol. \%}$$

Wenn alle drei Schwellenwerte überschritten werden, wird die Menge des abgebauten Wasserstoffs  $r_{H_2}$  wie folgt berechnet:

$$r_{H_2} = (Z_{H_2}^{in} - Z_{H_2}^{aus}) * \dot{m}$$

$$= f * \min(x_{H_2}, 2 * x_{O_2}, x_{H_2}^{max}) * (k_1 * p + k_2) * \tanh(x_{H_2} - x_{H_2,stop})$$

Der Faktor f wird wie folgt berechnet:

$$f = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & x_{H_2} < x_{O_2} \\ 0,6 & x_{H_2} \geq x_{O_2} \\ 0 & x_{O_2} < x_{O_2,stop} \end{array} \right\}$$

$Z_{H_2}^{in/aus}$  ist der H<sub>2</sub>-Massenbruch am Rekombinatorein-/austritt,  $\dot{m}$  ist der Massenstrom durch den Rekombinator, p der Druck in bar, und x<sub>i</sub> die Konzentrationen in Volumenprozent.

Dabei sind k1 und k2 Konstanten die vom Rekombinatortyp abhängen (Tab. 3.2-1).

Tab. 3.2-1 Konstanten k1 und k2 für verschiedene Rekombinatormodelle

Rekombinatorotyp	k1 [kg/s/bar]	k2 [kg/s]
FR90/1-1500 T	0,137 e-3	0,167 e-3
FR90/1-750 T	0,061 e-3	0,074 e-3
FR90/1-1380 T	0,031 e-3	0,037 e-3
FR90/1-960	0,031 e-3	0,037 e-3
FR90/1-320	0,01 e-3	0,012 e-3
FR90/1-150	0,0048 e-3	0,058 e-3

Bei einigen Versuchen, so bei den hier nachgerechneten Versuchen an der THAI-Anlage, wird nicht ein vollständiger Rekombinator verwendet, sondern eine Rekombinatorhälfte. Für den Rekombinator FR1-380T/1/2 werden von ARVEA  $k_1 = 0,0137 \text{ e-3 [kg/s/bar]}$  und  $k_2 = 0,0163 \text{ e-3 [kg/s]}$  angegeben /KAN 08/.

Aus Versuchen ist bekannt, dass nicht der gesamte in den Rekombinator einströmende Wasserstoff abgebaut wird, selbst wenn genügend Sauerstoff vorhanden ist. Der Versuch HR-2 konnte erfolgreich nachgerechnet werden, wenn unterstellt wird, dass ca. 65 % des einströmenden Wasserstoffs umgesetzt werden (Abschnitt 3.3.4.1):

$$f_{eff} = \frac{(x_{H_2}^{in} - x_{H_2}^{aus})}{x_{H_2}^{in}}$$

$$f_{eff} = 0,65$$

$f_{eff}$  ist eine vom Nutzer zu definierende Größe, die an experimentelle Daten anzupassen ist. Im Fall der OECD-THAI Versuche kann  $f_{eff}$  aus den Versuchsdaten abgeleitet werden, da die  $H_2$ -Konzentrationen am Rekombinatorein- und austritt gemessen wurden.

Für die Konzentrationen  $x_i$  der verschiedenen Spezies am Rekombinatoraustritt gilt:

$$u = \min(x_{H_2} * 0,5; x_{O_2}) * f_{eff}$$

$$x_{H_2}^{aus} = x_{H_2}^{ein} - 2u$$

$$x_{O_2}^{aus} = x_{O_2}^{ein} - u$$

$$x_{H_2O}^{aus} = x_{H_2O}^{ein} + 2u$$

Daraus kann nach Umrechnung in Massenbrüche der Massenstrom  $\dot{m}$  durch den Rekombinator berechnet werden:

$$\dot{m} = \frac{r_{H_2}}{(Z_{H_2}^{ein} - Z_{H_2}^{aus})}$$

Ein Teil der bei der katalytischen Reaktion freigesetzten Energie  $E$  wird zur Temperaturerhöhung des Gases führen, ein anderer Teil erhöht über Strahlung oder konvektiven Wärmetransport die Temperatur der Rekombinatorwände. Der Anteil  $f_q * E$  wird zur Temperaturerhöhung des Gases führen. Die Temperatur am Rekombinatorausgang  $T_{aus}$  wird so bestimmt, das gilt:

$$f_q * E = \int_{T_{ein}}^{T_{aus}} c_p * dT$$

Der Anteil  $(1-f_q)*E$  wird als Wärmestrom den Rekombinatorwänden räumlich homogen zugeführt. Die Annahme eines konstanten Faktors  $f_q$  stellt eine Vereinfachung dar, da der Anteil der in die Wände transportierten Energie von der Temperaturdifferenz zwischen Gas und Wand abhängt. Bei der Nachrechnung von HR-2 hat sich aber gezeigt, dass selbst mit dieser starken Vereinfachung hinreichend genaue Simulationsergebnisse erzielt werden können (Abschnitt 3.3.4.2). Gegebenenfalls lässt sich bei Bedarf das Modell dahingehend erweitern, dass  $f_q$  in Abhängigkeit von der Gas- und der Wandtemperatur gewählt wird.

### 3.2.3 Implementation des Rekombinatormodells in CFX-11

Das Rekombinatormodell wurde mit Hilfe von User-FORTRAN Routinen an CFX-11 gekoppelt. Dabei wurden ausschließlich von CFX zur Verfügung gestellte Interface-Funktionen verwendet. Diese ändern sich normalerweise bei einem Versionswechsel nicht. Deshalb sollte das Modell auch in zukünftigen CFX-Versionen lauffähig sein, bzw. sollte eine Anpassung an die neue CFX-Version mit geringem Aufwand möglich sein.

Die Parameter  $k_1$ ,  $k_2$ ,  $f_{\text{eff}}$ ,  $f_q$  werden über User-Variablen in der CFX- Definitionsdatei gesetzt. Die Schlüsselworte und die Syntax lauten:

K1:  $K1 = 0,0137e-3$

K2:  $K2 = 0,0163e-3$

$f_{\text{eff}}$ :  $\text{EffH2} = 0,65$

$f_q$ :  $\text{Qwandf} = 0,25$

Ebenso wird die Anzahl der Rekombinatoren als User-Variable definiert:

$\text{NumReko} = 1$

In der AREVA-Gleichung für die Abbaurrate wird davon ausgegangen, dass bei einem kalten Rekombinator die Rekombination erst ab einer  $\text{H}_2$ -Konzentration von 2 vol.% einsetzt. Die HR-Versuchsreihe zeigt, dass der tatsächliche Rekombinationsbeginn bei einem PAR deutlich von diesem Wert abweichen kann. Deshalb wird diese Größe vom Nutzer vorgegeben:

$\text{StartH2} = 2.0$

$\text{StartTemp} = 320,0$

Die Variable  $\text{StartTemp}$  definiert bis zu welcher mittleren Temperatur der Rekombinatorwände von einem kalten Rekombinator ausgegangen wird. Die AREVA-Korrelationen gehen davon aus, dass auch bei einem heißen Rekombinator die katalytische Wasserstoffrekombination erst ab 0,5 vol.%  $\text{H}_2$  einsetzt. Deshalb muss  $\text{StartH2} \geq 0,5$  gesetzt werden.

### 3.3 Simulation des HR-2 Experiments

#### 3.3.1 Kurze Beschreibung des HR-2-Experiments

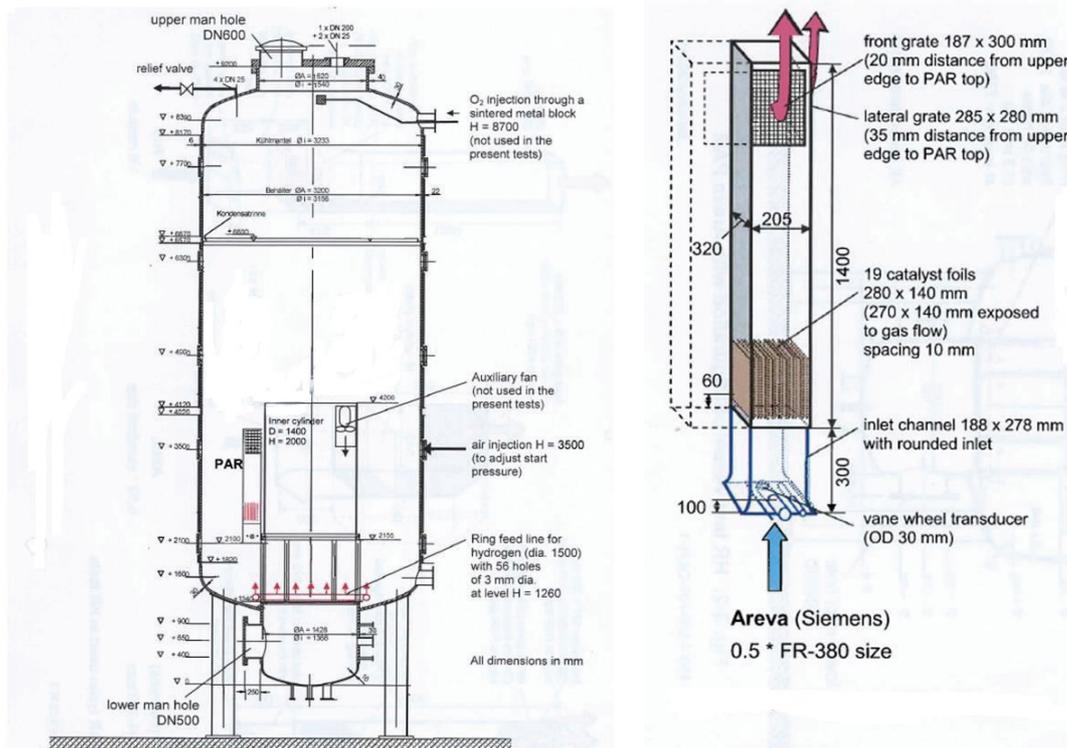
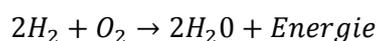


Abb. 3.3-1 Aufbau des HR-2 Experiments und der Rekombinatoren FR-380 1/2 /HIL 03/

Bei den THAI-Rekombinatorversuchen wird  $H_2$  durch einen Ring mit 56 Öffnungen mit einem Durchmesser von 3 mm eingespeist. Im THAI-Behälter befindet sich ein autokatalytischer Rekombinator, der - sobald ein Schwellenwert bei der  $H_2$ -Konzentration überschritten wird - mit dem Abbau von Wasserstoff beginnt. An den katalytischen Platten im Rekombinator läuft die chem. Reaktion ab:



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

Beim HR-2-Experiment wurde der AREVA-Rekombinatortyp FR-380 untersucht. Die Anzahl der katalytischen Platten und der Strömungsquerschnitt wurden auf 50 % reduziert.

Die Startbedingungen beim HR-2-Experiment waren trockene Luft (ohne Wasserstoff) bei 1,0 bar Druck und 27,9 °C.

Die Wasserstoffeinspeiserate wurde wie folgt modifiziert:

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

An verschiedenen Stellen im THAI-Behälter und im Rekombinator wurden u. a. die Temperatur und die Wasserstoffkonzentration gemessen. Eine genauere Versuchsbeschreibung ist in /KAN 09/ zu finden.

### **3.3.2 Modellierung des HR-2-Experiments mit CFX**

Das HR-2-Experiment (Phase 1 und 2) wurde mit CFX-11 simuliert. Dabei kam das in Abschnitt 3.2 beschriebene Rekombinatoremodell zum Einsatz. Die Turbulenz wurde mit dem SST-Modell simuliert. Um eine ausreichende Konvergenz zu erreichen (RMS-Residuum =  $1.0e-4$ ) musste ein relativ kleiner Zeitschritt gewählt werden. Die Simulation wurde mit einem adaptiven Zeitschritt von 0,1 s - 0,01 s durchgeführt. Ein Grund für die relativ kleinen Zeitschritte ist, dass sich bei der H<sub>2</sub>-Einspeisung kein zeitlich konstanter ringförmiger Plume ausbildet, sondern der Plume etwas schwankt. Bei der Simulation wurde ein relativ grobes CFD-Gitter verwendet. Es besteht aus ca. 100.000 Zellen (Abb. 3.3-2). Die H<sub>2</sub>-Einspeisung erfolgte über einen Ring mit 56 Öffnungen mit einem Durchmesser von je 3 mm. Im CFD-Gitter wurde die Einspeisung vereinfacht dargestellt. Der H<sub>2</sub>-Einspeisung erfolgt in der Simulation über einen 3 mm dicken Ring. Ein Vergleich der Wasserstoffkonzentrationen vor Beginn des H<sub>2</sub>-Abbaus zeigt eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment (Abschnitt 3.3.3). Deshalb kann davon ausgegangen werden, dass diese Vereinfachung zulässig ist.

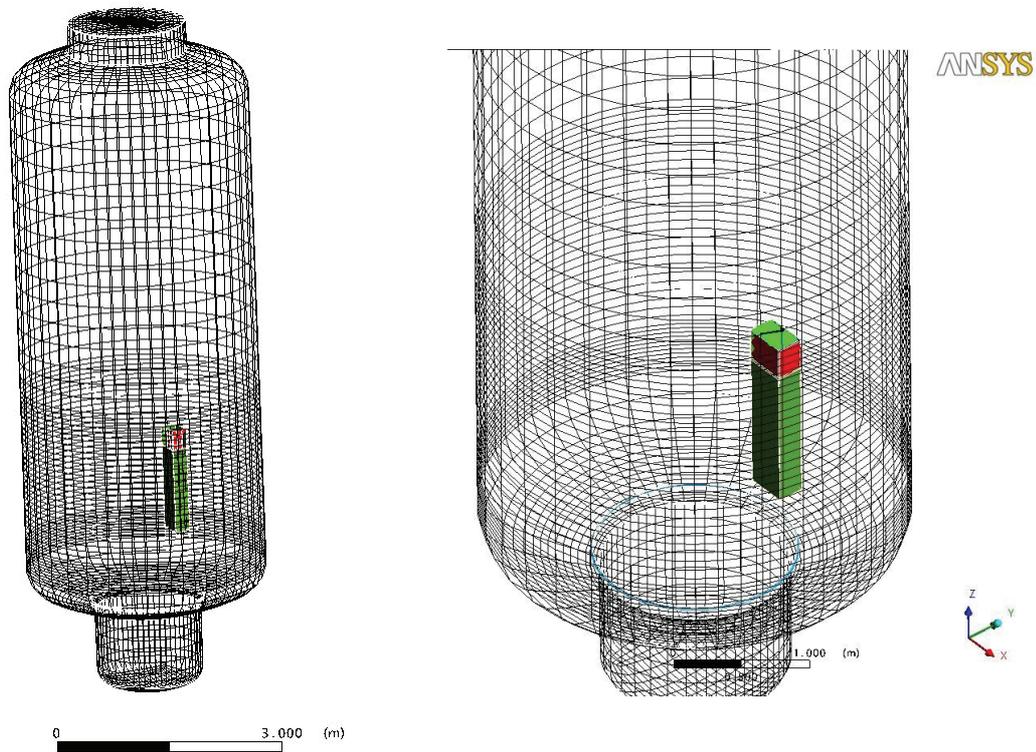


Abb. 3.3-2 Verwendete Diskretisierung in CFX; grün: Rekombinatorwände, rot: obere Rekombinatoröffnungen, blau: Ring mit H<sub>2</sub>-Einspeisung

### 3.3.3 Diskussion der Simulationsergebnisse

#### 3.3.3.1 Vergleich der AREVA-Korrelation mit der gemessenen Abbaurrate

Zentraler Bestandteil des Rekombinatorsmodells ist die von AREVA bereitgestellte Korrelation für die Wasserstoffabbaurate für den Rekombinator vom Typ 0,5\*FR-360. Ein Vergleich mit experimentellen Daten (Abb. 3.3-3) zeigt, dass sie die Wasserstoffabbaurate mit teilweise deutlichen Abweichungen beschreiben kann. Für die beiden Versuchsphasen mit abfallender Wasserstoffkonzentration (Phase 2, Phase 4) kann die Korrelation die Abbaurrate für H<sub>2</sub>-Eintrittskonzentrationen bis zu 4,5 vol.% gut beschreiben. Für die Phasen 1 und 3 mit ansteigender Wasserstoffkonzentration wird die Rekombinationsrate teilweise deutlich überschätzt. So wird im Experiment in der 1. Phase bei 3 vol.% Wasserstoffeintrittskonzentration ca. 0,06 g/s abgebaut, die Korrelation liefert aber eine Abbaurrate von über 0,09 g/s. Für die 2. Phase liefert die Korrelation dagegen den richtigen Wert. Die in der Korrelation verwendeten Eingabegrößen sind

nicht ausreichend, es sind weitere Abhängigkeiten vorhanden, die in der Korrelation nicht berücksichtigt werden. Eine mögliche weitere Abhängigkeit besteht bzgl. der Temperatur der Rekombinatorplatten und der Rekombinatorwände. Diese Größen können zum Beispiel über die Reaktionsgeschwindigkeit und über die Größe des Massenstroms durch den Rekombinator (Kamineffekt) die Abbaurrate beeinflussen.

Die AREVA-Korrelation weicht auch für den Startpunkt des H<sub>2</sub>-Abbaus vom Versuch ab. Im HR-2-Experiment beginnt der Wasserstoffabbau bei ca. 1,3 vol.% Wasserstoff am Rekombinatoreintritt. Laut AREVA-Korrelation setzt der Abbau bei einem kalten Rekombinator erst bei 2 vol.% Wasserstoff ein.

Da bereits die Korrelation teilweise deutliche Abweichungen zu den experimentellen Daten zeigt, kann auch von der CFX-Simulation nicht erwartet werden, dass sie die Abbaurrate und damit auch die H<sub>2</sub>-Konzentrationen exakt vorhersagt.

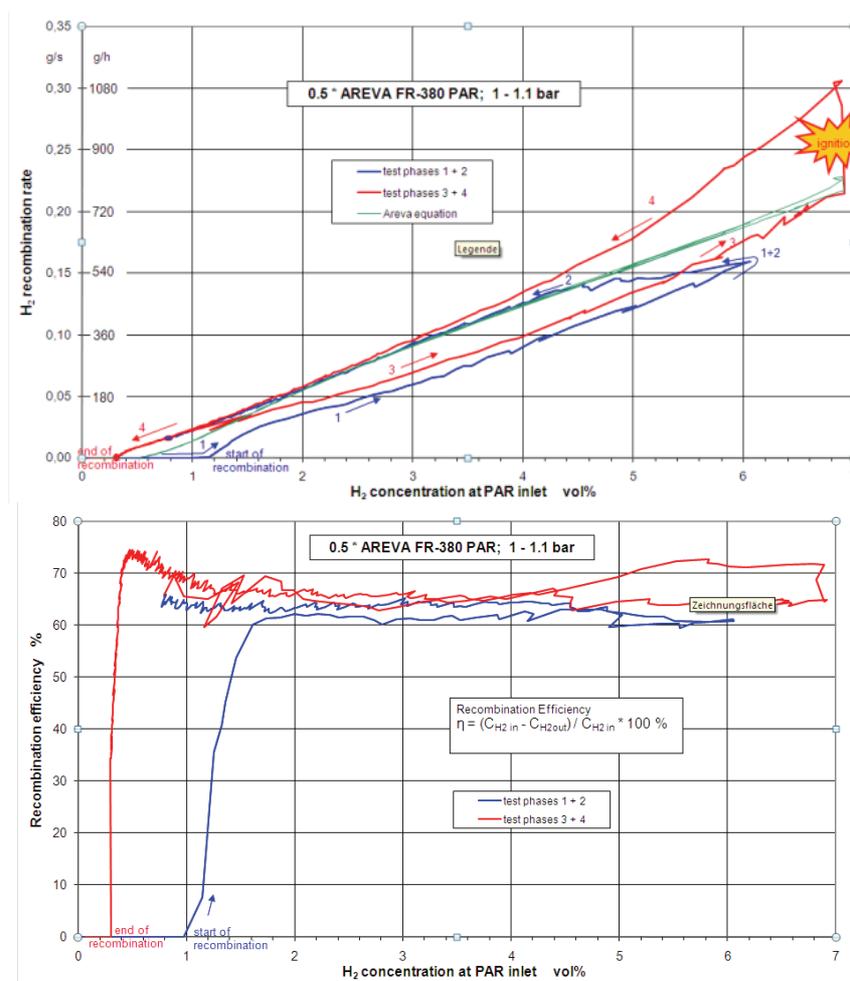


Abb. 3.3-3 Vergleich der experimentellen Daten mit der AREVA-Korrelation /KAN 09/ (oben) und gemessene Rekombinatoreffizienz (unten)

### 3.3.3.2 Überprüfung der Rekombinatormodellierung

Im Folgenden wird untersucht, ob die AREVA-Korrelation und die anderen Modellbestandteile richtig implementiert wurden und inwieweit die am Rekombinator gemessenen Konzentrationen und Temperaturen mit den Messwerten übereinstimmen. Die dominante Abhängigkeit beim Rekombinatormodell ist bei diesem Versuch die Wasserstoffkonzentration am Rekombinatoreintritt, da der Druck sich während des Experiments geringfügig ändert. Deshalb werden die zu untersuchenden Größen über der Wasserstoffeingangskonzentration aufgetragen.

Die vom CFX-Rekombinatormodell berechnete Abbaurate stimmt mit der AREVA-Korrelation überein (Abb. 3.3-4, Abb. 3.3-5). Die Korrelation wurde also richtig in das CFX-Rekombinatormodell implementiert. Es zeigt sich aber - wie bereits in Abschnitt 3.3.3.1 diskutiert - für die erste Phase des Versuchs eine deutliche Abweichung vom Experiment.

Der  $H_2$ -Abbau beginnt in der Simulation später als im Experiment. Da es sich bei dem Schwellenwert  $x_{H_2,Start}=2$  vol % um einen Eingabeparameter handelt, besteht die Möglichkeit, den HR-2-Versuch mit einem anderen Wert (z. B.  $x_{H_2,Start}=1,3$  vol.%) zu berechnen, der besser mit dem Experiment übereinstimmt. Für Anlagenrechnungen sollte aber der konservative Wert von 2 vol.% verwendet werden. Weitere Untersuchungen zu dieser Fragestellung sind unter Abschnitt 3.4.4 zu finden.

Die AREVA-Korrelation macht keine Aussage wie hoch die Wasserstoffkonzentration am Rekombinatoraustritt ist. Im Experiment wurde eine Effizienz  $f_{eff}$  (von 60 % - 70 %) gemessen. Im CFX-Rekombinatormodell ist  $f_{eff}$  ein vom Nutzer zu definierender Parameter. Die CFX Simulation wurde mit  $f_{eff}=0,65$  durchgeführt. Im Experiment wurde die Wasserstoffkonzentration an drei verschiedenen Stellen gemessen. Mit dieser Effizienz stimmen die gemessenen und die berechneten  $H_2$ -Konzentrationen gut miteinander überein.

Die bei der katalytischen Reaktion freigesetzte Wärme führt zur Erwärmung des aus dem Rekombinator ausströmenden Gases. Ein anderer Teil der freigesetzten Energie erwärmt die Rekombinatorplatten und das Rekombinatorgehäuse. In der Simulation wird angenommen, dass 75 % der bei der chemischen Reaktion freigesetzten Wärme zur Temperaturerhöhung des aus dem Rekombinator ausströmenden Gases führt. Die

restlichen 25 % werden zur Erwärmung der Rekombinatorwände im CFX-Modell verwendet ( $f_q = 0,25$ ). Die so berechneten Gasaustrittstemperaturen stimmen relativ gut mit der an zwei Stellen gemessenen Temperatur überein (Abb. 3.3-5).

Gegenwärtig werden die Rekombinatorwände stark vereinfacht simuliert. Sie haben eine homogene Temperatur und auch die integrale Wärmekapazität aller Rekombinatorstrukturen ist nicht hinreichend bekannt. Deshalb sind die vom Modell berechneten Wandtemperaturen nicht belastbar. Eine genauere Simulation der Wandtemperaturen ist ein Punkt für weitere Modellverbesserungen. In Abschnitt 3.3.4.3 wird der Einfluss dieser Größe untersucht.

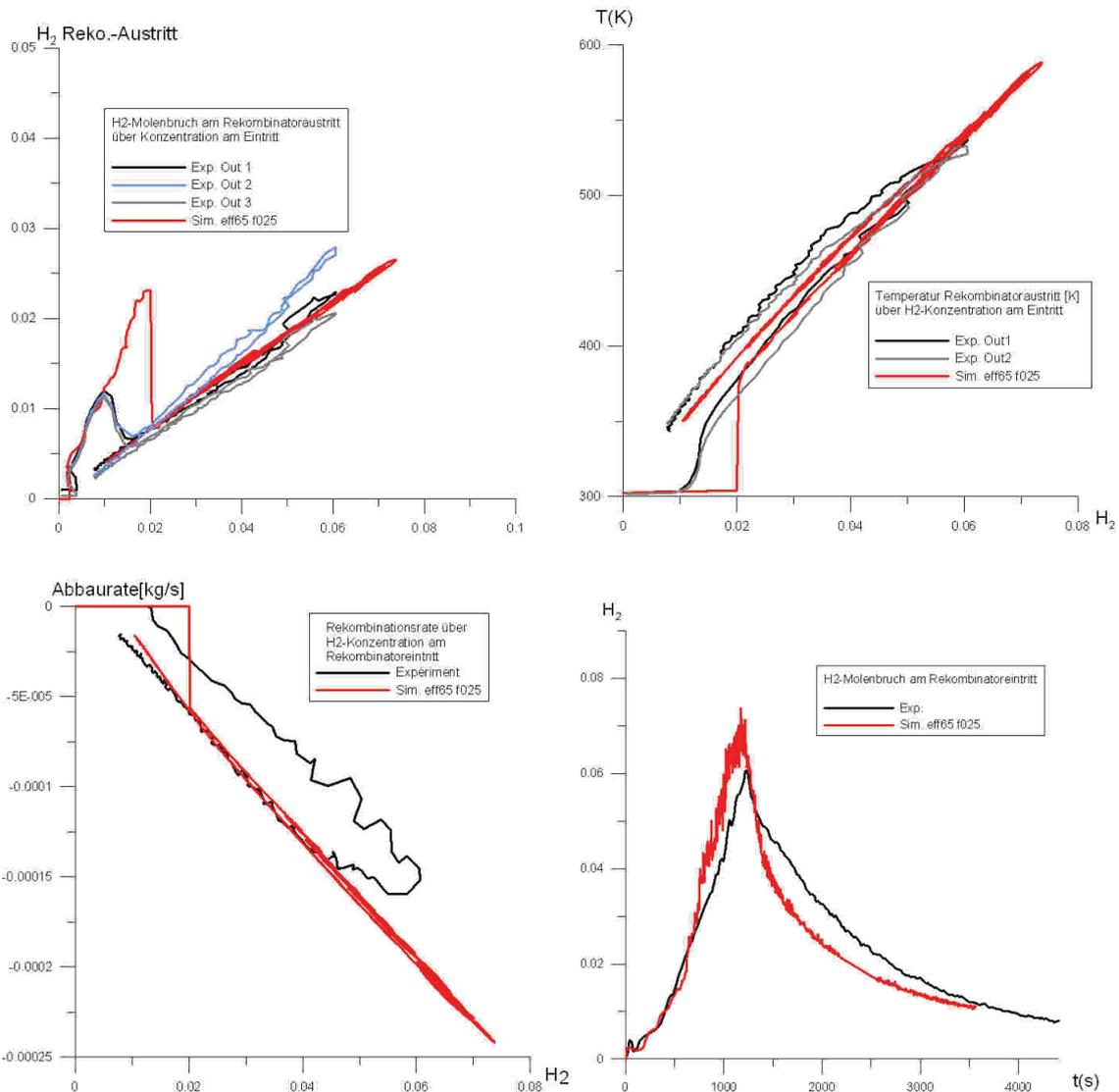


Abb. 3.3-4 Oben: H<sub>2</sub>-Konzentration und Temperatur am Rekombinatoraustritt;  
Unten: Abbaurrate des Rekombinators (links) und Wasserstoffkonzentra-  
tion am Rekombinatoreintritt (rechts)

### 3.3.3.3 Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten

- **H<sub>2</sub>-Eintrittskonzentration und Abbaurrate**

In den ersten 800 s stimmt die H<sub>2</sub>-Eingangskonzentration gut mit dem Experiment überein (Abb. 3.3-4). Aufgrund des unterschiedlichen Startwerts für die Rekombination ( $x_{H_2, \text{Start}}=2$  vol.%, Exp. 1,3 vol.%) beginnt der H<sub>2</sub>-Abbau in der Simulation etwas später als im Experiment (Abb. 3.3-5). In der 1. Phase des Experiments (bis ca. 1200 s) steigt die Wasserstoffkonzentration am Rekombinatoreintritt weiter an. Deshalb steigt auch

die Rekombinationsrate in dieser Phase. Sie wird in der Simulation deutlich überschätzt. Grund hierfür ist zum einen die AREVA-Korrelation, die die Abbaurate überschätzt, zum anderen ist auch die  $H_2$ -Eintrittskonzentration etwas höher als im Experiment. Die zu hohe  $H_2$ -Eintrittskonzentration kann auch mit der Überschätzung der Abbaurate zusammenhängen. Durch den zu hohen  $H_2$ -Abbau wird auch der Massenstrom durch den Rekombinator überschätzt. Der Rekombinator saugt verstärkt wasserstoffreiches Gas an, da sich der Ring, durch den  $H_2$  in den THAI-Behälter eingespeist wird, unterhalb des Rekombinators befindet (Abb. 3.3-7,  $H_2$ -Konzentration bei 1080s).

In der 2. Phase des Experiments nehmen die  $H_2$ -Eingangskonzentration und entsprechend auch die Abbaurate ab (Abb. 3.3-4, Abb. 3.3-5). Die Abbaurate wird dabei von CFX unterschätzt. Für diesen Teil des Versuchs liefert zwar die AREVA-Korrelation den richtigen Zusammenhang zwischen Abbaurate und  $H_2$ -Konzentration am Eintritt, aber die  $H_2$ -Konzentration am Eintritt ist in der Simulation niedriger. Dies kann dadurch erklärt werden, dass bereits in der ersten Versuchsphase deutlich mehr  $H_2$  abgebaut wurde und sich deshalb nach Abschalten der  $H_2$ -Einspeisung weniger Wasserstoff im THAI-Behälter befindet.

- **$H_2$ -Schichtung**

Die Schichtung der Wasserstoffkonzentration wird von CFX qualitativ richtig berechnet, allerdings weicht der Absolutbetrag der Konzentration an den einzelnen Messstellen vom Experiment teilweise deutlich ab (Abb. 3.3-6).

Im Versuch und in der Simulation liegen zwei verschiedene Schichtungen vor. Im Sumpf des THAI-Behälters existiert eine Schichtung, bei der sich unten  $H_2$ -armes Gas befindet (Abb. 3.3-7). Die  $H_2$ -Konzentration nimmt nach oben hin zu. Diese Schichtung existiert sowohl in Experiment wie auch in der Simulation bis ca. 3000 s. Danach ist dieser Bereich durchmischt.

Im Bereich der  $H_2$ -Einspeisung ( $h=1,2$  m) befindet sich bis zur Höhe des Rekombinators eine Schicht mit hoher  $H_2$ -Konzentration. Weiter oberhalb sammelt sich heißes Gas, das noch wenig  $H_2$  enthält. Oberhalb des Rekombinators hat das Gas eine relativ homogene Mischung (siehe M1,2,3 in Abb. 3.3-6), abgesehen vom Plume (mit heißem  $H_2$ -armen Gas) am Rekombinatoraustritt. Diese Schichtung bleibt während der

gesamten 2. Versuchsphase erhalten (wobei sich der Absolutwert der  $H_2$ -Konzentration verringert).

In der ersten Versuchsphase befindet sich eine erhöhte  $H_2$ -Konzentration im Innenzylinder. Das aus dem Ring ausströmende  $H_2$  bildet eine Plume mit hohem Wasserstoffgehalt. Diese Plume hat keine stabile Position, sondern „schwankt“ etwas. Dadurch strömt teilweise  $H_2$  direkt in den Innenzylinder, wo es sich sammelt (Abb. 3.3-7 siehe 1080 s). Nach Ende der Einspeisung verschwindet diese  $H_2$ -Ansammlung relativ schnell wieder. Nach 1500 s ist sie fast verschwunden.

In den ersten 700 s - 800 s stimmt die berechnete  $H_2$ -Konzentration gut mit den Messwerten überein (Abb. 3.3-8). In diesem Abschnitt des Versuchs hat der Rekombinator die Gasverteilung noch nicht signifikant beeinflusst. CFX ist in der Lage, die  $H_2$ -Einspeisung und die daraus folgende Gaszusammensetzung ausreichend genau zu simulieren. Die Vereinfachung bei der Modellierung der Einspeisung (1 Ring statt der vielen Einzelöffnungen) scheint zulässig zu sein.

Im weiteren Verlauf des Experiments werden die  $H_2$ -Konzentrationen im oberen Bereich des THAI-Behälters unterschätzt. Unterhalb des Rekombinators wird dagegen ein höherer  $H_2$ -Gehalt berechnet als im Versuch. Die Schichtung ist also stärker ausgeprägt. Dies ist durch die Überschätzung der Abbauraten zu erklären. Dadurch wird mehr  $H_2$  abgebaut und heißeres leichteres Gas strömt aus dem Rekombinator. Zudem ist der Massenstrom durch den Rekombinator höher. Nach dem Überschreiten der maximalen Abbauraten (1200 s - 1300 s) verringern sich die Abweichungen langsam wieder.

- **Temperatur**

Bis 600 s - 700 s stimmen die berechneten Temperaturen noch relativ gut mit dem Experiment überein (Abb. 3.3-9). Nach Einsetzen des Wasserstoffabbaus werden die Temperaturen an allen Messstellen dagegen deutlich überschätzt (analog zur Abbauraten). Mit der maximalen  $H_2$ -Abbauraten erreicht auch die Temperatur ihr Maximum und in dieser Versuchsphase besteht die größte Abweichung zwischen Messung und Simulation. Im späteren Verlauf sinkt die Temperatur wieder ab und die Simulation nähert sich wieder den experimentellen Daten an.

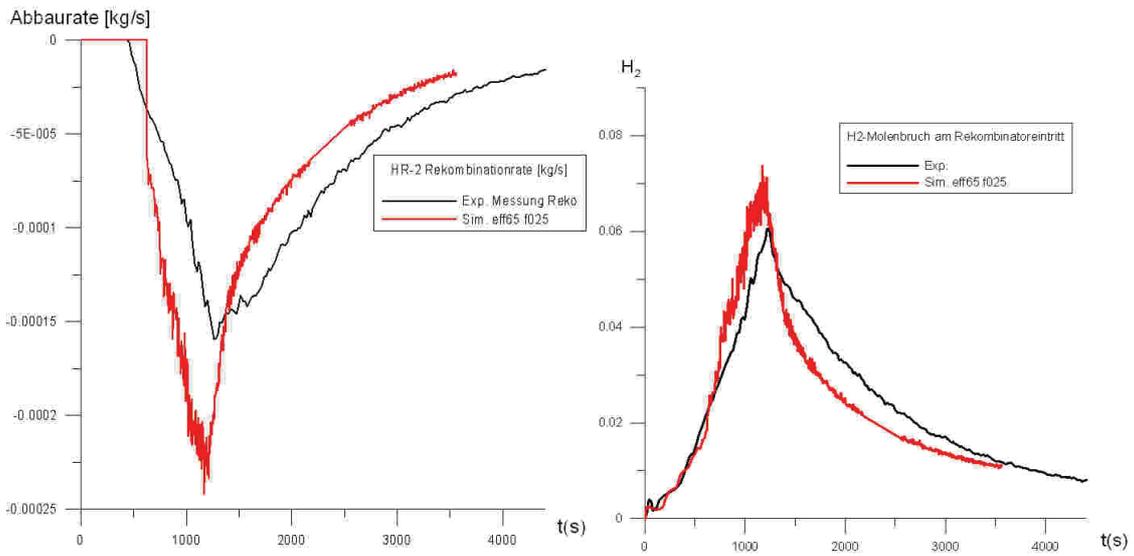


Abb. 3.3-5 Links: Gemessene und berechnete Wasserstoffabbaurrate; Rechts: H<sub>2</sub>-Konzentration am Rekombinatoreintritt

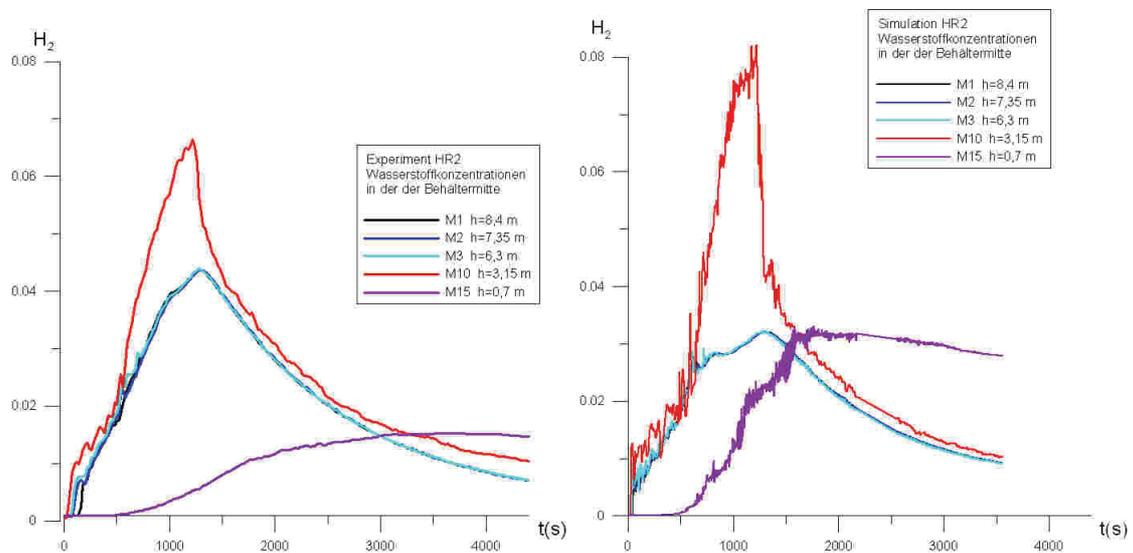


Abb. 3.3-6 Wasserstoffkonzentrationen an verschiedenen Messstellen auf der Behälterachse im Experiment und in der Simulation

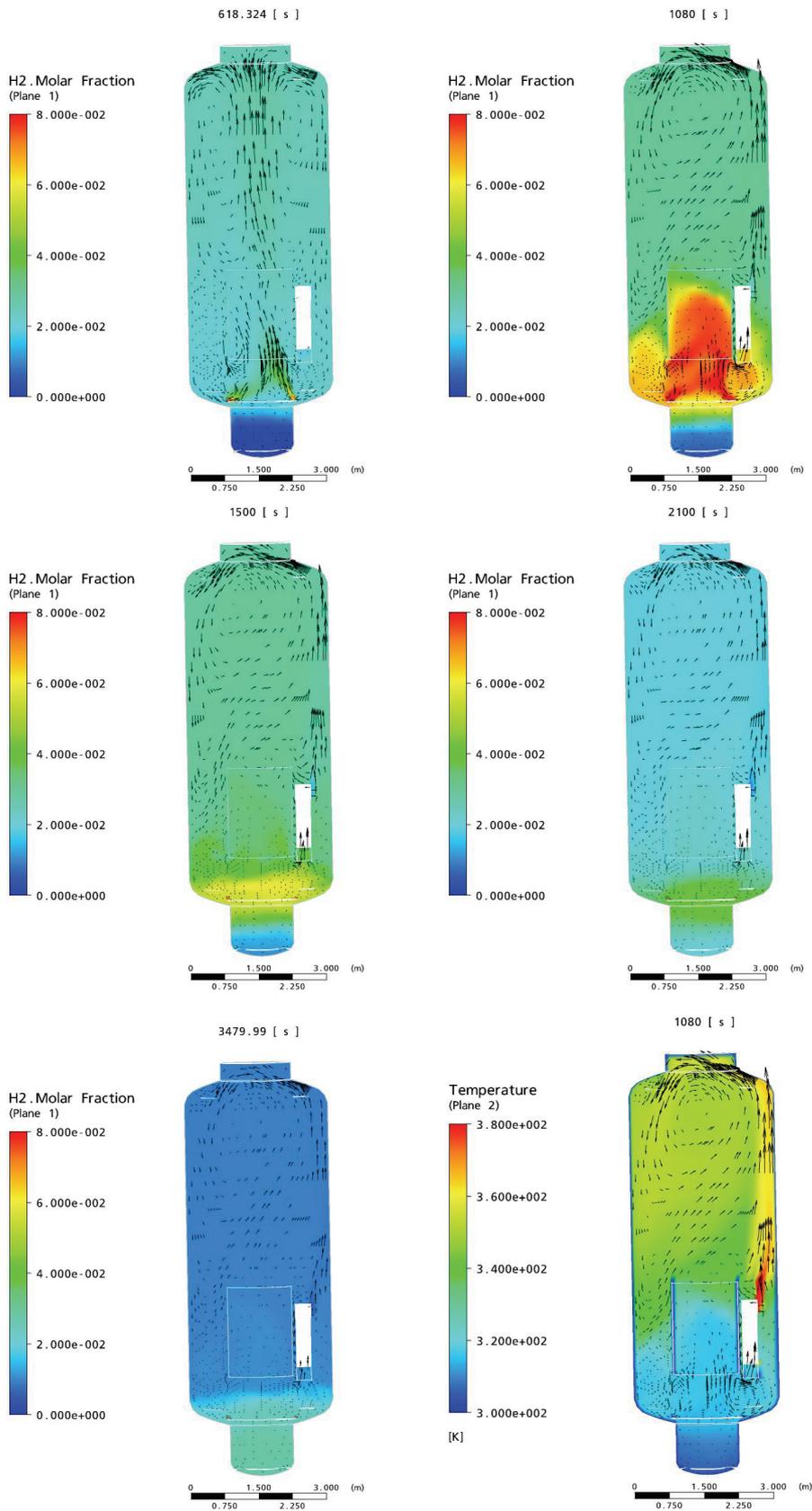


Abb. 3.3-7 H<sub>2</sub>-Konzentration und Temperatur an verschiedenen Zeitpunkten

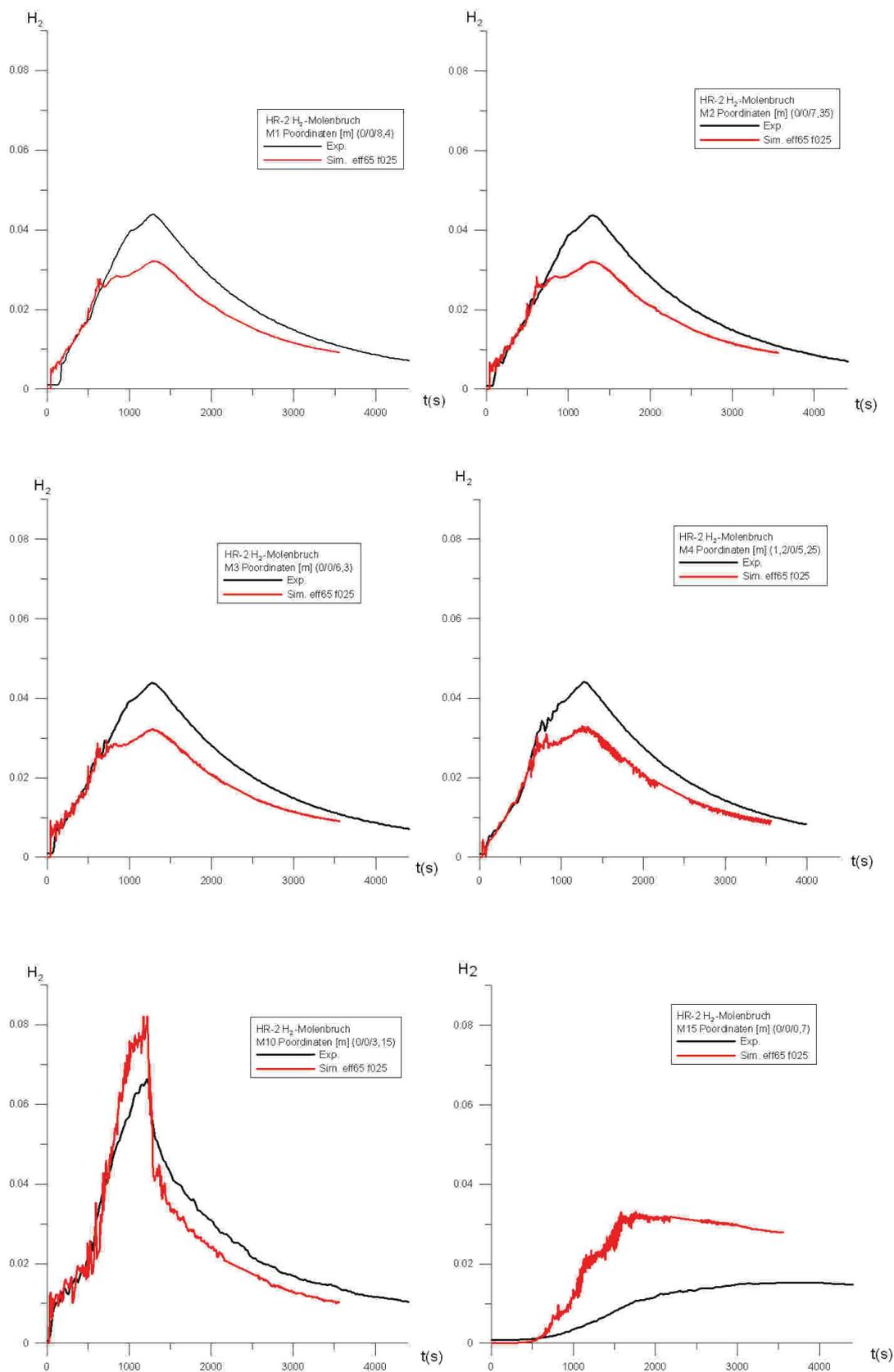


Abb. 3.3-8  $H_2$ -Konzentrationen an verschiedenen Messstellen

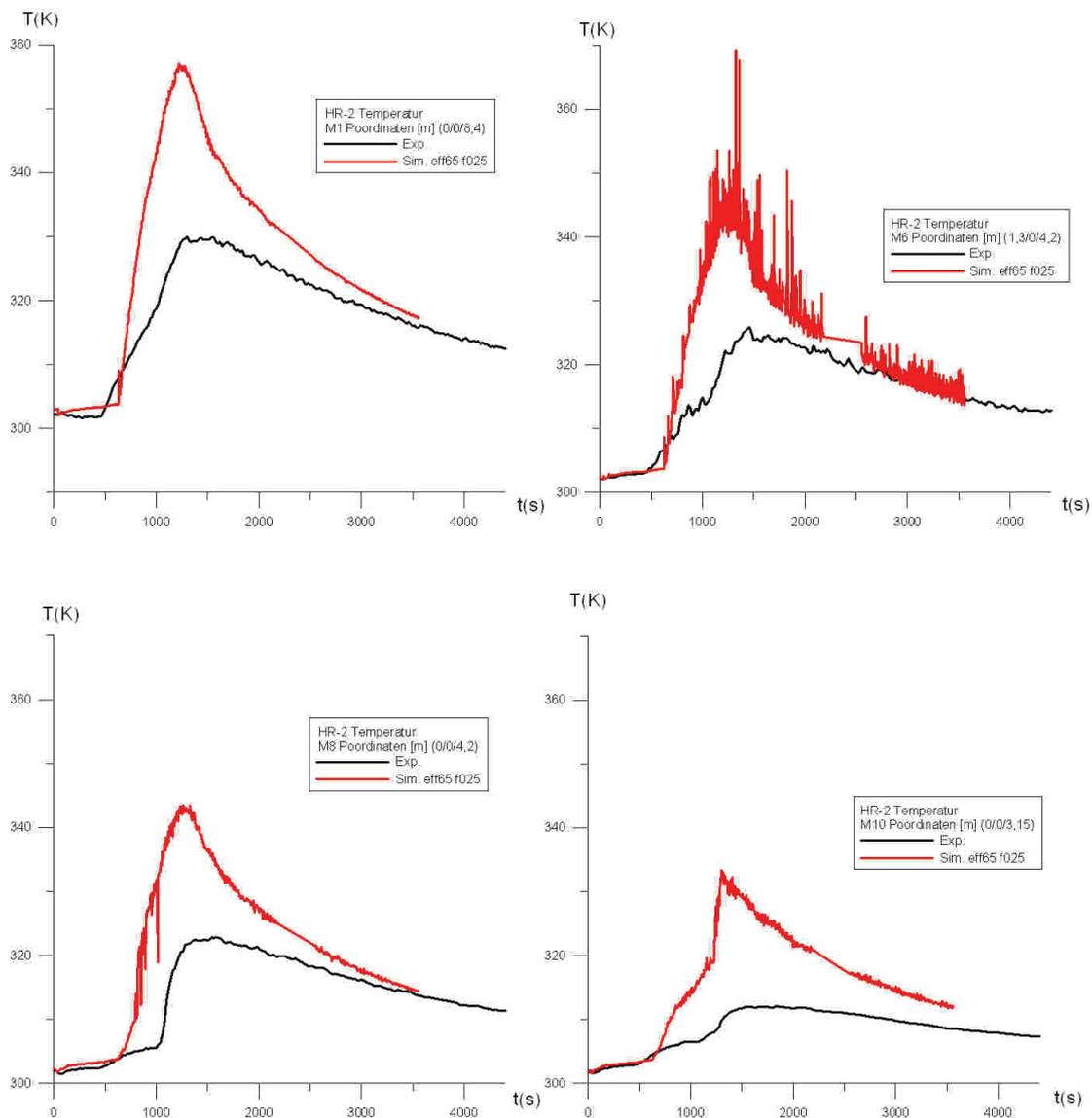


Abb. 3.3-9 Temperatur an verschiedenen Messstellen

### 3.3.4 Sensitivitätsstudien für Modellparameter

#### 3.3.4.1 Sensitivitätsstudien für den Parameter $f_{\text{eff}}$

Der Parameter  $f_{\text{eff}}$  gibt an, welcher Anteil des in den Rekombinator einströmenden  $\text{H}_2$  abgebaut wird. Der Faktor  $f_{\text{eff}} = 0,65$  wurde an Versuchsdaten angepasst (siehe Abschnitt 3.3.2). Mit  $f_{\text{eff}} = 0,5$  wird die  $\text{H}_2$ -Konzentration am Austritt etwas überschätzt, mit  $f_{\text{eff}} = 0,75$  dagegen unterschätzt (Abb. 3.3-13).  $f_{\text{eff}} = 1,0$  entspricht einer vollständigen Rekombination (sofern genug  $\text{O}_2$  vorhanden ist).

Die Wahl des Parameters  $f_{\text{eff}}$  hat einen Einfluss auf die Gaskonzentration am Rekombinatoreintritt, aber auch auf den Massenstrom durch den Rekombinator und auf die Gastemperatur. Die Parameterstudie zeigt, dass ab ca. 800 s die berechnete  $\text{H}_2$ -Konzentration von der Wahl von  $f_{\text{eff}}$  abhängt (Abb. 3.3-11). Mit zunehmenden  $f_{\text{eff}}$  nimmt die Konzentration im oberen Bereich des Behälters (M1, M3) ab, d. h. die Abweichung zum Experiment vergrößert sich. Dies kann dadurch erklärt werden, dass heißeres und  $\text{H}_2$ -ärmeres Gas aus dem Rekombinator austritt. Zudem ändern sich mit  $f_{\text{eff}}$  der Massenstrom durch den Rekombinator und der Auftrieb des heißen Plumes, wodurch die Konvektion im THAI-Behälter beeinflusst wird.

Im unterhalb des Rekombinatoreintritts liegenden Bereich nimmt die Konzentration dagegen zu (Abb. 3.3-10, M10). Die Konzentrationsunterschiede vergrößern sich also. Im Sumpf nimmt die  $\text{H}_2$ -Konzentration mit  $f_{\text{eff}}$  zu. Ab ca. 2500 s nehmen die Unterschiede zwischen den Simulationen wieder ab. Für die Temperatur ergeben sich analoge Ergebnisse (Abb. 3.3-12), wobei mit zunehmenden  $f_{\text{eff}}$  die Temperatur im oberen Bereich zunimmt. Der Grund hierfür ist, dass heißeres Gas aus dem Rekombinator austritt, wenn  $f_{\text{eff}}$  größer gewählt wird.

Die Abbaurate wird entsprechend der AREVA-Korrelation berechnet. Daher hat der Parameter  $f_{\text{eff}}$  keinen direkten Einfluss auf die Abbaurate. Die Temperatur am Rekombinatoreintritt und der Massenstrom durch den Rekombinator hängen von  $f_{\text{eff}}$  ab. Dadurch wird die Schichtung von  $\text{H}_2$  beeinflusst, was in der Simulation zu einer Abhängigkeit der  $\text{H}_2$ -Konzentration beim Rekombinatoreintritt für den Zeitraum  $\sim 800$  s - 1600 s führt. Dies wiederum führt zu einer Verringerung der Abbaurate mit abnehmenden  $f_{\text{eff}}$  (Abb. 3.3-11, Abb. 3.3-13).

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass der Parameter  $f_{\text{eff}}$ , insbesondere für den Zeitraum  $\sim 800$  s - 2500 s, einen nicht zu vernachlässigenden Einfluss auf die Schichtung (Temperatur und  $\text{H}_2$ ) hat. Durch eine Veränderung der  $\text{H}_2$ -Eintrittskonzentration hat dieser Parameter auch einen Einfluss auf die Abbaurate. Eine Simulation, bei der von einem kompletten Abbau des einströmenden Wasserstoffs ausgegangen wird ( $f_{\text{eff}} = 1$ ), liefert deutlich schlechtere Ergebnisse als eine Simulation mit  $f_{\text{eff}} = 0,65$ . Die Abweichungen zwischen den verschiedenen Simulationen sind kleiner als die Abweichungen zum Experiment, andere Modellfehler haben einen größeren Einfluss.

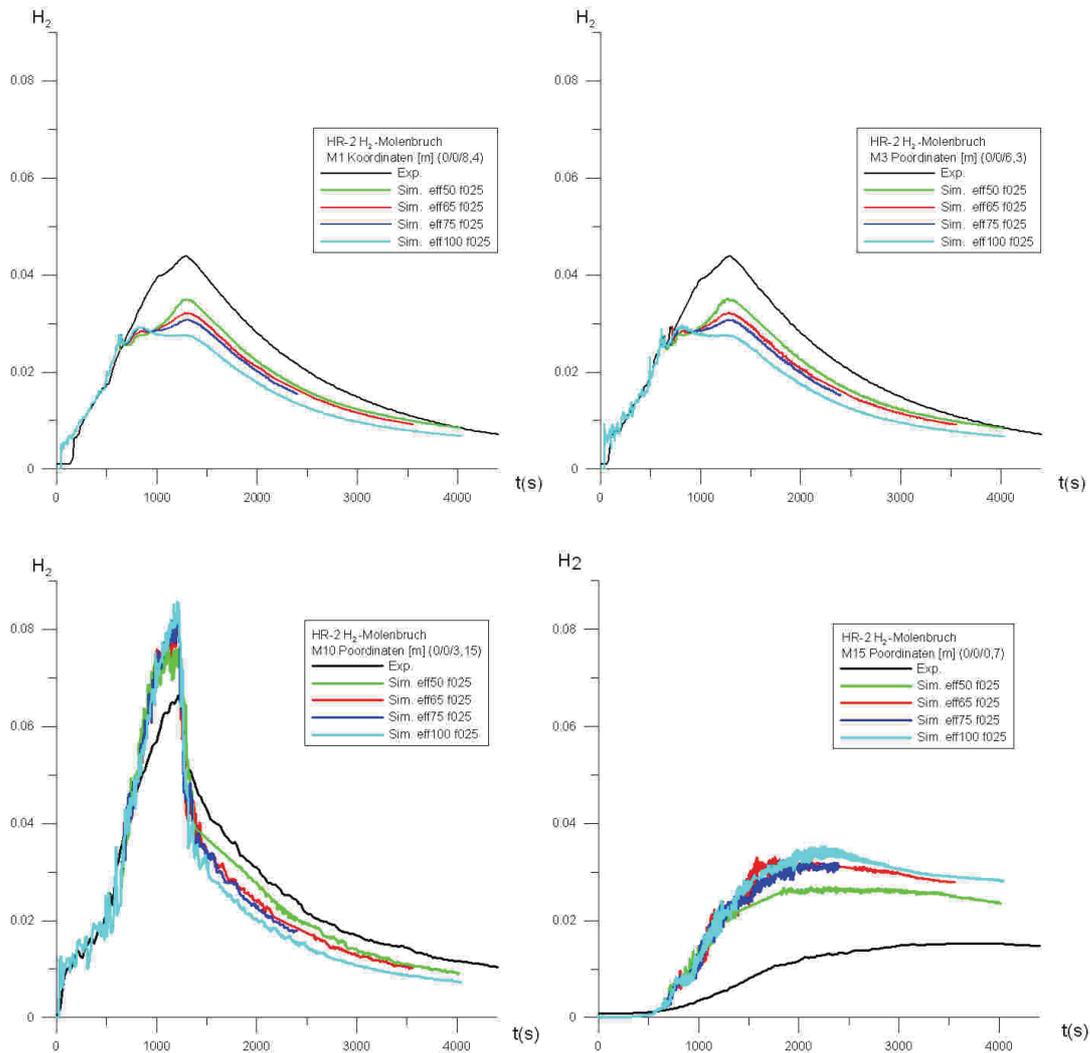


Abb. 3.3-10  $H_2$ -Konzentrationen an Messstellen auf der Behälterachse

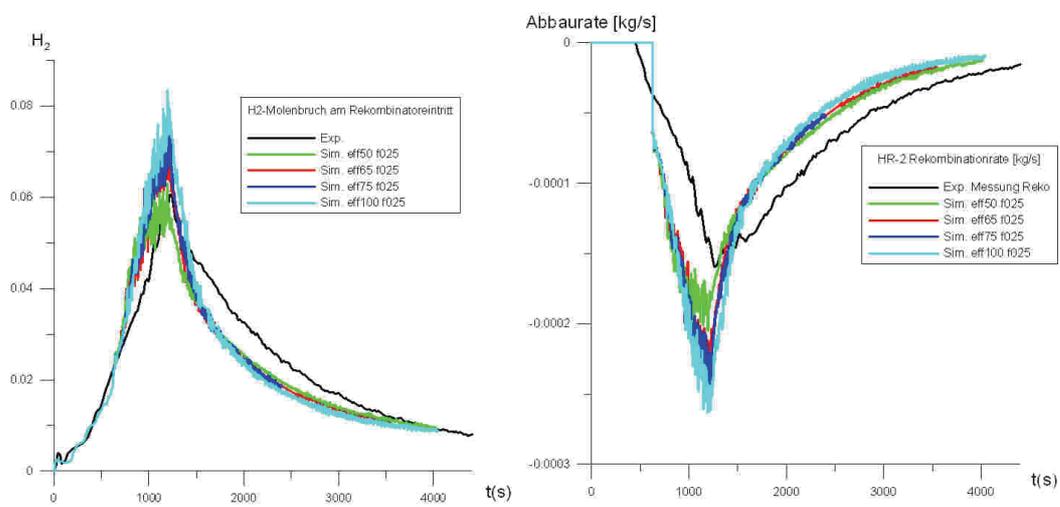


Abb. 3.3-11  $H_2$ -Konzentration am Rekombinatoreintritt und  $H_2$ -Abbaurrate

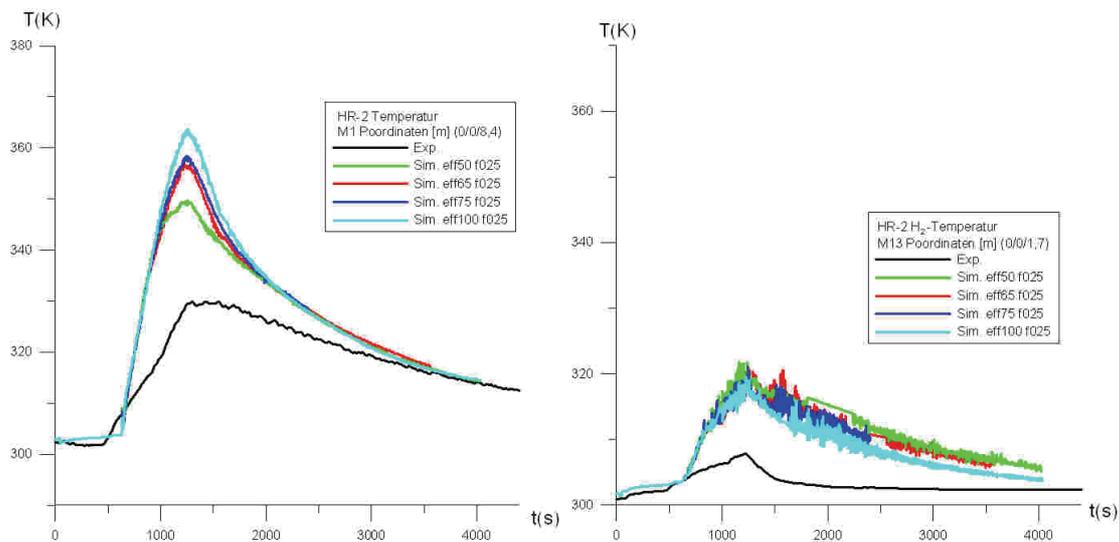


Abb. 3.3-12 Temperatur an zwei Messstellen

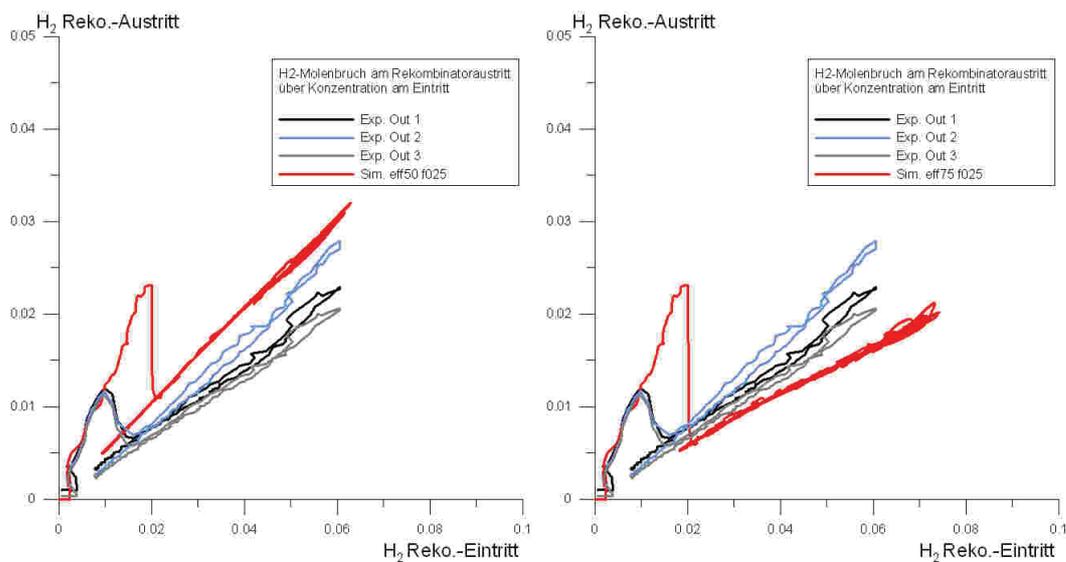


Abb. 3.3-13 H<sub>2</sub>-Konzentration am Rekombinatoraustritt über H<sub>2</sub>-Konzentration am Eintritt bei  $f_{eff}=0,5$  (links) und  $f_{eff}=0,75$

### 3.3.4.2 Sensitivitätsstudien für den Parameter $f_{wand}$

Der Parameter  $f_{wand}$  gibt an, welcher Anteil der bei der chemischen Reaktion freigesetzte Energie den Rekombinatorstrukturen zugeführt wird.  $f_{wand}$  wurde entsprechend den experimentellen Daten mit  $f_{wand} = 0,25$  gewählt (siehe Abschnitt 3.3.3.2),  $f_{wand} = 0,15$  und  $f_{wand} = 0,35$  unter- bzw. überschätzen die Wärmeleitung in die Rekombinatorwände leicht.  $f_{wand} = 0$  entspricht einer Vernachlässigung der Wärmeabgabe in die Strukturen.

Im Folgenden wird der Einfluss dieses Parameters auf das Berechnungsergebnis untersucht.

Wie zu erwarten, erniedrigt sich mit zunehmenden  $f_{\text{wand}}$  die Gastemperatur an den Messstellen, da heißeres Gas aus dem Rekombinator austritt (Abb. 3.3-17).

Die Wahl dieses Parameters hat auch einen nicht zu vernachlässigenden Einfluss auf die berechnete  $\text{H}_2$ -Schichtung (Abb. 3.3-14). Mit zunehmenden  $f_{\text{wand}}$  erhöht sich die  $\text{H}_2$ -Konzentration oberhalb des Rekombinators. Unterhalb des Rekombinatoreintritts nimmt die  $\text{H}_2$ -Konzentration dagegen ab. Dies kann dadurch erklärt werden, dass mit abnehmendem  $f_{\text{wand}}$  die Temperatur des austretenden Gases zunimmt. Der Plume des austretenden heißen Gases hat eine geringere Dichte, die Dichteunterschiede werden größer und sein Auftrieb nimmt zu. Durch die stärkeren Auftriebskräfte bei einem kleinen  $f_{\text{wand}}$  wird die Vermischung verstärkt, was in einer schwächeren Schichtung resultiert.

Dies wiederum führt in diesem Experiment zu einer kleineren  $\text{H}_2$ -Konzentration am Rekombinatoreintritt, was in einer niedrigeren Abbaurrate ab ca. 800 s resultiert (Abb. 3.3-15). Die Wahl dieses Parameters hat einen signifikanten Einfluss auf das Simulationsergebnis. Der Wärmetransport in die Rekombinatorwände darf nicht vernachlässigt werden, da es sonst zu einer fehlerhaften Berechnung der Schichtung kommt, was wiederum zu einer anderen  $\text{H}_2$ -Abbaurrate führen kann.

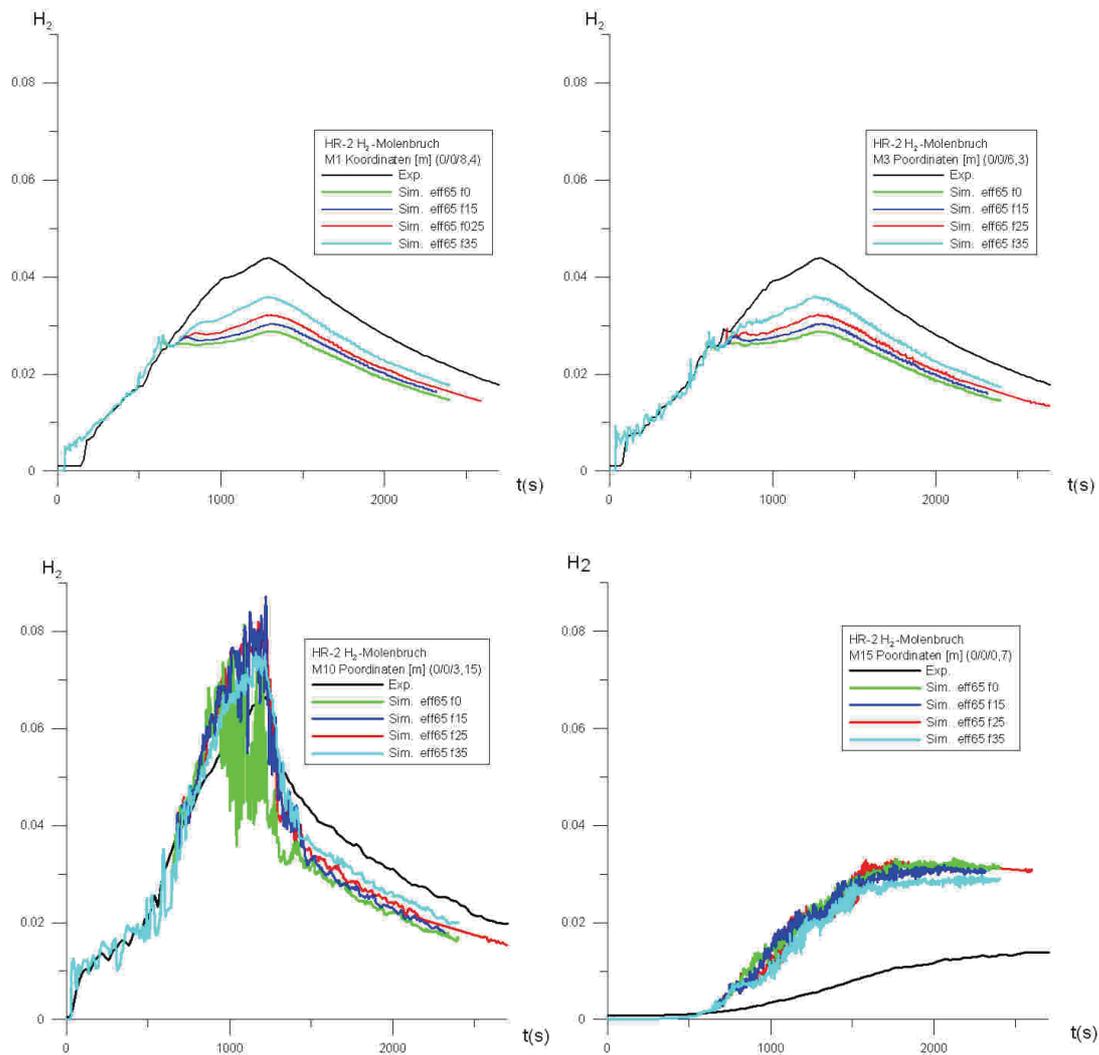


Abb. 3.3-14 Wasserstoffkonzentrationen auf verschiedenen Höhen entlang der Behälterachse

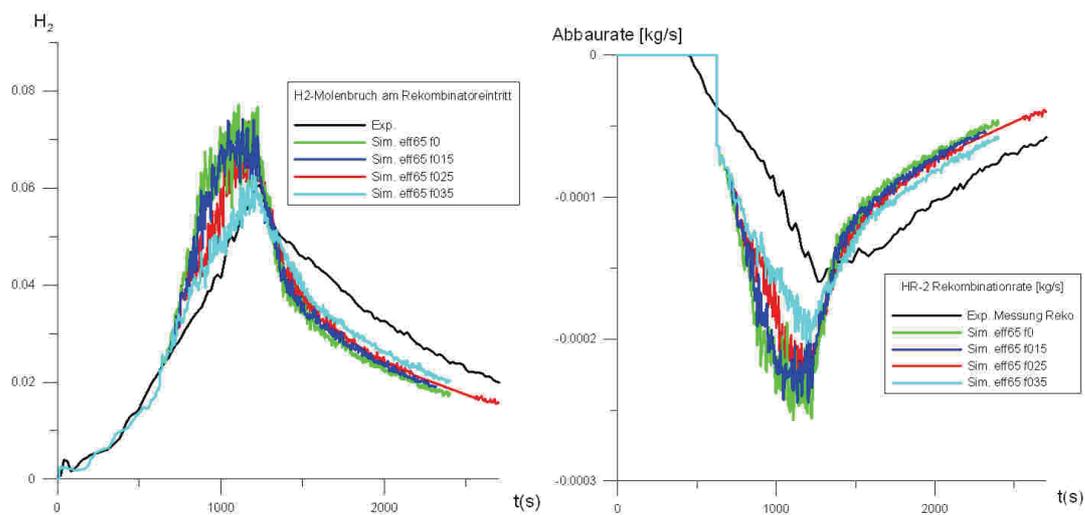


Abb. 3.3-15 H<sub>2</sub>-Konzentration am Rekombinatoreintritt und H<sub>2</sub>-Abbaurrate

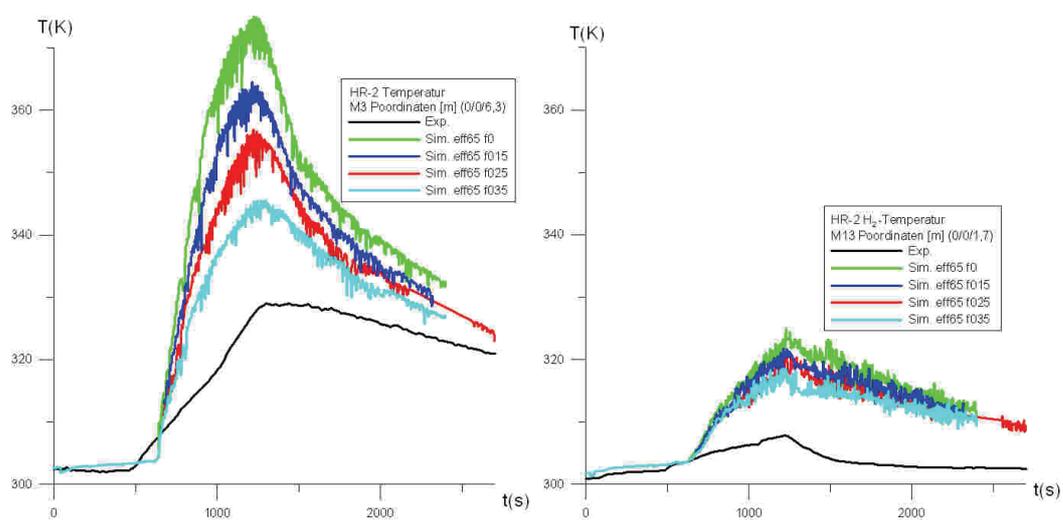


Abb. 3.3-16 Temperatur an zwei Messstellen

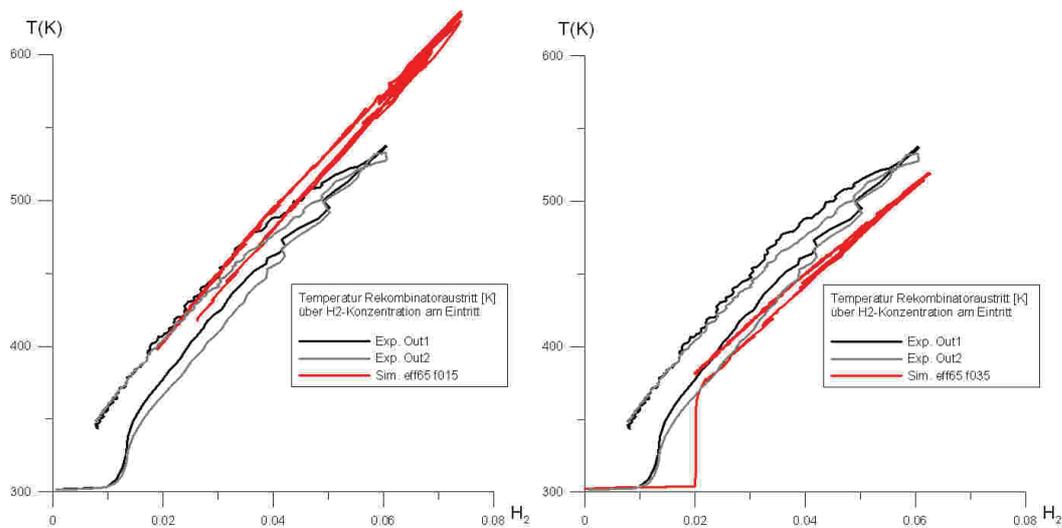


Abb. 3.3-17 Temperatur am Rekombinatoraustritt über  $H_2$ -Eintrittskonzentration für  $f_{wand}=0,15$  (links) und  $f_{wand}=0,35$  (rechts)

### 3.3.4.3 Einfluss der Wärmekapazität der Rekombinatorwände auf das Simulationsergebnis

In der Simulation werden die Rekombinatorstrukturen sehr vereinfacht abgebildet, die Rekombinatorplatten werden nicht in das Gitter integriert und das Gehäuse wird mit vereinfachter Geometrie in das Gitter integriert. Entsprechend wird auch die Wärmekapazität der Strukturen nicht mit der des Rekombinators im Experiment übereinstimmen. Im Rekombinormodell wird ein bestimmter Prozentsatz der bei der chemischen Reaktion freigesetzten Energie der Rekombinatorwand zugeführt. Die Temperatur der Rekombinatorwände hat lediglich einen Einfluss auf den Wärmestrom von der Rekombinatorwand in das sie umgebende Gas außerhalb des Rekombinators. Wird eine konstante Menge von Wasserstoff abgebaut, so wird sich die Wand solange erwärmen bis sich ein Gleichgewicht zwischen der zugeführten Reaktionswärme und dem Wärmetransport in das umliegende Gas einstellt. Je nach Wärmekapazität der Wände wird sich dieses Gleichgewicht schneller oder langsamer einstellen.

Durch die vereinfachte Abbildung der Rekombinatorwände kann auch der Wärmestrom in das den Rekombinator umgebende Gas ungenau berechnet werden. Die Wärmestrahlung wurde in den hier durchgeführten Simulationen ebenfalls vernachlässigt.

Aufgrund dieser Modellvereinfachungen kann nicht erwartet werden, dass die Temperatur der Rekombinatorwände genau simuliert werden kann. Im Folgenden soll untersucht werden, welchen Einfluss diese Modellvereinfachungen auf die Zielgrößen der Simulation (Rekombinationsrate und berechnete Schichtung haben). Dazu wurden 3 Simulationen mit einer deutlich unterschiedlichen Wärmekapazität der Rekombinatorwände durchgeführt (22000 J/K, 4900 J/K (cp5), 2460 J/K (cp10)). Je nach Wärmekapazität wird eine deutlich unterschiedliche mittlere Wandtemperatur berechnet (Abb. 3.3-18). Bei der Simulation mit der höchsten Wärmekapazität erwärmt sich die Wand auf maximal ca. 400 K, bei der Simulation mit der kleinsten Wärmekapazität erhöht sich die Wandtemperatur dagegen auf ~650 K.

Die berechneten Wasserstoffkonzentrationen und Temperaturen im Gasraum unterscheiden sich dagegen kaum. Lediglich von 1000 s - 1500 s sind leichte Abweichungen vorhanden (Abb. 3.3-18, Abb. 3.3-20). Die Simulationen mit den beiden niedrigen Wärmekapazitäten (cp5 und cp10) unterscheiden sich so gut wie gar nicht. Aufgrund der etwas unterschiedlichen Wasserstoffeintrittskonzentration in diesem Zeitbereich ist auch ein geringer Unterschied bei der Rekombinationsrate sichtbar (Abb. 3.3-19). Dabei lieferten die Simulationen cp5 und cp10 tendenziell eine etwas bessere Übereinstimmung mit dem Experiment. Diese Untersuchung zeigt, dass die Temperatur der Rekombinatorwände einen geringen Einfluss auf die Zielgrößen (Rekombinationsrate und Schichtung im THAI-Behälter) hat.

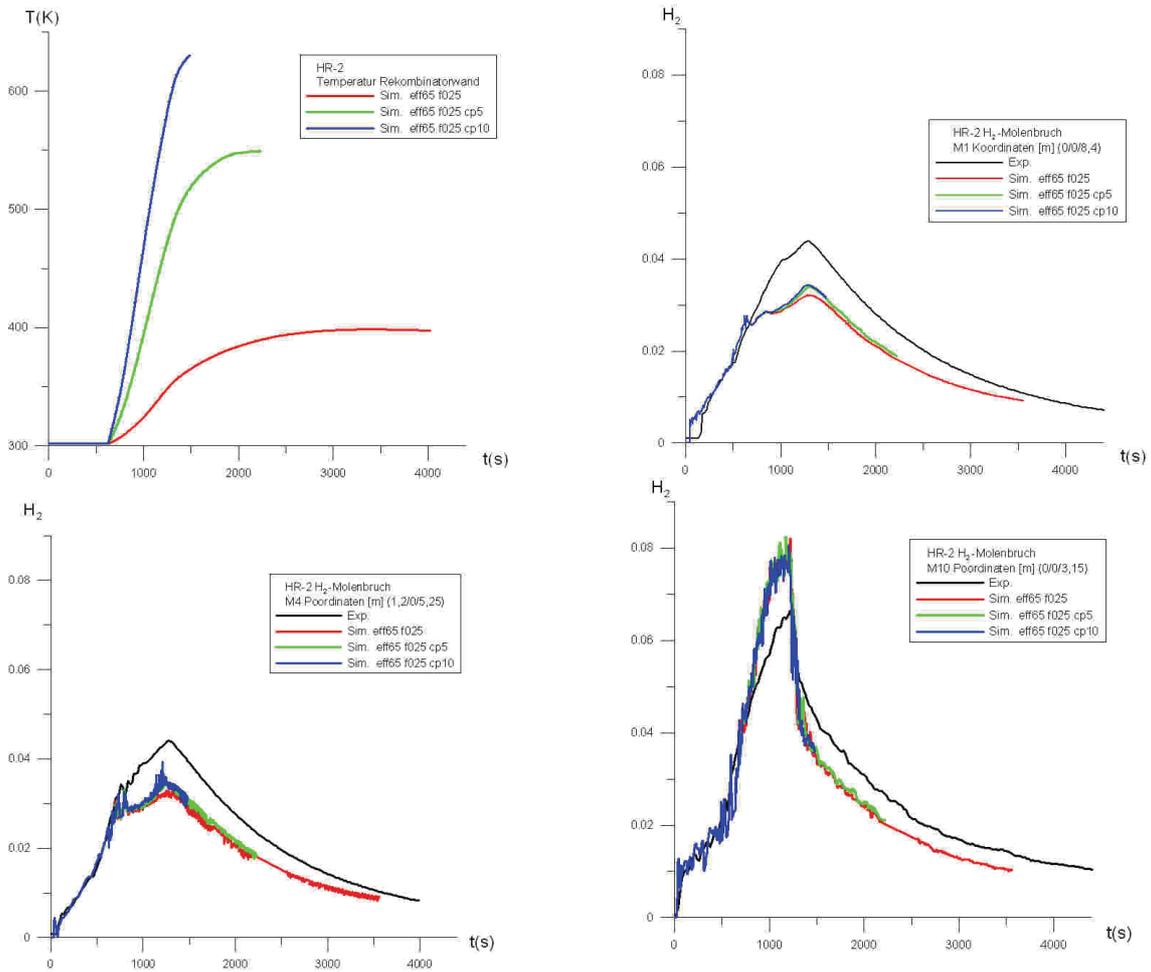


Abb. 3.3-18 Mittlere Temperatur der Rekombinatorwände und Wasserstoffkonzentration an verschiedenen Messstellen

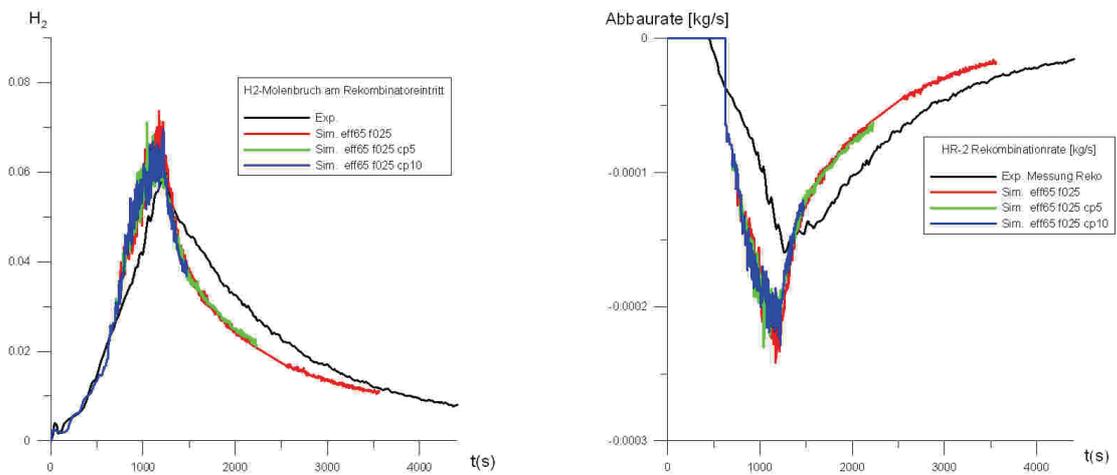


Abb. 3.3-19 Wasserstoffkonzentration am Rekombinatoreintritt und Rekombinationsrate

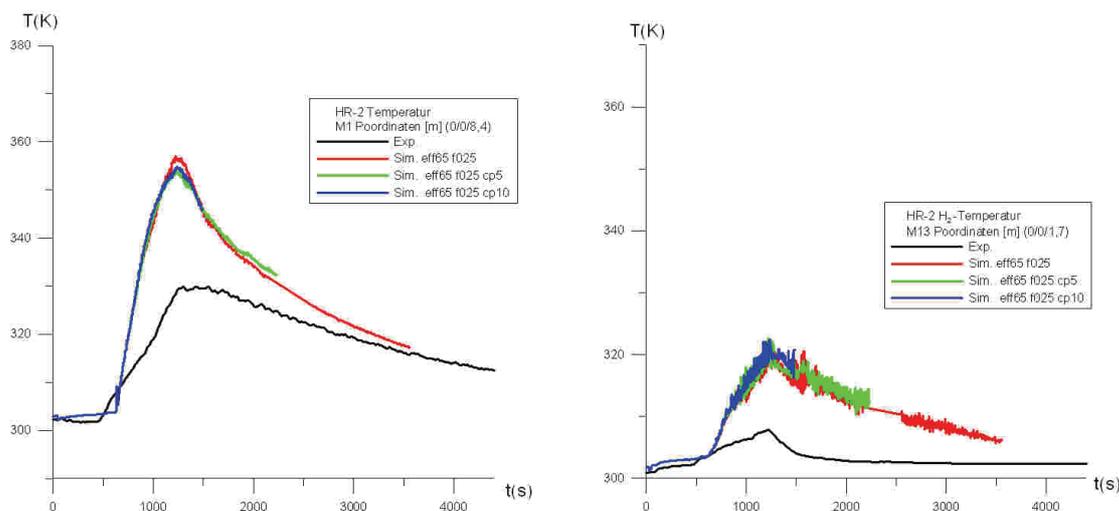


Abb. 3.3-20 Temperatur an 2 Messstellen

### 3.3.5 Zusammenfassung der Simulationsergebnisse für den HR-2 Versuch

Die AREVA-Korrelationen wurden erfolgreich in CFX-11 implementiert und um einfache Modelle für die Effizienz des Rekombinators und für die Wärmeabgabe in die Rekombinatorplatten und -wände ergänzt. Für diese Modelle wurden geeignete Parameter bestimmt. Mit diesem Rekombinatoremodell konnte der Versuch HR-2 erfolgreich nachgerechnet werden. Die Wasserstoffabbaurate konnte zufriedenstellend simuliert werden. Die beim Versuch auftretenden Schichtungen konnten qualitativ richtig simuliert werden. Die berechneten H<sub>2</sub>-Konzentrationen stimmen zufriedenstellend mit dem Experiment überein. Das Hauptproblem bei der Versuchsnachrechnung liegt darin, dass die AREVA-Korrelation die Abbaurate in der 1. Versuchsphase deutlich überschätzt. Offensichtlich sind in der Korrelation nicht alle Abhängigkeiten ausreichend berücksichtigt. Eine Abhängigkeit, die eventuell berücksichtigt werden sollte, ist die Abhängigkeit der Abbaurate von der Temperatur der Rekombinatorplatten und des Gehäuses. Dieser Modellfehler scheint der Hauptgrund für die Abweichungen zu sein und sollte der erste Ansatzpunkt für weitere Verbesserungen bei der Modellierung des HR-2-Experiments werden. Des Weiteren wurde der Einfluss der Modellparameter  $f_{\text{eff}}$  und  $f_{\text{wand}}$  untersucht. Beide Parameter haben einen Einfluss auf die berechnete H<sub>2</sub>-Schichtung und können über die H<sub>2</sub>-Konzentration am Rekombinatoreintritt auch die Rekombinatorrate beeinflussen. Die vereinfachte Abbildung der Rekombinatorstrukturen hat einen Einfluss auf die berechnete Temperatur der Rekombinatorwände.

Eine Parameterstudie mit unterschiedlicher Wärmekapazität der Wände zeigt aber, dass dies die Abbaurrate und die berechnete Schichtung geringfügig beeinflusst.

### **3.4 Nachrechnung des Versuchs HR-5**

#### **3.4.1 Das HR-5 Experiment**

Der Versuch HR-5 unterscheidet sich von HR-2 im Wesentlichen durch den höheren Anfangsdruck von 2.934 bar. Die Anfangstemperatur beträgt 32 °C und wie schon bei HR-2 liegen kein Dampf und kein Wasserstoff zu Versuchsbeginn vor. Durch Nachrechnung dieses Versuches kann untersucht werden, inwieweit das Rekombinatoremodell in der Lage ist, auch bei höheren Drücken den Wasserstoffabbau und die durch die Rekombination induzierten Strömungsphänomene richtig zu beschreiben.

Die Wasserstoffeinspeiserate wurde wie folgt modifiziert:

bis 600 s:	0,24 g/s	(Phase 1a)
600 s - 2082s:	0,48 g/s	(Phase 1b)
2082 s - 6120 s:	0 g/s	(Phase 2)
6120 s - 7380 s:	0,43 g/s	(Phase 3a)
7380 s - 8700 s:	0,32 g/s	(Phase 3b)
ab 8700 s:	0 g/s	(Phase 4)

Die Versuchsnachrechnungen beschränken sich aufgrund der hohen Rechenzeit auf die 1. und 2. Phase des Experiments.

#### **3.4.2 Modellierung mit CFX**

Für die Simulation von HR-5 wurde dasselbe CFD-Gitter (Abb. 3.3-2) und dieselben Modelle verwendet wie in der Simulation des Experiments HR-2 (Abschnitt 3.3). Der Modellparameter für die Effizienz des Wasserstoffabbaus  $f_{\text{eff}}$  wurde entsprechend den experimentellen Daten mit  $f_{\text{eff}} = 0,5$  gewählt und liegt damit unter dem Wert bei HR-2 ( $f_{\text{eff}} = 0,65$ ). Der prinzipielle Einfluss dieses Parameters wurde in Abschnitt 3.3.4.1 untersucht. Der Parameter  $f_{\text{wand}}$  wurde wie in HR-2 auf  $f_{\text{wand}} = 0,25$  gesetzt.

### 3.4.3 Simulationsergebnisse

#### 3.4.3.1 Überprüfung der Rekombinatoremodellierung

Für das HR-5 Experiment (1. + 2. Phase) ist die AREVA-Korrelation in der Lage, die Abbaurrate gut zu beschreiben (Abb. 3.4-2). Die einzige deutliche Abweichung ergibt sich bei der Vorhersage des Starts der Rekombination. Im Experiment setzt quasi sofort die Rekombination ein. Selbst bei Konzentrationen von 0,1 vol.% Wasserstoff am Rekombinatoreintritt wird in der Anfangsphase, in der der Rekombinator noch kalt ist, eine wenn auch kleine Rekombination gemessen. Dies steht im Widerspruch zur AREVA-Korrelation, die bei einem kalten Rekombinator eine Rekombination erst ab 2 vol.% vorhersagt. Selbst bei einem heißen Rekombinator sagt die Korrelation einen H<sub>2</sub>-Abbau erst ab 0,5 vol.% voraus. Für höhere Wasserstoffkonzentrationen am Rekombinatoreintritt wird die Abbaurrate aber gut durch die Korrelationen wiedergegeben. Im Gegensatz zum Experiment HR-2 unterscheidet sich bei HR-5 die Abbaurrate in Phase 1 und 2 bei gleicher Eingangskonzentration nicht. Eine Auswertung der anderen HR-Experimente (ohne Dampf) zeigt, dass mit zunehmendem Druck die Übereinstimmung zwischen AREVA-Korrelation und Experiment besser wird.

Zur Versuchsnachrechnung wurde eine Effizienz von  $f_{\text{eff}} = 0,5$  angenommen. Mit diesem Wert kann eine gute Übereinstimmung für das Verhältnis von H<sub>2</sub>-Eingangskonzentration zur H<sub>2</sub>-Ausgangskonzentration an Rekombinator erzielt werden. (Abb. 3.4-1).

Der Vergleich der Temperatur des Gases am Rekombinatorausritt für eine gegebene H<sub>2</sub>-Eintrittskonzentration zeigt, dass mit  $f_{\text{wand}} = 0,25$  die Temperatur des austretenden Gases deutlich unterschätzt wird (Abb. 3.4-1). Offensichtlich wird bei diesem Versuch ein geringerer Prozentsatz der bei der Reaktion freigesetzten Wärme zur Erwärmung der Rekombinatorstrukturen verwendet. Die Unterschiede können mit dem höheren Druck erklärt werden. Durch den ca. dreifachen Druck befindet sich in einer Volumeneinheit auch dreimal so viel Wasserstoff (bei gleicher Konzentration). Entsprechend mehr Energie kann pro Volumen freigesetzt werden. Die Wärmekapazität der Rekombinatorstrukturen ist dagegen gleich. Bei ausreichend langem Betrieb des Rekombinators werden die Rekombinatorstrukturen so weit aufgeheizt, dass sich ein

Gleichgewicht zur Wärmestrahlung konvektiven Wärmetransport und der Strukturen an das umgebende Gas ausbildet. Dieses Gleichgewicht ist vom Druck abhängig.

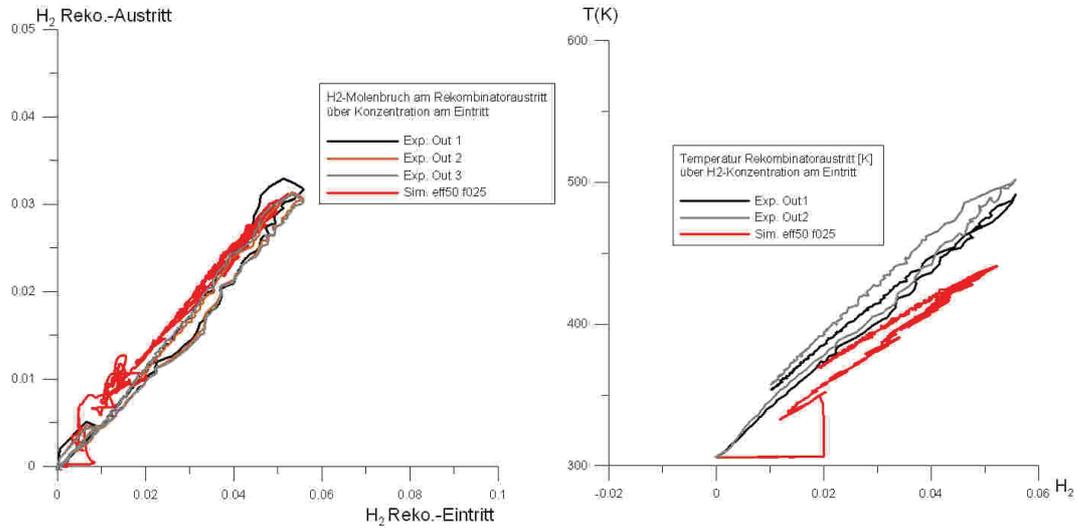


Abb. 3.4-1 Wasserstoffkonzentration (links) und Temperatur (rechts) an der Rekombinatorsausströmöffnung aufgetragen über der Wasserstoffkonzentration an der Rekombinatoreinströmöffnung

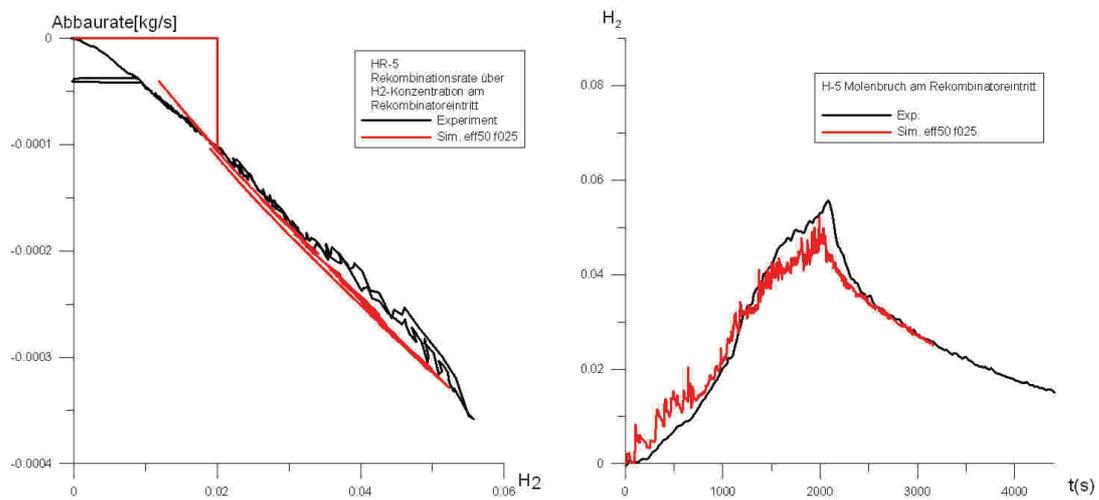


Abb. 3.4-2 Abbaurrate des Rekombinators (links) und Wasserstoffkonzentration am Rekombinatoreintritt (rechts)

### 3.4.3.2 Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten

- **H<sub>2</sub>-Eintrittskonzentration und Abbaurrate**

Der zeitliche Verlauf Wasserstoffabbaurrate stimmt gut mit den gemessenen Werten überein (Abb. 3.4-3). Merkliche Abweichungen ergeben sich in der Anfangsphase (bis 600 s) und zwischen 1900 s bis 2200 s. Die Abweichungen in der Anfangsphase sind darauf zurückzuführen, dass laut AREVA-Korrelation bei einem kalten Rekombinator der H<sub>2</sub>-Abbau erst ab 2 vol.% einsetzt (siehe Abschnitt 3.4.3). Zwischen 1900 s und 2200 s wird die Rekombination etwas unterschätzt. In der Simulation wird eine maximale Abbaurrate von ca. 0,00033 kg/s berechnet, im Experiment liegt sie dagegen bei ca. 0,0036 kg/s. Die Ursache für diese moderate Unterschätzung der Abbaurrate liegt an der etwas geringen H<sub>2</sub>-Konzentration am Rekombinatoreintritt in der Simulation (Abb. 3.4-2).

- **H<sub>2</sub>-Verteilung**

Wie aufgrund der analogen Versuchsdurchführung zu erwarten ist, zeigt die H<sub>2</sub>-Verteilung im HR-5 Experiment qualitativ einen ähnlichen Verlauf wie in HR-2. Es liegen wieder zwei verschiedene Schichtungen vor. Im Sumpf des THAI-Behälters existiert eine Schichtung, bei der sich unten H<sub>2</sub>-armes Gas befindet (Abb. 3.4-4). Die H<sub>2</sub>-Konzentration nimmt nach oben hin zu. Im Bereich der H<sub>2</sub>-Einspeisung (h=1,2 m) befindet sich bis zur Höhe des Rekombinators eine Schicht mit hoher H<sub>2</sub>-Konzentration. Weiter oberhalb sammelt sich heißes Gas, das noch wenig H<sub>2</sub> enthält. Oberhalb des Rekombinators hat das Gas eine relativ homogene Mischung (siehe M1,2,3 in Abb. 3.4-4), abgesehen vom Plume (mit heißem H<sub>2</sub>-armen Gas) am Rekombinatorausstritt. Die H<sub>2</sub>-Schichtung wird qualitativ und auch quantitativ richtig beschrieben (Abb. 3.4-5). An den Messpunkten oberhalb des Sumpfes stimmen Simulation und Experiment gut überein (siehe Messpunkte M1-4, M10 in Abb. 3.4-5). Lediglich im Sumpf des THAI-Behälters (M15) wird der Anstieg der H<sub>2</sub>-Konzentration deutlich überschätzt. Ein ähnliches Verhalten wird in zahlreichen CFX-Simulationen beobachtet. In Bereichen, die nicht durchströmt werden, kommt es bei CFX-Simulationen häufig zu einer fehlerhaften Simulation der (sehr langsamen) Vermischungsvorgänge.

- **Temperatur**

Die Temperaturen im THAI-Behälter werden von CFX auch in zufriedenstellender Übereinstimmung mit den experimentellen Daten berechnet. Bei allen Messstellen wird der qualitative Verlauf richtig vorhergesagt. Es fällt auf, dass an allen Messstellen die Temperatur tendenziell überschätzt wird (Abb. 3.4-7, Abb. 3.4-7).

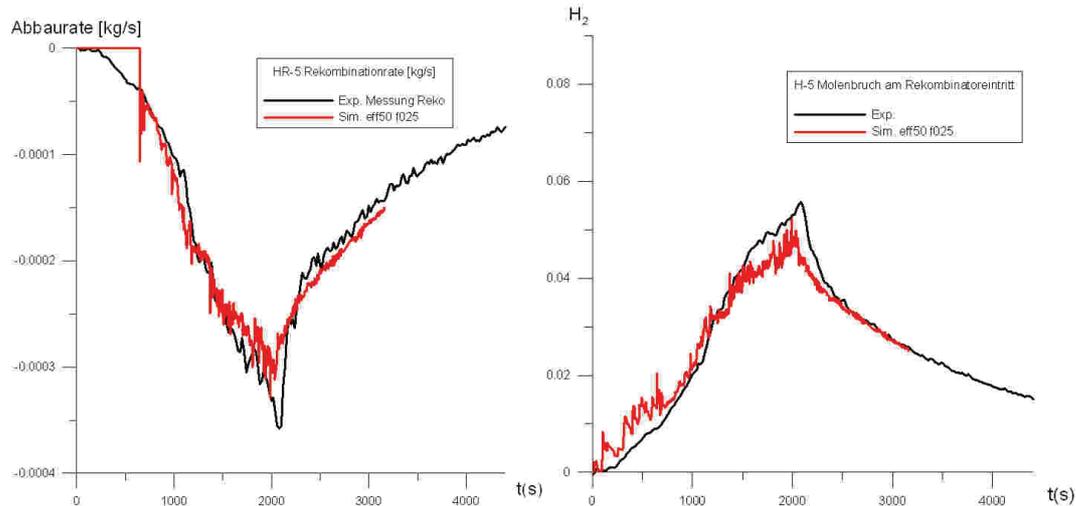


Abb. 3.4-3 Gemessene und berechnete Wasserstoffabbaurate; Rechts:  $H_2$ -Konzentration am Rekombinatoreintritt

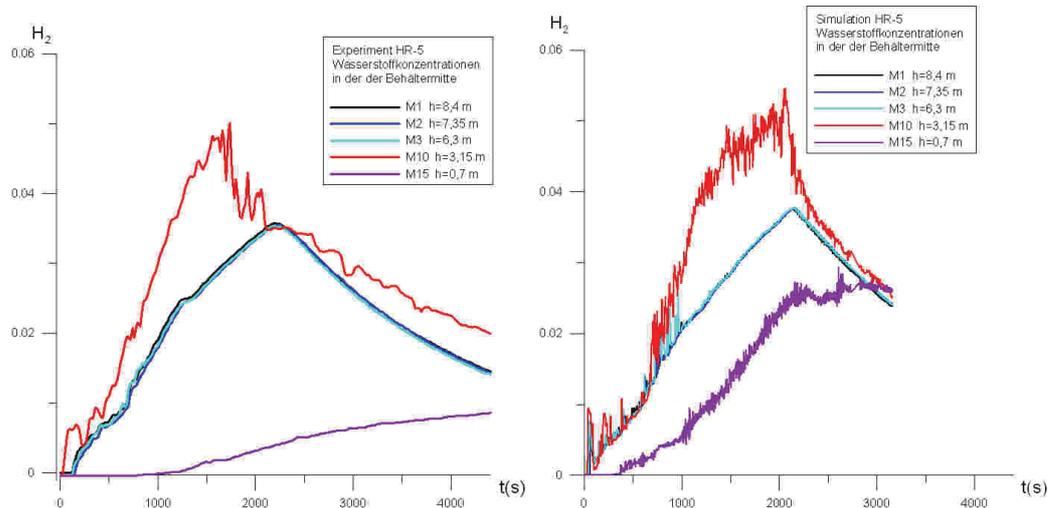


Abb. 3.4-4 Wasserstoffkonzentrationen auf verschiedenen Höhen entlang der Behälterachse

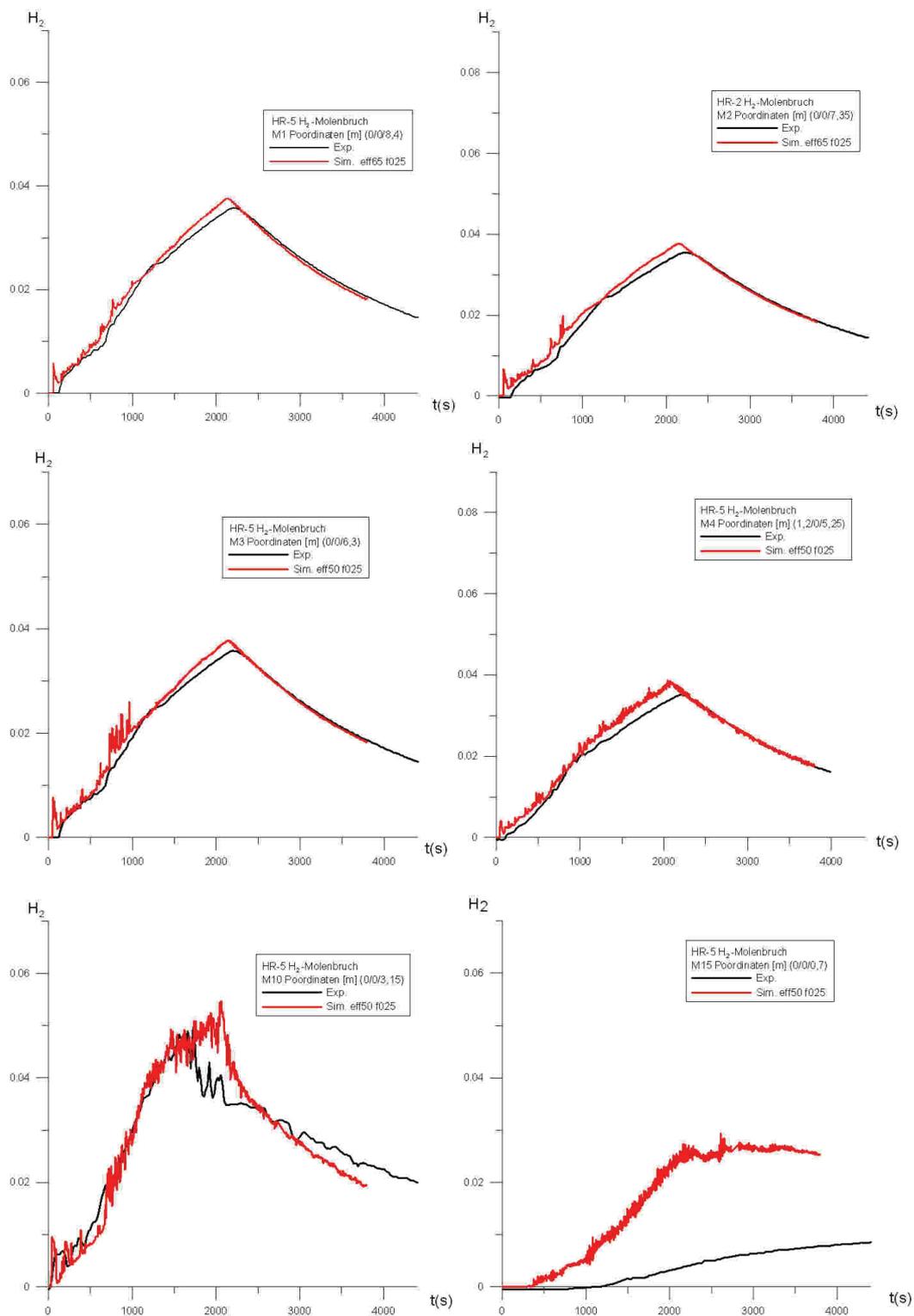


Abb. 3.4-5  $H_2$ -Konzentrationen an verschiedenen Messstellen

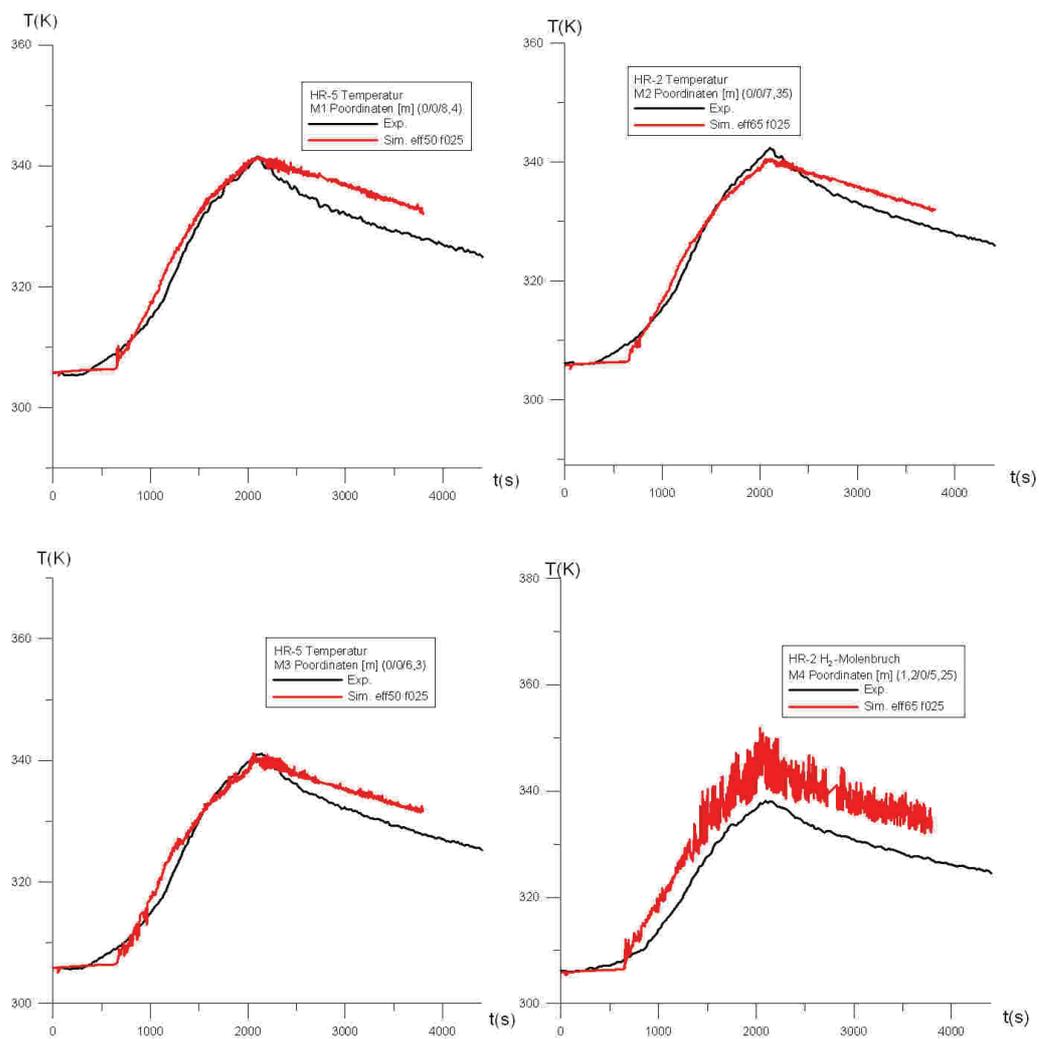


Abb. 3.4-6 Temperatur an verschiedenen Messstellen

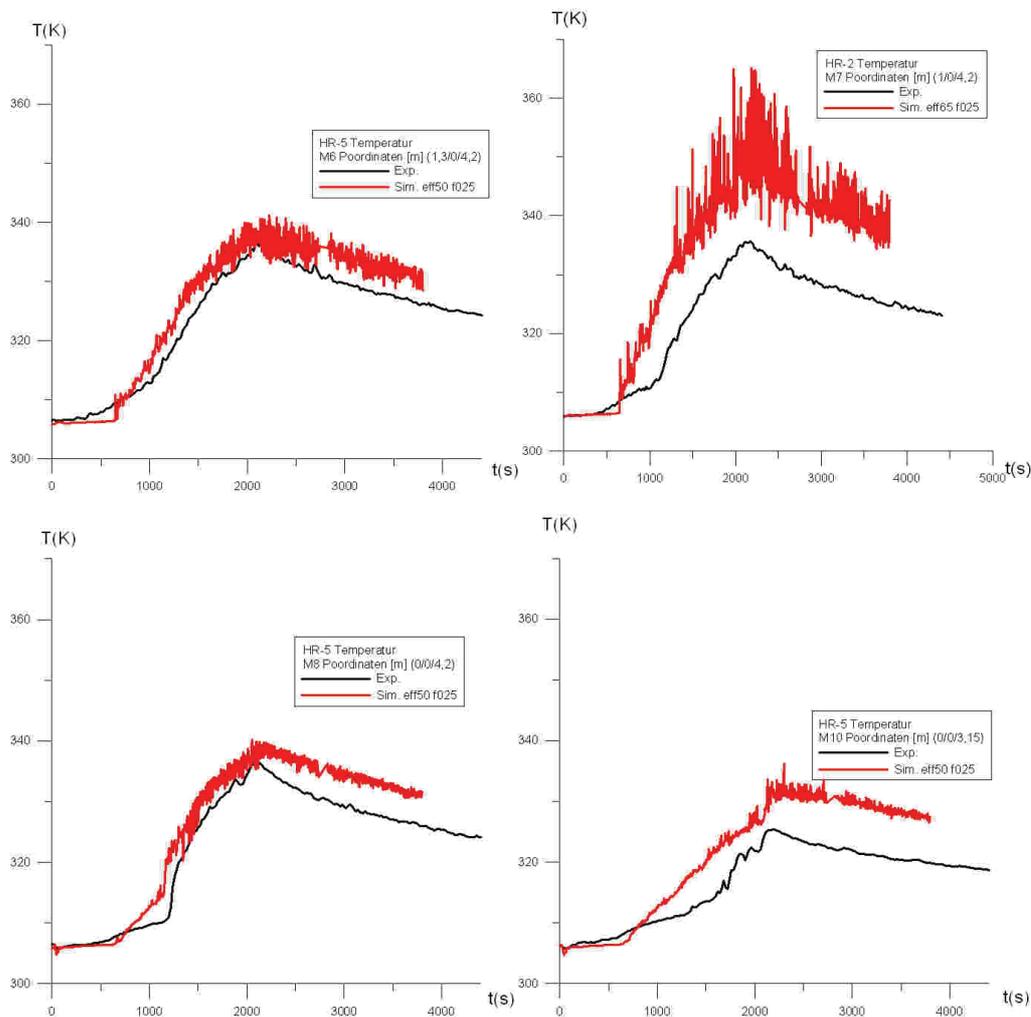


Abb. 3.4-7 Temperatur an verschiedenen Messstellen

### 3.4.4 Einfluss des Beginns der Reaktion bei kaltem Rekombinator

Laut AREVA-Korrelation beginnt der Wasserstoffabbau bei einem kalten Rekombinator ab einer Konzentration von 2 vol.%. Bei den HR-Versuchen wurde eine große Bandbreite für die Startkonzentration ermittelt. Bei einigen Versuchen (z. B. HR-1) erfolgte der Abbau erst ab einer Eingangskonzentration von über 2,5 vol.%, beim HR-5 Experiment setzte eine Rekombination dagegen schon ab 0,1 vol.% ein. Dieses Verhalten kann gegenwärtig noch nicht abschließend erklärt werden. Es gibt aber Hinweise, dass mit zunehmendem Druck die notwendige Startkonzentration abnimmt (Abb. 3.4-11) und dass es eine Rolle spielt, wie lange der letzte Betrieb des Rekombinators zurückliegt. War der Rekombinator lange nicht mehr in Betrieb, so scheint sich der notwendige Startwert deutlich zu erhöhen (Abb. 3.4-12).

Laut AREVA-Korrelation ist selbst für einen heißen Rekombinator die Abbaurate für Wasserstoffkonzentration unterhalb von 0,5 vol.% null. Deshalb kann der H<sub>2</sub>-Abbau in der Anfangsphase des HR-5 Experiments für die niedrigen H<sub>2</sub>-Eingangskonzentrationen (kleiner 0,5 vol.%) nicht beschrieben werden. Um den Einfluss der Startkonzentration zu untersuchen, wurde eine Simulation durchgeführt, bei der die Startkonzentration auf 0,5 vol.% abgesenkt wurde.

Abgesehen von der Anfangsphase, bei der die H<sub>2</sub>-Konzentration am Einlass niedriger als 2 vol.% ist, sind die Simulationsergebnisse schwach von der Wahl des Startwertes der Rekombination abhängig. Dies gilt sowohl für Abbaurate als auch für die gemessenen H<sub>2</sub>-Konzentrationen (Abb. 3.4-9, Abb. 3.4-10). Der Grund hierfür ist, dass in dieser Anfangsphase insgesamt eine geringe Menge H<sub>2</sub> (verglichen mit der gesamten in Phase 1 eingespeisten H<sub>2</sub>-Masse) abgebaut wird, da zum einen die Abbaurate klein ist und zum anderen diese Unterschiede einen relativ kurzen Zeitraum von 300 s andauern. Bei einer anderen Versuchsdurchführung, wenn sich die H<sub>2</sub>-Konzentration am Rekombinator sehr langsam erhöht, kann der Startzeitpunkt des Rekombinators aber einen größeren Einfluss gewinnen.

Bei der Simulation mit einem Startwert von 2 vol.% ist zu beachten, dass sobald die Grenze von 2 vol.% überschritten wurde, von einem warmen Rekombinator ausgegangen wird und dann die Grenze für die Rekombination noch bei 0,5 vol.% liegt.

Der Wasserstoff wird über einen Ring in den THAI-Behälter eingespeist. Die Lage des Plumes des eingespeisten Wasserstoffs ist nicht stationär, sondern schwankt etwas. Diese Instationarität des Plumes hat hier einen signifikanten Einfluss auf die Simulationsergebnisse. Kommt der Plume während der Schwankung in die Nähe des Rekombinatoreintritts, wird dort temporär die H<sub>2</sub>-Konzentration erhöht. Wird dabei die Schwelle von 2 vol.% überschritten, so kommt es zu einem früheren H<sub>2</sub>-Abbau. Dies ist bei ca. 700 s der Fall (Abb. 3.4-3). Ohne diesen Peak in der H<sub>2</sub>-Eingangskonzentration würde die Rekombination ca. 200 s später beginnen und die Unterschiede zwischen den beiden Simulationen würden tendenziell größer.

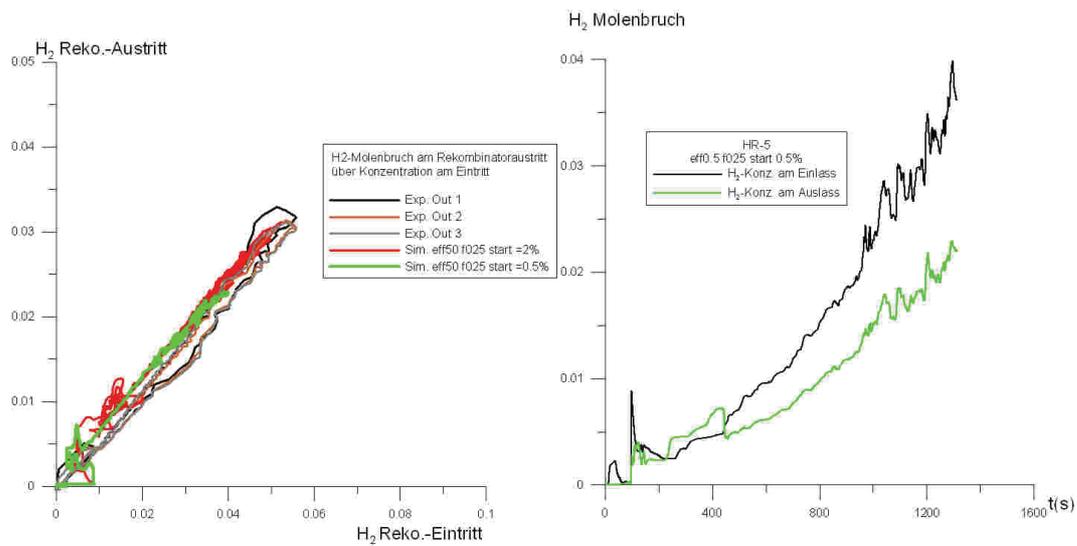


Abb. 3.4-8 Wasserstoffkonzentration am Rekombinatoreinlass und Auslass

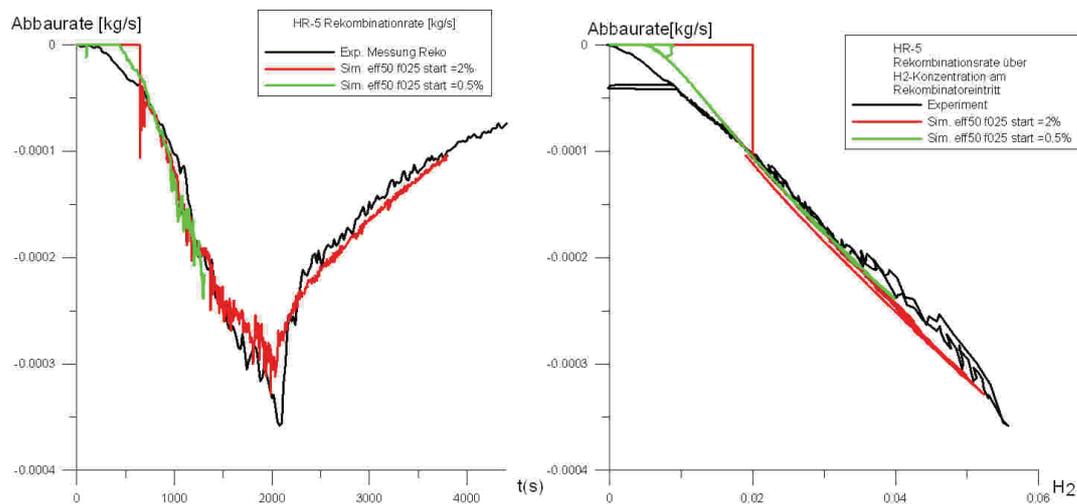


Abb. 3.4-9 Wasserstoffabbaureate in Abhängigkeit von der Wahl der Startbedingungen für die Rekombination

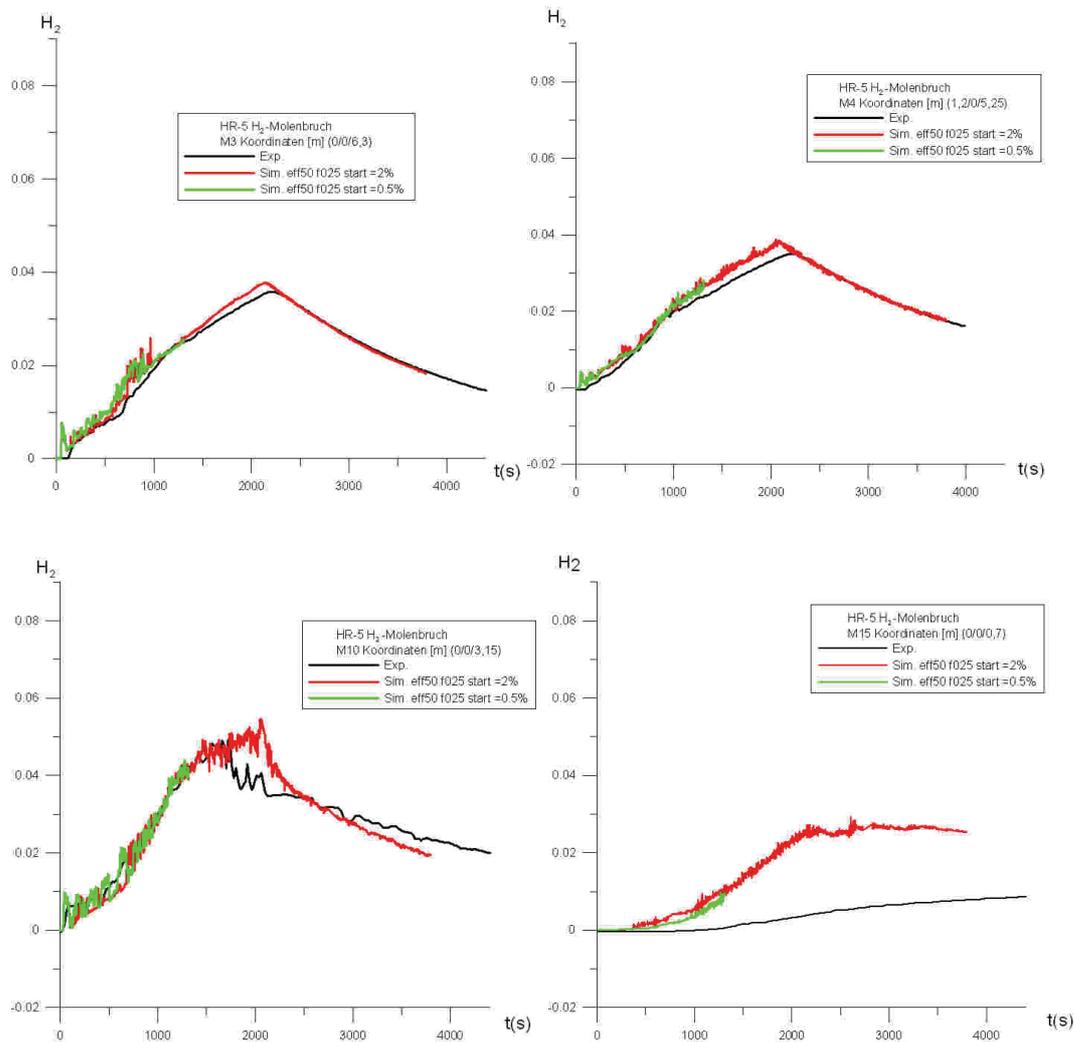


Abb. 3.4-10 Wasserstoffkonzentrationen an verschiedenen Messstellen in Abhängigkeit von der Wahl der Startbedingungen für die Rekombination

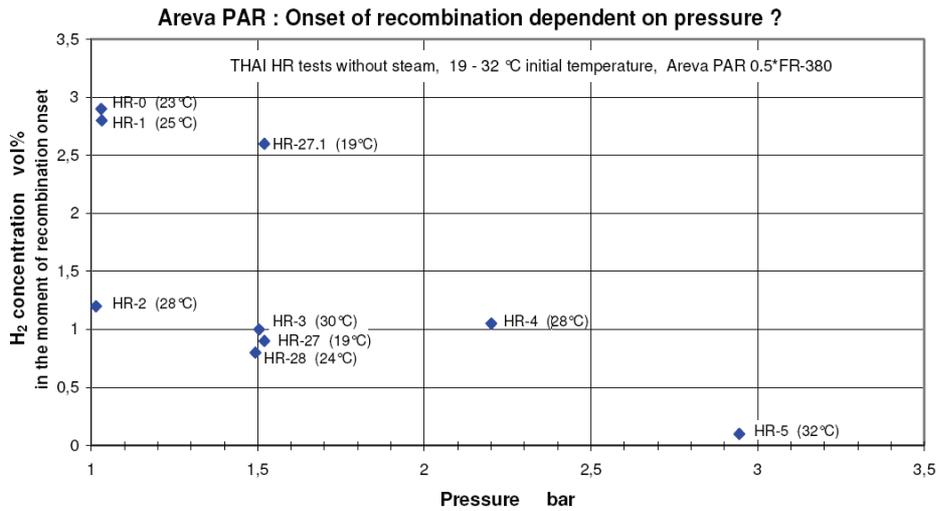


Abb. 3.4-11 Startkonzentration bei kalten Rekombinator bei verschiedenen Versuchen in Abhängigkeit vom Druck /KAN 09/

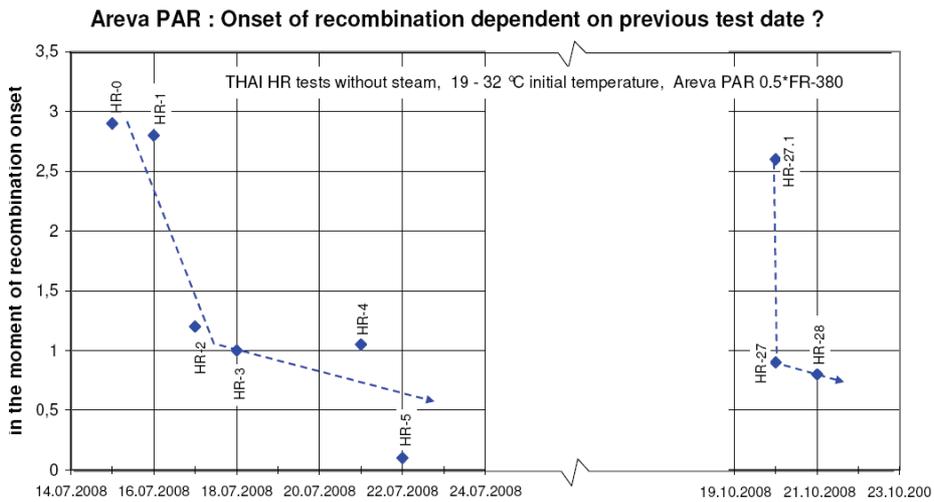


Abb. 3.4-12 Startkonzentration bei kalten Rekombinator bei verschiedenen Versuchen in Abhängigkeit von der zeitlichen Abfolge der Versuche /KAN 09/

### 3.5 Nachrechnung des Versuches HR-12

#### 3.5.1 Zielsetzung

Ziel der Nachrechnung des THAI Versuches HR-12 war eine weitere Validierung des GRS-Rekombinatormodells. Im Gegensatz zu den Nachrechnungen der Versuche HR-2 und HR-5 soll in diesem Fall die Gültigkeit des Rekombinatormodells für die Situation einer mit Dampf versetzten Atmosphäre untersucht werden. Dieses entspricht mehr den realen Bedingungen, unter denen ein Rekombinator in einem schweren Störfall im Containment arbeitet.

#### 3.5.2 Geometrie und Randbedingungen

Die zur Nachrechnung des Versuches HR-12 verwendete Geometrie entspricht der in den Nachrechnungen der Versuche HR-2 und HR-5 verwendeten Geometrie (90.000 Elemente, Einspeisung des H<sub>2</sub> über einen 3 mm dicken Ring). Die Modellparameter für das Rekombinatormodell wurden entsprechend Tab. 3.5-1 gewählt.

Tab. 3.5-1 Wahl der Modellparameter für die Nachrechnung von Versuch HR-12

<b>K1</b>	0,0137e-3 [kg/sbar]	<b>K2</b>	0,0163e-3 [kg/s]
<b>f<sub>eff</sub></b>	0,5	<b>f<sub>wand</sub></b>	0,2
<b>StartH2</b>	2,0 [Vol.-%]	<b>StartTemp</b>	405,0 [K]

Der THAI-Behälter war zu Beginn des Experiments HR-12 bereits mit Dampf gefüllt (61,1 vol.%) und er hatte einen Druck von 2,921 bar. Die Starttemperaturen wurden, abhängig von der Behälterhöhe, an die experimentellen Messdaten angepasst (siehe Abb. 3.5-1). Durch den Einspeiserring wurden sowohl weiterer Dampf als auch Wasserstoff in den Behälter eingespeist. Die genauen Einspeisemassen finden sich in Tab. 3.5-2. Eine detaillierte Beschreibung des Experiments findet sich bei /KAN 09b/.

Tab. 3.5-2 H<sub>2</sub>- und Dampfeinspeisemassen

H <sub>2</sub> Einspeisung		Dampfeinspeisung	
Zeit	H <sub>2</sub> -Masse	Zeit	Dampfmasse
[s]	[g]	[s]	[g]
0	0,49	0	6,16
240	0,247	480	6,16
701	0,247	580	0
702	0,451	6720	0
1919	0,451		
1920	0		
6720	0		

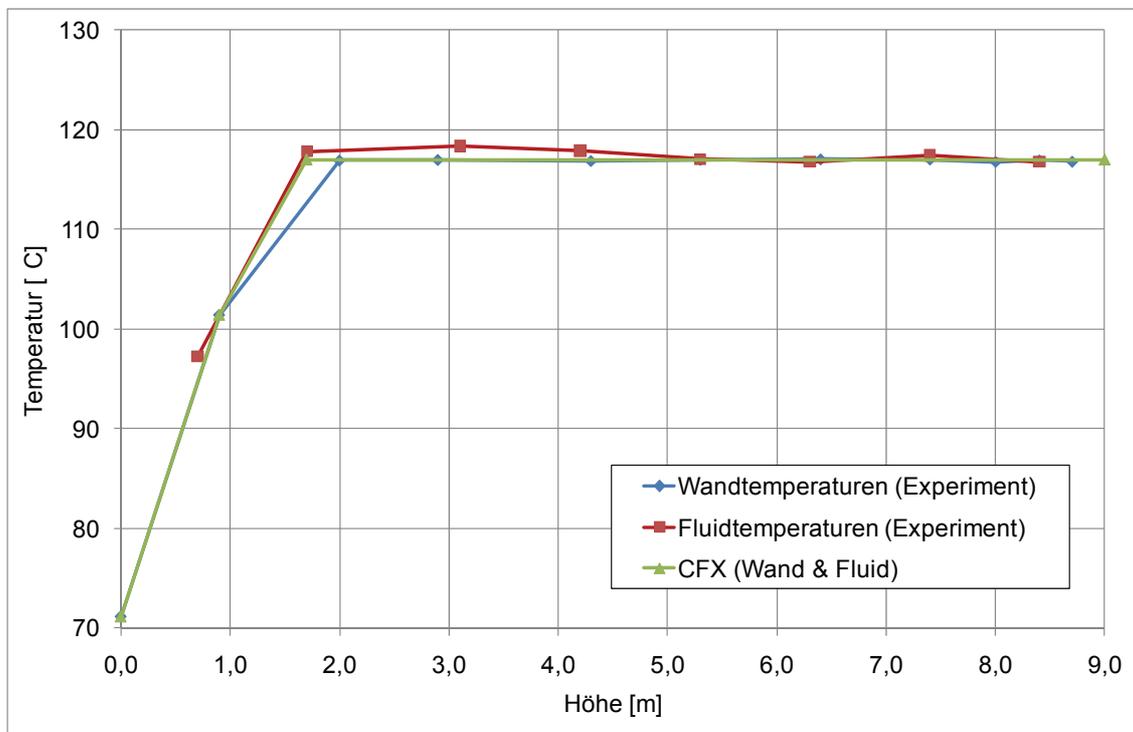


Abb. 3.5-1 Temperaturprofil zum Beginn des Experiments HR-12

Für die Berechnung wurden weiterhin das GRS-Kondensationsmodell, eine adaptive Zeitschrittsteuerung, ein Redlich-Kwong-Modell für den Dampf, das k-ε Turbulenzmodell und das Konvergenzkriterium  $RMS < 0,0001$  verwendet.

### 3.5.3 Vergleich mit experimentellen Ergebnissen

In Abb. 3.5-2 ist der mit CFX berechnete Druckverlauf im THAI-Behälter dargestellt und mit dem experimentellen Druckverlauf verglichen. Es zeigt sich, dass der in CFX berechnete Druckverlauf deutlich über den experimentellen Werten liegt. Ursache hierfür ist möglicherweise ein zu hoher Wärmegehalt in den Stahlwänden bei den Startbedingungen und/oder ein zu geringer Wärmeübergang an die Umgebung:

- Wärmegehalt in den Stahlwänden: Die Temperatur der Stahlwände wurde zwar in axialer Richtung entsprechend den experimentellen Werten modifiziert (siehe Abb. 3.5-1), in radialer Richtung wurde die Wandtemperatur jedoch als homogen angenommen. Dieses entspricht höheren Temperaturen als im Experiment, da dort die Temperaturen vermutlich in radialer Richtung von der Innenwand bis zur äußeren Atmosphäre abgenommen haben.
- Wärmeübergang an die Umgebung: Hierfür wurde angenommen, dass der Stahlbehälter vollständig von einer 12 cm dicken Schicht Mineralwolle umgeben war. Dieses entspricht nicht den experimentellen Gegebenheiten, weil dort das Mannloch im Deckel des THAI-Behälters nicht durch Mineralwolle abgedeckt gewesen ist. Zumindest hierüber hat im Experiment eine höhere Wärmeabgabe als in der CFX-Rechnung stattgefunden.

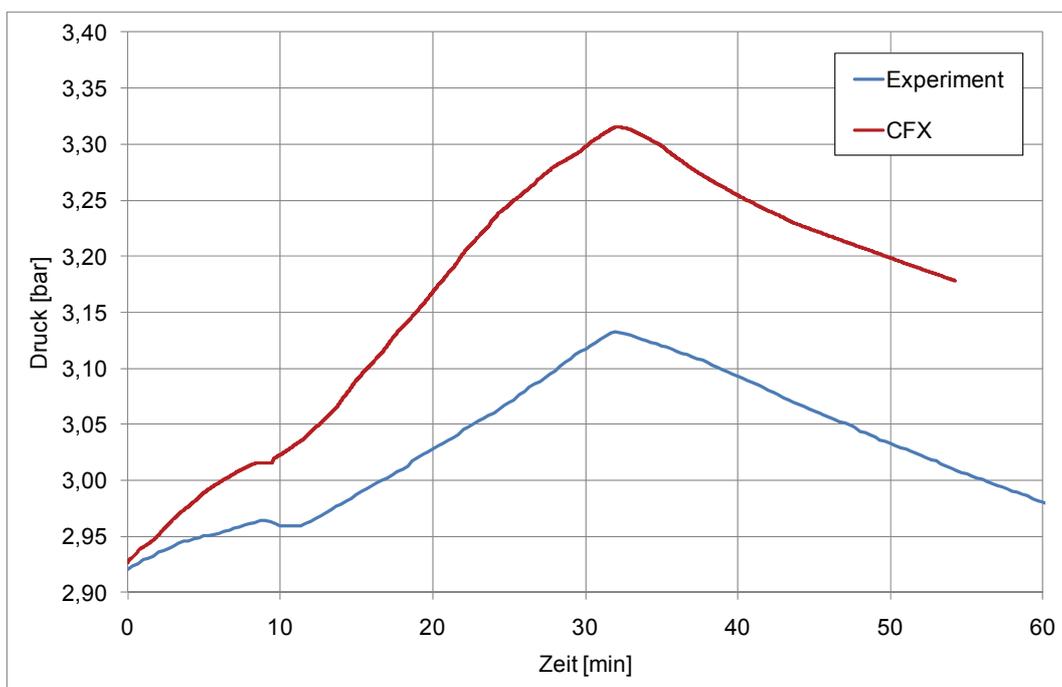


Abb. 3.5-2 Druckverlauf im THAI-Behälter

Entsprechend des Druckverlaufs zeigt auch der mit CFX berechnete Temperaturverlauf eine Überhöhung gegenüber den experimentellen Werten. Dieses ist in Abb. 3.5-3 am Beispiel einer Messstelle in 8,4 m Höhe dargestellt, gilt aber in etwa genauso für die Temperaturen im mittleren und unteren Bereich des THAI-Behälters. Eine weitere mögliche Ursache für die Temperaturüberhöhung (neben dem Wärmeübergang nach außen) könnte in einer Überschätzung der Rekombinationsrate liegen, die noch im nächsten Abschnitt diskutiert wird.

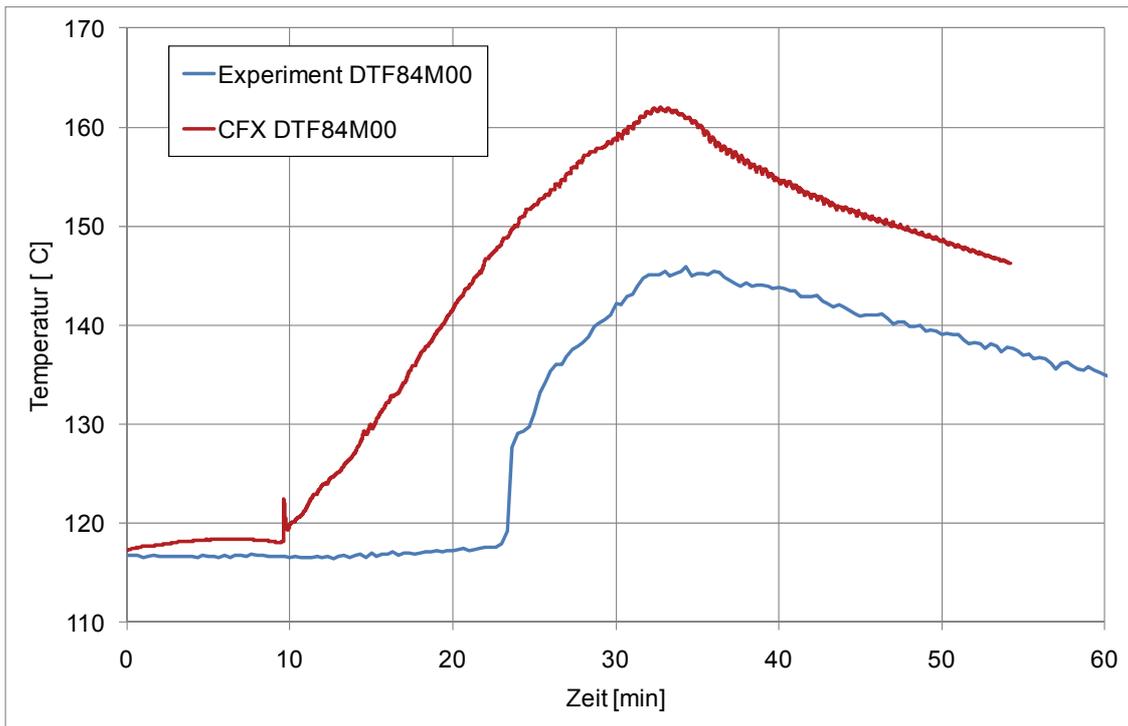


Abb. 3.5-3 Temperaturverlauf in 8,4 m Höhe

In den Abb. 3.5-4, Abb. 3.5-5 und Abb. 3.5-6 ist die  $H_2$ -Konzentration im THAI-Behälter dargestellt. Abb. 3.5-4 zeigt den zeitlichen Verlauf an einer Messstelle in 8,4 m Höhe und Abb. 3.5-5 den zeitlichen Verlauf in 3,15 m Höhe. Abb. 3.5-6 zeigt ein Höhenprofil zu einem festen Zeitpunkt ( $t=30$  min). Es zeigt sich, dass die  $H_2$ -Konzentration nach Einsetzen der Rekombination und insbesondere im oberen Bereich des THAI-Behälters von der CFX-Simulation unterschätzt wird, während die  $H_2$ -Konzentration im unteren Bereich besser zu den experimentellen Daten passt. Dieses Verhalten ist vergleichbar mit dem Experiment HR-2. Die Ursache hierfür liegt in einer Überschätzung der Rekombinationsrate durch die verwendete AREVA-Korrelation. Um diesen Aspekt

zu untersuchen, wird im folgenden Abschnitt die Rekombinationsrate detailliert analysiert.

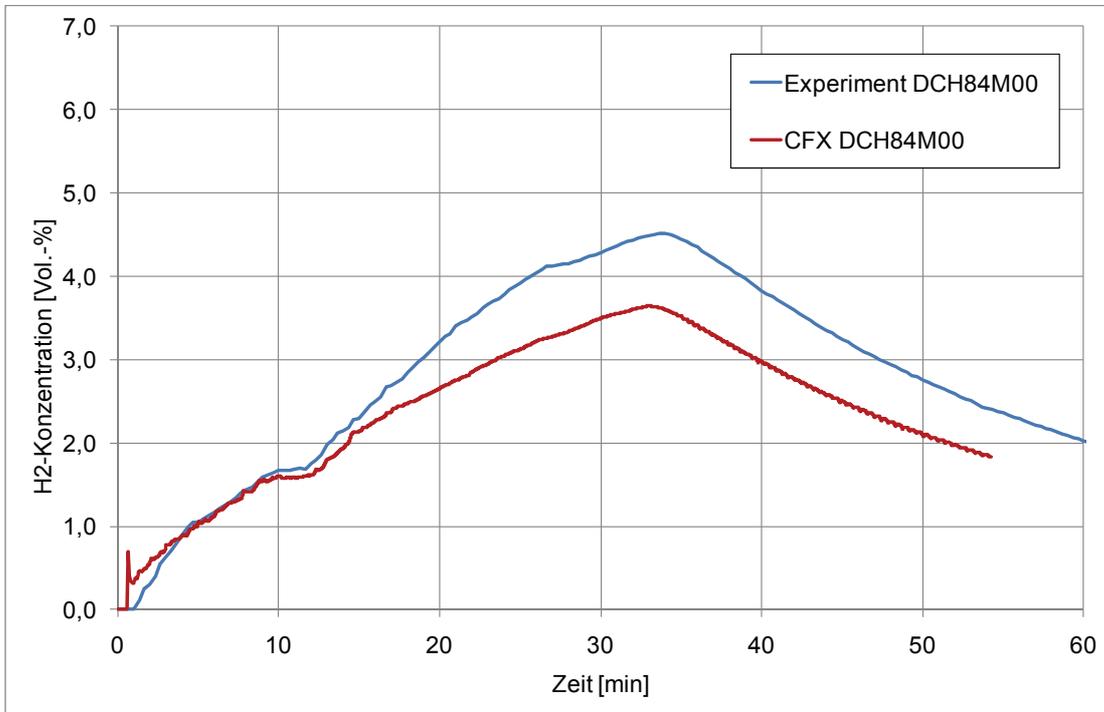


Abb. 3.5-4 H<sub>2</sub>-Konzentration in 8,4 m Höhe

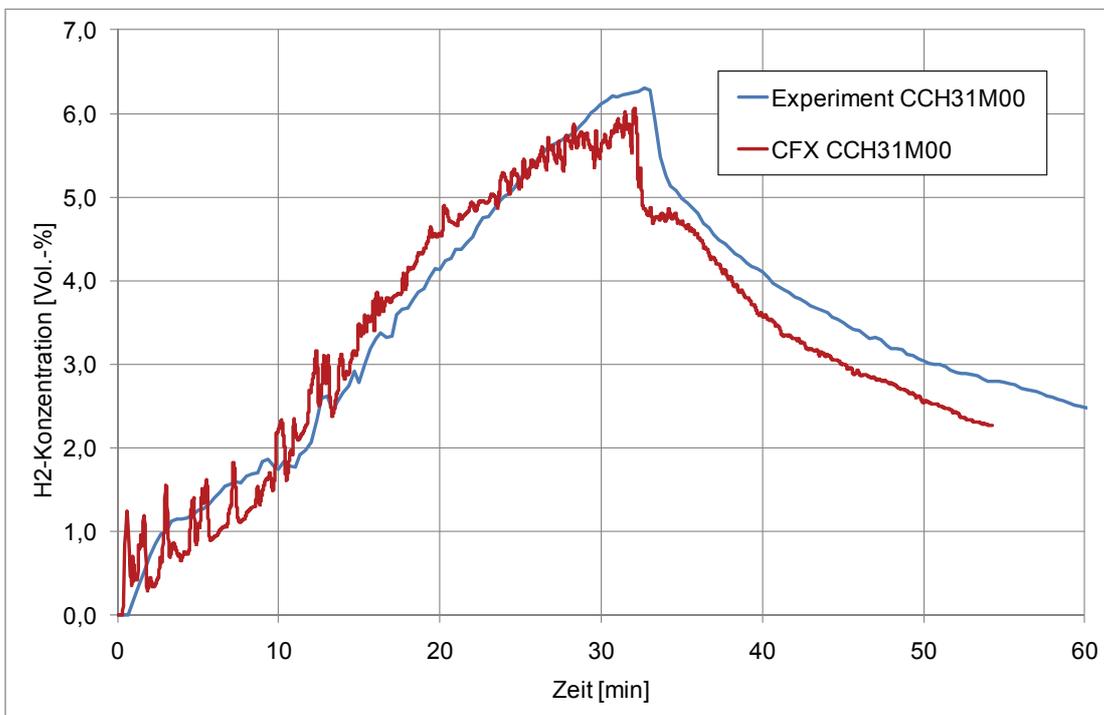


Abb. 3.5-5 H<sub>2</sub>-Konzentration in 3,15 m Höhe

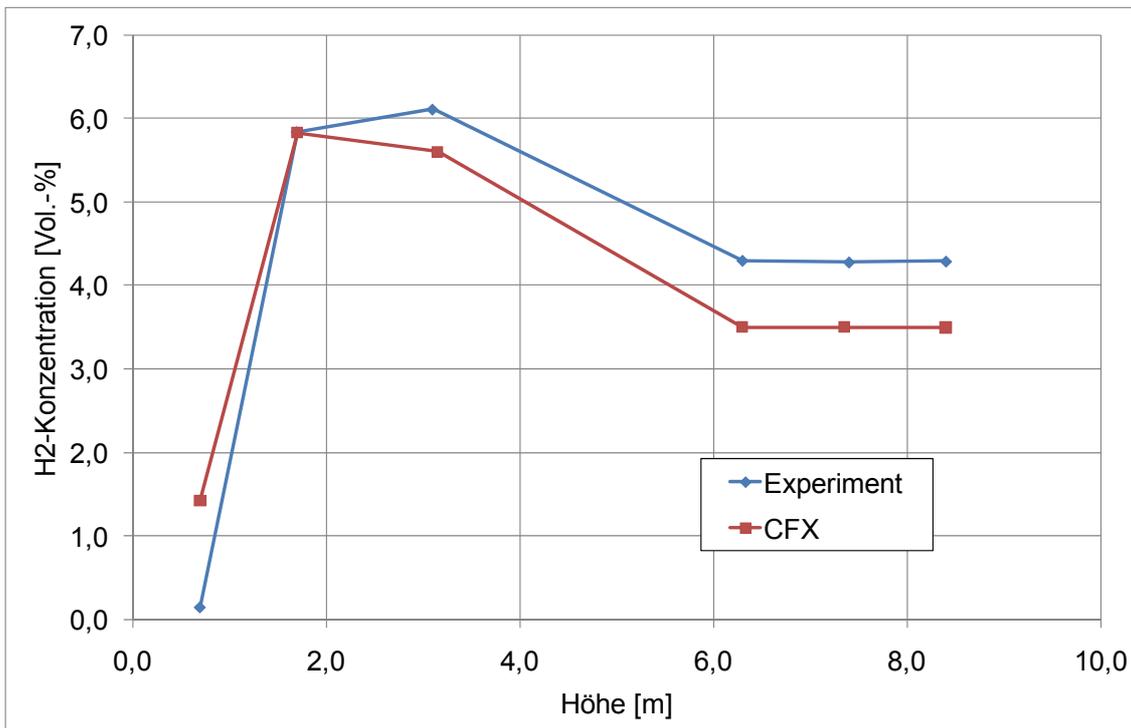


Abb. 3.5-6 Höhenprofil der H<sub>2</sub>-Konzentration bei t = 30 min

### 3.5.4 Analyse der Rekombinationsrate

In Abb. 3.5-7 ist die mit der AREVA-Korrelation aus der H<sub>2</sub>-Konzentration am Reko-Einlass berechnete Rekombinationsrate den experimentellen Werten gegenübergestellt. Einmal wurde in der AREVA-Korrelation der experimentelle Druck verwendet (grüne Linie) und einmal wurde der mit CFX berechnete Druck verwendet (rote Linie). Der Unterschied im Druck ist in Abb. 3.5-2 dargestellt. Es zeigt sich jedoch in beiden Fällen, dass durch die AREVA-Korrelation die experimentelle Rekombinationsrate überschätzt wird. Eine mögliche Ursache für den Fehler der AREVA-Korrelation ist die fehlende Berücksichtigung der Temperatur in den Rekombinatorplatten und -wänden oder eine ungleiche Durchströmung bzw. Konzentrationsunterschiede am Eintritt. Da die Rekombinationsrate überschätzt wird, wird in der CFX-Simulation zu viel H<sub>2</sub> abgebaut, dieses erklärt auch den Verlauf der H<sub>2</sub>-Konzentration in Abb. 3.5-4 sowie bedingt den zu hohen Druck.

In Abb. 3.5-8 ist der Verlauf der H<sub>2</sub>-Konzentration am Reko-Einlass dargestellt. Diese passt (vergleichbar mit der Situation beim HR-2) zunächst recht gut zu den experimentellen Werten (0 - 15 min). Dann zeigt sich eine Überhöhung der durch CFX berechnete

ten Werte im Vergleich zum Experiment (ca. 15 - 30 min). Eine mögliche Ursache ist die Überschätzung der Rekombinationsrate und dadurch verstärktes Ansaugen wasserstoffreichen Gases. Für  $t > 30$  min ist die  $H_2$ -Konzentration zu niedrig, was u. a. daran liegt, dass zu diesem Zeitpunkt schon zu viel  $H_2$  abgebaut wurde.

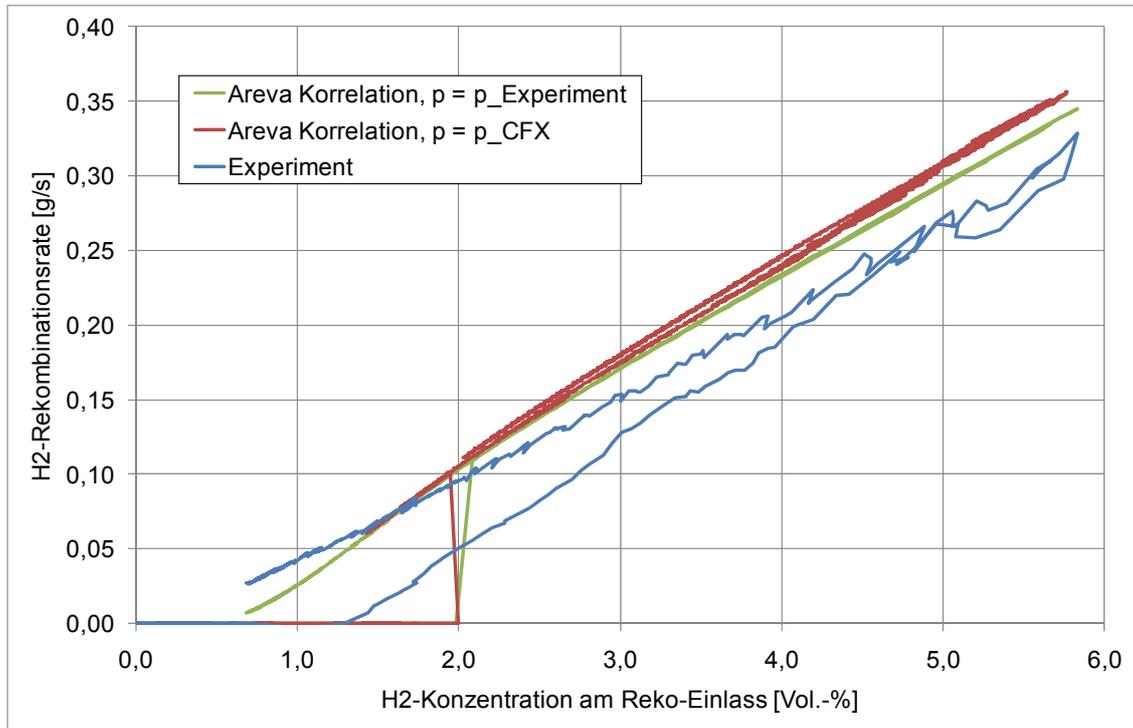


Abb. 3.5-7 Rekombinationsrate im Vergleich zur  $H_2$ -Konzentration am Reko-Einlass

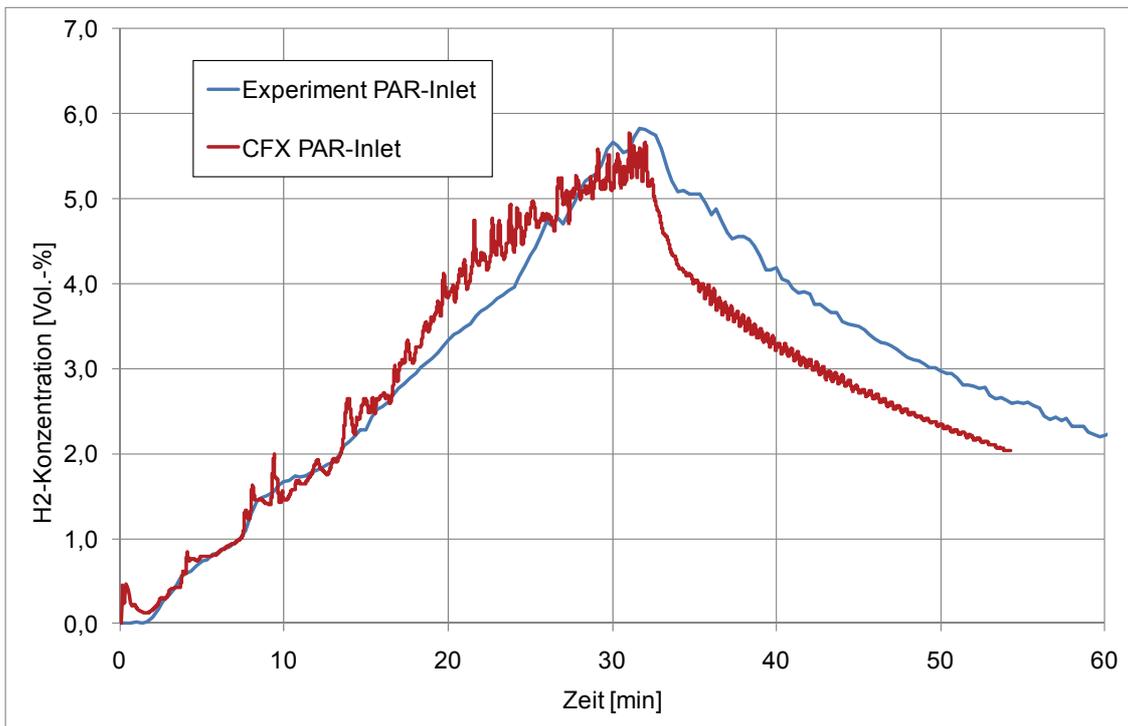


Abb. 3.5-8 H<sub>2</sub>-Konzentration am Reko-Einlass

In Abb. 3.5-9 ist der zeitliche Verlauf der Rekombinationsrate dargestellt. Auch hier zeigt sich für  $t < 32$  min eine Überschätzung der Rekombinationsrate durch CFX. Da in dieser Phase schon zu viel H<sub>2</sub> abgebaut wird, fällt die Rekombinationsrate in der zweiten Phase für  $t > 32$  min geringer aus und liegt in etwa bei den experimentellen Werten. Hierbei kompensieren sich zwei Fehler (H<sub>2</sub>-Konzentration am Reko-Einlass zu niedrig, Rekombinationsrate zu hoch).

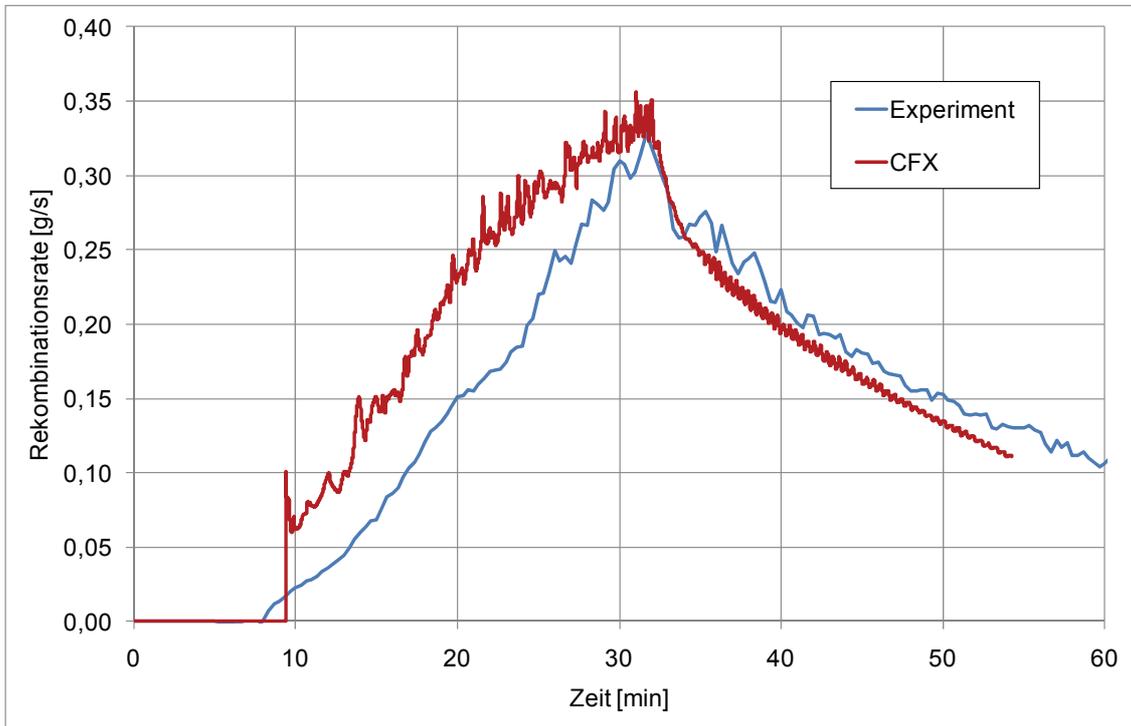


Abb. 3.5-9 Zeitlicher Verlauf der Rekombinationsrate

In Abb. 3.5-10 wird die Temperatur am Reko-Auslass der  $H_2$ -Konzentration am Reko-Einlass gegenübergestellt. In der Abbildung zeigt sich, dass die durch CFX berechneten Temperaturen unterhalb der experimentellen Werte liegen. Dieses zeigt, dass in der Simulation ein zu großer Teil der Wärme an die Rekombinatorplatten bzw. -wände abgegeben wird. Der hierfür zuständige Parameter  $f_{wand}$  ist mit 0,2 also für diese Nachrechnung möglicherweise zu hoch gewählt worden.

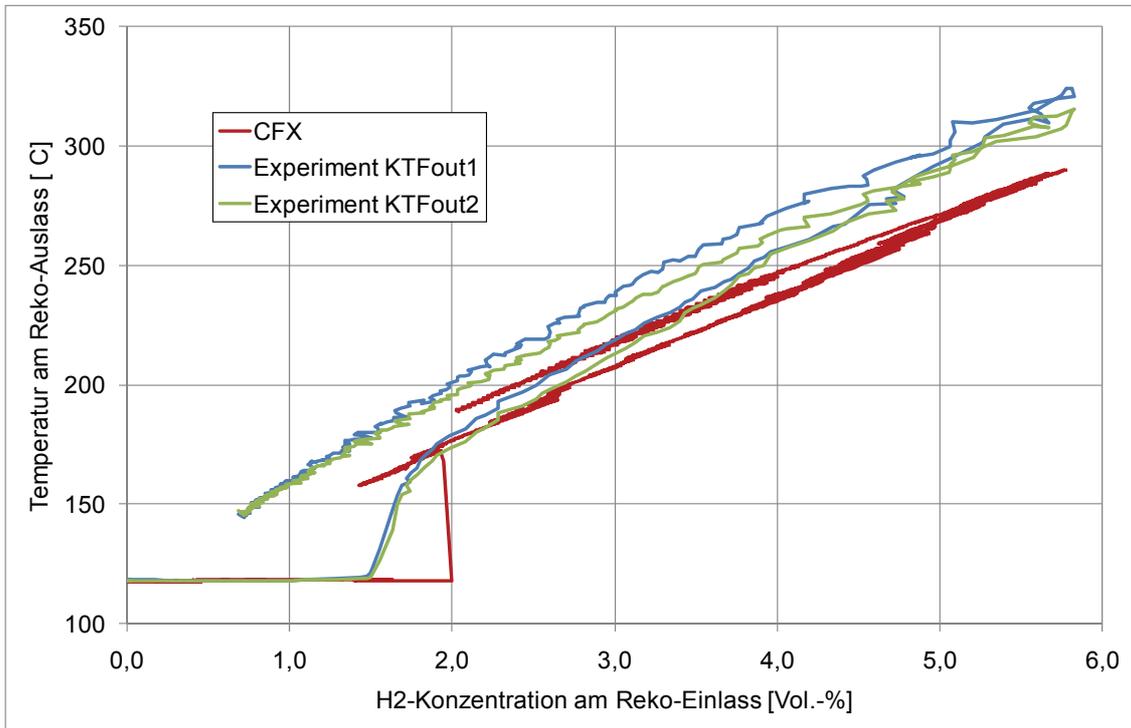


Abb. 3.5-10 Temperatur am Reko-Auslass im Vergleich zur H<sub>2</sub>-Konzentration am Reko-Einlass

In Abb. 3.5-11 wird die H<sub>2</sub>-Konzentration am Reko-Auslass mit der H<sub>2</sub>-Konzentration am Reko-Einlass verglichen. Hierbei zeigt sich eine relativ gute Übereinstimmung zwischen den experimentellen Werten und der CFX Simulation.

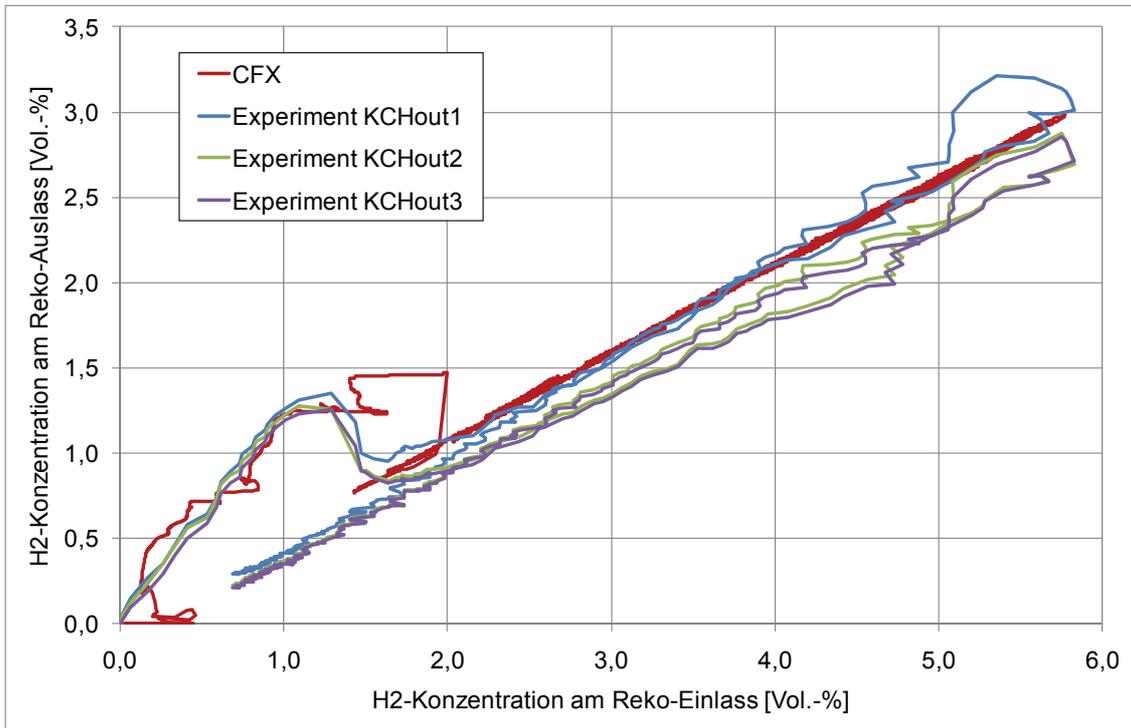


Abb. 3.5-11 Vergleich der H<sub>2</sub>-Konzentration von Ein- und Auslass

### 3.5.5 Zusammenfassung

Die Nachrechnung des THAI-Experiments HR-12 zeigt, dass das Verhalten eines Rekombinators auch in Anwesenheit von Dampf durch das Rekombinatoremodell qualitativ richtig wiedergegeben wird. Quantitativ wird die experimentelle Rekombinationsrate jedoch überschätzt, was nicht an der CFX-Rechnung liegt, sondern an der Güte der AREVA-Korrelation. Hier könnte die Erweiterung der AREVA-Korrelation um einen Term zur Beschreibung der Temperaturabhängigkeit der Rekombinationsrate zu einer Verbesserung führen. Weiterhin könnte eventuell für den Anteil der vom Gas an den Rekombinator abgegebenen Wärme die Konstante  $f_{\text{wand}}$  durch einen funktionalen Zusammenhang ersetzt werden. Auch die in CFX gewählte Wandtemperatur des THAI-Behälters in radialer Richtung bei der Initialisierung und der Wärmeübergang an die Umgebung sowie die Verluste über das Mannloch müssen noch genauer analysiert werden. Hierzu gibt es wenige experimentelle Daten.

### **3.6 Fazit aus den Validierungsrechnungen für das Rekombinatormodell**

Es wurde ein einfaches Rekombinatormodell für Anlagensimulationen entwickelt und an CFX gekoppelt, bei dem die Wirkungsweise des Rekombinators mittels Korrelationen simuliert wird. Die Abbaurrate wird mittels der AREVA-Korrelationen berechnet. Mit Hilfe der Abbaurrate und mit Annahmen bezüglich der Effizienz des Rekombinators (bestimmt den Anteil des in den Rekombinator transportierten Wasserstoffs, der abgebaut wird) kann der Massenstrom und die Gaszusammensetzung am Rekombinator bestimmt werden. Dieses Rekombinatormodell wurde zur Simulation von drei neuen Versuchen an der THAI-Anlage (HR-2, HR-5, HR-12) verwendet, bei denen  $\frac{1}{2}$  Rekombinator des Typs FR-380T der Firma AREVA eingesetzt war. Die Experimente unterschieden sich hinsichtlich des Drucks und der Dampfkonzentration während der Rekombination.

Dieses einfache Modell ist in der Lage, den Wasserstoffabbau und die Gas/Temperatur-Schichtung im THAI-Behälter prinzipiell richtig zu simulieren. Ein Großteil der verbleibenden Abweichungen der Simulationsergebnisse von den experimentellen Werten lässt sich dadurch erklären, dass die AREVA-Korrelationen, insbesondere für Atmosphärendruck, nicht immer den Wasserstoffabbau exakt vorhersagt.

## **4 Wärmetransport in Wände und andere Strukturen**

Wärmeübertragungsvorgänge von Fluiden/Gasen an Strukturen (z. B. Betonwände) spielen bei Stör- und Unfällen im Sicherheitsbehälter ebenfalls eine zentrale Rolle. Eine adäquate Simulation ist auch ein zentraler Punkt bei der Anwendung von CFX. In CFX besteht die Möglichkeit, Strukturen in das Rechengitter zu integrieren. Im Festkörper wird dann die dreidimensionale Wärmeleitungsgleichung gelöst und es wird eine dreidimensionale Temperaturverteilung in der Struktur berechnet. Um die Aufheizung z.B. von Betonwänden korrekt zu simulieren, muss am Übergang Gas/Wand ein sehr feines Gitter verwendet werden, da sich beim Beton aufgrund der schlechten Wärmeleitfähigkeit zuerst eine sehr dünne Betonschicht aufheizt. Werden zu große Zellen in senkrechter Richtung zur Grenzfläche gewählt, so wird die Oberflächentemperatur deutlich unterschätzt und die Wärmeabfuhr u.U. überschätzt.

Anhand der Simulation eines einfachen Testbeispiels soll zunächst geklärt werden, welche Diskretisierung im Gas und im Festkörper nötig ist, um die Wärmeleitung realistisch zu simulieren. Ein einfaches Testbeispiel ist besonders gut für diese Untersuchung geeignet, da bei ihm mit relativ geringem Aufwand eine gitterunabhängige Lösung erzielt werden kann, und mehrere Rechnungen mit verschiedenen feiner Diskretisierung durchgeführt werden können. Diese Untersuchung dient auch dazu, einen Anhaltspunkt für den Fehler zu erhalten, mit dem bei Verwendung eines groben Gitters zu rechnen ist. Danach wird die Nachrechnung der Versuchs TH21 und TH22 aus dem THAI III Versuchsprogramm beschrieben.

### **4.1 Untersuchung des Gittereinflusses auf die Simulation des Wärmetransports in die Wände anhand eines einfachen Testbeispiels**

#### **4.1.1 Zielsetzung**

Ziel der Arbeiten ist es, festzustellen, welchen Einfluss die Feinheit des Berechnungsgitters sowie des Gittertyps (strukturiert oder unstrukturiert) auf die Berechnung des Wärmetransports in die Wände haben. Dazu wurde anhand eines einfachen Testbeispiels eine Parametervariation durchgeführt und der Einfluss der genannten Größen studiert. Weiterhin soll ein Bereich gefunden werden, in dem die Berechnung des Wärmetransports unabhängig vom verwendeten Gitter wird. Darüber hinaus soll der

Fehler bei einer Berechnung mit einem außerhalb dieses Bereiches liegenden (größeren) Gitter bestimmt werden.

#### 4.1.2 Geometrie und Randbedingungen

In Abb. 4.1-1 ist die verwendete Geometrie für das Testbeispiel perspektivisch dargestellt. Sie besteht aus einer Betonwand und einem Luftraum. Im Luftraum gibt es eine Luftströmung entlang der Längsachse der Geometrie. Die Luft strömt in die Geometrie mit einer Geschwindigkeit von  $1 \text{ ms}^{-1}$  ein. Dabei hat sie eine Anfangstemperatur von  $170 \text{ °C}$ . Die Wand hat eine Anfangstemperatur von  $20 \text{ °C}$ . Es wurde berechnet, welcher integrale Wärmestrom aus der Luft in die Wand nach einer Simulationsdauer von 1000 Sekunden vorliegt und wie sich die Temperaturen der Luft und des Betons in dieser Zeit verändern. In den Abb. 4.1-2 bis Abb. 4.1-4 sind Gittervariationen dargestellt. Abb. 4.1-2 zeigt die Verfeinerung der Knotenabstandes in der Luft in der Nähe der Trennebene zwischen Luft und Beton. In Abb. 4.1-3 ist das verwendete unstrukturierte Gitter im Beton dargestellt, in Abb. 4.1-4 schematisch die Aufteilung des hybriden Gitters im Beton.

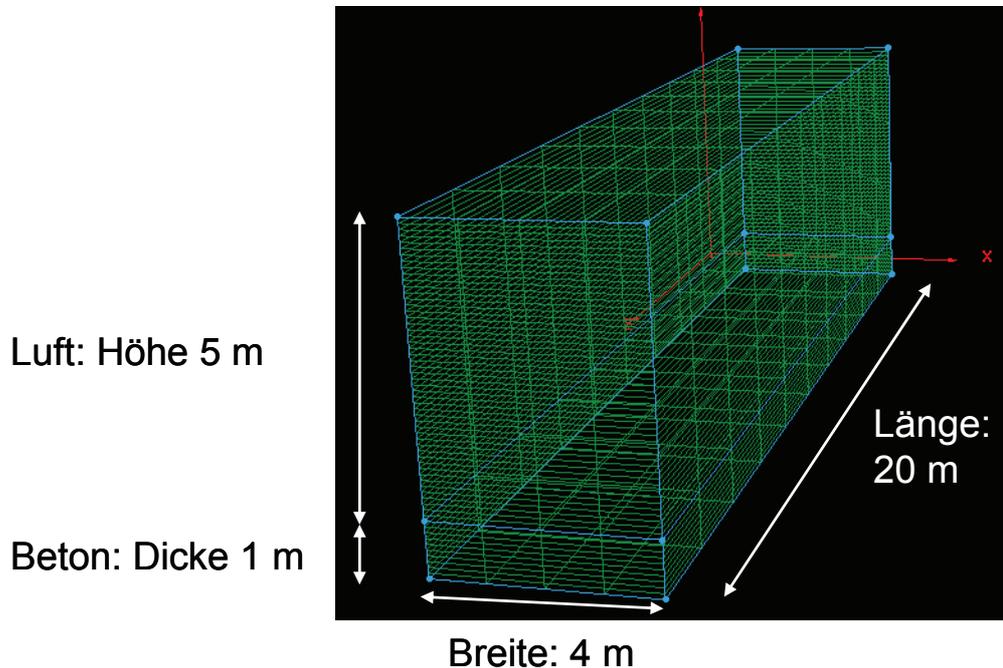


Abb. 4.1-1 Perspektivische Darstellung der Versuchsgeometrie

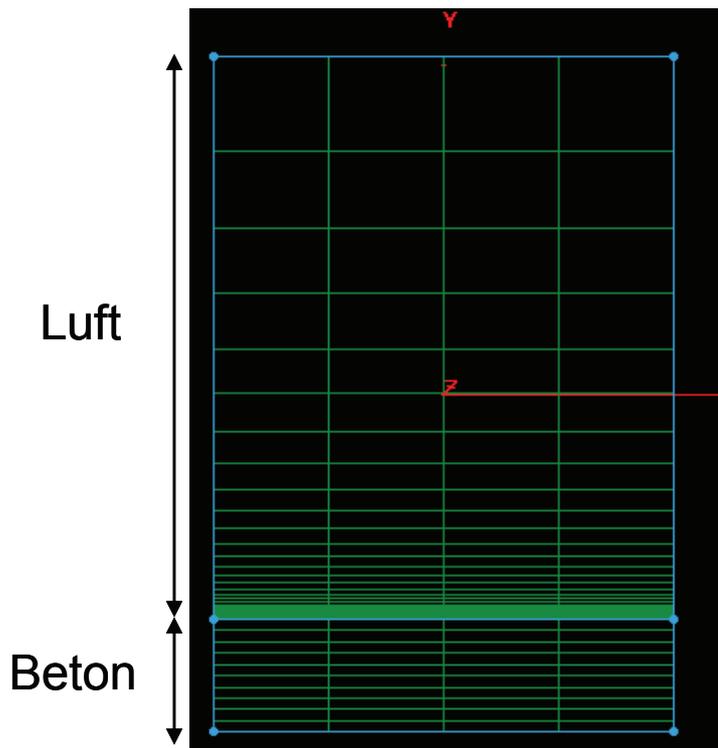


Abb. 4.1-2 Verfeinerung des Gitters in der Nähe der Trennebene

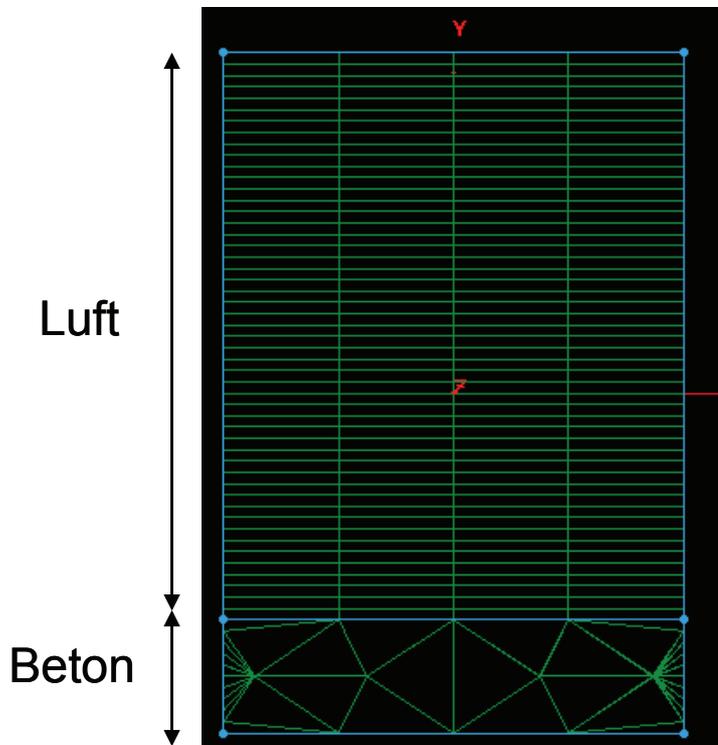


Abb. 4.1-3 Unstrukturiertes Gitter in der Wand

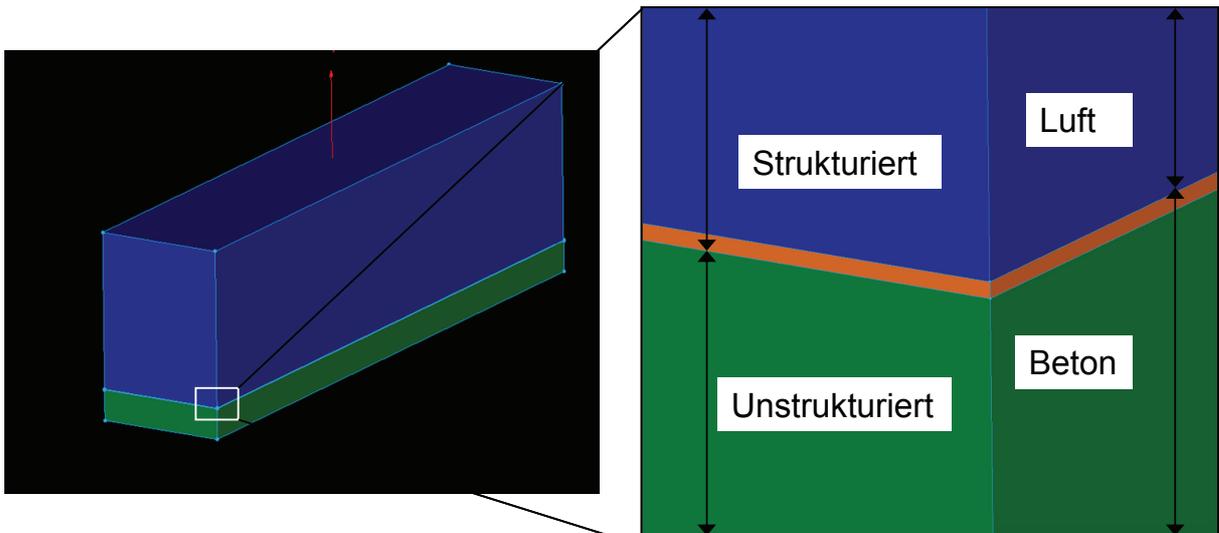


Abb. 4.1-4 Hybrides Gitter in der Wand

#### 4.1.3 Simulationen

Die zu untersuchenden Zielgrößen sind der integrale Wärmestrom in die Betonwand sowie die Temperaturerhöhung der Betonwand und der Temperaturabfall in der Luft. Die Temperaturen werden an den folgenden zwei Monitorpunkten überwacht:

- Monitorpunkt 1 liegt in der Mitte der Geometrie, 1 cm von der Luft/Beton-Grenzfläche entfernt (in der Betonwand).
- Monitorpunkt 2 liegt am Ende der Geometrie, 10 cm von der Luft/Beton-Grenzfläche entfernt (in der Luft).

Der Wärmestrom wurde als Integral über die gesamte Trennfläche zwischen Luft und Beton berechnet. Es werden die folgenden Einflussgrößen untersucht:

- Knotenabstand in der Luft normal zur Trennebene
- Knotenabstand im Beton normal zur Trennebene
- Knotenabstand in der Trennebene
- Gittertyp (strukturiert, unstrukturiert oder hybrid)

Der Netzparameter „Knotenabstand in der Trennebene“ wurde in der vorliegenden Untersuchung konstant bei 2 m gehalten. Dieser Einflussfaktor wurde in einer vorherigen

Untersuchung variiert und es konnte dabei kein Einfluss dieses Faktors auf die Zielgrößen festgestellt werden. Aus diesem Grund wurde auf eine erneute Untersuchung in dem vorliegenden Testbeispiel verzichtet.

In Tab. 4.1-1 sind die durchgeführten Simulationen dargestellt.

Tab. 4.1-1 Versuchsplan für die CFX-Simulationen

<b>Simulationsnummer</b>	<b>Knotenabstand in der Luft normal zur Trennebene [cm]</b>	<b>Knotenabstand im Beton normal zur Trennebene [cm]</b>	<b>Gittertyp</b>
S1	10	10	Strukturiert
S2	5	10	Strukturiert
S3	2,5	10	Strukturiert
S4	1,25	10	Strukturiert
S5	0,625	10	Strukturiert
S6	0,3125	10	Strukturiert
S7	0,15625	10	Strukturiert
S8	0,078125	10	Strukturiert
S9	0,0390625	10	Strukturiert
S10	0,01953125	10	Strukturiert
S11	0,009765625	10	Strukturiert
S12	0,004882813	10	Strukturiert
S13	0,01953125	10	Strukturiert
S14	0,01953125	5	Strukturiert
S15	0,01953125	2,5	Strukturiert
S16	0,01953125	1,25	Strukturiert
S17	0,01953125	0,625	Strukturiert
S18	0,01953125	0,3125	Strukturiert
S19	0,01953125	0,15625	Strukturiert
S20	0,01953125	0,078125	Strukturiert
S21	0,01953125	0,01953125	Strukturiert
S22	10	0,01953125	Strukturiert
S23	0,3125	0,3125	Strukturiert
S24	10	10	Unstrukturiert
S25	10	0,01953125	Unstrukturiert
S26	0,01953125	10	Unstrukturiert
S27	0,01953125	0,01953125	Unstrukturiert
S28	0,01953125	0,078125	Hybrid (1 cm strukturiert)
S29	0,01953125	0,078125	Hybrid (2 cm strukturiert)

#### 4.1.4 Diskussion der Ergebnisse

In Abb. 4.1-5 ist der Einfluss des Knotenabstandes in der Luft auf den Wärmestrom dargestellt (mit logarithmischer Skalierung der Abszisse). Es zeigt sich, dass der Wärmestrom mit kleiner werdenden Knotenabständen zunächst steigt. Unterhalb eines Knotenabstandes von 0,1 cm finden sich noch geringe Schwankungen der Wärmestromwerte. In diesem Bereich scheint also die Berechnung des Wärmestroms weitgehend unabhängig vom Knotenabstand zu sein.

In Abb. 4.1-6 ist der Einfluss des Knotenabstandes im Beton auf den integralen Wärmestrom dargestellt. Der berechnete Wärmestrom steigt mit kleiner werdenden Knotenabständen. Hier beginnt bereits unterhalb eines Knotenabstands von 1,0 cm eine Konvergenz der Simulationswerte. Der Unterschied zwischen dem in Abb. 4.1-5 und dem in Abb. 4.1-6 dargestellten Verlauf erklärt sich auch daraus, dass bei der Untersuchung des Einflusses durch den Knotenabstand in der Luft ein grobes Beton-Gitter verwendet wurde, bei der Untersuchung des Einflusses durch den Knotenabstand im Beton aber ein feines Luft-Gitter verwendet wurde.

In Abb. 4.1-7 ist die Abhängigkeit des berechneten Temperaturanstiegs im Beton vom Knotenabstand in der Luft dargestellt. Hier ist ein ähnlicher Verlauf wie beim Wärmestrom zu beobachten. Es findet sich auch hier ein annähernd gitterunabhängiger Bereich unterhalb eines Knotenabstandes von 0,1 cm in der Luft.

In Abb. 4.1-8 ist der Einfluss des Knotenabstandes im Beton auf den berechneten Temperaturanstieg im Beton dargestellt. Der Temperaturanstieg sinkt mit kleiner werdenden Knotenabständen. Hier beginnt unterhalb eines Knotenabstands von 1,0 cm eine Konvergenz der Simulationswerte. Zusätzlich wurde in dieser Untersuchung auch der Abstand des Monitorpunktes von der Luft/Beton-Grenzfläche variiert. In der Abbildung ist zu erkennen, dass auch für einen Abstand von 0,5 cm und 2 cm der Konvergenzbereich der Zielgröße unterhalb eines Knotenabstandes von 1,0 cm liegt. Auch hier erklärt sich der Unterschied zwischen dem in Abb. 4.1-7 und dem in Abb. 4.1-8 dargestellten Verlauf daraus, dass bei der Untersuchung des Einflusses durch den Knotenabstand in der Luft ein grobes Beton-Gitter verwendet wurde, bei der Untersuchung des Einflusses durch den Knotenabstand im Beton aber ein feines Luft-Gitter verwendet wurde.

Der Verlauf des berechneten Temperaturabfalls in der Luft in Abhängigkeit vom Knotenabstand in der Luft (siehe Abb. 4.1-9) ist wieder vergleichbar mit dem Verlauf des Wärmestroms und des Temperaturanstiegs im Beton (vergleiche mit Abb. 4.1-5 und Abb. 4.1-7).

In Abb. 4.1-10 ist der Einfluss des Knotenabstandes im Beton auf den berechneten Temperaturabfall in der Luft dargestellt. Der Temperaturabfall steigt mit kleiner werdenden Knotenabständen. Hier beginnt unterhalb eines Knotenabstands von 1,0 cm eine Konvergenz der Simulationswerte.

In Abb. 4.1-11 werden die prozentualen Abweichungen der Zielgrößen vom gitterunabhängigen Bereich dargestellt (wenn ein gröberes Gitter verwendet wurde). Diese Abweichung kann als Fehler der berechneten Zielgrößen durch die Verwendung eines zu groben Gitters interpretiert werden. Der Wert der Zielgrößen im gitterunabhängigen Bereich wurde als Mittelwert dieser Größe bei den drei feinsten Gittern (bzgl. des Knotenabstandes in der Luft) berechnet. Es zeigt sich, dass die Fehler bei einem Knotenabstand  $< 0,1$  cm unter 5 % liegen, bei einem Knotenabstand  $< 1$  cm unter 10 % liegen und bei einem Knotenabstand von 10 cm auf etwa 20 % bis 35 % ansteigen.

In Abb. 4.1-12 werden die prozentualen Abweichungen der Zielgrößen vom gitterunabhängigen Bereich dargestellt. Der Wert der Zielgrößen im gitterunabhängigen Bereich wurde als Mittelwert dieser Größe bei den drei feinsten Gittern (bzgl. des Knotenabstandes im Beton) berechnet. Es zeigt sich, dass die Fehler bei einem Knotenabstand  $< 0,1$  cm unter 5 % liegen und bei einem Knotenabstand  $< 1$  cm unter 10 % liegen. Bei einem Knotenabstand von 10 cm steigen die Fehler der berechneten Temperaturen auf etwa 11 % an, die Fehler des berechneten Wärmestroms steigen aber steil auf etwa 300 % an.

In Abb. 4.1-13 ist der Einfluss des verwendeten Gittertyps auf die Berechnungsergebnisse dargestellt. Hierbei wurde der Gittertyp der Betonwand variiert, für den Luftraum wurde immer ein strukturiertes Gitter verwendet. Für das Gitter der Betonwand werden sowohl ein strukturiertes, ein unstrukturiertes und ein hybrides Gitter verwendet. Das hybride Gitter besteht aus einer dünnen Schicht (2 cm) strukturierten Gitters an der Luft/Beton-Grenzfläche und einer dicken Schicht (98 cm) unstrukturierten Gitters (siehe Abb. 4.1-4). Aus der Abbildung ist eine sehr gute Übereinstimmung zwischen dem strukturierten Gitter und dem hybriden Gitter zu sehen. Dieses gilt für die in diesem

Beispiel verwendete Schichtdicke von 2 cm, für kleinere Schichtdicken (1 cm) ergeben sich deutliche Unterschiede. Auch das unstrukturierte Gitter zeigt einen deutlichen Unterschied zu den Ergebnissen der berechneten Zielgrößen, die mit dem strukturierten und hybriden Gitter berechnet werden.

Da bei allen Rechnungen mit konstanter Strömungsgeschwindigkeit von 0,1 m/s eingespeist wurde, liegen bei maximalem Knotenabstand (10 cm)  $Y^+$ -Werte von bis zu 4,9 vor. Mit zunehmender Gitterfeinheit nehmen die  $Y^+$ -Werte ab.

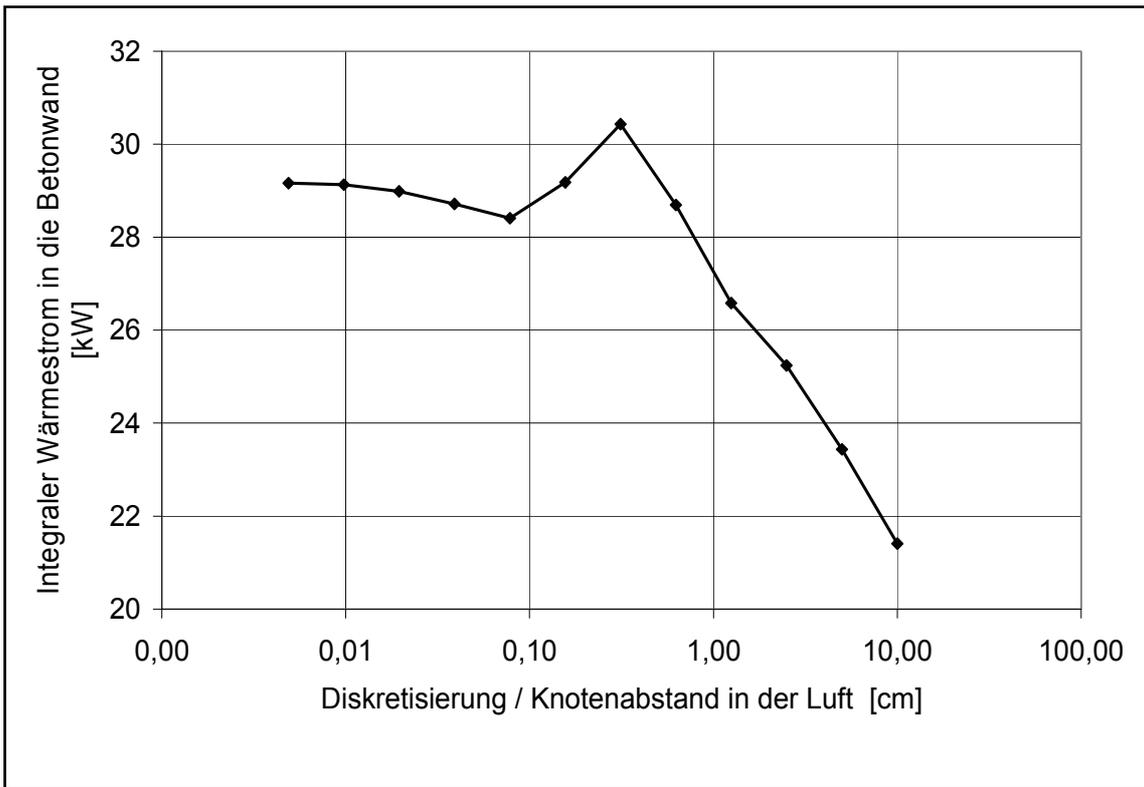


Abb. 4.1-5 Abhängigkeit des berechneten integralen Wärmestroms in die Betonwand vom Knotenabstand in der Luft

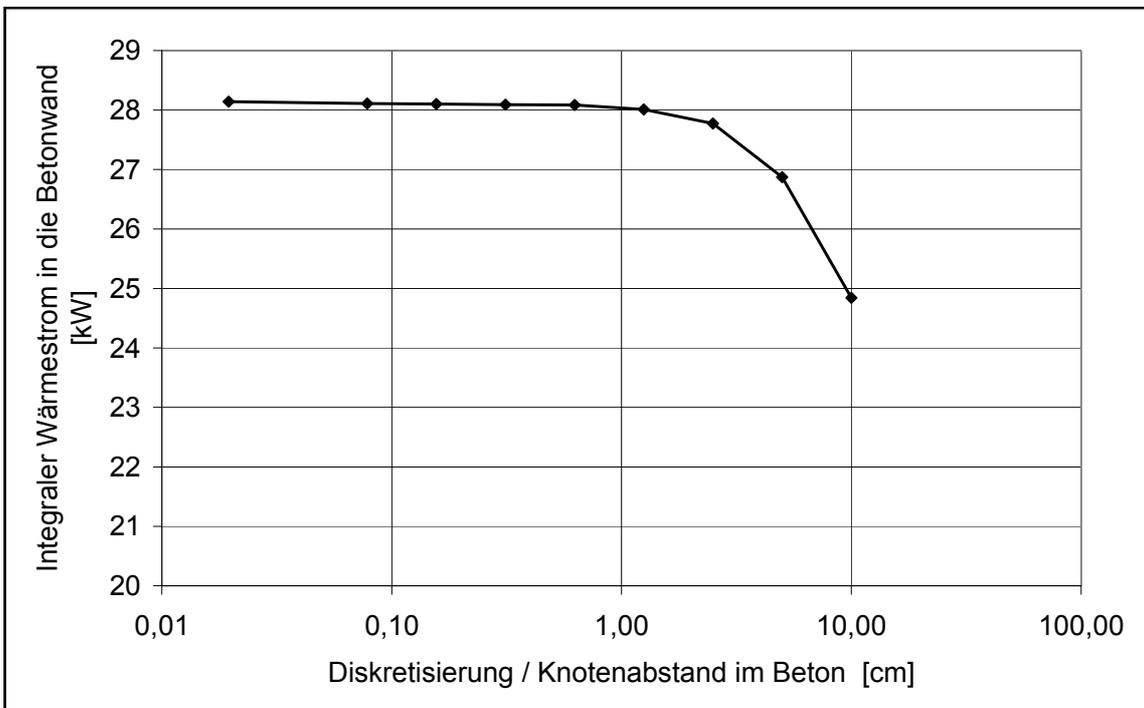


Abb. 4.1-6 Abhängigkeit des berechneten integralen Wärmestroms in die Betonwand vom Knotenabstand im Beton

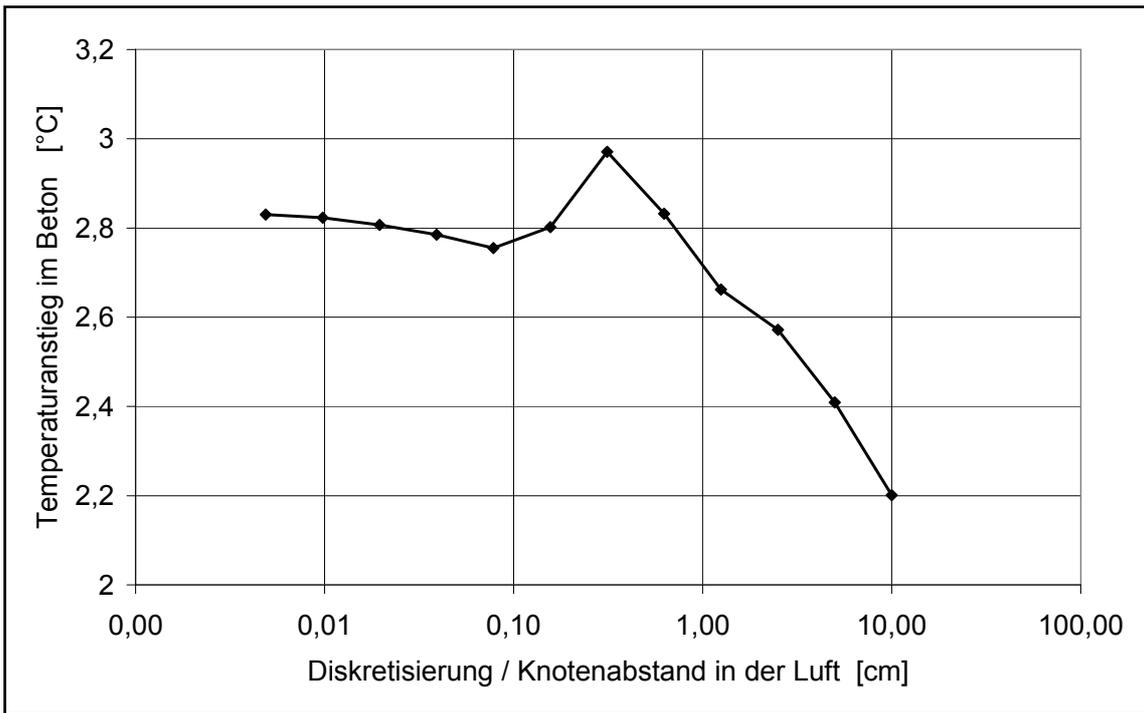


Abb. 4.1-7 Abhängigkeit des berechneten Temperaturanstiegs in der Betonwand vom Knotenabstand in der Luft

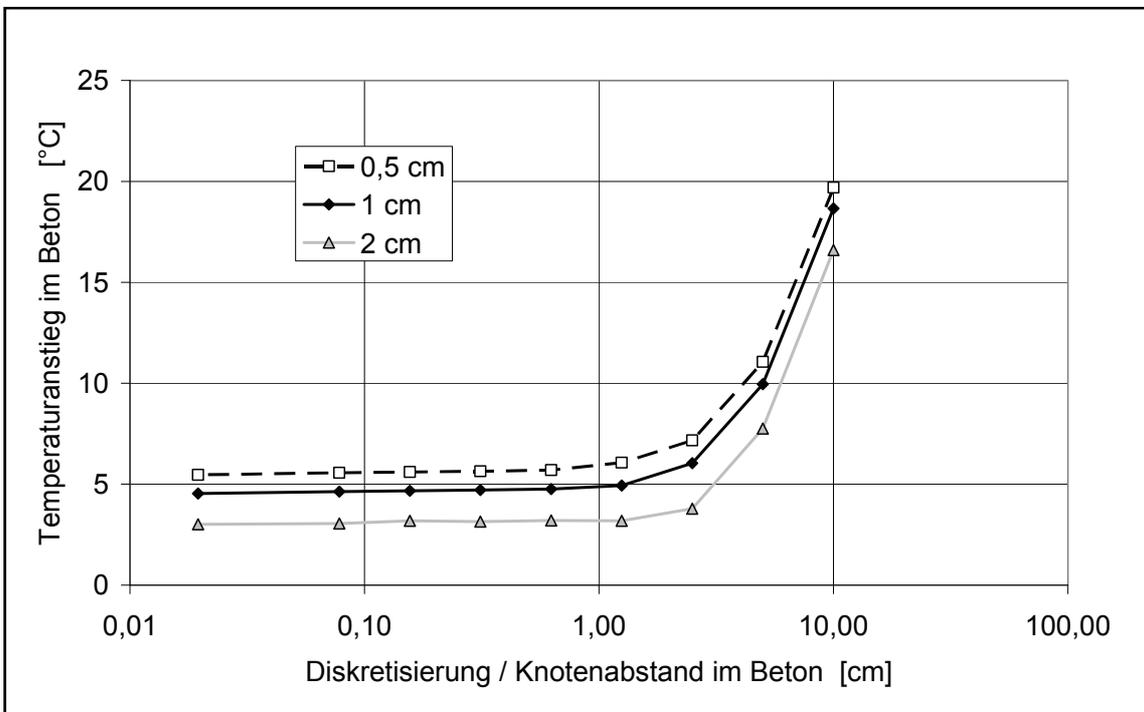


Abb. 4.1-8 Abhängigkeit des Temperaturanstiegs im Beton vom Knotenabstand im Beton

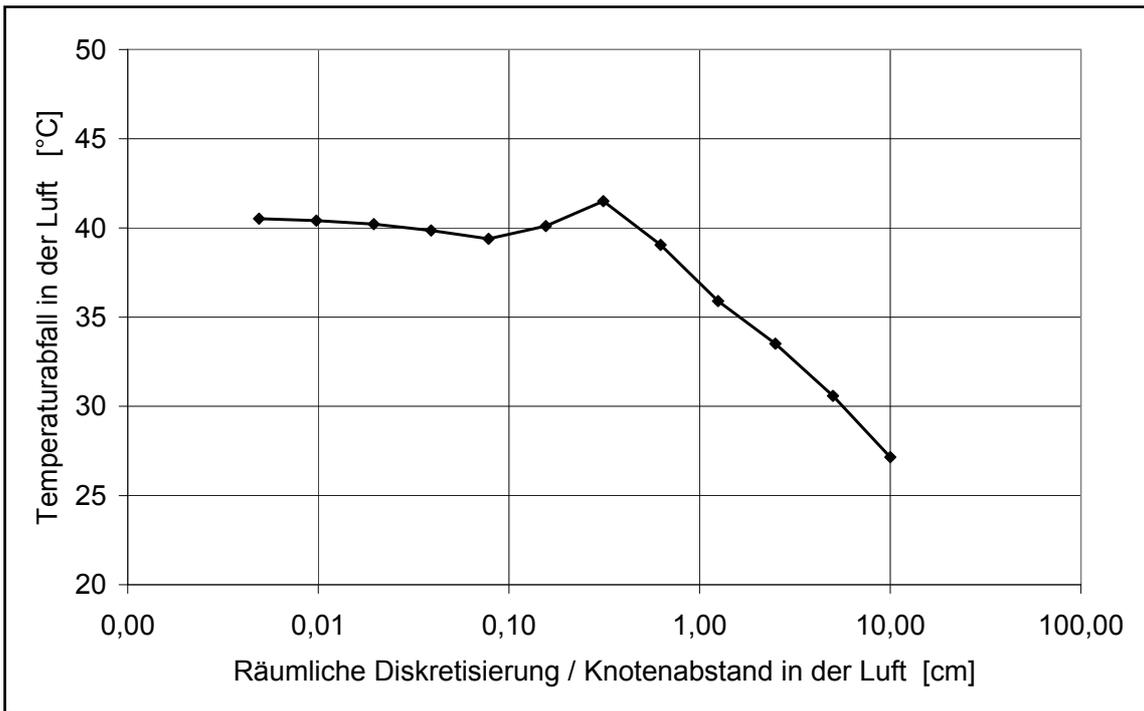


Abb. 4.1-9 Abhängigkeit des berechneten Temperaturabfalls in der Luft vom Knotenabstand in der Luft

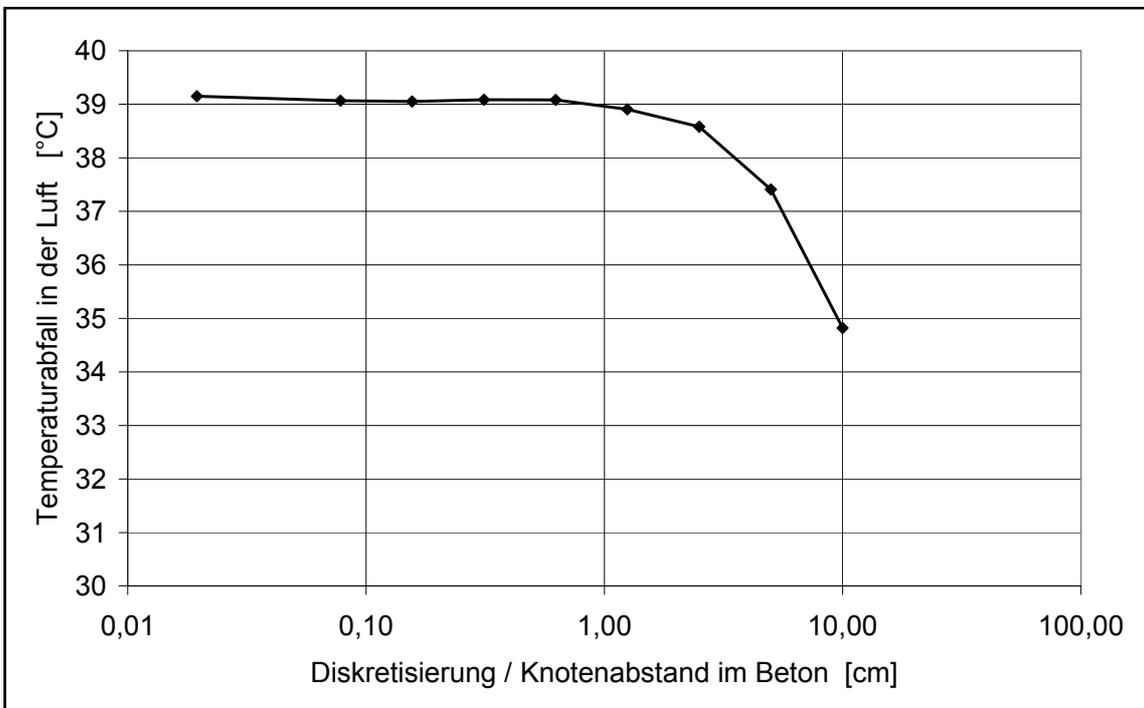


Abb. 4.1-10 Abhängigkeit des berechneten Temperaturabfalls in der Luft vom Knotenabstand im Beton

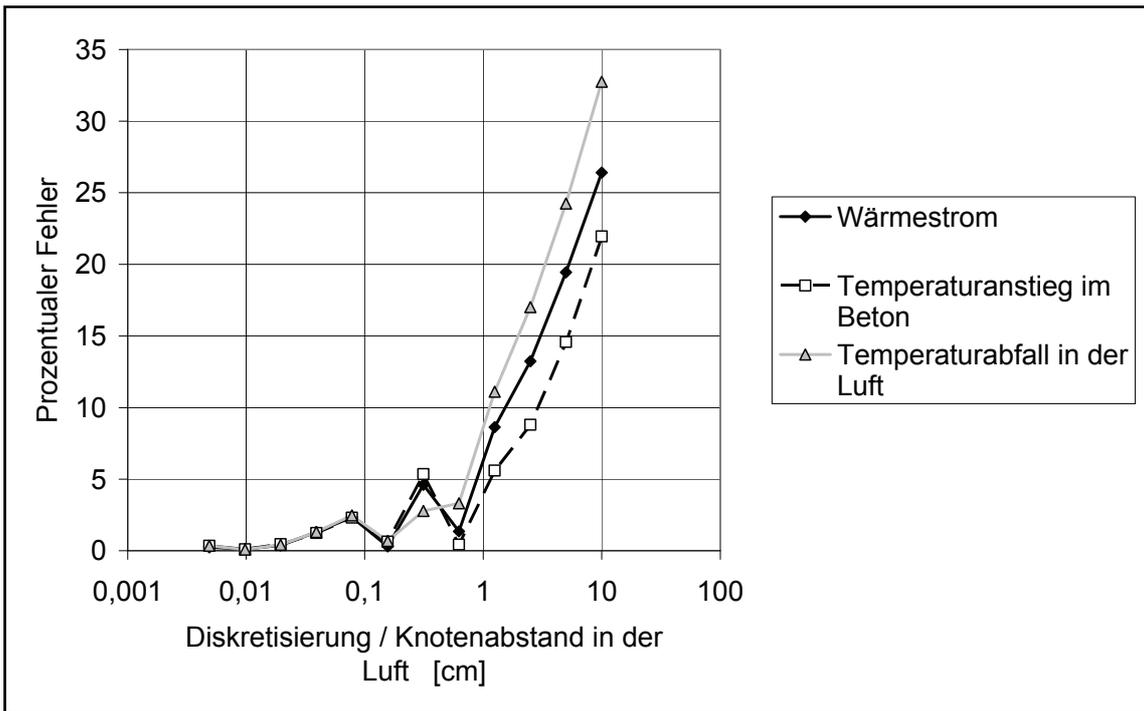


Abb. 4.1-11 Fehler durch unzureichende Diskretisierung des Luftraums: Prozentuale Abweichung vom Mittelwert der feinsten drei Gitter

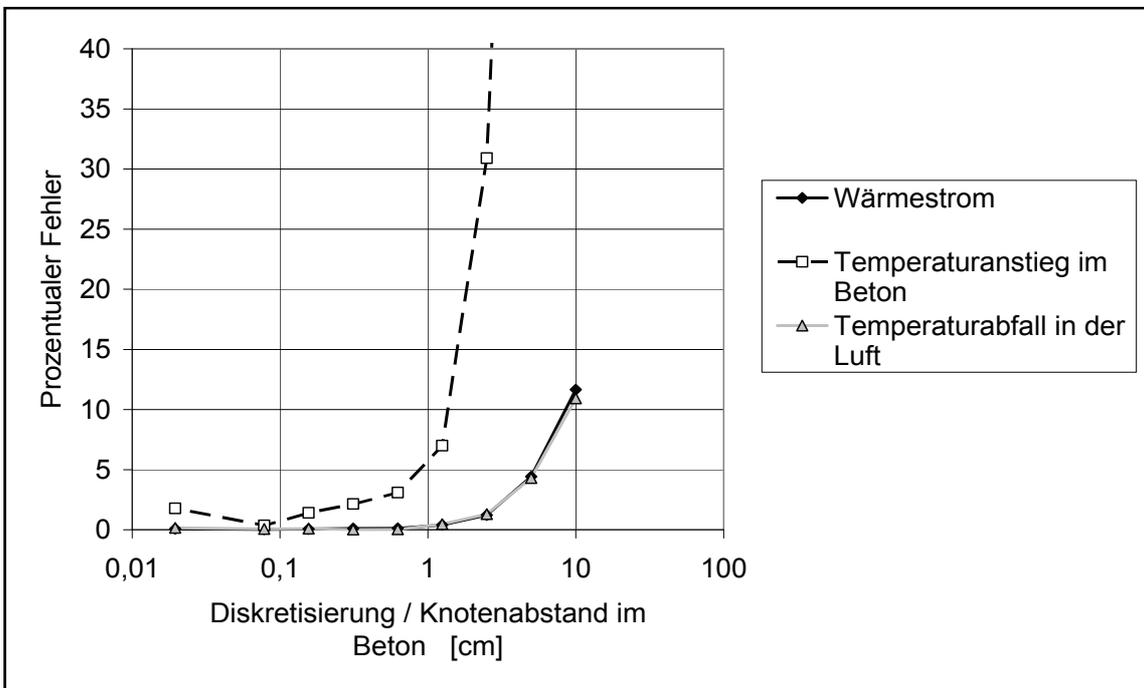


Abb. 4.1-12 Fehler durch unzureichende Diskretisierung des Betons: Prozentuale Abweichung vom Mittelwert der feinsten drei Gitter

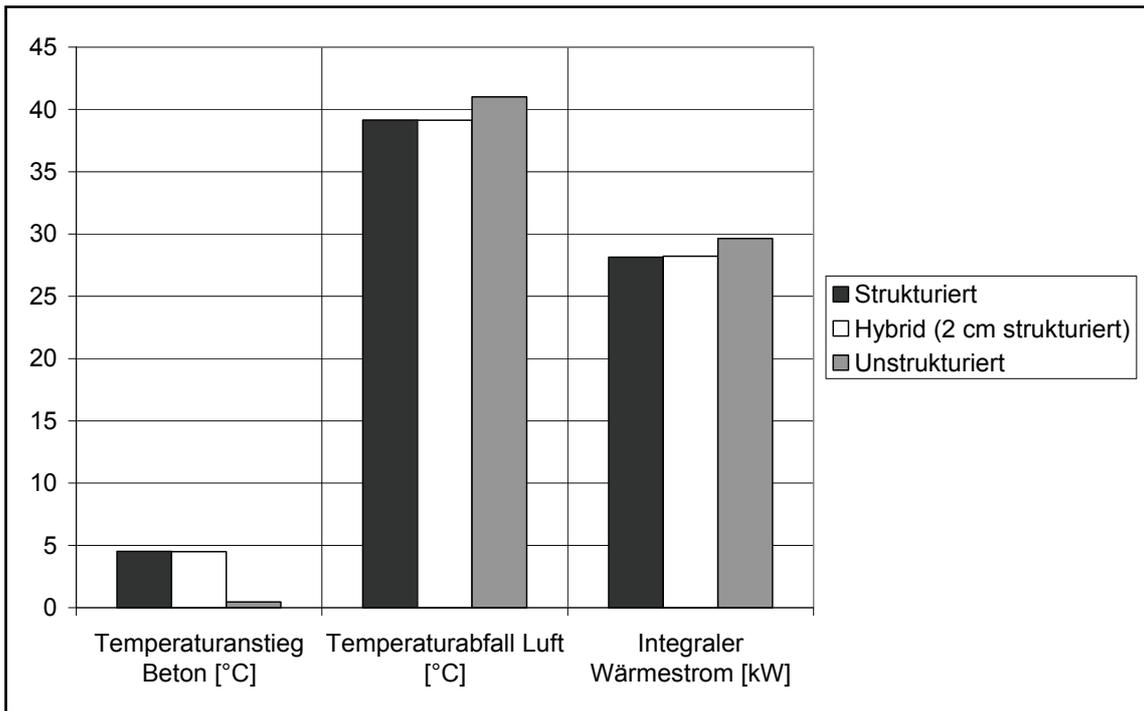


Abb. 4.1-13 Einfluss des Gittertyps auf die Berechnungsergebnisse

#### 4.1.5 Fazit

Insgesamt zeigt sich, dass die Netzparameter „Knotenabstand in der Luft normal zur Trennebene“, „Knotenabstand im Beton normal zur Trennebene“ und der Gittertyp (strukturiert, unstrukturiert oder hybrid) einen deutlichen Einfluss auf den berechneten Wärmestrom und die berechneten Temperaturen haben. Die Knotenabstände in der Luft und im Beton sollten  $< 0,1$  cm gewählt werden, um einen kleinen Diskretisierungsfehler (unter 5 %) zu erzielen. Beim Gittertyp kann sowohl ein strukturiertes als auch ein hybrides Gitter gewählt werden, ohne dass dieses einen Einfluss auf die Berechnungsergebnisse hat. Ein hybrides Gitter hat den Vorteil, dass sich damit insbesondere komplexe Geometrien besser vernetzen lassen als mit einem rein strukturierten Gitter. Der Parameter „Knotenabstand in der Trennebene“ zeigt keinen Einfluss auf die Zielgrößen.

Die vorliegenden Ergebnisse sind zunächst für die oben aufgeführten Randbedingungen (Geometrie, Strömungsgeschwindigkeit, Temperaturen) gültig. Diese Randbedingungen entsprechen aber typischen Bedingungen bei Gasströmungen in einem Containment. Die angegebenen Empfehlungen können deshalb als Richtlinie bei der Mo-

dellierung von Wärmeübertragungsprozessen in die Betonwand eines Containments verwendet werden. Bei Wasserstoffverbrennungen können aber auch deutlich höhere Strömungsgeschwindigkeiten erreicht werden (ca.  $100 \text{ ms}^{-1}$ ). In diesem Fall kann nicht unbedingt von einer Übertragbarkeit der Empfehlungen ausgegangen werden. Hier sollten noch gesonderte Untersuchungen durchgeführt werden.

## **4.2 Simulation von TH-21**

### **4.2.1 Zielsetzung**

Ziel der Arbeiten in diesem Arbeitspunkt ist die Validierung von CFD-Modellen zur Wärmeleitung. Hierzu wird ein durch thermische Auftriebskräfte und Naturkonvektion bestimmter Strömungszustand untersucht. In der Versuchsreihe TH-21 werden dazu der untere und der mittlere Behältermantel der THAI-Anlage geheizt, gleichzeitig wird der obere Behältermantel gekühlt (siehe Abb. 4.2-1). Genaue Details über die Versuchsreihe TH-21 (Versuchsaufbau, -durchführung und Instrumentierung) finden sich in /FIG 09/.

### **4.2.2 Geometrie und Randbedingungen**

Die in der Simulation verwendete Geometrie ist ein (Viertel-)Ausschnitt aus dem THAI-Behälter (siehe Abb. 4.2-1). Diese Vereinfachung kann aufgrund des symmetrischen Versuchsaufbaus getroffen werden. Im THAI-Behälter sind der Innenzylinder und eine schmale Kondensatrinne eingebaut. Die Geometrie wird mit einem strukturierten Gitter mit Elementzahlen von 24.192 bis 74.173 Elementen modelliert (siehe Tab. 4.2-1). Hierbei ist das Gitter zum Rand hin verfeinert. Wie im Experiment wird der THAI-Behälter im unteren und mittleren Bereich durch einen Heizmantel erwärmt und im oberen Bereich gekühlt. Nach einer Zeit von 7,5 h wird an den mittleren und unteren Heizmänteln die gewünschte Temperatur von  $120 \text{ °C}$  erreicht und ab dann konstant gehalten. Die Kühlung im oberen Bereich war nicht so stark, dass sie die Temperaturen im THAI-Behälter konstant bei diesen Bedingungen halten konnte. Vielmehr zeigt sich auch im späteren Zeitverlauf noch ein langsamer Temperaturanstieg. Der Zeitraum von 0 – 7,5 h wird im Experiment als Phase 1, der Zeitraum von 7,5 – 11,3 h wird als Phase 2 bezeichnet. Zur Modellierung der Turbulenz wird das k- $\epsilon$  Turbulenzmodell

verwendet. Weitere Details zu den in der Simulation verwendeten Startbedingungen finden sich in Tab. 4.2-1, zu den zeitabhängigen Randbedingungen in Tab. 4.2-2.

Tab. 4.2-1 Geometrie und Startbedingungen für die CFX-Simulation

Gitter ohne Wand	24.192 Elemente	74.173 Elemente
Gitter mit Wand	43.860 Elemente	
Turbulenzmodell	k-ε	
Symmetrierandbedingungen	An den zwei Schnittflächen	
Konvergenzkriterium	RMS < 1,0 e-4	
Simulationszeit	40600 s = 11,3 h	

Tab. 4.2-2 Zeitabhängige Randbedingungen

Wandtemperatur am oberen Kühlmantel		Wandtemperatur am unteren und mittleren Heizmantel	
Zeit [s]	Temperatur [°C]	Zeit [s]	Temperatur [°C]
0	12,97	0	13,00
3380	14,06	5500	53,06
5500	16,02	9600	77,02
9600	21,02	16200	102,25
21380	36,02	21380	113,96
28800	42,41	27600	121,61
40600	46,22	30500	120,22
		40600	120,82

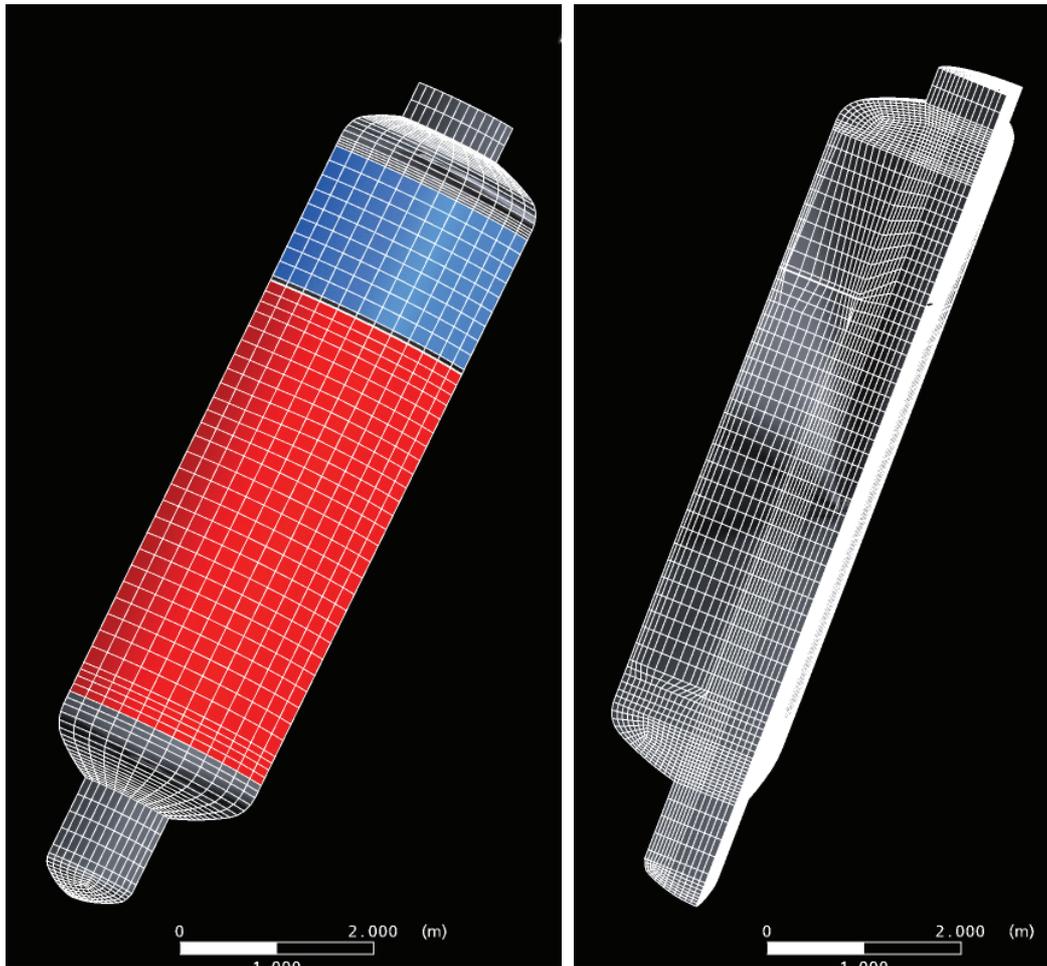


Abb. 4.2-1 Darstellung des offenen THAI-Versuchsbehälters mit Heizmantel (rot) und Kühlmantel (blau)

### 4.2.3 Auswertung der Simulationsergebnisse

In Abb. 4.2-2 ist die Temperatur- und Geschwindigkeitsverteilung im THAI-Behälter zum Zeitpunkt  $t = 11,3$  h dargestellt. Es zeigt sich in der Simulation, dass sich in Experimentierphase 2 ( $t > 7,5$  h) eine räumlich stabile Temperaturverteilung mit kleinen zeitlichen Oszillationen einstellt. Die Geschwindigkeitsverteilung weist in beiden Phasen starke zeitliche Oszillationen auf. Um die Temperaturen, die Geschwindigkeiten und auch den Druck auszuwerten, wird der zeitliche Verlauf dieser Größen an unterschiedlichen Messstellen untersucht. Diese Messstellen entsprechen den experimentellen Messstellen. Die Auswertung der Simulationsdaten wird in den folgenden Abschnitten besprochen.

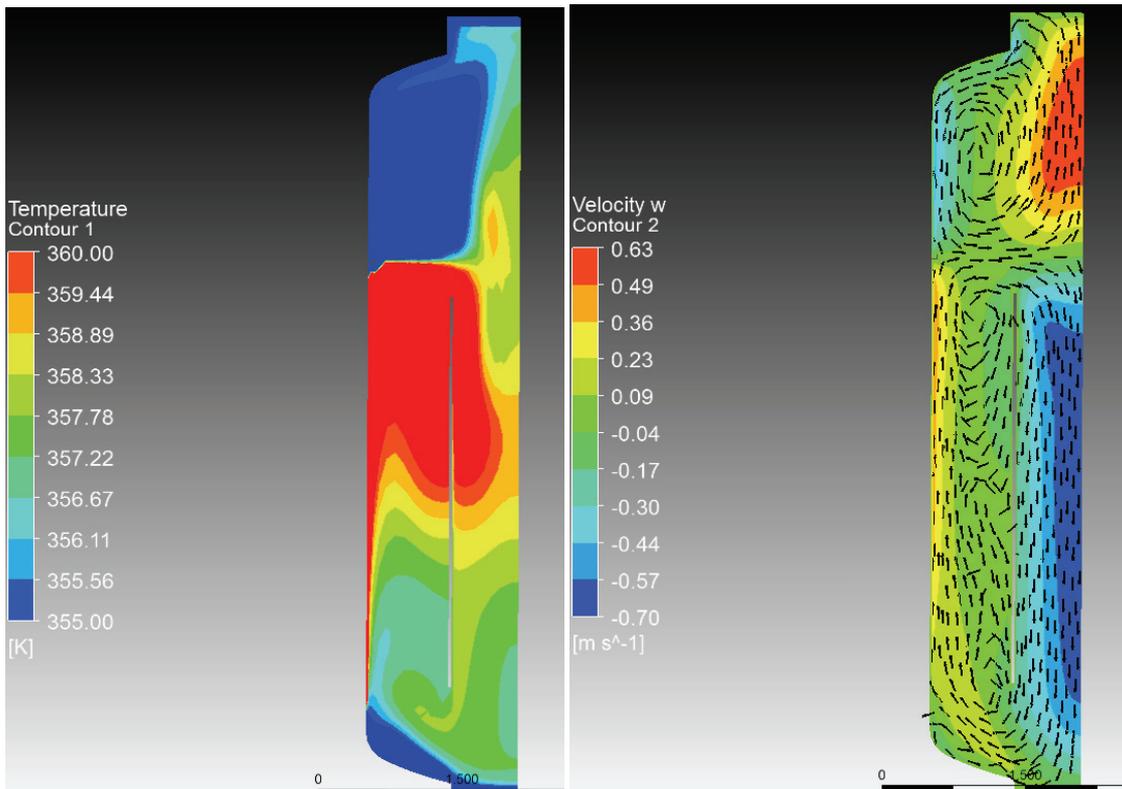


Abb. 4.2-2 Temperaturverteilung (links) und Geschwindigkeitsverteilung (rechts) zum Zeitpunkt  $t = 11,3$  h

#### 4.2.4 Einfluss der Gitterfeinheit auf die Berechnungsgrößen

Um den Einfluss der Gitterfeinheit zu untersuchen, werden eine Berechnung mit einem Gitter mit 24.192 Elementen und eine Berechnung mit 74.173 Elementen durchgeführt (adiabate Randbedingungen). Zunächst einmal zeigt sich, dass die Rechendauer mit zunehmender Elementzahl linear ansteigt (siehe Tab. 4.2-3).

Tab. 4.2-3 Einfluss der Gitterfeinheit auf die Rechendauer

Gitter	24.192 Elemente	74.173 Elemente
Rechendauer	23,2 CPU-Tage	75,3 CPU-Tage

In den Abb. 4.2-3 bis Abb. 4.2-5 ist der Einfluss der Gitterfeinheit auf die berechneten Verläufe von Druck, Temperatur und Geschwindigkeit dargestellt. Es werden jeweils die Werte für eine Messstelle exemplarisch ausgewertet. Wie in Abb. 4.2-3 und Abb. 4.2-4 zu sehen ist, ist der berechnete Druck und die berechnete Temperatur nahezu gitterunabhängig. Es ergibt sich für den mittleren Druck in Phase 2 ( $t > 7,5$  h) ein Unterschied von 0,004 bar und für die mittlere Temperatur ein Unterschied von 0,3 °C.

In Abb. 4.2-5 findet sich ein Vergleich der berechneten Vertikalgeschwindigkeiten an einer Messstelle. Hier ist der Vergleich etwas schwieriger, da für  $t > 7$  h bei der Berechnung mit feinem Netz aufgrund eines Programmfehlers an einigen wenigen Stützstellen Werte ausgegeben wurden. Berechnet man jedoch die mittlere Geschwindigkeit in Phase 2 für ein grobes und ein feines Netz aus den vorhandenen Werten, so haben diese Mittelwerte eine Abweichung von 0,01 m/s. Diese Abweichung ist auch als eher gering einzustufen. Damit kann gesagt werden, dass die Berechnungen mit den verwendeten Elementzahlen nahezu gitterunabhängig sind.

Tab. 4.2-4 Einfluss der Gitterfeinheit auf die Berechnungsgrößen Druck, Temperatur und Vertikalgeschwindigkeit

Berechnungsgröße	Absoluter Diskretisierungsfehler
Druck	0,004 bar
Temperatur	0,3 °C
Vertikalgeschwindigkeit	0,01 m/s

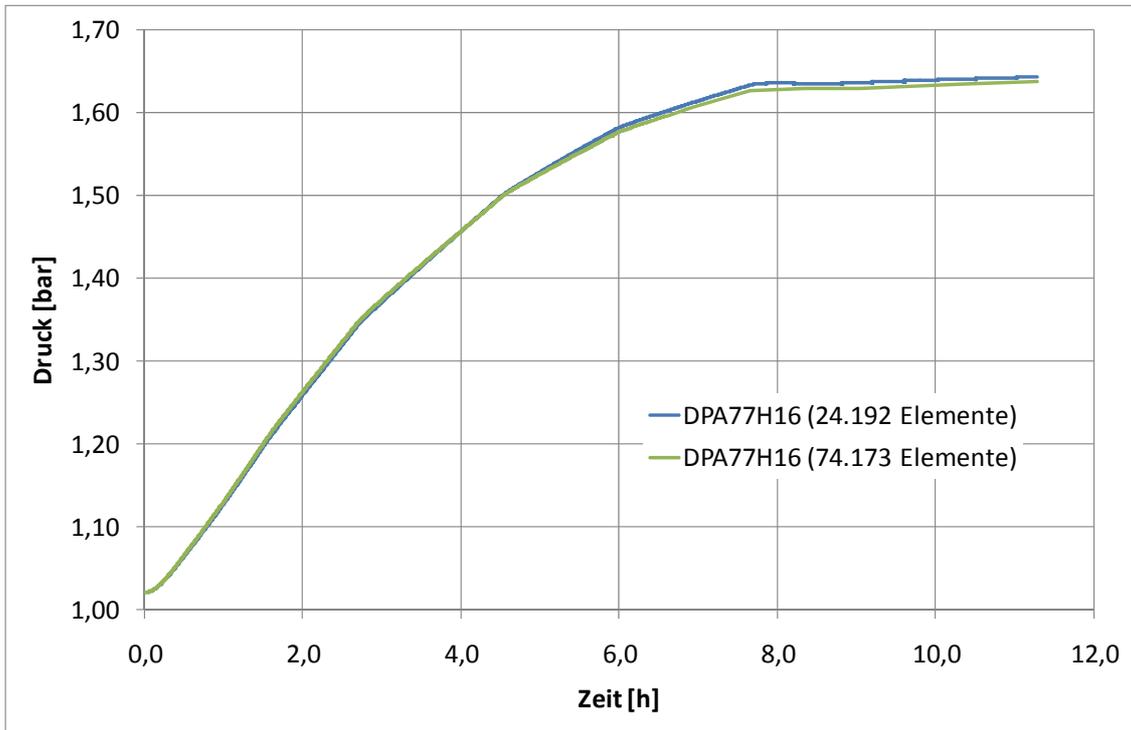


Abb. 4.2-3 Einfluss der Gitterfeinheit auf den berechneten Druck

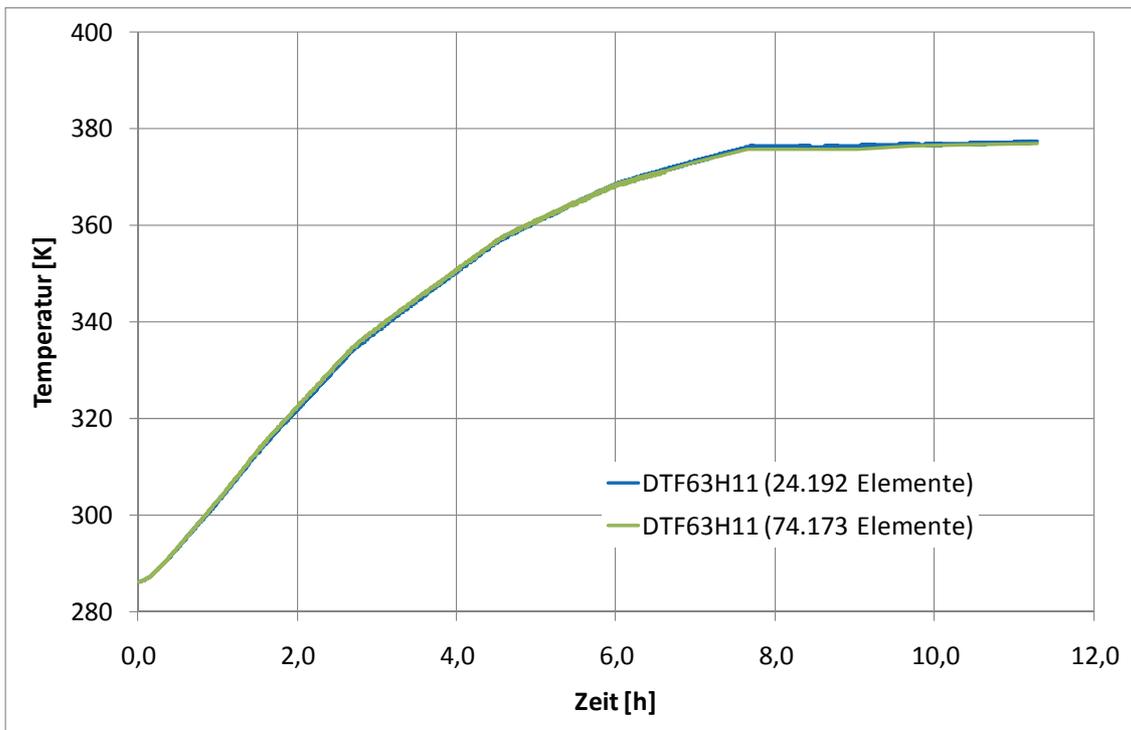


Abb. 4.2-4 Einfluss der Gitterfeinheit auf die berechnete Temperatur

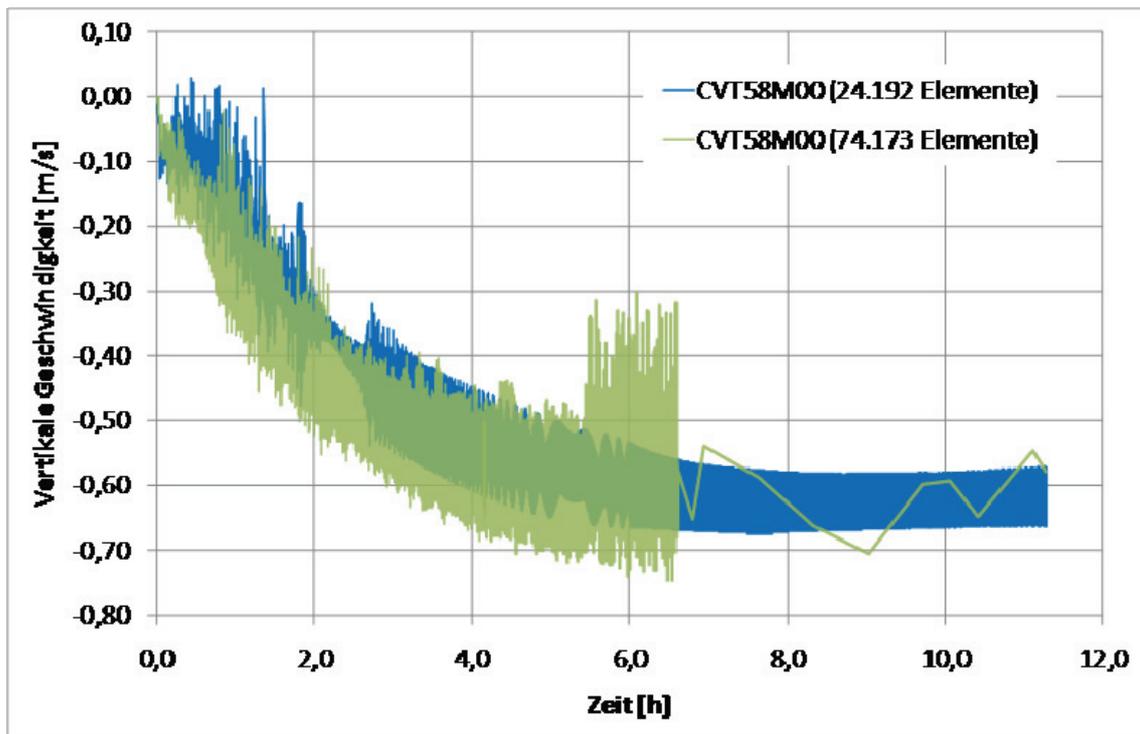


Abb. 4.2-5 Einfluss der Gitterfeinheit auf die berechnete Geschwindigkeit

#### 4.2.5 Einfluss der Randbedingungen auf die Ergebnisse

Es sind zwei unterschiedliche Randbedingungen für die Simulation des Experiments gewählt worden. Einmal ist das Experiment ohne die Stahlwände des THAI-Behälters, dafür aber mit adiabaten Randbedingungen simuliert worden. Dieses war die Annahme bei der blinden Vorausberechnung des Versuches TH-21. Nach Veröffentlichung der experimentellen Daten wurde noch eine weitere Simulation, dieses Mal mit einer Modellierung der Stahlwände durchgeführt. In Abb. 4.2-6 wird der Druckverlauf für die beiden Berechnungen verglichen. Es zeigt sich, dass der Druck mit adiabaten Randbedingungen erheblich größer ist als mit einer Modellierung der Wände. Die Ursache hierfür ist die Wirkung der Wände als Wärmespeicher. Dieser Effekt scheint so groß zu sein, dass er nicht vernachlässigt werden kann. Ein ähnliches Bild wie beim Druck ergibt sich beim Vergleich des Temperaturverlaufes, der in Abb. 4.2-7 dargestellt ist. Hier zeigen sich deutlich höhere Temperaturen bei Annahme von adiabaten Randbedingungen. Aus diesem Grund wird für den Vergleich mit den experimentellen Daten die Berechnung mit Wandmodellierung verwendet.

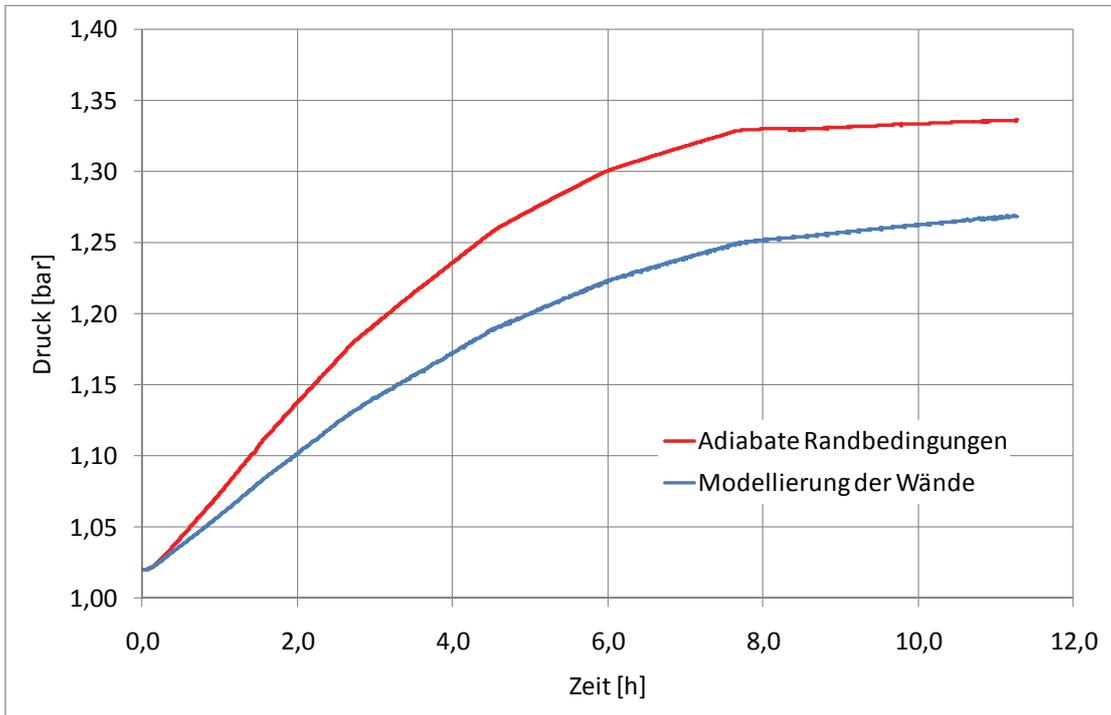


Abb. 4.2-6 Einfluss der Randbedingungen auf den berechneten Druckverlauf (an Messstelle DPA77H16)

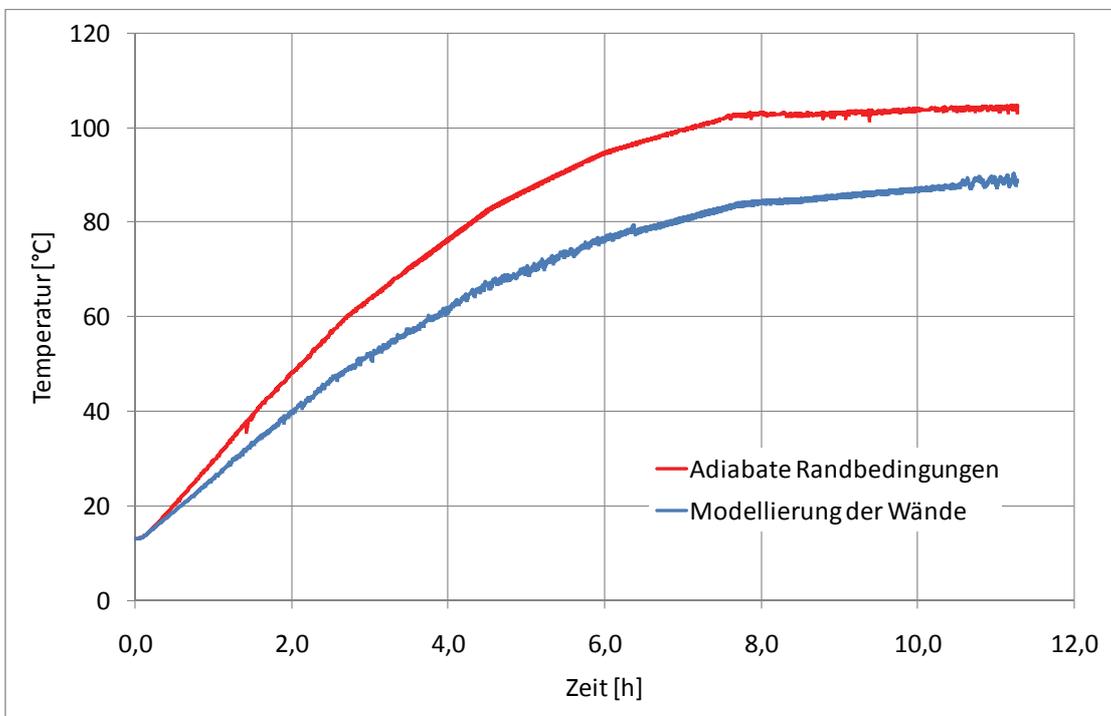


Abb. 4.2-7 Einfluss der Randbedingung auf den Temperaturverlauf (an Messstelle DTF63H11)

#### 4.2.6 Vergleich der Simulationsergebnisse mit den experimentellen Daten Druckverlauf

In Abb. 4.2-8 wird der berechnete Verlauf des Drucks mit den experimentellen Ergebnissen verglichen. In Experimentierphase 1 wächst er zunächst deutlich an, um dann in Phase 2 noch langsam zu steigen. Da der Druck in der zweiten Phase nicht als konstant angenommen werden kann, wird für den Vergleich von Simulation und Experiment ein anderer Mittelungszeitraum gewählt ( $10,2 \text{ h} < t < 11,2 \text{ h}$ ). Für diesen Zeitraum ergibt sich ein mittlerer berechneter Druck von  $1,266 \pm 0,001 \text{ bar}$ . Der genannte Fehler von  $\pm 0,001 \text{ bar}$  entspricht der Standardabweichung der Druckwerte im Mittelungsintervall. Experimentell ergibt sich hier ein mittlerer Druck von  $1,239 \pm 0,001 \text{ bar}$ . Damit liegt der absolute Fehler des Drucks für diesen Bereich bei  $0,027 \text{ bar}$ .

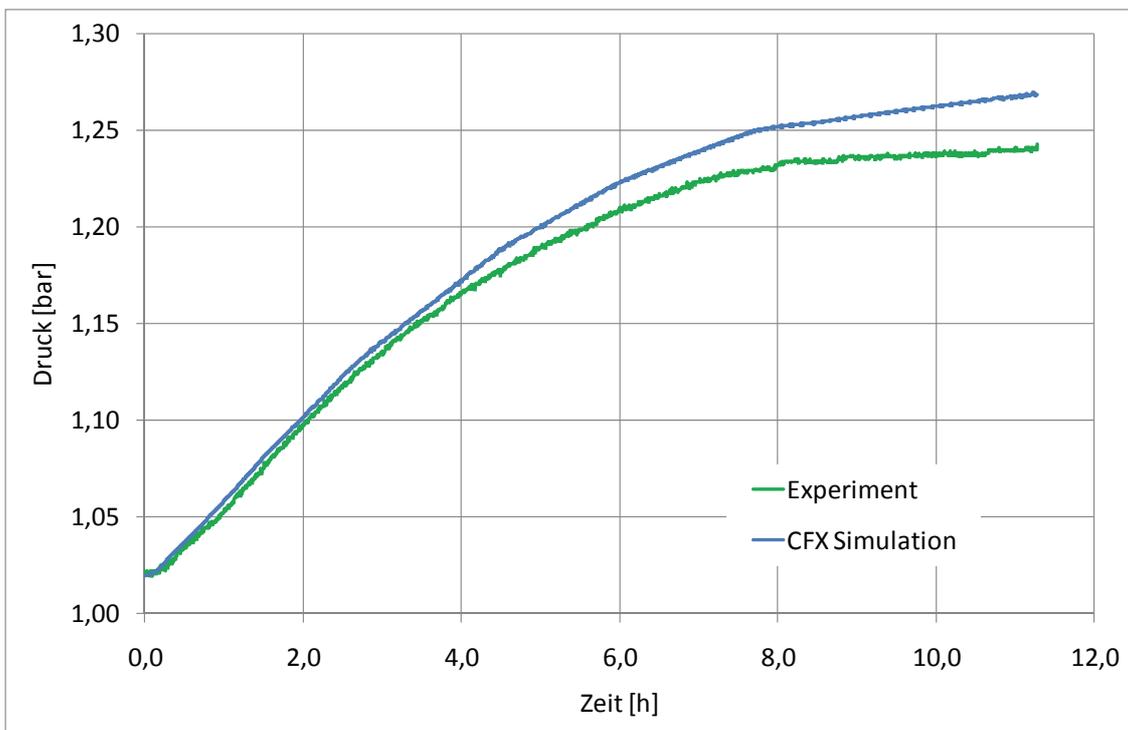


Abb. 4.2-8 Zeitlicher Verlauf des Drucks im THAI-Behälter (DPA77H16)

- **Temperaturverlauf**

In Abb. 4.2-9 ist der zeitliche Verlauf der Temperatur im THAI-Behälter exemplarisch für eine Messstelle dargestellt. Wie beim Druck ergeben sich zunächst ein steiler Anstieg der Werte in Phase 1 und ein langsamer Anstieg in Phase 2. Insgesamt wird der experimentelle Temperaturverlauf qualitativ gut wiedergegeben. Die Werte in der Simu-

lation liegen jedoch leicht unterhalb der experimentellen Werte. Ein ähnliches Bild ergibt sich auch bei der Betrachtung eines Temperaturprofils über der Behälterhöhe am Ende der Versuchszeit ( $t = 11,3$  h). Dieses Profil ist in Abb. 4.2-10 dargestellt. Das Temperaturprofil gibt den Temperatursprung bei 6,5 m Höhe qualitativ richtig wieder. Dieser Temperatursprung entsteht durch den Übergang von den beheizten zu den gekühlten Wänden. Quantitativ wird der Temperatursprung jedoch deutlich überschätzt.

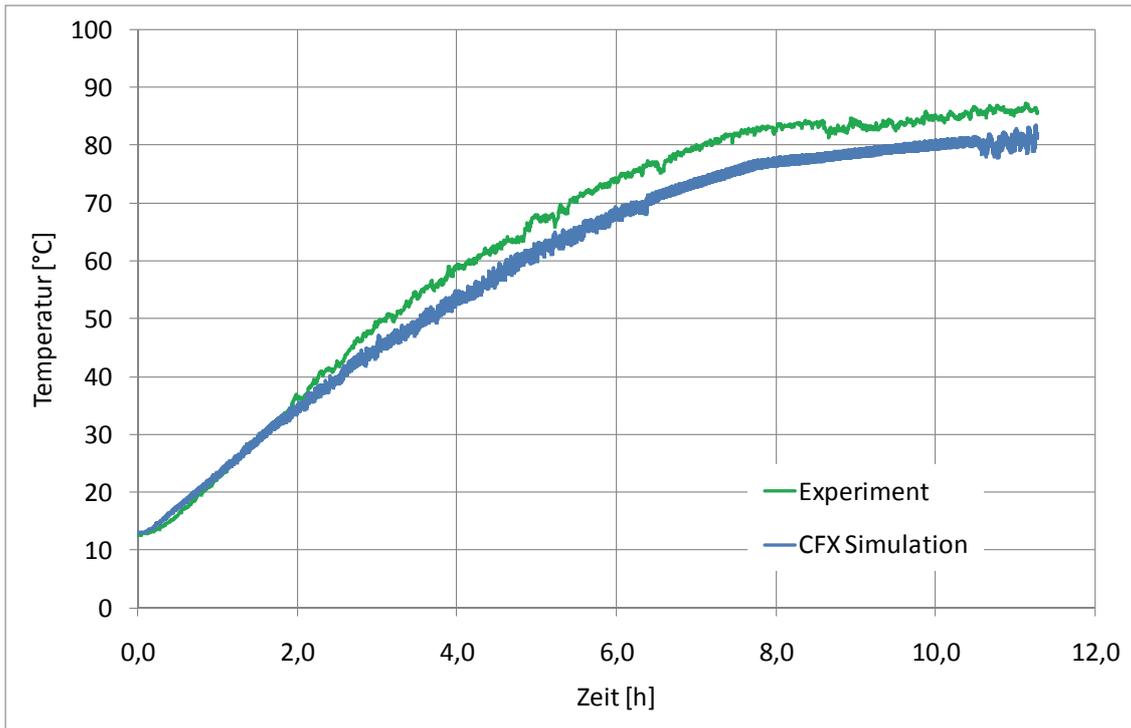


Abb. 4.2-9 Zeitlicher Verlauf der Temperatur im THAI-Behälter (an Messstelle DTF84H11)

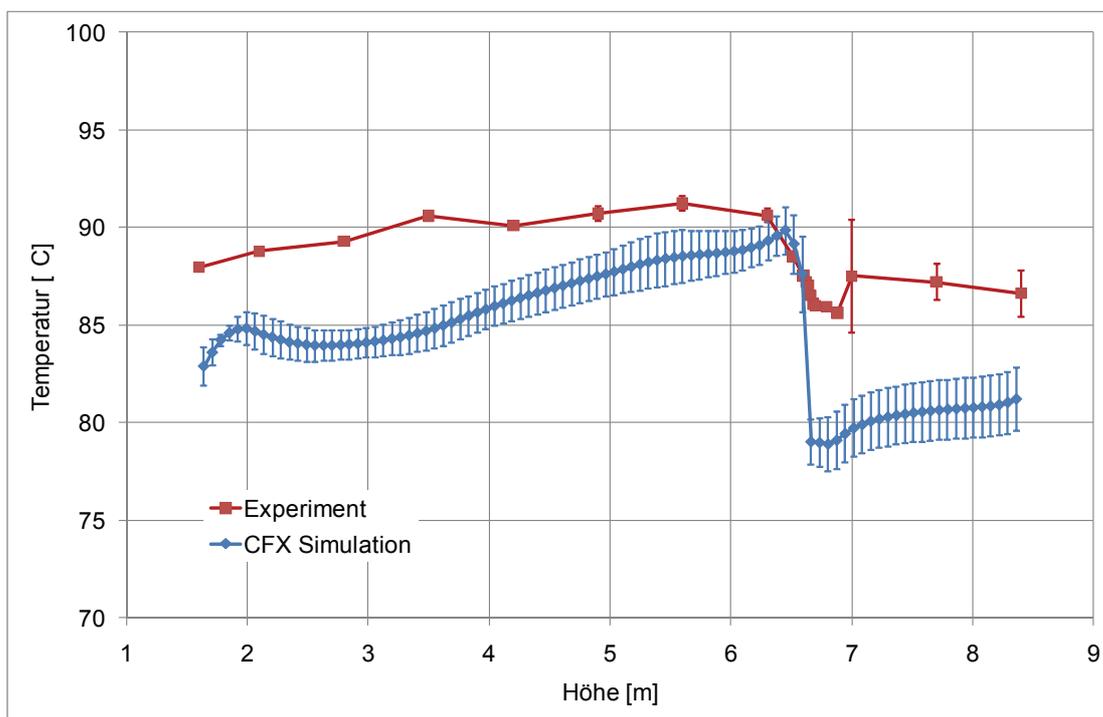


Abb. 4.2-10 Temperaturprofil über die Behälterhöhe beim Radius  $r = 1,15 \text{ m}$

In Abb. 4.2-11 sind die mittlere Temperaturen für  $t > 10,2 \text{ h}$  für alle Messstellen dargestellt. Hierbei werden Simulationswerte und experimentelle Daten miteinander verglichen. Es zeigt sich, dass die berechneten Werte meistens leicht unter den gemessenen Werten liegen. Die mittlere Abweichung zwischen Simulation und Experiment beträgt  $4,0 \text{ °C}$ . Die im Diagramm durch Fehlerbalken dargestellte Schwankungsbreite ist die im Mittelungsintervall ( $10,2 \text{ h} < t < 11,2 \text{ h}$ ) vorhandene Standardabweichung um den Mittelwert. In Tab. 4.2-5 finden sich noch die genauen quantitativen Werte aus Simulation und Experiment.

Tab. 4.2-5 Mittlere Temperaturen für  $t > 10,2 \text{ h}$

Messstelle	BTF21H11	CTF28M00	CTW28H07	DTF63H11
<b>Experiment</b>	$88,1 \pm 0,5 \text{ °C}$	$87,0 \pm 0,5 \text{ °C}$	$79,9 \pm 0,9 \text{ °C}$	$90,0 \pm 0,5 \text{ °C}$
<b>Simulation</b>	$83,5 \pm 0,8 \text{ °C}$	$84,2 \pm 1,2 \text{ °C}$	$82,9 \pm 0,6 \text{ °C}$	$88,3 \pm 0,7 \text{ °C}$
Messstelle	DTF63H15	DTF70H11	DTF70H15	DTF84H11
<b>Experiment</b>	$96,0 \pm 0,5 \text{ °C}$	$85,1 \pm 0,4 \text{ °C}$	$82,0 \pm 0,6 \text{ °C}$	$85,9 \pm 0,6 \text{ °C}$
<b>Simulation</b>	$92,1 \pm 0,7 \text{ °C}$	$78,9 \pm 0,8 \text{ °C}$	$77,0 \pm 0,8 \text{ °C}$	$80,4 \pm 0,9 \text{ °C}$

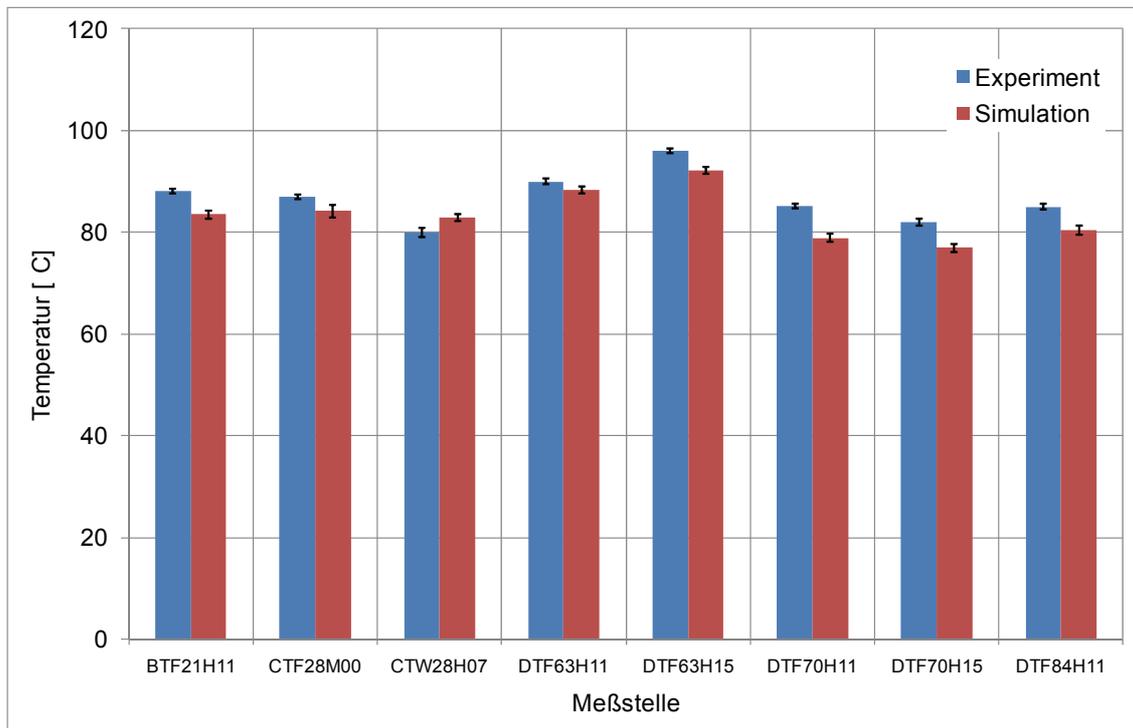


Abb. 4.2-11 Vergleich von berechneten und gemessenen mittleren Temperaturen für  $t > 10,2$  h

- **Vertikalgeschwindigkeiten**

In Abb. 4.2-12 ist der zeitliche Verlauf der Vertikalgeschwindigkeiten an einer Messstelle im THAI-Behälter dargestellt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wurden die stark schwankenden Geschwindigkeitswerte gemittelt. Jeder im Diagramm eingezeichnete Wert ist ein Mittelwert über einen Zeitraum von 250 Sekunden. Es zeigt sich an dieser Messstelle eine gute qualitative Übereinstimmung zwischen dem simulierten und dem experimentellen Werteverlauf.

In Abb. 4.2-13 sind die mittleren Vertikalgeschwindigkeiten in Phase 2 für alle drei Messstellen dargestellt. Hierbei werden Simulationsdaten und experimentelle Werte miteinander verglichen. Es zeigen sich im Gegensatz zur Messstelle CVT58M00 in Abb. 4.2-12 hier deutliche Unterschiede zwischen Experiment und Simulation für die zwei anderen Messstellen. Insgesamt liegt der mittlere Fehler der Simulation bei 0,23 m/s.

Die im Diagramm durch Fehlerbalken dargestellte Schwankungsbreite ist die im Mittelungsintervall ( $t > 7,5$  h) vorhandene Standardabweichung um den Mittelwert. In Tab.

4.2-6 finden sich noch die genauen quantitativen Werte aus Simulation und Experiment.

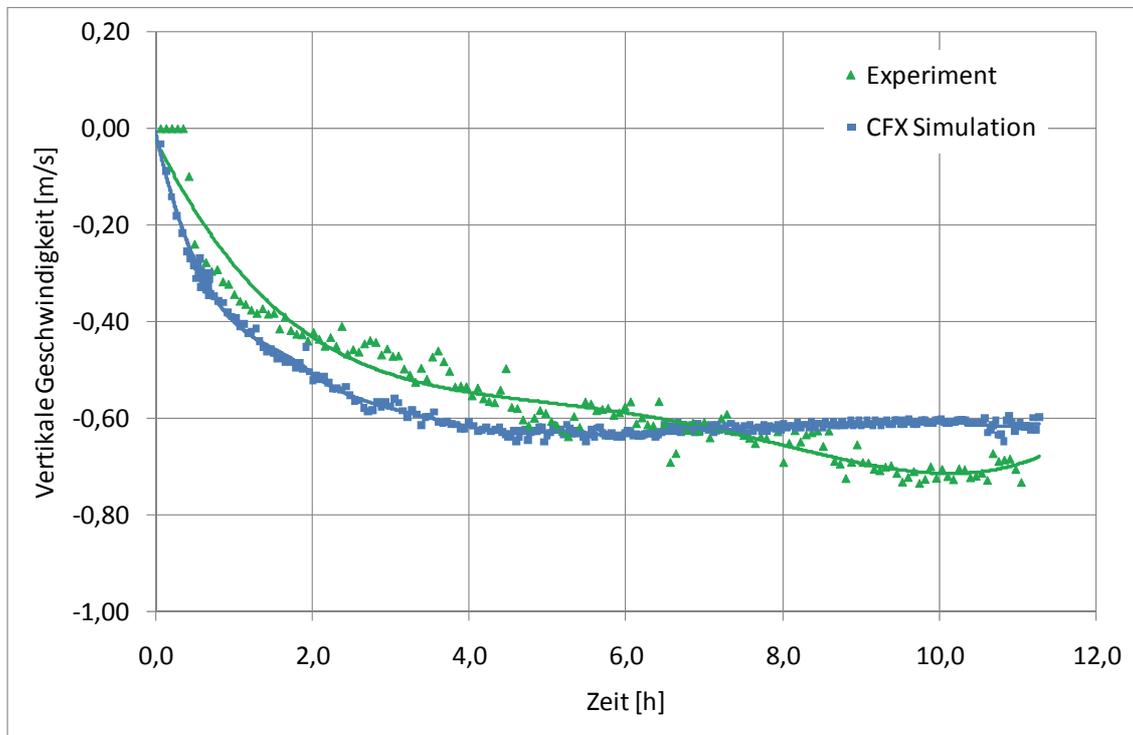


Abb. 4.2-12 Zeitlicher Verlauf der Vertikalgeschwindigkeit im THAI-Behälter (an Messstelle CVT58M00)

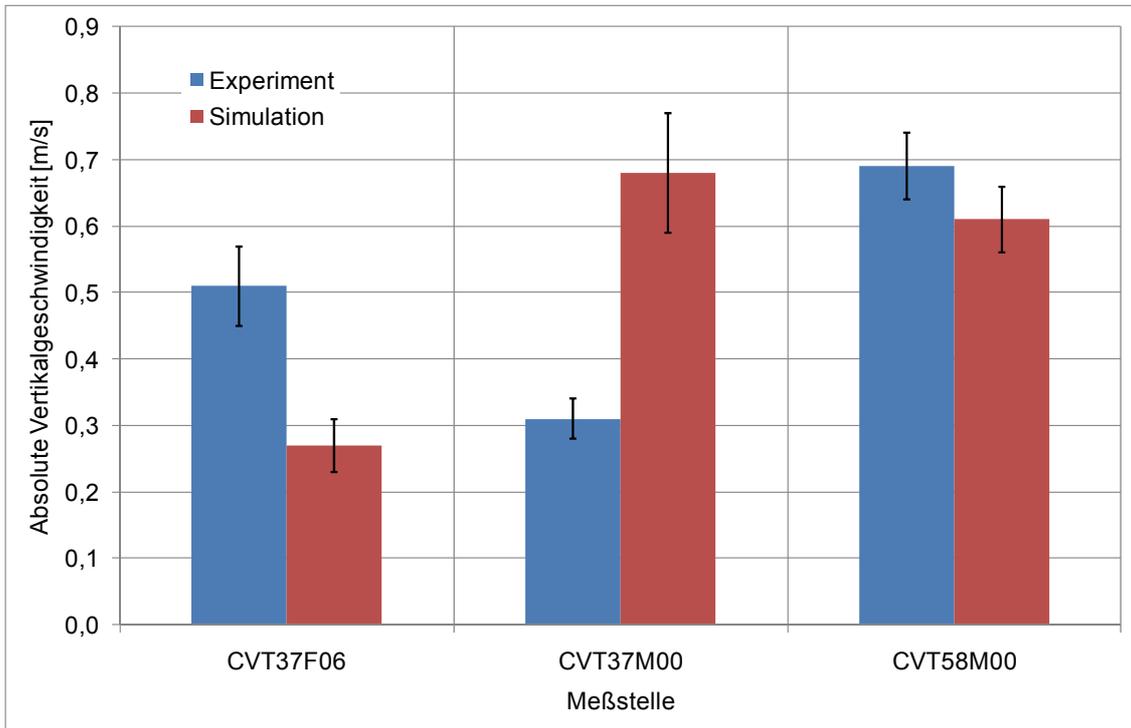


Abb. 4.2-13 Vergleich von berechneten und gemessenen vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten für Phase 2 ( $t > 7,5$  h / Absolutwert)

Tab. 4.2-6 Mittlere Vertikalgeschwindigkeiten in Phase 2 ( $t > 7,5$  h)

Messstelle	Vertikalgeschwindigkeit	
	Experiment	Simulation
CVT37F06	$-0,51 \pm 0,06$ m/s	$-0,27 \pm 0,04$ m/s
CVT37M00	$-0,31 \pm 0,03$ m/s	$-0,68 \pm 0,09$ m/s
CVT58M00	$-0,69 \pm 0,05$ m/s	$-0,61 \pm 0,05$ m/s

#### 4.2.7 Fazit und offene Fragen

Der Versuch TH-21 wurde anhand einer Viertel-Geometrie des THAI-Behälters nachgerechnet. Hierbei zeigt eine Gitterstudie, dass die Berechnungen im nahezu gitterunabhängigen Bereich durchgeführt wurden. Die Rechnung ist konvergiert und der volle experimentelle Zeitraum von 11,3 Stunden wurde berechnet. Eine erste Berechnung ohne Behälterwand aber mit adiabaten Randbedingung zeigt, dass diese Annahme ei-

ne zu starke Vereinfachung darstellt. Für eine korrekte Wiedergabe der experimentellen Verhältnisse ist es notwendig, die Behälterwände mit zu simulieren, damit deren Wirkung als Wärmespeicher berücksichtigt wird. Der Vergleich mit den experimentellen Daten zeigt eine gute qualitative Übereinstimmung der Werteverläufe an den Druck-, Temperatur- und Geschwindigkeitsmessstellen. Für einen quantitativen Vergleich wurden Mittelwerte in Phase 2 gebildet. Hier zeigt sich, dass die berechneten Mittelwerte von Druck und Temperaturen gut mit den experimentellen Werten übereinstimmen. Bei den Strömungsgeschwindigkeiten gibt es jedoch an zwei von drei Messstellen deutliche Unterschiede.

## **4.3 TH-22**

### **4.3.1 Zielsetzung**

Ziel des TH-22 Experiments war es, die Auflösung einer Leichtgasschichtung durch natürliche Konvektionsströmungen zu untersuchen. Ähnliche Prozesse können auch in der Atmosphäre eine Containments in einem schweren Störfall stattfinden. Die Simulation dieses Prozesses dient der Validierung von CFX, insbesondere in den Bereichen Wärmeübergang und Turbulenz. Da die Ergebnisse des TH-22 Experiments bis zum Zeitpunkt der Berichtserstellung (Juni 2010) noch nicht vorlagen, werden hier ausschließlich die Ergebnisse der blinden Voraussrechnung vorgestellt.

### **4.3.2 Geometrie und Randbedingungen**

In Abb. 4.3-1 ist die Geometrie des THAI-Behälters dargestellt, die für die blinde Voraussrechnung des TH-22 Experiments verwendet wurde. Aufgrund der Symmetrie des Experiments konnte ein 180° Halbmodell des THAI-Behälters verwendet werden. Dargestellt sind unter anderem die äußeren Heiz- und Kühlmäntel und die Position für die Heliuminjektion. Das TH-22 Experiment kann in drei Phasen unterteilt werden:

1. Phase (0 – 24,166 h): Aufheizung des THAI-Behälters. Diese Phase ist bis zum Einstellen eines quasistationären Strömungs- und Temperaturfeldes mit Konvektionsschleifen ähnlich zum TH-21 Experiment. Hierbei wird der Heizmantel auf etwa 120 °C geheizt und die Kühlmäntel auf ca. 40 °C. Der erste Teil dieser Phase (0 – 24,1 h) wurde durch eine stationäre Rechnung abgebildet. Das Ende dieser ersten Aufwärmphase (24,1 – 24,166 h) wurde durch eine transiente Berechnung abgebildet. Hierdurch werden die zeitabhängigen turbulenten Schwankungen berücksichtigt, die in der Strömung zu erwarten sind. Dabei ergibt sich ein möglichst genauer Endzustand der ersten Phase (bei  $t = 24,166$  h), der dann als Startzustand für die transiente Berechnung der 2. Phase verwendet wird.

2. Phase (24,166 – 24,23 h): Einspeisung von Helium im oberen Bereich des THAI-Behälters. Durch eine schnelle Einspeisung kann sich eine stabile Heliumschicht im oberen Dombereich ausbilden. Diese Schicht bremst die Konvektionsströmungen zuerst ab. Diese Phase wird durch eine transiente Berechnung abgebildet.

3. Phase (24,23 h – 25,79 h): Auflösung der Heliumschicht. Durch das langsame erneute Anlaufen der Konvektionsströmungen wird die Heliumschicht langsam aufgelöst und das Helium im gesamten THAI-Behälter verteilt. Auch die 3. Phase wurde mit einer zeitabhängigen Berechnung berechnet.

In den Tab. 4.3-1 und Tab. 4.3-2 finden sich die Start- und Randbedingungen für die Phasen 1 und 2. Es wurde jeweils mit einem 180° Halbmodell gerechnet, dass in Phase 1 92.388 Elemente hatte. In den transienten Simulationen gab es jeweils zwei Berechnungen sowohl mit 92.388 Elementen als auch mit 36.490 Elementen. Als Turbulenzmodell wurde das k- $\epsilon$  Modell verwendet, welches sich in anderen Berechnungen (TH-18) bereits als gut und schnell herausgestellt hatte. Das verwendete Konvergenzkriterium war  $RMS < 0,0001$ . In Abb. 4.3-2 sind der Massenstrom und die Temperatur des in Phase 2 eingespeisten Heliums dargestellt. Weitere Details zum TH-22 Experiment finden sich im Auslegungsbericht /FGU 09/.

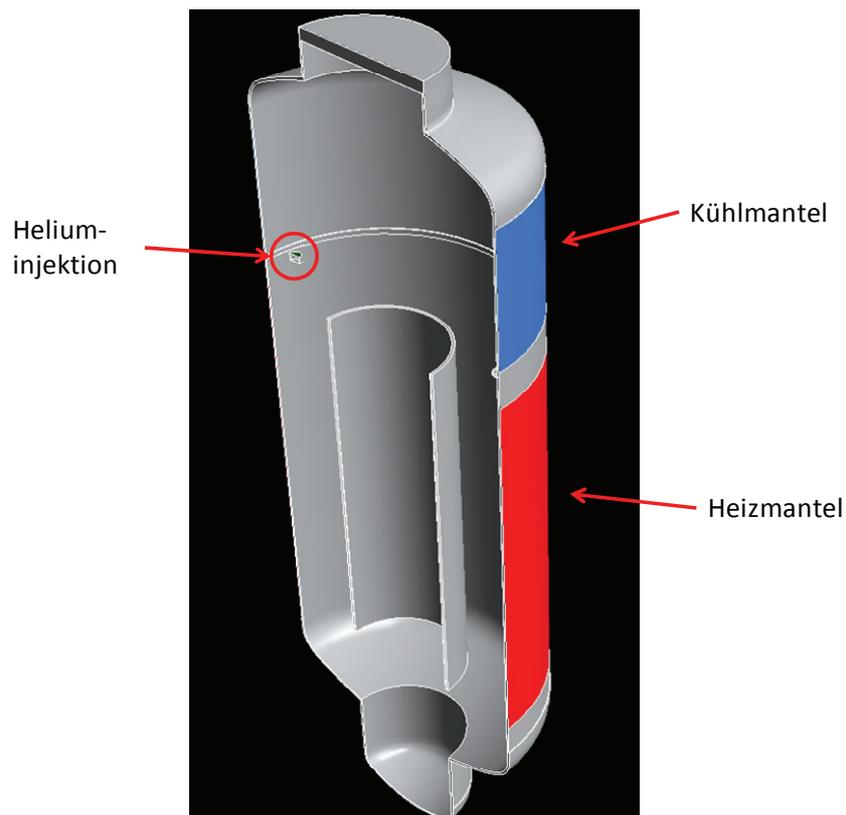


Abb. 4.3-1 Konfiguration des TH-22 Experimentes (180° Halbmodell)

Tab. 4.3-1 Start- und Randbedingungen für die Berechnung von Phase 1 (0 h - 24,1 h)

Simulationstyp	Stationäre Rechnung
Geometrie	180° Halbmodell + Symmetrieebene
Elementzahl	92.388 Elemente
Startdruck	1,22 bar
Starttemperatur	17,7 °C
Temperatur Heizmantel	119 °C
Temperatur Kühlmantel	41 °C
Randbedingung unbeheizte Wände	Wärmeübergang 5 W/Km <sup>2</sup> , Außen: 23 °C
Turbulenzmodell	k-ε
Konvergenzkriterium	RMS < 0,0001

Tab. 4.3-2 Start- und Randbedingungen für die transiente Simulation (24,1 h - 25,79 h)

Simulationstyp	Instationäre Rechnung	
Geometrie	180° Halbmodell	
Elementzahl	36.490 Elemente	92.388 Elemente
Startdruck, -temperatur, -geschwindigkeiten	Ergebnis aus der Berechnung von Phase 1	
Temperatur Heizmantel	119 °C	
Temperatur Kühlmantel	41 °C	
Randbedingung unbeheizte Wände	Wärmeübergang 5 W/Km <sup>2</sup> , Außen: 23 °C	
Heliumeinspeisung	Entsprechend Abbildung 2	
Turbulenzmodell	k-ε	
Konvergenzkriterium	RMS < 0,0001	

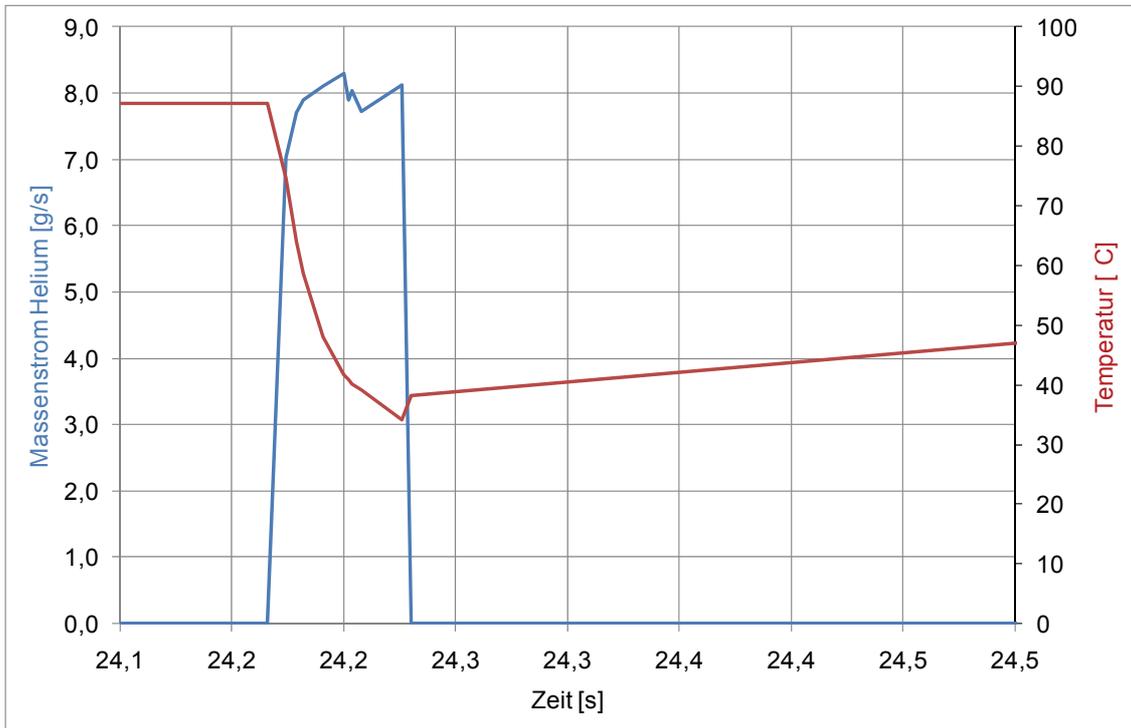


Abb. 4.3-2 Massenstrom und Temperatur des eingespeisten Heliums

### 4.3.3 Stationäre Berechnung (Aufwärmphase)

Der zeitliche Verlauf der Aufwärmphase (0 – 24,1 h) wurde nicht detailliert nachgerechnet, sondern es wurde der Endzustand (Druck, Temperatur- und Geschwindigkeitsverteilung) bei  $t = 24,1$  h durch eine stationäre Rechnung ermittelt. Dieser berechnete Zustand bei  $t = 24,1$  h wurde dann als Startbedingung für die zeitabhängige Berechnung (24,1 – 25,79 h) genutzt.

In Abb. 4.3-3 ist das Ergebnis der stationären Rechnung dargestellt. Die Temperatur- und Geschwindigkeitsverteilung entspricht in etwa dem Bild, das in der Berechnung des vergleichbaren Versuchs TH-21 ermittelt wurde. Die Verteilung ist nicht symmetrisch und möglicherweise liegt die Ursache hierfür darin, dass es für das hier vorliegende Strömungsproblem keine eindeutige Lösung gibt. Beim Versuch TH-21 gab es im quasi-stationären Bereich zeitabhängige turbulente Oszillationen im Strömungs- und Geschwindigkeitsfeld. Diese zeigen sich auch in der zeitabhängigen Berechnung der folgenden Phasen des TH-22 Experiments, die weiter hinten diskutiert werden. Im Folgenden wird aber zunächst die Gitterunabhängigkeit der zeitabhängigen Berechnungen geprüft.

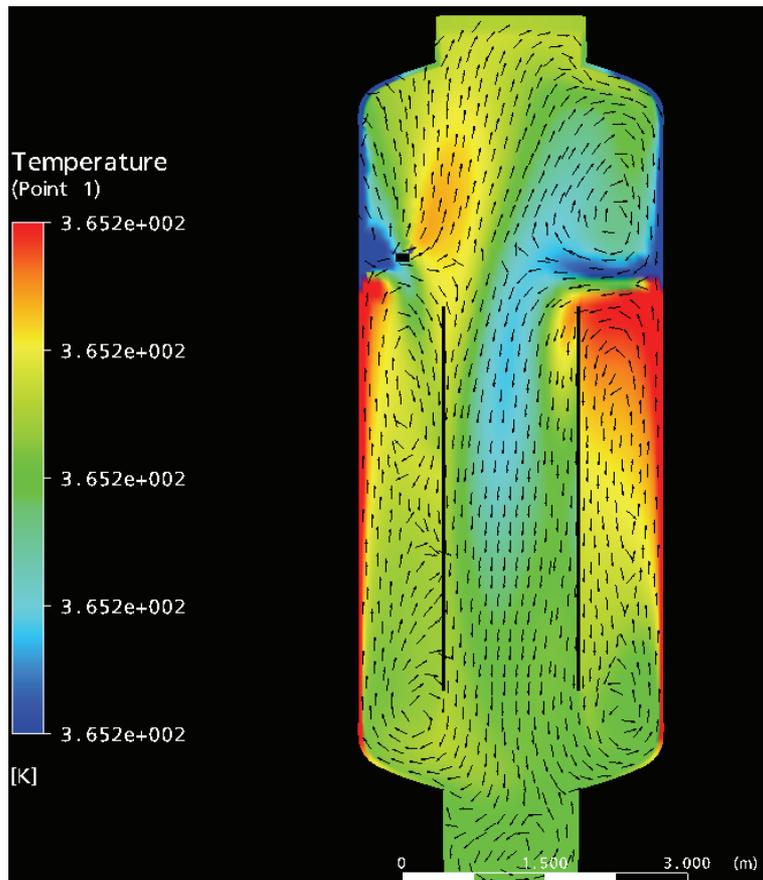


Abb. 4.3-3 Temperaturverteilung am Ende von Phase 1 (t = 24,1 h)

#### 4.3.4 Analyse von Diskretisierungsfehlern

Um den Einfluss von Diskretisierungsfehlern auf die transiente Berechnung abschätzen zu können, wurden zwei Berechnungen mit unterschiedlicher Elementzahl (92.388 und 36.490 Elemente) durchgeführt. In Abb. 4.3-4 ist dargestellt, welchen Einfluss die Elementzahl auf den berechneten Druckverlauf hat. Dort zeigt sich, dass der durch die Heliumeinspeisung erzeugte Druckanstieg für die Rechnung mit 36.490 Elementen etwas kleiner ausfällt als für die Berechnung mit 92.388 Elementen. Der Unterschied ist jedoch mit ca. 0,01 bar relativ gering. Ebenso gering oder noch kleiner ist der Einfluss der Elementzahl auf den Temperaturverlauf (Abb. 4.3-5), auf die Heliumkonzentration (Abb. 4.3-6) sowie auf den zeitlichen Verlauf der Geschwindigkeiten (Abb. 4.3-7). Aus diesem Grund und aufgrund des geringeren Rechenzeitbedarfs wird für die weiteren Berechnungen und Analysen das Gitter mit 36.490 Elementen verwendet. In Abb. 4.3-4 bis Abb. 4.3-7 sind jeweils zur genauen Identifikation die Namen der Messstellen im Experiment verwendet worden, z.B. „DTF66H11“ für die Temperaturmessstelle in Abb. 4.3-5. Bei diesen Messstellennamen kennzeichnet jeweils die vierte und fünfte Stelle die absolute Höhe der Messstelle in Dezimetern. Die Messstelle DTF66H11 liegt also in einer Höhe von 6,6 m im THAI-Behälter.

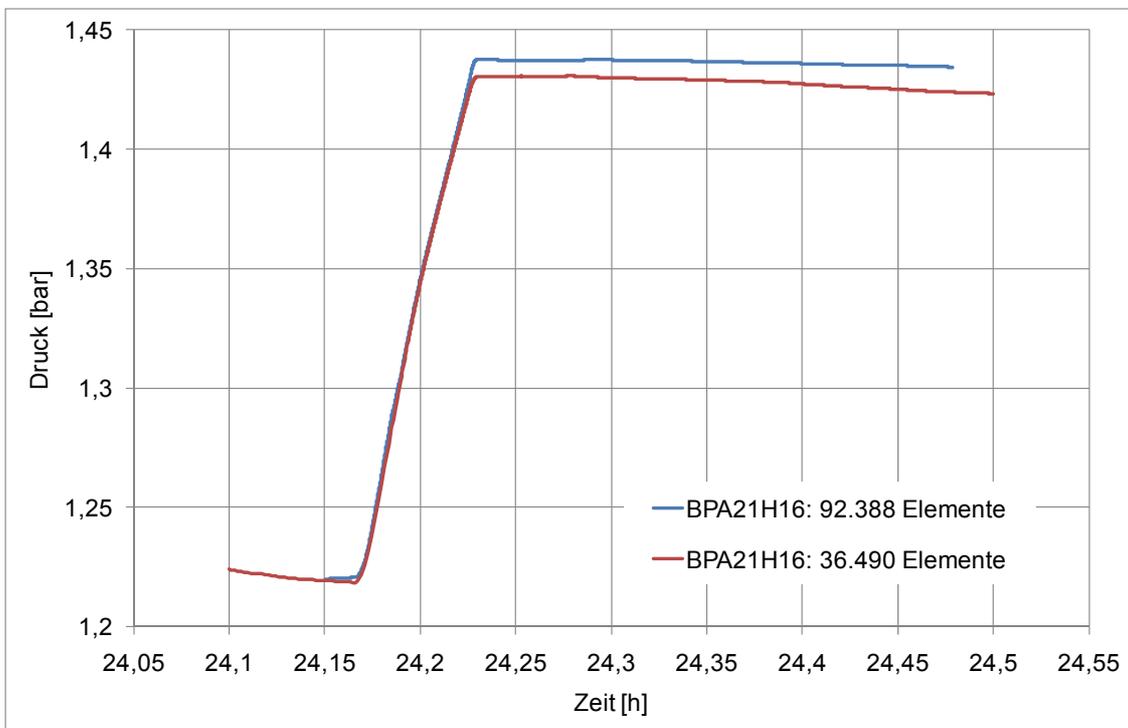


Abb. 4.3-4 Abhängigkeit des berechneten Drucks von der Elementzahl

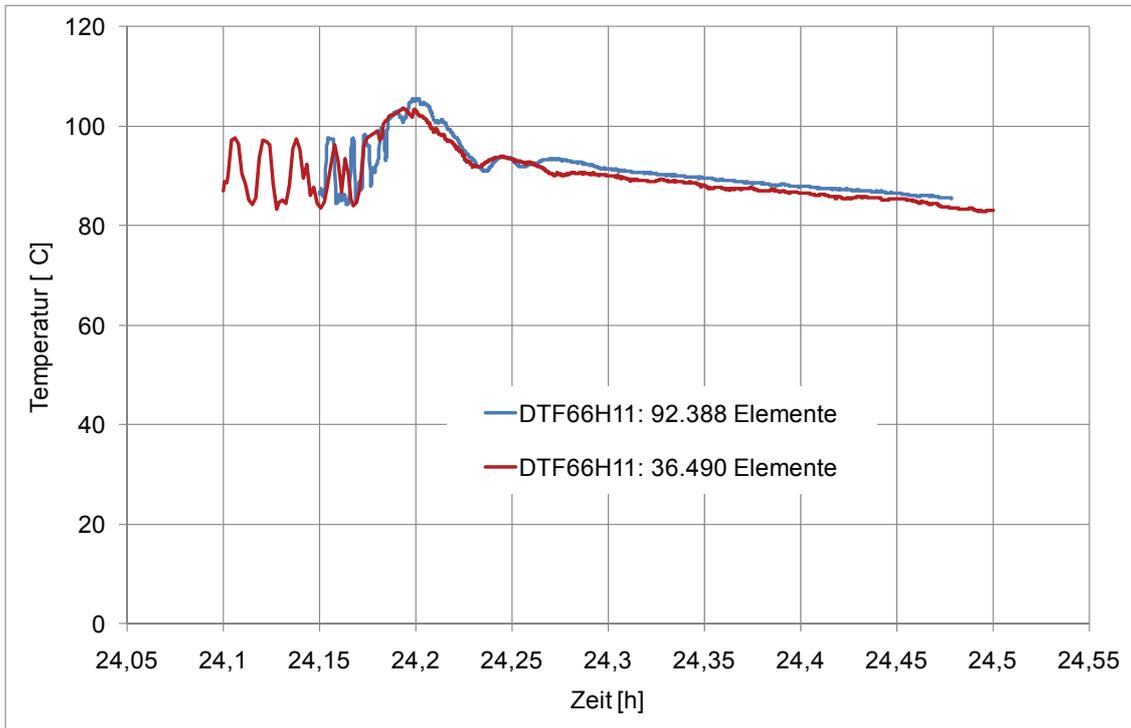


Abb. 4.3-5    Abhängigkeit des berechneten Temperaturverlaufs von der Elementzahl

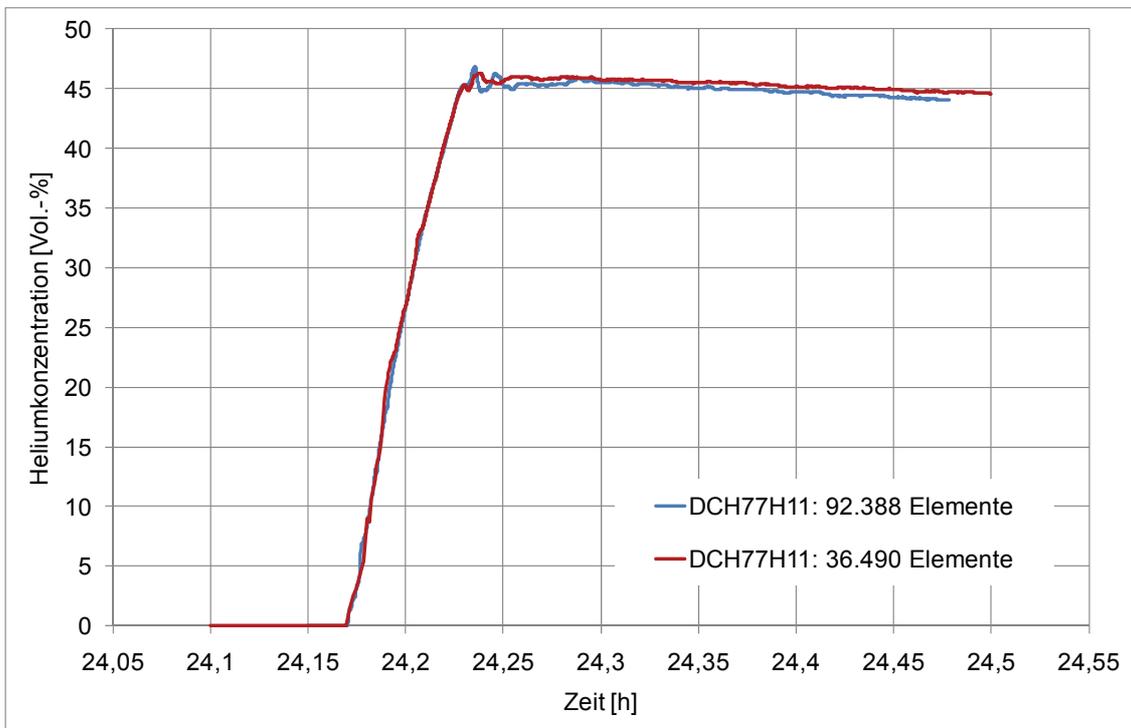


Abb. 4.3-6    Abhängigkeit der berechneten Heliumkonzentration von der Elementzahl

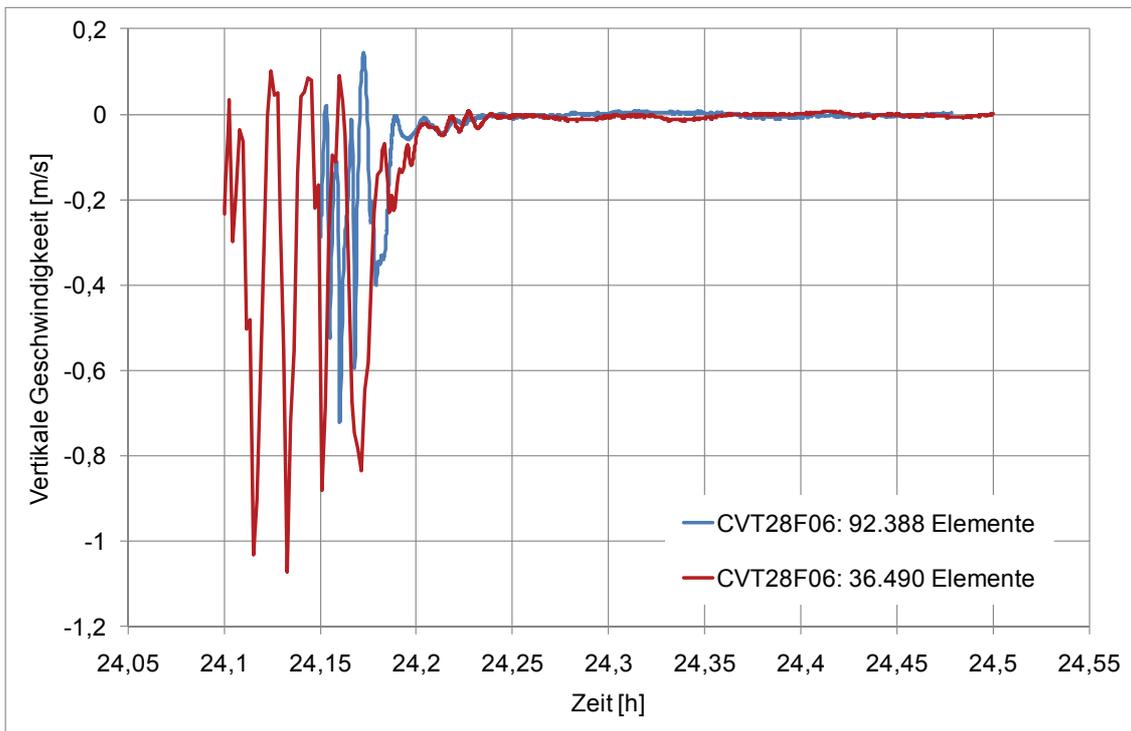


Abb. 4.3-7 Abhängigkeit der berechneten Geschwindigkeiten von der Elementzahl

#### 4.3.5 Transiente Berechnung (Ende der 1. Phase, Heliumeinspeisung und Schichtauflösung)

In Abb. 4.3-8 bis Abb. 4.3-13 sind die Ergebnisse der transienten Berechnung dargestellt. Zum späteren Vergleich mit den experimentellen Daten wurde am Ende der Aufwärmphase (bei  $t = 24,1$  h) ein vertikales Temperaturprofil sowie ein horizontales Profil der Vertikalgeschwindigkeiten erstellt. Dazu wurden die Temperaturen und Vertikalgeschwindigkeiten in der transienten Berechnung über einen Zeitraum von 100 s gemittelt. Das Ergebnis für die Temperaturen findet sich in Abb. 4.3-8, die Vertikalgeschwindigkeiten sind in Abb. 4.3-9 dargestellt. Die eingetragenen Fehlerbalken kennzeichnen den statistischen Fehler. Das Temperaturprofil ist qualitativ ähnlich dem Temperaturprofil, welches bei der Analyse des TH-21 Versuchs berechnet wurde (siehe Abschnitt 4.2). Insbesondere zeigt es in 6,5 m Höhe auch einen Temperatursprung. Das Geschwindigkeitsprofil in Abb. 4.3-9 zeigt die Vertikalgeschwindigkeiten in 6,4 m Höhe oberhalb des Innenzylinders. Hier zeigt sich, dass die Luft an der Behälterwand aufsteigt, während sie im Bereich des Innenzylinders nach unten sinkt.

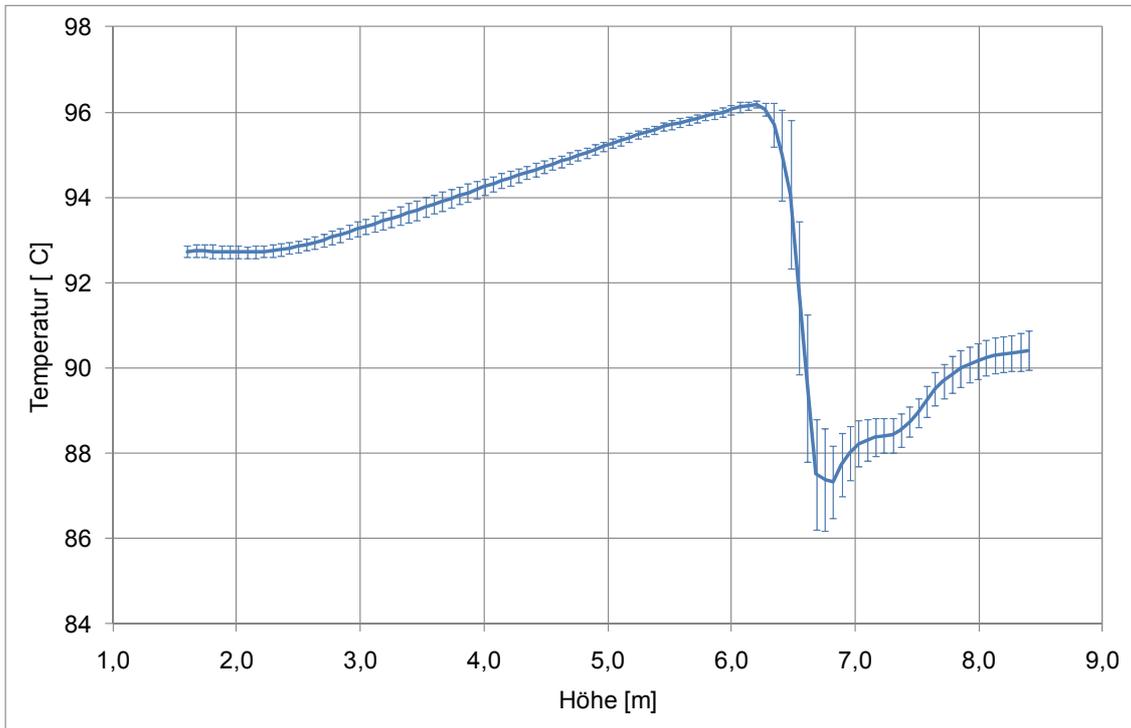


Abb. 4.3-8 Vertikales Temperaturprofil am Ende der Aufwärmphase (bei  $t = 24,1 \text{ h}$  / Radius  $r = 1,14 \text{ m}$ )

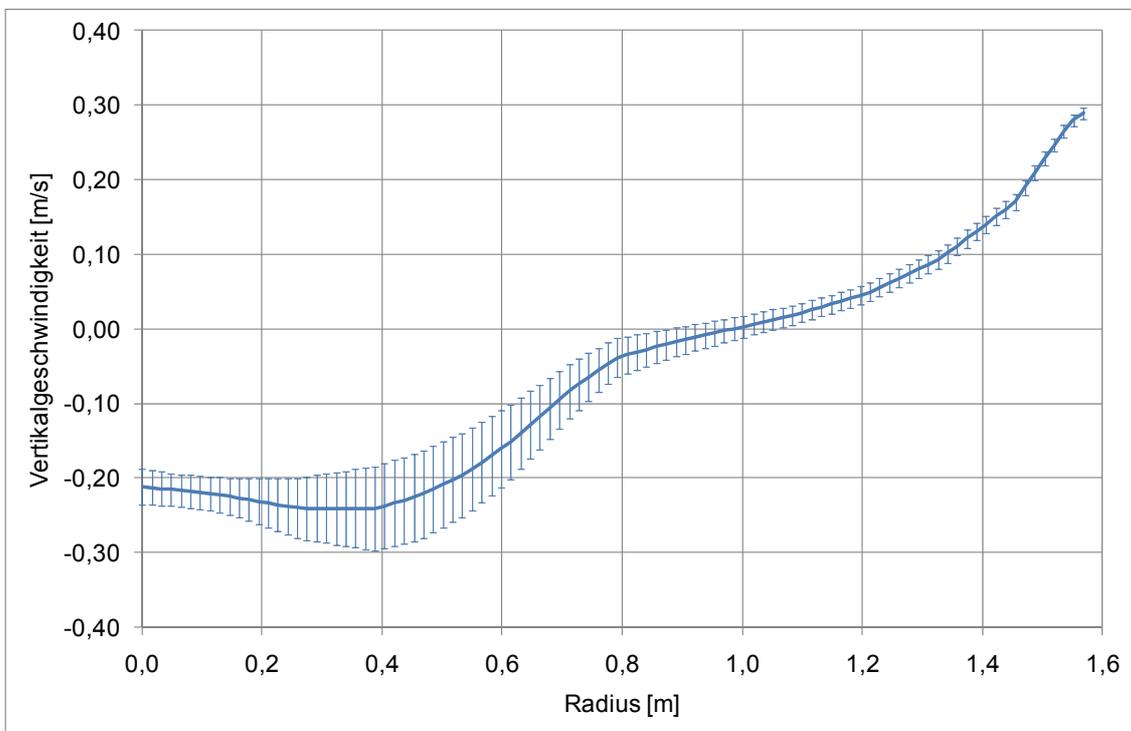


Abb. 4.3-9 Horizontales Profil der Vertikalgeschwindigkeiten am Ende der Aufwärmphase (bei  $t = 24,1 \text{ h}$  / in  $6,4 \text{ m}$  Höhe)

Abb. 4.3-10 zeigt den zeitlichen Verlauf des Drucks im THAI-Behälter. Dieser steigt zunächst durch die Heliumeinspeisung stark an. Das Abfallen des Drucks im weiteren Verlauf (für  $t > 24,25$  h) zeigt, dass der THAI-Behälter in dieser Phase mehr Energie über den Kühlmantel sowie über die unbeheizten Flächen nach außen abgibt, als er durch den Heizmantel aufnimmt.

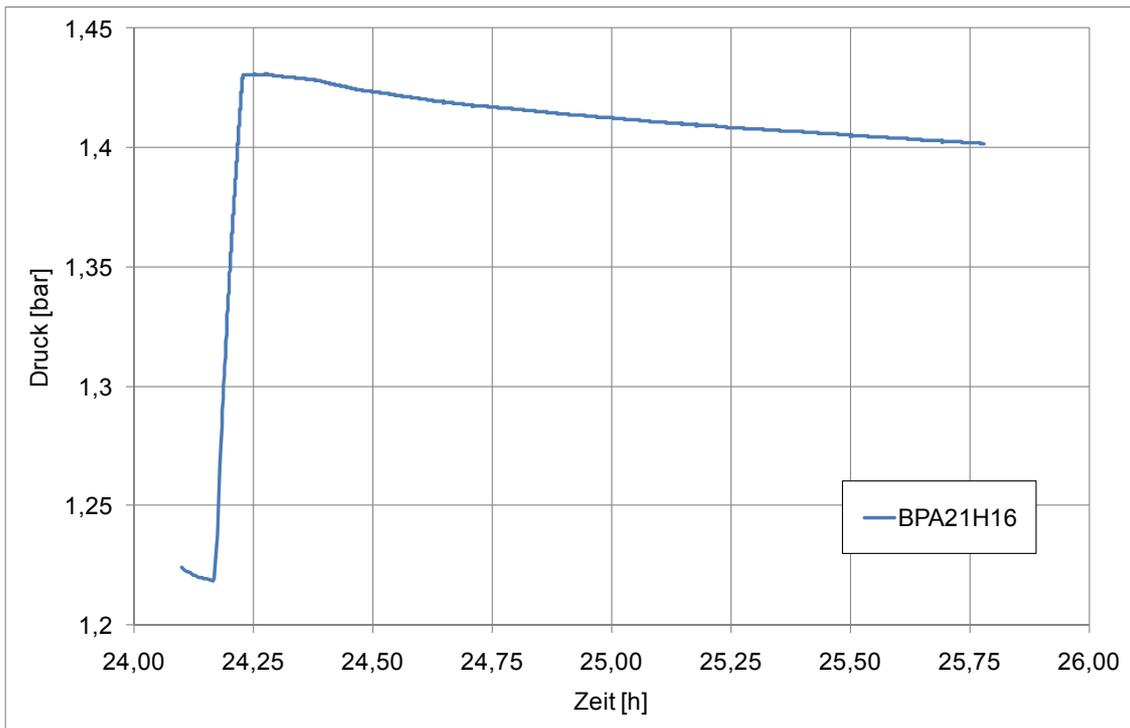


Abb. 4.3-10 Zeitlicher Verlauf des Drucks im THAI-Behälter

Abb. 4.3-11 zeigt den Temperaturverlauf an verschiedenen Messstellen im THAI-Behälter. Das Einfüllen des Heliums unterbindet zunächst den konvektiven Wärmeaustausch im Behälter und es entstehen zwei unterschiedliche Temperaturzonen:

- Im unteren Bereich ( $z < 5$  m) bleiben die lokalen Temperaturen weitgehend konstant. Die durch den Heizmantel zugeführte Wärme entspricht also in etwa der abgeführten Wärme.
- Im oberen Bereich ( $z > 5$  m) sinken die lokalen Temperaturen stetig ab. Hier wird konstant Wärme an den Kühlmantel und über die unbeheizten Wände nach außen abgegeben.

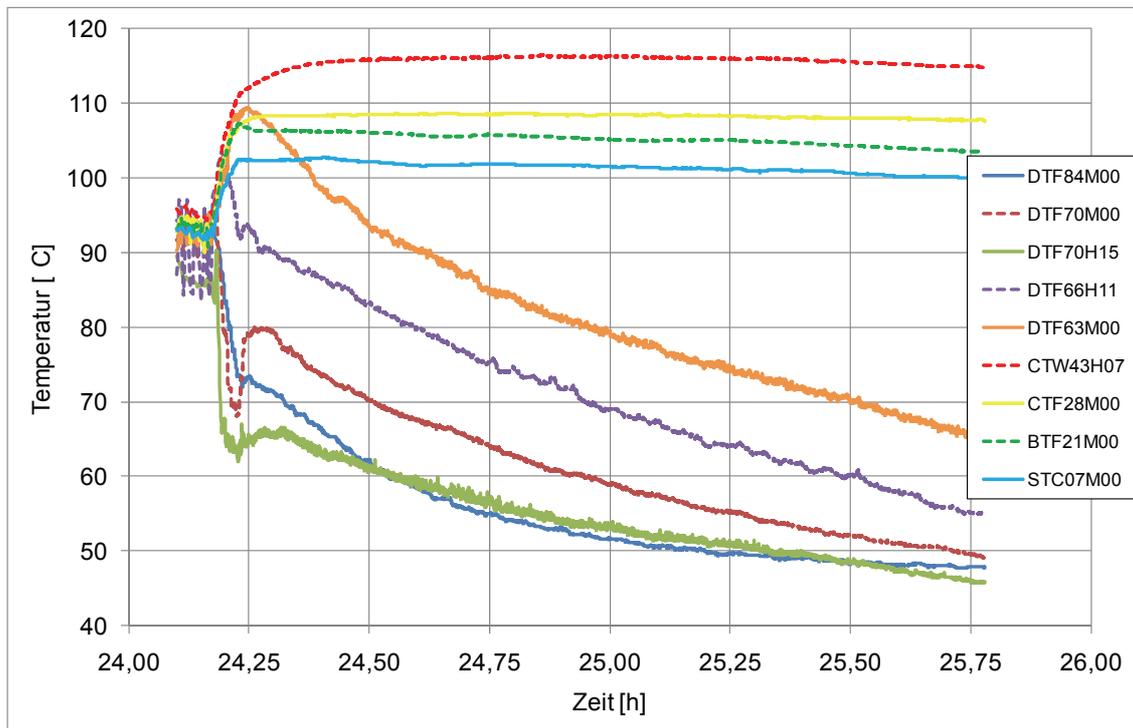


Abb. 4.3-11 Temperaturverläufe an den unterschiedlichen Messpositionen im Behälter

Der zeitliche Verlauf der Vertikalgeschwindigkeiten in Abb. 4.3-12 zeigt, wie durch das Einspeisen des Heliums die Konvektionsströmung zum Erliegen kommt und bis zum Versuchsende ( $t = 25,75$  h) bei kleinen Strömungsgeschwindigkeiten verbleibt. Entsprechend löst sich die gebildete Helium-Schichtung im THAI-Behälter auch langsam auf. Die entsprechenden Konzentrationen an verschiedenen Messstellen sind in Abb. 4.3-13 dargestellt. Diese Konzentrationen nähern sich einander an, was zeigt, dass es eine Vermischung gibt. Diese ist recht langsam und bis zum Versuchsende wurde die Heliumschichtung unzureichend aufgelöst.

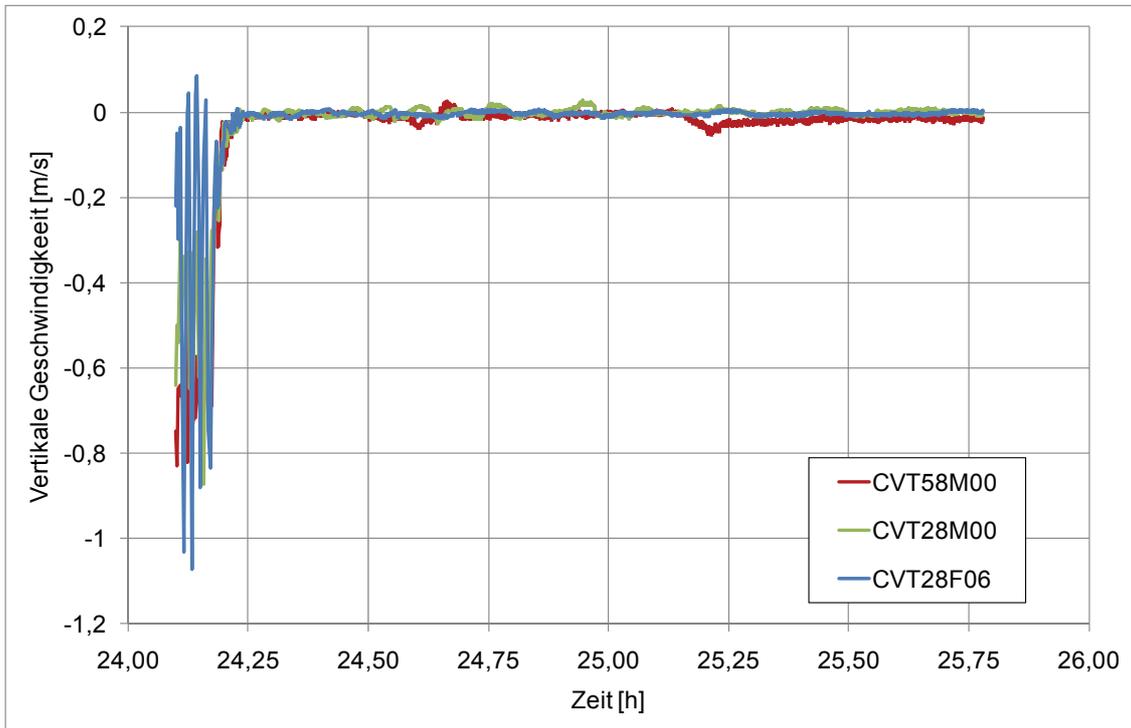


Abb. 4.3-12 Zeitlicher Verlauf der Vertikalgeschwindigkeiten

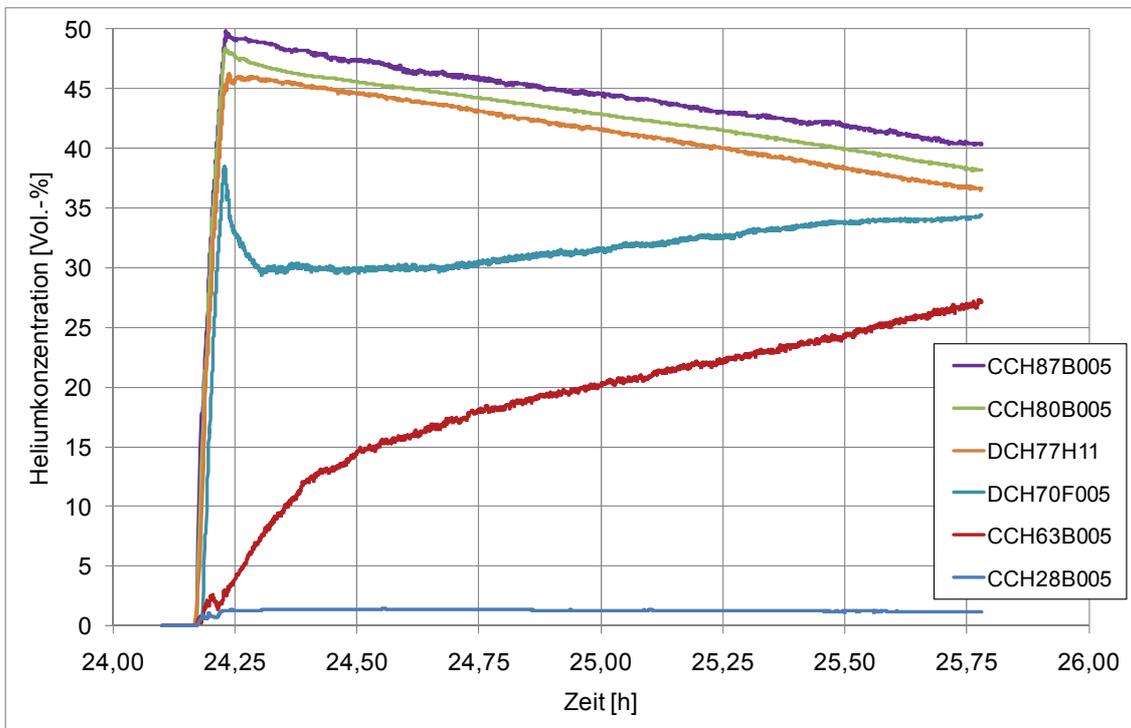


Abb. 4.3-13 Zeitlicher Verlauf der Heliumkonzentration an unterschiedlichen Messpositionen im THAI-Behälter

#### **4.3.6 Zusammenfassung TH-22**

Der Versuch TH-22 wurde im Rahmen dieses Arbeitspunktes durch eine blinde Simulation vorausberechnet. Hierbei wurde die erste Versuchsphase durch eine stationäre CFX-Berechnung simuliert, während das Ende der ersten Phase sowie die zweite und dritte Versuchsphase durch eine transiente Rechnung abgebildet wurden. Durch die Analyse zweier unterschiedlicher Gitter konnte gezeigt werden, dass in dem betrachteten Bereich mit einer geringen Gitterabhängigkeit zu rechnen ist. Als Ergebnis dieser Simulationen liegen nun Druck, Temperatur sowie Geschwindigkeits- und Konzentrationsprofile vor. Da die Versuchsdaten bis zum Projektende noch nicht vorlagen, konnten sie bisher nicht mit den vorliegenden Berechnungsergebnissen verglichen werden.

#### **4.4 Fazit zur Validierung des Wärmetransports in Wände und andere Strukturen**

Durch Simulation von verschiedenen Versuchen (TH-21, TH-22) konnte gezeigt werden, dass CFX in der Lage ist, den Wärmetransport in Wände und Strukturen unter containment-typischen Strömungsbedingungen mit ausreichender Genauigkeit zu berechnen. Dazu ist eine ausreichend feine Diskretisierung der Grenzschicht Gas/Festkörper notwendig.

Bei Verwendung des SST-Turbulenzmodells muss für die Diskretisierung im Gas das Kriterium  $y^+ < 100$  eingehalten werden. Insbesondere bei Festkörpern mit einer schlechten Wärmeleitfähigkeit wie z. B. Beton ist darauf zu achten, dass auch im Festkörper eine ausreichend feine Diskretisierung vorhanden ist. Im Beton sollte die erste Zelle an der Grenze zum Gas in senkrechter Richtung zum Interface nicht größer als 1 mm bis 2 mm sein. Ansonsten ist mit einer Überschätzung des Wärmetransports zu rechnen, da die Oberflächentemperatur des Betons unterschätzt wird.

## 5 Vergleichende Tests unterschiedlicher Modellansätze für die Turbulenz

Das Ziel der Arbeiten in diesem Arbeitspunkt ist ein Vergleich unterschiedlicher Turbulenzmodelle im eingesetzten Programm CFX-11 bei der Anwendung auf verschiedene Strömungszustände in Experimenten. Die folgenden unterschiedlichen Turbulenzmodelle wurden an verschiedenen Versuchen getestet:

- $k-\varepsilon$
- Shear Stress Transport (SST)
- SGG Reynolds-Stress.

Weiterhin wurde eine Berechnung ganz ohne Turbulenzmodellierung (laminar) durchgeführt.

### 5.1 Simulation des Versuchs TH-18

#### 5.1.1 Zielsetzung

Nachfolgend werden die Ergebnisse des Vergleichs des Einsatzes unterschiedlicher Turbulenzmodelle ( $k-\varepsilon$ , Shear Stress Transport (SST), SGG Reynolds-Stress) für die Nachrechnung des Versuchs TH-18 aus dem Versuchsprogramm ThAI III diskutiert. Zusätzlich wurde auch eine Berechnung ohne Turbulenzmodellierung (laminar) durchgeführt. Ziel der Arbeiten ist es, ein Turbulenzmodell zu finden, das so einfach wie möglich aber so komplex wie nötig ist und die wesentlichen Eigenschaften der Strömungsvorgänge realistisch wiedergibt. Hierzu werden die folgenden Bewertungskriterien verwendet:

- **Zahl der verwendeten Gitterelemente  $N_{\text{Element}}$ :** Dieser Wert kann direkt bei der Gittererstellung bestimmt werden. Je kleiner dieser Wert ist, desto einfacher ist ein Modell.
- **Rechenzeitaufwand in CPU-Stunden ( $t_{\text{CPU}}$ ):** Dieser Wert kann erst nach der Simulation bestimmt werden. Auch hier gilt in der Regel, je kleiner dieser Wert ist, desto einfacher ist ein Modell.

- **Gemittelter absoluter Diskretisierungsfehler ( $F_{\text{Diskret}}$ ):** Dieser Fehler wurde als Mittelwert über alle Datenpunkte bestimmt und es gilt:

$$\langle F_{\text{Diskret}} \rangle = \frac{\sum |v_{\text{grob}} - v_{\text{fein}}|}{N_{\text{Mess}}} \quad (1)$$

Hierbei ist  $v_{\text{grob}}$  die Vertikalgeschwindigkeit, berechnet mit einem groben Gitter, und  $v_{\text{fein}}$  die Vertikalgeschwindigkeit, berechnet mit dem feinsten Gitter.  $N_{\text{Mess}}$  ist die Zahl der für die Untersuchung verwendeten Datenpunkte. Der Diskretisierungsfehler sollte minimiert werden, bevor eine Analyse des Modellfehlers durchgeführt wird.

- **Gemittelter absoluter Modellfehler ( $F_{\text{Modell}}$ ):** Nach der Minimierung des Diskretisierungsfehlers kann die Differenz der Simulationswerte zu den experimentellen Daten bestimmt werden:

$$\langle F_{\text{Modell}} \rangle = \frac{\sum |v_{\text{Modell}} - v_{\text{Experiment}}|}{N_{\text{Mess}}} \quad (2)$$

Hierbei ist  $v_{\text{Modell}}$  die Vertikalgeschwindigkeit, berechnet mit CFX, und  $v_{\text{Experiment}}$  die experimentell ermittelte Vertikalgeschwindigkeit. In dem so definierten Modellfehler sind noch die experimentellen Messfehler enthalten. Diese müssen getrennt analysiert werden (Konsistenz-Tests, Reproduzierbarkeit, systematische Fehler, Streuung der Messwerte, diverse statistische Analysen). Erst dann kann eine belastbare Aussage über den verbleibenden Modellfehler gemacht werden.

- **Korrelationskoeffizient nach Bravais-Pearson ( $R$ ):** Dieser Wert berechnet sich aus der Kovarianz und der Varianz zweier Variablen (Simulationswerte und experimentelle Werte). Dabei gilt:

$$R = \frac{\text{Cov}(X, Y)}{\sqrt{\text{Var}(X)} \cdot \sqrt{\text{Var}(Y)}} \quad (3)$$

Der Koeffizient ist ein Maß für die qualitative Übereinstimmung des Verlaufes der Variablen (Ähnlichkeit der Kurvenform).  $R$  nimmt Werte zwischen -1 und 1 an. Je näher  $R$  an -1 oder 1 liegt, desto stärker ist die Übereinstimmung, es wird von negativer bzw.

positiver Korrelation gesprochen. Bei Werten von R nahe 0 besteht keine Übereinstimmung der Daten. R macht jedoch eine Aussage über die qualitative Übereinstimmung im Verlauf der Daten. Hieraus kann keine Aussage bzgl. der quantitativen Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment abgeleitet werden.

Alle Kennwerte, die eine Aussage über die Genauigkeit eines (Turbulenz-)Modells machen, können sowohl für einzelne Bereiche des THAI-Behälters als auch für den gesamten THAI-Behälter berechnet werden. Die Zielgrößen, welche mit den Simulationen bestimmt werden, sind die vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten an verschiedenen Positionen im THAI-Behälter sowie die Druckdifferenz über die eingebaute Kondensatwanne. Eine genaue Aufstellung der untersuchten Zielgrößen und Positionen findet sich in Tab. 5.1-1.

Tab. 5.1-1 Untersuchte Zielgrößen

Zielgrößen	Bereich
Vertikalgeschwindigkeit in 8,0 m Höhe	Radius: -0,8 m bis 0,8 m
Vertikalgeschwindigkeit in 6,5 m Höhe	Radius: -1,6 m bis 1,6 m
Vertikalgeschwindigkeit über D in 4,9 m Höhe	Radius: 0,7 m bis 1,6 m
Vertikalgeschwindigkeit unter D in 3,5 m Höhe	Radius: 0,7 m bis 1,6 m
Vertikalgeschwindigkeit über H in 4,9 m Höhe	Radius: -1,6 m bis -0,7 m
Vertikalgeschwindigkeit unter H in 3,5 m Höhe	Radius: -1,6 m bis -0,7 m
Flügelradmessung	Höhe Messpunkt: 3,65 m
Druckabfall über Kondensatwanne	Höhe Messpunkte: 3,98 m, 4,9 m

Zum Verständnis der Angaben in der Tabelle wird nachfolgend die Versuchsgeometrie erläutert. Die in der Simulation berechneten Ergebnisse werden anschließend mit den experimentell ermittelten Daten verglichen. Hieraus lassen sich Aussagen über die Eignung der unterschiedlichen Turbulenzmodelle ableiten.

### 5.1.2 Geometrie und Randbedingungen

Die Geometrie des THAI-Versuchsbehälters für den Versuch TH-18 ist in Abb. 5.1-1 und Abb. 5.1-2 dargestellt. Abb. 5.1-1 links zeigt eine schematische Darstellung des gesamten Versuchsbehälters mit Innenzylinder, Kondensatwanne und Gebläse. Eine genaue Aufstellung der Geometrieparameter findet sich in /FIS 06/ und /FIS 07/. Abb.

5.1-1 rechts stellt das verwendete Rechengitter dar. In Abb. 5.1-2 ist eine schematische Zeichnung der Kondensatwanne zu sehen, die zwei unterschiedliche große Strömungsöffnungen aufweist. Die kleine Öffnung hat die Bezeichnung H, die große Öffnung hat die Bezeichnung D.

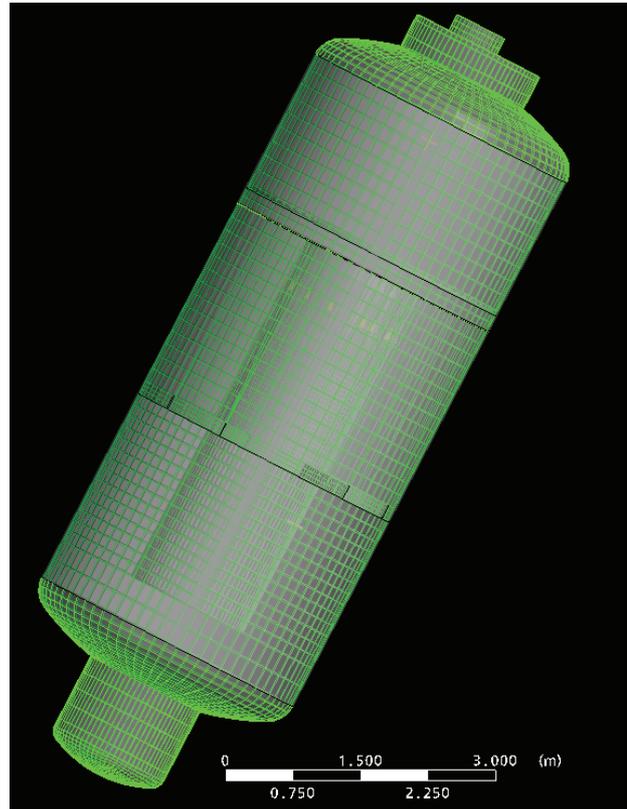
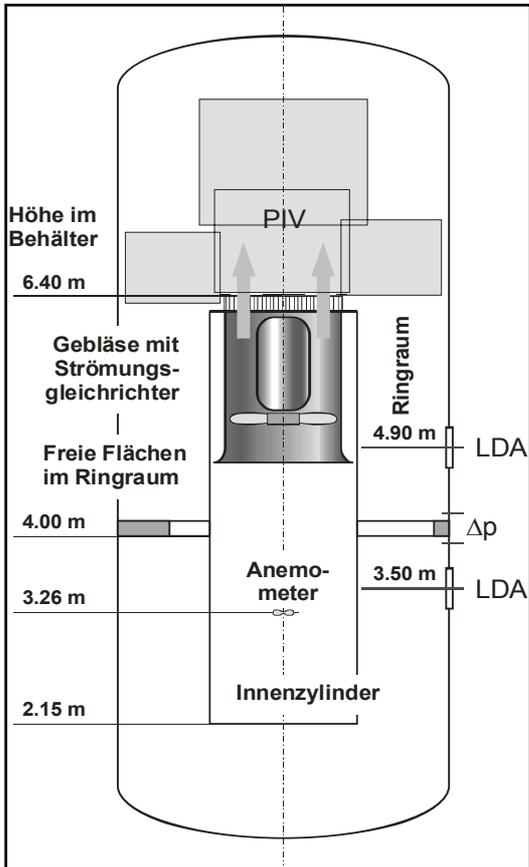


Abb. 5.1-1 THAI Versuchsbehälter (links schematische Zeichnung /FIS 07/, rechts CFD-Gitter)

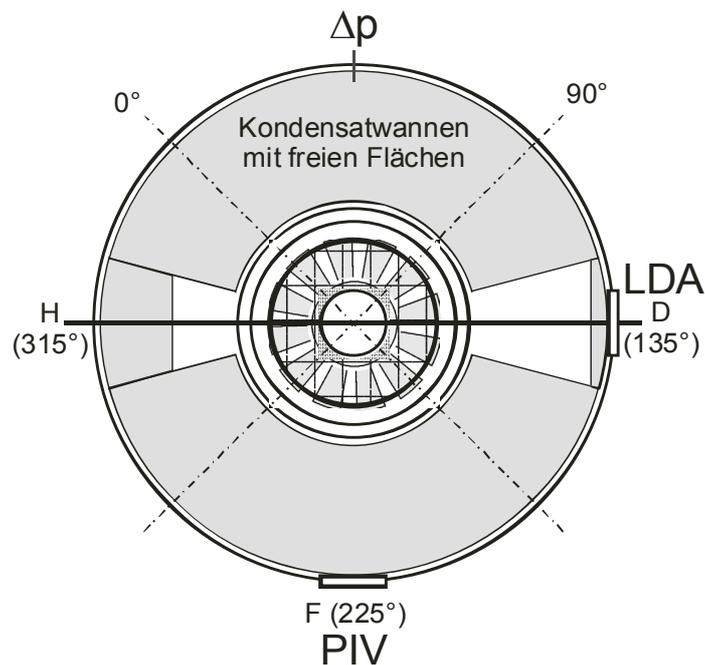


Abb. 5.1-2 Schematische Zeichnung der Kondensatwanne /FIS 07/

In Tab. 5.1-2 finden sich die Modelle und Randbedingungen, die in der Simulation verwendet werden. Diese sind gleichzeitig auch Faktoren, die einen Einfluss auf die Zielgrößen haben. Wie groß der Einfluss der einzelnen Faktoren ist, ist zunächst unbekannt. In dieser Untersuchung wird insbesondere der Einfluss des verwendeten Turbulenzmodells untersucht. Zunächst muss jedoch geprüft werden, ab welcher Elementzahl die Rechnung unabhängig vom verwendeten Gitter wird. In Tab. 5.1-3 ist ein Plan der durchgeführten Simulationen dargestellt, mit denen der Einfluss der Elementzahl und des Turbulenzmodells untersucht wurde.

Tab. 5.1-2 In den Simulationen verwendete Modelle und Randbedingungen

	<b>Faktoren</b>	<b>Faktorstufen</b>			
<b>Randbedingungen</b>	Konfiguration	THAI 18 / Ganze Geometrie			
	Massenstrom am Gebläseaustritt	4,46465 kg/s			
	Turbulenzintensität am Gebläseaustritt	5 %	10 %		
	Druckdifferenz am Gebläseeintritt	1 Pa			
	Simulationsdauer	Maximal 1000 s			
<b>Physikalische Modelle</b>	Turbulenz	K- $\epsilon$	SST	SSG Reynolds	Laminar
	Auftrieb	Ohne Auftrieb			
<b>Materialparameter Luft</b>	Materialmodell	Air ideal gas			
	Temperatur	22 °C			
	Druck	1 atm			
	Dichte	1,185 kg/m <sup>3</sup>			
<b>Numerische Parameter</b>	Elementzahlen	166.437	825.382	1.188.800 bzw. 1.393.418	
	Gittertyp	Strukturiert			
	Simulationstyp	Transient und isotherm			
	Konvergenzkriterium	RMS: 0,0001			

Tab. 5.1-3 Plan der durchgeführten Simulationen

<b>Simulationsnummer</b>	<b>Elementzahl</b>	<b>Turbulenzmodell</b>	<b>Strömungsprofil Gebläseaustritt</b>	<b>Turbulenzintensität am Gebläseaustritt</b>
S1	166437	SST	Blockströmung	5 %
S2	825382	SST	Blockströmung	5 %
S3	1393418	SST	Blockströmung	5 %
S4	166437	Laminar	Blockströmung	5 %
S5	166437	k-ε	Blockströmung	5 %
S6	166437	SSG Reynolds Stress	Blockströmung	5 %
S7	166437	k-ε	PIV-Fit	5 %
S8	1188800	k-ε	PIV-Fit	5 %
S9	1188800	SST	PIV-Fit	5 %
S10	1188800	SST	PIV-Fit	10 %
S11	1188800	SSG Reynolds Stress	PIV-Fit	5 %

Das Strömungsprofil und der Massenstrom am Gebläseaustritt sind experimentell auf zwei unterschiedliche Arten bestimmt worden (siehe Abb. 5.1-3). Einerseits wurden Messungen mit einem Flügelradanemometer durchgeführt, andererseits wurden PIV-Messungen gemacht. Die hieraus errechneten Massenströme sind inkonsistent. Für die Messung mit dem Anemometer ergibt sich ein mittlerer Massenstrom von 5,17 kg/s. Dazu liegt eine von ANSYS durchgeführte Anpassung vor. Für die Messung mit der PIV-Methode ergibt sich ein mittlerer Massenstrom von 4,47 kg/s. Welche Daten die experimentelle Wirklichkeit besser wiedergeben, kann nicht mit Sicherheit gesagt werden. Für die in dem vorliegenden Bericht dargestellten Simulationen wurde ein Fit der PIV-Messwerte verwendet. Dieser ist in Abb. 5.1-3 dargestellt.

Weiterhin werden in Tab. 5.1-4 die Massenströme und Regressionsgleichungen der beiden unterschiedlichen Messmethoden dargestellt.

Tab. 5.1-4 Geschwindigkeitsprofile am Gebläseaustritt

Messmethode	Fit durch:	Massenstrom	Regressions-Gleichung
PIV	GRS	4,47 kg/s	$v_z(r) = -173,627 \frac{1}{m \cdot s} \cdot r^2 + 113,791 \frac{1}{s} \cdot  r  - 11,382 \frac{m}{s}$
Flügelradaneometer	ANSYS	5,17 kg/s	$v_z(r) = v_{\max} \left[ 1 - \left( \frac{ 2r - r_a - r_i }{r_a - r_i} \right)^n \right]$ Mit $v_{\max} = 8,1 \text{ m/s}$ und $n = 4,66176$

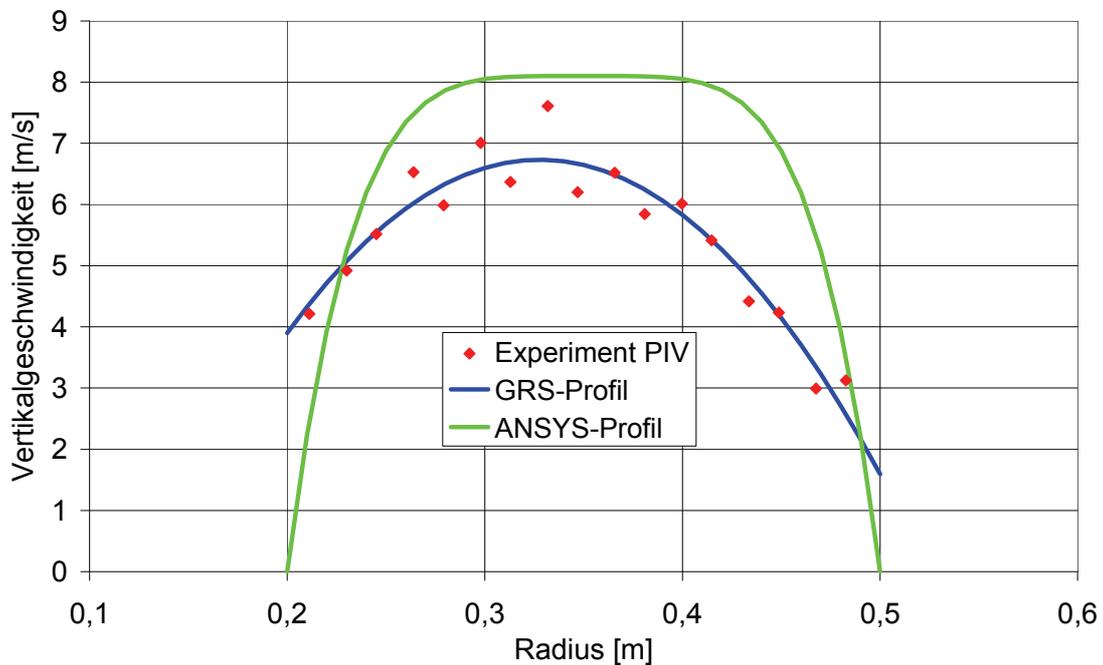


Abb. 5.1-3 Geschwindigkeitsprofile am Gebläseaustritt

### 5.1.3 Auswertung der Simulationen

In Abb. 5.1-4 ist eine mit CFX berechnete Geschwindigkeitsverteilung im THAI-Behälter zu einem festen Zeitpunkt dargestellt. Es wurden mehrere Berechnungen mit unterschiedlichen Elementzahlen durchgeführt (166.437 bis 1.188.800 Elemente). Beobachtet man den zeitlichen Verlauf der vertikalen Strömungsgeschwindigkeit, so zeigt sich, dass die Geschwindigkeiten starke zeitliche Oszillationen aufweisen. Genaue quantitative Aussagen können darum erst durch eine Mittelung der Werte über einen

längeren Zeitraum getroffen werden. Die Ursache dieser Oszillationen ist unklar, d. h. es kann nicht gesagt werden, ob die Oszillationen eine physikalische Ursache haben oder ob sie durch einen rein numerischen Effekt entstehen.

In Abb. 5.1-5 ist schematisch dargestellt, wie die simulierten Vertikalgeschwindigkeiten ausgewertet werden. Oben links in Abb. 5.1-5 sind die Vertikalgeschwindigkeiten für vier Zeitpunkte gegen den Radius (entlang einer gedachten Linie durch den THAI-Behälter) aufgetragen. Die Unterschiede entstehen durch die schon genannten zeitlichen Oszillationen. Aus den vier Verteilungen wurde dann durch Mittelwertbildung eine Verteilung berechnet (unten rechts in Abb. 5.1-5). Die Fehlerbalken dieser gemittelten Verteilung symbolisieren die Standardabweichungen und sind damit ein Maß für die Streuung der Werte um ihren Mittelwert.

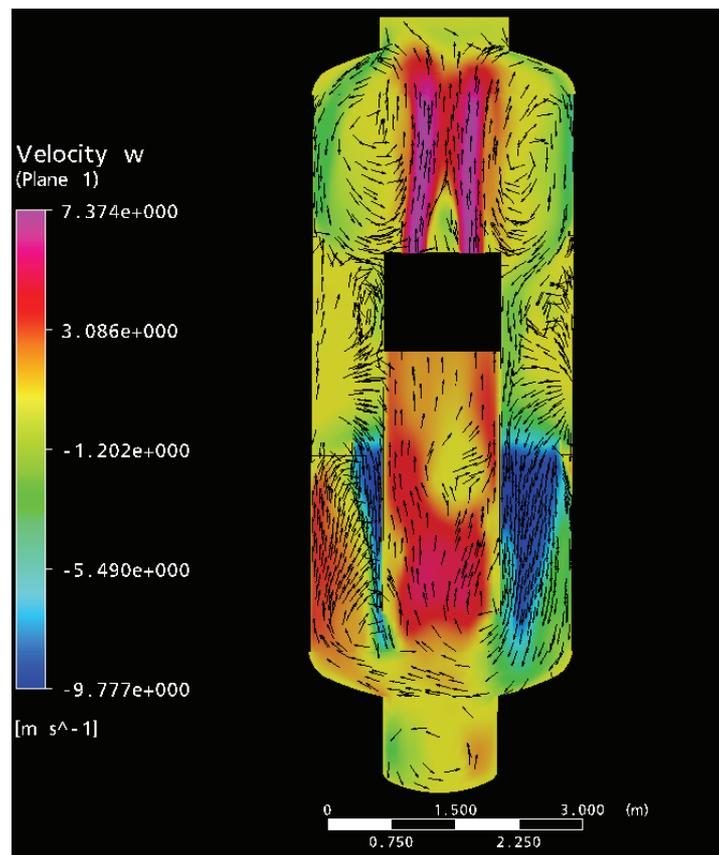


Abb. 5.1-4 Berechnete Vertikalgeschwindigkeitsverteilung im THAI-Behälter

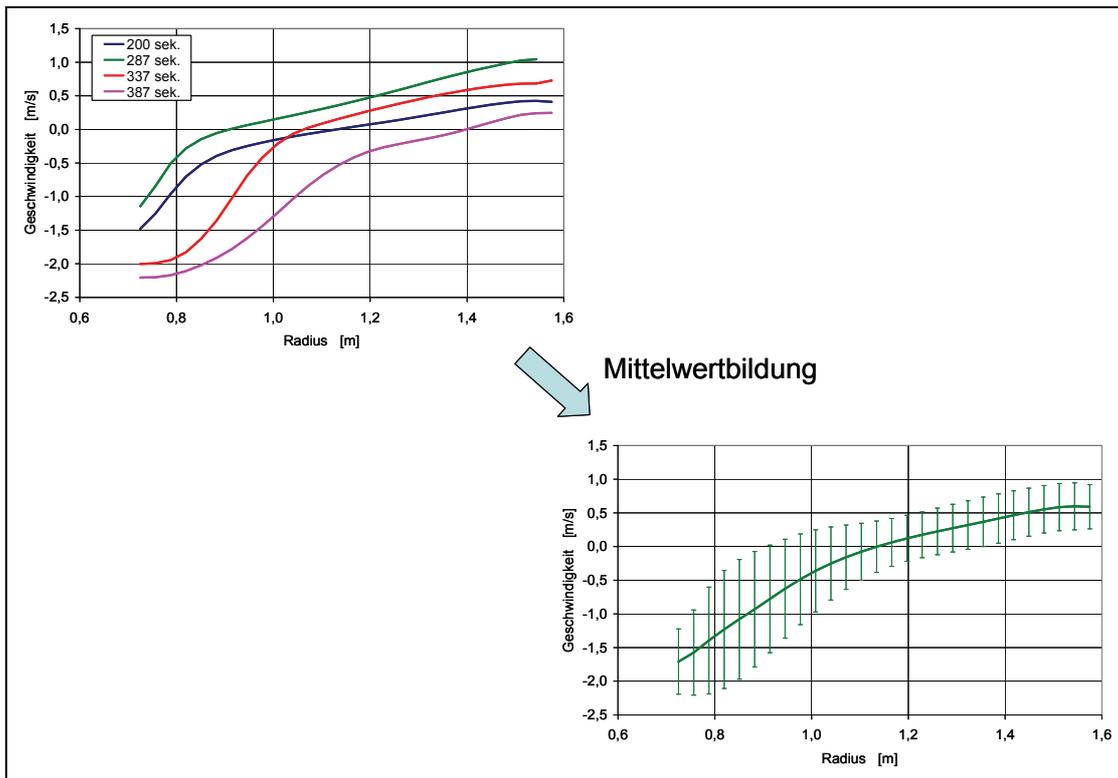


Abb. 5.1-5 Schematische Darstellung der Berechnung von Mittelwerten und Standardabweichungen aus mehreren Zeitschritten

#### 5.1.4 Analyse des Diskretisierungsfehlers

Um den Diskretisierungsfehler (Gleichung 1 in Abschnitt 5.1.1) zu bestimmen, werden Berechnungen mit unterschiedlich vielen Gitterelementen durchgeführt und miteinander verglichen. Hierfür wurden die in Tab. 5.1-3 genannten Berechnungen S7 und S8 verwendet.

In Abb. 5.1-6 ist das berechnete Geschwindigkeitsprofil in 6,5 m Höhe für die zwei unterschiedlichen Rechnungen dargestellt. Eine Rechnung wurde mit einem Gitter mit 166.437 Elementen und eine Rechnung mit einem Gitter mit 1.188.800 Elementen durchgeführt. Es zeigen sich im mittleren Bereich (Radius  $\pm 0,6$  m) fast keine Unterschiede, diese treten erst im äußeren Bereich des Behälters auf.

Das Geschwindigkeitsprofil in einer Höhe von 8,0 m ist in Abb. 5.1-7 dargestellt. Hier zeigt sich ein sehr deutlicher Einfluss der räumlichen Diskretisierung auf die Ergebnisse. Die Berechnung mit 166.437 Elementen zeigt deutlich schwächer ausgeprägte Ge-

schwindigkeitsspitzen als die Berechnung mit 1.188.800 Elementen. Ursache ist vermutlich eine durch das grobe Gitter bedingte numerische Diffusion.

In Abb. 5.1-8 ist die Vertikalgeschwindigkeit über der Öffnung H dargestellt. Hier zeigen beide Berechnungen mit unterschiedlichen Gittern ähnliche Ergebnisse. Das gleiche gilt auch für die in den Abb. 5.1-9, Abb. 5.1-10 und Abb. 5.1-11 dargestellten Vertikalgeschwindigkeiten oberhalb und unterhalb der Öffnung D und unterhalb der Öffnung H.

In Abb. 5.1-12 ist die Abhängigkeit des absoluten Diskretisierungsfehlers (berechnet mit Gleichung 1 in Abschnitt 5.1.1) von der Position im THAI-Behälter dargestellt. Die Fehler werden aus der Differenz zwischen dem Netz mit 166.437 Elementen und dem Netz mit 1.188.800 Elementen berechnet. Die auftretenden Fehler liegen in einem Bereich zwischen 0,2 m/s und 1,0 m/s - je nach Position. Bei Mittellung über diese an sieben Positionen bestimmten Fehler ergibt sich ein Mittelwert von 0,54 m/s.

In Abb. 5.1-13 ist die Abhängigkeit des absoluten Diskretisierungsfehlers von der Elementzahl dargestellt. Hierbei wurde als Referenz-Netz das Netz mit 1.188.800 Elementen verwendet. Es zeigt sich, dass dieser Fehler mit zunehmender Elementzahl kleiner wurde. Aus diesem Grund wurde für alle folgenden Berechnungen das Gitter mit 1.188.800 Elementen verwendet.

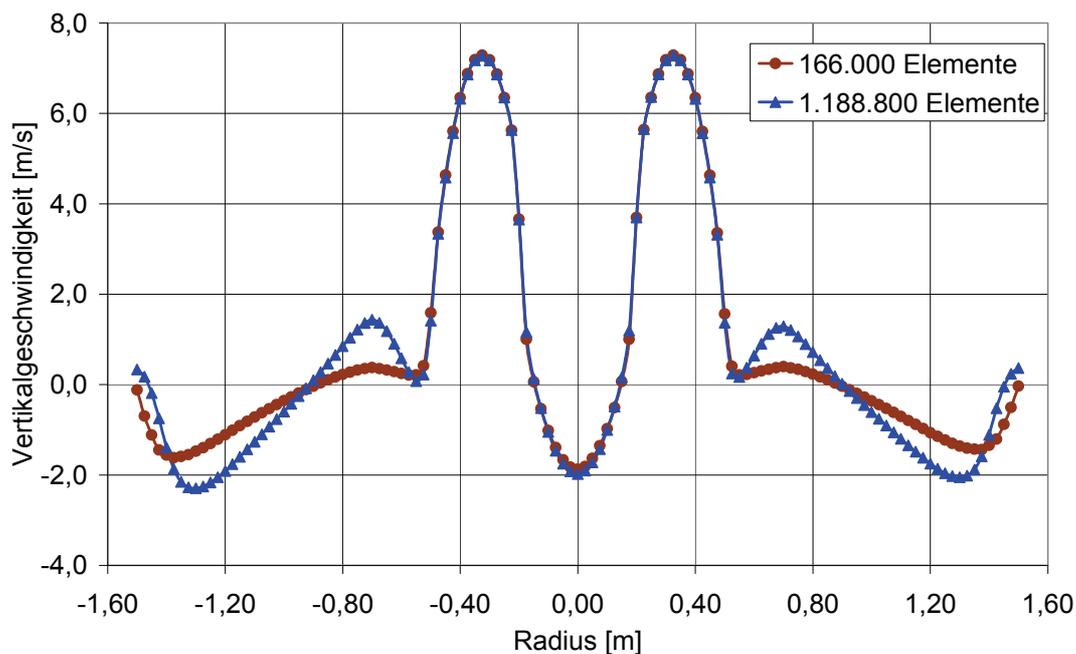


Abb. 5.1-6 Vertikalgeschwindigkeit bei 6,5 m (Rechnungen S7 und S8)

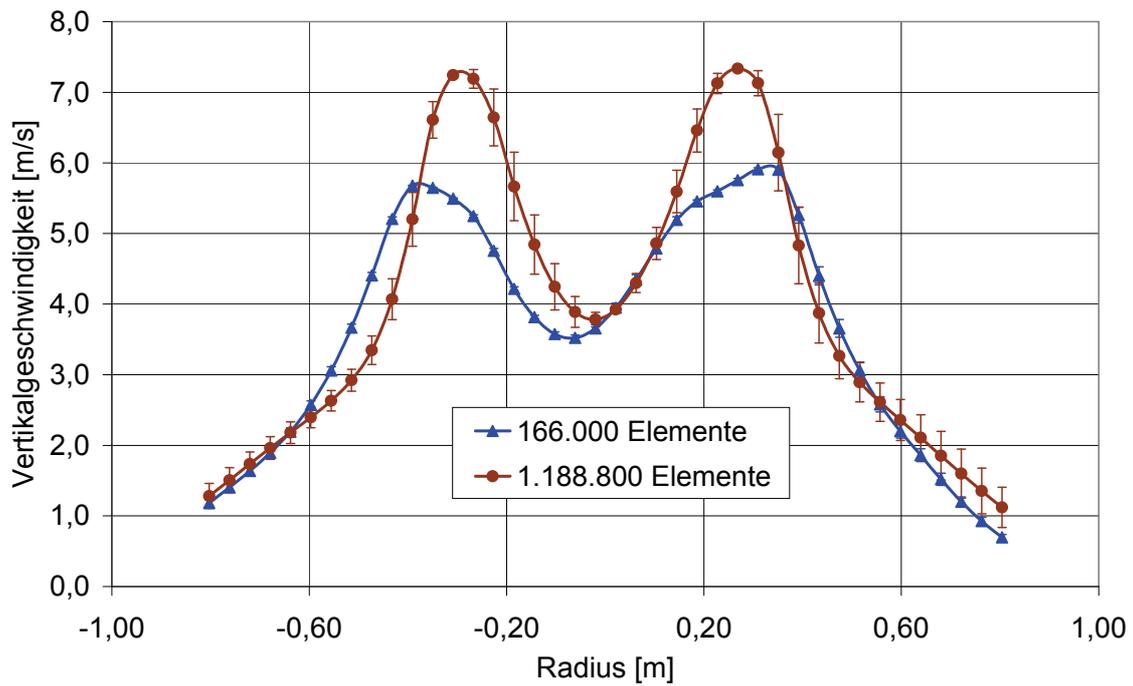


Abb. 5.1-7 Vertikalgeschwindigkeit bei 8,0 m (Rechnungen S7 und S8)

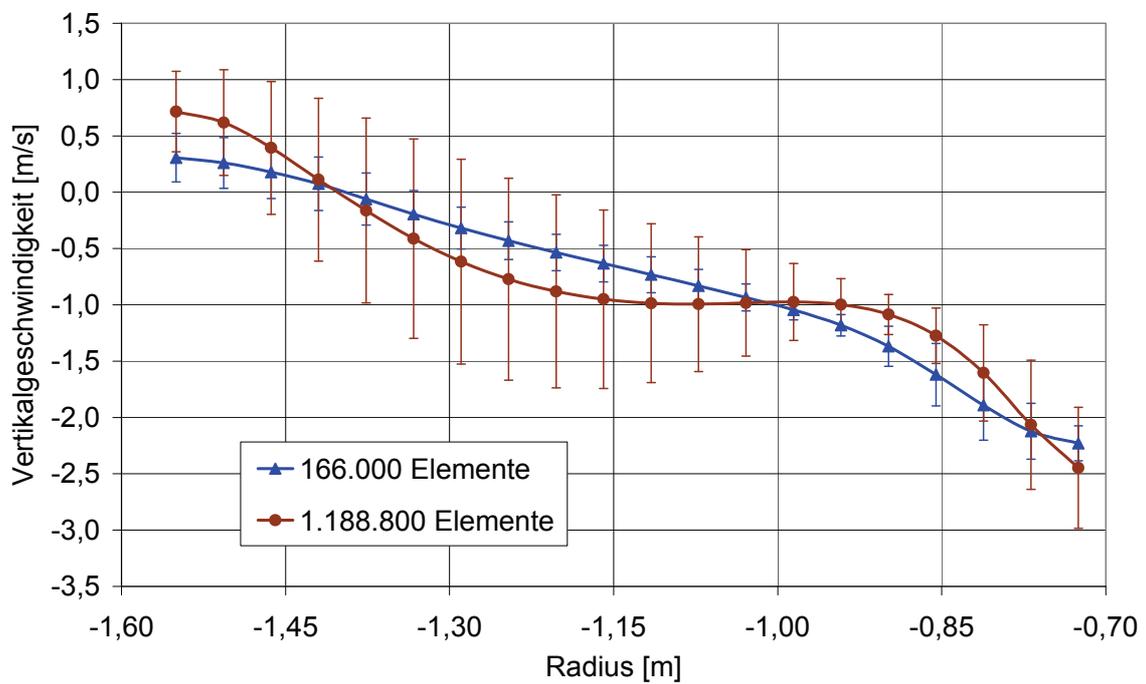


Abb. 5.1-8 Vertikalgeschwindigkeit über H (4,9 m) (Rechnungen S7 und S8)

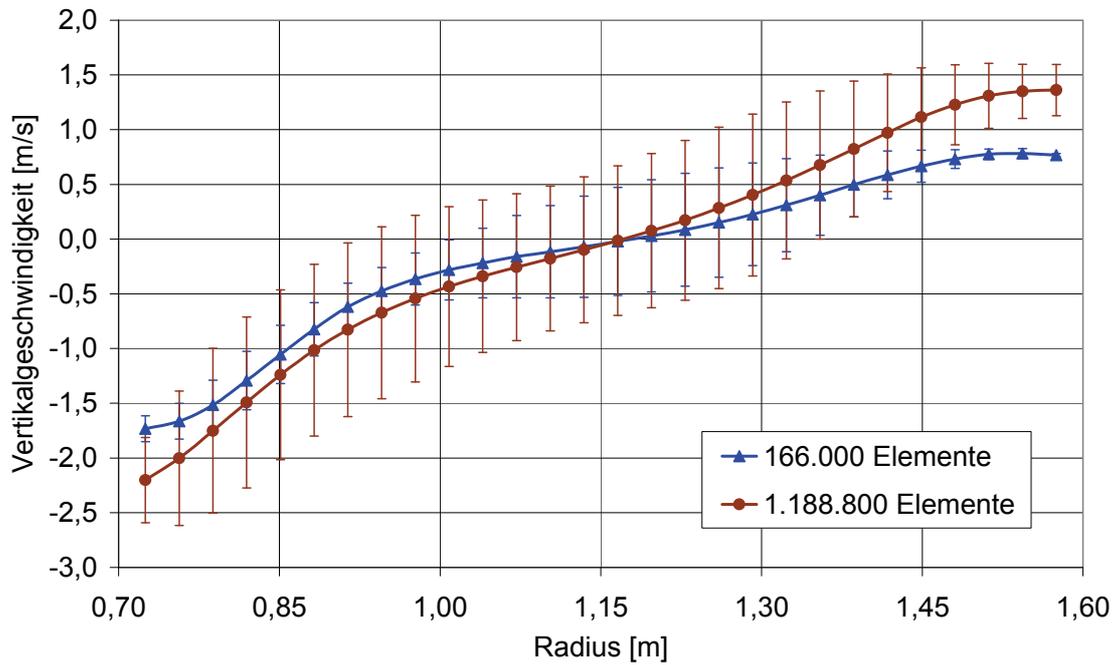


Abb. 5.1-9 Vertikalgeschwindigkeit über D (4,9 m) (Rechnungen S7 und S8)

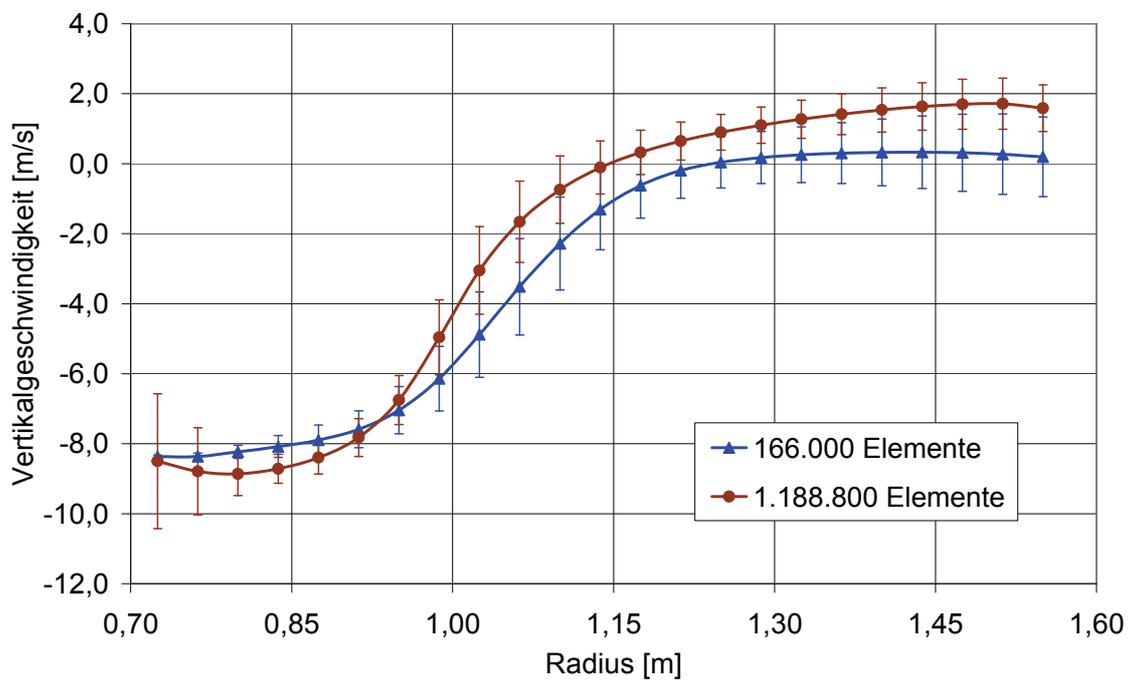


Abb. 5.1-10 Vertikalgeschwindigkeit unter D (3,5 m) (Rechnungen S7 und S8)

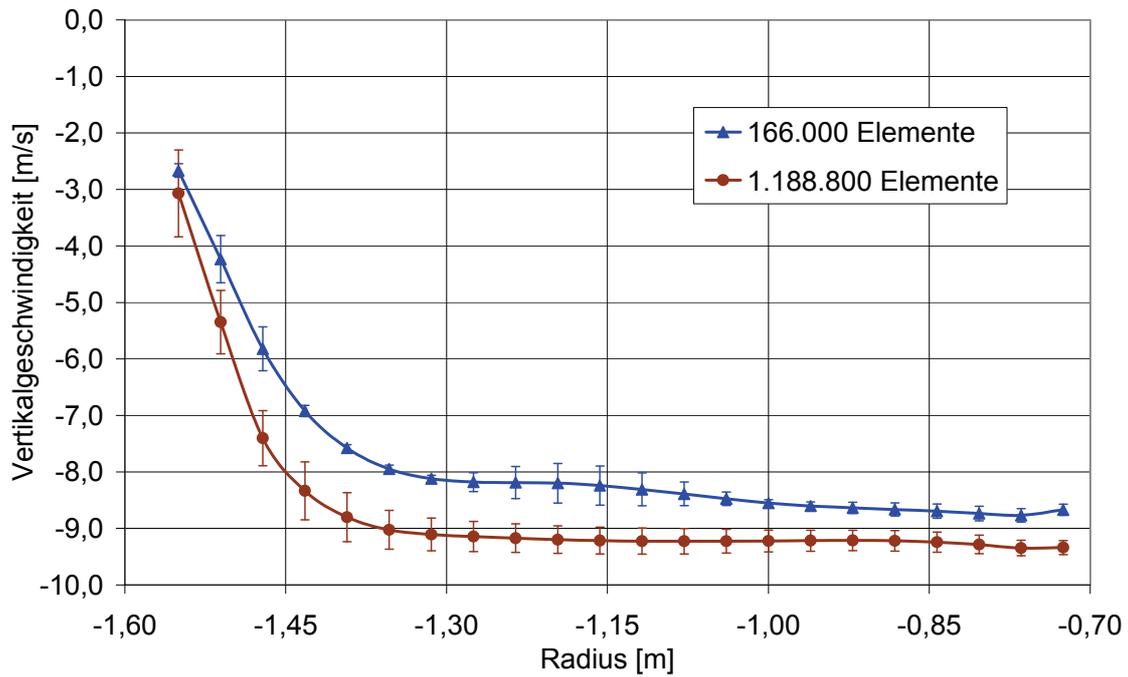


Abb. 5.1-11 Vertikalgeschwindigkeit unter H (3,5 m) (Rechnungen S7 und S8)

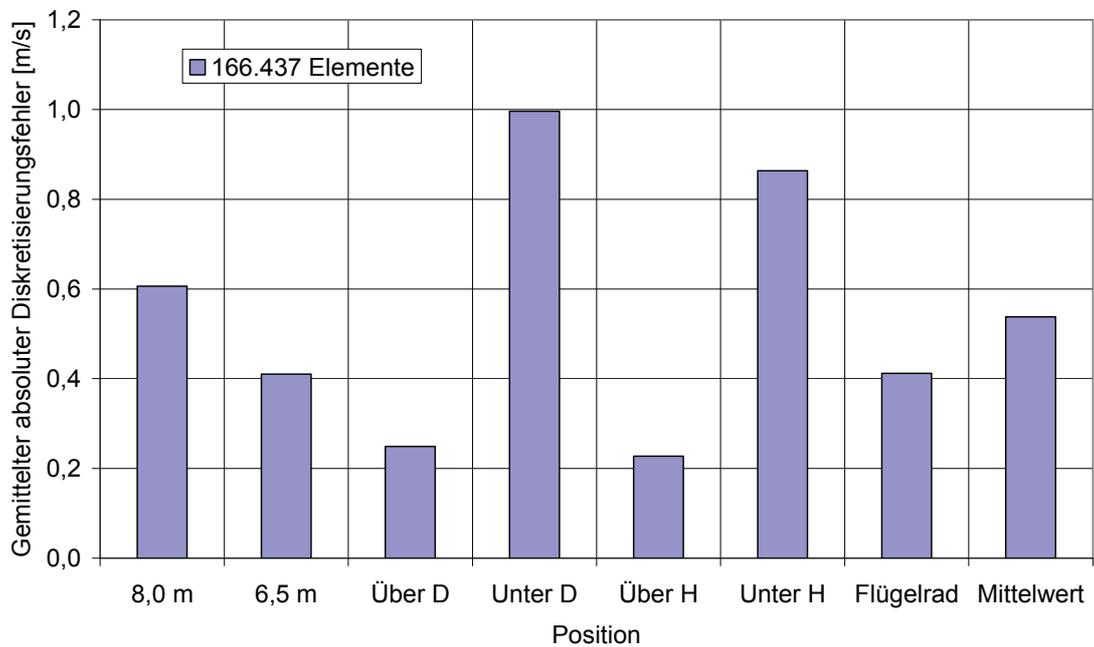


Abb. 5.1-12 Abhängigkeit des absoluten Diskretisierungsfehlers  $F_{\text{Diskret}}$  von der Position im THAI-Behälter

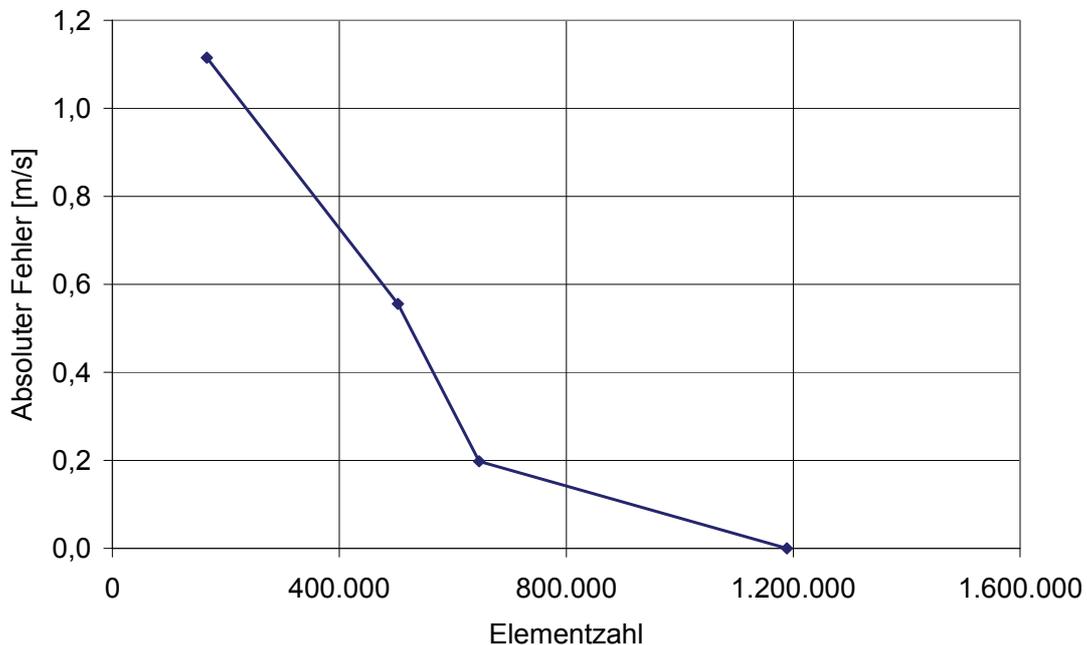


Abb. 5.1-13 Abhängigkeit des absoluten Diskretisierungsfehlers  $F_{\text{Diskret}}$  von der Elementzahl  $N_{\text{Element}}$

### 5.1.5 Vergleich der CFD-Simulationen mit experimentellen Daten

Im Folgenden werden die berechneten Vertikalgeschwindigkeiten mit den experimentell gemessenen Werten verglichen. Hierzu wurde die Simulation S9 verwendet (1.188.800 Elemente, SST-Modell, 5 % Turbulenzintensität am Inlet, GRS-Profil, siehe Tab. 5.1-3).

In den Abb. 5.1-14 bis Abb. 5.1-19 sind für alle Zielgrößen die Vertikalgeschwindigkeiten gegen den Radius aufgetragen. Dabei werden jeweils der experimentelle Geschwindigkeitsverlauf und der mit CFX berechnete Geschwindigkeitsverlauf dargestellt. Die Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation ist nahe dem Gebläseaustritt am besten (Abb. 5.1-14) und wurde mit zunehmender Entfernung vom Gebläseaustritt insbesondere unter den Überströmöffnungen D und H schlechter (siehe z. B. Abb. 5.1-19). In den folgenden Abschnitten werden diese Unterschiede zwischen Experiment und Simulation genauer untersucht und quantifiziert. Weiterhin wurde versucht, durch Parameter- und Modellvariationen die Unterschiede zu minimieren.

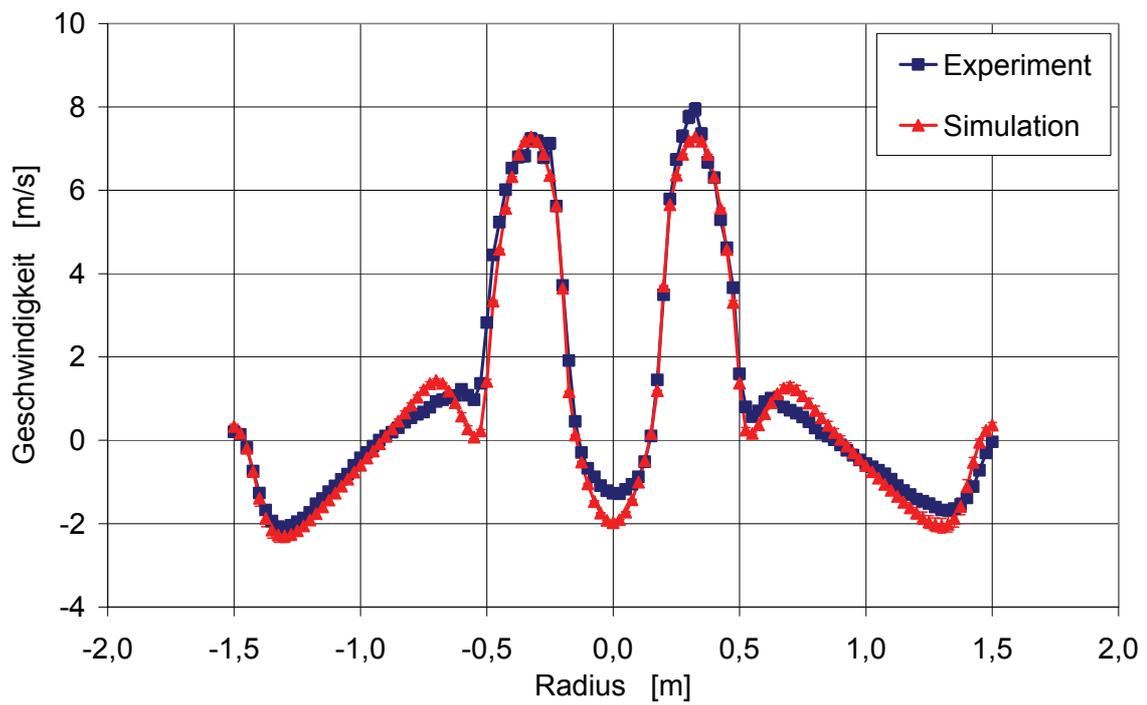


Abb. 5.1-14 Vertikalgeschwindigkeit bei 6,5 m (Rechnung S9)

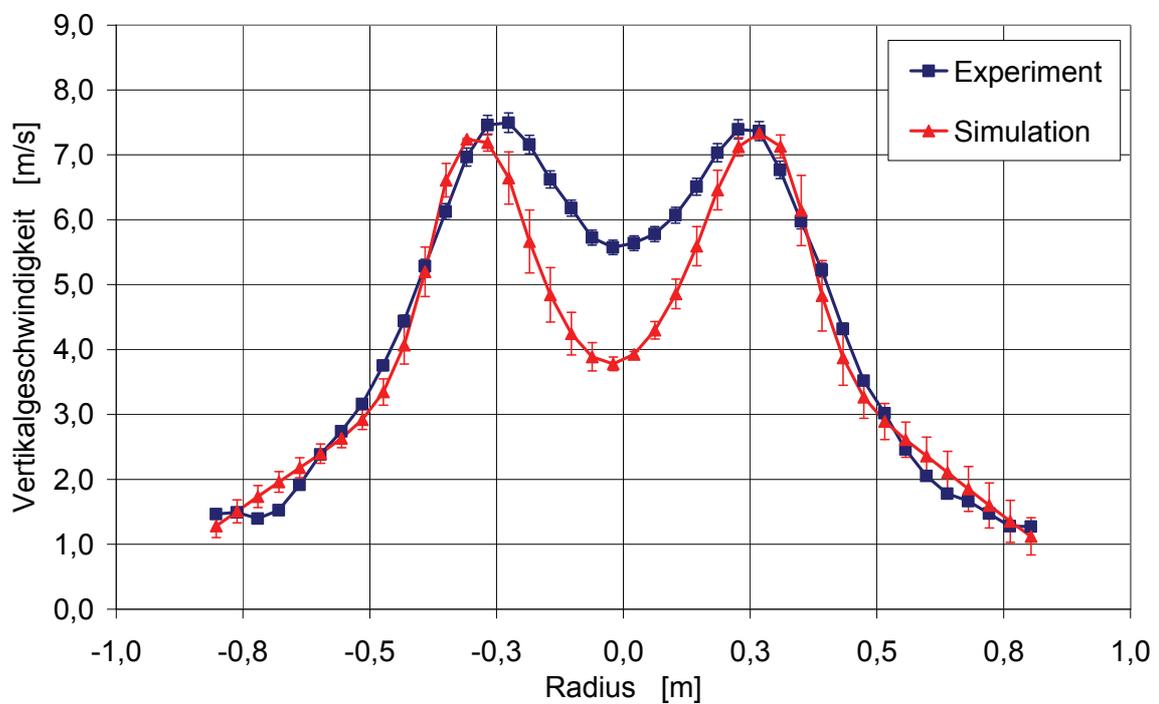


Abb. 5.1-15 Vertikalgeschwindigkeit bei 8,0 m (Rechnung S9)

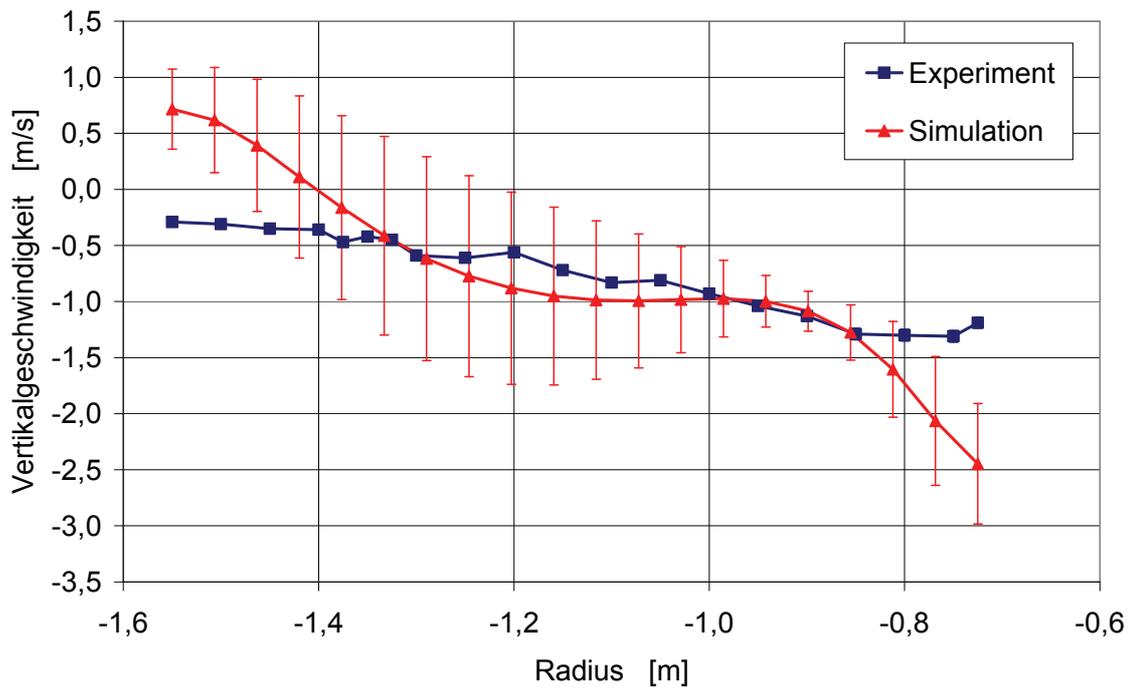


Abb. 5.1-16 Vertikalgeschwindigkeit über H (4,9 m) (Rechnung S9)

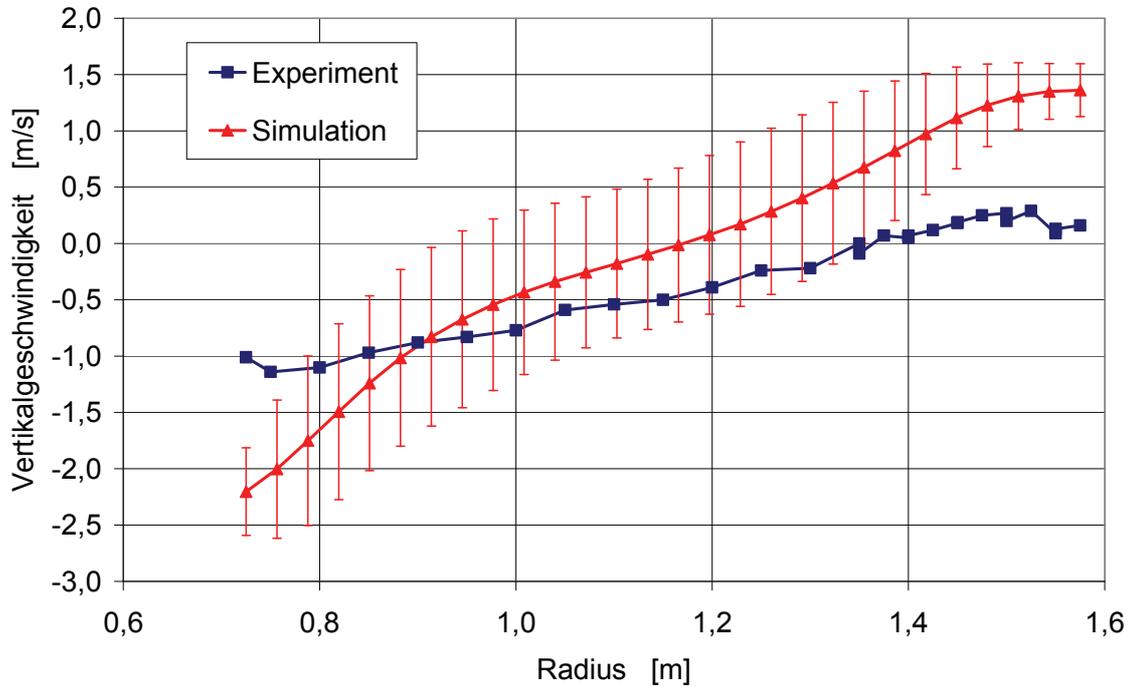


Abb. 5.1-17 Vertikalgeschwindigkeit über D (4,9 m) (Rechnung S9)

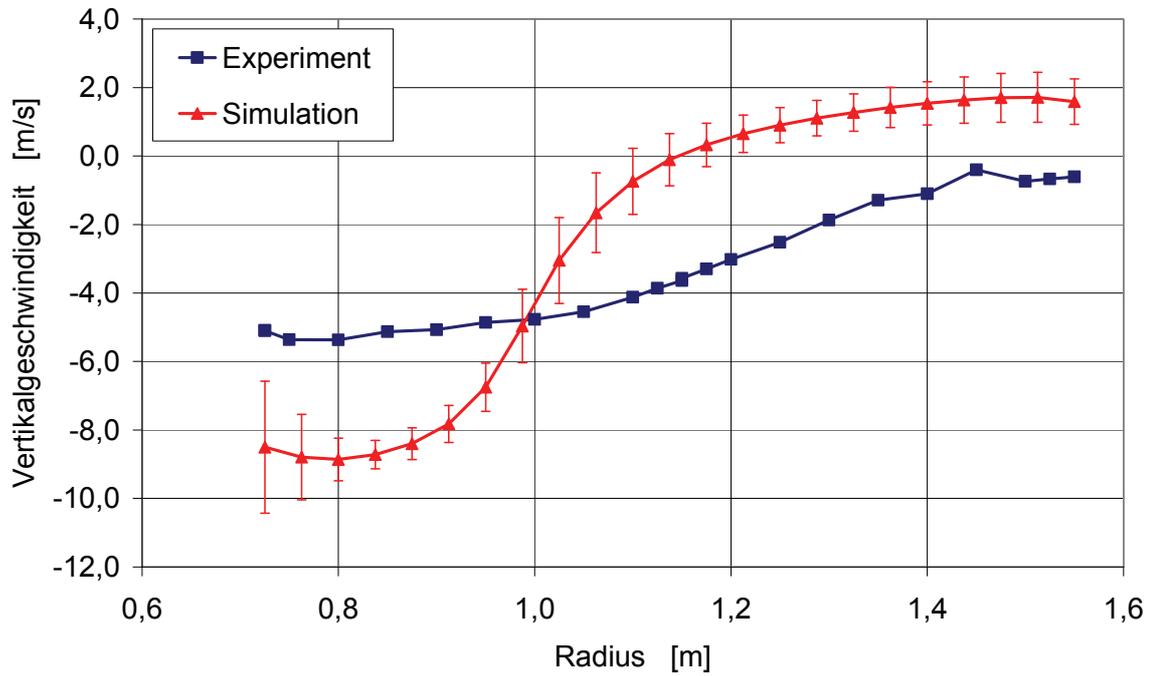


Abb. 5.1-18 Vertikalgeschwindigkeit unter D (3,5 m) (Rechnung S9)

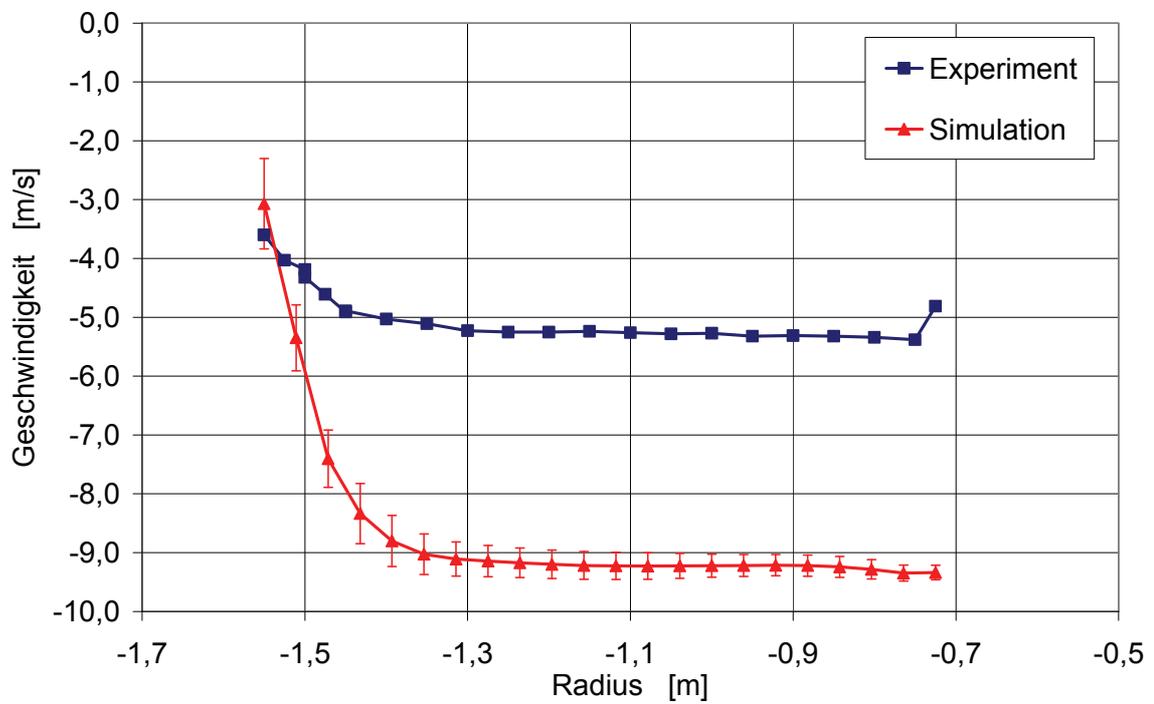


Abb. 5.1-19 Vertikalgeschwindigkeit unter H (3,5 m) (Rechnung S9)

### 5.1.6 Einfluss der Turbulenzintensität am Gebläseaustritt

Um den Einfluss der Turbulenzintensität am Gebläseaustritt zu bestimmen, werden zwei Berechnungen mit Intensitäten von 5 % und 10 % durchgeführt (Berechnungen S9 und S10 aus Tab. 5.1-3). Dabei werden jeweils ein Gitter mit 1.188.800 Elementen und das SST-Turbulenzmodell verwendet. Die Ergebnisse sind in Abb. 5.1-20 bis Abb. 5.1-25 dargestellt. Unmittelbar oberhalb des Gebläses sind kaum Unterschiede in der Geschwindigkeitsverteilung zu erkennen (siehe Abb. 5.1-20). In 8,0 m Höhe sowie ober- und unterhalb der Öffnung D sind kleinere Unterschiede zu erkennen (siehe Abb. 5.1-21 bis Abb. 5.1-23). Die größten Unterschiede zwischen beiden Berechnungen gibt es ober- und unterhalb der Öffnung H. Hier zeigt sich eine bessere Übereinstimmung der Berechnung mit 5 % Turbulenzintensität mit den experimentellen Ergebnissen im Vergleich zur Berechnung mit 10 % Intensität, insbesondere was die Ähnlichkeit des Kurvenverlaufs betrifft (siehe Abb. 5.1-24 und Abb. 5.1-25).

Die unten beschriebenen Beobachtungen spiegeln sich auch in dem gemittelten absoluten Modellfehler und im Korrelationskoeffizienten wieder (siehe Abb. 5.1-26 und Abb. 5.1-27). Beide Berechnungen zeigen ähnliche absolute Modellfehler (1,23 m/s bzw. 1,24 m/s), allerdings hat die Berechnung mit 5 % Turbulenzintensität einen deutlich besseren mittleren Korrelationskoeffizienten ( $R = 0,92$ ) im Vergleich zur Berechnung mit 10 % Turbulenzintensität ( $R = 0,86$ ). Dieser Unterschied ist hauptsächlich durch die Unterschiede im Bereich der Öffnung H zu erklären. Dieses ist der Bereich, der insgesamt noch die größte Abweichung zum Experiment aufweist. Für die folgenden Berechnungen wurde aufgrund der vorliegenden Ergebnisse mit einer Turbulenzintensität von 5 % gerechnet.

Tab. 5.1-5 Kennwerte zur Charakterisierung der Modellfehler

<b>Turbulenzintensität am Gebläseaustritt</b>	<b>Mittlerer absoluter Modellfehler <math>F_{\text{Modell}}</math></b>	<b>Mittlerer Korrelationskoeffizient R</b>
5 %	1,23 m/s	0,92
10 %	1,24 m/s	0,86

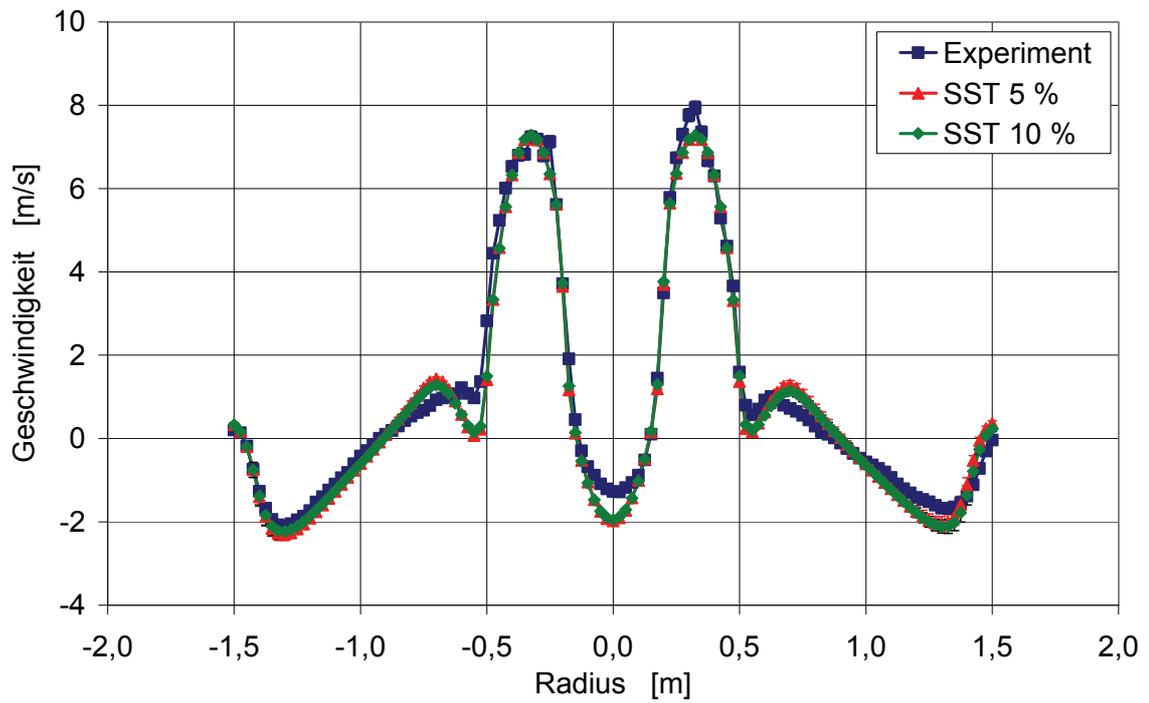


Abb. 5.1-20 Vertikalgeschwindigkeit bei 6,5 m (Rechnung S9 und S10)

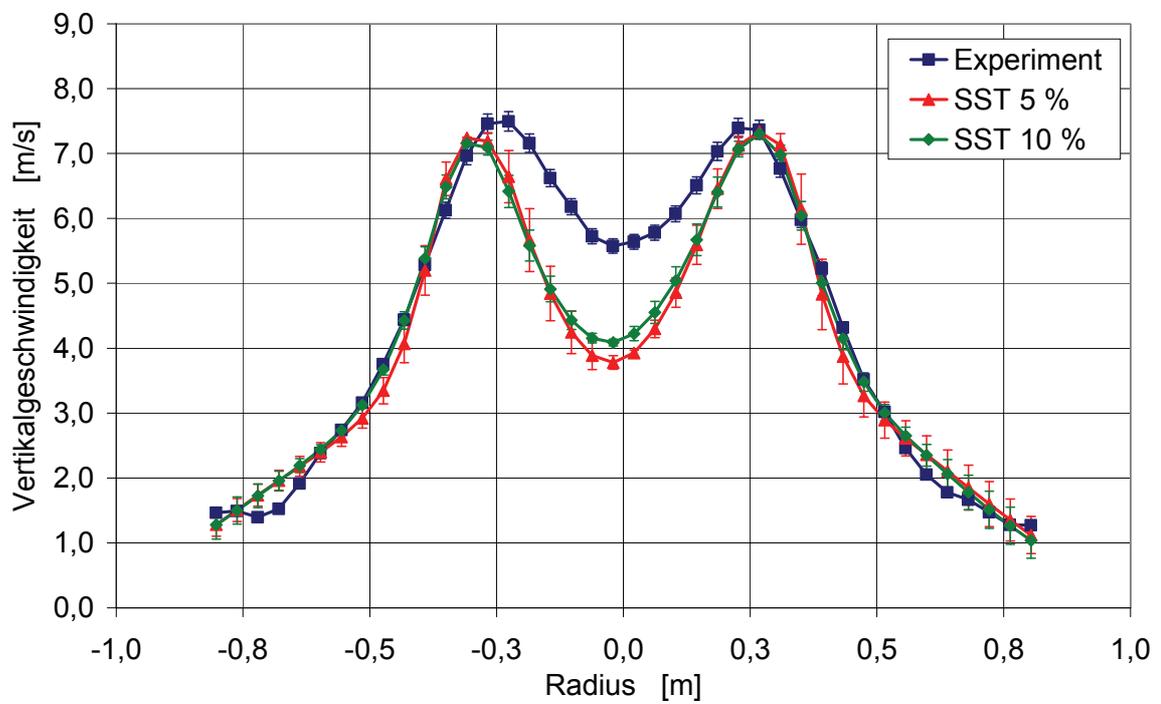


Abb. 5.1-21 Vertikalgeschwindigkeit bei 8,0 m (Rechnung S9 und S10)

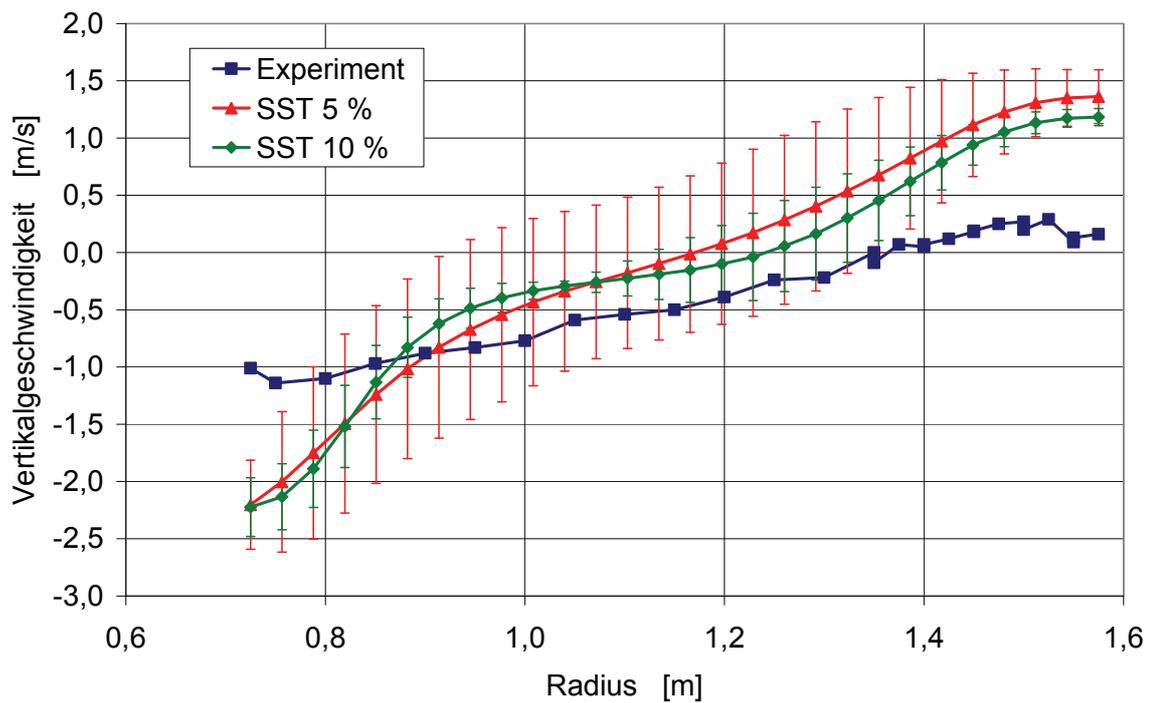


Abb. 5.1-22 Vertikalgeschwindigkeit über D (4,9 m) (Rechnung S9 und S10)

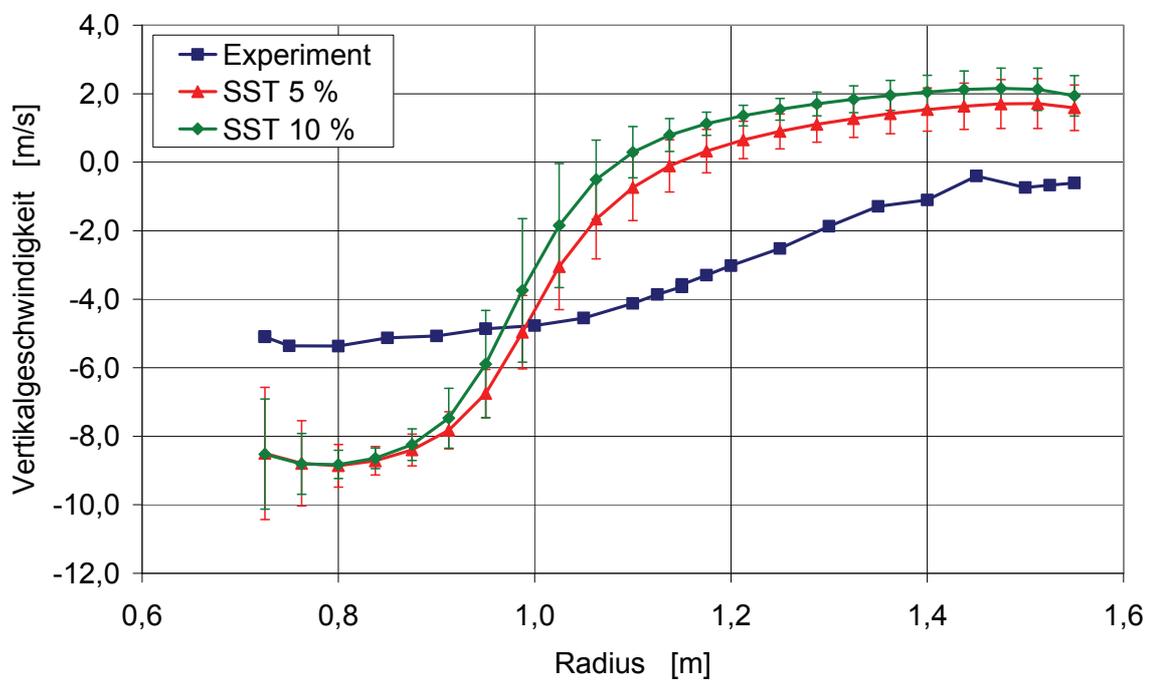


Abb. 5.1-23 Vertikalgeschwindigkeit unter D (3,5 m) (Rechnung S9 und S10)

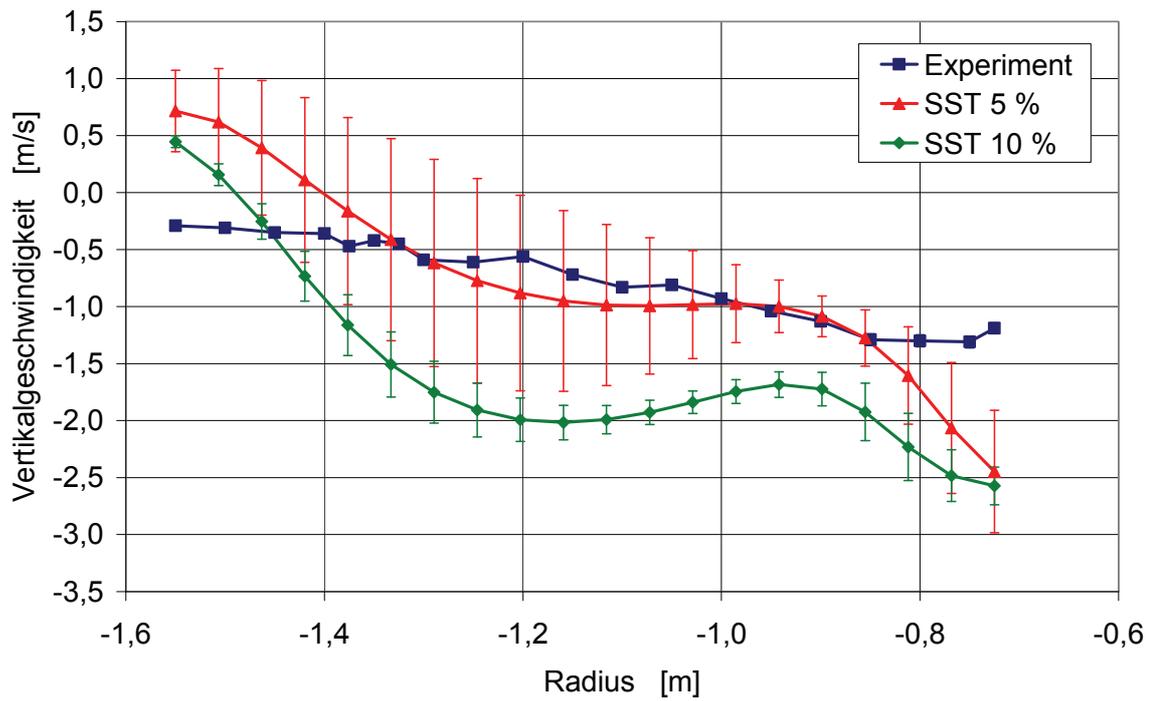


Abb. 5.1-24 Vertikalgeschwindigkeit über H (4,9 m) (Rechnung S9 und S10)

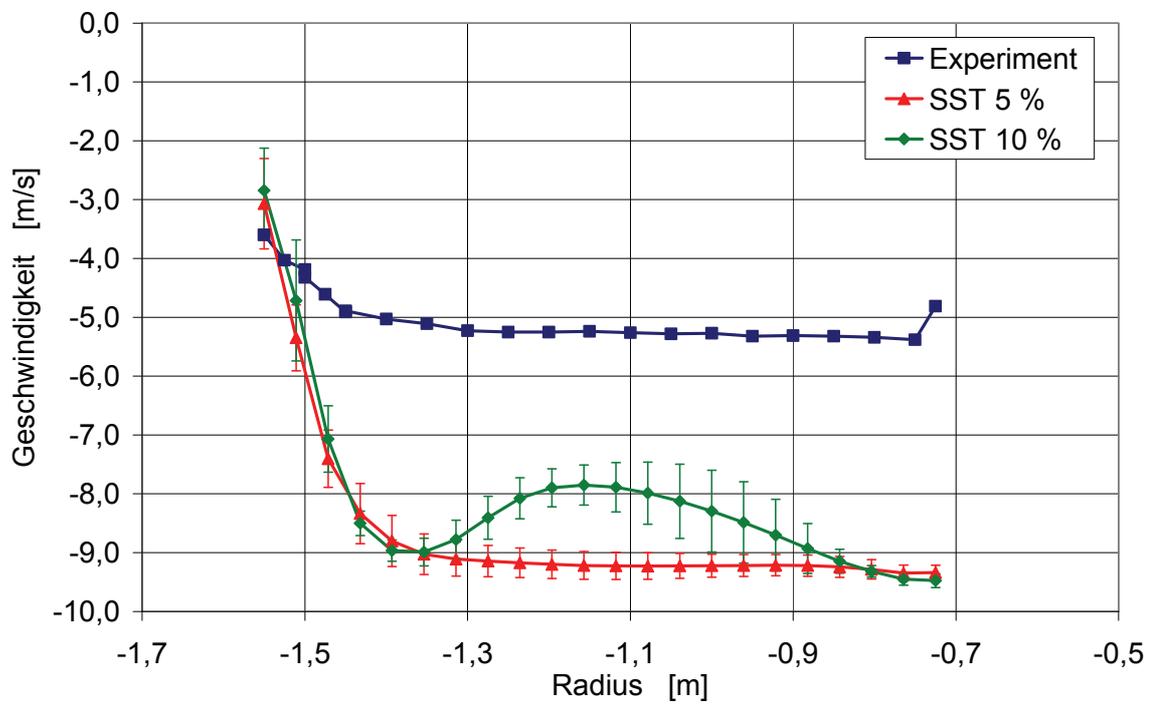


Abb. 5.1-25 Vertikalgeschwindigkeit unter H (3,5 m) (Rechnung S9 und S10)

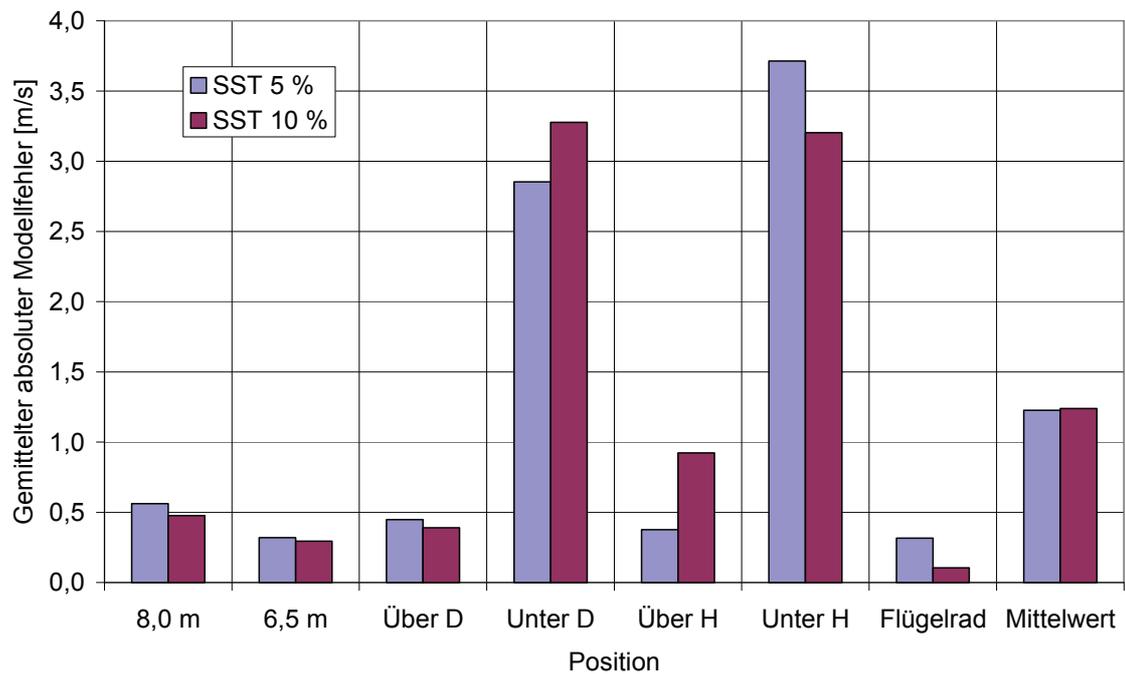


Abb. 5.1-26 Abhängigkeit des absoluten Modellfehlers  $F_{\text{Modell}}$  von der Turbulenzintensität am Gebläseaustritt

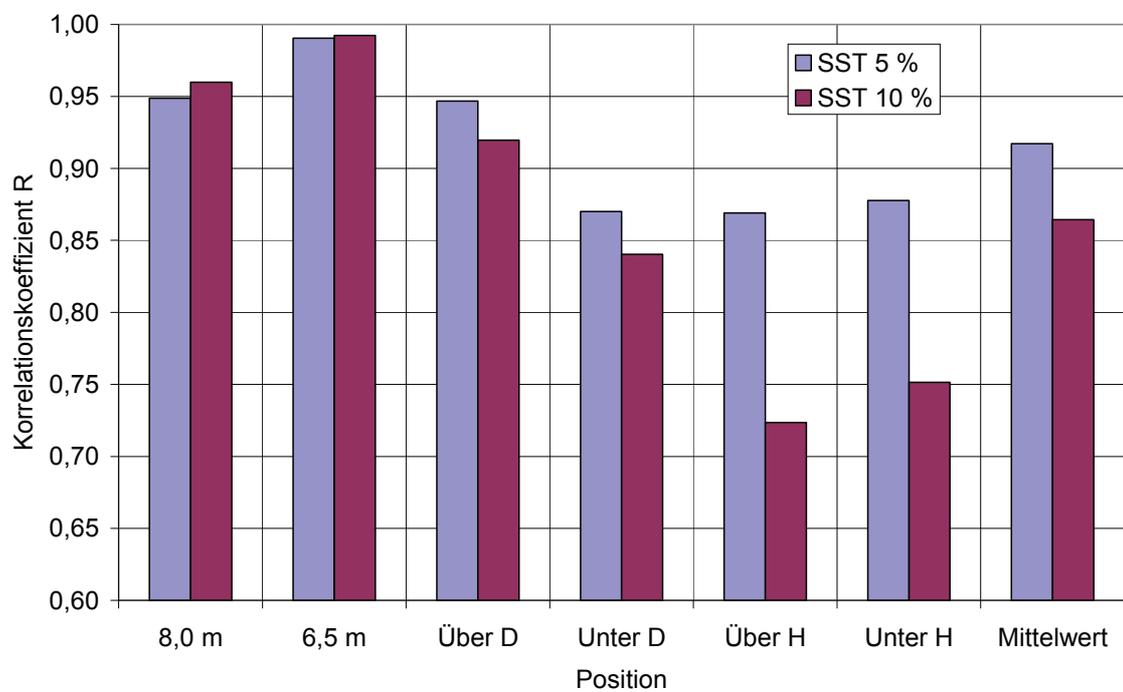


Abb. 5.1-27 Abhängigkeit des Korrelationskoeffizient R von der Turbulenzintensität am Gebläseaustritt

### 5.1.7 Einfluss des Turbulenzmodells

Im Folgenden werden die berechneten Zielgrößen (siehe Tab. 5.1-1) für die unterschiedlichen Turbulenzmodelle mit den experimentellen Daten verglichen. Dazu wurden die Berechnungen S8, S9 und S11 durchgeführt, die das  $k$ - $\epsilon$ -Modell, das SST-Modell und das SSG-Reynolds-Stress-Modell verwenden.

In Abb. 5.1-28 bis Abb. 5.1-34 sind jeweils die Vertikalgeschwindigkeiten gegen den Radius aufgetragen. Dabei werden der experimentelle Geschwindigkeitsverlauf und der mit CFX berechnete Geschwindigkeitsverlauf gegenübergestellt. Es zeigt sich, dass die Unterschiede der einzelnen Turbulenzmodelle untereinander eher klein sind. Die Streuung der Geschwindigkeitsverteilungen um ihren Mittelwert ist am stärksten für das SSG-Modell und am kleinsten für das  $k$ - $\epsilon$ -Modell.

In Abb. 5.1-28 und Abb. 5.1-29 sind die Geschwindigkeitsverteilungen bei 6,5 m und 8,0 m dargestellt. Hier zeigen sich geringe Unterschiede zwischen den Turbulenzmodellen. In Abb. 5.1-30 und Abb. 5.1-31 sind die Geschwindigkeiten über den Öffnungen D und H dargestellt. Es zeigt sich hier, dass das SSG-Reynolds-Stress-Modell den Verlauf der Geschwindigkeitsverteilung besser wiedergeben kann als das  $k$ - $\epsilon$ - und das SST-Modell. Unterhalb der Öffnungen D und H sind zwar Unterschiede zwischen den Turbulenzmodellen vorhanden, es kann jedoch kein Modell als signifikant besser als die anderen bezeichnet werden (siehe Abb. 5.1-32, Abb. 5.1-33).

Ein Vergleich der Simulationsdaten mit der Flügelradmessung im Innenzylinder zeigt, dass durch das SSG-Modell der experimentelle Geschwindigkeitswert besser getroffen wurde als durch die anderen Turbulenzmodelle (siehe Abb. 5.1-34).

In Abb. 5.1-35 ist dargestellt, wie der absolute Modellfehler an verschiedenen Positionen vom Turbulenzmodell abhängt. Hier zeigt sich für alle Modelle ein ähnliches Verhalten, im Mittel hat jedoch das SSG-Modell den kleinsten absoluten Modellfehler mit 1,08 m/s. Die genauen Mittelwerte der verschiedenen Modelle finden sich in Tab. 5.1-6.

In Abb. 5.1-36 zeigt die Abhängigkeit des Korrelationskoeffizienten vom Turbulenzmodell. Hier zeigt sich, dass das SSG-Modell die experimentellen Werte besser wieder-

gibt. Das bedeutet, dass der qualitative Kurvenverlauf der experimentellen Daten durch dieses Modell besser wiedergegeben wurde ( $R = 0,95$ ).

Tab. 5.1-6 Kennwerte zur Charakterisierung der Modellfehler

Turbulenzmodell	Mittlerer absoluter Modellfehler $F_{\text{Modell}}$	Mittlerer Korrelationskoeffizient $R$
k- $\epsilon$	1,23 m/s	0,91
SST	1,23 m/s	0,92
SSG Reynolds Stress	1,08 m/s	0,95

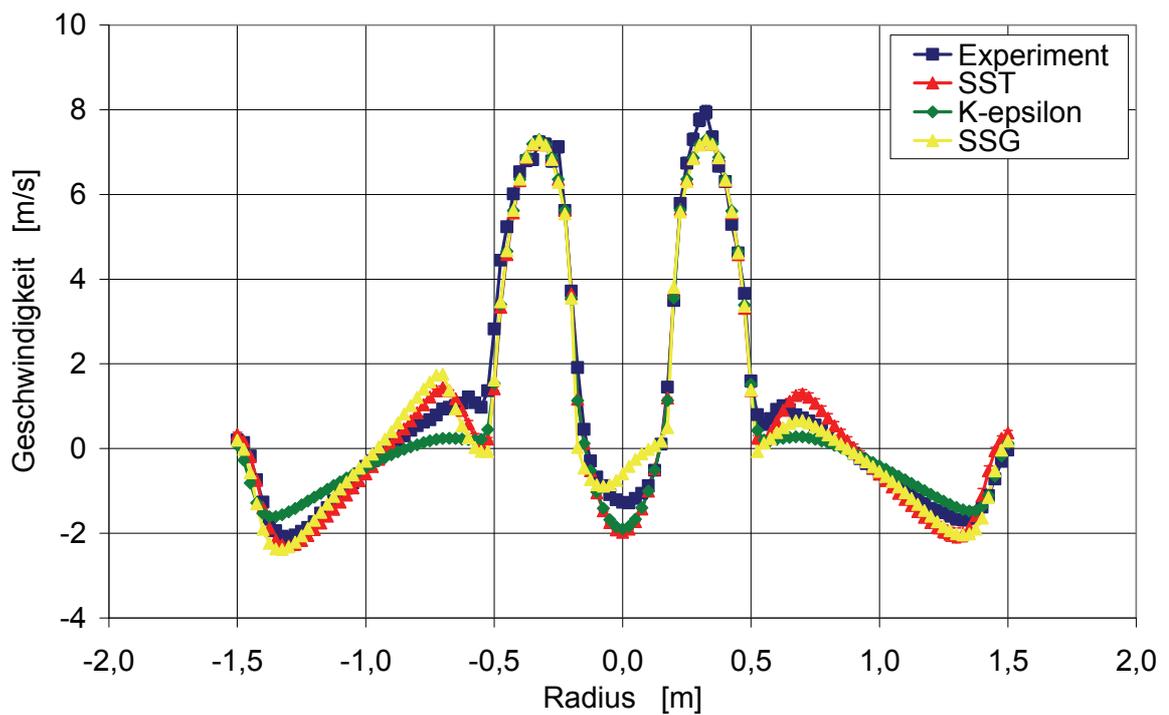


Abb. 5.1-28 Vertikalgeschwindigkeit bei 6,5 m (Rechnungen S8, S9 und S11)

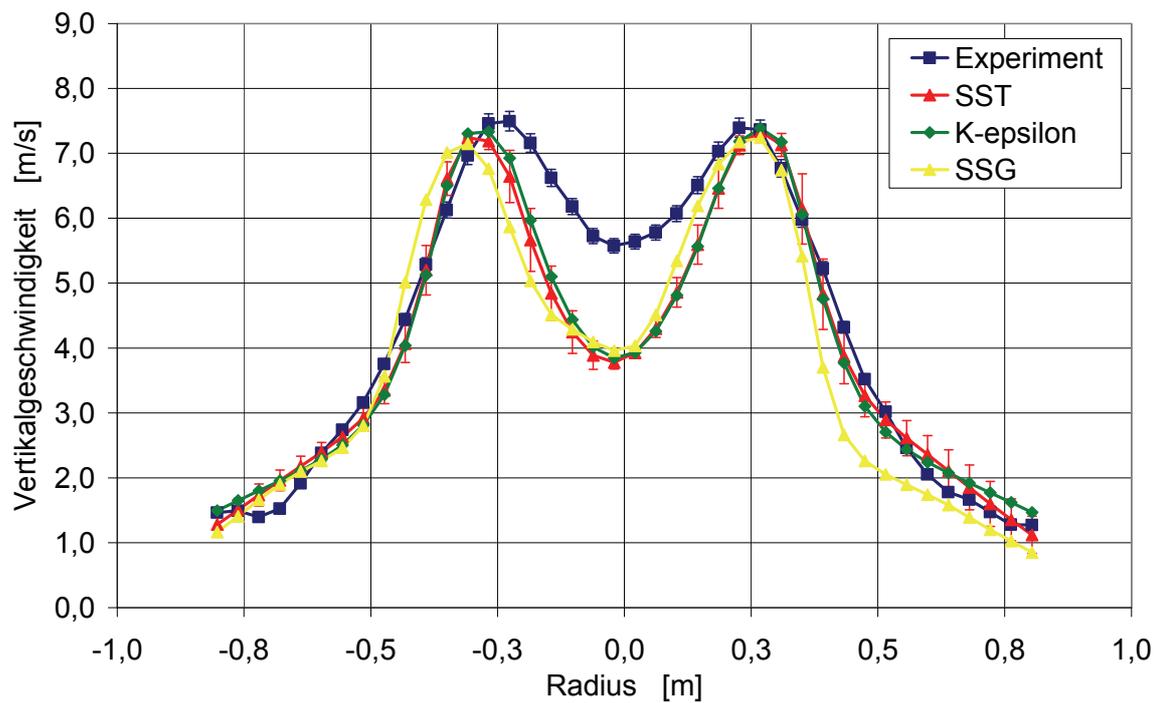


Abb. 5.1-29 Vertikalgeschwindigkeit bei 8,0 m (Rechnungen S8, S9 und S11)

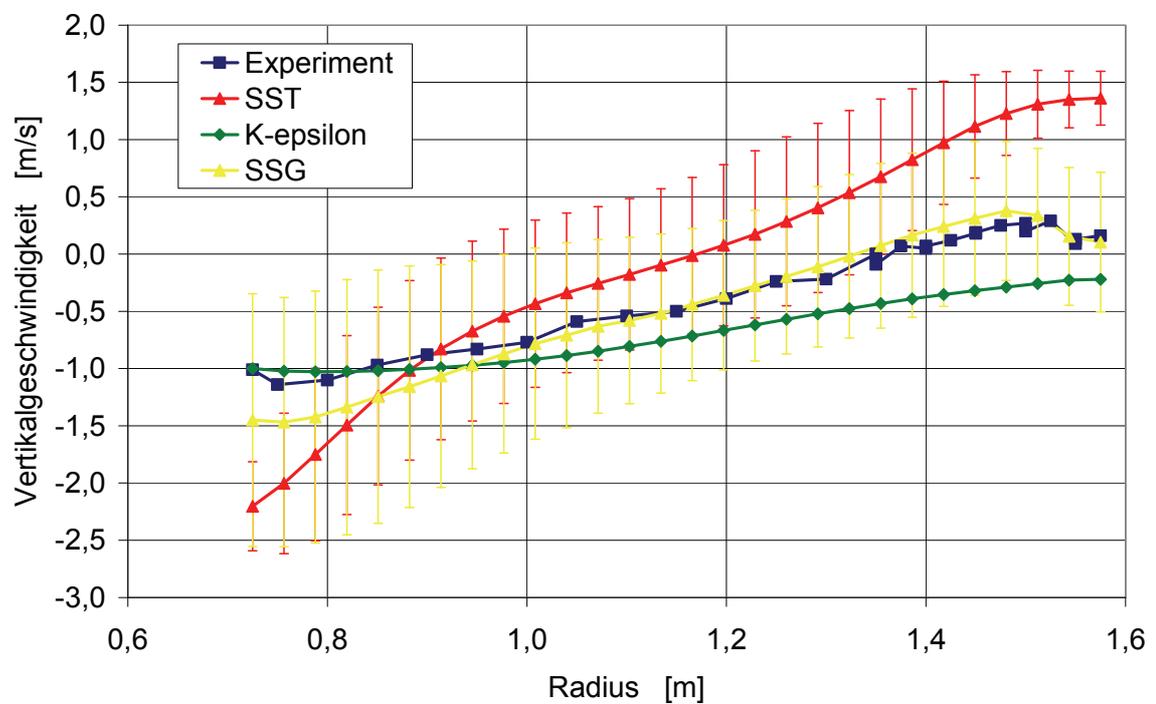


Abb. 5.1-30 Vertikalgeschwindigkeit über D (4,9 m) (Rechnungen S8, S9 und S11)

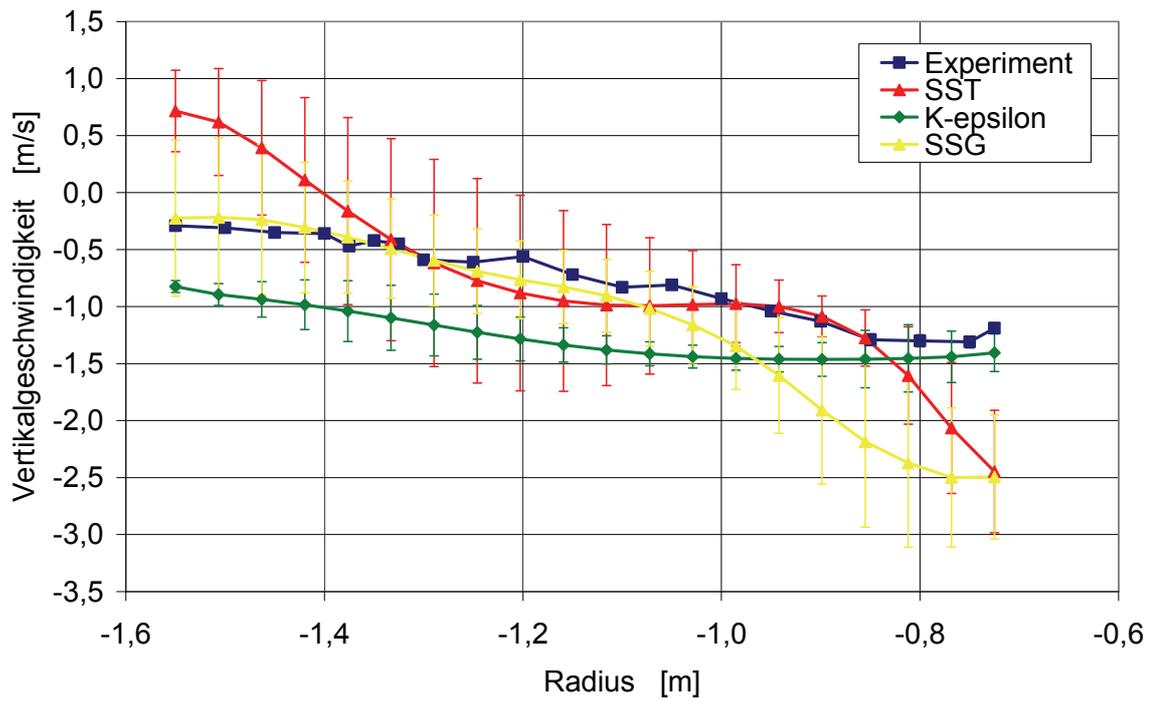


Abb. 5.1-31 Vertikalgeschwindigkeit über H (4,9 m) (Rechnungen S8, S9 und S11)

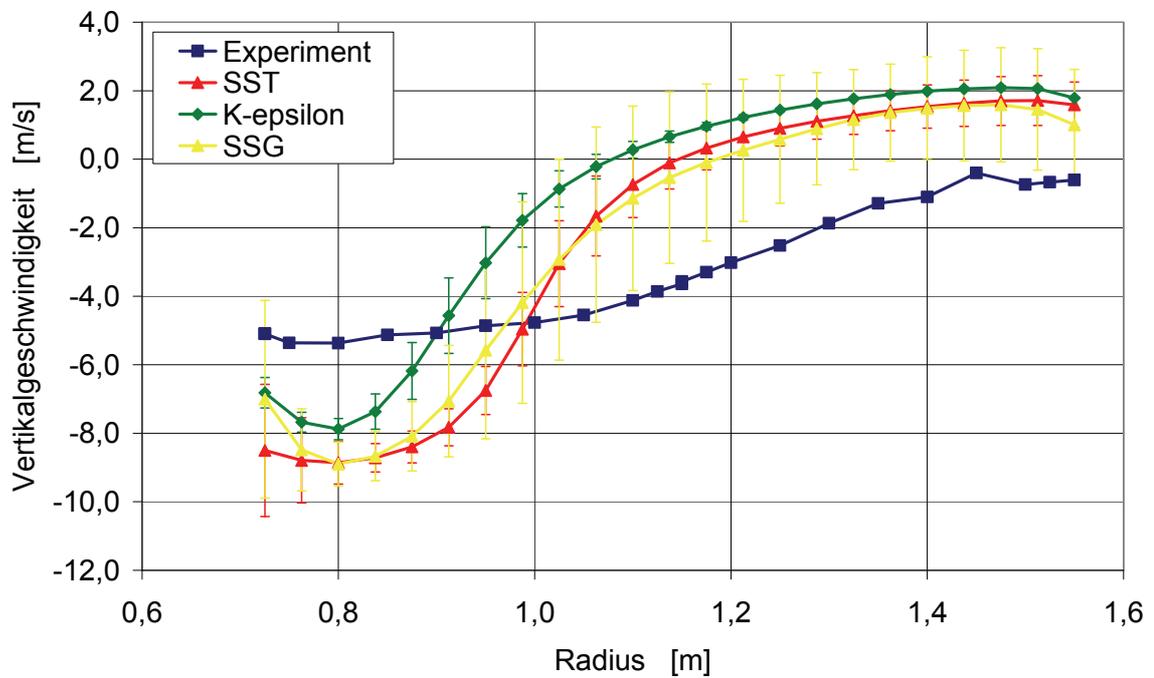


Abb. 5.1-32 Vertikalgeschwindigkeit unter D (3,5 m) (Rechnungen S8, S9 und S11)

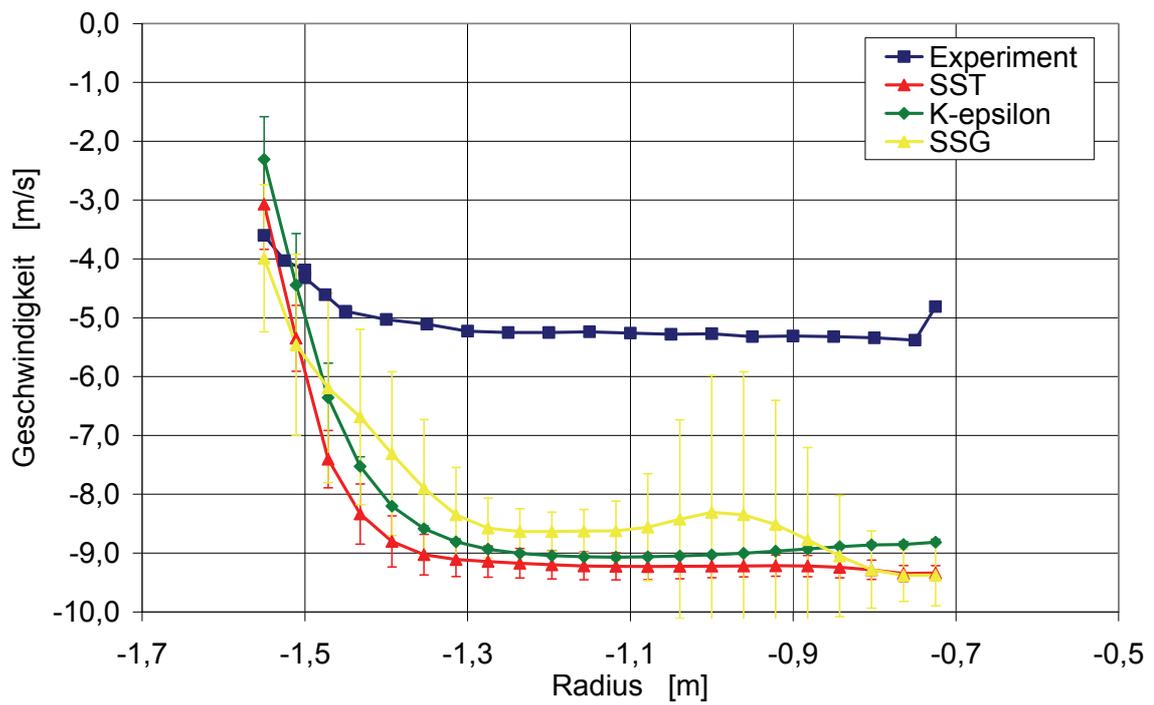


Abb. 5.1-33 Vertikalgeschwindigkeit unter H (3,5 m) (Rechnungen S8, S9 und S11)

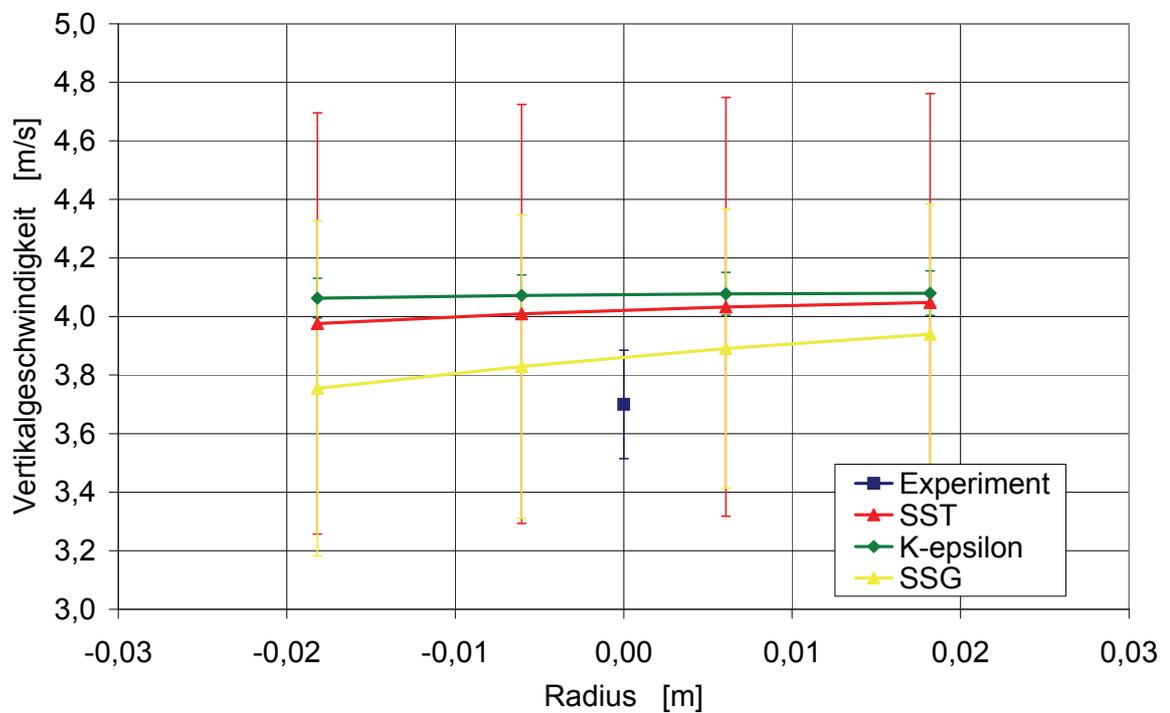


Abb. 5.1-34 Flügelradmessung im Innenzylinder (Rechnungen S8, S9 und S11)

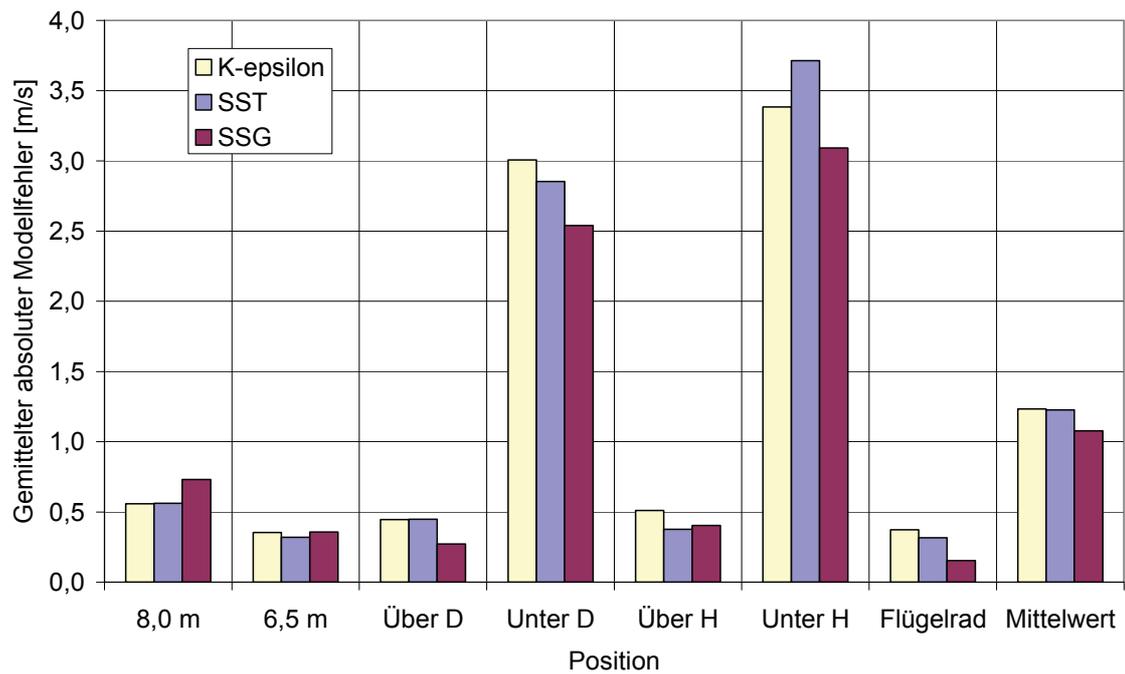


Abb. 5.1-35 Abhängigkeit des absoluten Modellfehlers  $F_{\text{Modell}}$  vom Turbulenzmodell

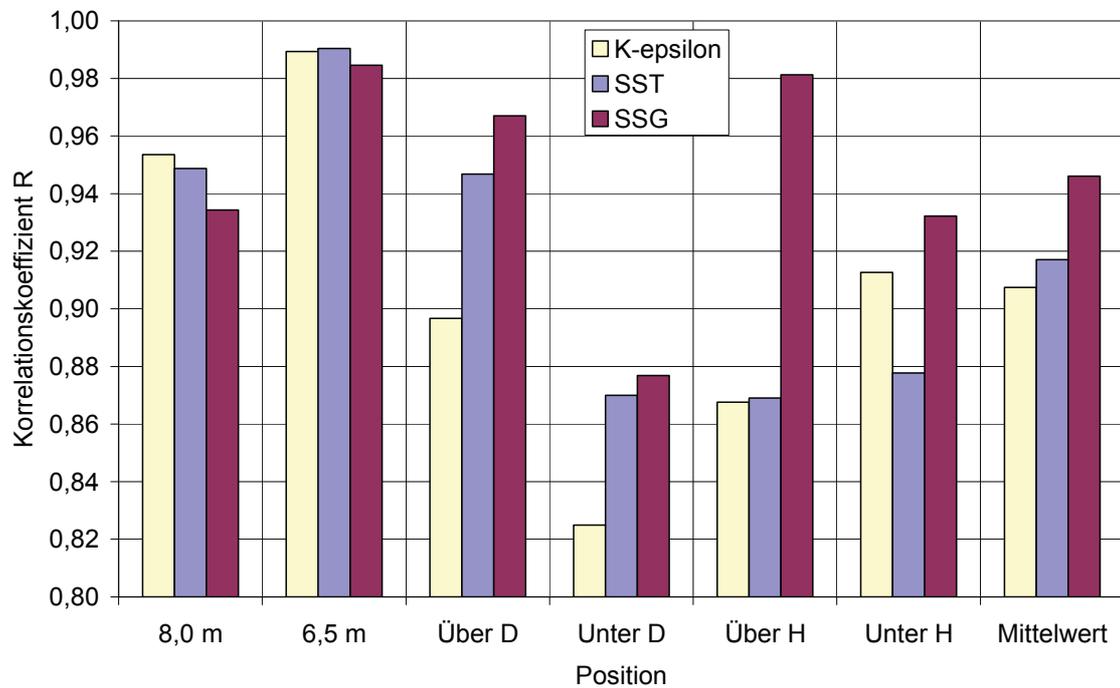


Abb. 5.1-36 Abhängigkeit des Korrelationskoeffizient R vom Turbulenzmodell

### 5.1.8 Druckdifferenz über die Kondensatwanne

In Abb. 5.1-37 ist die Druckdifferenz über die Kondensatwanne dargestellt. Alle Simulationen ergeben, unabhängig vom Turbulenzmodell, eine mittlere Druckdifferenz von etwa 50 Pa. Diese berechnete Differenz ist deutlich höher als die im Experiment gemessene Druckdifferenz von 30 Pa. Woher dieser Unterschied kommt ist unklar. Es gab jedoch Hinweise, dass bei der experimentellen Untersuchung möglicherweise Fehler bei der Messung der Druckdifferenz über die Kondensatwanne aufgetreten sind.

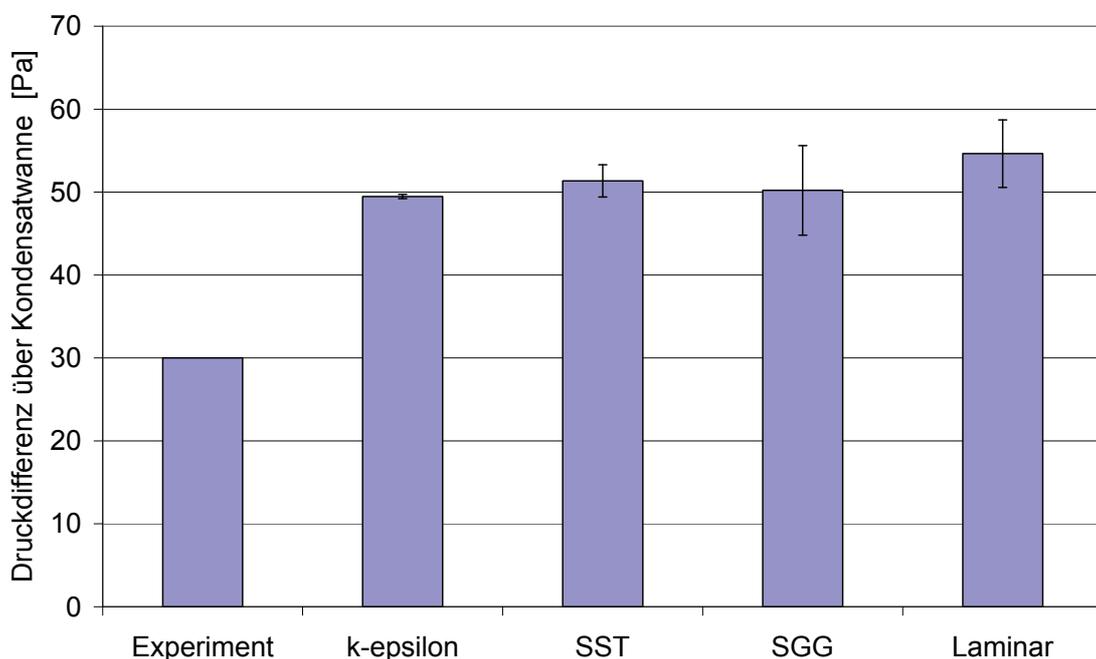


Abb. 5.1-37 Vergleich des simulierten und gemessenen Druckverlaufs über die Kondensatwanne

### 5.1.9 Untersuchung der Rechenzeiten

Um den Einfluss der Zahl der in der Simulation verwendeten Elemente auf die benötigte Rechenzeit zu ermitteln, werden drei bis auf die verwendete Elementzahl des Gitters identische Simulationen durchgeführt. Hierbei werden 166.437, 825.382 und 1.393.418 Elemente verwendet (Simulationen S1 bis S3 in Tab. 5.1-3). In Abb. 5.1-38 ist die Rechenzeit in CPU-Tagen gegen die Elementzahl aufgetragen. Es zeigt sich, dass die Rechenzeit annähernd linear mit der Zahl der verwendeten Elemente ansteigt. Für das feinste Gitter ergibt sich eine Rechenzeit von etwa 35 CPU-Tagen.

In Abb. 5.1-39 ist der Einfluss des verwendeten Turbulenzmodells auf die Rechenzeit dargestellt (Rechnungen S1, S4, S5 und S6 in Tab. 5.1-3). Hierbei zeigt sich, dass die Berechnung mit dem SSG-Reynolds-Stress-Modell und die laminare Berechnung deutlich mehr Rechenzeit benötigen als das k-ε-Modell und SST-Modell. Das k-ε-Modell benötigt von allen Modellen die geringste Rechenzeit.

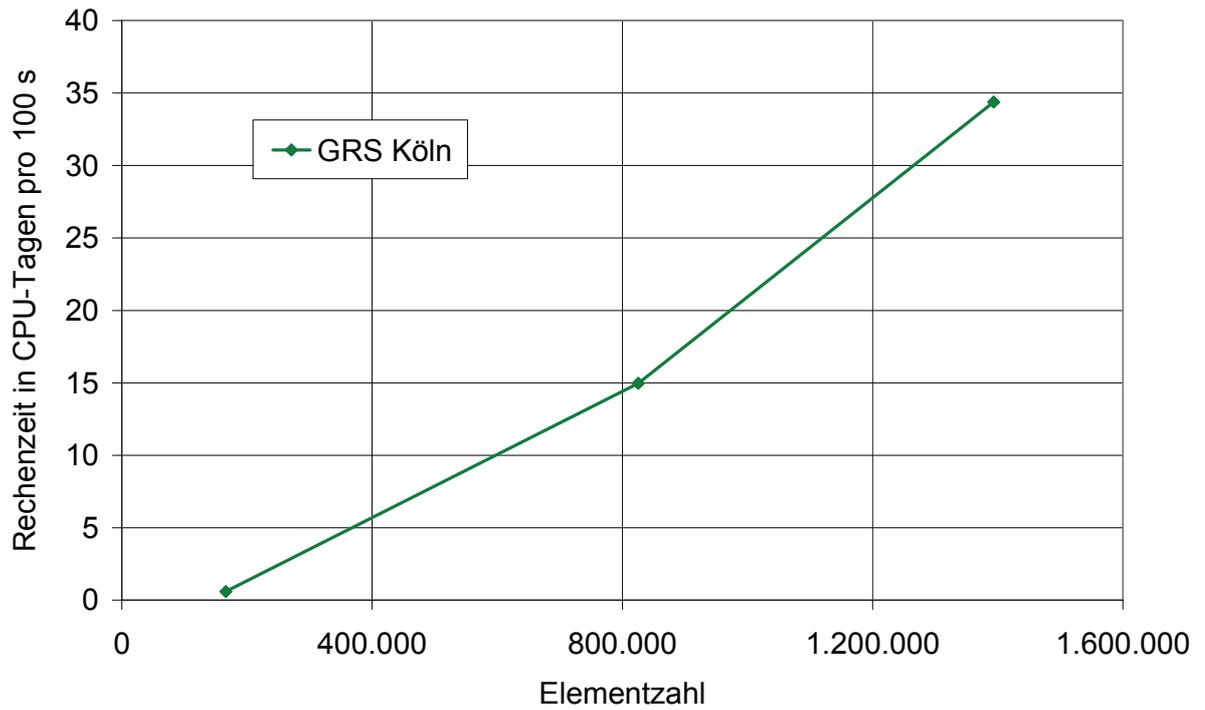


Abb. 5.1-38 Einfluss der Elementzahl  $N_{\text{Element}}$  auf die benötigte Rechenzeit  $t_{\text{CPU}}$

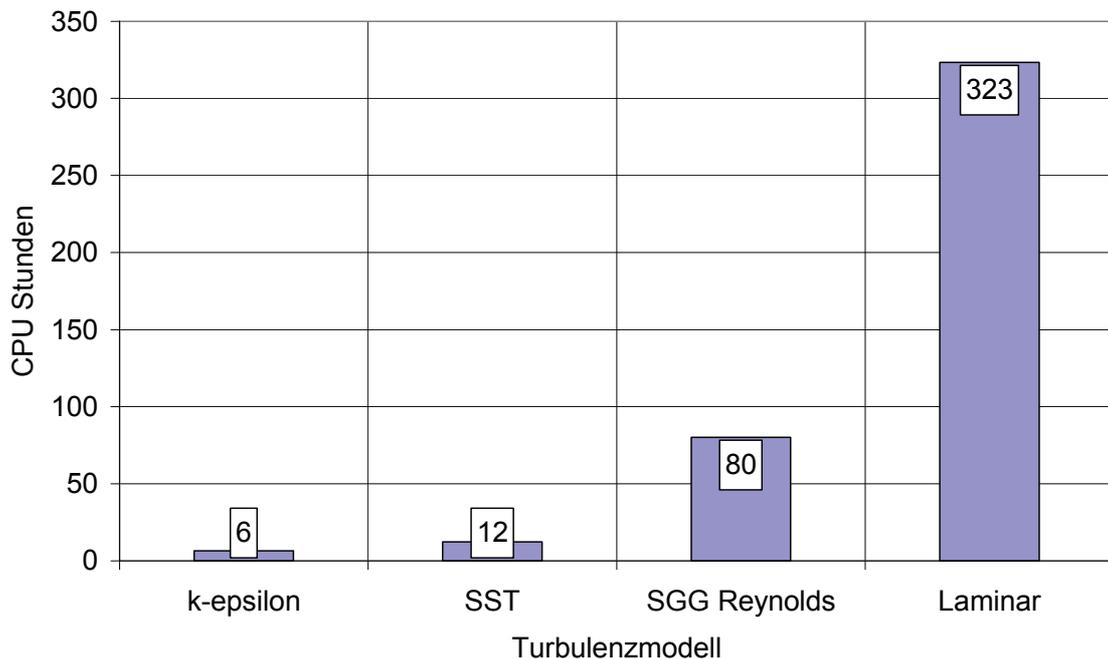


Abb. 5.1-39 Einfluss des Turbulenzmodells auf die Rechenzeit  $t_{\text{CPU}}$

### 5.1.10 Zusammenfassung

Im Rahmen dieses Arbeitspunktes wurden ein Vergleich und eine Bewertung unterschiedlicher Turbulenzmodelle in CFX-11 durchgeführt. Hierzu wurde der Versuch TH-18 aus dem Versuchsprogramm THAI III mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen ( $k$ - $\epsilon$ , Shear Stress Transport und SGG Reynolds-Stress) nachgerechnet. Die Zielgrößen, welche mit den Simulationen bestimmt wurden, sind die vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten an verschiedenen Positionen im THAI-Behälter sowie die Druckdifferenz über der eingebauten Kondensatwanne. Diese Zielgrößen wurden mit den unterschiedlichen Turbulenzmodellen berechnet und mit experimentellen Ergebnissen verglichen. Weiterhin wurden Diskretisierungs- und Modellfehler analysiert, Rechenzeiten untersucht sowie der Einfluss der Turbulenzintensität am Gebläseeinlass studiert. Abschließend liegt nun eine erste Bewertung der Modelle in Hinblick auf eine Containmentrechnung vor.

Die Rechenzeit steigt etwa linear mit der Elementzahl an. Oberhalb von einer Millionen Elementen ist die Berechnung von längeren Prozessdauern aus zeitlichen Gründen nicht mehr praktikabel. Für den Versuch TH-18 lassen sich noch Lösungen finden, es lässt sich aber abschätzen, dass eine Berechnung von längeren Prozessen im Con-

tainment mit zusätzlichen physikalischen Effekten auf diesem Wege nicht mehr möglich ist. In Abb. 5.1-40 werden die Diskretisierungsfehler den Rechenzeiten gegenübergestellt.

In Tab. 5.1-1 sind die optimalen Parameterwerte zusammengetragen, wenn eine Minimierung des Diskretisierungs- und Modellfehlers angestrebt ist. Diese Parameter sind natürlich innerhalb des gewählten Parameterbereichs optimal. Es kann sein, dass bei größerer Elementzahl der Diskretisierungsfehler noch kleiner würde oder dass sich bei einer kleineren Turbulenzintensität der Modellfehler noch weiter verringert.

Tab. 5.1-1 Optimale Parameterwahl zur Minimierung der Diskretisierungs- und Modellfehler

	<b>Parameter</b>	<b>Optimaler Parameterwert</b>
<b>Randbedingungen</b>	Turbulenzintensität am Gebläseaustritt	5 %
<b>Physikalische Modelle</b>	Turbulenzmodell	SSG Reynolds
<b>Numerische Parameter</b>	Elementzahlen	1.188.800

Prinzipiell wäre es noch interessant zu untersuchen ob es auch Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Einflussgrößen gibt. Zum Beispiel könnte untersucht werden wie sich die Strömungsgeschwindigkeiten bei einer gleichzeitigen Veränderung von Gitterfeinheit und Turbulenzmodell ändern. Unklar geblieben sind leider auch die experimentellen Messungenauigkeiten. Hier könnte z.B. durch wiederholte Messungen der statistische Fehler ermittelt werden. Weiterhin wäre eine Überprüfung auf mögliche systematische Messfehler von Interesse. Erst dann ist eine genaue Analyse zur Trennung der Messfehler vom tatsächlichen Modellfehler möglich.

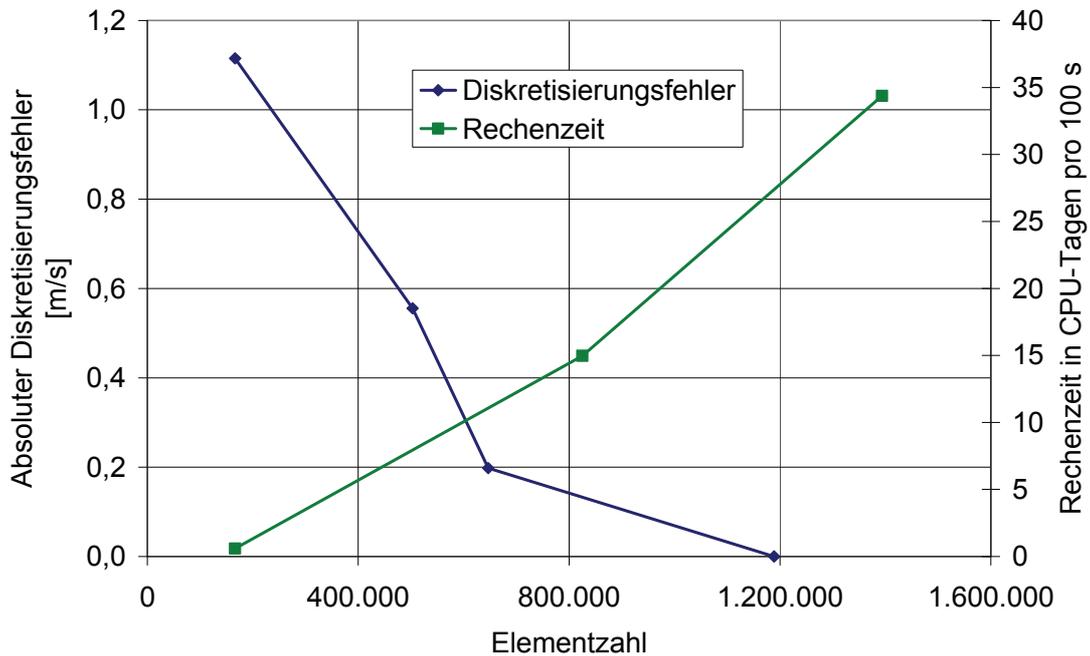


Abb. 5.1-40 Gegenüberstellung des mittleren absoluten Diskretisierungsfehlers und der Rechenzeit für den Versuch TH-18

## 5.2 Simulation des Experiments TH-20-2

### 5.2.1 Kurze Beschreibung des Experiments TH-20-2

Bei den Versuchen TH-20 in der THAI-Anlage wurde die Vermischung eines geschichteten Helium-Luft-Gemisches (Abb. 5.2-1) bei erzwungener Konvektion untersucht /FIS 07/. Zu Beginn besteht eine stabile He-Schichtung. Durch ein Gebläse wurde ein Gasstrahl erzeugt, der die Helium-Schichtung erodiert. Der zeitliche Verlauf der Helium-Schichtung wurde an verschiedenen Stellen gemessen. Das Ziel der CFX-Simulation besteht im Wesentlichen darin, den Abbau der Helium-Schichtung zu berechnen. Die verschiedenen TH-20-Experimente unterscheiden sich hinsichtlich der Helium-Konzentrationen zu Beginn des Versuchs und hinsichtlich der Geschwindigkeit des Gebläses. Die lokalen Geschwindigkeiten am Gebläseaustritt sind in Abhängigkeit von der Umdrehungsgeschwindigkeit des Gebläses aus anderen Versuchen bekannt und wurden von Becker Technologies zur Verfügung gestellt.

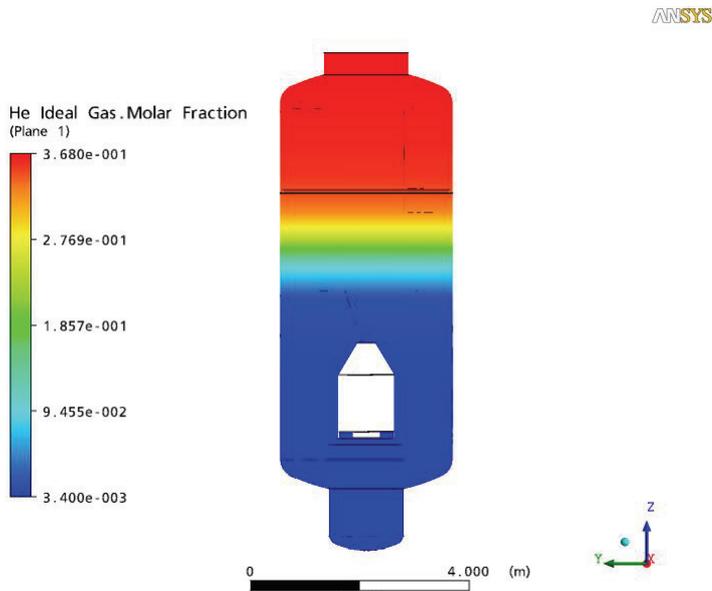


Abb. 5.2-1 Helium-Schichtung zu Beginn der Simulation

### 5.2.2 CFD-Gitter und Randbedingungen

Für die Untersuchungen wurde ein strukturiertes CFD-Gitter mit 280.000 Zellen erstellt, das den gesamten THAI-Behälter umfasst. Im Bereich des Jets am Gebläseaustritt wurde das Gitter stark verfeinert (Abb. 5.2-2).

Die Details des Gebläses werden nicht mit CFX simuliert. Es wurde nicht in das CFD-Gitter integriert, sondern es wurde der Eintritt in das Gebläse als Druckrandbedingung vorgegeben. Am Gebläseaustritt wurde die von Becker Technologies zur Verfügung gestellte Geschwindigkeitsverteilung vorgegeben. Die blinden Vorausrechnungen wurden mit einem etwas modifizierten Gitter durchgeführt. Insbesondere im Bereich des Gebläses wurde das Gitter für die Versuchsnachrechnungen weiter verfeinert und der Gebläseeintritt wurde weiter ins Innere des Gebläses verlegt.

Die gemessenen Helium-Konzentrationen wurden als Startwerte für CFX verwendet. Dabei wurde davon ausgegangen, dass die Helium-Konzentration zu Simulationsbeginn von der Höhe abhängt (Abb. 5.2-1). Dies wurde bis auf kleinere Abweichungen durch experimentelle Daten bestätigt.

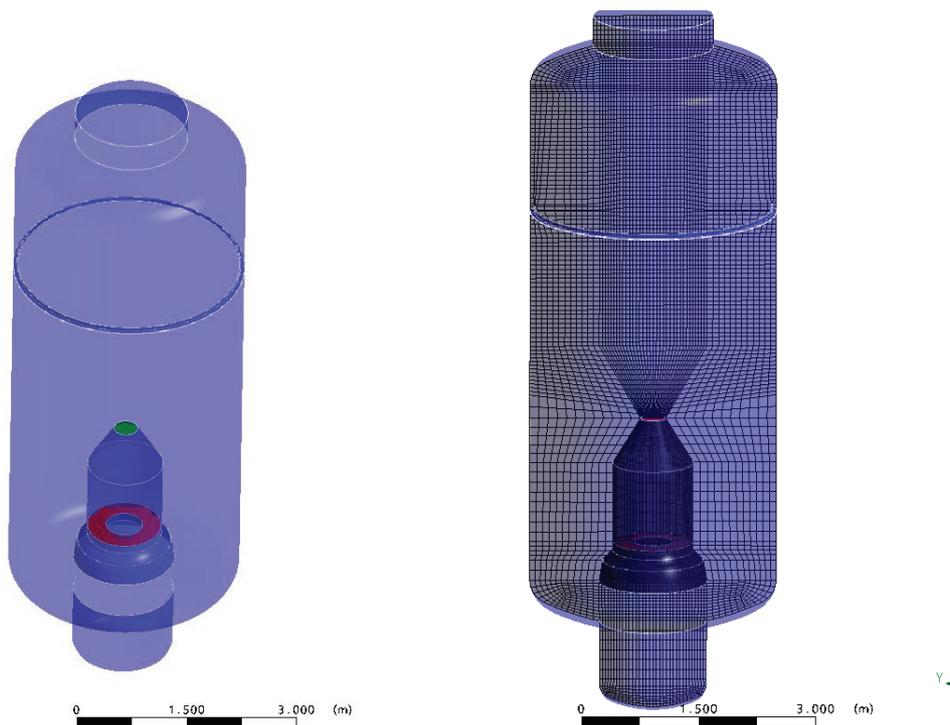


Abb. 5.2-2 Links: Gebläseeintritt (rot), Gebläseaustritt (grün); Rechts: CFD-Gitter

### 5.2.3 Blinde Vorausrechnung der Experimente TH-20

Die GRS hat sich mit CFX-11 Simulationen an den blinden Vorausrechnungen der TH-20 Experimente beteiligt. Die Versuche TH-20-2, TH-20-3 und TH-20-4 unterscheiden sich hinsichtlich des Heliumgradienten und der Austrittsgeschwindigkeit am Gebläse.

Tab. 5.2-1 Versuchsrandbedingungen

	TH-20-2	TH-20-3	TH-20-4
Min. He-Konzentration	0 %	0,8 %	0,2 %
Max. He-Konzentration	35,5 %	37 %	18,8 %
Gebläsegeschwindigkeit	100 Upm	50 Upm	50 Upm

CFX war in der Lage, den Zusammenhang zwischen Gebläsegeschwindigkeit, Konzentrationsgradienten und der Zeit, die zur Auflösung der Schichtung benötigt wurde, richtig zu beschreiben. Wie im Experiment hat eine Erhöhung der Gebläsegeschwindigkeit zu einer deutlich schnelleren Schichtungsauflösung geführt. Ebenso führt ein stärkerer Konzentrationsgradient zu einer langsameren Auflösung der

Schichtung. Quantitativ wurde die Zeitdauer der Schichtungsauflösung aber stark überschätzt (Faktor 4 oder mehr).

Da die Ergebnisse für alle 3 Experimente vergleichbar waren, wurde das Experiment TH-20-2 für weitere detaillierte Untersuchungen ausgewählt, da bei ihm die Schichtungsauflösung am schnellsten erfolgt ist. Dadurch wurde die benötigte Rechenzeit minimiert.

#### **5.2.4 Untersuchung des Einflusses der Turbulenzmodellierung**

Der Versuch TH-20-2 wurde mit verschiedenen Turbulenzmodellen simuliert. Es kamen die Zweigleichungs-Turbulenzmodelle  $k-\varepsilon$  und SST zum Einsatz. Zudem wurde eine Rechnung mit dem SSG-Reynolds-Stress-Modell durchgeführt. Aufgrund numerischer Probleme konnte diese Rechnung aber nicht erfolgreich beendet werden. Auch Versuche mit dem BSL-Reynolds-Stress-Turbulenzmodell brachen nach weniger als 100 s aufgrund numerischer Probleme ab. Trotz intensiver Bemühungen (auch in Zusammenarbeit mit ANSYS-Support) war es nicht möglich, Simulationen mit diesen beiden Reynolds-Stress-Turbulenzmodellen durchzuführen. Diese Turbulenzmodelle sind offensichtlich numerisch sehr instabil, deshalb sind sie zumindest in CFX-11 nicht für den Einsatz bei Containmentfragestellungen geeignet.

Um den Einfluss der Turbulenzmodellierung zu untersuchen, wurde auch eine Rechnung ohne Turbulenzmodell durchgeführt. CFX berechnet eine Reynoldszahl von 45.000 für die Simulation. Die Annahme einer laminaren Strömung entspricht daher nicht den Gegebenheiten im Experiment.

Das verwendete Turbulenzmodell hat einen signifikanten Einfluss auf die Geschwindigkeit der Vermischung. Sowohl beim  $k-\varepsilon$ - als auch beim SST-Modell wurde die Geschwindigkeit des Abbaus der Schichtung um einen Faktor von mehr als 4 unterschätzt. Der Abbau der Schichtung erfolgt beim SST-Modell langsamer als beim  $k-\varepsilon$  Turbulenzmodell. Bei der laminaren Strömung wurde die Schichtung am schnellsten abgebaut. Trotzdem wurde die Geschwindigkeit der Vermischung immer noch deutlich unterschätzt.

Prinzipiell stellt sich die Frage, ob 2-Gleichungs-RANS-Turbulenzmodelle zur Simulation der Schichtungsauflösung in ihrer jetzigen Form geeignet sind. In der Nähe der

Schichtung ist mit einer Anisotropie der Turbulenz zu rechnen, was 2-Gleichungsturbulenzmodelle nicht berücksichtigen können, da sie von der Isotropie der Turbulenz ausgehen. Zudem muss untersucht werden, ob CFX-11 alle für die Erosion einer Schichtung notwendigen physikalischen Phänomene adäquat simuliert.

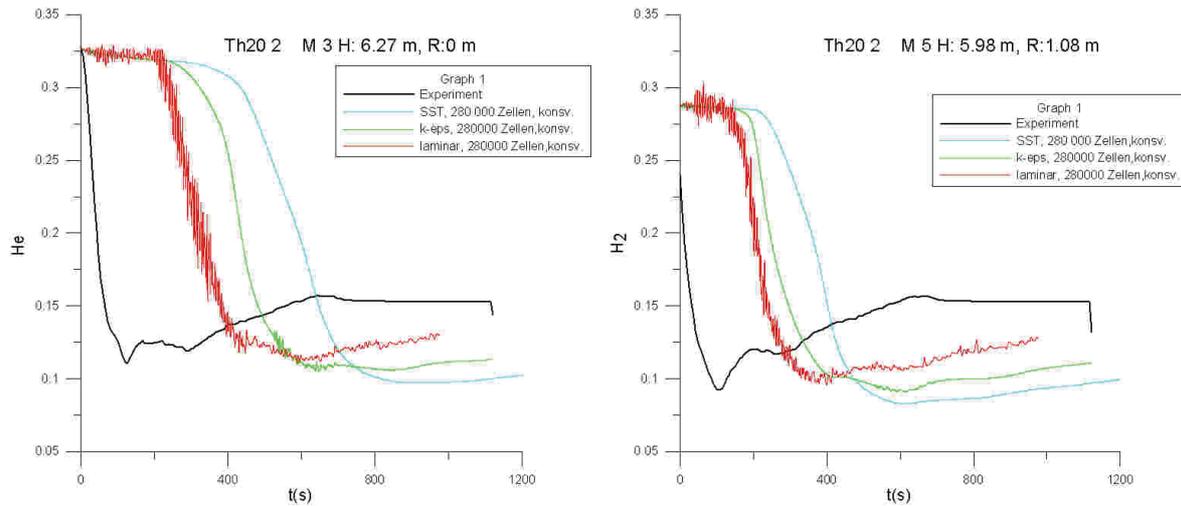


Abb. 5.2-3 Gemessene und berechnete He-Molenbrüche an zwei Messpunkten

### 5.2.5 Untersuchung der Gitterabhängigkeit

Um zu untersuchen, ob das verwendete CFD-Gitter ausreichend fein ist, wurden 2 weitere Simulationen durchgeführt. Eine wurde mit einem groben Gitter (ca. 67.000 Zellen) und eine mit einem feineren Gitter (ca. 827.000 Zellen) durchgeführt. Die berechneten Konzentrationen variieren in Abhängigkeit vom CFD-Gitter, d. h., das zunächst eingesetzte Gitter mit 280.000 Zellen reicht nicht aus, um eine gitterunabhängige Lösung zu erhalten. Aufgrund der hohen Rechenzeit ist die Verwendung eines feineren Gitters für Parameterstudien aber nicht möglich. Ein Ausweg besteht prinzipiell, die Symmetrie auszunutzen und eine quasi 2-dimensionale Simulation durchzuführen, bei der ein schmales Winkелеlement des THAI-Behälters simuliert wurde. Bei den Untersuchungen sollte aber berücksichtigt werden, dass CFX für Containment-Anwendungen validiert werden soll. Selbst ein CFD-Gitter, das den kompletten THAI-Behälter mit 827.000 Zellen diskretisiert, ist viel feiner als CFD-Gitter, die bei typischen Anwendungen für KKW (z. B. Gasverteilung in einem Sicherheitsbehälter) verwendet werden können. Deshalb ist bei Auswahl und Validierung von Modellen darauf zu achten, dass sie auch für

komplexe Geometrien (mit relativ groben Gittern) noch sinnvolle Ergebnisse liefern. Eine weitere Gitterverfeinerung mag im Rahmen der Modellentwicklung durchaus sinnvoll sein, zur Modellvalidierung im Hinblick auf Anwendungen für den nuklearen Bereich ist sie aber von wenig praktischem Nutzen.

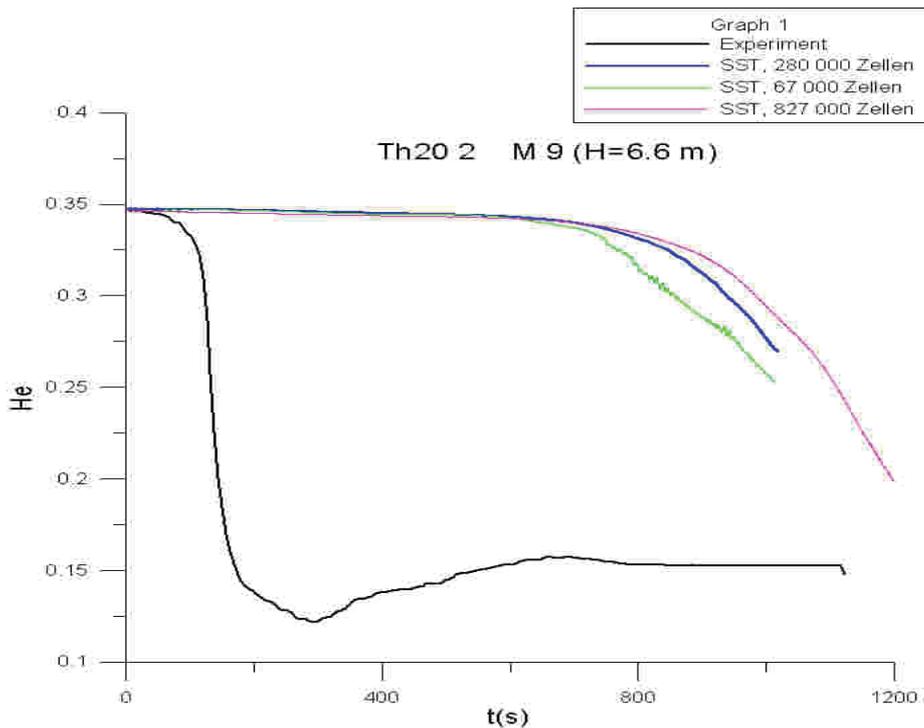


Abb. 5.2-4 Simulation des TH-20-2 Experiments mit unterschiedlich feinen CFD-Gittern

### 5.2.6 Modellierung des Jets am Gebläseaustritt

Eine mögliche Ursache für die großen Unterschiede zwischen Simulation und Experiment kann eine unzureichende Modellierung des Strahls am Gebläseaustritt sein. Becker Technologies hat Vorversuche mit Luft durchgeführt, bei denen die Geschwindigkeit in Teilen des Jets gemessen wurde. Es wurden CFX-Simulationen mit verschiedenen Turbulenzmodellen für diesen Vorversuch durchgeführt. Die Geschwindigkeiten im Strahl sind signifikant vom Turbulenzmodell abhängig. Beim SST-Turbulenzmodell ergeben sich die niedrigsten Strömungsgeschwindigkeiten in der Mitte des Strahls (Abb. 5.2-5). Entsprechend wurde beim TH-20-2 Versuch auch die Schichtung beim SST-Modell am langsamsten abgebaut. Die Geschwindigkeiten in der Strahlmitte sind beim

$k$ - $\epsilon$ - und beim SSG-Reynolds-Stress-Modell höher. Das  $k$ - $\epsilon$  Modell sagt in der Nähe des Gebläses in der Jetmitte höhere Geschwindigkeiten voraus, während beim SSG-Reynolds-Stress-Modell in größerem Abstand vom Gebläse höhere Geschwindigkeiten vorhergesagt werden. Da dieser Bereich für den Abbau der Schichtung wichtig ist, ist zu vermuten, dass beim SSG-Reynolds-Stress-Modell die Schichtung am schnellsten abgebaut wurde. Aufgrund numerischer Schwierigkeiten konnte mit diesem Modell bisher aber keine Simulation des Experiments TH-20-2 durchgeführt werden.

Ein Vergleich mit den experimentellen Daten zeigt, dass bei allen drei Turbulenzmodellen die Geschwindigkeiten im Strahl unterschätzt werden. Dies kann ein Grund für den zu langsamen Abbau der Schichtung in der Simulation sein.

Die experimentellen Daten zeigen aber auch eine Asymmetrie, die im Widerspruch zu den angenommen Randbedingungen steht. Eine mögliche Ursache sind Messfehler im Vorversuch bzw. eine unzureichende zeitliche Mittelung. Es ist aber auch möglich, dass die Geschwindigkeit am Gebläseaustritt nicht exakt den von Becker Technologies angegebenen Werten entspricht.

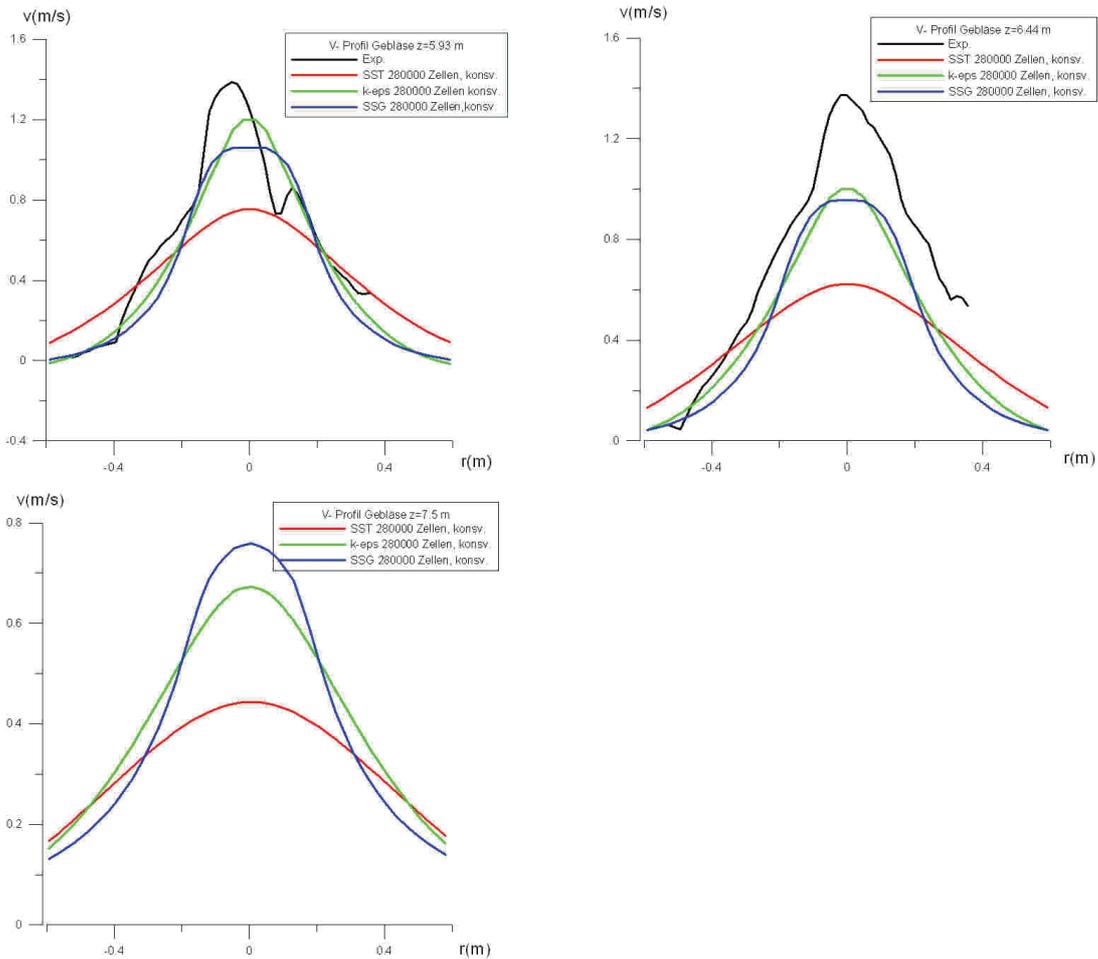


Abb. 5.2-5 Geschwindigkeiten im Strahl auf verschiedenen Höhen

### 5.2.7 Zusammenfassung und Ausblick

Der Versuch TH-20-2 wurde mit CFX-11 unter Verwendung verschiedener Turbulenzmodelle simuliert. Bei allen Turbulenzmodellen handelte es sich um 2-Gleichungs-RANS-Turbulenzmodelle (SST,  $k-\epsilon$ ). Simulationen mit Reynolds-Stress-Turbulenzmodellen konnten aufgrund numerischer Schwierigkeiten nicht erfolgreich durchgeführt werden.

Bei allen Simulationen wurde die Mischungsgeschwindigkeit signifikant unterschätzt. Dies steht im Widerspruch zu dem Ergebnis beim ISP-47-Benchmark, bei dem CFX die Mischungsgeschwindigkeit überschätzt hat. Als mögliche Ursachen für die großen Abweichungen zum Experiment wurden identifiziert:

- 2-Gleichungs-RANS-Turbulenzmodelle sind (in ihrer gegenwärtigen Form) unzureichend zur Simulation der Schichtung geeignet.
- Es werden nicht alle für die Erosion der Schichtung relevanten physikalischen Prozesse adäquat simuliert.
- Unzureichende Simulation des Jets.

Zudem müssen auch die Annahmen für die Austrittsgeschwindigkeit am Gebläse und andere Anfangs- und Randbedingungen noch einmal einer kritischen Prüfung unterzogen werden.

Im Rahmen der am IKE-Stuttgart (Projektnummer 1501339) und bei ANSYS (Projektnummer 1501337) durchgeführten Forschungsvorhaben sollte die Turbulenzmodellierung zur Simulation von Strömungen im Sicherheitsbehälter verbessert werden. Die Modellierung des TH-20-Experiments war dabei ein Forschungsschwerpunkt. Im Rahmen dieser Vorhaben wurde ein verbessertes Turbulenzmodell entwickelt. In einem geplanten Nachfolgevorhaben der GRS soll dieser Versuch mit diesem verbesserten Turbulenzmodell nachgerechnet werden.

## 5.3 Nachrechnung PANDA-4-Experiment

### 5.3.1 Randbedingungen des Versuchs

Der Versuchsstand PANDA-4 besteht aus zwei Behältern (D1 und D2), die durch ein Rohr miteinander verbunden sind (Abb. 5.3-1). Dieses Rohr ist um  $110^\circ$  gekrümmt, so dass die Behälter nicht in einer Ebene liegen. In den Behälter D1 strömt horizontal Dampf mit einem mittleren Massenstrom von  $49,95 \text{ g/s}$  ein. Die Temperatur des Dampfes beträgt  $140^\circ\text{C}$ . Das Rohr, durch das der Dampf einströmt, befindet sich in einer Höhe von  $2 \text{ m}$  über dem Behälterboden und endet in der Mitte des Behälters. Die Dauer der Einspeisung beträgt  $7200 \text{ s}$ .

In der oberen Kuppel des 2. Behälters (D2) befindet sich ein Ventil, mit dem der Druck in den Behältern auf konstant  $1,3 \text{ bar}$  gehalten wurde. Zu Beginn des Versuchs befindet sich trockene Luft mit einer Temperatur von  $108^\circ\text{C}$  im Versuchsstand. Die Außenwände werden auf ebenfalls  $108^\circ\text{C}$  gehalten. Durch diese Randbedingungen wurde sichergestellt, dass während des Versuches keine Kondensationsvorgänge ablaufen. Die Dampfkonzentration wurde an mehreren Messstellen in den beiden Behältern und im Verbindungsrohr gemessen. Die Konzentrationsmessungen in den Behältern D1 und D2 werden in der Behältermitte an verschiedenen Höhen durchgeführt (Abb. 5.3-2).

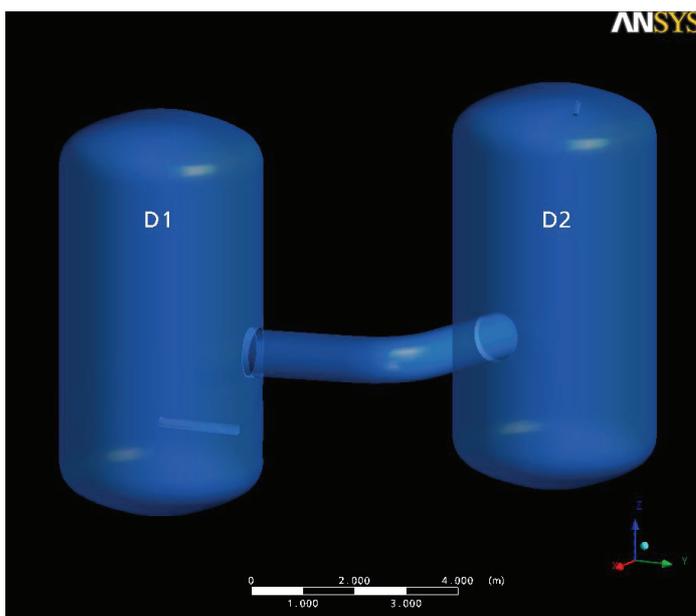


Abb. 5.3-1 Geometrie beim PANDA-4-Versuch

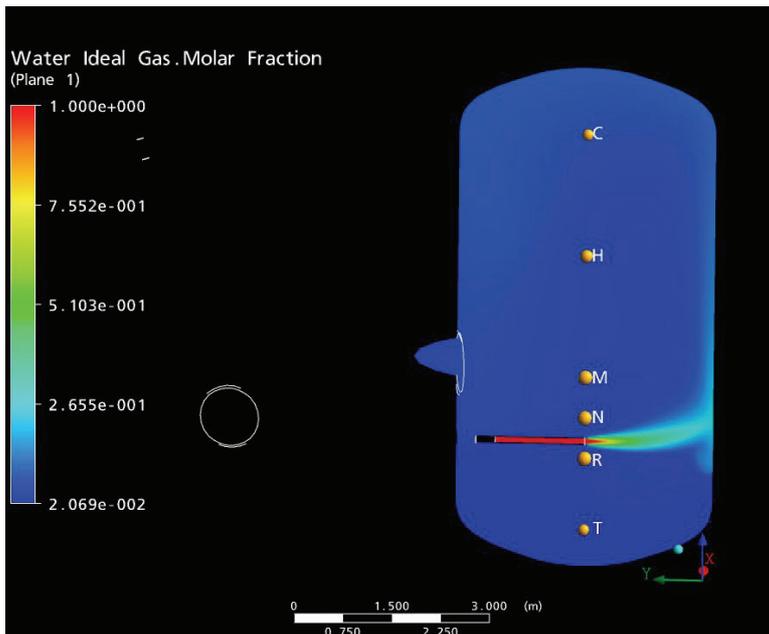


Abb. 5.3-2 Messstellen im Behälter D1

### 5.3.2 Verwendetes Gitter

Das verwendete CFD-Gitter besteht aus 193.000 Zellen. Dabei wurden überwiegend strukturierte Zellen verwendet (ca. 190.000 Hexaeder), im Bereich des Venting-Ventils befinden sich unstrukturierte Zellen (ca. 3000 Pyramiden und Tetraedern) (Abb. 5.3-3). Die Behälterwände wurden nicht in das Gitter integriert (siehe Abschnitt 5.3.9). Die Abhängigkeit des Simulationsergebnisses vom CFD-Gitter wird in Abschnitt 5.3.5 untersucht.

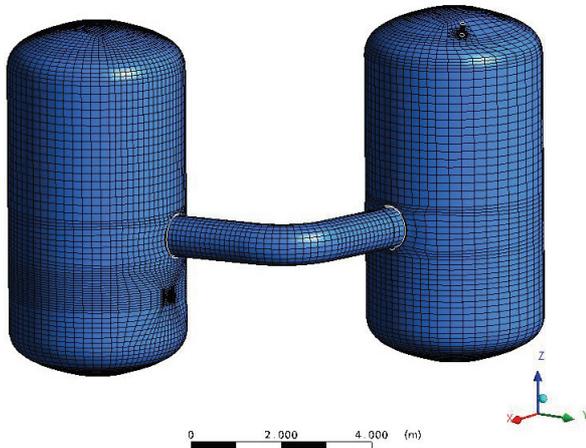


Abb. 5.3-3 CFD-Gitter bei der Simulation des Versuchs PANDA-4

### 5.3.3 Verwendete Modelle

Die Simulationen des PANDA-4-Experiments wurden mit CFX-11 durchgeführt. Die Wärmeverluste an den Wänden wurden bei den Simulationen vernachlässigt. Der Fehler, der durch diese Vereinfachung gemacht wurde, wurde in (Abschnitt 5.3.9) näher untersucht. Für die meisten Untersuchungen wurde das SST-Turbulenzmodell verwendet. In Abschnitt 5.3.6 wurde der Einfluss des Turbulenzmodells auf die Lösungen untersucht. Am Einlass werden der Massenstrom und die Temperatur des Dampfes vorgegeben; es wurde von einer mittleren Turbulenzintensität (5 %) ausgegangen. Der Einfluss der Turbulenzintensität auf die Ergebnisse wurde in Abschnitt 5.3.8 untersucht. Als kinematische Diffusivität von Wasserdampf wurde  $2.5 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$  angenommen.

Bei den Simulationen wurde eine adaptive Zeitschrittweite verwendet. Typischerweise stellen sich bei den Simulationen Zeitschritte von 0,5 s - 1 s ein. Als Konvergenzkriterium wurde ein maximales Residuum von  $5,0 \cdot 10^{-4}$  verwendet. Damit kann sichergestellt werden, dass überall im Simulationsgebiet eine ausreichend konvergente Lösung vorliegt.

#### 5.3.4 Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten

Die Simulationsergebnisse des PANDA-4-Experiments werden nachfolgend mit Messdaten verglichen. Dabei wurde die Turbulenz mit dem SST-Modell simuliert, da es gegenwärtig standardmäßig bei Containmentanwendungen verwendet wird. In Abschnitt 5.3.6 wurde der Einfluss des Turbulenzmodells genauer untersucht.

Die berechneten Wasserdampfkonzentrationen im Behälter 1 stimmen gut mit den gemessenen Werten überein (siehe Abb. 5.3-4). Im unteren Teil des Behälters (T20 bei  $h = 0,54$  m) sind größere Unterschiede zu erkennen. In diesem Bereich erfolgt der Anstieg der Dampfkonzentration zu schnell. Bei T20 wurde eine Dampfkonzentration von 20 % nach ca. 1450 s gemessen. In der Rechnung wurde diese Konzentration aber schon nach ca. 700 s erreicht. Bei den anderen Messpunkten R20 - C20 (entspricht  $h > 1,7$  m) wurde die Dampfkonzentration ausreichend genau berechnet. Ab 4000 s wurde die Dampfkonzentration um ca. 2 vol.% überschätzt. Dies entspricht einem relativen Fehler von ca. 2 - 3 %. Für die Messung der molaren Konzentrationen wurde eine Messgenauigkeit von  $\pm 1.5$  % angegeben. Die Abweichung liegt damit fast noch in der Bandbreite der Messgenauigkeit.

Im zweiten Behälter wurde oberhalb des Verbindungsrohres die Dampfkonzentration richtig berechnet (Abb. 5.3-4). An der Messstelle M20 ( $h = 3,02$  m) stimmen Simulation und Messung sehr gut überein. Die kleinen Abweichungen lassen sich vermutlich mit Messungenauigkeiten erklären, da die Kurve mit den experimentellen Daten nicht glatt ist. Bei den Messstellen H20 und C20 wurde die Dampfkonzentration ab ca. 4000 s um ca. 2 vol.% überschätzt. Dies entspricht einem relativen Fehler von ca. 2 - 3 % und liegt ebenfalls noch nahe der Bandbreite der Messgenauigkeit ( $\pm 1.5$  %).

Bei den unteren Messstellen sind größere Abweichungen zwischen Simulation und Experiment zu beobachten. CFX sagt qualitativ richtig voraus, dass in diesem Bereich verspätet eine Mischung stattfindet und dass diese dann auch schwach ist. Bei N20 ( $h = 2,32$  m) ist der Anstieg der Dampfkonzentration zu stark. Bei den Messstellen R20 ( $h = 1,73$  m) und T20 ( $0,53$  m) erfolgt der Dampfanstieg dagegen zu spät. In der Simulation wurde in diesen Bereich kaum Dampf transportiert.

Im Verbindungsrohr zwischen den beiden Behältern stimmt die simulierte Dampfkonzentration gut mit den Versuchsdaten überein (Abb. 5.3-5).

Die größte Abweichung wurde am untersten Messpunkt TDD10 gemessen. Die Abweichung ist auch hier  $\leq 4$  vol.%, was einem relativen Fehler von etwa 5 % entspricht.

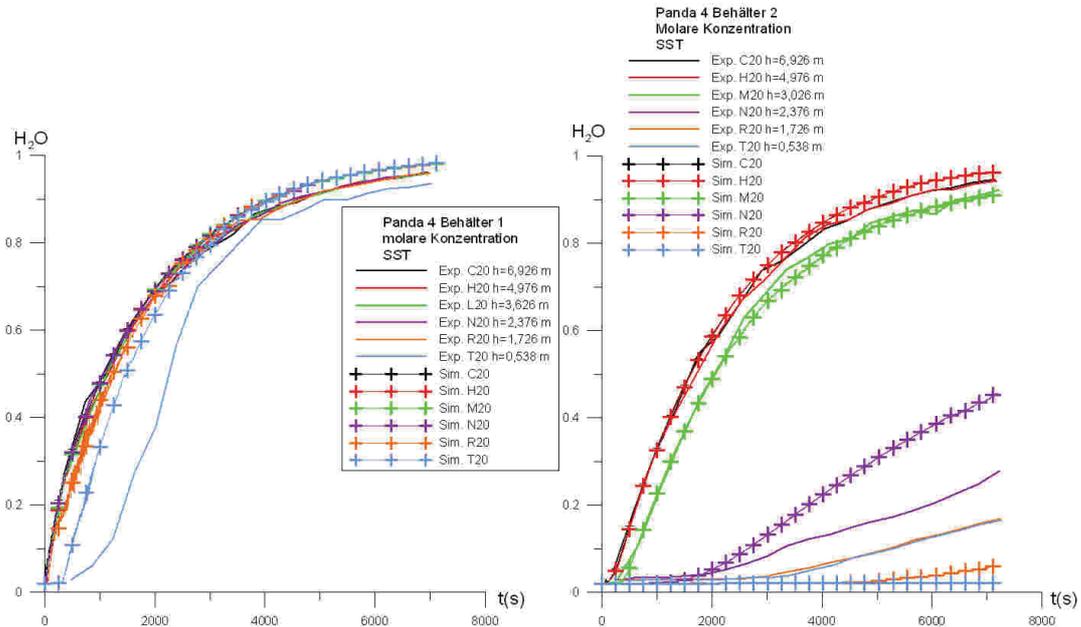


Abb. 5.3-4 Molare Dampfkonzentrationen im Experiment und in der Simulation in den beiden Behältern

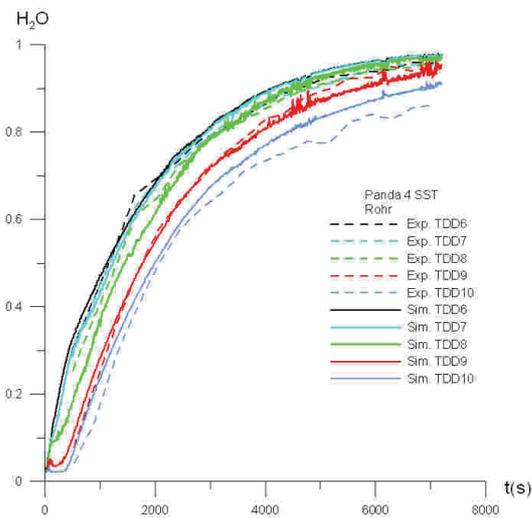


Abb. 5.3-5 Molare Dampfkonzentrationen im Experiment und in der Simulation im Verbindungsrohr

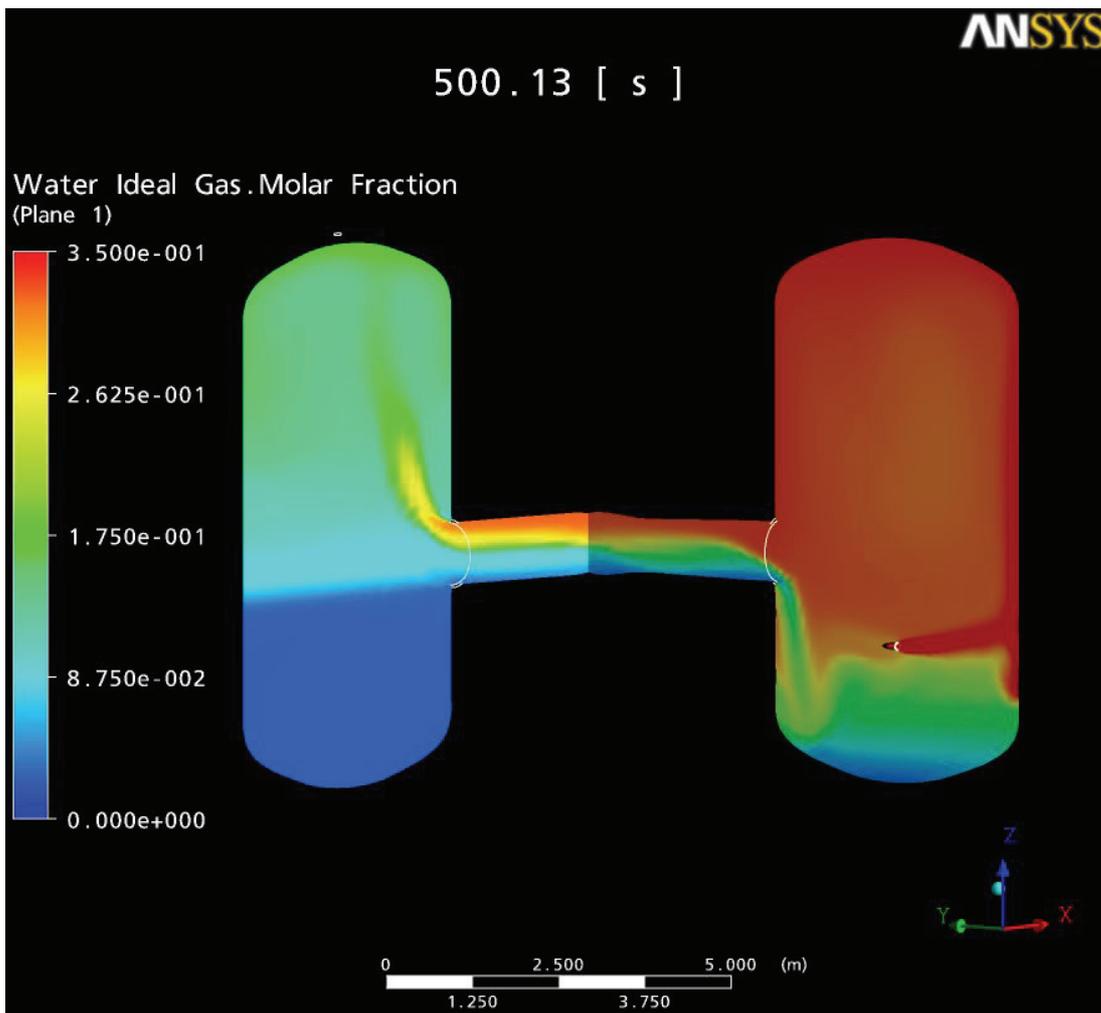


Abb. 5.3-6 Wasserdampfverteilung nach 500 s

### 5.3.5 Benötigte Rechenzeit und Untersuchung der Gitterabhängigkeit der Simulationen

Zur Untersuchung der Gitterabhängigkeit der durchgeführten Simulationen wurde auch eine Rechnung mit einem feineren Gitter durchgeführt. Für den Vergleich wurde das SST-Turbulenzmodell verwendet. Das bei den hier durchgeführten Rechnungen standardmäßig verwendete CFD-Gitter besteht aus 193.000 Elementen (ca. 190.000 Hexaedern und ca. 3000 Pyramiden und Tetraedern), das feinere Gitter aus ca. 608.000 Elementen (ca. 604.000 Hexaedern und ca. 4000 Pyramiden und Tetraedern). Dies entspricht ungefähr einer Verfeinerung um den Faktor 1,5 in jeder Dimension.

Bei den meisten Messstellen in Behälter 1 und 2 sind keine signifikanten Unterschiede in der Dampfkonzentration bei den unterschiedlichen Diskretisierungen zu erkennen. Lediglich im Behälter 1 sind bei T20 (unterer Bereich des Behälters) größere Abweichungen zu erkennen. Die Simulation mit dem feineren Gitter liegt dabei etwas dichter bei den Messwerten, insgesamt ist die Abweichung zum Experiment an diesem Punkt aber auch beim feinen Gitter noch groß (Abb. 5.3-7).

Im 2. Behälter besteht noch am Messpunkt M20 eine Gitterabhängigkeit. In der Anfangsphase liegt der gemessene Wasserdampfgehalt dichter bei der Simulation mit dem gröberem Gitter, ab ca. 2500 s liefert das feinere Gitter etwas besser Vorhersagen. Im Rohr sind geringe Abweichungen zwischen den beiden Simulationsergebnissen zu erkennen (Abb. 5.3-7).

Die Simulation mit dem Standardgitter benötigte für 7200 s ca. 47 CPU-Tage. Da 4 CPUs zum Einsatz kamen, konnte die Rechnung in etwas mehr als 12 Tagen abgeschlossen werden. Die Simulation mit dem feineren Gitter benötigte für ca. 3440 s ca. 90 CPU-Tage. Hochgerechnet auf die gesamte Experimentdauer ergäben sich etwa 188 CPU Tage. Aufgrund der großen Rechenzeit war es mit der verfügbaren Rechenzeitkapazität nicht möglich, für die Untersuchungen eine feinere Diskretisierung als das Standardgitter zu wählen oder auch bei der Gitterstudie noch feinere Diskretisierungen zu untersuchen. Der Vergleich mit dem feinen Gitter zeigt aber, dass auch bei dieser Diskretisierung die Gitterabhängigkeit der Lösung relativ gering ist.

In den Bereichen, bei denen deutliche Abweichungen zu den experimentellen Daten vorliegen, wurde in den Simulationen keine gitterunabhängige Lösung entsprechend den „Best Practice Guidelines“ erreicht. Allerdings ist die Veränderung bei der Gitterverfeinerung gering im Vergleich zu den Abweichungen von den experimentellen Daten. Es kann deshalb davon ausgegangen werden, dass entweder ein viel feineres Gitter in diesen Teilen notwendig ist oder aber Abweichungen zwischen Experiment und Simulation auch noch bei einer gitterunabhängigen Lösung bestehen bleiben.

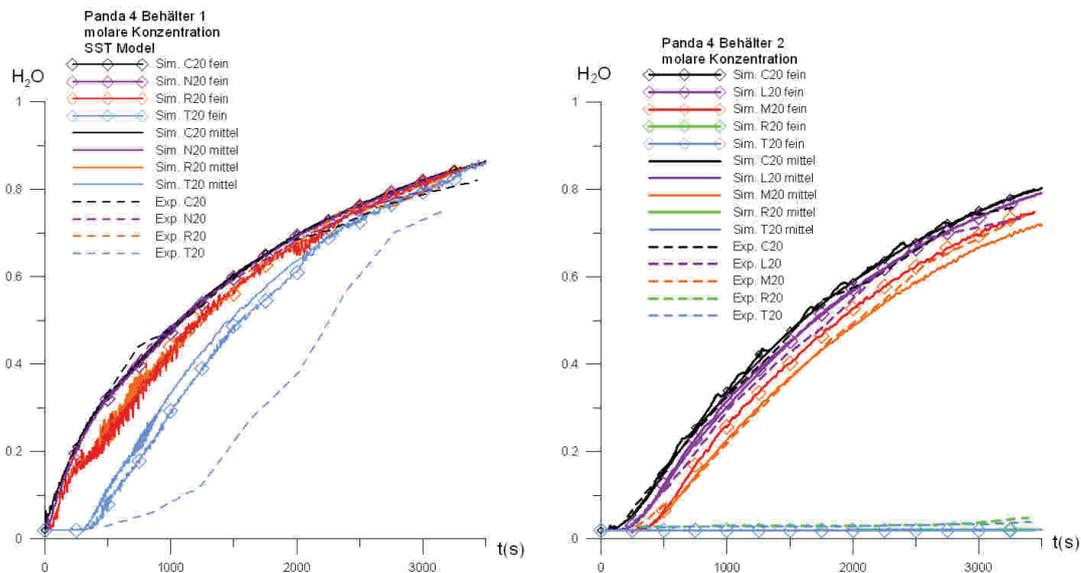


Abb. 5.3-7 Untersuchung zur Gitterabhängigkeit der Lösung

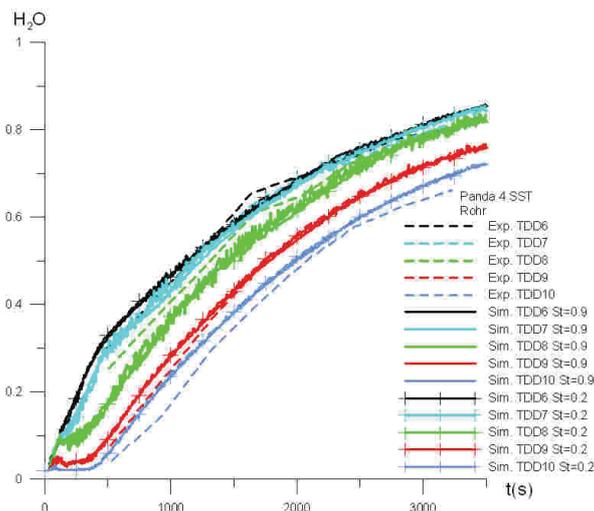


Abb. 5.3-8 Untersuchung zur Gitterabhängigkeit der Lösung (Messstellen im Verbindungsrohr zwischen den Behältern)

### 5.3.6 Einfluss des Turbulenzmodells

Um den Einfluss der Turbulenzmodellierung zu untersuchen, wurden Simulationen mit verschiedenen Turbulenzmodellen (SST, k- $\epsilon$ , RNG-k- $\epsilon$ , SSG-Reynolds-Stress) durchgeführt.

Die Rechnung mit dem SSG-Reynolds-Stress-Modell ist nach ca. 246 s aufgrund numerischer Probleme abgebrochen, obwohl bis zu diesem Zeitpunkt eine konvergente

Lösung gefunden wurde. Dies entspricht dem Ergebnis bei der Simulation des TH-20-Experiments, bei dem auch mit Reynolds-Stress-Modellen wegen numerischer Schwierigkeiten keine Lösung gefunden werden konnte. Offensichtlich fehlt in CFX-11 bei den untersuchten Reynolds-Stress-Modellen die numerische Robustheit, so dass sie für Containmentanwendungen nicht oder mit einem nicht zu vertretenden Aufwand eingesetzt werden können. Aufgrund des frühen Abbruchs wurde diese Rechnung nicht in den folgenden Vergleichen berücksichtigt.

Aus Abb. 5.3-9 wurde ersichtlich, dass die Abweichungen aufgrund der unterschiedlichen Turbulenzmodellierung klein sind. Sie sind deutlich kleiner als die Abweichungen zu den experimentellen Daten. Die Vorhersagegenauigkeit der Turbulenzmodelle SST,  $k-\varepsilon$ , und RNG- $k-\varepsilon$  ist ungefähr gleich. Dabei ist aber zu berücksichtigen, dass es sich bei allen drei Turbulenzmodellen um 2-Gleichungsmodelle handelt, die Gleichungen für die turbulente kinetische Energie und für die turbulente Dissipation lösen. Das SSG-Reynolds-Stress-Modell wäre eine sinnvolle Ergänzung der Untersuchung gewesen, da in ihm 6-Erhaltungsgleichungen zur Turbulenzmodellierung gelöst werden und bei ihm eine signifikant andere Turbulenzmodellierung vorgenommen wurde.

Aufgrund der ähnlichen Turbulenzmodellierung ist es möglich, dass bei allen 3 Turbulenzmodellen dieselben Defizite vorliegen und sie deshalb zu denselben (meist relativ kleinen) Abweichungen von den experimentellen Daten führten (Abb. 5.3-10). Aus den vorliegenden Untersuchungen ergeben sich keine Anhaltspunkte, dass eine unzureichende Turbulenzmodellierung tatsächlich die Ursache für die Abweichungen vom Experiment ist.

Für die Rechnung mit dem SST-Modell wurde weniger Rechenzeit (ca.  $4 \cdot 10^6$  CPU-Sekunden) wie für die beiden anderen Rechnungen ( $k-\varepsilon$ :  $5,79 \cdot 10^6$  bzw. RNG- $k-\varepsilon$ :  $5,74 \cdot 10^6$  CPU-Sekunden) benötigt. Bei allen Rechnungen wurde ein adaptiver Zeitschritt verwendet. Bei der Rechnung mit dem SST-Modell war ein minimaler Zeitschritt von 0,5 s ausreichend, um das Konvergenzkriterium von ( $5,0 \cdot 10^{-4}$  Max-Residuum) zu erfüllen. Bei den anderen beiden Modellen musste der minimale Zeitschritt auf 0,2 s abgesenkt werden. Diese beiden Modelle benötigten deshalb ca. doppelt so viele Zeitschritte, um die Simulationszeit von 7200 s zu durchlaufen. (SST: ca. 14000;  $k-\varepsilon$ : 30000, RNG- $k-\varepsilon$ : 33000).

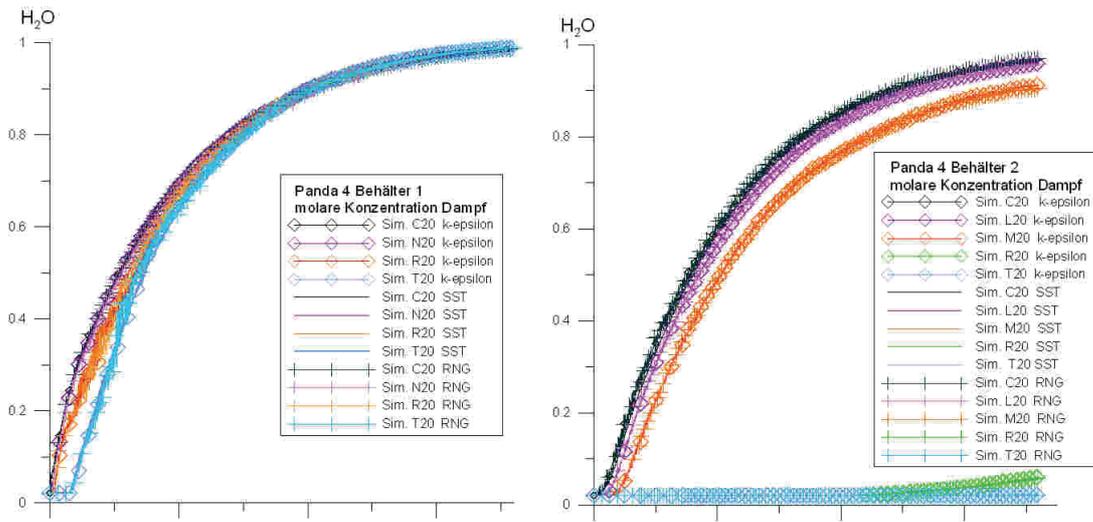


Abb. 5.3-9 Einfluss des Turbulenzmodells auf die berechneten Dampfkonzentrationen

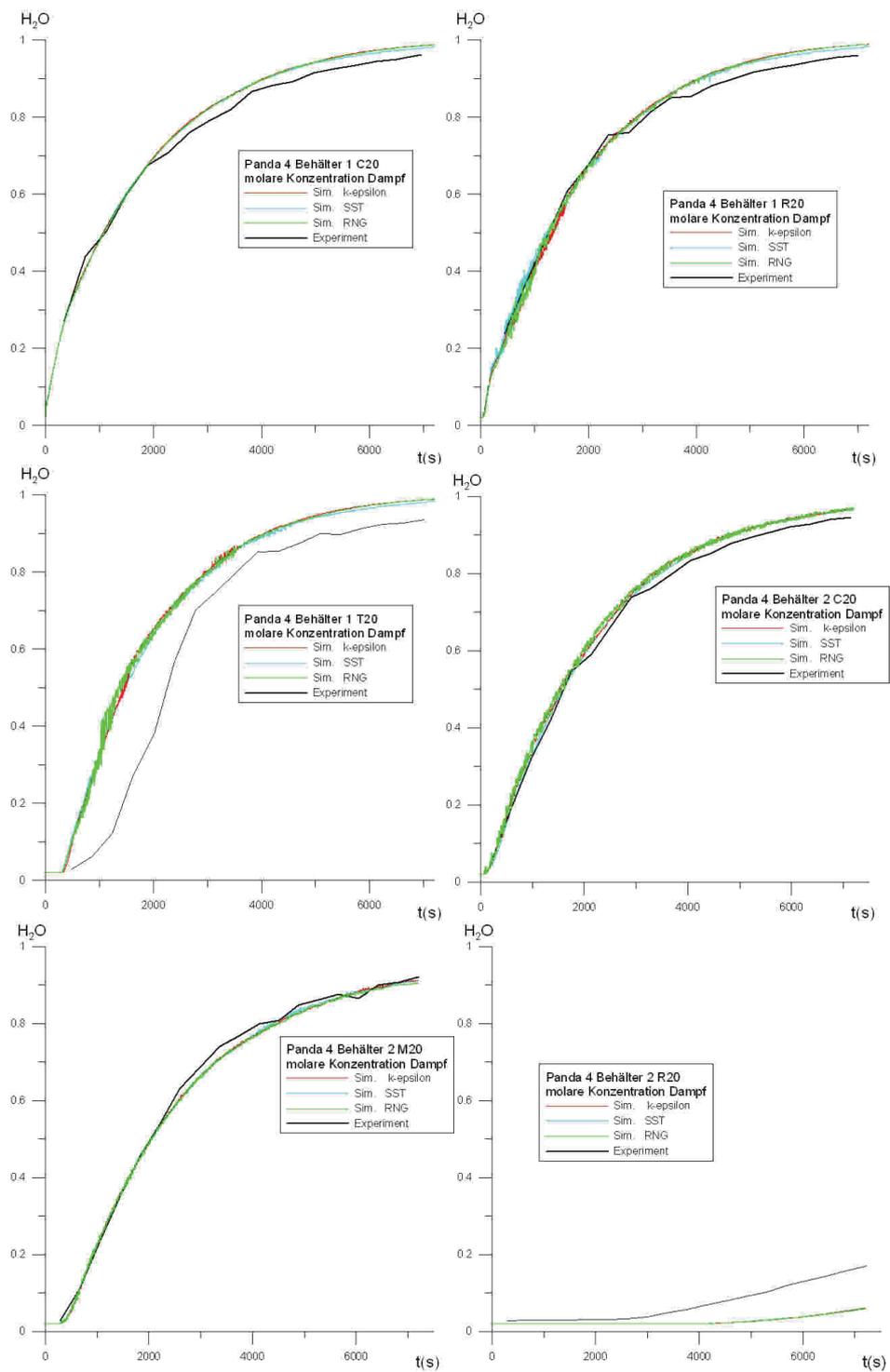


Abb. 5.3-10 Vergleich der gemessenen und der mit verschiedenen Turbulenzmodellen berechneten Dampfkonzentration an verschiedenen Messstellen in beiden Behältern

### 5.3.7 Modifikation der turbulenten Schmidt-Zahl

Die turbulente Schmidt-Zahl ist eine dimensionslose Kennzahl die durch:

$$Sc_t = \frac{\nu}{D_t}$$

definiert ist. Dabei ist  $\nu$  die kinematische Viskosität und  $D_t$  die turbulente Diffusivität.

In mehreren Versuchsnachrechnungen konnten mit einer Verringerung der turbulenten Schmidt-Zahl bessere Ergebnisse erzielt werden. Um den Einfluss von  $Sc_t$  auf die Simulationsergebnisse zu untersuchen, wurde auch eine Rechnung mit  $Sc_t = 0,2$  durchgeführt. Bei dieser Rechnung konnte kein deutlicher Einfluss der turbulenten Schmidt-Zahl auf die berechneten Dampfkonzentrationen festgestellt werden (Abb. 5.3-11). beim Messpunkt T20 im 1. Behälter ist ein kleiner Unterschied festzustellen. Hier liegt die Simulation mit der Schmidt-Zahl 0,2 geringfügig näher bei den experimentellen Daten.

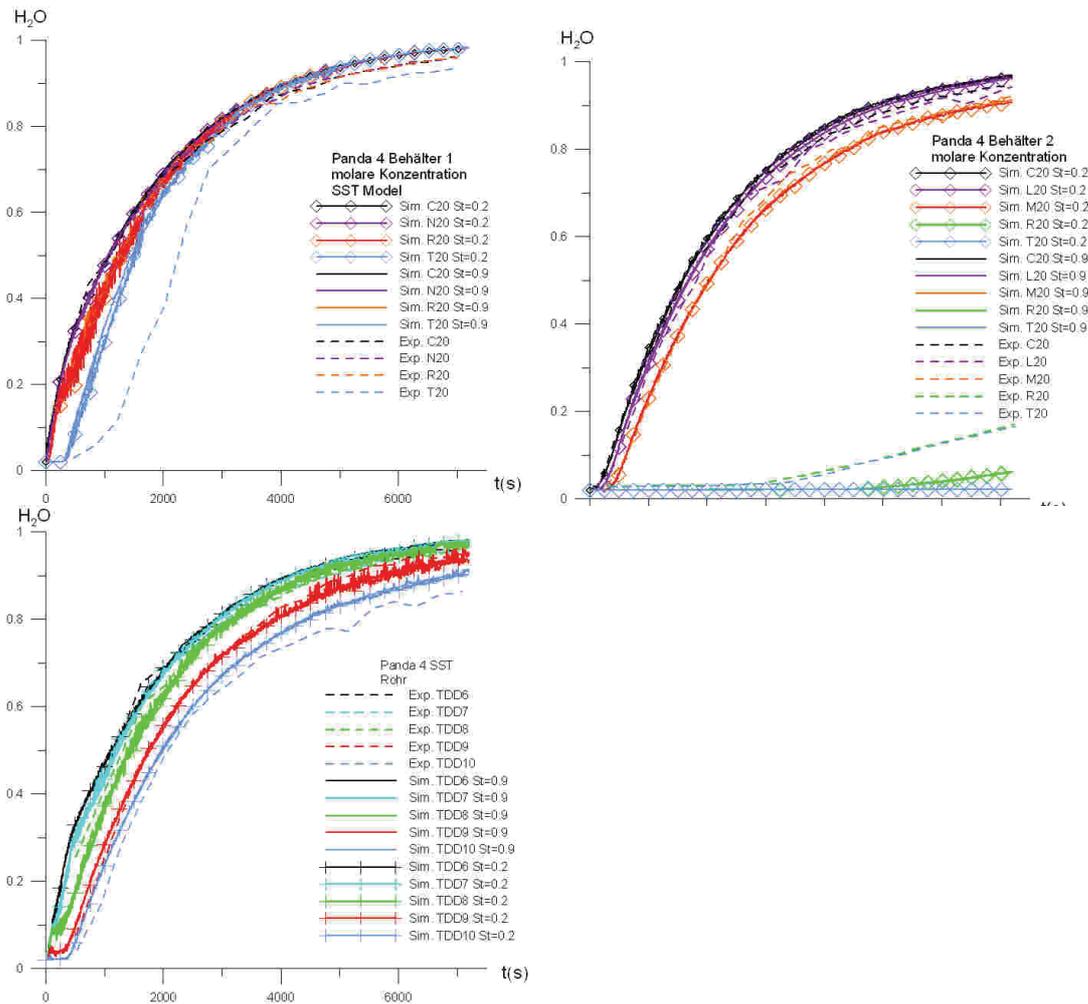


Abb. 5.3-11 Einfluss der turbulenten Schmidt-Zahl

### 5.3.8 Einfluss der Turbulenzintensität am Einlass auf die Dampfkonzentration

In früheren Versuchsnachrechnungen (z. B. beim Versuch TH-18) hat sich gezeigt, dass die Turbulenzintensität am Einlass einen signifikanten Einfluss auf die Strömung im Versuchsstand haben kann. Deshalb sollte auch hier ihr Einfluss untersucht werden. Im Gegensatz den THAI-Experimenten TH-18 und TH-20, bei denen ein Geschwindigkeitsprofil und auch die Turbulenzintensität an einem Gebläseaustritt vorgegeben werden müssen, wurde beim PANDA-4-Experiment der letzte Teil des Rohres, durch das der Dampf in den Behälter einströmt, ebenfalls in das CFD-Gitter integriert (Abb. 5.3-2). Daher werden im Inneren des Rohres ein Geschwindigkeitsprofil und auch die Turbulenz vorgegeben. Es kann davon ausgegangen werden, dass sich bis zum Rohr-

austritt ein physikalisches Geschwindigkeits- und Turbulenzprofil ausgebildet hat. Erwartungsgemäß ist kein signifikanter Einfluss der vorgegebenen Turbulenzintensität erkennbar. Würde der Einlass an den Rohraustritt verlegt, so kann davon ausgegangen werden, dass die Sensitivität von diesen Parametern steigen würde.

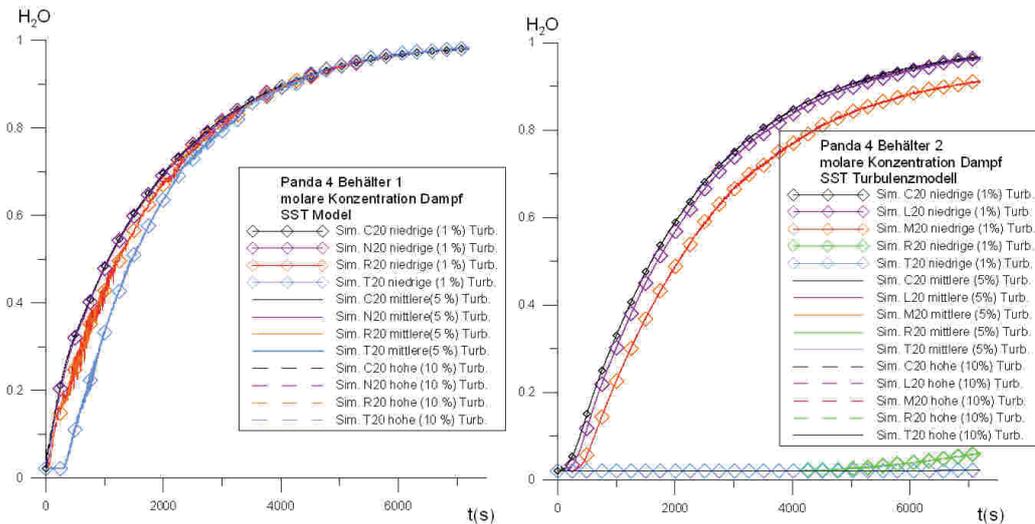


Abb. 5.3-12 Dampfkonzentration in Behälter 1 und 2 in Abhängigkeit von der Turbulenzintensität am Einlass. Einfluss der Wärmeverluste an den Wänden.

### 5.3.9 Modellierung der Wärmeverluste an den Wänden

In den bisher durchgeführten Simulationen wurden die Wärmeverluste an den Behälterwänden vernachlässigt. Mit der folgenden Simulation soll gezeigt werden, dass diese Annahme von adiabatischen Randbedingungen zu keiner signifikanten Abweichung bei der Simulation der Gaskonzentration führt. Dazu wurde eine Simulation durchgeführt, bei der die Behälterwände im CFD-Gitter diskretisiert werden. Für diesen Festkörper wurde die dreidimensionale Wärmeleitungsgleichung gelöst und der Wärmeaustausch mit dem Gas berechnet. In der Beschreibung des PANDA-Versuchsstandes sind die Wärmeverluste an den Behälteraußenwänden als Funktion der Gas-temperatur im Innern angegeben. Diese Wärmeverluste wurden als Randbedingung für die Behälteraußenwände vorgegeben. Bei dieser Simulation wurde das SST-Turbulenzmodell verwendet.

Ein Vergleich der beiden Rechnungen mit der unterschiedlichen Modellierung der Behälterwände zeigt, dass sich kaum Unterschiede in den berechneten Gaskonzentrationen zeigen.

nen ergeben (Abb. 5.3-13). Deshalb ist die Annahme adiabatischer Außenwände bei der Simulation des PANDA-4-Experiments ausreichend genau. Bei der Simulation des PANDA-4bis-Versuchs (siehe Abschnitt 2.3) müssen dagegen die Behälterwände detailliert modelliert werden, da an den kälteren Wänden Kondensation stattfindet und im Versuchsverlauf auch eine Aufheizung der Wände stattfindet.

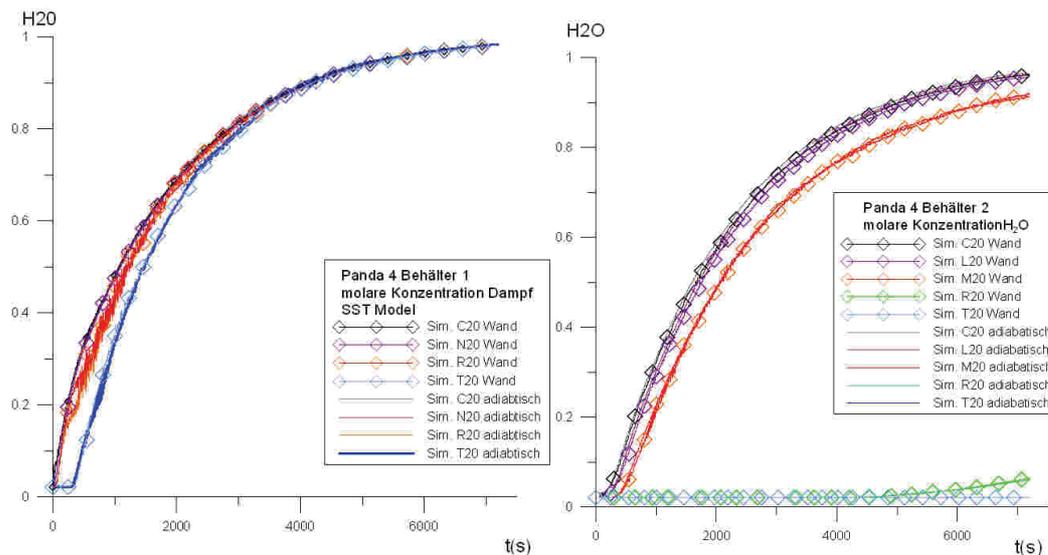


Abb. 5.3-13 Einfluss der Modellierung der Wärmeverluste an den Wänden auf die Dampfkonzentration

### 5.3.10 Zusammenfassung

Das Experiment PANDA-4 wurde mit CFX-11 nachgerechnet und die berechnete Wasserdampfkonzentration mit experimentellen Daten verglichen.

Die berechneten Wasserdampfkonzentrationen im Behälter 1 stimmen gut mit den gemessenen Werten überein. Im unteren Teil des Behälters erfolgt der Anstieg der Dampfkonzentration zu schnell. Auch im zweiten Behälter stimmt die Dampfkonzentration oberhalb der des Verbindungsrohres gut mit den Messergebnissen überein und bei den unteren Messstellen sind größere Abweichungen zwischen Simulation und Experiment zu beobachten.

Es wurde der Einfluss der Turbulenzmodellierung auf das Simulationsergebnis untersucht. Hierzu wurde eine Rechnung mit dem SST-, dem  $k-\epsilon$ -, dem RNG- $k-\epsilon$ - und dem

SSG-Reynolds-Stress-Modell durchgeführt. Die Rechnung mit dem Reynolds-Stress-Modell ist aufgrund numerischer Schwierigkeiten nach ca. 246 s abgestürzt. Die anderen drei Rechnungen liefern sehr ähnliche Simulationsergebnisse. Allerdings benötigte die Rechnung mit dem SST-Modell wegen besserer Konvergenz weniger Rechenzeit.

In den Bereichen, bei denen deutliche Abweichungen zu den experimentellen Daten vorliegen, wurde in den Rechnungen keine gitterunabhängige Lösung entsprechend den „Best Practice Guidelines“ erreicht. Die Veränderung bei Gitterverfeinerung ist gering im Vergleich zu den Abweichungen von den experimentellen Daten. Eine weitere Gitterverfeinerung war aufgrund der begrenzten Rechenkapazität nicht möglich.

Als weitere Parameter wurden der Einfluss der turbulenten Schmidt-Zahl, der Einfluss der Turbulenzintensität am Einlass und der Einfluss der Modellierung des Wärmeeintrags in die Wände untersucht. Diese Parameter führen aber zu keiner signifikanten Änderung der berechneten Dampfkonzentrationen.



Unstrukturierte Zellen werden unterhalb der beiden Einspeisestellen verwendet. Das Gitter wird vor allem im Bereich der Einspeisestellen und im Bereich der beiden resultierenden Plumes verfeinert. Die Stahlwände sind in das CFD-Gitter integriert, in ihnen berechnet CFX die dreidimensionale Wärmeleitung.

Die Simulation wurde mit CFX-11 durchgeführt. Es wird eine URANS (unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes) Simulation mit CFX-11 durchgeführt. Die Turbulenz wird mit dem SST-Modell (Shear-Stress-Transport) simuliert. Die Wand- und die Volumen Kondensation wird mit dem GRS-Kondensationsmodell berechnet.

### **5.4.3 Rechenzeit und Konvergenz**

Die für die Simulation des HM-2-Versuchs benötigte Rechenzeit war extrem hoch, sie betrug ca. 196 CPU-Tage. Da die Simulation parallel auf 4 CPUs durchgeführt wurde dauerte sie ca. 49 Tage. Der Grund für diese hohe Rechenzeit ist das Konvergenzverhalten, das sich im Laufe der transienten Rechnung verschlechtert (Abb. 5.4-2). Bei den durchgeführten Simulationen sollte mindestens das Standardkonvergenzkriterium von  $1.0e-4$  für das RMS-Residuum eingehalten werden. Dies konnte bis zu ca. 1650 s Problemzeit mit einem Zeitschritt von  $\Delta t = 0,05$  s erreicht werden. Aber die Konvergenz verschlechtert sich für die Residuen der drei Geschwindigkeitskomponenten kontinuierlich. Ab ca. 1650 s musste der Zeitschritt auf  $\Delta t = 0,025$  s halbiert werden, um eine konvergente Lösung zu finden. Nach ca. 2800 s konnte selbst mit einem Zeitschritt von  $\Delta t = 0,01$  s keine konvergente Lösung mehr gefunden werden, es wäre eine weitere Zeitschrittreduktion notwendig gewesen. Da dadurch die benötigte Rechenzeit zu hoch würde, wurde der Zeitschritt nicht angepasst, obwohl dadurch das Konvergenzkriterium nicht mehr eingehalten werden konnte. Nach ca. 3000 s wurde der Zeitschritt wieder erhöht, da dadurch eine Simulation des gesamten Versuchs (insbesondere auch der 2. Phase) möglich war.

Das Konvergenzverhalten deutet darauf hin, dass zumindest in Teilen des Simulationsgebiets Prozesse ablaufen, deren Zeitskala sich im Laufe der Simulation verringert, wodurch ein kleinerer Zeitschritt notwendig wird. Dies ist erstaunlich, da sich insbesondere in der ersten Versuchsphase die großskalige  $H_2$ -Verteilung und die Strömung in den Bereichen mit einer großen Strömungsgeschwindigkeit zeitlich sehr langsam ändern (Abb. 5.4-4, Abb. 5.4-5). Größere zeitliche Unterschiede sind aber bei der Strö-

mungsgeschwindigkeit unterhalb der H<sub>2</sub>-Einspeisung zu beobachten (Abb. 5.4-5). In diesem Bereich ist der Absolutwert der Strömungsgeschwindigkeit vergleichsweise klein. Die Strömung hat in diesem Bereich keine durch die Einströmung vorgegebene Richtung, sondern ist relativ „chaotisch“ und ändert sich deutlich im zeitlichen Verlauf. Möglicherweise ist diese ungerichtete Strömung für das sich verschlechternde Konvergenzverhalten verantwortlich.

Aufgrund der Verletzung des Konvergenzkriteriums ist mit einem großen numerischen Fehler zu rechnen, weshalb die im Folgenden beschriebenen Simulationsergebnisse begrenzt belastbar sind. Insbesondere die Geschwindigkeit der Schichtungsauflösung kann durch numerische Fehler deutlich beeinflusst werden (z. B. numerische Diffusion). Eine genaue Abschätzung des Einflusses der numerischen Fehler ist schwierig. Möglich ist, die Massenbilanz zu prüfen. Da kein N<sub>2</sub> in der Simulation eingespeist wird, sollte die N<sub>2</sub>-Masse konstant sein. In der Simulation wird in der N<sub>2</sub>-Masse ein relativer Fehler von 1,6 % beobachtet (Abb. 5.4-3), was in Anbetracht der Verletzung des Konvergenzkriteriums ein besseres Ergebnis ist, als es zu erwarten war.

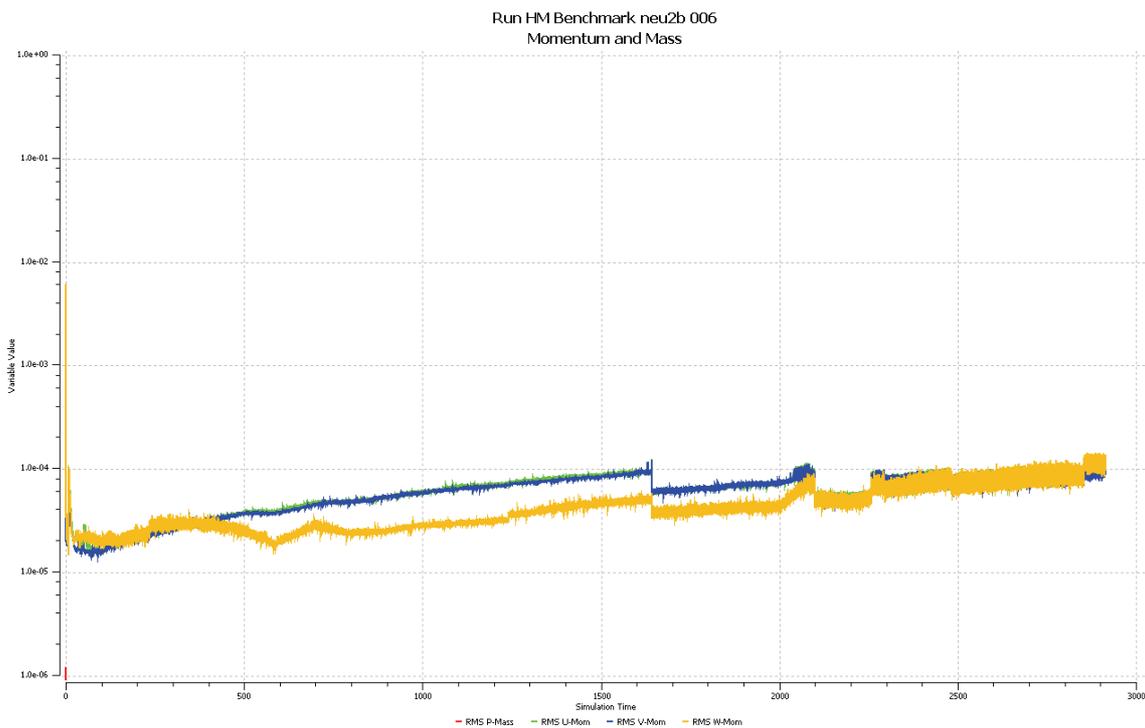


Abb. 5.4-2 Konvergenz für die Geschwindigkeitskomponenten u,v,w und für den Druck

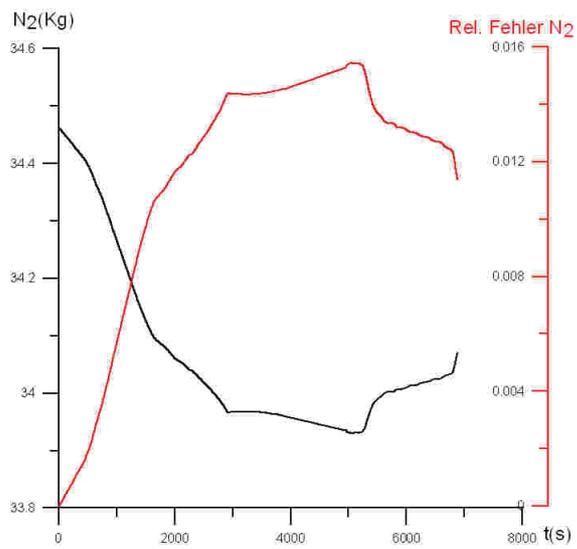


Abb. 5.4-3 Gesamtmasse N<sub>2</sub> und relativer Fehler bei der N<sub>2</sub>-Masse

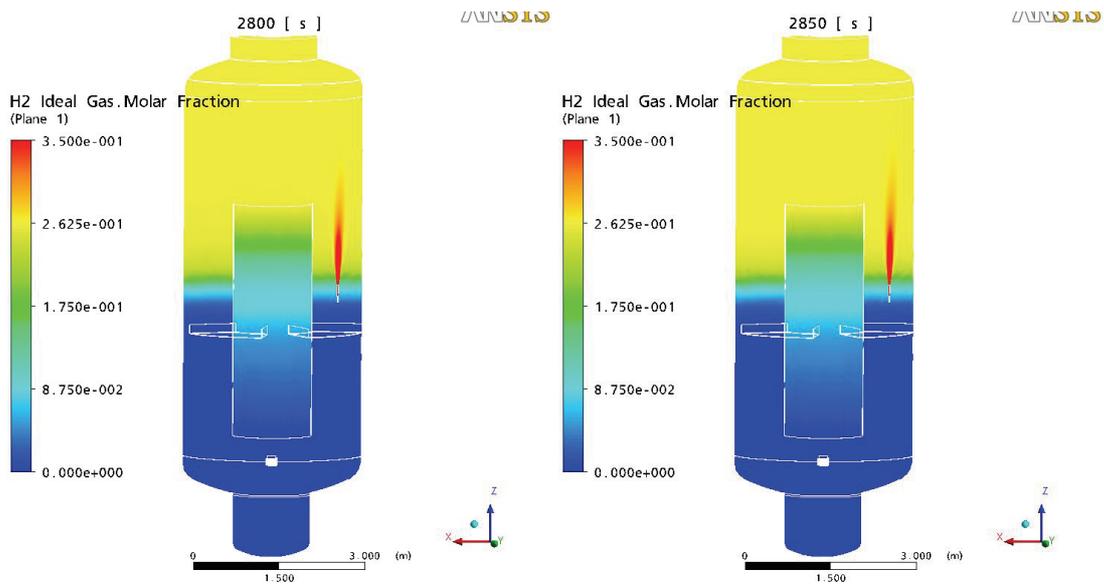


Abb. 5.4-4 H<sub>2</sub>-Konzentration zum Zeitpunkt 2800 s und 2850 s

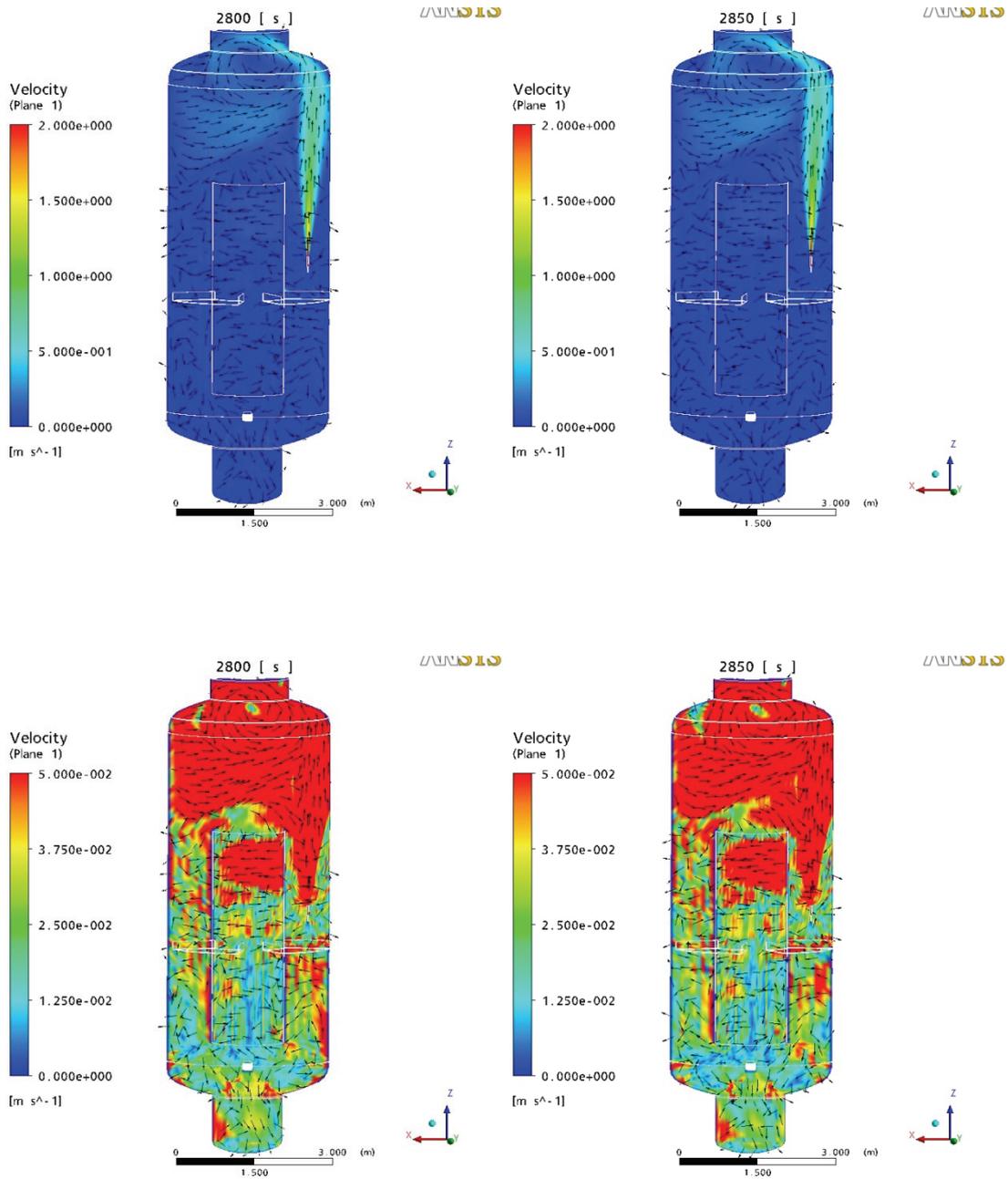


Abb. 5.4-5 Strömungsgeschwindigkeit nach 2800 s bzw. 2850 s bei unterschiedlicher Geschwindigkeitsskala (oben: 0 – 2 m/s, unten: 0 – 0,05 m/s)

## 5.4.4 Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten

### 5.4.4.1 Phase 1: Aufbau der H<sub>2</sub>-Schichtung

Bei der Simulation kommt es in der ersten Versuchsphase (0 s - 4300 s) zum Aufbau einer stabilen H<sub>2</sub>-Schicht im oberen Bereich des THAI-Behälters. Wenn man vom H<sub>2</sub>-Jet absieht, herrschen in dieser Schicht kaum H<sub>2</sub>-Konzentrationsunterschiede (Abb. 5.4-6, Abb. 5.4-12). Die Konzentration in der H<sub>2</sub>-Schicht steigt linear während der ersten Versuchsphase an.

Im Annulus reicht die H<sub>2</sub>-Schicht bis ca. zur Höhe der H<sub>2</sub>-Einspeisung und es schließt sich eine dünne Schicht mit einem starken H<sub>2</sub>-Gradienten an. Im Innenzylinder ist der H<sub>2</sub>-Gradient viel geringer, die Grenzschicht erstreckt sich nach 4000 s fast über den gesamten Innenzylinder. Im unteren Bereich des THAI-Behälters ist die Wasserstoffkonzentration sehr gering.

Die von CFX berechnete Gasverteilung stimmt mit den im Experiment beobachteten Phänomenen überein. In den ersten 2000 s sind sehr geringe Abweichungen zwischen Experiment und Simulation für die H<sub>2</sub>-Konzentrationen zu beobachten (Abb. 5.4-13). Danach erfolgt der Konzentrationsanstieg in der oberen Behälterhälfte etwas langsamer als im Experiment (z. B. M11 oder M16 in Abb. 5.4-13).

Die von CFX berechnete Konzentration in der H<sub>2</sub>-Schicht wird am Ende der 1. Einspeisephase um 2 - 3 vol.% unterschätzt. Im Experiment werden nach 4200 s in der H<sub>2</sub>-Schicht Konzentrationen von 37 - 38 vol.% gemessen, während in der Simulation H<sub>2</sub>-Konzentrationen von 35 - 35,5 vol.% berechnet werden. Die sehr niedrige H<sub>2</sub>-Konzentration in der unteren Behälterhälfte wird richtig simuliert (M3 in Abb. 5.4-13). Der einzige Messpunkt, an dem eine signifikante Abweichung zwischen Simulation und Experiment besteht, ist M5 in Abb. 5.4-13. Er liegt im Innenzylinder auf der Höhe von 4,67 m.

Der Druck steigt sowohl in der Simulation als auch im Experiment linear an. In der Simulation wird der Druck ab ca. 1000 s etwas unterschätzt (Abb. 5.4-14). Die Abweichung von ca. 2000 Pa lässt sich durch den Fehler in der Massenbilanz erklären, der relativ gesehen ähnlich groß ist (Abb. 5.4-3).

Die Temperatur bleibt während der ersten Phase nahezu konstant. Dies wird von CFX richtig simuliert (Abb. 5.4-15).

#### **5.4.4.2 Phase 2: Auflösung der Schichtung**

Die 2. Versuchsphase kann in 2 Abschnitte unterteilt werden, bei denen unterschiedliche physikalische Prozesse ablaufen. In der Phase 2 a wird die H<sub>2</sub>-Konzentration im Innenzylinder nach Beginn der Dampfeinspeisung (4320 s) schnell abgesenkt und im Innenzylinder befindet sich eine hohe Dampfkonzentration. Am oberen Rand des Innenzylinders findet ein relativ schwacher Massenstrom seitlich und nach unten in den Annulus statt (Abb. 5.4-7, 4400 s). In dieser Phase herrscht ein großer Konzentrationsunterschied zwischen Innenzylinder und Annulus (Abb. 5.4-6, 4400 s und 4650 s). In der Simulation setzt nach ca. 4750 s ein Naturumlauf ein, bei dem Gas aus dem Annulus von unten in den Innenzylinder strömt (Abb. 5.4-7, 4850 s). In dieser Phase wird ein deutlich geringerer Konzentrationsunterschied zwischen Innenzylinderbereich und Annulus berechnet. In der Phase 2 b wird die H<sub>2</sub>-Schicht oberhalb des Innenzylinders erodiert. In der Simulation ist die Auflösung der H<sub>2</sub>-Schicht nach ca. 5250 s abgeschlossen.

Diese physikalischen Abläufe wurden auch im Experiment beobachtet. Der schlagartige Abfall der H<sub>2</sub>-Konzentration im Innern des Innenzylinders wird von CFX richtig simuliert (Abb. 5.4-13, Messstellen M5, M7). Die minimale H<sub>2</sub>-Konzentration im Innenzylinder ist in der Simulation niedriger. Die Dauer der Phase 2 a wird relativ gut vorhergesagt, in der Simulation dauert diese Phase ca. 430 s, während sie in dem Experiment ungefähr 500 s ± 25 s dauert.

Auch im Experiment findet in der Phase 2 b eine kontinuierliche Erosion der H<sub>2</sub>-Wolke statt, allerdings erfolgt diese Erosion deutlich langsamer als in der Simulation. Im Experiment ist die Homogenisierung nach ca. 5840 s abgeschlossen, während dies in der Simulation schon nach ca. 5240 s der Fall ist. Nach Ende der 1. Phase war die Schichtung in der Simulation etwas schwächer ausgeprägt als im Experiment. Diese Abweichung in den Anfangsbedingungen der 2. Versuchsphase wird einen Betrag zur schnelleren Homogenisierung leisten. Es ist aufgrund des geringen Konzentrationsunterschieds (~35,5 vol.% (Sim.) zu ~37,5 vol.% (Exp.)) unwahrscheinlich, dass dies als Erklärung ausreicht.

Beim Vergleich des Druckverlaufs in der Phase 2 a beobachtet man in der Simulation einen deutlich stärkeren und schnelleren Druckanstieg als im Experiment (Abb. 5.4-14). Der deutliche Druckunterschied kommt vermutlich durch eine unterschiedlich starke Kondensation zustande. In dieser Versuchsphase wird in der Simulation im Inneren des Innenzylinders eine höhere Dampfkonzentration gemessen und deshalb wird in diesem Bereich eine deutliche Kondensation stattfinden (Abb. 5.4-8, Abb. 5.4-9). Mögliche Ursachen für die Unterschätzung der Kondensation wären:

- Vernachlässigung der Kondensation und der Wärmeverluste an der Einlassdüse
- Fehlerhafte Berechnung der Dampf- und Temperaturverteilung
- Fehlerhafte Berechnung der Wandkondensation am Innenzylinder und der Volumenkondensation in diesem Bereich

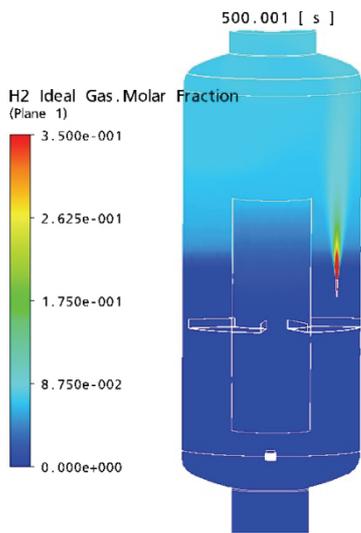
Nach Beginn der Naturkonvektion verteilt sich der Dampf auch in den Annulus und der Druck fällt wieder ab. Er liegt nach 5000 s noch geringfügig höher als im Experiment und der Druckverlauf wird für diese späte Versuchsphase durch die Simulation richtig wiedergegeben.

Die Temperatur im Annulus (Abb. 5.4-15, M19, M20) wird in der zweiten Phase bis zur Homogenisierung der Gasverteilung um bis zu 10 K überschätzt.

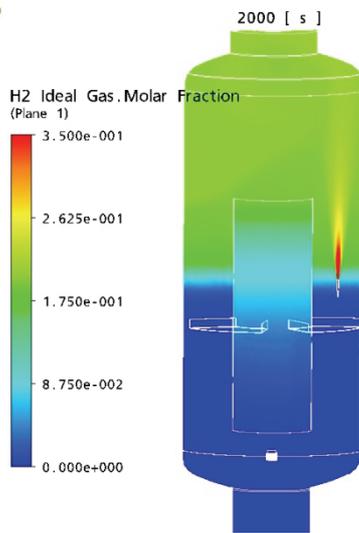
Am oberen Ende des Innenzylinderbereichs wird die Temperatur während der Phase 2 a von der Simulation gut wiedergegeben (Abb. 5.4-15, M21). Mit Beginn der Naturkonvektion fällt im Experiment die Temperatur um ca. 10 K auf ein niedrigeres Niveau ab, während in der Simulation der Temperaturabfall deutlich geringer ausfällt (ca. 5 K).

In der Simulation ist das Gas unterhalb der H<sub>2</sub>-Schicht um 5-10 K heißer als im Experiment.

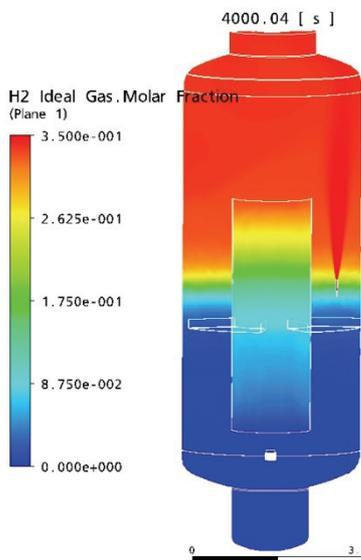
Da der einströmende Dampf heißer als das Gas in der stabilen H<sub>2</sub>-Schicht ist, breitet sich mit fortschreitender Erosion der Schichtung auch der Bereich mit heißerem Gas aus (Abb. 5.4-9). Wie schon beim Vergleich der H<sub>2</sub>-Konzentrationen diskutiert, erfolgt der Schichtungsabbau schneller als im Experiment (Abb. 5.4-15, M25, M28). Nachdem die Homogenisierung erfolgt ist, wird die Temperatur von der Simulation an allen Messstellen in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet.



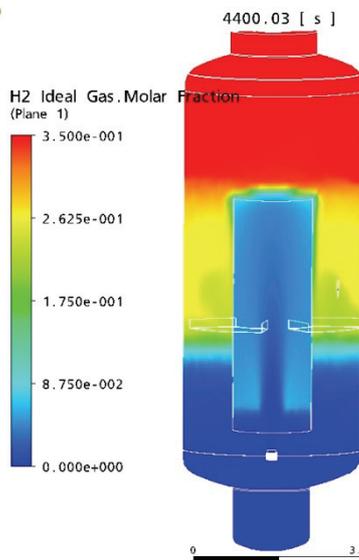
ANSYS



ANSYS



ANSYS



ANSYS

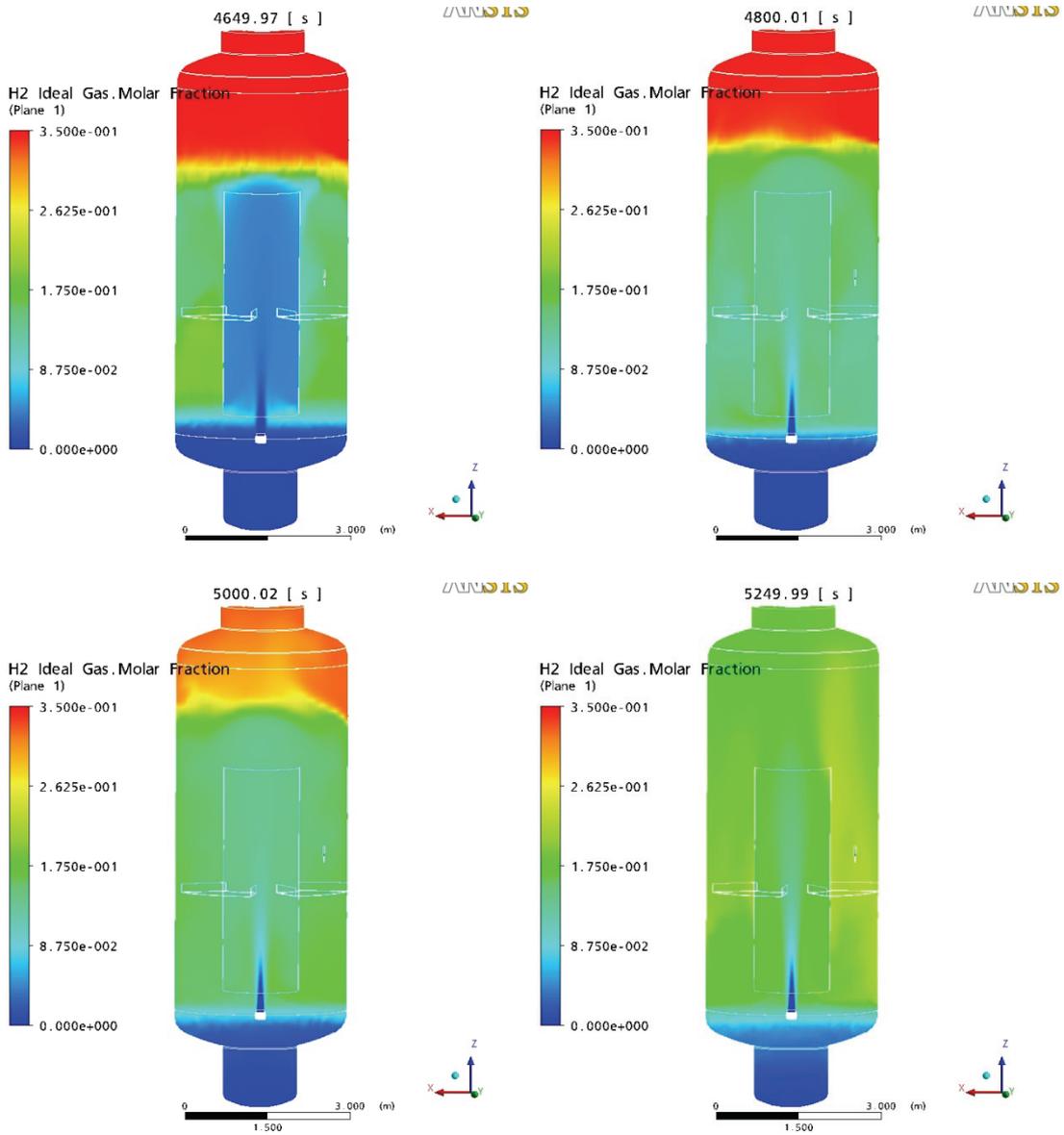


Abb. 5.4-6 Wasserstoffkonzentration zu verschiedenen Zeitpunkten

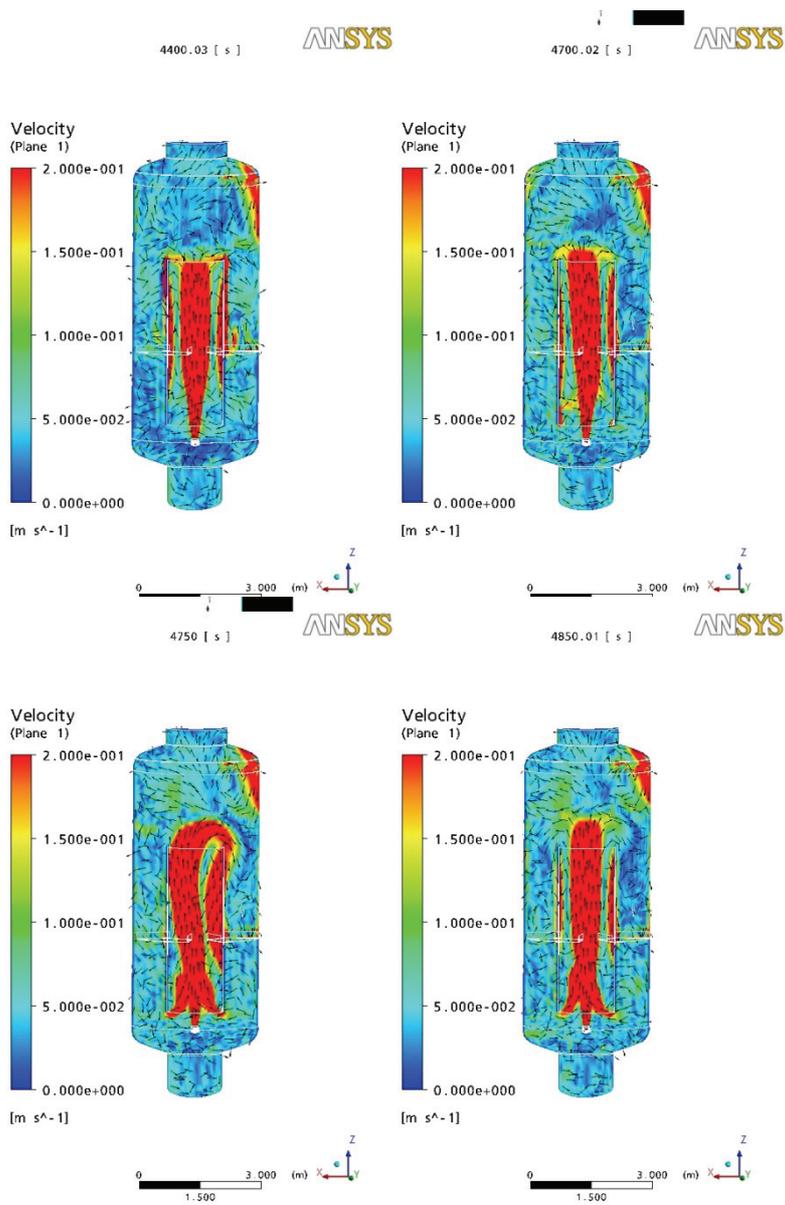


Abb. 5.4-7 Geschwindigkeit im THAI-Behälter

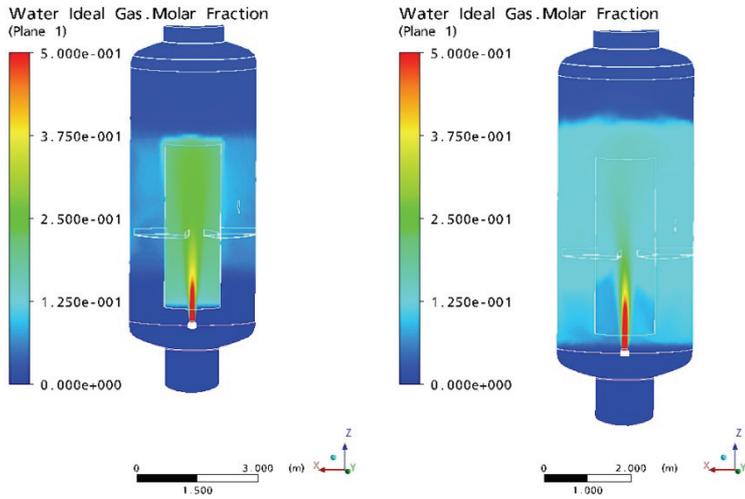


Abb. 5.4-8 Dampfkonzentration nach 4500 s und 4800 s

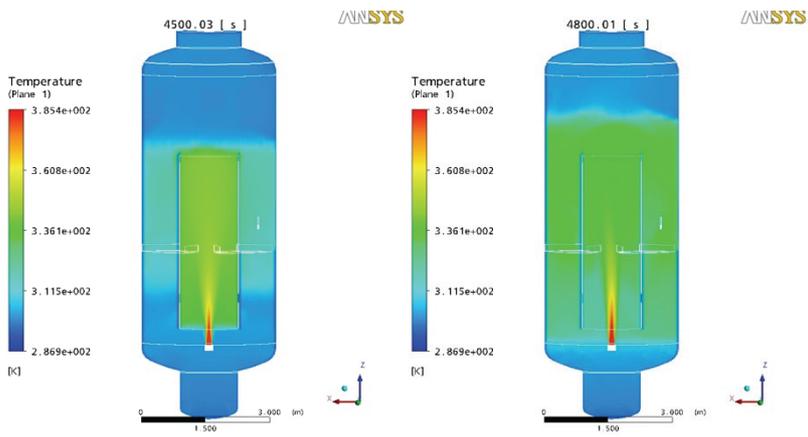


Abb. 5.4-9 Temperatur nach 4500 s und 4800 s

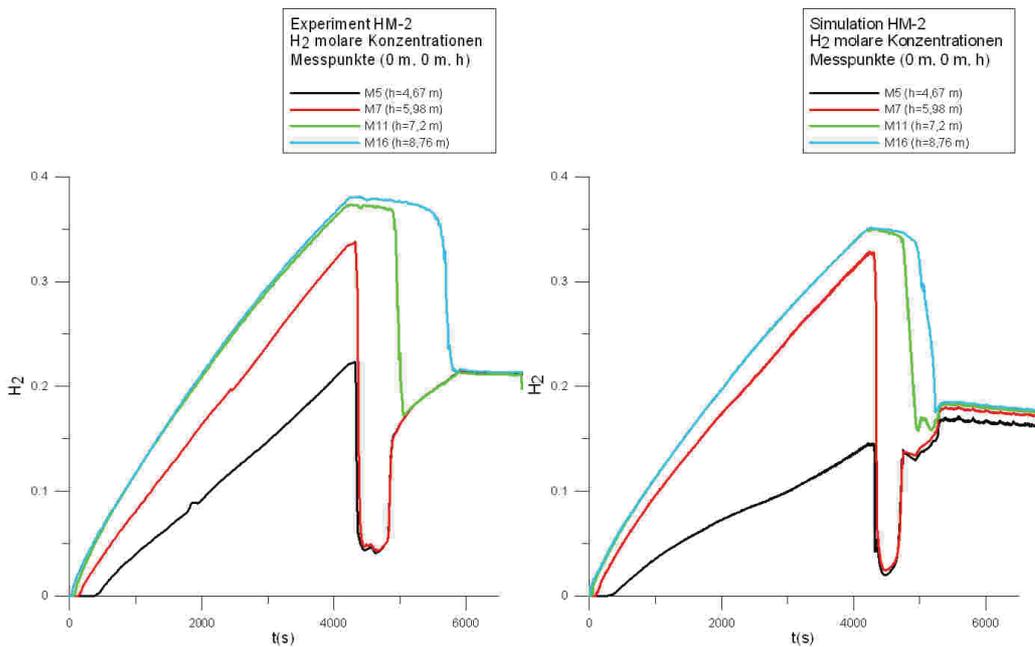


Abb. 5.4-10 Vergleich der H<sub>2</sub>-Konzentrationen entlang der Höhenlinie in der Behältermitte

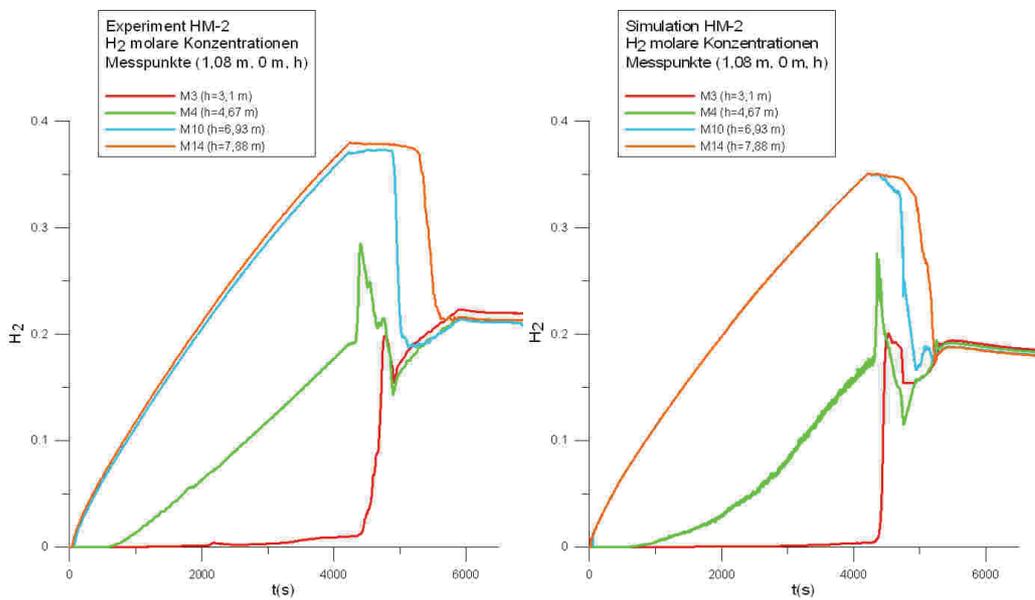


Abb. 5.4-11 Vergleich der H<sub>2</sub>-Konzentrationen entlang der Höhenlinie (1,08 m, 0 m, Höhe)

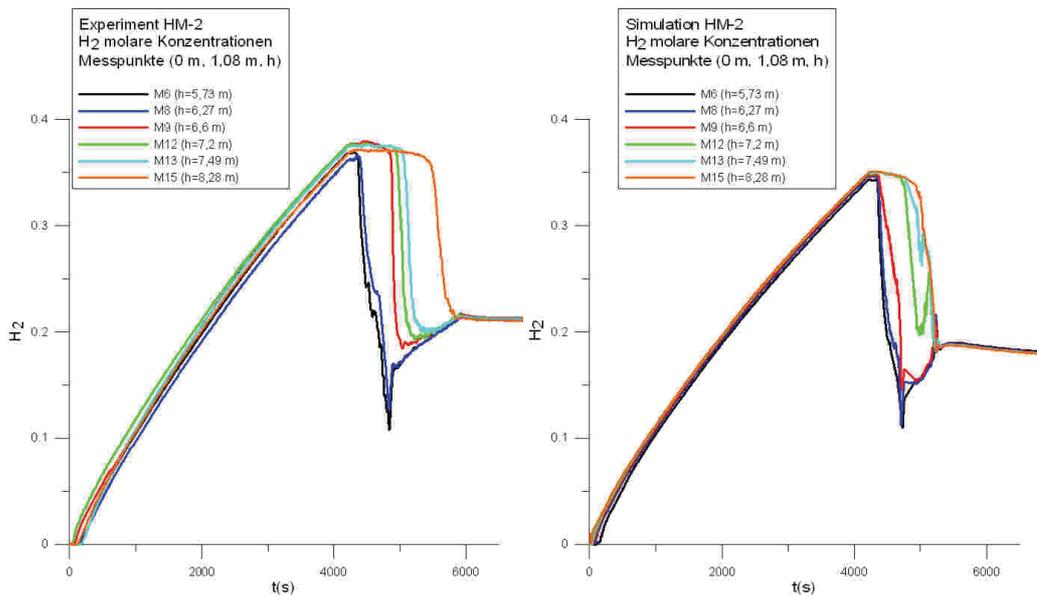
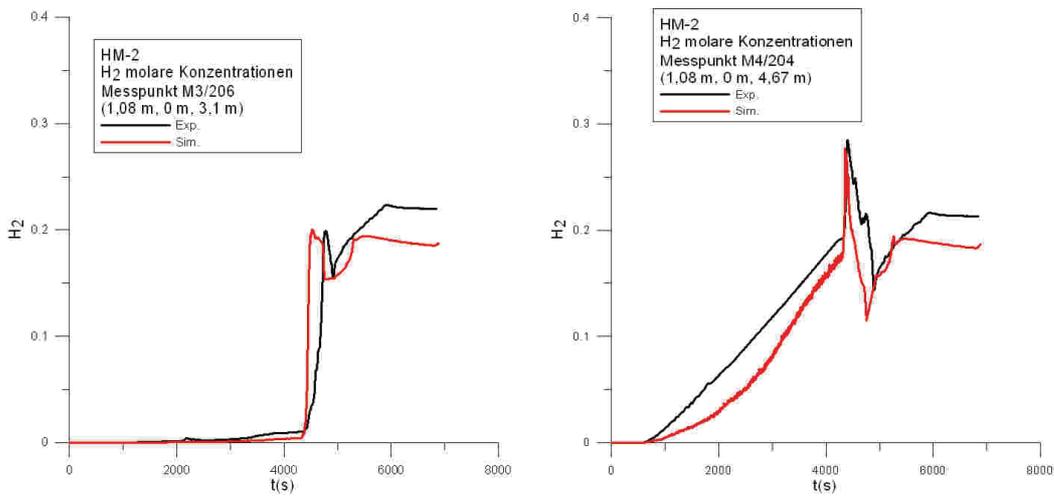
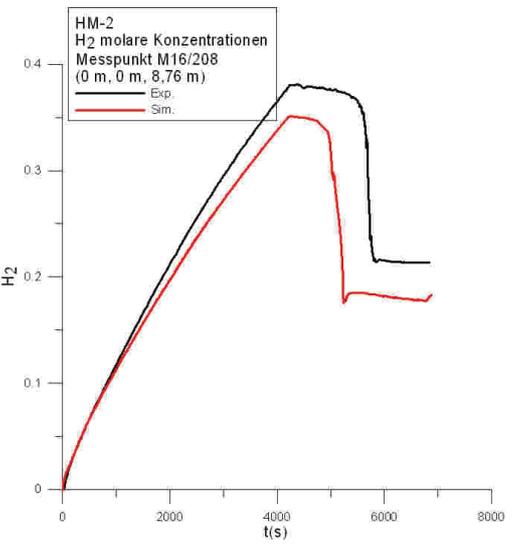
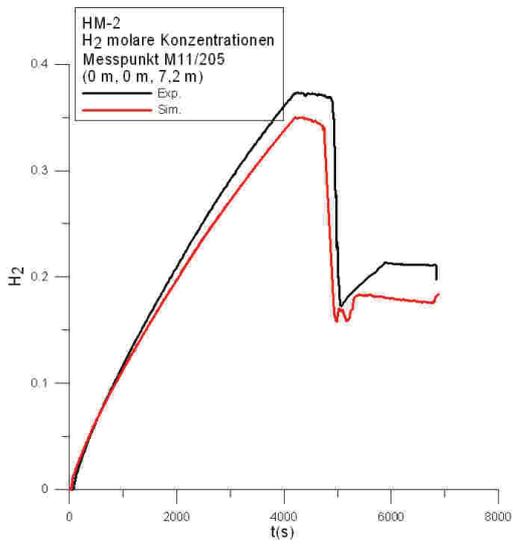
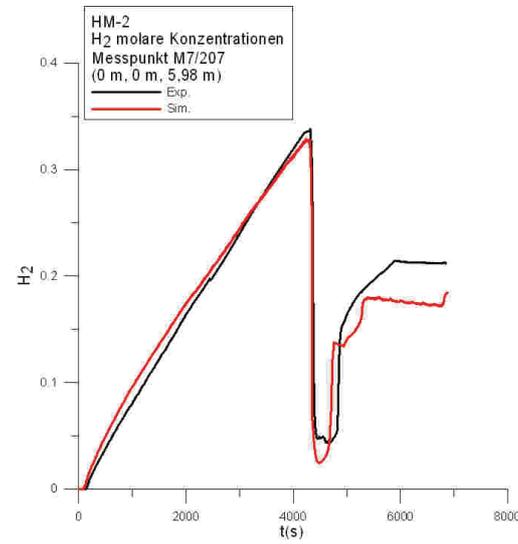
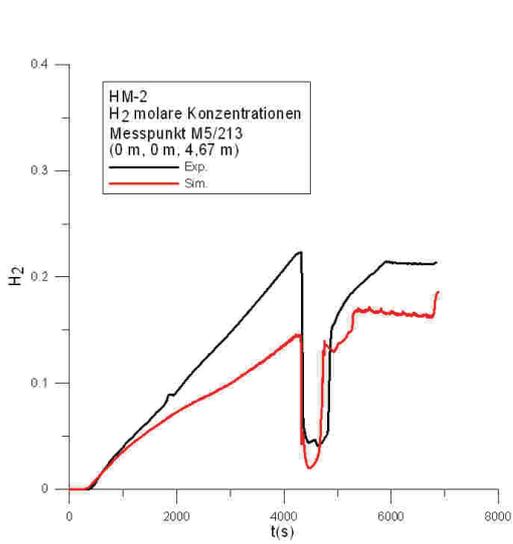
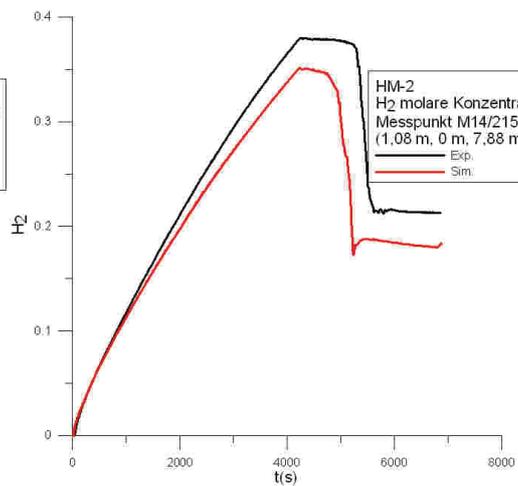
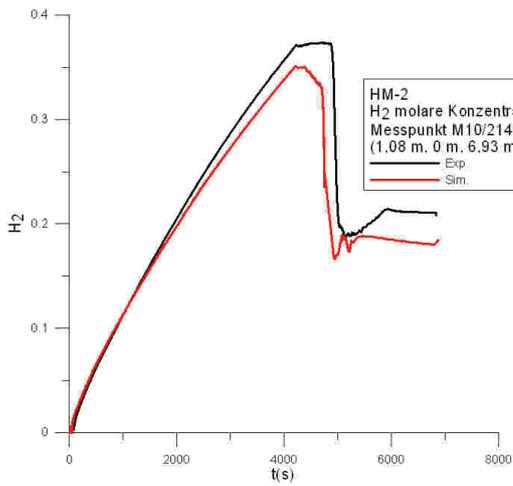


Abb. 5.4-12 Vergleich der H<sub>2</sub>-Konzentrationen entlang der Höhenlinie (0 m, 1.08 m, Höhe)





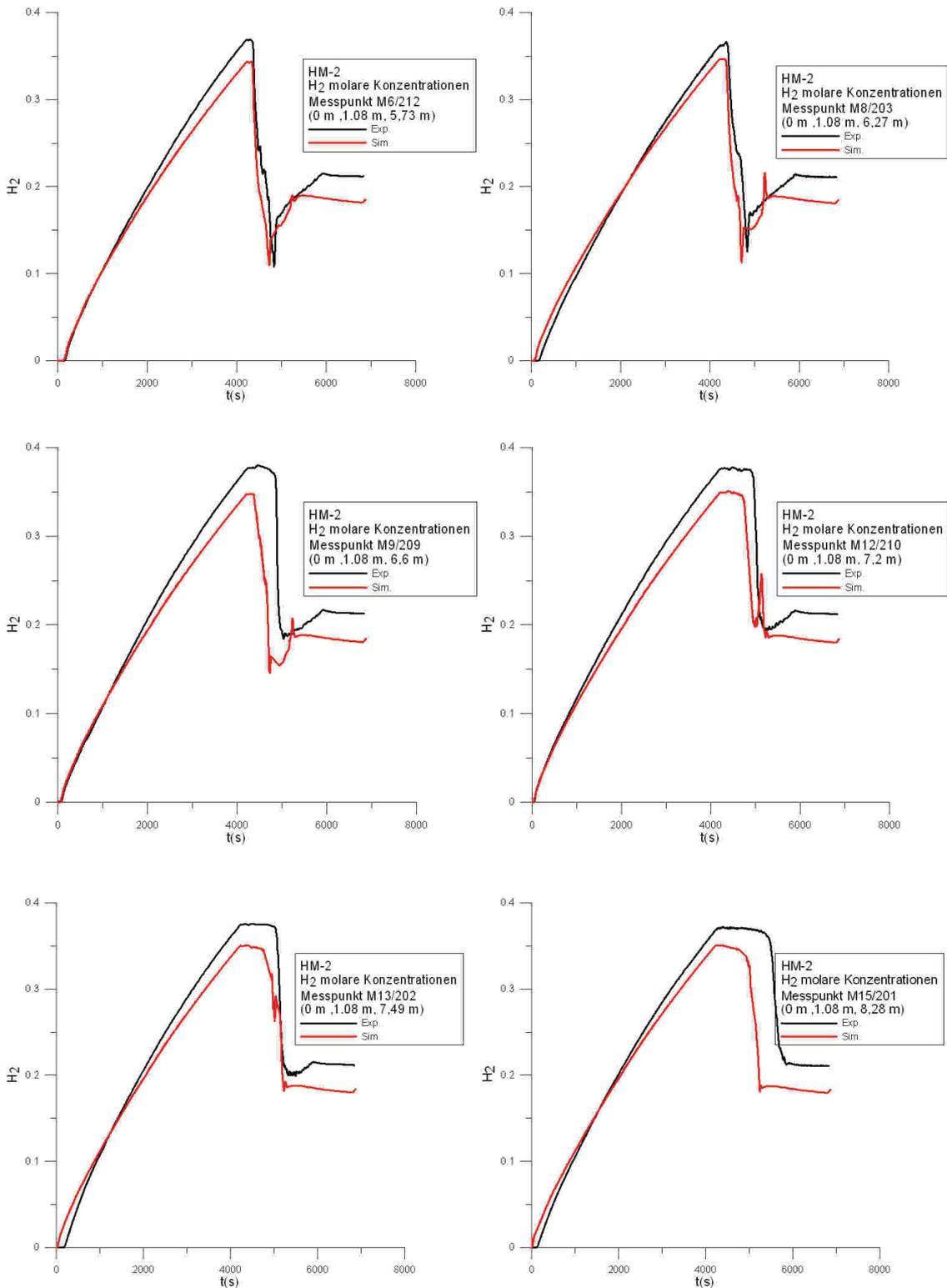


Abb. 5.4-13 H<sub>2</sub>-Konzentration an verschiedenen Messstellen

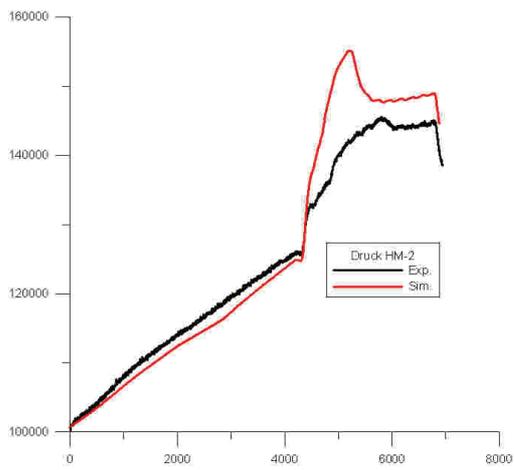
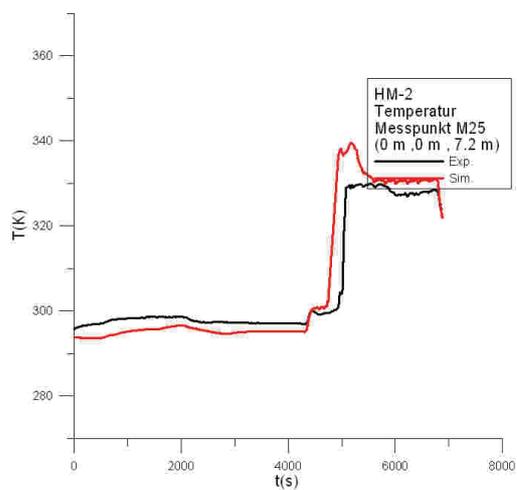
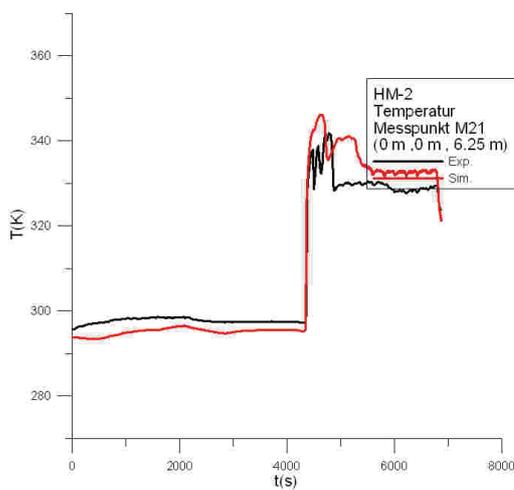
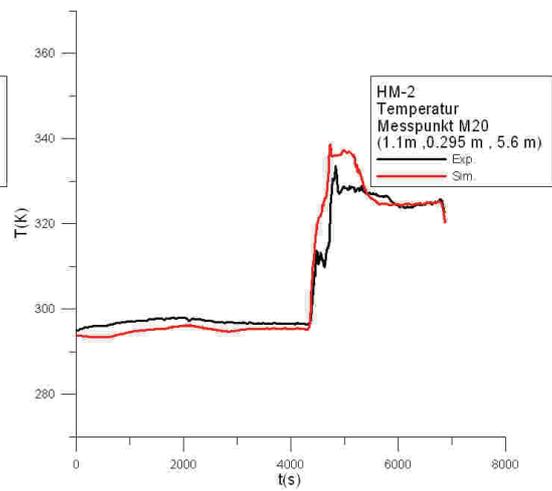
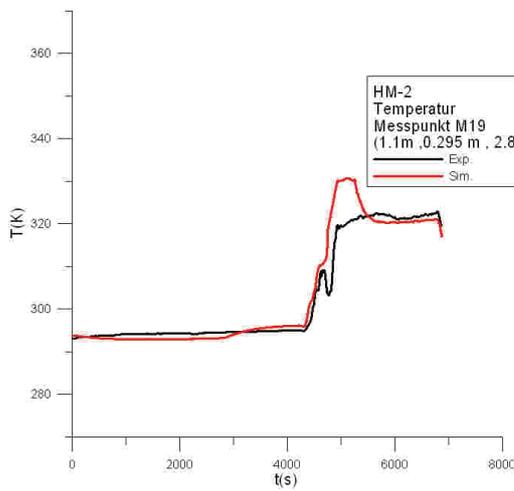


Abb. 5.4-14 Druck im THAI-Behälter



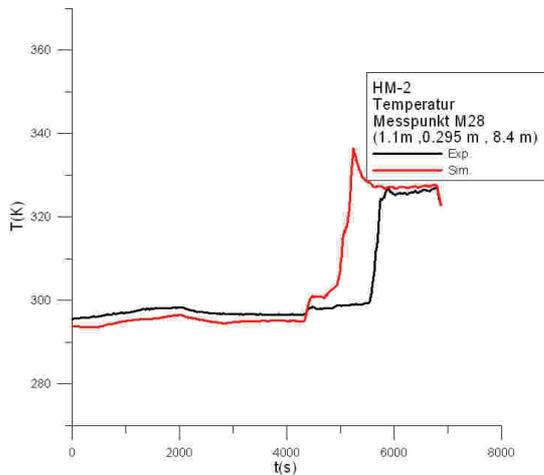


Abb. 5.4-15 Temperatur an verschiedenen Messstellen

#### 5.4.5 Einfluss des Turbulenzmodells

Um den Einfluss des Turbulenzmodells auf das Simulationsergebnis zu untersuchen, wurde auch eine Simulation mit dem  $k$ - $\epsilon$ -Turbulenzmodell durchgeführt.

Auch bei der Simulation mit dem  $k$ - $\epsilon$ -Modell trat das Problem auf, dass im Laufe der Simulation der Zeitschritt immer weiter verkleinert werden musste, um das Konvergenzkriterium einzuhalten. Deshalb wurde auch bei dieser Simulation ab ca. 2400 s der Zeitschritt nicht weiter verringert, auch wenn das Konvergenzkriterium verletzt wird. Als ein wichtiges Ergebnis dieser Untersuchung kann festgehalten werden, dass die Probleme mit dem Zeitschritt/Konvergenz nicht spezifisch für das SST-Turbulenzmodell sind.

Die mit dem SST- und dem  $k$ - $\epsilon$ -Turbulenzmodell berechneten  $H_2$ -Konzentrationen unterscheiden sich in der ersten Versuchsphase (bis 4320 s) geringfügig (Abb. 5.4-16). Auch für die 2. Versuchsphase zeigt sich für die beiden Modelle ein ähnlicher Verlauf bei den  $H_2$ -Konzentrationen. Bei der Simulation mit dem  $k$ - $\epsilon$  erfolgt die Schichtungsauflösung allerdings etwas langsamer (Abb. 5.4-16). Beim SST-Modell ist die Homogenisierung nach ca. 5240 s abgeschlossen, während dies beim  $k$ - $\epsilon$ -Modell erst nach ca. 5350 s der Fall ist. Damit liegt das  $k$ - $\epsilon$  etwas näher am experimentellen Wert von 5840 s. Für den Temperaturverlauf ergeben sich analoge Betrachtungen (Abb. 5.4-18).

In der Rechnung mit dem  $k$ - $\epsilon$ -Modell wird der Druckverlauf in der 1. Phase in besserer Übereinstimmung mit dem Experiment simuliert (Abb. 5.4-17). Am Ende der Phase bei 4300 s wird mit dem  $k$ - $\epsilon$  Modell der Druck in Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Mit Beginn der Dampfeinspeisung wird, wie auch beim SST-Modell, der Druck deutlich überschätzt. Das Druckmaximum wird beim  $k$ - $\epsilon$  Modell aber ca. 50 s später erreicht; die Höhe des Maximums ist aber in etwa gleich.

Insgesamt kann festgestellt werden, dass die Simulation mit dem  $k$ - $\epsilon$ -Turbulenzmodell, insbesondere für die Schichtungsauflösung, besser mit dem Experiment übereinstimmt. Da das Konvergenzkriterium ab 2400 s nicht mehr eingehalten wurde, ist mit größeren numerischen Fehlern zu rechnen. Deshalb ist bei Abweichungen zwischen der Simulation mit dem  $k$ - $\epsilon$ - und dem SST-Modell nicht klar, ob die unterschiedlichen Ergebnisse durch das unterschiedliche Turbulenzmodell zustande kommen oder ob sie auf numerische Fehler zurückzuführen sind. Deshalb sind diese Versuchsnachrechnungen eingeschränkt geeignet, um Aussagen über die Leistungsfähigkeit der Turbulenzmodelle zu treffen. Dazu sind andere Versuchsnachrechnungen, wie z. B. TH-18, besser geeignet.

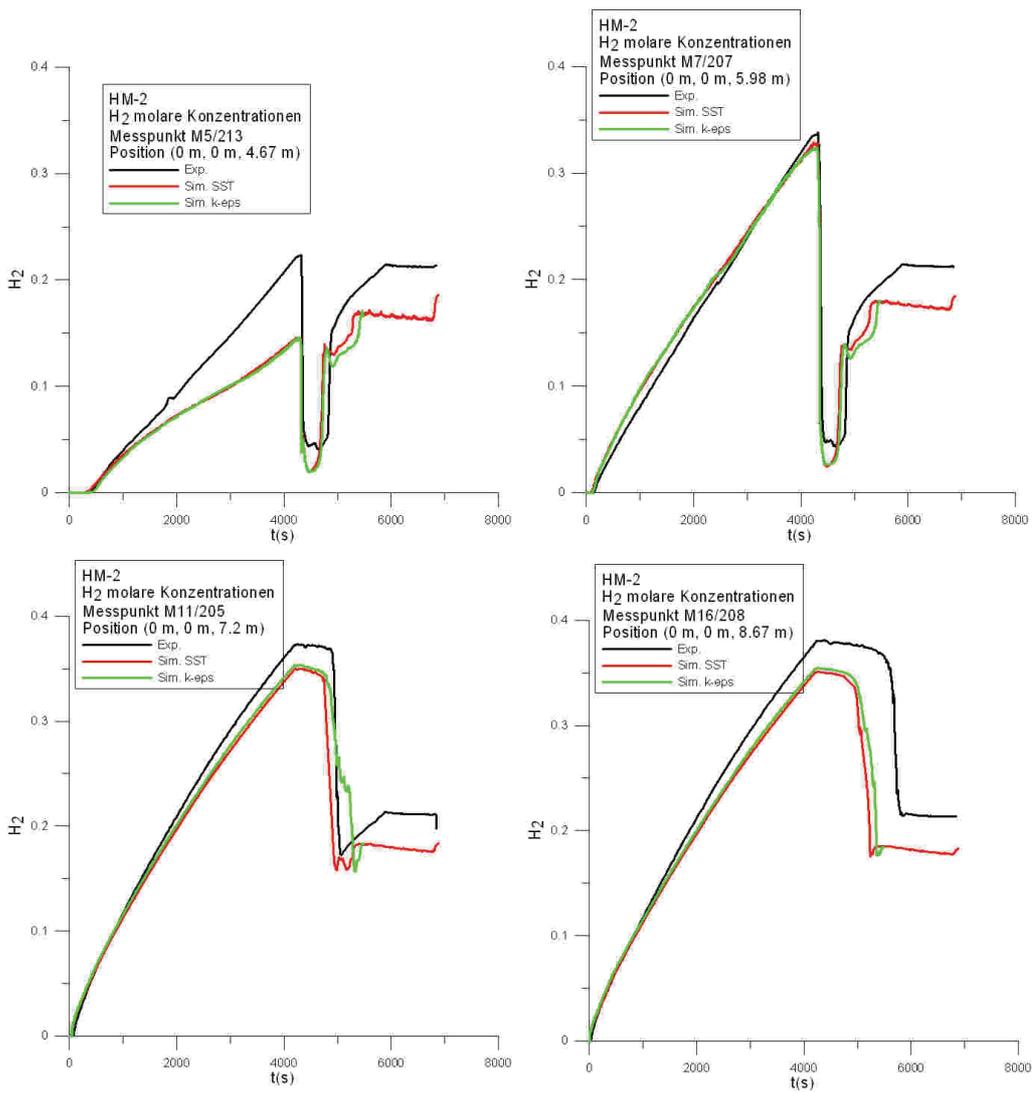


Abb. 5.4-16 H<sub>2</sub>-Konzentration entlang der Mittelachse

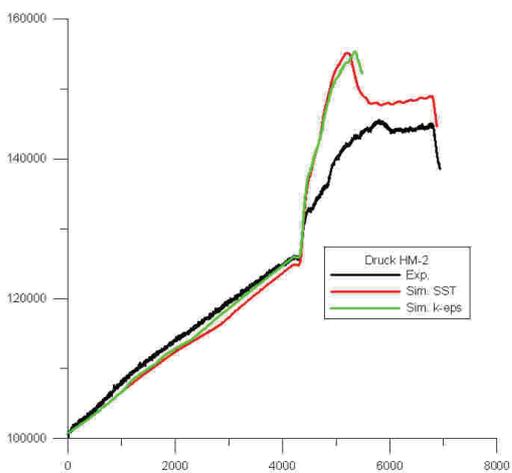


Abb. 5.4-17 Druckverlauf beim HM-2 Experiment

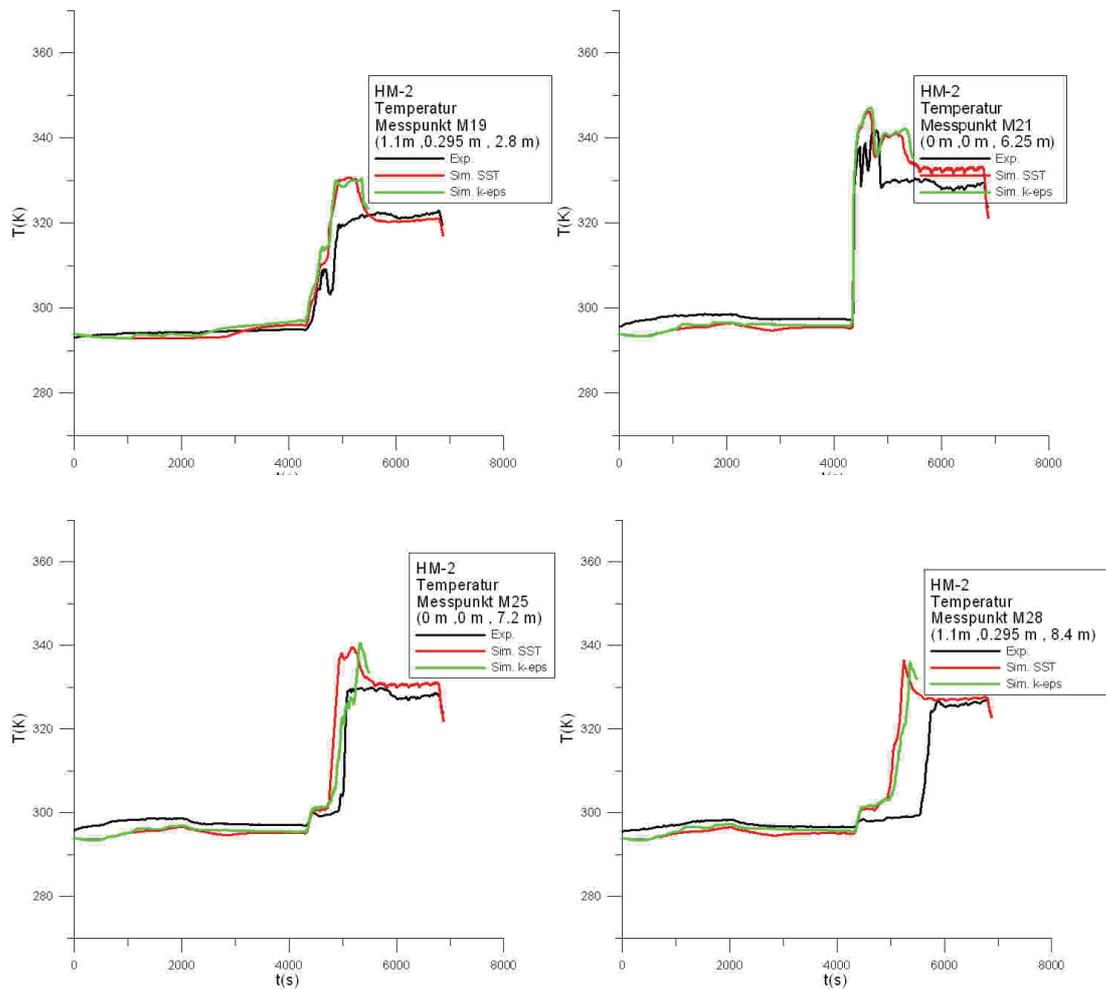


Abb. 5.4-18 Temperatur an verschiedenen Messstellen

### 5.4.6 Untersuchung zur Gitterabhängigkeit

Im Folgenden wird untersucht wie stark bei den durchgeführten Simulationen der Einfluss der räumlichen Diskretisierung ist. Aufgrund des hohen Rechenaufwands war keine weitere Gitterverfeinerung möglich. Stattdessen wurde eine Simulation mit einem größeren CFD-Gitter (96.500 Zellen) durchgeführt.

In der 1. Versuchsphase wird für die  $H_2$ -Konzentration (Abb. 5.4-19, M11, M16) in der  $H_2$ -Leichtgasschicht und im unteren Bereich des THAI-Behälter (Abb. 5.4-19, M3) auch mit dem groben Gitter eine nahezu identische  $H_2$ -Konzentration berechnet. An der Grenze der  $H_2$ -Leichtgasschicht wird dagegen ein starker Einfluss der Gitterfeinheit auf

das Simulationsergebnis beobachtet (Abb. 5.4-19, M4). In der zweiten Versuchsphase erfolgt die Schichtungsauflösung mit dem größeren CFD-Gitter schneller.

Insgesamt kann festgestellt werden, dass die Simulation mit dem feineren CFD-Gitter (252.000 Zellen) eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt. Zumindest beim Gitter mit 96.500 Zellen ist noch keine gitterunabhängige Lösung erreicht worden.

Auch bei Verwendung eines größeren Gitters trat das Problem mit dem Zeitschritt/Konvergenzverhalten auf, es ist also nicht auf eine ungünstige räumliche Diskretisierung zurückzuführen.

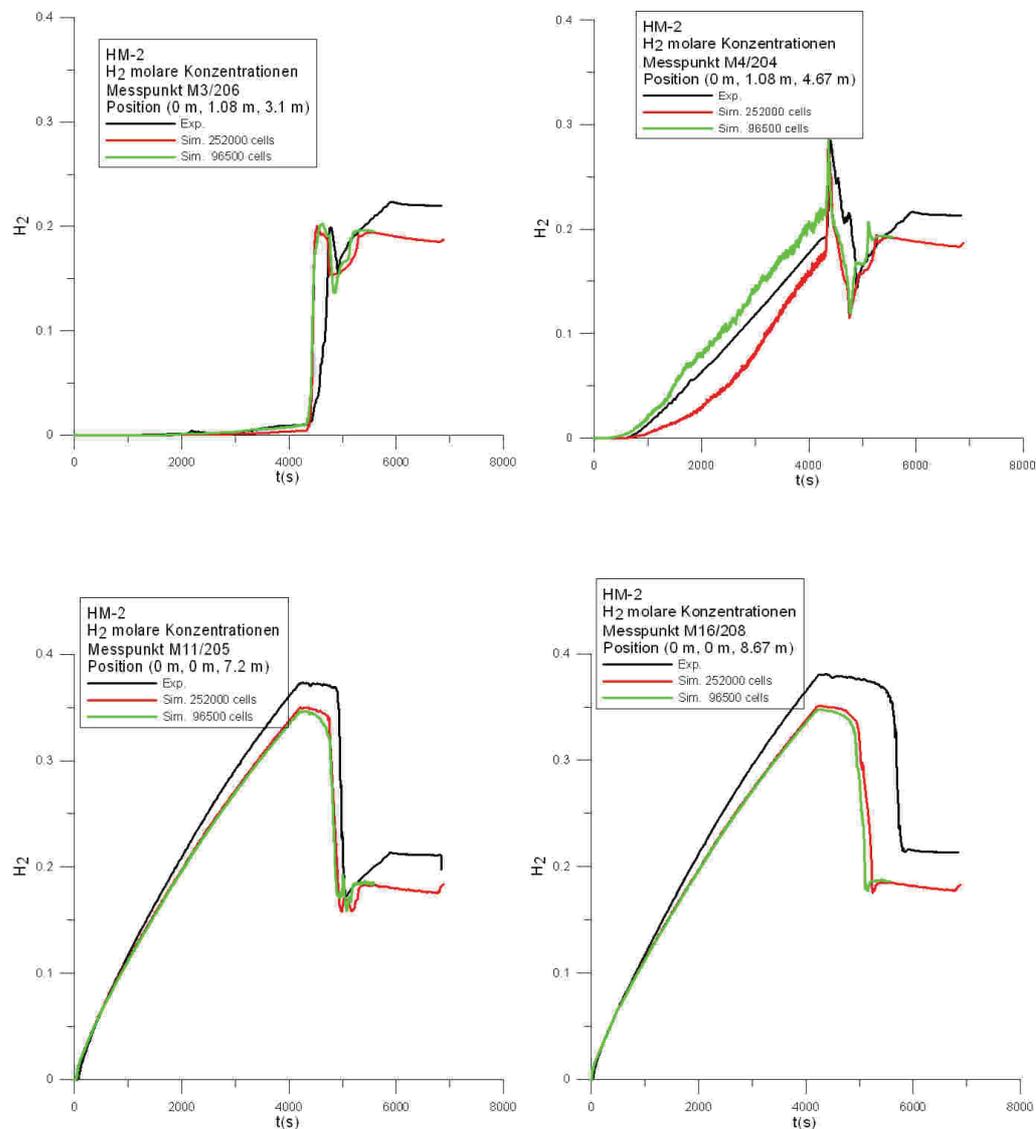


Abb. 5.4-19 Abhängigkeit der H<sub>2</sub>-Konzentration von der räumlichen Diskretisierung

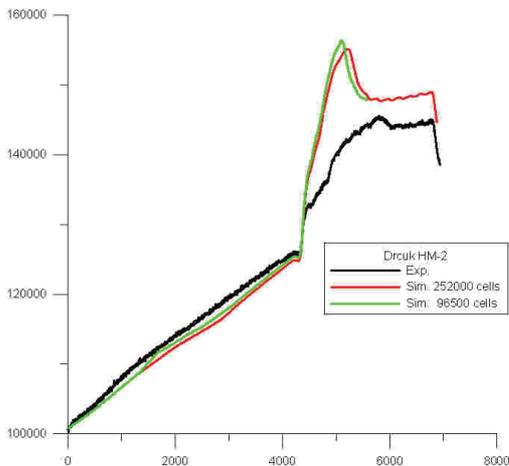


Abb. 5.4-20 Abhängigkeit des Drucks von der räumlichen Diskretisierung

#### 5.4.7 Zusammenfassung

Der Versuch HM-2 wurde mit CFX-11 simuliert. CFX war in der Lage, die Bildung der  $H_2$ -Schichtung zu simulieren. Die  $H_2$ -Konzentration in der Leichtgasschicht wurde dabei etwas unterschätzt (35,5 vol.% gegenüber 37 - 38 vol.% im Experiment). Die beiden Phasen der Schichtungsauflösung wurden von CFX simuliert, allerdings erfolgt die Schichtungsauflösung schneller als im Experiment (Homogenisierung ca. 920 s nach Beginn der Dampfeinspeisung gegenüber ca. 1520 s im Experiment).

Bei Verwendung des  $k-\epsilon$ -Turbulenzmodells konnten die Simulationsergebnisse etwas verbessert werden. Die Schichtungsauflösung erfolgt beim  $k-\epsilon$  etwas später (Homogenisierung ca. 1030 s nach Beginn der Dampfeinspeisung) als beim SST-Turbulenzmodell, ist aber immer noch deutlich schneller als im Experiment (1520 s).

Hauptproblem bei der Simulation war die lange Rechenzeit, die vor allem daher rührt, dass im Laufe der Simulation die Zeitschritte immer weiter verkleinert werden mussten, um das Konvergenzkriterium zu erfüllen. Nach ca. 3000 s wurde der Zeitschritt auf 0,05 s gesetzt, um überhaupt in vertretbarer Zeit ein Ergebnis zu erhalten, obwohl dadurch das Konvergenzkriterium verletzt wurde. Das Problem mit dem Zeitschritt bzw. Konvergenzverhalten tritt auch bei Modifikation des CFD-Gitters und auch bei Verwendung eines anderen Turbulenzmodells ( $k-\epsilon$  statt SST) auf.

Die teilweise Verletzung des Konvergenzkriteriums führt zu einem schwer abschätzba-  
ren numerischen Fehler. Deshalb sind die bei dieser Rechnung gewonnen Erkenntnis-  
se begrenzt belastbar. Es ist zu erwarten, dass bei Verringerung des numerischen  
Fehlers eine weitere Verbesserung der Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt  
werden kann.

## **5.5 Fazit zur Untersuchung der Turbulenzmodellierung**

Im Vorhaben wurden zahlreiche Versuche mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen  
berechnet (TH-18, TH-20, PANDA-4, HM-2). Bei einem Teil der Versuche konnten die  
Turbulenz, die Strömungsgeschwindigkeit, usw. mit dem SST-Turbulenzmodell in guter  
Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden (z. B. PANDA-4). Bei ande-  
ren Versuchen, insbesondere bei der Auflösung von stabilen Schichtungen, kam es zu  
größeren Abweichungen (z. B. TH-20). Beim TH-20 Experiment wurde zwar das quali-  
tative Verhalten der Schichtungsauflösung richtig beschrieben (z. B. stärkerer Jet ->  
schnellere Vermischung; größere Dichteunterschiede -> langsamere Vermischung)  
aber kein Projektpartner (ANSYS; IKE; GRS) war in der Lage, die Geschwindigkeit der  
Schichtungsauflösung mit den Standardturbulenzmodellen richtig zu berechnen. Trotz  
teilweise sehr feiner Diskretisierung wurde die Geschwindigkeit der Schichtungsauflö-  
sung immer um mindestens einen Faktor 2 unterschätzt. Um diese Modelldefizite zu  
beseitigen wurde vom IKE und von ANSYS im Rahmen der vom BMWi geförderten  
Projekte 1.501.337 und 1.501.339 ein verbessertes Turbulenzmodell entwickelt. Dieses  
Modell soll im Rahmen eines geplanten Folgevorhabens einer vom Entwickler unab-  
hängigen Validierung unterzogen werden.

Beim  $k-\varepsilon$ , SST und RNG- $k-\varepsilon$  Turbulenzmodell handelt sich um Zwei-  
Gleichungsturbulenzmodelle, bei denen die Turbulenz durch zwei Erhaltungsgleichun-  
gen modelliert wird. Solche Zwei-Gleichungsturbulenzmodelle haben einige Modell-  
schwächen. So kann prinzipiell die Anisotropie der Turbulenz mit ihnen nicht modelliert  
werden. Diese Modellschwäche kann durch Reynolds-Stress-Modelle überwunden  
werden, bei denen 7 Erhaltungsgleichungen gelöst werden. Die untersuchten Rey-  
nolds-Stress-Modelle (BSL, SSG) waren numerisch sehr instabil, so dass sich für  
Containmentanwendungen in ihrer gegenwärtigen Implementation wenig geeignet er-  
scheinen.

CFX-11 hat offensichtlich noch Probleme mit Rechengebieten, bei denen keine stark gerichtete Strömung vorliegt, sondern bei der die Strömung fast ruht. Für diese Gebiete (z. B. der untere Teil im THAI-Behälter oder des PANDA-Versuchsstands) wird die Strömung/Gaszusammensetzung oft mit größeren Abweichungen simuliert und es treten teilweise auch Konvergenzprobleme auf, bzw. es muss ein sehr kleiner Zeitschritt gewählt werden, um Konvergenz zu erzielen.

## **6 Vergleich von GASFLOW und CFX**

Bei den bisherigen Versuchsnachrechnungen wurden die CFX-Ergebnisse sowohl immer mit den experimentellen Ergebnissen, als auch teilweise mit den Ergebnissen des Lumped-Parameter-Codes COCOSYS verglichen. Zur umfassenden Bewertung von CFX ist ein Vergleich mit einem anderen CFD-Code durchgeführt worden. Dieses ist der vom Forschungszentrum Karlsruhe entwickelte Code GASFLOW /TRA 08/.

Zur Simulation der Gasverteilung im Sicherheitseinschluss hat das FZK das ursprünglich in Los Alamos begonnene Programm GASFLOW übernommen und entwickelt es seit 1994 eigenständig weiter. GASFLOW ist ein dreidimensionaler Finite-Volumen-Code zur Beschreibung der Fluididdynamik in Containments von Kernkraftwerken. Hierbei werden die Druck- und Temperaturverteilung, Kondensations- und Verdampfungsvorgänge, Turbulenz, Wärmetransport, chemische Reaktionen sowie Gegenmassnahmen (Rekombinatoren) durch entsprechende Modelle in GASFLOW berücksichtigt. GASFLOW wurde bisher noch nicht in der GRS eingesetzt. Im Vorhaben sollte ein erster qualitativer Vergleich von Analysen mit GASFLOW und CFX anhand vorliegender Rechenergebnisse für eine Versuchsnachrechnung vorgenommen werden. GASFLOW soll dann im Nachfolgevorhaben etwas vertieft analysiert und eingesetzt werden.

### **6.1 Vergleich anhand von Simulationen des Versuchs HM-2**

#### **6.1.1 Einleitung**

Die beiden Codes CFX und GASFLOW werden anhand der Rechenergebnisse des THAI-Versuches HM-2 miteinander verglichen, der auch schon als OECD-Benchmark gedient hat. Die Ergebnisse der GASFLOW-Analyse wurden der GRS hierbei freundlicherweise durch das Forschungszentrum Karlsruhe überlassen /GAS09/. In diesem Versuch wird eine zuvor gebildete H<sub>2</sub>-Schichtung durch die Einleitung eines Dampfstrahls aufgelöst. Eine genaue Beschreibung des Versuchsablaufes findet sich unter anderem in /KAN 07/. In Abschnitt 5.4 dieses Abschlussberichtes ist weiterhin die Durchführung der CFX-Berechnung detailliert beschrieben und diese Beschreibung wird deshalb hier nicht wiederholt.

## 6.1.2 Vergleich der CFD-Codes anhand verschiedener Parameter

Um die beiden Codes miteinander zu vergleichen, werden der jeweils berechnete Druck, die Temperatur und die H<sub>2</sub>-Konzentration an verschiedenen Messstellen miteinander verglichen.

- **Druck**

In Abb. 6.1-1 ist der zeitliche Verlauf des Drucks im THAI-Behälter dargestellt. Neben der CFX-Rechnung sind weiterhin zwei GASFLOW-Rechnungen abgebildet. Hierbei handelt es sich um eine blinde Vorausrechnung und um eine offene Nachrechnung des HM-2 Versuches. Zunächst einmal zeigt sich, dass alle Simulationen den Druckanstieg in Phase 1 (0 – 4200 s) qualitativ und quantitativ gut wiedergeben.

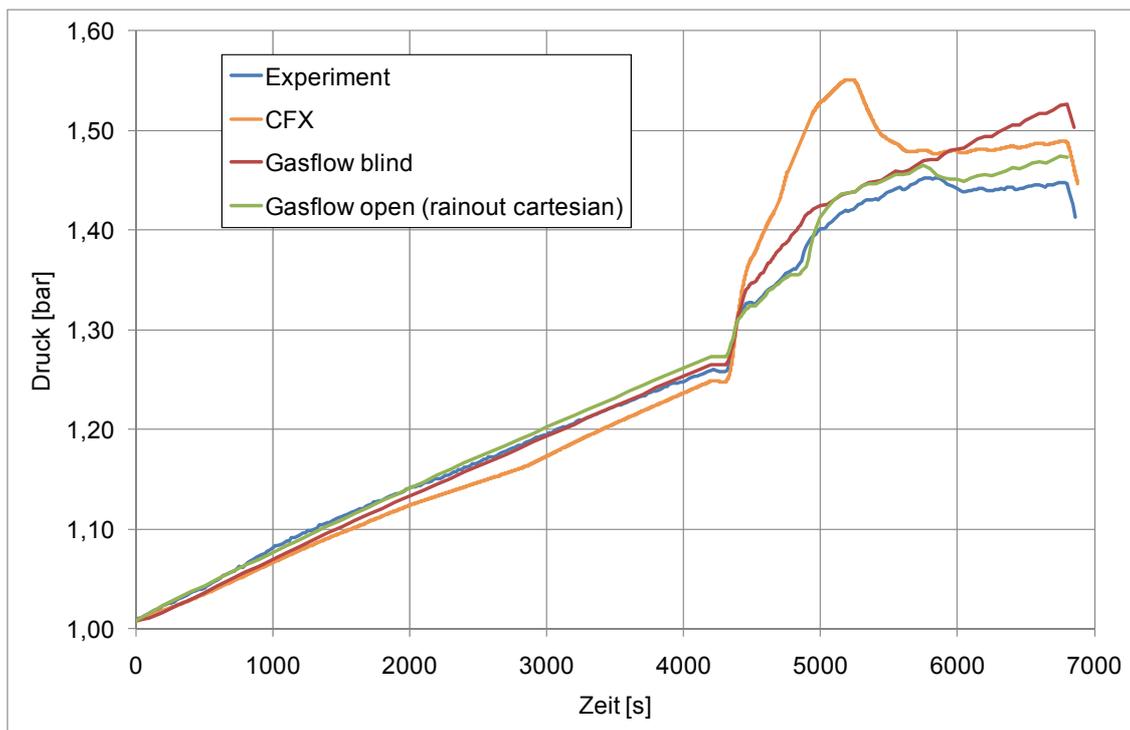


Abb. 6.1-1 Vergleich des Druckverlaufs im THAI-Behälter

In Phase 2 ( $t > 4200$  s) zeigt die CFX-Rechnung zunächst eine deutliche Überhöhung gegenüber den experimentellen Werten (siehe Abb. 6.1-2). Diese Überhöhung geht jedoch ab etwa 6000 s wieder deutlich zurück. In Abschnitt 5.4 wurden bereits verschiedene mögliche Ursachen für diese Abweichung diskutiert (Probleme bei der Berechnung der Dampfverteilung oder bei der Berechnung der Kondensation, speziell am Ein-

lass oder am Innenzylinder). Die GASFLOW-Rechnungen zeigen beide in Phase 2 zunächst eine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Daten (siehe Abb. 6.1-2). Erst ab etwa 6000 s zeigt die blinde GASFLOW-Berechnung eine deutliche Überschätzung des Drucks, die dann über die CFX-Werte hinausgeht.

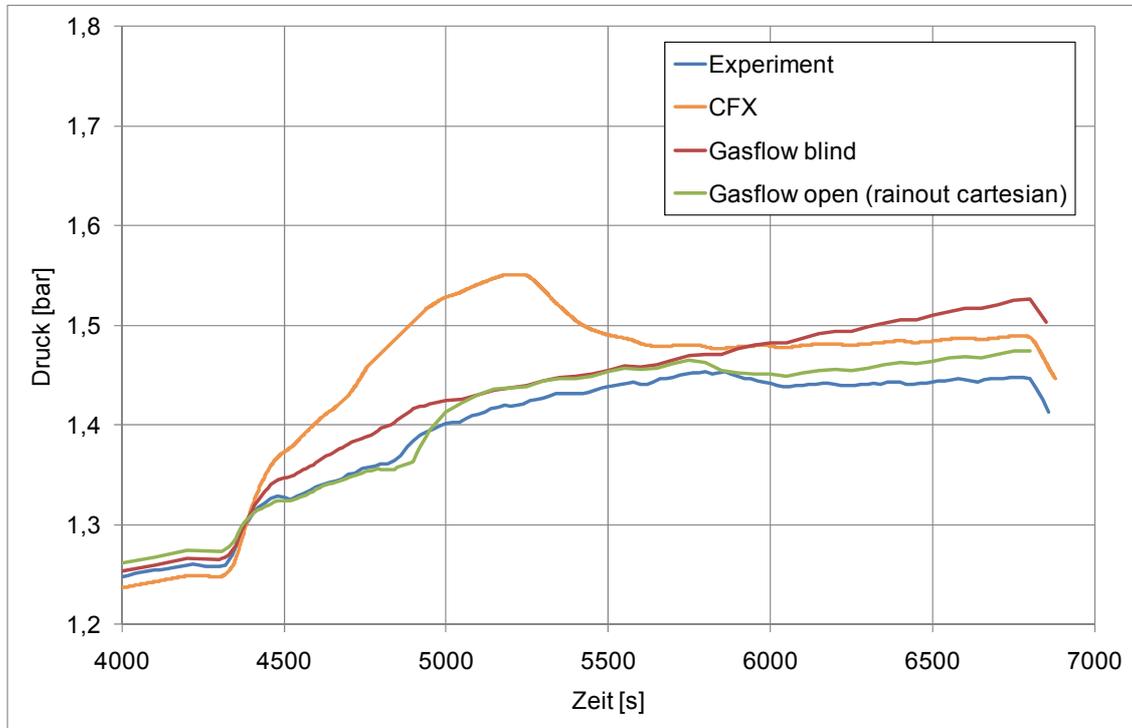


Abb. 6.1-2 Druckverlauf in Phase 2

- **H<sub>2</sub>-Konzentration**

In Abb. 6.1-3 ist das Höhenprofil der Wasserstoffschichtung am Ende der H<sub>2</sub>-Einleitung nach 4000 s dargestellt. Alle Simulationen unterschätzen die H<sub>2</sub>-Konzentration im Innenzylinder in 4,6 m Höhe um etwa 5 %. Im oberen Dombereich kommen die Simulationen annähernd an den experimentellen Wert heran. Die Unterschiede der einzelnen Simulationen untereinander sind dabei kleiner als der Unterschied aller Simulationen zum Experiment.

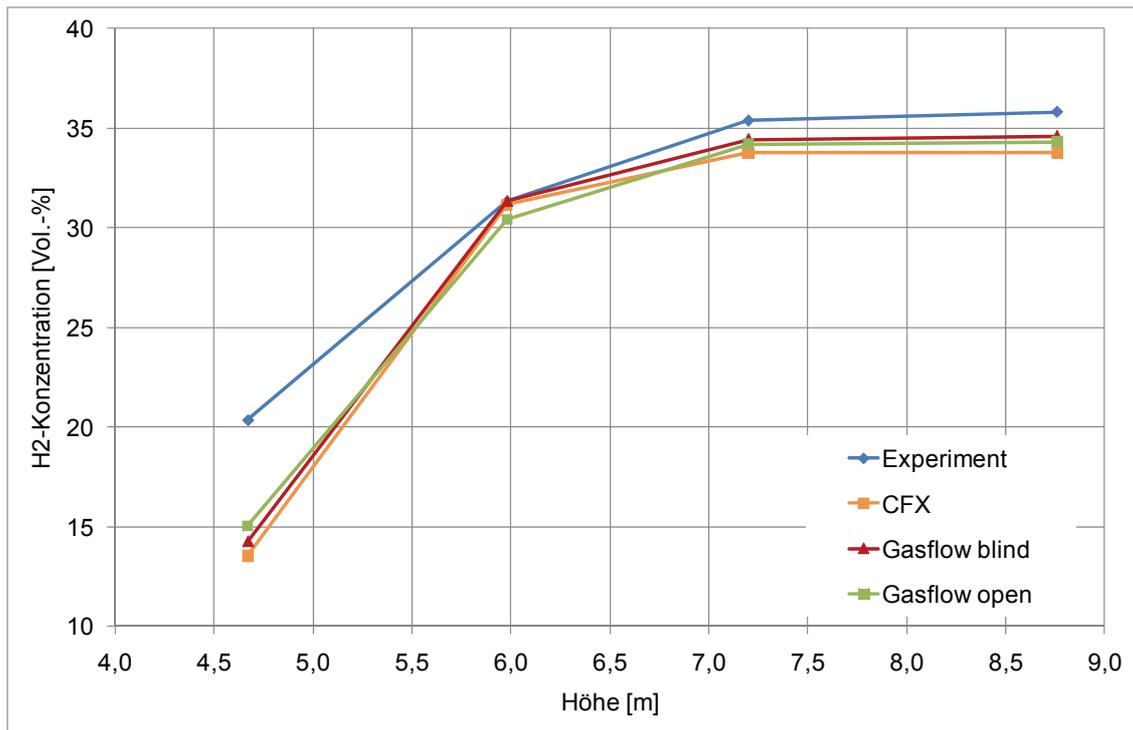


Abb. 6.1-3 Höhenprofil der H<sub>2</sub>-Konzentration am Ende von Phase 1 (t = 4000 s, x = y = 0 m)

Der zeitliche Verlauf der H<sub>2</sub>-Konzentration im Innenzylinder in 6,0 m Höhe ist in Abb. 6.1-4 dargestellt. Mit dem Einströmen des Dampfes senkt sich die H<sub>2</sub>-Konzentration schnell ab. Dieser Vorgang wird durch alle Berechnungen zeitlich richtig vorhergesagt. Durch ein erneutes Einströmen von H<sub>2</sub> von unten in den Innenzylinder steigt die H<sub>2</sub>-Konzentration an der betrachteten Messstelle wieder an, was auch durch alle Simulationen richtig beschrieben wird. Dieses Ansteigen kennzeichnet den Zeitpunkt an dem eine globale Naturkonvektion im THAI-Behälter in Bewegung kommt. Da die Zeit von Beginn der zweiten Phase bis zum Einsetzen der globalen Konvektion ein gutes Charakteristikum der vorliegenden Strömung ist wurden diese Werte noch einmal getrennt ausgewertet und in Abb. 6.1-5 aufgetragen. Diese Zeit wird sowohl von CFX als auch von den GASFLOW-Berechnungen relativ gut berechnet.

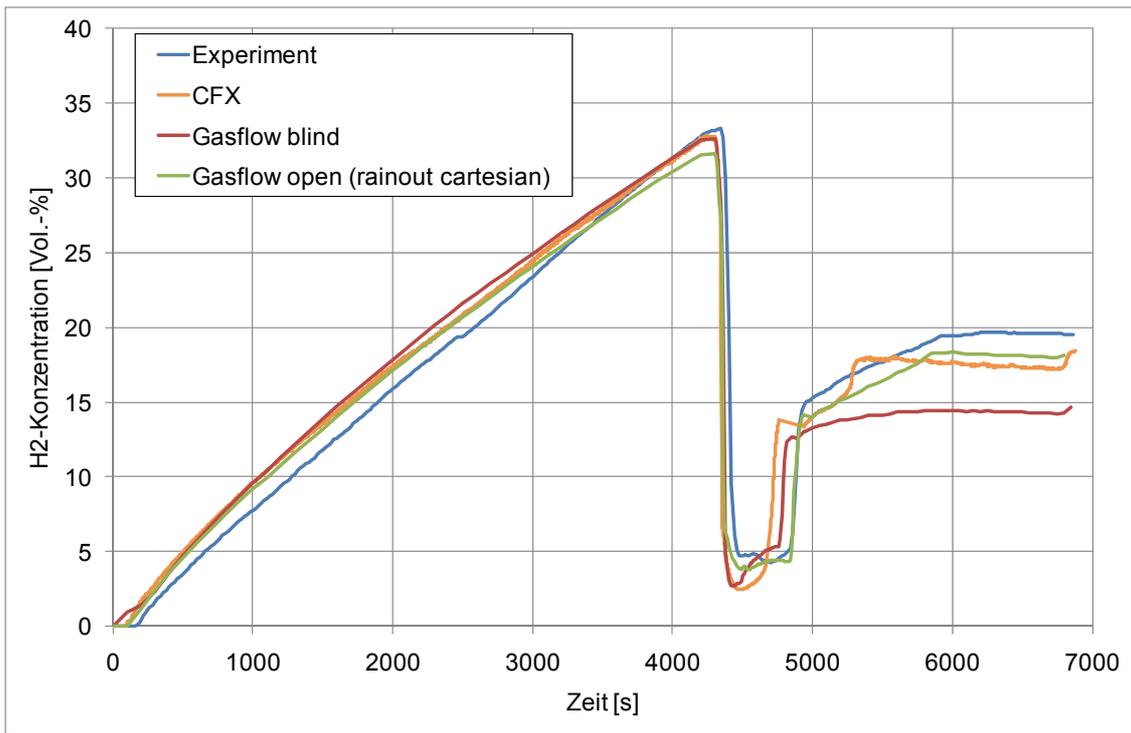


Abb. 6.1-4 Vergleich des H<sub>2</sub>-Konzentration in 6,0 m Höhe (Messstelle CCH60M00)

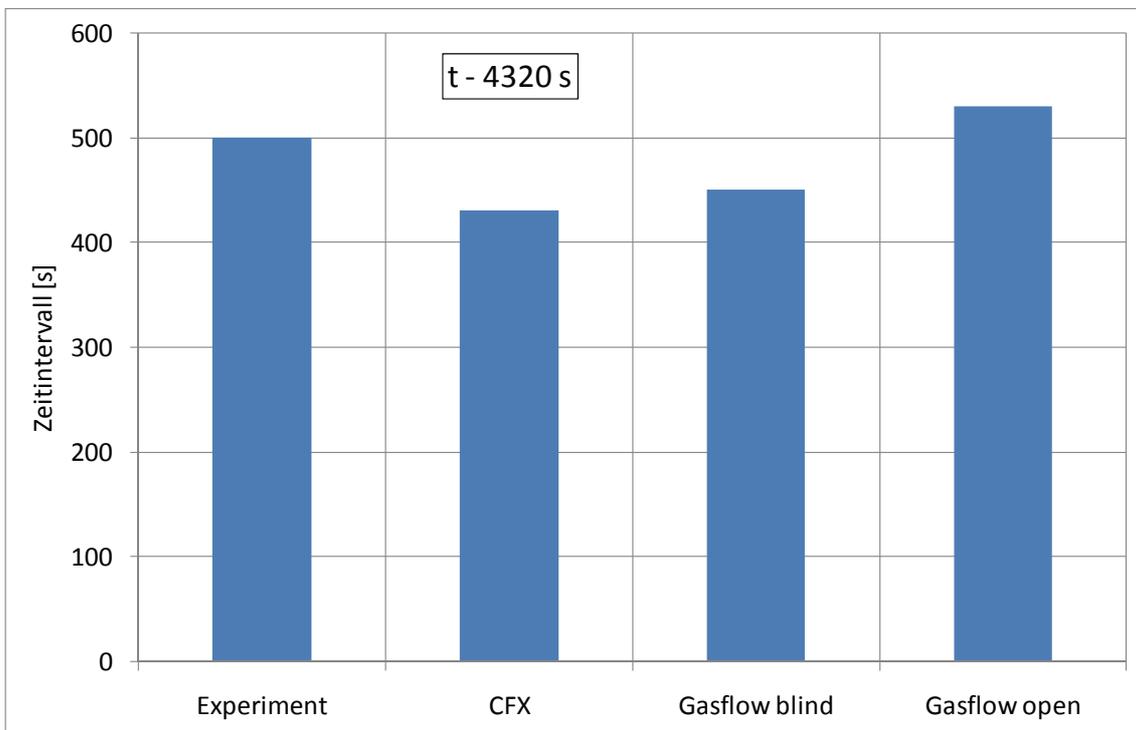


Abb. 6.1-5 Zeit bis zum Einsetzen der globalen Naturkonvektion

Abb. 6.1-6 stellt den zeitlichen Verlauf der H<sub>2</sub>-Konzentration im oberen Dombereich dar. Hierbei ist der Verlauf der Konzentrationen im Dom für Phase 1 (t < 4200 s) identisch, in Phase 2 zeigen sich jedoch Unterschiede zwischen den einzelnen Simulationen. In der CFX-Rechnung findet die Absenkung der H<sub>2</sub>-Konzentration und damit die Auflösung der Schichtung deutlich früher als im Experiment statt (etwa bei 5220 s statt erst bei 5820 s). In der blinden GASFLOW-Rechnung wird die H<sub>2</sub>-Schicht gar nicht aufgelöst (bis 7000 s). Der Verlauf der Werte in der offenen GASFLOW-Rechnung passt gut zu den experimentellen Daten.

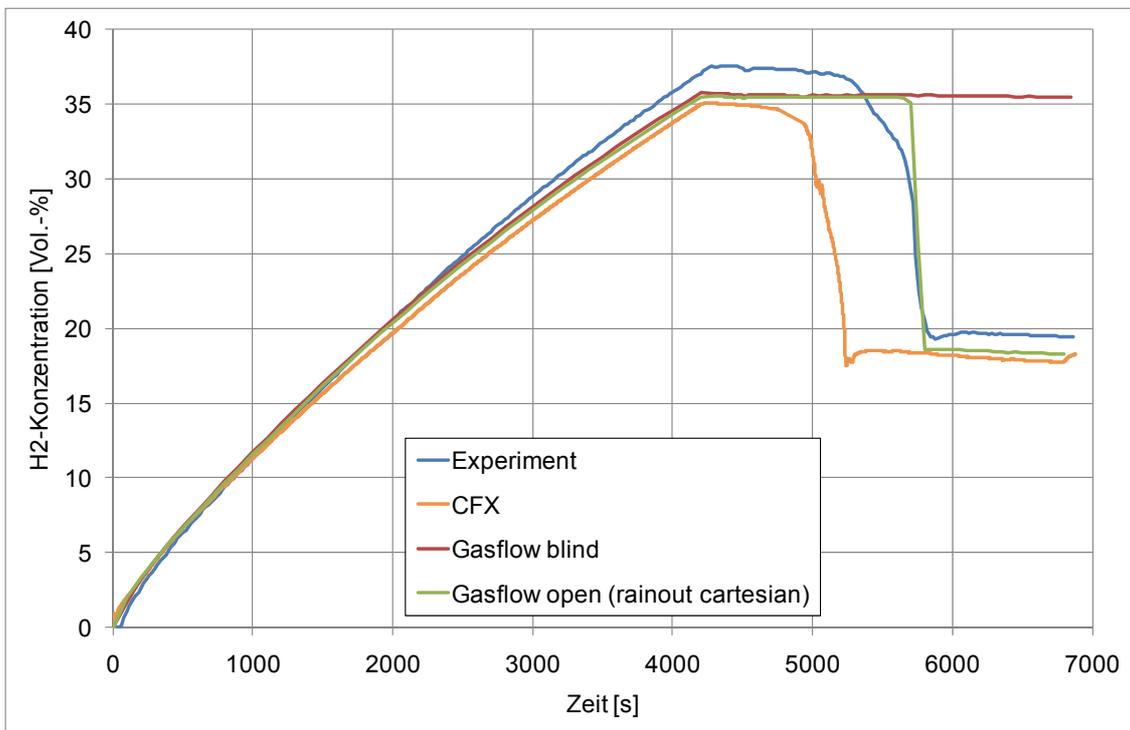


Abb. 6.1-6 Vergleich des H<sub>2</sub>-Konzentration in 8,7 m Höhe (Messstelle DCH87M00)

- **Temperaturen**

In den Abb. 6.1-7 und Abb. 6.1-8 ist der Temperaturverlauf an zwei unterschiedlichen Stellen im THAI-Behälter dargestellt (in 1,6 m Höhe und in 7,2 m Höhe). An beiden Messstellen zeigt sich, dass die Temperaturen in CFX nach der Dampfeinspeisung (ab t > 4200 s) schneller ansteigen und höhere Werte erreichen als im Experiment. Zu einem späteren Zeitpunkt (t > 5500 s) passen sich die CFX-Werte jedoch besser den experimentellen Daten an. Dieses Verhalten des Temperaturverlaufs ist dem Druckverlauf im THAI-Behälter sehr ähnlich (vergleiche Abb. 6.1-1).

Bei den GASFLOW-Berechnungen gibt es in einigen Bereichen eine leichte Verzögerung im Temperaturanstieg im Vergleich zum Experiment. Insgesamt passen die GASFLOW-Werte jedoch etwas besser zu den experimentellen Daten als die CFX-Werte.

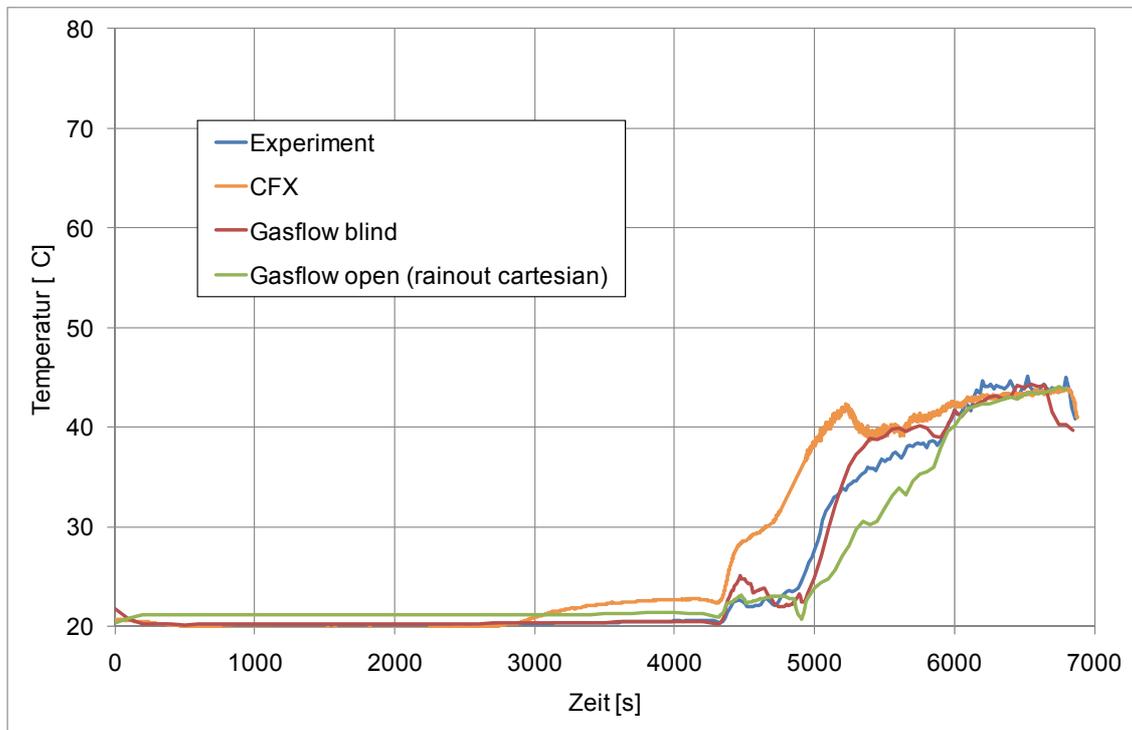


Abb. 6.1-7 Vergleich des Temperaturverlaufs in 1,6 m Höhe (Messstelle BTF16H11)

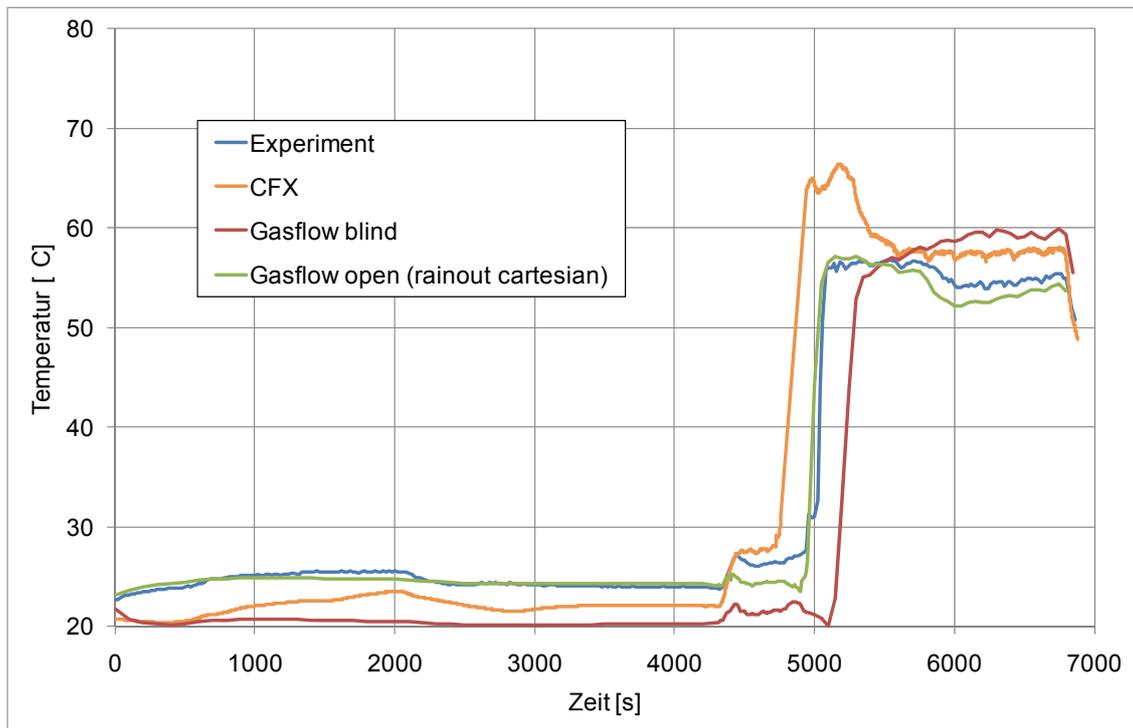


Abb. 6.1-8 Vergleich des Temperaturverlaufs in 7,2 m Höhe (Messstelle DTF72M00)

### 6.1.3 Zusammenfassung

Im Rahmen dieses Arbeitspunktes wurden die Ergebnisse einer CFX-Rechnung zum THAI Versuch HM-2 mit den Ergebnissen von GASFLOW-Berechnungen verglichen. Es zeigt sich, dass mit beiden CFD-Programmen der qualitative Verlauf von Druck, Temperatur und  $H_2$ -Konzentration an unterschiedlichen Messstellen im THAI-Behälter gut wiedergegeben werden konnte. Quantitativ steigen der Druck und die Temperaturen in der CFX-Berechnung zu Beginn der 2. Phase zu stark an, sinken dann aber wieder auf das experimentelle Niveau. Die Auflösung der  $H_2$ -Schichtung geht in der CFX-Berechnung etwas zu schnell. In der blinden GASFLOW-Berechnung wird die Auflösung der  $H_2$ -Schichtung gar nicht wiedergegeben, in der offenen Nachrechnung passt die Zeit zur Auflösung sehr gut. Aufgrund der sehr unterschiedlichen Ergebnisse kann keine abschließende Relativ-Bewertung der Programme CFX/GASFLOW abgegeben werden. Beide geben den qualitativen Verlauf des Experimentes gut wieder, aber sie zeigen an einzelnen Stellen Vor- bzw. Nachteile. Hier soll eine differenzierte Untersuchung mit weiteren Experimenten im Nachfolgevorhaben erfolgen, um zu einer fundierten Bewertung zu kommen.

## **7 Nachrechnung von H<sub>2</sub>-Verbrennungsversuchen mit CFX**

Mit CFD-Programmen können Verbrennungsvorgänge detailliert berechnet werden. Dies ermöglicht eine genauere Vorhersage des zu erwartenden Druckverlaufs auch für komplexe Geometrien und Gaszusammensetzungen. Das in der älteren Version CFX-4 implementierte Eddy-Dissipation-Verbrennungsmodell wurde bereits zur Simulation verschiedener Versuche (mehrere HYCOM-Experimente) eingesetzt. Allerdings unterscheidet sich die Implementierung dieses Modells in CFX-11 erheblich von der in der älteren Version CFX-4. Daher war eine erneute Anpassung der empirischen Konstanten in diesem Modell nötig. Durch Nachrechnung weiterer Versuche soll die Validierung fortgesetzt werden.

### **7.1 Einleitung**

Als Verbrennungsmodelle wurden das um den Borghi-Vorfaktor erweiterte Eddy-Dissipation-Modell und das Burning-Velocity-Modell verwendet. Es wurden die in der RUT-Anlage durchgeführten Versuche HYCOM13 und HYCOM14 sowie der am Battelle-Modell-Containment durchgeführte Versuch IX2 nachgerechnet. Weiterhin hat die GRS mit CFX am ISP-49 und an einem SARNET-2-Verbrennungsbenchmark teilgenommen.

### **7.2 Beschreibung der verwendeten Verbrennungsmodelle**

#### **7.2.1 Eddy-Dissipation-Verbrennungsmodell mit Erweiterung um den Said-Borghi-Faktor**

##### **7.2.1.1 Modellbeschreibung**

Beim Eddy-Dissipation-Modell (EDM) wird unterstellt, dass der Ablauf der chemischen Reaktion durch turbulente Mischungsvorgänge bestimmt wird. Der Ansatz für die Reaktionsgeschwindigkeit  $R$  beim Eddy-Dissipation-Modell lautet /SB 88/:

$$R = f_{borghi} A_E \frac{\varepsilon}{k} \min\left(\frac{C_{O_2}}{1}, \frac{C_{H_2}}{2}\right)$$

$$f_{borghi} = 1 + \left( \frac{4.4}{1 + 3.2 \frac{\sqrt{k}}{v_{lam}}} \right)$$

$k$  ist die turbulente kinetische Energie,  $\varepsilon$  die Dissipationsgeschwindigkeit,  $C$  sind die molaren Konzentrationen der Edukte  $H_2$  und  $O_2$ .  $A_E$  ist eine empirische Konstante, die von verschiedenen Parametern abhängig ist, z. B. dem Brennstoff (hier  $H_2$ ) und dem Turbulenzmodell. Durch die Parameteranpassung an das HYCOM01 Experiment wurde  $A_E = 21$  als geeigneter Parameter identifiziert.

Beim Eddy-Dissipation-Modell wurde angenommen, dass die chemische Kinetik viel schneller ist als die turbulenten Mischungsvorgänge. Daher können Prozesse, die durch die chemische Kinematik bestimmt sind - wie zum Beispiel die Zündung -, mit diesem Modell nicht richtig modelliert werden. Wenn eine beschleunigte turbulente Flammenausbreitung vorliegt, kann dieses Modell aber zur Anwendung kommen. Für die Simulation von Detonationen ist dieses Modell allerdings nicht geeignet.

Die laminare Flammgeschwindigkeit  $v_{lam}$  wurde durch folgendes Polynom angenähert /POR 02/:

$$v_{lam} = 64.494x^5 + 37.898x^4 - 186.87x^3 + 100.28x^2 - 5.7839x - 0.0245$$

$X$  ist dabei der Molenbruch von  $H_2$  im unverbrannten Gas. Diese Korrelation ist für Wasserstoff-Luft-Gemische bei  $T = 298$  K und atmosphärischen Druck gültig. Für niedrige Wasserstoffkonzentrationen wurde diese Korrelation modifiziert (siehe Abschnitt 7.6.4.2).

Die bei der Reaktion freigesetzte Wärme wurde aus den Stoffdaten der Edukte und der Produkte von CFX automatisch berechnet.

Der Borghi-Vorfaktor  $f_{borghi}$  bewirkt eine Beschleunigung der Reaktionsgeschwindigkeit. Er wird in Bereichen mit geringer turbulenter kinetischer Energie  $k$  zu einer Beschleunigung der Verbrennung um einen Faktor von maximal 5.4 (für  $k = 0$ ) führen. In Bereichen mit großer turbulenter kinetischer Energie nähert sich  $f_{borghi}$  1. Der Borghi-Faktor

wird deshalb vor allem in der Anfangsphase zu einer Beschleunigung der Verbrennung führen.

Beim Eddy-Dissipation-Modell ist die Reaktionsrate von der Konzentration der Edukte und der Turbulenz abhängig. Die Temperatur geht nicht in die Gleichungen ein. Dies ist problematisch, weil bei einem vorgemischtem Gemisch sofort die Reaktion beginnt, sobald es zu einer turbulenten Strömung kommt. Eine Zündung ist dazu nicht nötig. Es besteht daher die Möglichkeit, eine Grenztemperatur  $T_{\text{ext}}$  zu definieren. Ist das Gas kälter als diese Temperatur, ist die Reaktionsrate Null. Damit kann sichergestellt werden, dass es zu einer Reaktion kommt, wenn ein Kontakt mit heißem Gas besteht. In den hier durchgeführten Arbeiten wurde  $T_{\text{ext}} = 400 \text{ K}$  gesetzt.

### 7.2.2 Modellierung der Zündung

In CFX-11 steht für das Eddy-Dissipation-Verbrennungsmodell kein Zündmodell zur Verfügung. Um bei den Simulationen den Verbrennungsprozess zu starten, wurden bei der Initialisierung einige Zellen in der Nähe der Zündquelle (Abstand  $\pm 0,2 \text{ m}$ ) auf eine hohe Temperatur ( $T_{\text{ini}} = 1000 \text{ K}$ ) gesetzt. Dadurch wurde in dieser Region eine Strömung und Turbulenz erzeugt und die Verbrennung des Gasgemisches wurde in Gang gesetzt. Die exakte Größe der Zündregion und die Temperatur, mit der das Gas gezündet wurde, sind willkürlich gewählt. Es muss gewährleistet sein, dass es nicht zu einem Verlöschen der Flamme kommt. Deshalb sollten mehrere Gitterpunkte im Zündvolumen liegen und die Zündtemperatur sollte deutlich über der Grenztemperatur  $T_{\text{ext}}$  des Eddy-Dissipation-Modells liegen.

Um die Energiebilanz genauer zu erfüllen, kann zusätzlich zu einer Temperaturerhöhung der  $\text{H}_2$ - und  $\text{O}_2$ -Gehalt verringert werden und stattdessen  $\text{H}_2\text{O}$  im Zündvolumen erhöht (verbranntes Gemisch) werden. Ebenso kann im Zündvolumen die Turbulenz erhöht werden. Je nach Initialisierung des Zündvolumens kommt die Verbrennung unterschiedlich schnell in Gang. Der Zeitpunkt, an dem die beschleunigte Flammenausbreitung einsetzt, kann dadurch variiert werden. Die resultierenden Flammengeschwindigkeiten und der Verlauf des Druckanstiegs werden hierdurch aber in der Regel nicht beeinflusst. Bei den Nachrechnungen wurde darauf verzichtet, durch geschickte Wahl der Zündbedingungen den Zeitpunkt des Druckmaximums in Simulation und Experiment anzugleichen, da eine Übertragung der Ergebnisse bzgl. des Zündzeitpunktes auf andere Experimente nicht zu erwarten ist.

## 7.2.3 Burning-Velocity-Modell

### 7.2.3.1 Modellbeschreibung

Das Burning-Velocity-Modell (BVM) ist zur Simulation der Verbrennung in (teilweise) vorgemischten Gasgemischen geeignet. Es besteht aus zwei Teilen:

1. Ein Modell für den Fortschritt der globalen Reaktion mittels TFC (Turbulent Flame Closure)
2. Ein Modell für die Zusammensetzung des Gasgemischs: Laminare Flamelet mit PDF (Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion)

Die Zusammensetzung des unverbrannten Gemischs wird mittels linearer Interpolation zwischen Brennstoff ( $H_2$ ) und Oxidationsmittel (Luft) bestimmt. Für ein verbranntes Gemisch wird die Gaszusammensetzung aus der Flamelet Library eingelesen.

Der Fortschritt der Reaktion erfolgt mittels einer einzigen Fortschrittsvariablen  $c$ , welche die Reaktion Brennstoff + Oxidationsmittel  $\rightarrow$  Produkte beschreibt.  $c = 0$  entspricht einem unverbrannten Gemisch und  $c = 1$  einem vollständig verbrannten Gemisch. In einer turbulenten Strömung wird eine bimodale Verteilung von  $c$  angenommen, d. h. zu jeder Zeit und an jedem Ort wird angenommen, dass das Gemisch entweder unverbrannt oder die chemische Reaktion bereits abgeschlossen ist. Diese Annahme ist gerechtfertigt, sofern die chemische Reaktion viel schneller abläuft als die turbulente Vermischung.

Die gemittelte Fortschrittsvariable  $\tilde{c}$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass ein entweder unverbranntes oder ein komplett verbranntes Gemisch vorliegt.  $\tilde{c} = 0,6$  bedeutet, dass mit 40 %iger Wahrscheinlichkeit eine Mischung aus Brennstoff und Oxidizer und mit 60 %iger Wahrscheinlichkeit die Produkte vorliegen. Für die Fortschrittsvariable wird eine Transportgleichung gelöst. Der Quellterm der Verbrennung  $\bar{w}_c$  in der Transportgleichung wird durch die "Turbulent flame closure" TFC modelliert.

$$\bar{w}_c = \bar{S}_c - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( (\rho D) \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_j} \right)$$

$$\bar{S}_c = \bar{\rho}_u S_T |\nabla \bar{c}|$$

$S_T$  ist die turbulente Brenngeschwindigkeit und  $\rho_u$  die Dichte des unverbrannten Gases.

Dieses Modell hat zwei Vorteile gegenüber Modellen, die auf molekularen Verbrennungsgeschwindigkeiten basieren:

1.  $S_T$  ist eine Größe, die in Experimenten gemessen werden kann und deshalb ist eine Modellierung relativ gut möglich.
2. Die turbulente Brenngeschwindigkeit ändert sich meistens in 1-2 Größenordnungen in einem gegebenen Experiment. Deshalb ist sie numerisch besser zu handhaben als die molekularen Verbrennungsgeschwindigkeiten, die typischerweise um mehrere Größenordnungen variieren.

Zur Modellierung der turbulenten Brenngeschwindigkeit wurde das Zimont-Modell verwendet.

Im Zimont-Modell treten einige empirische Konstanten auf. Bei den HYCOM-Versuchen wurde keine turbulente Flammenverlöschung aufgrund einer zu großen turbulenten Dissipationsgeschwindigkeit beobachtet. Deshalb wurde die Konstante, welche die kritische Dissipationsgeschwindigkeit definiert, ausreichend groß ( $1.0e+6$  bzw.  $1.0e+5$ ) gewählt.

Im Zimont-Modell gelten folgenden Abhängigkeiten:

$$S_T \sim v_L^{0.5}$$

$$S_T \sim A_B$$

$A_B$  ist eine Modellkonstante und  $v_L$  die laminare Flammgeschwindigkeit. Durch die Parameteranpassung an das HYCOM01-Experiment wurde  $A_B = 1,65$  als geeigneter Parameter identifiziert.

In der gegenwärtigen Implementation (CFX-11) wird die Gemischzusammensetzung durch einen einzigen Mischungsbruch definiert. Der Mischungsbruch ist bei den hier durchgeführten Rechnungen von der  $H_2$ -Konzentration abhängig. In den meisten An-

wendungen für Störfallabläufe in KKW's wird auch Wasserdampf im System vorliegen. In diesem Fall hat die Gemischzusammensetzung zwei Freiheitsgrade (Wasserdampf- und Wasserstoffkonzentration). Gegenwärtig ist das BVM nicht in der Lage, solche Systeme zu beschreiben. Laut Aussage von ANSYS ist für die nächsten CFX-Versionen geplant, das Modell dahingehend zu erweitern.

### **7.2.3.2 Modellierung der Zündung**

Für das Burning-Velocity-Modell steht in CFX-11 als Zündmodell das Spark-Ignition-Modell zur Verfügung. Beim Spark-Ignition-Modell wird die Zündung durch eine kugelförmige Ausbreitung eines kleinen Zündvolumens modelliert. Das Modell berechnet die Zündung bis ein vom Nutzer definierter Radius erreicht wird. In den hier beschriebenen Simulationen beträgt er einige Zentimeter. Eine detaillierte Auflösung des Zündvolumens im CFD-Gitter ist nicht notwendig.

Die Ausbreitungsgeschwindigkeit ergibt sich aus der turbulenten Flammgeschwindigkeit modifiziert um einen Term, der die Ausbreitungsgeschwindigkeit in der Anfangsphase der Zündung bei sehr kleinen Radien erhöht.

$$\frac{d}{dt} r_k = \frac{\rho_u}{\rho_b} s_{T,k}$$

$r_k$  ist der Radius des bereits verbrannten Volumens.

## **7.3 Nachrechnung des Experiments HYCOM13**

### **7.3.1 Kurze Beschreibung des Experiments**

Der Versuch HYCOM13 wurde an der RUT-Anlage durchgeführt. Die Geometrie der RUT-Versuchsanlage beim HYCOM13-Experiment kann Abb. 7.3-1 und Abb. 7.3-2 entnommen werden. Die Einbauten im Bereich des "Canyons" (Abb. 7.3-3) wurden gegenüber dem Experiment HYCOM1 modifiziert. Durch die beiden zusätzlichen horizontalen Einbauten können Flammenverzweigungen entstehen. Wie im HYCOM01-Experiment wurde die Verbrennung eines Wasserstoff-Luft-Gemischs bei ca. 10 % H<sub>2</sub>

gemessen. Durch die zu HYCOM01 veränderte Geometrie und den anderen Zündort kann geprüft werden, inwieweit die Verbrennungsmodelle und die gefundenen Parameter auch auf andere Versuchsanordnungen (von ähnlicher Größenskala) übertragbar sind.

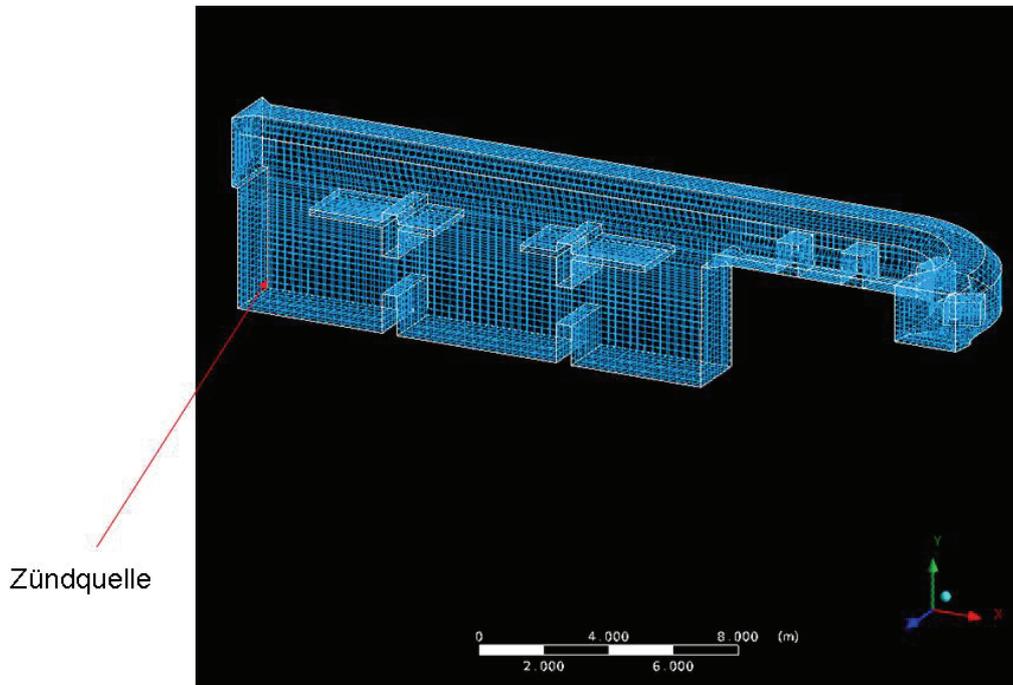


Abb. 7.3-1 Geometrie bei den Versuchen HYCOM13 und HYCOM14

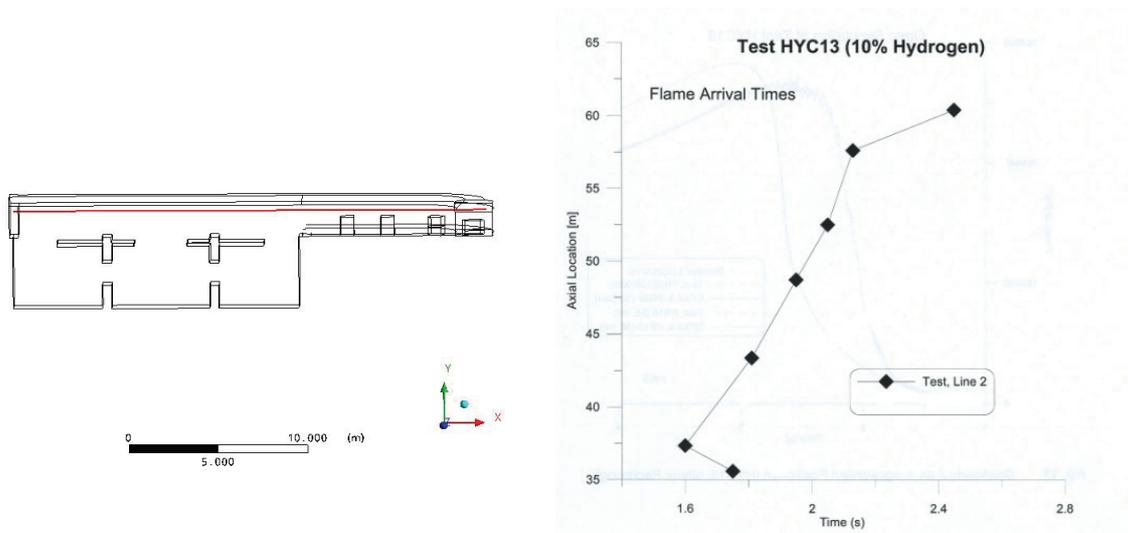


Abb. 7.3-2 Links: Geometrie der RUT-Anlage bei HYCOM13 und HYCOM14; rot: Position der Messline 2; Rechts: Experimentell bestimmte Flammenankunftszeiten entlang Messline 2 bei HYCOM013

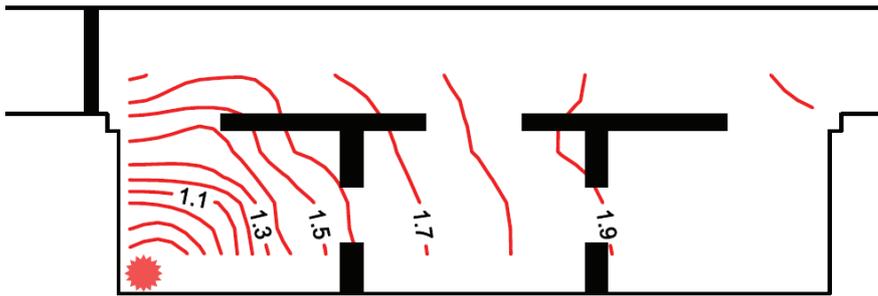
### 7.3.2 Ergebnisse der Simulation mit dem Eddy-Dissipation-Modell

Die an den HYCOM01-Versuch angepassten Parameter wurden ohne Modifikation für die Simulation verwendet (siehe /SPE 08/, /KLE 09/). Der Vorfaktor im Eddy-Dissipation-Modell wurde mit  $A_E = 21,0$  gewählt. Als Turbulenzmodell kam das SST-Modell zum Einsatz und die Wärmestrahlung wurde mit dem Discrete-Transfer-Modell berechnet.

Der Druckanstieg erfolgt in der Simulation etwas schneller als im Experiment (Abb. 7.3-4). Es kommt zur Ausbildung von lokalen kurzzeitigen Druckspitzen. In diesen Druckspitzen wurde ein um ca. 100.000 Pa höherer Maximaldruck gerechnet. Im Experiment dagegen werden keine Druckspitzen gemessen.

Beim Vergleich der Flammenankunftszeiten fallen deutliche Unterschiede zwischen Experiment und Simulation auf (Abb. 7.3-2 und Abb. 7.3-4). Im Bereich 42 m - 46 m erreicht die Flamme später als im Experiment die Sensoren im oberen Bereich des "Canyons". Offensichtlich erfolgt die Flammenausbreitung um die Hindernisse herum anders als berechnet (Abb. 7.3-6). In diesem Bereich ergibt sich bei Auswertung der Flammenankunftszeiten zudem das Problem, dass der Temperaturanstieg unterschiedlich schnell erfolgt. Bei der Auswertung wurde angenommen, dass die Flamme den Ort erreicht hat, wenn die Temperatur über 600 K liegt. Den Monitorpunkt  $x = 43,4$  m erreicht bei diesem Schwellenwert die Flamme viel später als die Nachbarpunkte (Abb. 7.3-4, Abb. 7.3-5).

Im Experiment erfolgt im Bereich 37,4 m - 54,7 m eine Flammenausbreitung entlang der Messlinie 2 (Abb. 7.3-2) mit einer ungefähr konstanten Geschwindigkeit von 35 m/s. Für diesen Bereich ergibt sich in der Simulation bei Vernachlässigung des Wertes bei 43,4 m eine Ausbreitungsgeschwindigkeit von ca. 85 m/s. Die Überschätzung der Geschwindigkeit der Flammenausbreitung korreliert mit der Überschätzung der Geschwindigkeit des Druckanstiegs und den lokalen Druckspitzen in der Simulation. Dieses Experiment könnte vermutlich mit einem kleineren Vorfaktor  $A_E$  besser nachgerechnet werden, da hierdurch die Reaktionsgeschwindigkeit verringert würde. Ziel der Untersuchungen war es aber, die in CFX implementierten Verbrennungsmodelle mit einem bereits an HYCOM01 angepassten Parametersatz zu validieren, weshalb auf Parameteränderungen verzichtet wurde.



Flame front in the Canyon  
(based on photodiodes data)

Abb. 7.3-3 Gemessene Flammenfronten im „Canyon“ im HYCOM13-Experiment

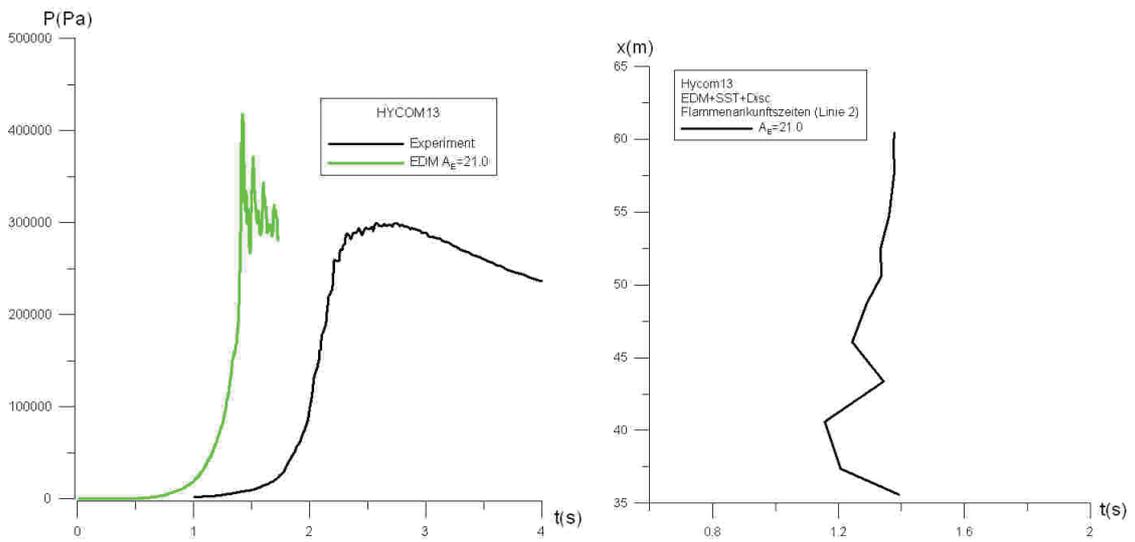


Abb. 7.3-4 Druck und Flammenankunftszeiten in der Simulation des HYCOM13-Experiments mit dem EDM + SST + Discrete-Transfer-Modell

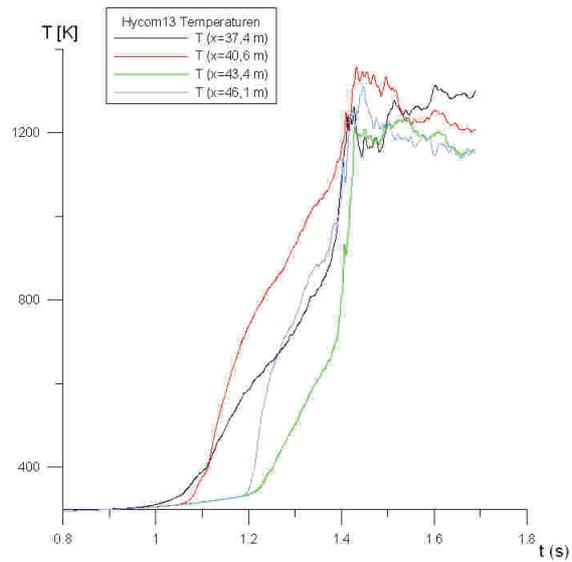


Abb. 7.3-5 Temperaturen an den Sensoren entlang der Messlinie 2 im Bereich  $37\text{ m} < x < 47\text{ m}$ , bei Simulation mit dem EDM + SST +Disc.-Transfer-Modell mit  $A_E = 21,0$

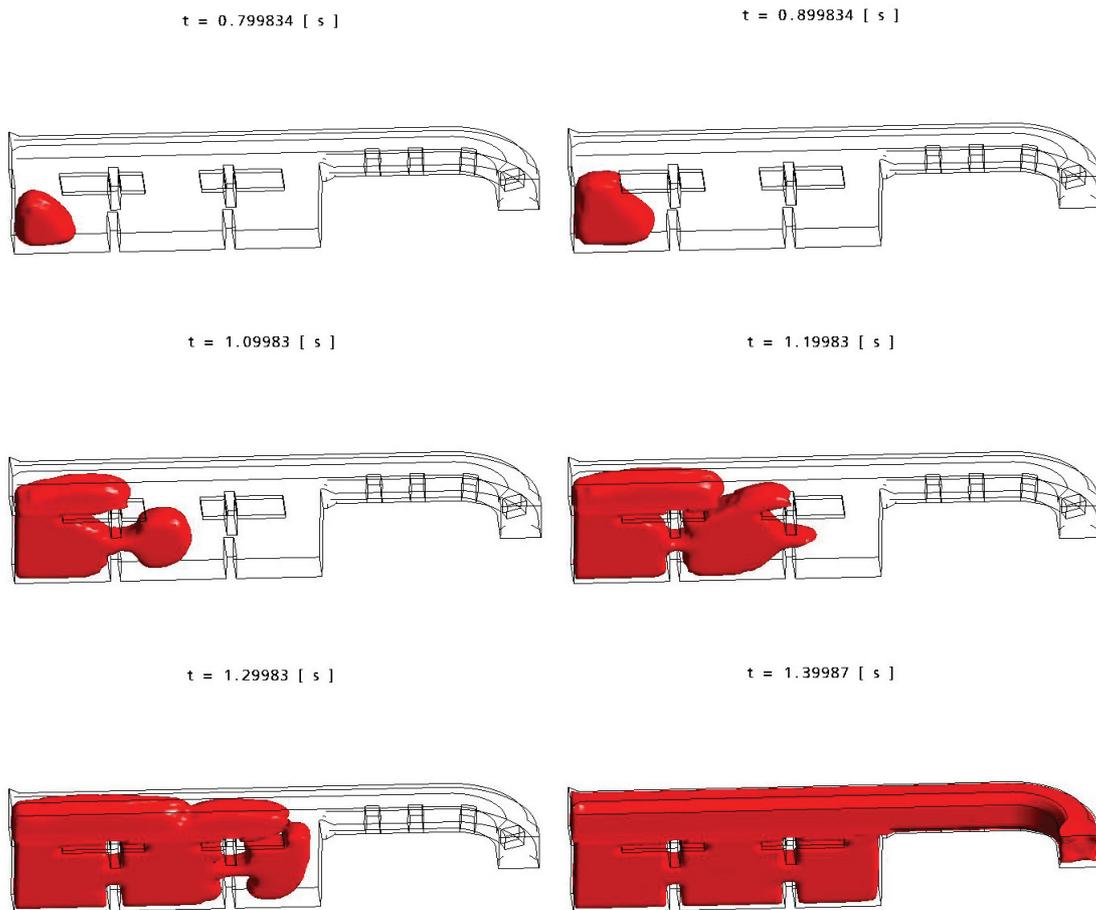


Abb. 7.3-6 Ausbreitung der Flammenfront (Isolinie mit Temperatur = 800 K) bei HYCOM13 (EDM-Modell)

### 7.3.3 Ergebnisse der Simulation mit dem Burning-Velocity-Modell

#### 7.3.3.1 Vergleich mit dem Experiment

Auch in dieser Simulation wurden die an den HYCOM01-Versuch angepassten Parameter ohne Modifikation verwendet (siehe /SPE 08/, /KLE 09/). Die turbulente Brenngeschwindigkeit wurde mit dem Zimont-Modell unter Verwendung des Vorfaktors  $A_B = 1,65$  bestimmt. Als Turbulenzmodell kam das SST-Modell zum Einsatz und die Wärmestrahlung wurde mit dem Discrete-Transfer-Modell berechnet. Als Anfangsturbulenz wurde  $k = 3 \text{ m}^2/\text{s}^2$  angenommen. Der Einfluss dieses Parameters wird im folgenden Abschnitt untersucht (siehe Abschnitt 7.3.3.2).

Der berechnete Druckverlauf (Abb. 7.3-7) stimmt relativ gut mit den experimentellen Daten überein. Die Geschwindigkeit des Druckanstiegs wurde gut getroffen, wobei sie leicht überschätzt wurde. Es kommt zu geringen lokalen Druckspitzen. Deutlichere Abweichungen zum Experiment sind zu Beginn und Ende der Verbrennung zu beobachten. Nach der Zündung erfolgt in der Simulation der schnelle Druckanstieg nach weniger als 1 s und es gibt eine kurze Phase mit einem moderaten Druckanstieg, während im Experiment 1 - 2 s nach Zündung noch eine relativ langsame Reaktion stattfindet. Ebenso wurde der langsame Druckanstieg am Ende der Verbrennung nicht exakt wiedergegeben. Das Druckmaximum ist etwas breiter als im Experiment und es ist in der Simulation etwas niedriger (ca. 10.000 Pa). Eine Abweichung um 10.000 Pa entspricht einem relativen Fehler von ca. 3,3 % bezogen auf das experimentell gemessene Maximum von ca. 300.000 Pa.

Im Experiment erfolgt im Bereich  $x = 46 \text{ m}$  bis  $57 \text{ m}$  eine Flammenausbreitung entlang der Linie 2 mit einer ungefähr konstanten Geschwindigkeit von 35 m/s. In diesem Bereich liegt in der Simulation mit dem BVM-Modell eine Ausbreitungsgeschwindigkeit von ca. 37 m/s vor. Sie liegt damit deutlich näher am experimentellen Wert als bei Simulation mit dem Eddy-Dissipation-Modell (vergleiche auch Abb. 7.3-8).

Für den Bereich der Hindernisse ( $x = 40 \text{ m} - 45 \text{ m}$ ) ergibt sich ebenfalls eine deutlich geringere Abweichung zwischen Simulation und Experiment als dies beim Eddy-Dissipation-Modell der Fall ist. Es muss beim Vergleich berücksichtigt werden, dass bei der Bestimmung der Flammenankunftszeit in der Simulation die Temperatur an einem

Punkt (in der Mitte des Canyons) zugrunde gelegt wurde. Im Experiment erfolgt die Bestimmung durch Lichtdioden entlang einer Linie. In der Simulation erfolgt die Flammenausbreitung oft an den Seiten schneller als in der Mitte. Durch diese unterschiedliche Bestimmungsmethode ergeben sich zusätzliche Abweichungen.

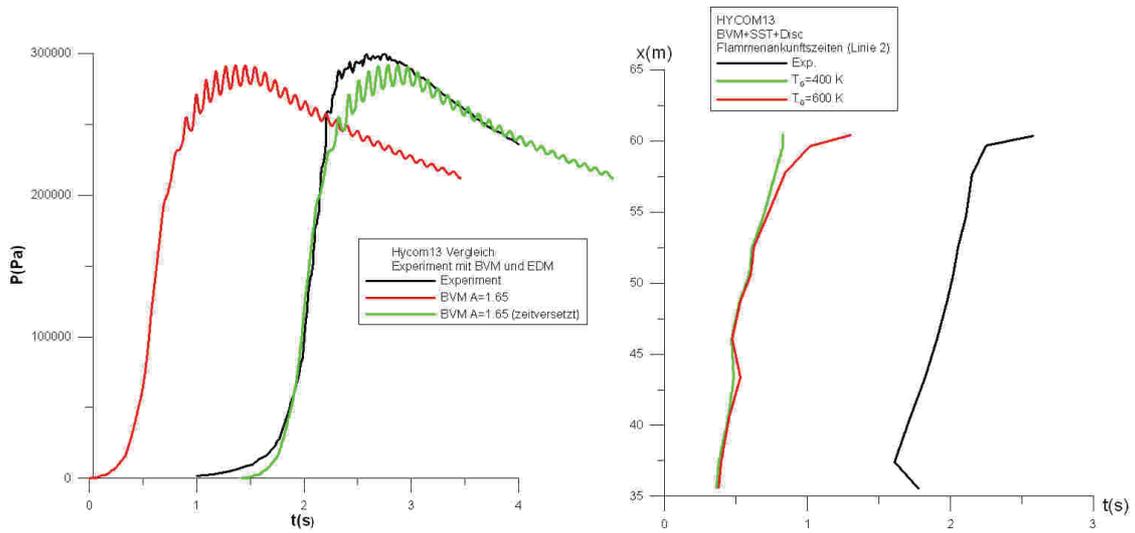
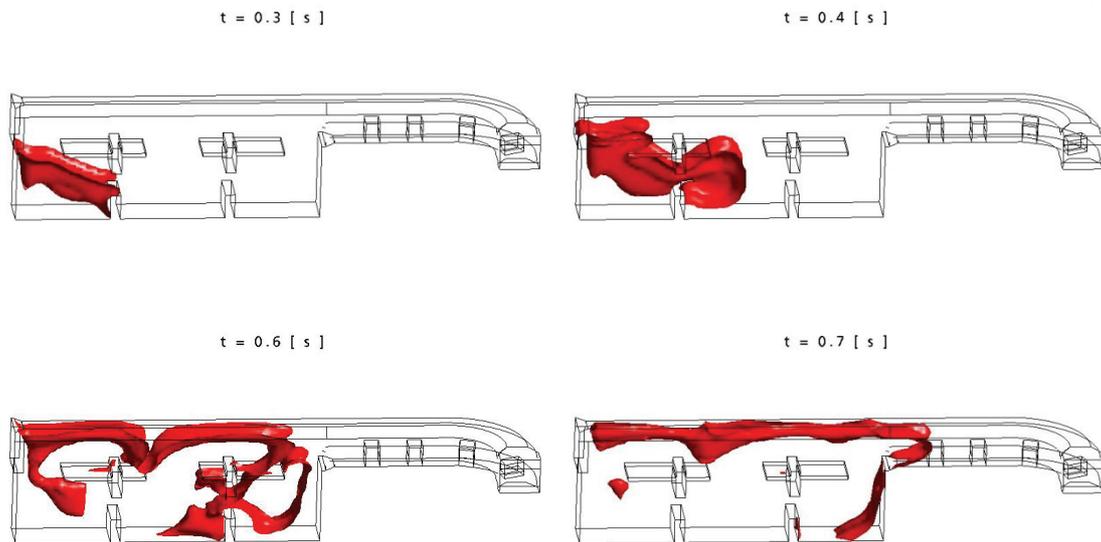


Abb. 7.3-7 Druck und Flammenankunftszeiten in der Simulation des HYCOM13-Experiments mit dem BVM + SST + Discrete-Transfer-Modell



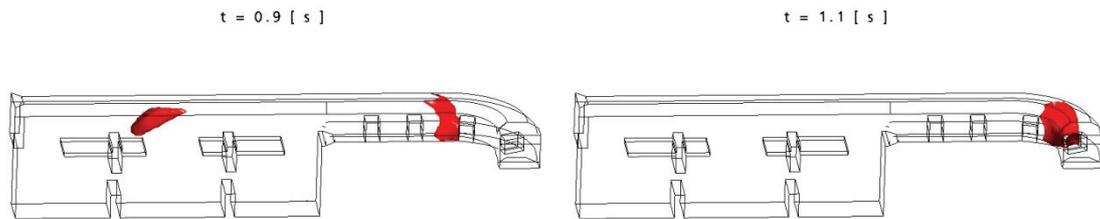


Abb. 7.3-8 Ausbreitung der Flammenfront (Isolinie mit  $H_2$ -Molenbruch  $x_{H_2} = 0,01$ ) bei HYCOM013 (BVM-Modell)

### 7.3.3.2 Einfluss der Anfangsturbulenz auf das Simulationsergebnis

Für die HYCOM-Versuche steht keine Information über die Turbulenz zum Zeitpunkt der Zündung zur Verfügung. Nach Auskünften vom FZK war vor der Zündung ein Ventilator in der RUT-Anlage im Betrieb, der eine homogene Vermischung des Wasserstoffs sicherstellen sollte. Daraus lässt sich auf eine gewisse Anfangsturbulenz schließen. Eine Verifikation dieser Auskünfte war mit der, der GRS vorliegenden Versuchsbeschreibungen nicht möglich, da in ihnen keine Aussagen zur Anfangsturbulenz getroffen werden. Der Wert für die turbulente kinetische Energie  $k = 3 \text{ m}^2/\text{s}^2$  ist derselbe Wert, für den das FZK die beste Übereinstimmung zwischen COM3D-Ergebnissen und Experiment erzielen konnte. Allerdings handelt es sich hier um eine sehr hohe Anfangsturbulenz. Ob dies realistisch ist, kann nicht abschließend geklärt werden. Es ist prinzipiell auch denkbar, dass sowohl beim COM3D als auch bei CFX ähnliche Modell-schwächen vorliegen, die durch die Wahl einer unrealistisch hohen Anfangsturbulenz kompensiert werden müssen.

Im Folgenden soll untersucht werden, welchen Einfluss die Startturbulenz auf das Simulationsergebnis hat. Dazu wird die Startturbulenz von  $k_{ini} = 1,0 \text{ e-}4 \text{ m}^2/\text{s}^2$  (schwache Turbulenz) bis  $k_{ini} = 6 \text{ m}^2/\text{s}^2$  (sehr starke Turbulenz) variiert. Da keine weiteren Informationen vorliegen, wird von einer homogenen Verteilung der Turbulenz ausgegangen. Die turbulente Dissipationsgeschwindigkeit wurde über Eddy Viscosity Ratio = 10 gesetzt (Nutzerempfehlung von ANSYS).

Es zeigt sich, dass die Verbrennungsgeschwindigkeit stark von der anfänglichen turbulenten kinetischen Energie  $k$  abhängt. Je größer  $k$  gewählt wird umso früher beginnt der Druckanstieg und umso steiler ist der Druckanstieg. (Abb. 7.3-9). Ganz offensicht-

lich hat eine unterstellte Anfangsturbulenz bei diesem Versuch nicht einen Einfluss auf das Zündverhalten, sondern auch auf den späteren Verlauf der Verbrennung. Dies wird besonders deutlich, beim Vergleich des Verlaufs der Flammenfront. In Abb. 7.3-10 wird die berechnete Flammenfront bei schwacher Startturbulenz und bei starker Startturbulenz verglichen. Bei geringer Anfangsturbulenz erfolgt eine langsame Verbrennung und die Flammenfront bewegt sich aufgrund des Auftriebs nach oben, während bei hoher Anfangsturbulenz die Verbrennung viel schneller abläuft und eine deutlich schnellere Verbrennung in seitlicher Richtung stattfindet. Entsprechend erfolgt die Flammenverzweigung am ersten Hindernis in Abhängigkeit von der Startturbulenz unterschiedlich und auch der weitere Verbrennungsverlauf unterscheidet sich deutlich.

Der starke Einfluss der Anfangsturbulenz wurde bei Untersuchungen zu HYCOM01 nicht in diesem Maße festgestellt. Ursache ist vermutlich, dass bei HYCOM01 die Zündung am Ende des Kanals mit den Hindernissen erfolgte. Kurz nach Zündung erreicht die Flamme das erste Hindernis, an dem ebenso wie an den folgenden Hindernissen Turbulenz erzeugt wird. Deshalb liegt schon relativ früh während des Verbrennungsexperiments unabhängig von der Startturbulenz eine merkliche Turbulenz vor. Ein weiterer Unterschied ist, dass durch den engen Kanal bei HYCOM01 die Richtung des Verbrennungsvorgangs für die Anfangsphase vorgegeben ist, während bei Zündung im Canyon (HYCOM13) eine unterschiedliche Flammenausbreitung möglich ist (Abb. 7.3-10).

Weitere Untersuchungen haben gezeigt, dass auch die Wahl der initialen turbulenten Dissipationsgeschwindigkeit  $\epsilon$  einen deutlichen Einfluss auf den Verbrennungsvorgang hat (Abb. 7.4-4).

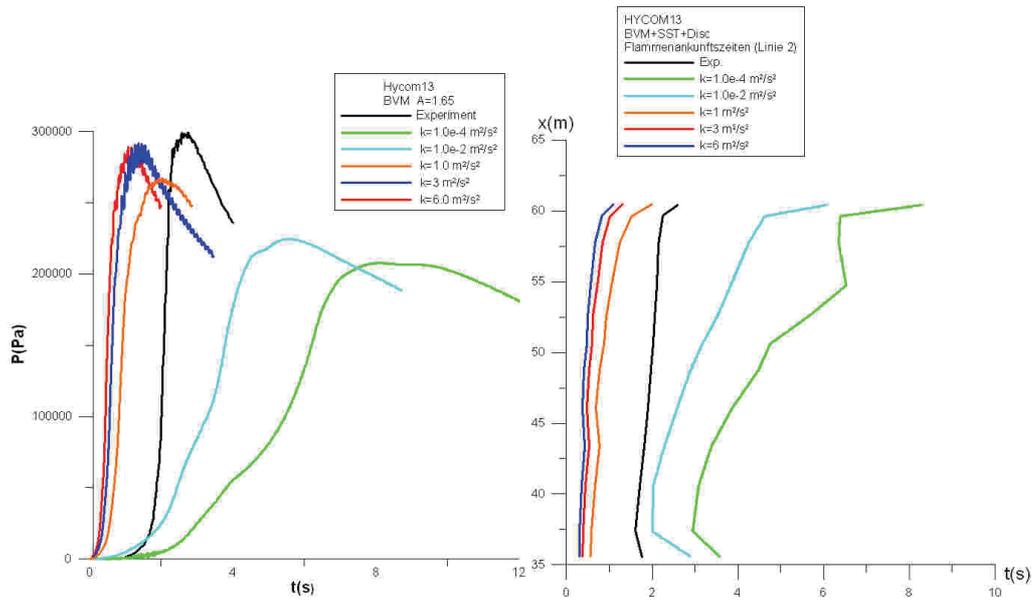


Abb. 7.3-9 Druck (links) und Flammenankunftszeiten in Abhängigkeit von turbulenter kinetischer Energie  $k$  zu Simulationsbeginn



## **7.4 Nachrechnung des Experiments HYCOM14**

### **7.4.1 Kurze Beschreibung des Experiments**

Die Geometrie und der Zündort sind mit denen des Experiments HYCOM13 identisch. Das Experiment HYCOM14 unterscheidet sich lediglich durch die höhere Wasserstoffkonzentration von 11,5 %. Durch Nachrechnung dieses Experiments kann geprüft werden, inwieweit die für HYCOM13 gewonnenen Erkenntnisse auch auf andere höhere Wasserstoffkonzentrationen übertragbar sind.

### **7.4.2 Ergebnisse der Simulation mit dem Eddy-Dissipation-Modell**

Beim Vergleich der Simulationsergebnisse mit den experimentellen Daten ergibt sich ein sehr ähnliches Bild wie bei der Simulation des Experiments HYCOM13. Auch hier wurde die Geschwindigkeit des Druckanstiegs etwas überschätzt und die berechneten lokalen Druckmaxima sind deutlich höher als im Experiment (Abb. 7.4-2).

Auch die berechneten Flammenankunftszeiten zeigen ähnliche Abweichungen vom Experiment wie bei der Simulation von HYCOM13. Im Bereich der Hindernisse ist eine deutliche Abweichung zu beobachten. Im Experiment ergibt sich für den Bereich  $46 \text{ m} < x < 57 \text{ m}$  eine mittlere Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von ca. 135 m/s. In der Simulation mit dem Eddy-Dissipation-Modell ergibt sich für diesen Bereich eine mittlere Ausbreitungsgeschwindigkeit von ca. 240 m/s.

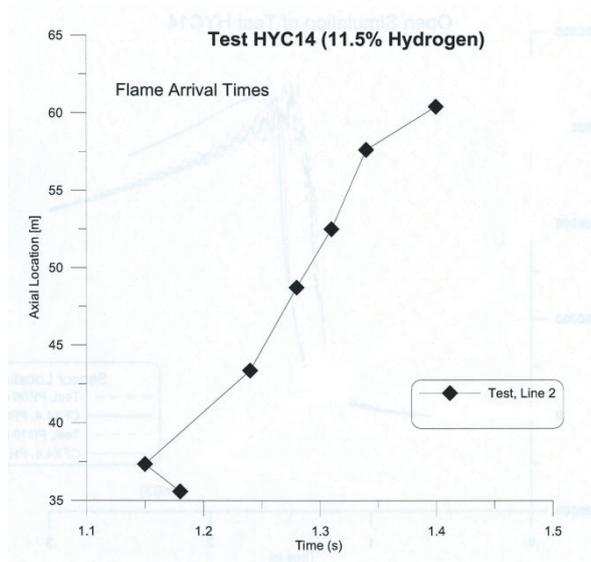


Abb. 7.4-1 Flammenankunftszeiten im Experiment HYCOM14

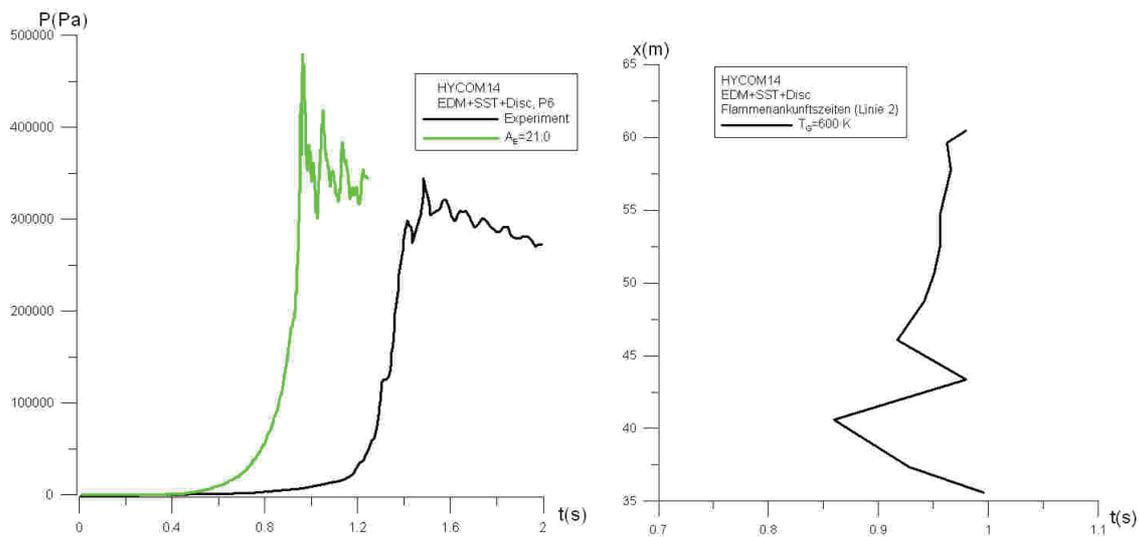


Abb. 7.4-2 Druck und Flammenankunftszeiten in der Simulation des HYCOM14-Experiments mit dem EDM + SST + Discrete-Transfer-Modell

### 7.4.3 Ergebnisse der Simulation mit dem Burning-Velocity-Modell

Für die Simulation wurden dieselben Modellparameter wie bei der Simulation von HYCOM13 verwendet. Auch hier wurde wieder von einer Startturbulenz von  $k_{ini} = 3 \text{ m}^2/\text{s}^2$  ausgegangen.

Auch bei HYCOM14 wurde der Druckverlauf mit dem BVM-Modell gut simuliert (Abb. 7.4-3). Die Geschwindigkeit des Druckanstiegs und der Maximaldruck werden in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Wie schon bei HYCOM13 wurde die Phase mit dem relativ langsamen Druckanstieg (0,7 s – 1,2 s) von der Rechnung nicht exakt simuliert.

Für den Bereich  $46 \text{ m} < x < 57 \text{ m}$  ergibt sich beim Burning-Velocity-Modell eine mittlere Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von ca. 85 m/s. Sie liegt damit unter dem experimentellen Wert von 135 m/s.

Auch bei dieser Simulation ergibt sich wieder die Unsicherheit bezüglich der Anfangsturbulenz. Für dieselben Startbedingungen wie bei HYCOM13 ergibt sich eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Der Einfluss der Anfangsturbulenz auf das Simulationsergebnis ist in Abb. 7.4-4 zu sehen.

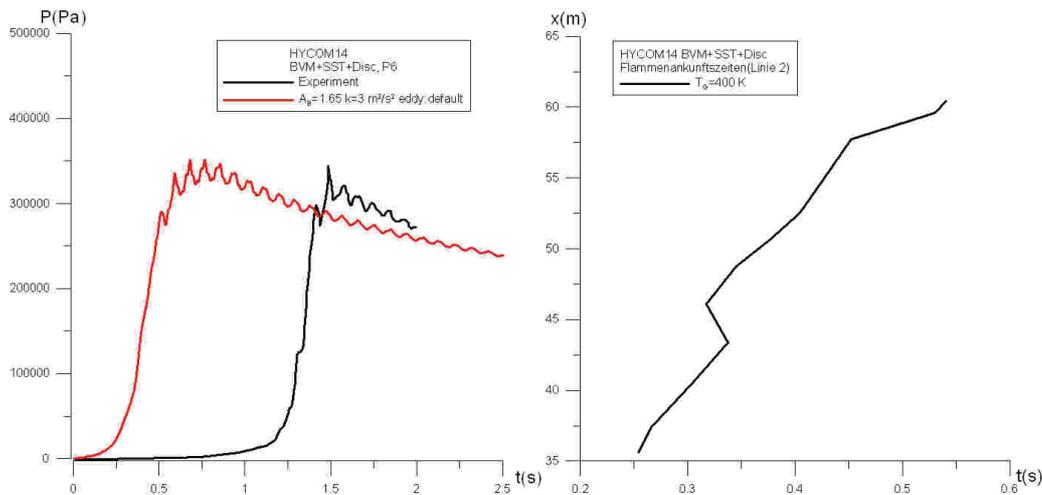


Abb. 7.4-3 Druck und Flammenankunftszeiten in der Simulation des HYCOM14-Experiments mit dem BVM + SST + Discrete-Transfer-Modell

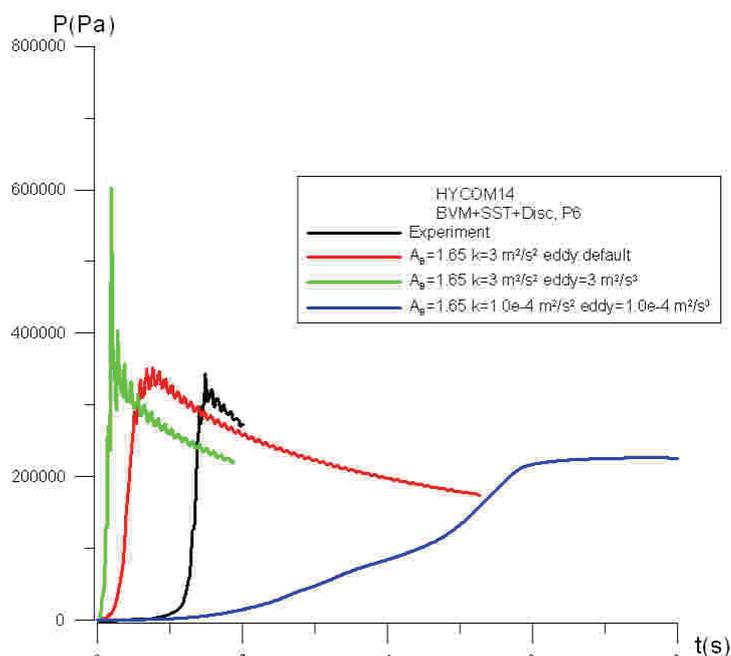


Abb. 7.4-4 Druck in Abhängigkeit von der Startturbulenz ( $k_{ini}$  und  $\epsilon_{ini}$ )

## 7.5 Zusammenfassung der Ergebnisse der Nachrechnungen der Experimente HYCOM13 und HYCOM14

Bei diesen beiden Experimenten wurden im Gegensatz zu HYCOM01 und HYCOM02 eine modifizierte Geometrie und ein anderer Zündort im Versuch gewählt. Mit dem BVM-Modell konnten beide Experimente auch ohne Parameteranpassung relativ gut nachgerechnet werden (Abb. 7.5-1). Die Geschwindigkeit des Verbrennungsvorgangs wurde dabei bei HYCOM14 unterschätzt während sie bei HYCOM13 in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet wurde.

Bei den Nachrechnungen mit dem erweiterten Eddy-Dissipation-Modell sind die Abweichungen größer. In beiden Simulationen wurde die Geschwindigkeit des Verbrennungsvorgangs deutlich überschätzt.

Für das BVM-Modell wurde der Einfluss der Anfangsturbulenz untersucht. Es zeigte sich eine starke Abhängigkeit der Verbrennungsgeschwindigkeit und der Form der Flammenfront von der Anfangsturbulenz. Nach Auskünften vom FZK war vor der Zündung ein Ventilator in der RUT-Anlage im Betrieb, der eine homogene Vermischung des Wasserstoffs sicherstellen sollte. Ob dies die Annahme einer hohen Anfangsturbulenz von  $k_{ini} = 3 \text{ m}^2/\text{s}^2$  gerechtfertigt ist, ist unklar, da die Turbulenz nicht gemessen

wurde. Zudem besteht eine hohe Unsicherheit hinsichtlich der Wahl der turbulenten Dissipationsgeschwindigkeit  $\epsilon_{ini}$ . In Zukunft sollte bei Durchführung von Validierungsexperimenten darauf geachtet werden, wie hoch die Turbulenz ( $k_{ini}$ ,  $\epsilon_{ini}$ ) beim Zeitpunkt der Zündung ist.

Es sei angemerkt, dass sich dieses Problem hauptsächlich bei Versuchsnachrechnungen stellt. Bei Berechnung der Verbrennung in einem Sicherheitsbehälter ist die Anfangsturbulenz aus der CFD-Rechnung mit der die Gasverteilung berechnet wurde, bekannt.

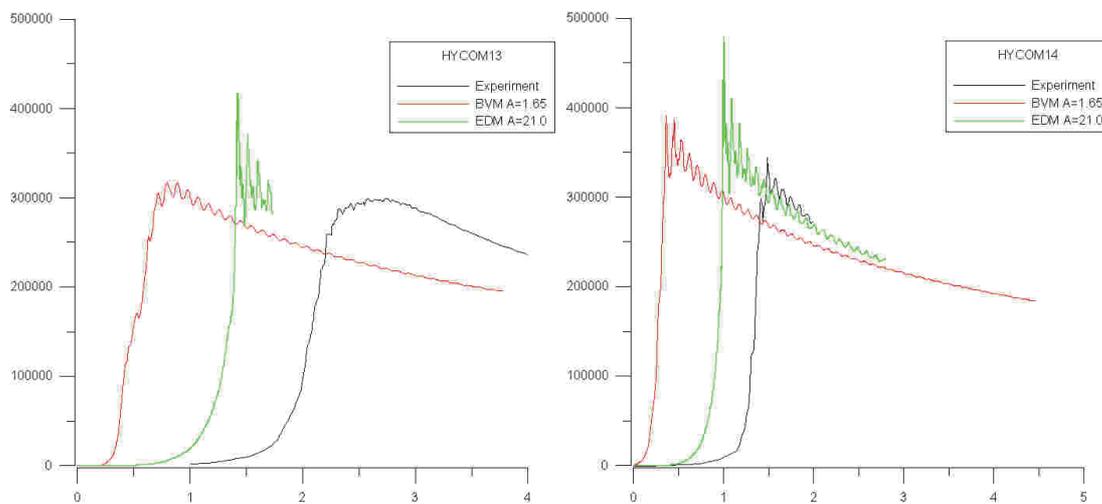


Abb. 7.5-1 Druck im HYCOM13- und HYCOM14-Experiment

## 7.6 Simulation des Experiments Ix2 am Battelle-Modell-Containment

### 7.6.1 Kurze Beschreibung des Experiments

Der Versuch Ix2 wurde am Battelle-Modell-Containment durchgeführt. Der Verbrennungsvorgang und die Raumanordnung unterscheiden sich maßgeblich von der HYCOM Anlage. Daher wurde er für die weitere Validierung ausgewählt.

In Abb. 7.6-1 ist eine schematische Darstellung der Geometrie und des Zündortes des Versuchstandes zu sehen. In Abb. 7.6-2 ist die Geometrie und das verwendete CFD-Gitter zu sehen. In den Räumen R7 und R5 des Modell-Containments befanden sich 9,86 vol.% bzw. 9,6 vol.% Wasserstoff. Raum R5 ist mit Raum R9 über eine 1,8 m<sup>2</sup> große Öffnung verbunden. Die Verbindungen zu den anderen Räumen waren ver-

geschlossen. In R9 befand sich zu Versuchsbeginn eine  $H_2$ -Konzentration von 0,4 vol.%. Die Zündung erfolgte in R7. In der Verbindung R7 nach R5 fand eine Freistrahlzündung in den Raum R5 hinein statt. Der Druck im Folgeraum R5 ist vorübergehend höher als im Zündraum R7. Durch die Expansion des Gases aufgrund der Verbrennung wurde eine große Menge von Wasserstoff in den Raum R9 transportiert. Eine Verbrennung findet nicht bzw. in geringen Maßen in R9 statt. Nach Ablauf der Verbrennung befinden sich ca. 42 % der Ausgangsmasse des Wasserstoffs unverbrannt in R9. In den anderen beiden Räumen befindet sich dagegen sehr wenig unverbrannter Wasserstoff.

Anhand der Nachrechnung dieses Experiments kann getestet werden, inwieweit die beiden Verbrennungsmodelle mit den zugehörigen Parametern zur Simulation von Mehrraumgeometrien - wie sie auch in einem Containment vorhanden sind - geeignet sind. Insbesondere ist interessant zu untersuchen, inwieweit sie in der Lage sind, Freistrahlezündungen korrekt zu simulieren.

Raumkonfiguration: Versuchsgeometrie "A", Position des Siemens-Funkenzünders = Zü1

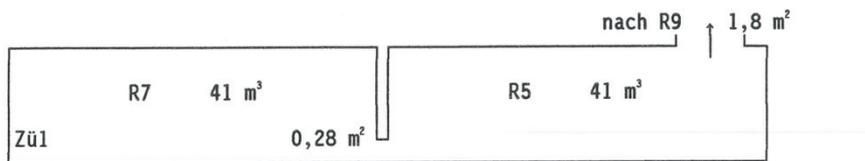


Abb. 7.6-1 Schematische Darstellung der Geometrie und des Zündortes

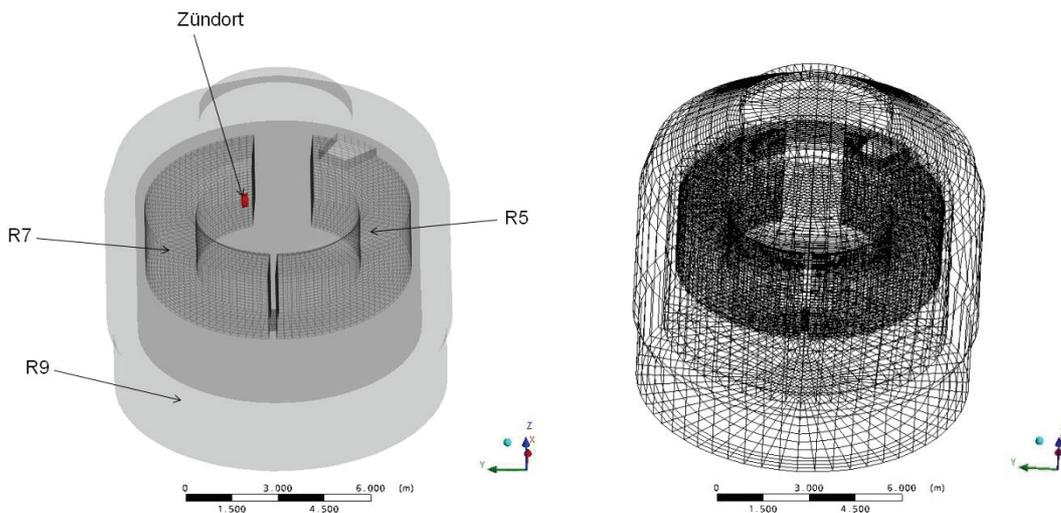


Abb. 7.6-2 Geometrie und CFD-Gitter beim Ix2-Experiment

## 7.6.2 Diskretisierung und Modellierung des Versuchs Ix2

Bei den Rechnungen des Versuchs Ix2 kam ein strukturiertes Gitter mit ca. 60.000 Zellen zum Einsatz. Der eigentliche, zu simulierende Verbrennungsvorgang läuft in den Räumen R5 und R7 ab. Der Raum R9 wurde in das Gitter integriert, um das Gesamtvolumen des Versuchsstandes richtig zu simulieren. Alternativ hätte auch an der Verbindung R5 zu R9 eine Druckrandbedingung gesetzt werden können, wobei als zeitlicher Druckverlauf experimentelle Daten hätten verwendet werden müssen. Da die Bestimmung der Abläufe in R9 ursprünglich nicht Ziel der Simulation war, wurde die Geometrie in R9 räumlich vereinfacht dargestellt und ein sehr grobes CFD-Gitter verwendet.

Durch eine verbesserte Modellierung der laminaren Brenngeschwindigkeit kann mit dem BVM-Modell simuliert werden, dass es zu keiner Flammenausbreitung kommt, wenn die Wasserstoffanfangskonzentration weniger als 4 vol.% beträgt (siehe Abschnitt 7.6.4.2). Um den Verlöschungseffekt der Verbrennung bei niedrigen Konzentrationen besser simulieren zu können, wurden zusätzlich Rechnungen mit der modifizierten Korrelation für  $v_{lam}$  mit einem im Raum R9 verfeinerten Gitter durchgeführt. Dieses Gitter hat insgesamt 85.000 Zellen.

Es wurden Rechnungen sowohl mit dem erweiterten Eddy-Dissipation-Modell als auch mit dem Burning-Velocity-Modell durchgeführt. Dabei wurden die an den HYCOM01-Versuch angepassten Modellparameter verwendet. Des Weiteren wurden die Vorfaktoren für die beiden Verbrennungsmodelle so variiert, dass eine möglichst gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt wurde.

Bei allen Simulationen wurden die Turbulenz mit dem SST-Modell und die Wärmestrahlung mit dem Discrete-Transfer-Modell simuliert. Für die Wände wurde eine konstante Oberflächentemperatur von 22 bzw. 23 °C angenommen.

Um die unterschiedlichen Startbedingungen für die einzelnen Räume möglichst einfach vorgeben zu können, wurden für die 3 Räume jeweils unterschiedliche Rechengebiete (Domains) definiert, die über GGI-Interfaces miteinander verbunden sind. Die Handhabung mehrere Domains hat sich als kompliziert und fehlerträchtig erwiesen. Speziell bei Verwendung des BVM-Modells zusammen mit dem Spark-Ignition-Modell mussten Expertparameter gesetzt werden, um die Zündung in einer Domain zu simulieren und

$v_{lam}$ (Temperatur) definieren zu können. Deshalb wurde bei den Rechnungen in Abschnitt 7.6.4.4 mit einer Domain und mehreren Subdomains (zur Initialisierung der Startbedingungen) gerechnet. Die Simulationsergebnisse werden durch diese Unterschiede aber in sehr geringem Maße beeinflusst. Durch Wegfall der GGI-Interfaces und einer besseren Partitionierung beim Parallelrechnen ist die Simulation mit einer Domain etwas schneller. Auf eine quantitative Untersuchung dieses Effekts wurde aus Zeitgründen verzichtet.

### **7.6.3 Simulationsergebnisse der Rechnungen mit dem Eddy-Dissipation-Modell**

Bei der Simulation des HYCOM01-Experiments wurde mit dem Faktor  $A_E = 18$  bzw.  $A_E = 21$  eine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment erzielt. Bei Verwendung dieses Vorfaktors für die Simulation des Experiments Ix2 wird die Verbrennungsgeschwindigkeit deutlich überschätzt. Der Ablauf der Verbrennung wurde qualitativ richtig berechnet. Auch in der Simulation findet im Raum R5 an der Verbindung zu R7 eine Freistrahzündung statt, mit der Folge eines zeitweise höheren Druckes in R5 als in R7. Allerdings sind alle Drücke immer signifikant höher als im Experiment.

In der Simulation wurde das Druckmaximum in Raum R5 um einen Faktor 10 und in Raum R7 um einen Faktor 3 überschätzt. Selbst in Raum R9 wurde ein kurzzeitiger Druckpeak berechnet, während im Experiment in diesem Raum ein kontinuierlicher Druckanstieg ohne einen Druckpeak gemessen wurde.

Mit einem Faktor  $A_E = 10$  kann das Druckmaximum in R7 richtig vorhergesagt werden. Für diesen Faktor wurde aber der Druck in R5 unterschätzt. Es wurde bei diesem  $A_E$  kein Druckpeak in R5 simuliert, sondern ein stetiger Druckanstieg bis die Wärmeverluste die frei werdende Energie bei der Verbrennung übersteigen und der Druck wieder abfällt. Mit  $A_E = 12$  kann das Druckmaximum in R5 richtig vorhergesagt werden, allerdings ist in diesem Fall der Maximaldruck in R7 um ca. 30 % zu hoch. Mit keinem Faktor  $A_E$  lassen sich beide Druckmaxima exakt berechnen, allerdings ergibt sich mit  $A_E = 10 - 12$  die beste Übereinstimmung. Das Verhältnis von  $P_{max}(R5)/P_{max}(R7)$  weicht dabei in der Simulation mit 0,55 für  $A_E = 10$  deutlich von dem im Experiment mit 0,83 ab.

Der Druck nach Ablauf der chemischen Reaktion ist unabhängig von der Wahl des Faktors  $A_E$ , wenn die Wärmeverluste an den Wänden vernachlässigt werden. Der Druckanstieg ist ungefähr doppelt so hoch wie Experiment. Ursache ist, dass im Experiment ca. 48 % des Wasserstoffs nicht verbrannt sind. Im Raum R9 fand im Experiment keine oder eine räumlich sehr begrenzte Verbrennung statt. 42,4 % der Anfangswasserstoffmasse befanden sich unverbrannt nach Ablauf der Verbrennung in R9. Bei einer Wasserstoffkonzentration unterhalb von 4 vol.% – 5 vol.% ist keine Verbrennung mehr möglich (bei 20 °C und 1 bar für das unverbrannte Gas). Zwischen 4 vol.% – 8 vol.% ist eine Verbrennung abwärts nicht mehr möglich, da dieser Brennrichtung der Auftrieb des heißen Gases entgegensteht.

Beim Eddy-Dissipation-Modell findet keine Modellierung von Verlöschungsphänomenen statt. Unabhängig von der Anfangswasserstoffkonzentration kommt es zu einer vollständigen Verbrennung (soweit es stöchiometrisch möglich ist). Folglich verbrennt der gesamte Wasserstoff im Raum R9, da genug Sauerstoff zur Verfügung steht, was den höheren Enddruck zur Folge hat. Die Annahme einer vollständigen Verbrennung ist in der Regel konservativ. Denkbar ist aber, das Modell dahingehend zu modifizieren, dass  $A_E = 0$  gesetzt wird, sofern die Anfangswasserstoffkonzentration kleiner 4 vol.% ist. Dadurch würde für solch niedrige Wasserstoffkonzentrationen die Verbrennung unterbunden.

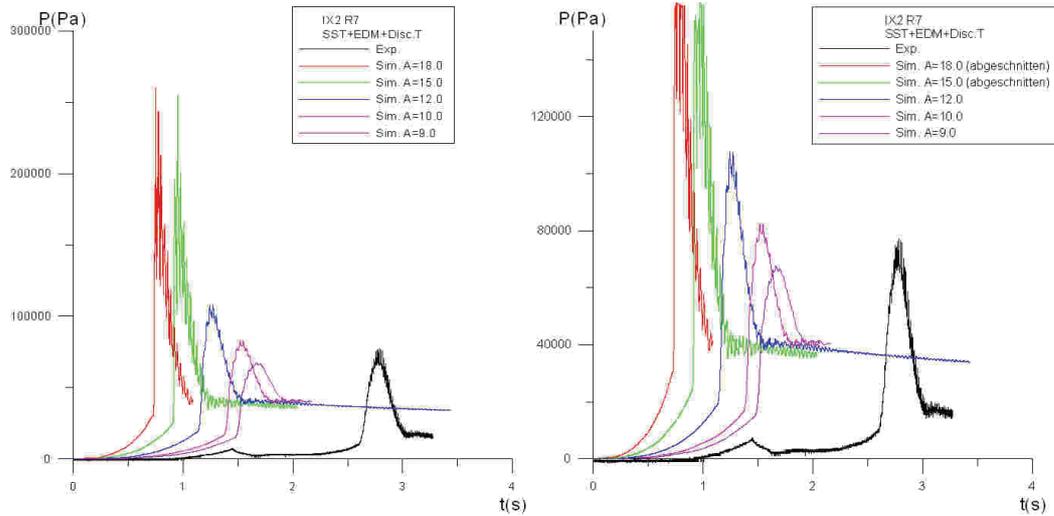


Abb. 7.6-3 Vergleich des Druckverlaufs im Raum R7 im Experiment und in der Simulation mit dem erweiterten Eddy-Dissipation-Modell unter Verwendung verschiedener Vorfaktoren

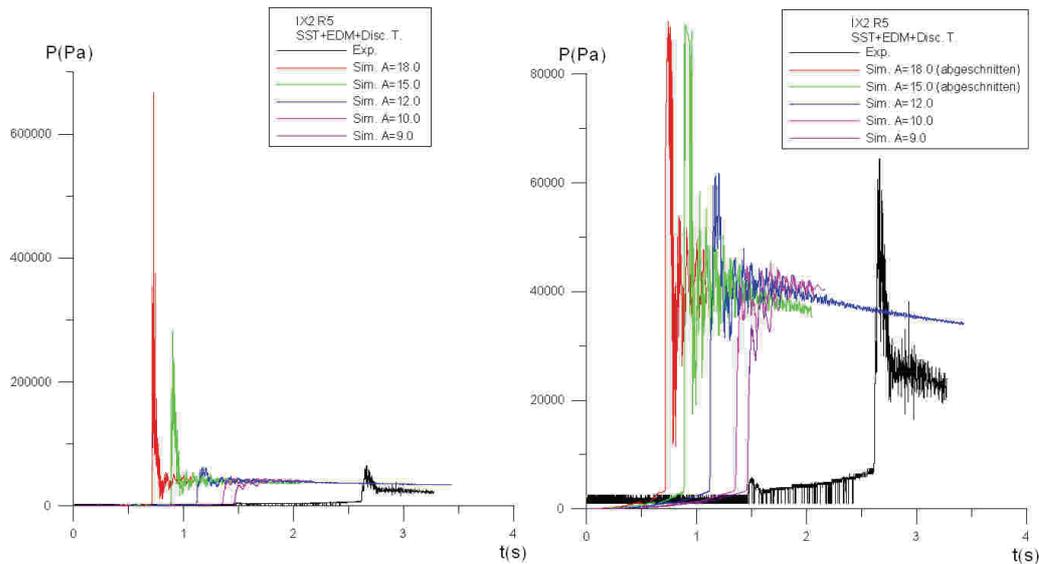


Abb. 7.6-4 Vergleich des Druckverlaufs im Raum R5 im Experiment und in der Simulation mit dem erweiterten Eddy-Dissipation-Modell unter Verwendung verschiedener Vorfaktoren

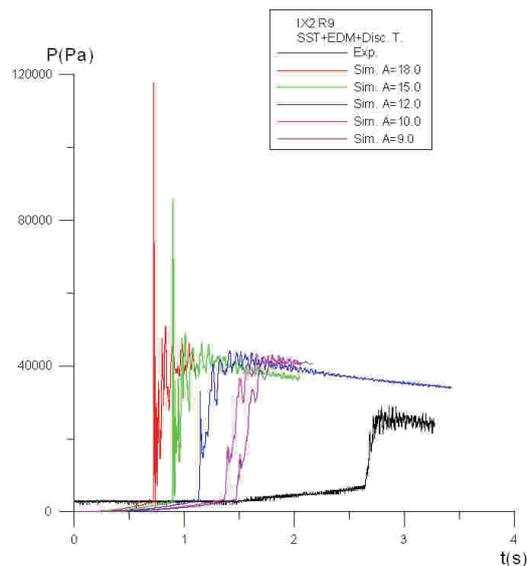


Abb. 7.6-5 Vergleich des Druckverlaufs im Raum R9 im Experiment und in der Simulation mit dem erweiterten Eddy-Dissipation-Modell unter Verwendung verschiedener Vorfaktoren

## 7.6.4 Simulationsergebnisse mit dem Burning-Velocity-Modell

### 7.6.4.1 Unmodifiziertes Burning-Velocity-Modell

Der Versuch Ix2 wurde auch mit dem Burning-Velocity-Verbrennungsmodell nachgerechnet. In der ersten Rechnung wurde derselbe Faktor im Zimont-Modell ( $A_B = 1,65$ ) wie für die Nachrechnung der HYCOM-Versuche verwendet. Mit  $A_B = 1,65$  wurde das Druckmaximum im Raum R7 um ca. 20.000 Pa überschätzt, während das Maximum in R5 um ca. 10.000 Pa zu niedrig vorhergesagt wurde. Dies entspricht einem relativen Fehler von ca. 20 % bei beiden Maxima. Durch eine Verringerung von  $A_B$  auf 1,4 kann erreicht werden, dass der Maximaldruck in R7 dem experimentellen Wert entspricht, allerdings ist in diesem Fall der Maximaldruck in R5 noch kleiner. Insgesamt gesehen wurde dadurch keine Verbesserung der Ergebnisse erreicht. Der bereits für die HYCOM-Versuche bestimmte Faktor  $A_B = 1,65$  scheint auch für das Experiment Ix2 weiterhin Gültigkeit zu besitzen.

Der Ergebnisvergleich zeigt weiterhin, dass sich der Druckverlauf in der Anfangsphase von dem im Experiment unterscheidet (Abb. 7.6-6, Abb. 7.6-7). Ab einem relativen Druck von weniger als 10.000 Pa setzt im Experiment ein schneller Druckanstieg in R5

und R7 ein. In der Simulation setzt dieser Druckanstieg deutlich später ein. Die Unterschiede im Verlauf des Druckanstiegs und auch die Tatsache, dass das Verhältnis der Höhe der beiden Druckpeaks  $P_{\max}(R5) / P_{\max}(R7)$  in Simulation und Experiment unterschiedlich sind (0,53 zu 0,83), zeigen, dass Details im Ablauf der Verbrennung in der Simulation nicht exakt wiedergegeben werden. Der kleine Druckpeak im Experiment bei 1,5 s in R7 wurde durch das Bersten einer Folie bewirkt. Dieses Phänomen konnte in der Simulation nicht berücksichtigt werden. Es wurde aber erwartet, dass dieser Vorgang keinen signifikanten Einfluss auf den Verbrennungsvorgang hat.

Bei dieser Simulation wurde die laminare Flammgeschwindigkeit auch für niedrige  $H_2$ -Anfangskonzentrationen nicht 0. Deshalb findet auch bei dieser Simulation eine vollständige Wasserstoffverbrennung statt, was eine deutliche Überschätzung des Enddrucks zur Folge hat (siehe auch Diskussion in Abschnitt 7.6.3).

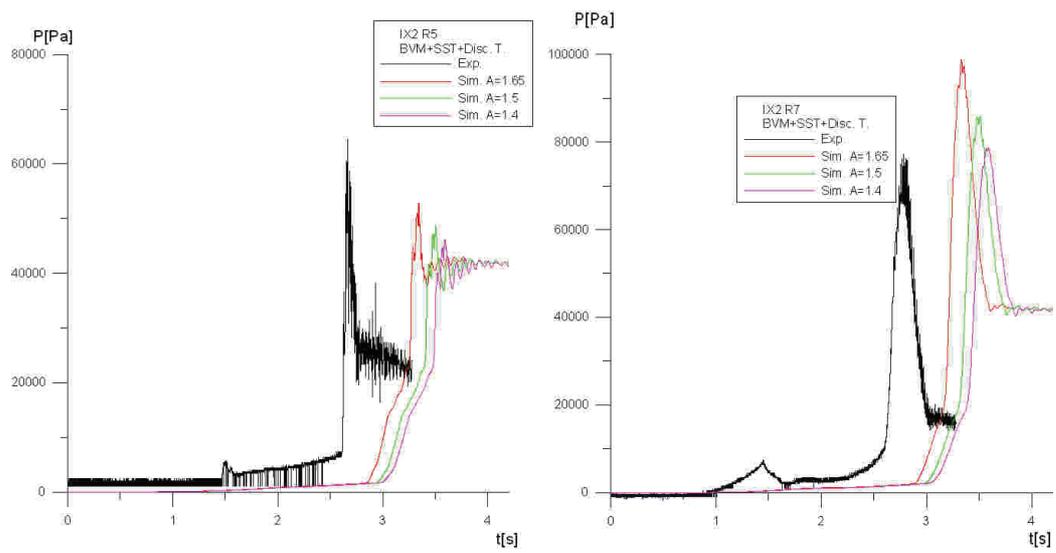


Abb. 7.6-6 Vergleich des Druckverlaufs in Raum R5 (links) und R7 (rechts) im Experiment und in der Simulation mit dem Burning-Velocity-Modell unter Verwendung verschiedener Vorfaktoren

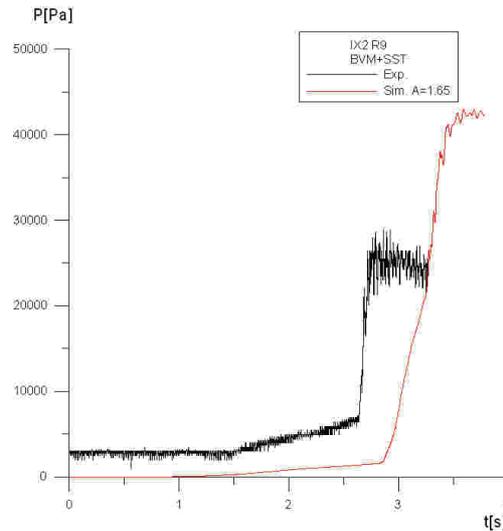


Abb. 7.6-7 Vergleich des Druckverlaufes im Raum R9 im Experiment und in der Simulation mit dem Burning Velocity-Modell unter Verwendung verschiedener Vorfaktoren

#### 7.6.4.2 Modifizierte Korrelation für die laminare Flammengeschwindigkeit

In den bisher vorgestellten Simulationen wurde die Abhängigkeit der laminaren Flammengeschwindigkeit vom Molenbruch der Wasserstoffanfängskonzentration  $x$  durch folgendes Polynom beschrieben [ARD 98], [POR 02]:

$$P(x) = 64.494x^5 + 37.898x^4 - 186.87x^3 + 100.28x^2 - 5.7839x - 0.0245$$

Für niedrige Wasserstoffkonzentrationen ist diese Korrelation nicht mehr gültig. Deshalb wurde der Ansatz wie folgt erweitert:

$$v_{lam} = \begin{cases} P(x) & \text{für } x \geq 0,08 \\ -P(x = 0,08) + 1.5x & \text{für } 0,08 < x < 0,04 \\ 0 & \text{für } x \leq 0,04 \end{cases}$$

Diese Korrelation für  $v_{lam}$  gilt für trockene Luft,  $p = 1$  bar, und einer Temperatur des unverbrannten Gases von ca. 20 °C. Durch Korrekturfaktoren kann  $P(x)$  auch auf andere Zustände erweitert werden ([KAN 08], [OEC 00], [POR 02]). Es ist zu beachten, dass für niedrige Wasserstoffkonzentrationen ( $x < 10$  vol.%) die laminare Flammengeschwindigkeit ungenau bekannt ist, da kaum experimentelle Daten vorliegen.

Bei diesem Ansatz wurde davon ausgegangen, dass  $P(x)$  für  $H_2$ -Konzentrationen größer als 8 vol.% eine gute Näherung darstellt. Experimente zeigen, dass für Wasserstoffanfangskonzentrationen kleiner als 4 – 5 vol.% keine Verbrennung mehr stattfindet. Für Konzentrationen im Bereich 4 – 8 vol.% ist normalerweise eine Verbrennung noch eingeschränkt möglich. So findet bei zu niedrigen  $H_2$ -Konzentrationen keine Verbrennung mehr in alle Raumrichtungen statt, sondern sie erfolgt noch aufwärts und nicht mehr nach unten, da der Verbrennung abwärts die Auftriebskraft des leichteren, heißen verbrannten Gases entgegensteht.

Da bei den HYCOM-Versuchen 1, 2, 13 und 14 eine homogene  $H_2$ -Anfangskonzentration  $x > 0,08$  vorliegt, hat diese Modifikation keine Auswirkung auf die durchgeführten Validierungsrechnungen. Im nachfolgenden Abschnitt ist erläutert, warum bislang mit diesem modifizierten Ansatz noch keine Analyse ohne weitere Anpassungen durchgeführt werden konnte.

#### **7.6.4.3 Zündung aufgrund von numerischen Fehlern beim Burning-Velocity-Modell**

Die Reaktion von  $H_2$  mit  $O_2$  kann stattfinden, wenn die nötige Aktivierungsenergie für die Reaktion vorhanden ist. Bei der Flammenausbreitung erfolgt dies durch Kontakt/Vermischung mit heißem (teilweise) verbranntem Gas. Deshalb kommt es zur Ausbildung von Flammenfronten, die sich durch das  $H_2$ /Luft-Gemisch mit der turbulenten Flammengeschwindigkeit ausbreiten.

Aufgrund von numerischen Fehlern bei der Berechnung der Reaktionsfortschrittsvariablen kann es bei CFX-Simulationen mit dem BVM-Modell auch ohne Kontakt mit heißem verbranntem Gas zum Start einer Reaktion und danach zur Ausbildung einer neuen "unphysikalischen" Flammenfront kommen (Abb. 7.6-8). Dies führt in der Regel zu einer falschen Berechnung des Verbrennungsvorgangs. So ist in Abb. 7.6-8 eine zweite unphysikalische Flammenfront rechts unten in Raum R5 zu sehen, die keinen Kontakt zur Flammenfront in R7 links besitzt.

Dieses numerische Problem bei CFX-11 ist bekannt, allerdings konnten die von ANSYS vorgeschlagenen "work arounds" (Lösung einer Transportgleichung für die "reaction progress variable" statt für die "weighted reaction progress variable"; oder Ini-

tialisierung mit einer geringen Anfangsturbulenz) keine zuverlässige Abhilfe schaffen. Deshalb war es nicht möglich, den Versuch Ix2 mit der in Abschnitt 7.6.4.2 beschriebenen modifizierten Flammgeschwindigkeit oder mit einem verfeinerten CFD-Gitter zu simulieren.

Um trotzdem das BVM-Modell verwenden zu können, wurde  $v_{\text{lam}} = 0$  gesetzt, falls die Temperatur einen Schwellenwert  $T_s$  nicht überschreitet. Um die Simulationsergebnisse möglichst wenig zu verfälschen, sollte dieser Schwellenwert  $T_s$  möglichst klein gewählt werden. Mit  $T_s = 325$  K konnte sichergestellt werden, dass keine Zündung aufgrund von numerischen Fehlern auftritt. Durch diesen Schwellenwert kann die Berechnung des Flammenfortschritts modifiziert werden, da die Temperaturentwicklung den Flammenfortschritt limitiert. Im Experiment ist dies zwar auch der Fall, in der Simulation wurde die Flammenfront aber nicht detailliert aufgelöst. Um den Einfluss des Schwellenwertes möglichst gering zu halten, sollte  $T_s$  möglichst klein gewählt werden, bzw. sofern es numerisch möglich ist, sollte ganz auf diesen Schwellenwert verzichtet werden. Aufgrund der begrenzten verfügbaren Zeit im Projekt wurde bisher darauf verzichtet, einen oder mehrere HYCOM-Versuche mit einer solchen Schwellentemperatur zu simulieren, um den Einfluss dieses "work arounds" auf die Simulationsergebnisse genauer zu untersuchen.

Es wurde ebenfalls versucht, das Problem der Zündung aufgrund von numerischen Fehlern dadurch zu lösen, dass  $v_{\text{lam}}=0$  gesetzt wurde, falls die Reaktionsfortschrittsvariable einen kleinen Wert nicht überschreitet. Erste Rechnungen waren aber nicht erfolgreich, deshalb wurde dieser Lösungsansatz nicht weiter verfolgt.

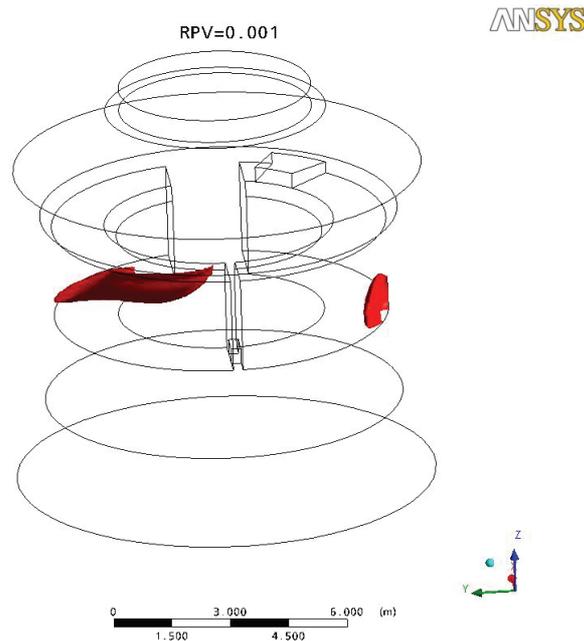


Abb. 7.6-8 Unphysikalische Flammenfronten (rechts, rot) nach Auftreten einer Zündung aufgrund von numerischen Fehlern

#### 7.6.4.4 Ergebnisse mit dem modifizierten BVM-Modell

Mit der modifizierten Flammengeschwindigkeit und dem Temperaturschwellenwert wurde der Versuch lx2 erneut nachgerechnet.

Mit  $T_s = 325$  K konnte eine unphysikalische Zündung verhindert werden. Der Maximaldruck in R5 wurde um ca. 10.000 Pa und der in R7 um ca. 15.000 Pa unterschätzt. Dies entspricht einem relativen Fehler von ca. 20 % (Abb. 7.6-9).

In der Simulation treten in R5 starke Druckschwankungen über einen Zeitraum von ca. 0,5 s auf, während im Experiment ein Druckpeak beobachtet wurde. Im experimentellen Druckpeak treten zwar auch Schwankungen auf, diese sind aber deutlich schwächer und haben eine deutlich höhere Frequenz als in der Simulation. Die Form des Druckpeaks in R7 entspricht besser der im Experiment. Der Druckabfall erfolgt etwas langsamer, was mit dem insgesamt höheren Enddruck erklärt werden kann.

Im Experiment lagen im Raum R9 noch ca. 42 % der Ausgangsmasse an  $H_2$  unverbrannt vor. In der Simulation bleibt dagegen ca. 18 % der  $H_2$ -Anfangsmasse er-

halten. Abweichungen im Verbrennungsprozess, wie sie der Vergleich des Druckverlaufs in R5 und R7 nahelegen, führen dazu, dass in der Simulation eine andere H<sub>2</sub>-Menge aus R5 in den Raum R9 transportiert wurde. Ebenso weicht die räumliche Verteilung des H<sub>2</sub> in R9 vom Experiment ab, da auch der zeitliche Verlauf des Massenstroms und der Impuls des in R9 transportierten Gases in der Simulation mit Abweichungen berechnet werden. Da die Ausgangskonzentration in R9 nicht der im Experiment entsprechen wird, ist auch nicht damit zu rechnen, dass die Menge des unverbrannten Wasserstoffs exakt wiedergegeben werden kann. Beim Vergleich muss auch berücksichtigt werden, dass die Geometrie des Raums R9 nicht exakt wiedergegeben wurde. Zudem stellt die Grenze von 4 vol.% H<sub>2</sub>, ab der eine Verbrennung ablaufen kann, eine Näherung dar. Je nach Literatur schwankt diese Grenze zwischen 4 vol.% und 5 vol.%. Es ist daher nicht zu erwarten, dass in der Simulation die Masse an unverbranntem H<sub>2</sub> exakt berechnet werden kann.

Insgesamt kann die Modifikation der laminaren Flammgeschwindigkeit für  $x < 8$  vol.% positiv bewertet werden, da damit die Simulation einer unvollständigen Verbrennung möglich wird. Zur Validierung und eventuell nötigen Feinanpassung der Parameter dieser Modifikation wäre die Simulation von Experimenten nötig, bei denen eine wohlbekannte niedrige H<sub>2</sub>-Verteilung vorliegt.

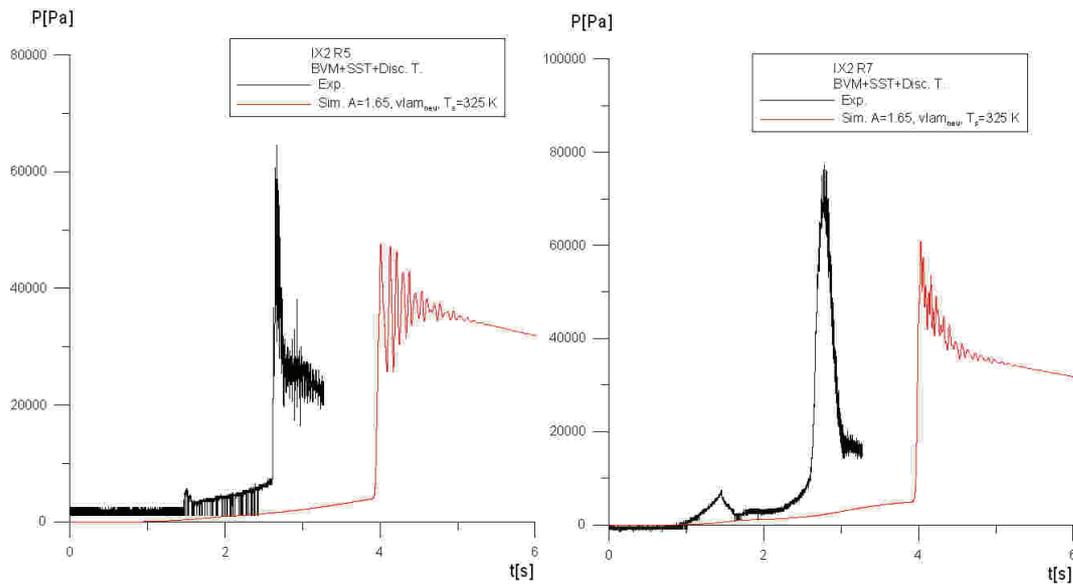


Abb. 7.6-9 Druckverlauf im Raum R5 und R7 bei Simulation mit dem modifizierten Ausdruck für  $v_{lam}$

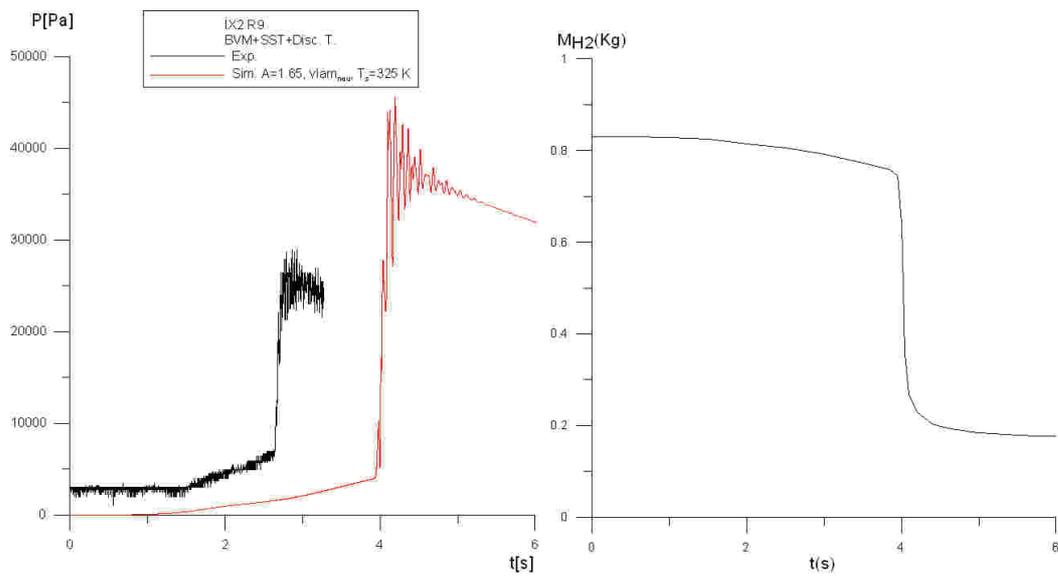


Abb. 7.6-10 Links: Druckverlauf in R9 bei Simulation mit dem modifizierten Ausdruck für  $v_{lam}$ ; rechts: H<sub>2</sub>-Masse in Ix2 in der Simulation mit dem BVM

### 7.6.5 Zusammenfassung der Ix2- Versuchsnachrechnungen

Der Versuch Ix2 zur Wasserstoffverbrennung am Battelle-Modell-Containment wurde mit CFX-11 simuliert. Dabei kamen das erweiterte Eddy-Dissipation-Modell und das Burning-Velocity-Modell zum Einsatz.

Verwendet man beim erweiterten Eddy-Dissipation-Modell die an den HYCOM01-Versuch angepassten Parameter, so wurde die Verbrennungsgeschwindigkeit deutlich überschätzt und der Maximaldruck in R7 und R5 ist um ein Vielfaches zu hoch. Bei Verringerung von  $A_E = 18$  auf  $A_E = 10 - 12$  kann die Höhe der Druckpeaks besser wiedergegeben werden. Das Verhältnis  $P_{\max}(R5) / P_{\max}(R7)$  wurde nicht richtig vorhergesagt (0,55 zu 0,83) und es findet eine vollständige  $H_2$ -Verbrennung statt.

Bei der Simulation mit dem BVM-Modell brauchte keine Parameteranpassung durchgeführt zu werden. Die Druckpeaks wurden mit einem absoluten Fehler von 0,2 bar bzw. 0,15 bar vorhergesagt. Dies entspricht einer relativen Abweichung von rund 20 %. Die unvollständige Verbrennung wurde in R9 nicht korrekt simuliert. Deshalb wurde die Korrelation für die laminare Flammgeschwindigkeit modifiziert. Für Wasserstoffanfangskonzentrationen, die kleiner als 4 vol.% sind, wurde die laminare Flammgeschwindigkeit Null gesetzt. Zwischen 4 vol.% und 8 vol.% wurde eine lineare Interpolation durchgeführt.

Bei Verwendung dieses verbesserten Ausdrucks für die laminare Flammgeschwindigkeit kam es zu numerischen Schwierigkeiten. Aufgrund von numerischen Fehlern kam es zur Zündung des Gases auch in Bereichen ohne Kontakt mit dem heißen (teilweise) verbrannten Gas. Dieses Problem ist ANSYS bekannt und kann auch in anderen Fällen auftreten. Als "work around" wurde die Flammgeschwindigkeit auf Null gesetzt, falls die Temperatur kleiner als 325 K ist. Damit konnte dieses numerische Problem umgangen werden. Es ist nicht auszuschließen, dass hierdurch die Simulation des Verbrennungsvorgangs verfälscht wird. Mit diesen Modifikationen wurde der Versuch Ix2 erneut nachgerechnet. Die berechneten Druckmaxima in R5 und R7 sind etwas geringer als im Experiment (10.000 bzw. 15.000 Pa). In R5 werden aber starke Druckfluktuationen über einen Zeitraum von 0,5 s berechnet, die im Experiment nicht beobachtet wurden. In R9 bleibt ca. 18 % der Ausgangsmasse an  $H_2$  unverbrannt zurück, d. h. mit der neuen Korrelation für die laminare Flammgeschwindigkeit kann eine unvollständige Verbrennung berechnet werden.

## 7.7 Beteiligung an der 2. Phase des ISP-49 (ENACCEF-Versuche)

### 7.7.1 Versuchsanordnung beim ENACCEF-Versuch mit H<sub>2</sub>-Gradienten (RUN 736 und RUN 733)

In der 2. Phase des ISP-49 wurden neben Versuchen an der THAI Anlage auch am ENACCEF-Versuchsstand durchgeführte Experimente zur H<sub>2</sub>-Verbrennung eines Luft/H<sub>2</sub>-Gemisches untersucht. Dies waren ein Versuch mit einem negativen H<sub>2</sub>-Gradienten (RUN736) und ein Versuch mit positiven Gradienten (RUN733). Sie sollten im Rahmen des ISP-49 blind vorausgerechnet werden.

Der ENACCEF Versuchsstand besteht aus einem 3,3 m langen Beschleunigungsrohr mit einem Innendurchmesser von 0,154 m und einem 1,7 m langen Dome mit einem Innendurchmesser von 0,74 m (siehe Abb. 7.7-1). Bei allen hier simulierten Versuchen fand die Zündung im Beschleunigungsrohr in 0,138 m Höhe statt.

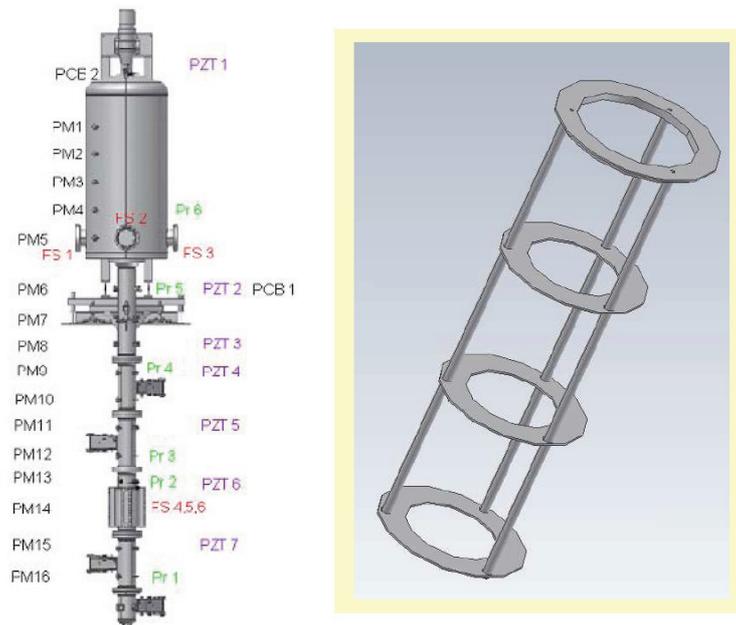


Abb. 7.7-1 Links: Skizze des ENACCEF-Versuchsstands mit Position der Messstellen. Rechts: Geometrie der Hindernisse, die ins Beschleunigungsrohr eingebracht wurden

In das Beschleunigungsrohr wurden neun Hindernisse eingebracht. Das erste Hindernis befindet sich 0,638 m oberhalb des Zündortes, der Abstand zwischen den Hinder-

nissen beträgt 0,154 m. Bei den Versuchen RUN736 und RUN733 beträgt das Blockadeverhältnis (BR) 0,63. BR ist wie folgt definiert:

$$BR = 1 - \left(\frac{d}{D}\right)^2$$

Dabei ist d der Innendurchmesser des Hindernisses und D der Innendurchmesser des Beschleunigungsrohres. Eine detaillierte Versuchsbeschreibung ist in /CHA 09/ zu finden.

### 7.7.2 Anfangskonzentration bei RUN736

Beim Versuch RUN736 beträgt entsprechend der Spezifikation die H<sub>2</sub>-Konzentration am Versuchsanfang 11,4 vol.% (unten) und fällt bis zum Ende des Beschleunigungsrohres/Domeintritts auf 0,058 vol.% ab und bleibt im Dome konstant auf diesem Wert. Unglücklicherweise herrscht für den Bereich der Zündquelle Unklarheit, inwieweit der spezifizierte Wert eingehalten wurde. Beim Versuch RUN736 gibt es Hinweise, dass aufgrund der Versuchsdurchführung im Bereich der Zündquelle eine höhere Wasserstoffkonzentration vorgelegen hat. Eine abschließende Klärung dieser Frage war aber nicht mehr möglich.

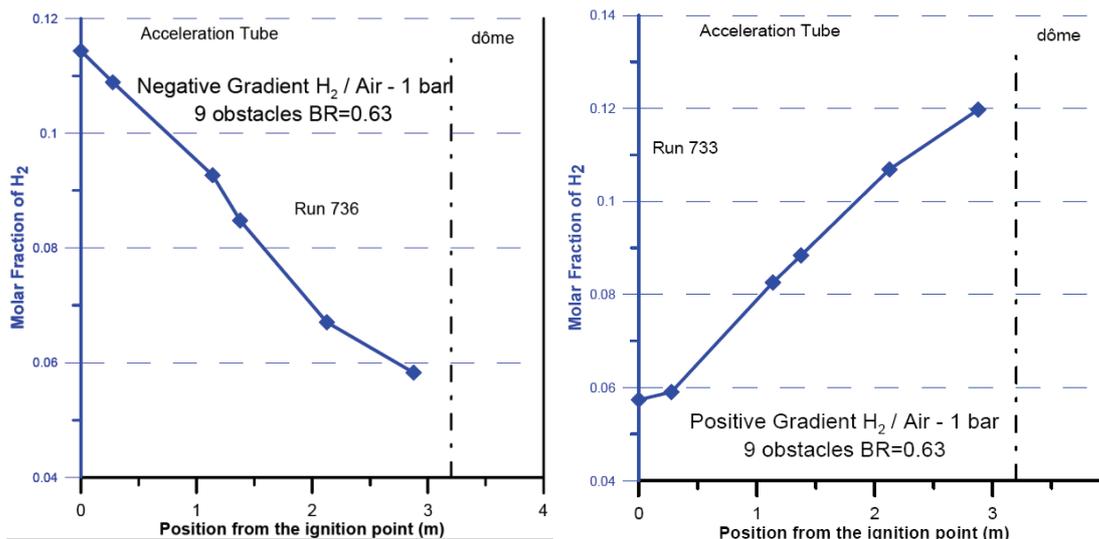


Abb. 7.7-2 Wasserstoffanfangskonzentration bei Beginn der Verbrennung; Links: RUN 736; Rechts RUN733

### 7.7.3 Modellierung mit CFX

Die im Folgenden beschriebene Modellierung wurde für alle an der ENACCEF-Versuchsanlage durchgeführten Experimente verwendet. Die Turbulenz wird mit dem SST-Modell modelliert. Die Verbrennung wird mit dem Burning-Velocity Modell (BVM) simuliert. Dabei wird zur Berechnung der turbulenten Flammengeschwindigkeit das Zimont-Modell mit dem Modellparameter  $A = 0,6$  verwendet. Dieser Parameter hatte sich in der 1. Phase des ISP-49 als optimal für die Simulation der ENACCEF-Versuchsanlage herausgestellt /KLE 09/. Warum bei der ENACCEF-Versuchsanlage dieser Wert bessere Ergebnisse liefert als der an HYCOM-01 angepasste Wert von  $A = 1,65$  konnte bisher nicht abschließend geklärt werden.

Mögliche Erklärungen wären u. a.:

- Die Geometrie und die verwendete Zellgröße sind bei den HYCOM-Experimenten deutlich größer (Geometrie ca. Faktor 10; Zellgröße: Faktor 10 - 100) und dadurch werden bei der Simulation des HYCOM-Experiments kleinskalige Vorgänge vernachlässigt bzw. (zu stark) gemittelt.
- Die Verbrennung läuft beim ENACCEF-Versuch in einem anderen Verbrennungs-Regime ab.

Die Strahlung wird mit dem Discrete-Transfer-Modell modelliert. Die konvektiven Wärmeverluste in die Wände werden berücksichtigt. Dabei wird für die Behälterwand eine konstante Temperatur vorgegeben (z. B. 25 °C bei RUN736). Um die teilweise sehr schnellen physikalischen Prozesse mit CFX zu simulieren wurde ein adaptiver Zeitschritt mit Zeitschritten von typischerweise  $1,0e-3$  s -  $1,0e-6$  s verwendet.

### 7.7.4 Gitterstudie für RUN736

Bei allen Simulationen wird jeweils ein Viertel der Geometrie des ENACCEF-Versuchs simuliert. Es zeigt sich, dass insbesondere im Bereich der Hindernisse eine sehr feine Diskretisierung nötig ist, um die durch die Hindernisse generierte Turbulenz ausreichend genau berechnen zu können (Abb. 7.7-3). Deshalb wurde ein strukturiertes CFD-Gitter mit adaptiver Gitterweite verwendet. Bei der feinsten Diskretisierung wird die Zellgröße orthogonal zu den Hindernissen auf bis zu 0,28 mm verringert.

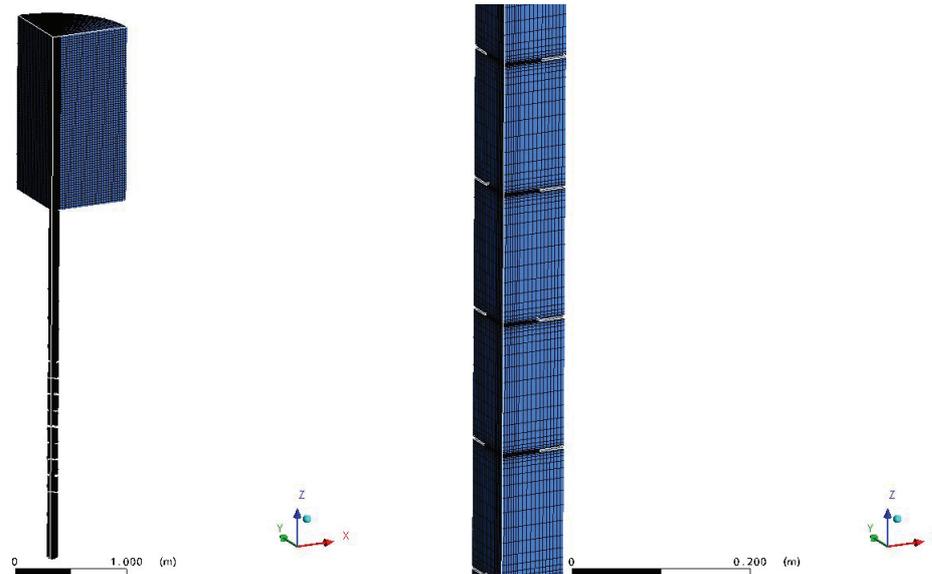


Abb. 7.7-3 Links: Verwendetes CFD-Gitter; Rechts: CFD-Gitter im Bereich der Hindernisse

Es wurden drei Simulationen mit einer unterschiedlichen Anzahl von Zellen durchgeführt (104.000, 275.000, 524.000). Sowohl für den Druckverlauf als auch bei den berechneten Flammengeschwindigkeiten ist ein starker Einfluss der Diskretisierung zu erkennen (Abb. 7.7-4). Mit zunehmender Gitterverfeinerung nimmt die berechnete Beschleunigung an den Hindernissen zu. Entsprechend erhöhen sich die Flammengeschwindigkeit und auch der kurzzeitige Druckpeak bei der Messstelle Kistler 1 (~PCB1) (siehe Abb. 7.7-1). Aufgrund der hohen Rechenzeit (ca. 2 Wochen auf 4 CPUs für 524.000 Zellen) war eine weitere Gitterverfeinerung nicht möglich.

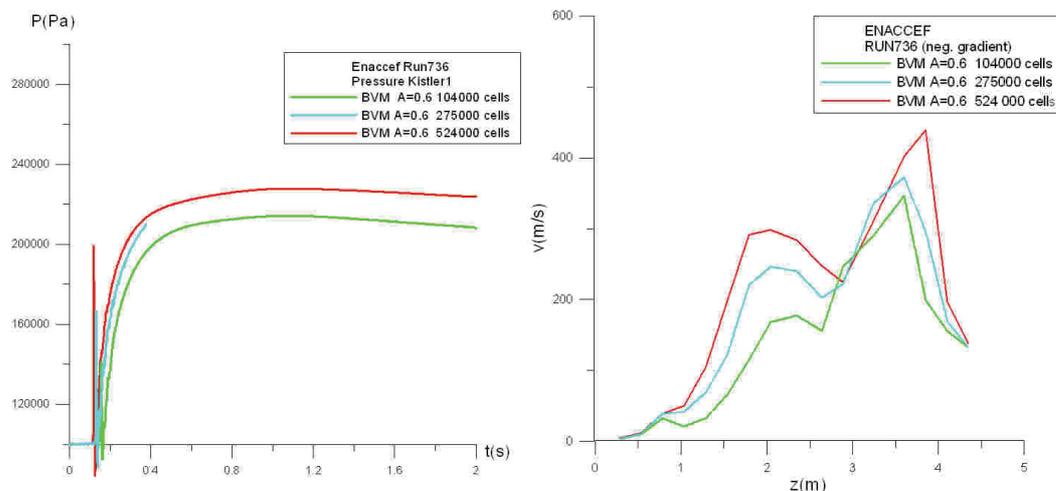


Abb. 7.7-4 Untersuchung zur Gitterabhängig; Links: Druckverlauf; Rechts: Flammenausbreitungsgeschwindigkeit

### 7.7.5 Vergleich mit experimentellen Daten RUN736

- **Turbulente Flammenverlöschung**

Bei dem Versuch RUN736 hat im Experiment eine Flammenverlöschung (Quenching) stattgefunden. Als wahrscheinlichster Ort für die Flammenverlöschung wurde der Bereich nach dem letztem Hindernis identifiziert. Aufgrund der hohen Turbulenz in diesem Bereich wurde der konvektiv-diffusive Wärmeverlust so stark, dass es zur Verlöschung der Flamme kam.

Ziel der ENACCEF-Versuchsrechnungen beim ISP-49 war es, die Simulation von turbulent beschleunigten Flammenausbreitungen zu validieren. Der Spezialeffekt des Flammen-Quenchings sollte dabei nicht untersucht werden. Durch unglückliche Wahl der Versuchsbedingungen kam es aber beim 2. Teil des ISP-49 (ENACCEF) zu diesem Effekt. Dadurch ist der Versuch RUN736 im eingeschränkten Maße zur Validierung der turbulent-beschleunigten Verbrennungssimulation geeignet.

Die Modellierung des turbulenten Flammen-Quenchings ist ein sehr anspruchsvolles Themengebiet, das noch nicht abschließend erforscht ist. Es existieren zwar Kriterien, die Hinweise geben, ob Quenching möglich ist, aber eine gesicherte Aussage ob Quenching auftritt oder nicht, ist für beliebige Geometrien und Konfigurationen noch sehr schwierig. Entsprechend existiert ein Model in CFX-12 mit dem Quenching modelliert werden kann. Für den Modellparameter „kritischer Geschwindigkeitsgradient“ wird als typischer Bereich  $g_{cr} \sim 6000 - 10000$  angegeben. Laut Handbuch /CFX 07/ ist er an die jeweilige Konfiguration anzupassen. Eine solche Vorgehensweise ist für Containment-Simulationen nicht möglich, da sich die Geometrie, die  $H_2$ -Konzentration etc. stark unterscheiden und auch keine experimentellen Daten zur Parameteranpassung vorliegen. Da im Allgemeinen die Vernachlässigung von Quenching-Effekten konservativer ist, wird für Sicherheitsanalysen angenommen, dass keine Flammenverlöschung durch turbulentes Flammen-Quenching auftritt.

- **Druck**

Sowohl im Experiment als auch in der Simulation wird ein kurzzeitiger Druckpeak an der Messstellen Kistler 1 beobachtet (Abb. 7.7-5). Er kommt zustande, wenn bei einer sehr schnellen Verbrennung die Flammenfront die Messstelle erreicht. In der Simulation ist dieser Druckpeak höher. Da diese Messstelle in den Bereich fällt, wo vermutlich

die Verlöschung auftrat, ist es unklar, inwieweit das Quenching einen Einfluss auf die absolute Höhe des Druckpeaks hatte.

Beim Vergleich des experimentellen Druckverlaufs mit dem berechneten fällt auf, dass in der Simulation ein Maximaldruck von ca. 235.000 Pa erreicht wird, während im Experiment nach dem kurzzeitigen Druckpeak keine signifikante Druckerhöhung erfolgt. Der Grund für dieses unterschiedliche Verhalten ist, dass im Experiment keine Verbrennung im Dome stattfand. Das Volumen des Beschleunigungsrohres beträgt ca. 8 % des Domes und in diesem Bereich sind aufgrund der großen Oberfläche die Wärmeverluste besonders stark. Außerdem wird ein Teil des Gases, das sich zu Beginn der Verbrennung im Beschleunigungsrohr befindet, während der Verbrennung durch den Druckanstieg in den Dome transportiert. Deshalb wird der Maximaldruck im Wesentlichen durch die Verbrennung im Dome bestimmt. Da durch das turbulente Quenching keine Verbrennung im Domebereich beim Experiment auftrat, ist im Gegensatz zum Versuch RUN765 kein signifikanter längerfristiger Druckanstieg zu beobachten (Abb. 7.7-7)

- **Flammengeschwindigkeit**

Der berechnete Verlauf der Flammengeschwindigkeit im Beschleunigungsrohr stimmt zwar mit dem gemessenen Verlauf qualitativ überein, die berechneten Werte sind aber deutlich kleiner (bis zu 200 - 300 m/s) als die gemessenen (Abb. 7.7-5).

Beim Vergleich der Ergebnisse mit denen der offenen Phase des ISP-49 fällt auf, dass die Messergebnisse der beiden Versuche nicht konsistent sind. Beim Versuch RUN765 war laut Spezifikation an jedem Ort im Beschleunigungsrohr die  $H_2$ -Konzentration größer als beim Versuch RUN736 (Abb. 7.7-6 links). Entsprechend ist die zugehörige laminare Flammengeschwindigkeit höher und auch der Verbrennungsvorgang sollte bei RUN765 schneller sein. Im Experiment wurde dagegen teilweise eine höhere Flammengeschwindigkeit für den Versuch mit der laut Spezifikation geringeren Wasserstoffkonzentration gemessen. Bei Einhaltung der Spezifikation und bei sonst gleicher Versuchsdurchführung lässt sich dieses Verhalten schwer erklären.

Vergleicht man dagegen die Simulationsergebnisse der CFX-Simulationen von RUN765 und RUN736 so wird entsprechend der niedrigeren  $H_2$ -Konzentration auch eine geringere Flammengeschwindigkeit für RUN736 berechnet.

In der anschließenden Diskussion der Messergebnisse hat sich ergeben, dass aufgrund der Versuchsdurchführung nicht auszuschließen ist, dass im Bereich der Zündung eine höhere  $H_2$ -Konzentration vorlag, als dies laut Spezifikation vorgesehen war. Die  $H_2$ -Konzentration in der Zündregion ist aber für den Verbrennungsvorgang in einem großen Teil des Beschleunigungsrohres wichtig. In Abb. 7.7-8 ist der Mischungsbruch zu verschiedenen Zeitpunkten beim Verbrennungsprozess zu sehen. Der Mischungsbruch errechnet sich aus einer linearen Interpolation zwischen  $H_2$ -Massenbruch und Luft und ist damit ein Maß für die  $H_2$ -Konzentration des unverbrannten Gemischs. Nach Zündung und Beginn des Verbrennungsprozesses dehnt sich das heiße verbrannte Gas aus. Dadurch wird im Fall eines negativen Konzentrationsgradienten unverbranntes Gas mit einer höheren  $H_2$ -Konzentration vor der Flammenfront hergeschoben. Dies führt dazu, dass viel länger als es die Anfangswasserstoffkonzentration nahelegt eine Verbrennung in einem Bereich mit hoher Wasserstoffkonzentration stattfindet.

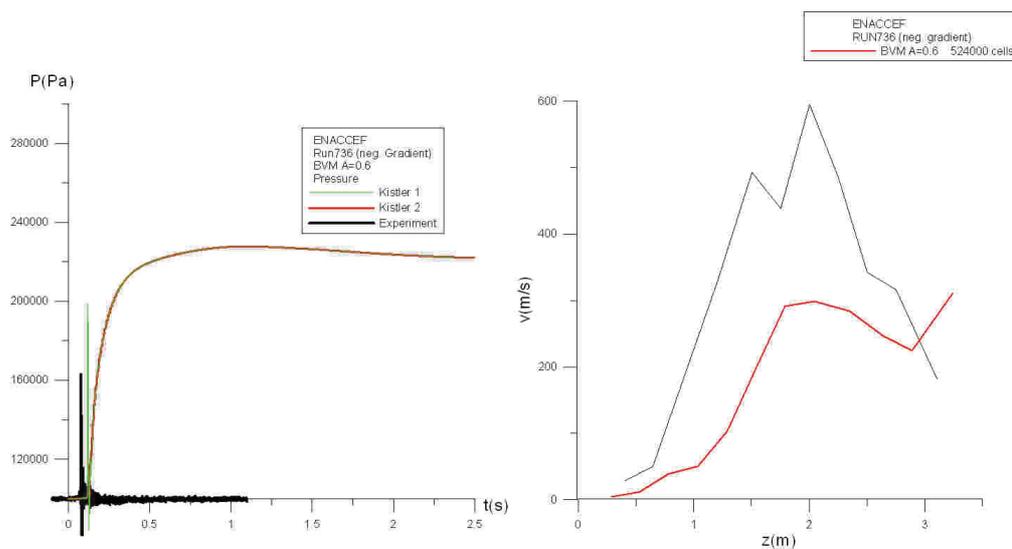


Abb. 7.7-5 Druckverlauf (links) und Flammengeschwindigkeit (rechts) bei RUN736 (neg. Gradient)

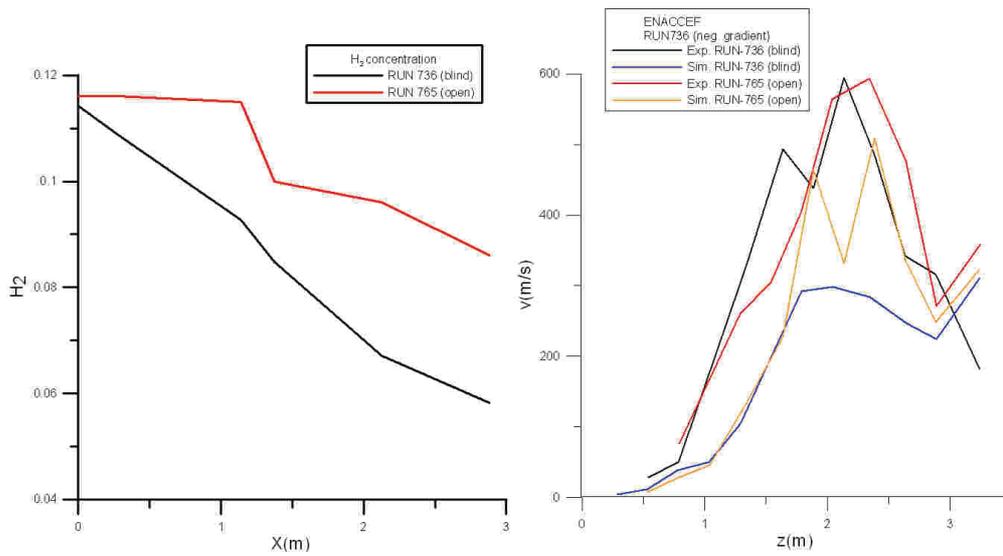


Abb. 7.7-6 Vergleich der beiden ENACCEF-Versuche mit negativen Gradienten RUN765 (offen) und RUN736 (blind). Links: Anfangskonzentration; Rechts: Flammgeschwindigkeit

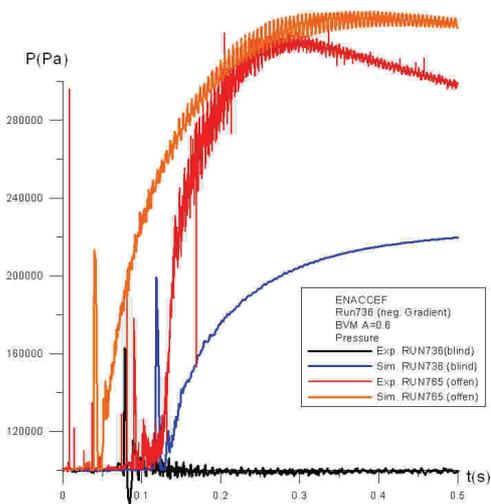


Abb. 7.7-7 Vergleich der Drücke bei den beiden ENACCEF-Versuche mit negativen Gradienten RUN765 (offen) und RUN736 (blind)

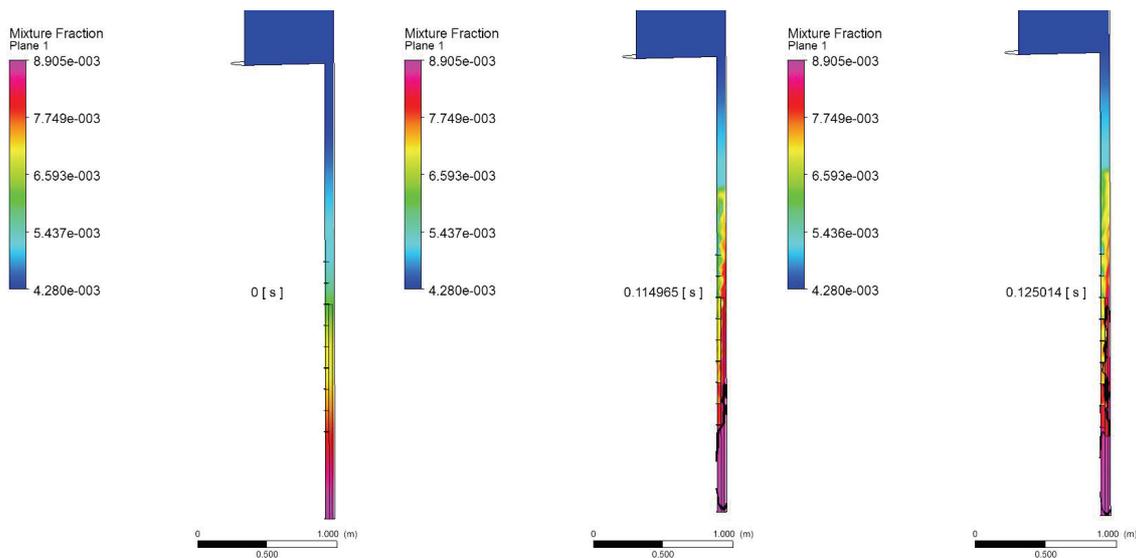


Abb. 7.7-8 Mischungsbruch zu verschiedenen Zeitpunkten. In schwarz ist die Position der Flammenfront eingezeichnet

### 7.7.6 Vergleich mit experimentellen Daten RUN733

Neben dem Versuch RUN736 mit einem negativen Konzentrationsgradienten wurde in der 2. Phase des ISP-49 auch der Versuch RUN733 mit einem positiven Konzentrationsgradienten (Abb. 7.7-9) blind vorausgerechnet. Bei der Versuchsnachrechnung kam das in Abschnitt 7.7.4 beschriebene Gitter mit 105.000 Zellen zum Einsatz.

Bei den experimentellen Ergebnissen, ergibt sich kein eindeutiges Bild von den beim Versuch aufgetretenen Phänomenen. Wie schon beim Versuch RUN736 kommt es bei der Messung zu einem Druckpeak und danach zu einem raschen Druckabfall. Falls im Domebereich eine Verbrennung stattgefunden hätte, wäre mit einem Druck von 4 - 5 bar zu rechnen gewesen und einem Druckverlauf, der dem von RUN765 in der 1. Phase des ISP-49 entspricht. Im Gegensatz zu RUN736 wurden Signale von Lichtdioden im Dome gemessen, was eigentlich für eine Verbrennung sprechen würde.

Es gibt verschiedene Interpretationsmöglichkeiten für diese widersprüchlichen Messungen; u. a. ist denkbar:

- Die Druckmessung ist fehlgeschlagen und es wurde nicht der korrekte Absolutwert des Druckes gemessen.

- Es kam zu einer Flammenverlöschung am Ende des Beschleunigungsrohres/Eintritts zum Dome und die Lichtsignale wurden ausgelöst durch heißes verbranntes Gas, das aufgrund des Auftriebs in den Dome aufsteigt, das aber zu keiner Zündung des 12 vol.% H<sub>2</sub>-Gemisches geführt hat.

Aufgrund dieser Unklarheiten ist es schwierig, aus dem Vergleich Experiment-Simulation Schlussfolgerungen zu ziehen.

In der Simulation wird eine vollständige Verbrennung mit einem Maximaldruck von ca. 4,5 bar vorhergesagt. Da der Verbrennungsvorgang im Beschleunigungsrohr deutlich langsamer abläuft als bei RUN736, wird kein kurzzeitiger Druckpeak an der Messstelle im Beschleunigungsrohr (Kistler 1) vorhergesagt.

Bis zu einer Höhe von 1,25 m Höhe im Beschleunigungsrohr liegen keine gemessenen Flammenankunftszeiten vor. Danach wird im Experiment eine höhere Flammengeschwindigkeit als in der Simulation berechnet. Im Experiment wird im Beschleunigungsrohr eine Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von ca. 130 m/s gemessen, während in der Simulation max. 100 m/s berechnet werden. Im Dome dagegen wird eine deutlich höhere Flammenausbreitungsgeschwindigkeit als im Experiment berechnet. (160 m/s gegenüber 30 m/s - 40 m/s). Dabei bleibt unklar, inwieweit überhaupt im Experiment eine Verbrennung im Dome stattgefunden hat.

Nach den Erfahrungen aus der Gitterstudie für RUN736 (Abschnitt 7.7.4) wäre es eigentlich sinnvoll, auch für diese Simulation eine Gitterstudie durchzuführen. Wegen der großen Unsicherheiten, die hinsichtlich der beim Versuch aufgetretenen Phänomene herrschen, wurde aber darauf verzichtet.

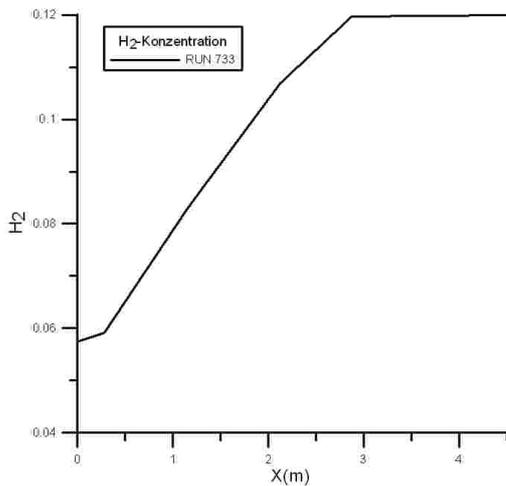


Abb. 7.7-9 H<sub>2</sub>-Konzentration zu Beginn des Versuchs RUN733

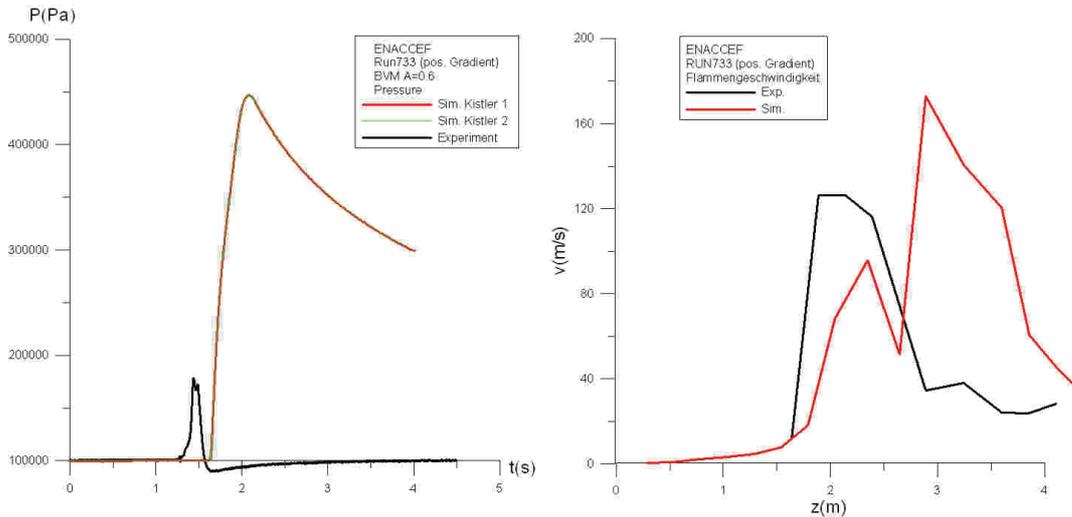


Abb. 7.7-10 Druck (links) und Flammengeschwindigkeit (rechts) beim Versuch RUN733

### 7.7.7 Zusammenfassung

Die GRS hat sich mit CFX an der 2. Phase des ISP-49 (blinde Vorausrechnungen) beteiligt. Dabei wurden die beiden an der ENACCEF-Anlage durchgeführten Verbrennungsversuche RUN736 (negativer Konzentrationsgradient) und RUN733 (positiver Konzentrationsgradient) simuliert. Ziel der Versuchssimulationen war es, die Verbrennungssimulation für schnelle, turbulent beschleunigte Verbrennungsvorgänge zu wählen. Durch eine unglückliche Auswahl der Versuchsbedingungen kam es beim Versuch RUN736 zu einem turbulenten Quenching der Flamme nach dem letzten Hindernis.

Solche Phänomene lassen sich bislang schwer vorhersagen. In CFX steht kein Quenching-Modell zur Verfügung, das eine gesicherte Vorhersage dieses Phänomens erlauben würde. Deshalb wurde dieser Vorgang nicht simuliert.

Die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit im Beschleunigungsrohr wurde von CFX im Vergleich zum Experiment unterschätzt. Es gibt deutliche Hinweise, dass die H<sub>2</sub>-Konzentration im Bereich der Zündung höher als spezifiziert gewesen sein könnte.

Beim Versuch RUN733 (positiver Gradient) sind der gemessene Druckverlauf und die gemessene Flammenausbreitung inkonsistent. Es ist unklar, ob und wenn ja, inwieweit im Dome eine Verbrennung stattgefunden hat. Deshalb können der Druck und die Flammengeschwindigkeit im Dome nicht zur Validierung verwendet werden.

Da die beiden ENACCEF-Versuche RUN733 und RUN736 in eingeschränktem Maße für die geplante Validierung von CFX für turbulent beschleunigte Verbrennungsvorgänge geeignet sind, hat sich die GRS zusätzlich zu den im Arbeitsprogramm von RS1181 vorgesehenen Arbeiten an einem Verbrennungsbenchmark im Rahmen von SARNET-2 beteiligt.

## **7.8 Beteiligung an einem Verbrennungsbenchmark im Rahmen von SARNET-2**

### **7.8.1 Zielsetzung**

Es wurden 3 andere, an der ENACCEF-Versuchsanlage durchgeführte Versuche blind vorausgerechnet. Bei allen drei Versuchen entspricht die Versuchsanordnung bis auf die H<sub>2</sub>-Konzentration und das Blockadeverhältnis der Beschreibung in Abschnitt 7.7.1 /CHA 10/. Alle drei Versuche wurden mit einer homogenen Wasserstoffkonzentration von 13 vol.% durchgeführt. Die Versuche unterscheiden sich durch das Blockadeverhältnis, wobei BR = 0 einem Versuch ohne Hindernisse entspricht (siehe Tab. 7.8-1). Alle drei Versuche wurden wiederholt, darum sind in der Auswertung für die Flammengeschwindigkeit zwei verschiedene experimentelle Daten eingetragen. Für die Versuche RUN148, RUN144 und RUN142 liegen keine Messwerte für den Absolutdruck vor. Bei den hier vorgestellten Simulationen wurden wieder dieselben Modelle und Parameter wie beim ISP-49 verwendet (siehe Abschnitt 7.7.3).

Tab. 7.8-1 Versuchsbedingung der H<sub>2</sub>-Verbrennungsversuche

Versuchsbezeichnung	Blockadeverhältnis	H <sub>2</sub> -Konzentration
RUN148, RUN160	0	13 vol.%
RUN144, RUN158	0,33	13 vol.%
RUN142, RUN153	0,63	13 vol.%

## 7.8.2 Simulation der Versuche mit BR = 0,63

### 7.8.2.1 Gitterstudie

Das für diese Versuchssimulationen verwendete Gitter entspricht dem, das in der 2. Phase des ISP-49 verwendet wurde (Abschnitt 7.7.4). Da die Simulationsergebnisse teilweise sensitiv auf eine zu grobe Diskretisierung sind, wurde erneut eine Gitterstudie durchgeführt. Es werden die Ergebnisse mit einem Gitter das 125.000 Zellen hat und einem das 524.000 Zellen umfasst verglichen.

Insgesamt liefern die beiden Simulationen ähnliche Ergebnisse (Abb. 7.8-1) und es ist noch eine moderate Gitterabhängigkeit festzustellen. Die Simulation mit dem feineren Gitter sagt einen etwas geringeren kurzzeitigen Druckpeak voraus. Der Druckanstieg erfolgt dagegen etwas schneller als bei der groben Diskretisierung. Die Flamme wird bei der feineren Diskretisierung im Beschleunigungsrohr an den Hindernissen etwas stärker beschleunigt (z: 1 m bis 1,8 m). Am Ende des Beschleunigungsrohres (z: 3 m) wird dagegen mit der gröberen Diskretisierung eine deutlich höhere Flammengeschwindigkeit berechnet.

Ein Vergleich mit experimentellen Daten zeigt, dass die Simulation mit einem feineren CFD-Gitter besser mit den experimentellen Daten übereinstimmt (siehe Abschnitt 7.8.2.2). Aufgrund der hohen Rechenzeit (ca. 2 Wochen auf 4 CPUs) wurde von einer weiteren Gitterverfeinerung abgesehen.

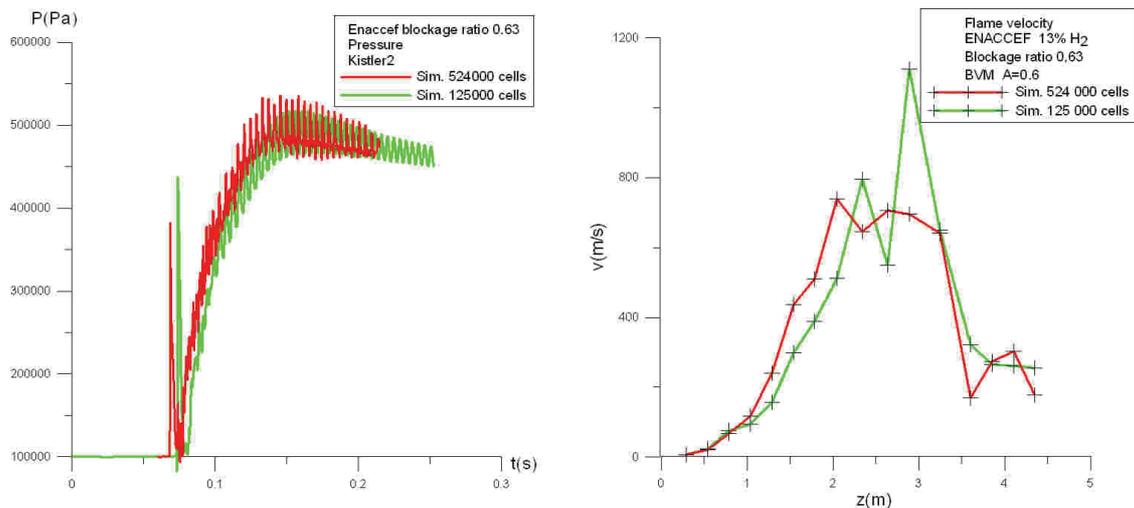


Abb. 7.8-1 Druck und Flammgeschwindigkeit bei unterschiedlicher Diskretisierung

### 7.8.2.2 Vergleich mit experimentellen Daten (BR = 0,63)

- **Flammgeschwindigkeit**

Beim Vergleich der Flammgeschwindigkeit der beiden Versuche RUN142 und RUN153 (Abb. 7.8-2) sind nach Ende der Hindernisse im Beschleunigungsrohr ( $z = 1,86$  m) und im Dome deutliche Unterschiede zwischen den beiden Experimenten zu beobachten. Bei dieser Größe ist also mit erheblichen Messungenauigkeiten zu rechnen. Bei Berücksichtigung dieser experimentellen Unsicherheiten wird die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von CFX in guter Übereinstimmung mit den Versuchen berechnet. Tendenziell wird die Flammgeschwindigkeit nach Ende der Hindernisse im Beschleunigungsrohr ( $z = 1,86$  m bis 3,3 m) etwas überschätzt.

- **Druck**

Da der Zündvorgang sehr vereinfacht modelliert wurde (siehe Spark-Ignition-Modell, Abschnitt 7.2.3) und auch die Anfangsturbulenz unbekannt ist, kann nicht erwartet werden, dass der Zeitpunkt des Beginns des Druckanstiegs mit dem im Experiment übereinstimmt. Der kurzzeitige Druckpeak beim Durchlauf der Flammenfront (Abb. 7.8-3) wird in der Simulation überschätzt, hat aber die richtige Größenordnung. Die Geschwindigkeit des Druckanstiegs, der mit der Verbrennung im Dome einhergeht, wird in der Simulation etwas unterschätzt. Da im Dome die vertikale Flammenausbrei-

Flammgeschwindigkeit gut vorhergesagt wurde, ist dies ein Indiz dafür, dass die Form der Flammenfront in der Simulation Unterschiede zu der im Experiment zeigt. Da im Experiment keine detaillierte Messung der Flammenausbreitung im Dome erfolgte, sind genauere Aussagen zu den Unterschieden nicht möglich.

Der Maximaldruck in der Simulation wird etwas (ca. 0,4 bar) überschätzt. Dies kann unter anderem folgende Gründe haben:

- Fehlerhafte Berechnung der Wärmeverluste
- Annahme einer vollständigen Verbrennung in der Simulation
- Abweichungen in der H<sub>2</sub>-Konzentration zwischen Experiment und Simulation

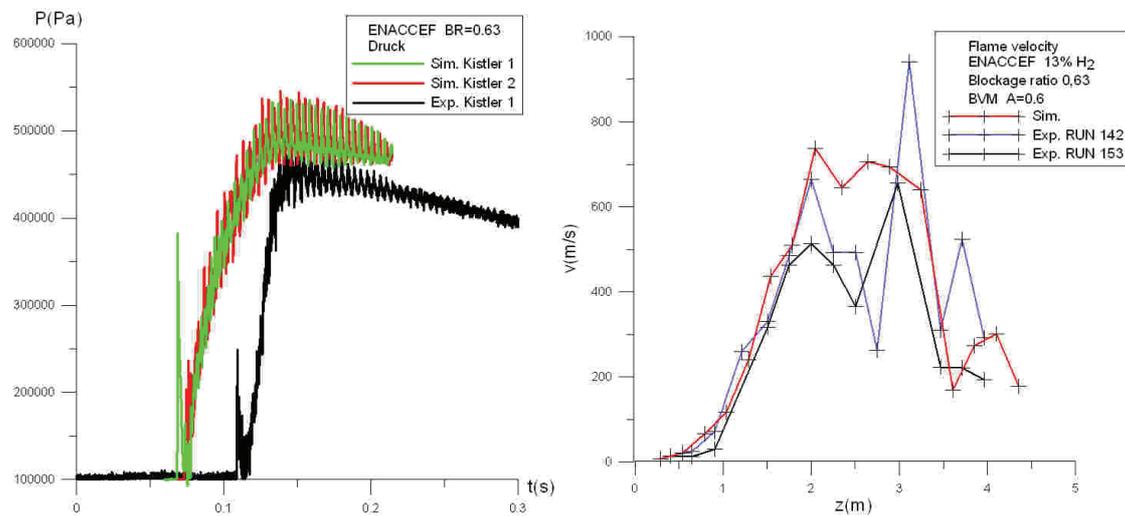


Abb. 7.8-2 Druck und Flammengeschwindigkeit bei BR=0,63

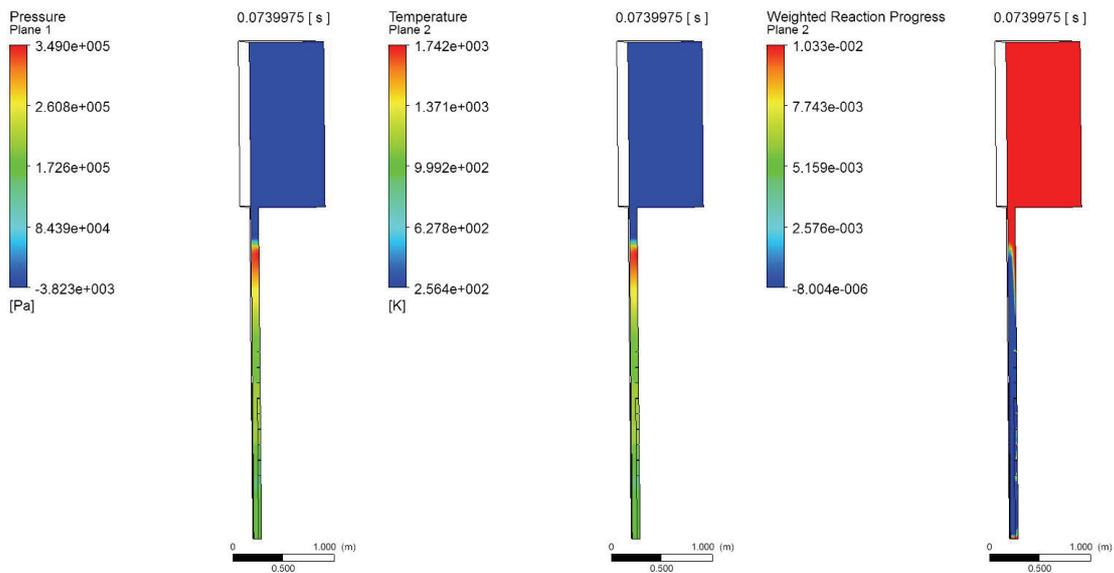


Abb. 7.8-3 Druck (links), Temperatur (Mitte) und Reaktionsfortschritt (rechts) nach 0,074 s

### 7.8.3 Simulation der Versuche mit BR = 0,33

#### 7.8.3.1 Gitterstudie

Die Struktur des verwendeten CFD-Gitters entspricht bis auf die Größe der Hindernisse im Wesentlichen dem, das für die Simulation mit BR = 0,63 verwendet wurde. Es werden die Simulationsergebnisse bei Verwendung eines Gitters bestehend aus 137.000 Zellen mit denen nach einer Verfeinerung (275.000 Zellen) verglichen.

Bei einer feineren Diskretisierung ist die Höhe des kurzzeitigen Druckpeaks höher und der Druckanstieg erfolgt schneller (Abb. 7.8-4, links). Bei einer feineren Diskretisierung wird auch eine stärkere Flammenbeschleunigung im Bereich der Hindernisse berechnet. Ein Vergleich mit den Messdaten zeigt eine bessere Übereinstimmung der Simulationsergebnisse bei Verwendung eines feineren CFD-Gitters (siehe Abschnitt 7.8.3.2). Insbesondere im Bereich mit den Hindernissen ist eine feine Diskretisierung notwendig.

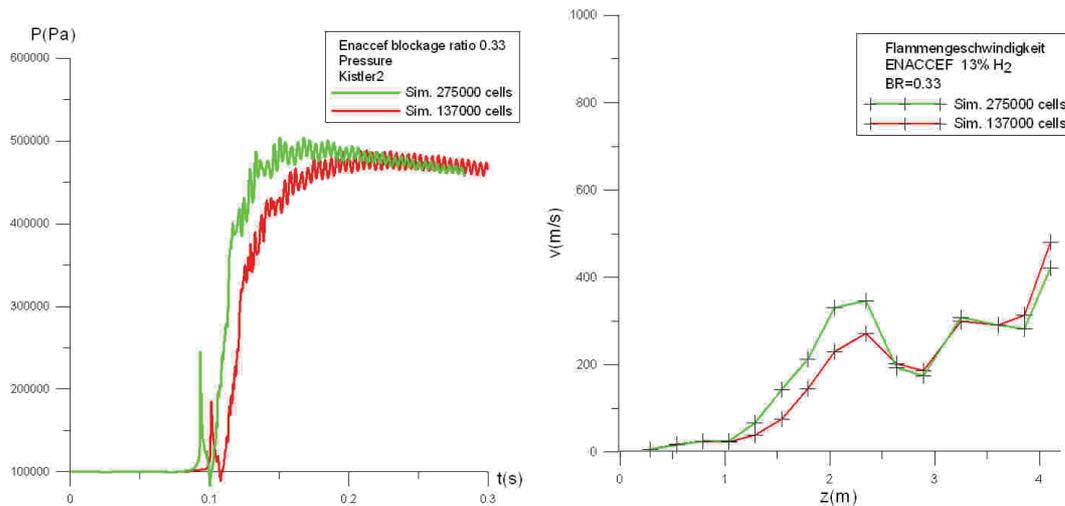


Abb. 7.8-4 Druck und Flammengeschwindigkeit bei unterschiedlicher Diskretisierung

### 7.8.3.2 Vergleich mit experimentellen Daten (BR=0,33)

- **Flammengeschwindigkeit**

Im Rahmen der Messgenauigkeiten wird die Flammengeschwindigkeit in guter Übereinstimmung mit dem Experiment vorhergesagt. Im Beschleunigungsrohr wird die Flammengeschwindigkeit im Bereich der Hindernisse etwas unterschätzt ( $z$ : 1 m - 1,9 m) (siehe Abb. 7.8-5). Die Gitterstudie (Abb. 7.8-4) gibt einen Hinweis darauf, dass durch eine weitere Gitterverfeinerung eine noch bessere Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt werden kann.

- **Druck**

Der kurzzeitige Druckpeak bei der Messstelle Kistler 2 wird von CFX in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Er ist sowohl im Experiment als auch in der Simulation kleiner als bei  $BR = 0,63$ , was in Übereinstimmung mit der langsameren Flammenausbreitungsgeschwindigkeit steht. Der Vergleich des Druckverlaufs liefert sehr ähnliche Ergebnisse wie für das größere Blockadeverhältnis. Der prinzipielle Druckverlauf wird richtig beschrieben, allerdings wird auch hier wieder die Geschwindigkeit des Druckanstiegs etwas unterschätzt und der Maximaldruck ist um ca. 0,3 - 0,4 bar höher.

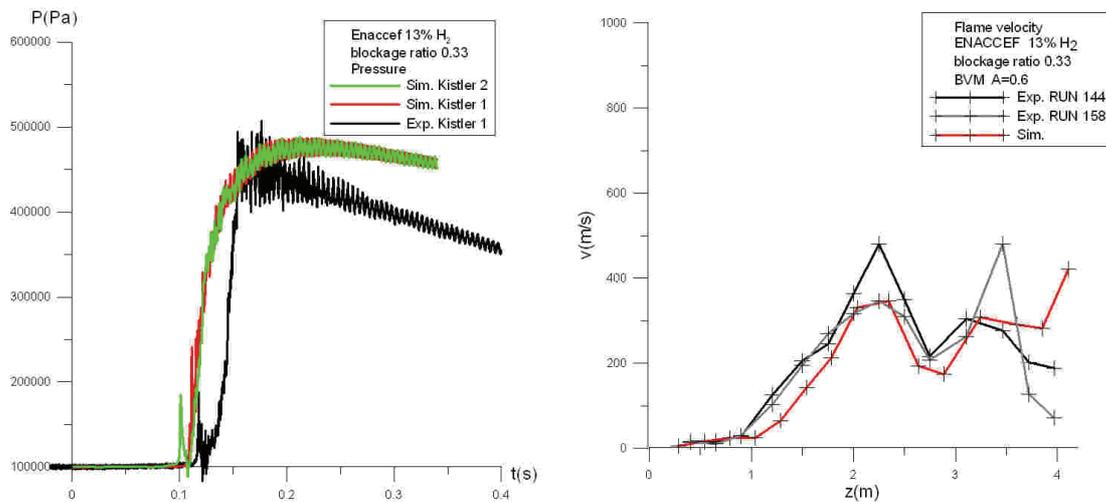


Abb. 7.8-5 Druck und Flammengeschwindigkeit bei BR = 0,33

## 7.8.4 Simulation der Versuche mit BR = 0

### 7.8.4.1 Modellierung der Versuche mit BR = 0

Bei den beiden Versuchen mit BR = 0 RUN148 und RUN160 befinden sich keine Hindernisse im Beschleunigungsrohr. Deshalb wurde bei den blinden Vorausrechnungen davon ausgegangen, dass das Beschleunigungsrohr komplett glatt ist, und dass sich keine turbulenzerzeugende Hindernisse/Einbauten in ihm befinden. Es wurden wieder wie schon für BR = 0,63 und BR = 0,33 dieselben physikalischen Modelle und Parameter verwendet.

### 7.8.4.2 Vergleich mit experimentellen Daten (BR=0)

- **Flammengeschwindigkeit und Druck**

Die von CFX berechnete Flammengeschwindigkeit ist deutlich kleiner als die gemessene (Abb. 7.8-6). Nach ca. 1 m im Beschleunigungsrohr stellt sich eine Flammengeschwindigkeit von 2 m - 4 m ein. Im Experiment dagegen wird eine stark schwankende Geschwindigkeit von 15 m – 50 m gemessen. Entsprechend ist der Druckanstieg in der Simulation deutlich langsamer als im Experiment. Verglichen mit den Versuchen mit BR = 0,63 und BR = 0,33 ist die Verbrennungsgeschwindigkeit deutlich geringer. Des-

halb wird sowohl im Experiment als auch in der Simulation kein kurzzeitiger Druckpeak beim Durchlauf der Flammenfront an der Messstelle Kistler 1 gemessen/berechnet.

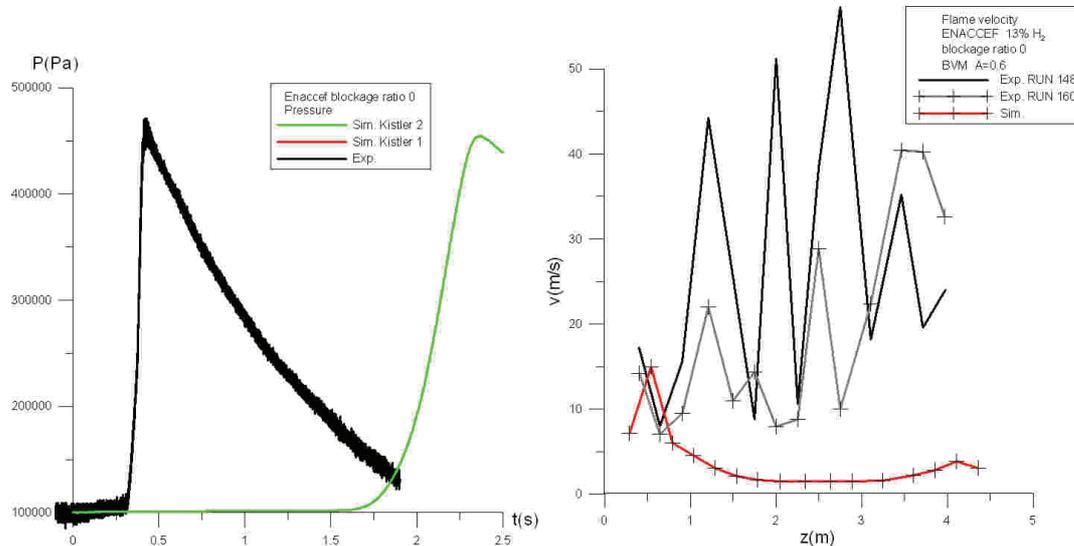


Abb. 7.8-6 Druck und Flammengeschwindigkeit bei BR=0

### 7.8.4.3 Simulation bei Annahme von BR = 0,01

In der Diskussion nach Bekanntgabe der Versuchsergebnisse hat sich ergeben, dass bei diesem Versuch zwar keine Hindernisse ins Beschleunigungsrohr eingebracht wurden, dass für das Beschleunigungsrohr aber trotzdem die Annahme eines komplett glatten Rohres nicht zutreffend ist. Im Rohr gab es kleine Hindernisse (Messinstrumentierung, Flansche etc.) in der Größenordnung von 1 mm. Diese können prinzipiell eine zusätzliche Turbulenz erzeugen und den Verbrennungsvorgang beschleunigen.

Da die genaue Geometrie und die Position dieser Hindernisse nicht bekannt ist, wurde eine Simulation mit BR = 0,01 durchgeführt, was einem Strömungshindernis von ca. 1,5 mm entspricht. Die Position der Hindernisse entspricht der bei BR = 0,63. ( $z$ : 0,63 m bis 1,86 m). Ziel dieser Simulation ist es, zu untersuchen, ob solch kleine Strömungshindernisse für eine deutliche Flammenbeschleunigung ausreichen.

Bei der Simulation mit BR = 0,01 (Abb. 7.8-7) kommt zu einer deutlich höheren Flammengeschwindigkeit in den Bereichen, in denen die Hindernisse eingebracht wurden. Hinter dem letzten Hindernis wird eine Flammengeschwindigkeit von über 20 m/s berechnet - im Gegensatz zu der Simulation ohne Hindernisse, bei der die Flammenge-

schwindigkeit in diesem Bereich 2 m - 3 m beträgt. Ab 1,89 m befinden sich auch bei der Simulation mit BR = 0,01 keine Hindernisse mehr im Beschleunigungsrohr. Deshalb fällt die Flammengeschwindigkeit langsam auf ähnliche Werte wie bei der Simulation mit BR = 0. Es zeigt sich also, dass bei diesem Experiment Hindernisse in der Größenordnung von 1 mm zu einer signifikanten Flammenbeschleunigung ausreichen. Das Experiment kann bei Berücksichtigung dieser kleinen Hindernisse erfolgreich nachgerechnet werden.

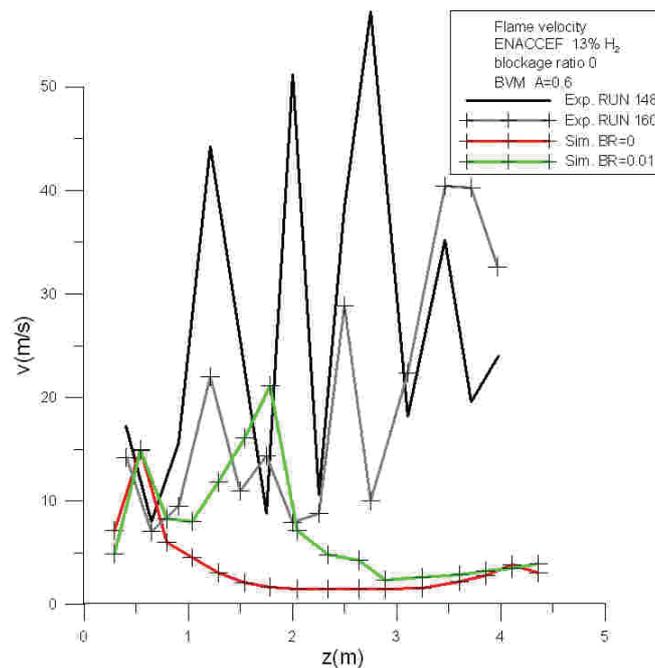


Abb. 7.8-7 Vergleich der berechneten Flammengeschwindigkeit mit BR=0 (rot) und BR=0,01 (grün) mit den Messwerten

#### 7.8.4.4 Fazit

Drei verschiedene an der ENACCEF-Anlage durchgeführte Versuche wurden mit CFX „blind“ vorausgerechnet. Bei allen drei Experimenten lag eine H<sub>2</sub>-Konzentration von 13 vol.% vor. Sie unterscheiden sich lediglich durch die Größe der Hindernisse, die in das Beschleunigungsrohr eingebracht wurden (BR = 0,63, BR = 0,33, BR = 0 -> kein Hindernis).

Für die Experimente mit BR = 0,63 und BR = 0,33 konnte die Flammengeschwindigkeit und der Druck in guter Übereinstimmung mit dem Experiment vorhergesagt werden. Bei der Simulation des Experiments ohne Hindernisse (BR = 0) wurde die Flammenge-

schwindigkeit und auch entsprechend die Geschwindigkeit des Druckanstiegs stark unterschätzt. Die Rechnung mit  $BR = 0,1$  hat gezeigt, dass in dieser Simulation nicht von einem komplett glatten Beschleunigungsrohr ausgegangen werden kann, da im Experiment kleine Hindernisse aufgrund von Messinstrumentierung, Flanschen etc. vorliegen, die eine zusätzliche Turbulenz erzeugen.

## **7.9 Zusammenfassung**

Durch Simulation verschiedener Versuche zur  $H_2$ -Verbrennung trockener  $H_2$ -Luft-Gemische wurden die Verbrennungsmodelle in CFX validiert. Es wurde das Burning-Velocity-Modell und das um den Said-Borghgi-Faktor erweiterte Eddy-Dissipation-Modell verwendet. Insgesamt hat sich gezeigt, dass das Burning-Velocity-Modell eine bessere Prognosefähigkeit besitzt als das Eddy-Dissipation-Modell. In zukünftigen Arbeiten sollte das Burning-Velocity-Modell um einen weiteren Mischungsbruch erweitert werden, um auch die Verbrennung von  $H_2$ /Dampf/Luftgemischen simulieren zu können. Bei einigen Versuchen (z. B. blinde Vorausrechnung der ENACCEF-Versuche im Rahmen von SARNET-2) konnte eine gute Übereinstimmung mit den Experimenten erzielt werden. Es haben sich aber auch beim BVM-Modell noch Modellschwächen gezeigt, wie z. B. die „spontane“ Zündung aufgrund numerischer Fehler beim Ix-2 Versuch. Außerdem konnte noch nicht abschließend geklärt werden, warum bei den großskaligen HYCOM-Versuchen ein anderer Modellparameter im Zimont-Modell verwendet werden sollte, als der Standardparameter, der bei den ENACCEF-Versuchen zu guten Ergebnissen führt.

## 8 Vergleich der Verbrennungsrechnungen von COM3D und CFX

### 8.1 Zielsetzung

Ziel der Arbeiten in diesem Arbeitspunkt war ein Vergleich der Verbrennungsrechnung von CFX mit dem FZK-Code COM3D. Hierzu wurde der RUT-Versuch HYCOM-13 sowohl mit COM3D als auch mit CFX nachgerechnet und die Ergebnisse dieser Berechnungen mit experimentellen Daten verglichen. In den folgenden Abschnitten wird insbesondere auf die COM3D-Simulation eingegangen, eine ausführliche Beschreibung der CFX Simulation des HYCOM-13 Experimentes findet sich in Abschnitt 7.3. Die Durchführung der COM3D Berechnungen fand mit tatkräftiger Unterstützung durch die Mitarbeiter des FZ Karlsruhe statt /YAN 10/, denen wir hiermit für ihre Hilfe danken möchten.

### 8.2 Geometrie und Randbedingungen

In Abb. 8.2-1 ist der schematische Aufbau des HYCOM-13 Versuchs dargestellt. Der Zündort befand sich in der unteren Ecke des so genannten Canyons und es wurde eine  $H_2$ -Konzentration von 10 vol.% gewählt. Bei der Berechnung mit COM3D wurde eine feine räumliche Auflösung mit ca. 3.800.000 Zellen, das Turbulenzmodell  $k-\epsilon$  und das KYLCOM-Verbrennungsmodell verwendet. In Tab. 8.2-1 finden sich die Start- und Randbedingungen für die COM3D-Berechnung.

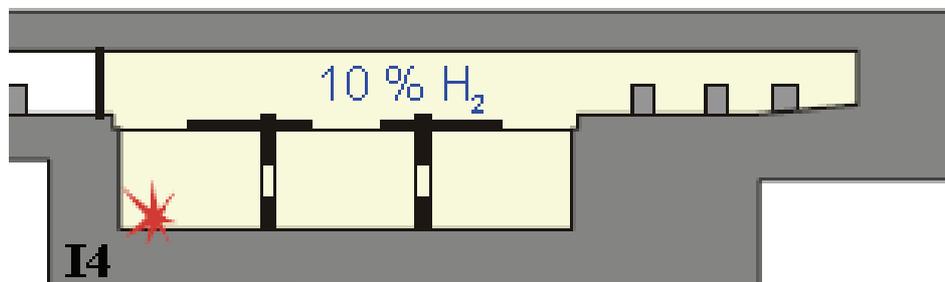


Abb. 8.2-1 Experimenteller Aufbau des HYCOM-13 Versuchs /SCHO 04/

Tab. 8.2-1 Start und Randbedingungen für die COM3D-Berechnung

Gitter		3.832.192 Zellen
Startbedingungen	H <sub>2</sub> -Konzentration	10 vol. %
	Druck	1,028 bar
	Temperatur	289,25 K
Verwendete Modelle	Wärmeübergang	Wird nicht betrachtet
	Verbrennungsmodell	KYLCOM / Kawanabe
	Turbulenzmodell	Standard k-ε

### 8.3 Auswertung der Simulationsergebnisse

In Abb. 8.3-1 ist die mit COM3D berechnete Flammenfront im HYCOM-13 Experiment dargestellt. Die Flammen bewegen sich vom Zündpunkt in der unteren linken Ecke aus und laufen dabei an den Hindernissen im Canyon vorbei. In der Abbildung ist weiterhin zu erkennen, dass die Wahl der anfänglichen Turbulenz einen deutlichen Einfluss auf die Form der Flammenfront hat. Dieses wird im nächsten Abschnitt diskutiert.

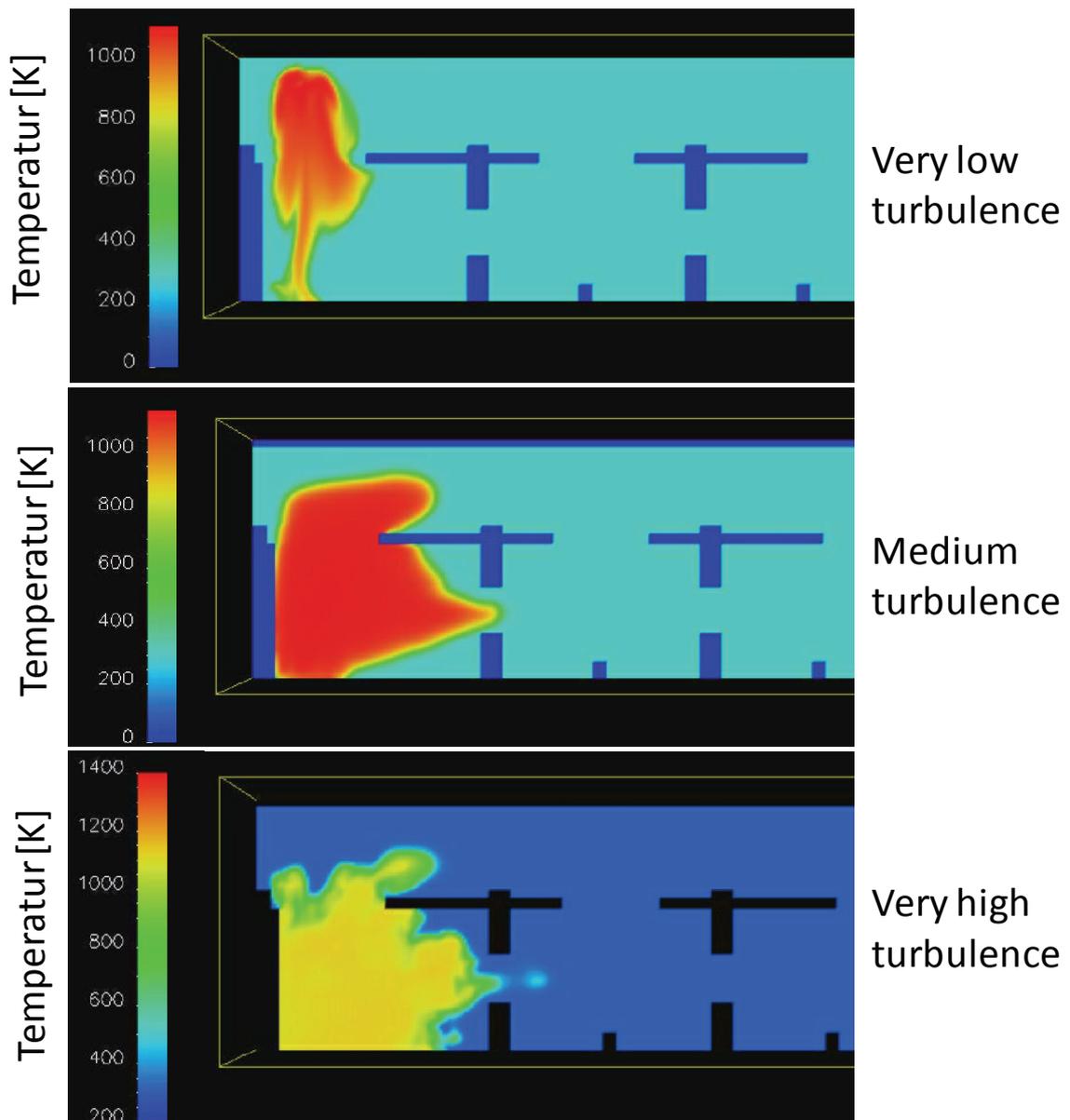


Abb. 8.3-1 Ausbreitung der Flammen im HYCOM-Experiment; berechnet mit COM3D /YAN 10/

Im Experiment waren entlang von drei horizontalen Linien im RUT-Behälter Lichtsensoren installiert mit deren Hilfe die Flammenankunftszeiten an den jeweiligen Positionen ermittelt wurden. Diese im Experiment aufgezeichneten Flammenankunftszeiten werden im Folgenden als Vergleichsgrundlage für die Simulationswerte verwendet. In Abb. 8.3-2 sind diese drei Linien (gestrichelt) im Versuchsaufbau eingezeichnet (Unten/Mitte/Oben). In Tab. 8.3-1 finden sich die genauen Positionen der drei Sensorlinien.

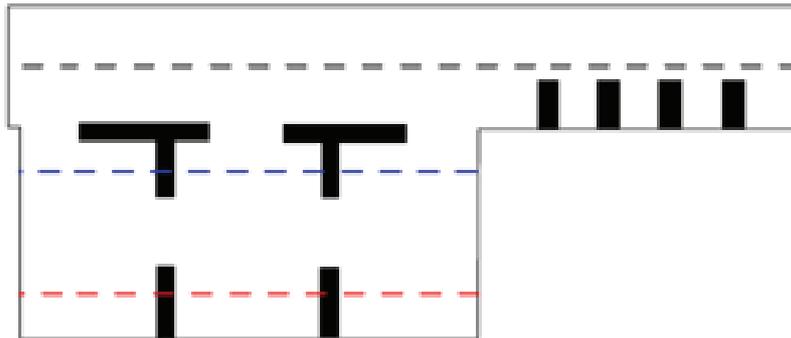


Abb. 8.3-2 Positionen der drei Messlinien im RUT-Versuch (gestrichelt) /SCHO 04/

Tab. 8.3-1 Position der Sensorlinien

Linie	Position	Höhe (über dem Canyonboden)
1	Unten	1,55 m
2	Mitte	3,40 m
3	Oben	4,90 m

#### 8.4 Einfluss der initialen Turbulenz auf die Flammenausbreitung

In den experimentellen Daten gibt es einen Hinweis darauf, dass möglicherweise schon zum Zeitpunkt der Zündung Strömungen und Turbulenzen im RUT-Behälter vorlagen. So hat die Flamme schon vor Erreichen des ersten Hindernisses eine höhere Geschwindigkeit in horizontaler Richtung als in vertikaler Richtung (siehe Abb. 8.4-1). Eine solche Flammenbeschleunigung in horizontaler Richtung (bevor ein Hindernis erreicht wurde) könnte ein Hinweis auf Strömungen und Turbulenzen schon zum Startzeitpunkt sein. Aus diesem Grund wurde im Rahmen der Nachrechnung des Experi-

menten mit COM3D eine Variation der initialen Turbulenz durchgeführt. Die Werte reichen von einer sehr geringen Turbulenz ( $0,0001 \text{ m}^2/\text{s}^2$ ) bis hin zu einer sehr hohen Turbulenz ( $5 \text{ m}^2/\text{s}^2$ ), hierzu siehe auch Tab. 8.4-1.

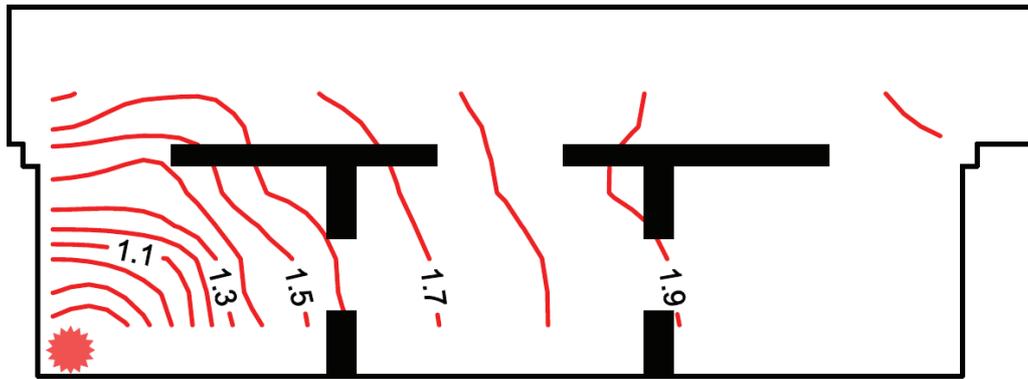


Abb. 8.4-1 Position der Flammenfront zu festgelegten Zeitpunkten /SCHO 04/

Tab. 8.4-1 Variation der initialen Turbulenz in den COM3D-Rechnungen

<b>Very low</b>	$0,0001 \text{ m}^2/\text{s}^2$
<b>Low</b>	$0,01 \text{ m}^2/\text{s}^2$
<b>Medium</b>	$1,0 \text{ m}^2/\text{s}^2$
<b>High</b>	$3,0 \text{ m}^2/\text{s}^2$
<b>Very high</b>	$5,0 \text{ m}^2/\text{s}^2$

In Abb. 8.4-2 ist dargestellt, welchen Einfluss die initiale Turbulenz auf die Flammenankunftszeiten entlang der unteren Linie (siehe Abb. 8.3-2) hat. Zu jeder Position entlang der Linie ist die zugehörige (Ankunfts-)Zeit aufgetragen. Es zeigt sich, dass die initiale Turbulenz einen sehr starken Einfluss auf die Flammenankunftszeiten hat. Am besten passen die Werte mit der Startturbulenz „High“ zu den gemessenen Werten. Dieses entspricht einer initialen Turbulenz von  $3,0 \text{ m}^2/\text{s}^2$ .

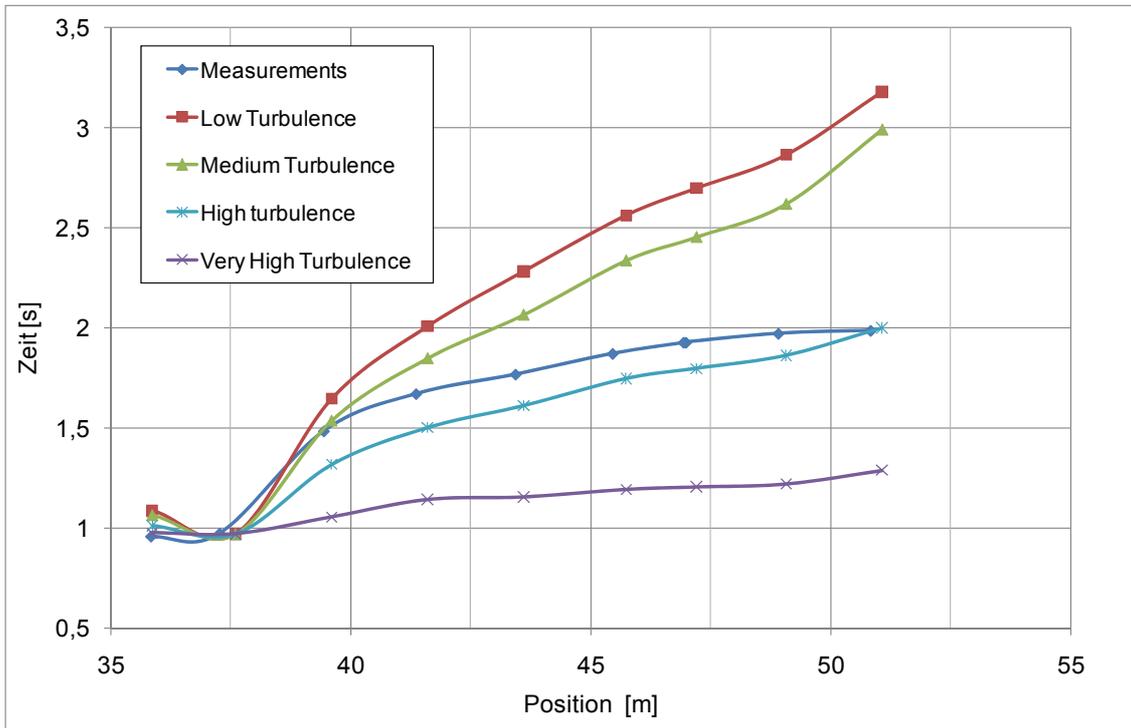


Abb. 8.4-2 Einfluss der initialen Turbulenzintensität auf die Flammenankunftszeiten entlang der unteren Linie

Ein ähnliches Bild ergibt sich auch für die mittlere Linie (Abb. 8.4-3) und für die obere Linie (Abb. 8.4-4). Auch hier findet sich jeweils die beste Übereinstimmung mit dem Experiment bei einer initialen Turbulenz von  $3 \text{ m}^2/\text{s}^2$ .

In Abb. 8.4-5 ist der Einfluss der initialen Turbulenz auf den Druckverlauf dargestellt. Auch hier findet sich eine starke Abhängigkeit des Drucks von der initialen Turbulenz und auch hier ergibt sich die beste Übereinstimmung für einen Wert von  $3 \text{ m}^2/\text{s}^2$ .

Unter der Annahme, dass eine initiale Turbulenz von  $3 \text{ m}^2/\text{s}^2$  vorliegt, ergeben sich also sowohl für die Flammenankunftszeiten als auch für den Druckverlauf die besten Übereinstimmungen mit den experimentellen Werten.

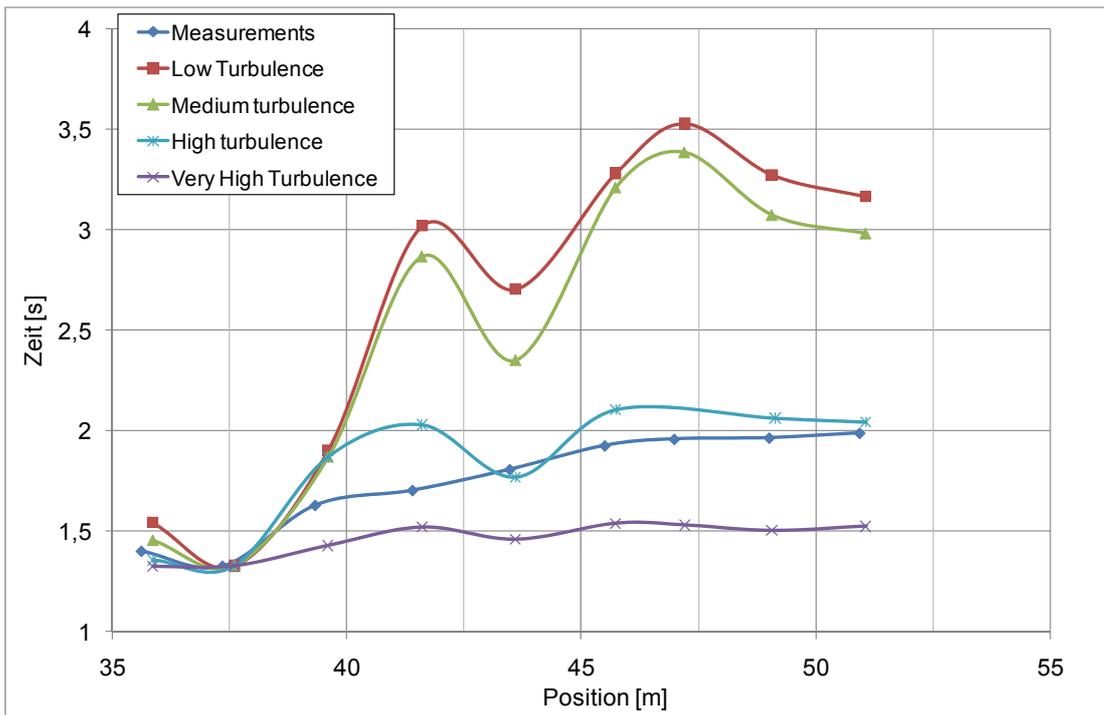


Abb. 8.4-3 Einfluss der initialen Turbulenzintensität auf die Flammenankunftszeiten entlang der mittleren Linie

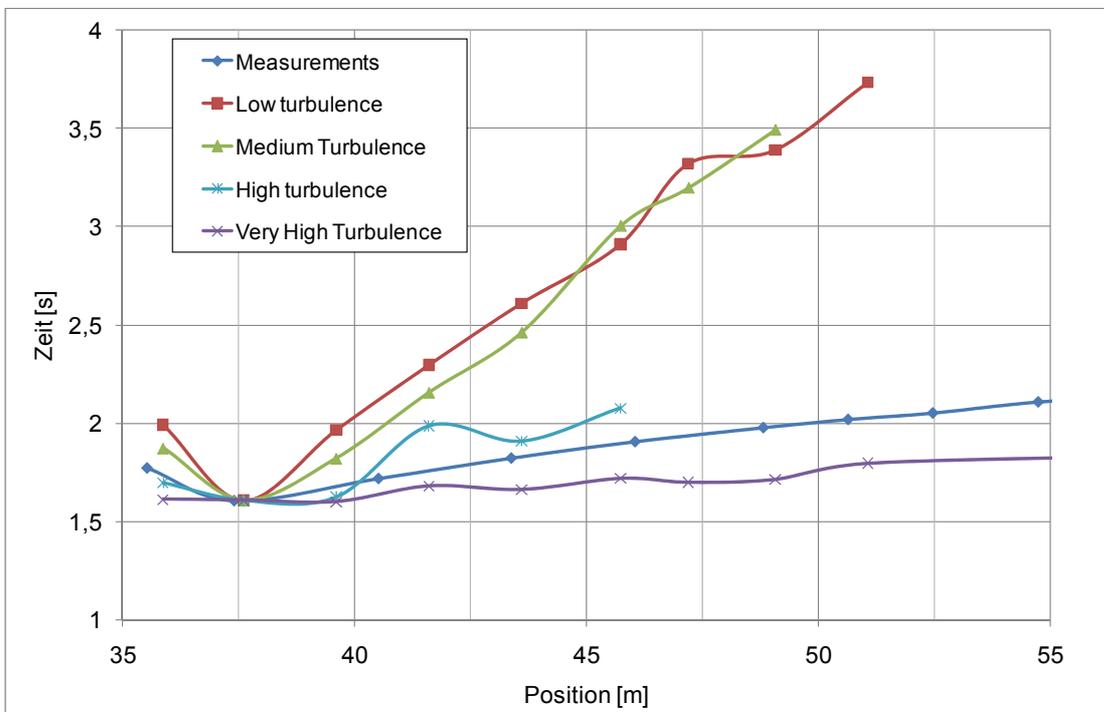


Abb. 8.4-4 Einfluss der initialen Turbulenzintensität auf die Flammenankunftszeiten entlang der oberen Linie

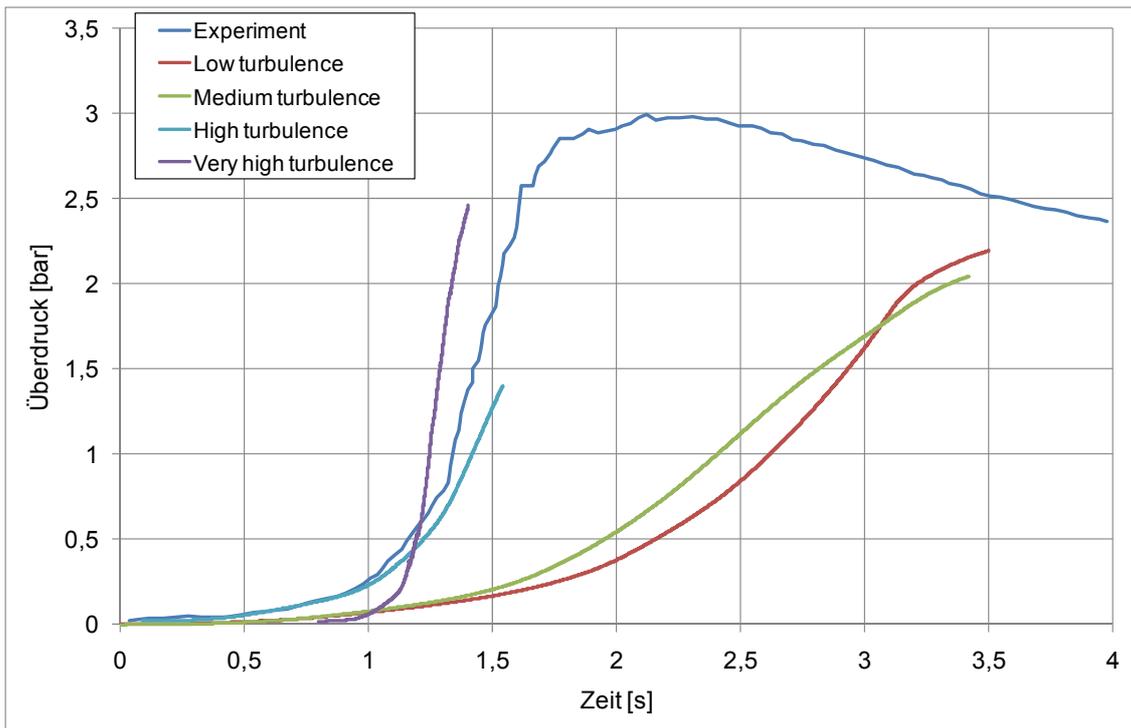


Abb. 8.4-5 Einfluss der initialen Turbulenzintensität auf den Druckverlauf

### 8.5 Vergleich der COM3D Ergebnisse mit einer CFX Rechnung

Zum Vergleich wird die CFX-Rechnung aus Abschnitt 7.3 verwendet die  $k_{ini} = 3 \text{ m}^2/\text{s}^2$  unterstellt. Das ist die gleiche turbulente kinetische Energie wie sie bei der COM3D-Rechnung mit „High Turbulence“ unterstellt wird.

In Abb. 8.5-1 werden die mit COM3D berechneten Flammenankunftszeiten (entlang der oberen Linie) den mit CFX berechneten Werten gegenübergestellt. Zum besseren Vergleich wurden die Flammenankunftszeiten so normiert, dass alle Rechnungen die Messstelle bei 37 m zum gleichen Zeitpunkt erreichen.

Sowohl CFX als auch COM3D erzielen mit einer hohen Anfangsturbulenz von  $k = 3 \text{ m}^2/\text{s}^2$  eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten, wobei CFX eine etwas bessere Übereinstimmung mit dem Experiment zeigt.

In Abb. 8.5-2 werden die mit COM3D und CFX berechneten Druckverläufe miteinander verglichen. In der Anfangsphase erzielt COM3D eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment, was darauf hindeutet, dass die Zündung und der Beginn des Ver-

brennungsprozesses von COM3D realistischer modelliert werden. Der anschließende Druckanstieg wird von beiden Programmen in guter Übereinstimmung modelliert, sofern eine hohe Anfangsturbulenz unterstellt wird, wobei CFX eine etwas bessere Vorhersage des Druckanstiegs erzielt.

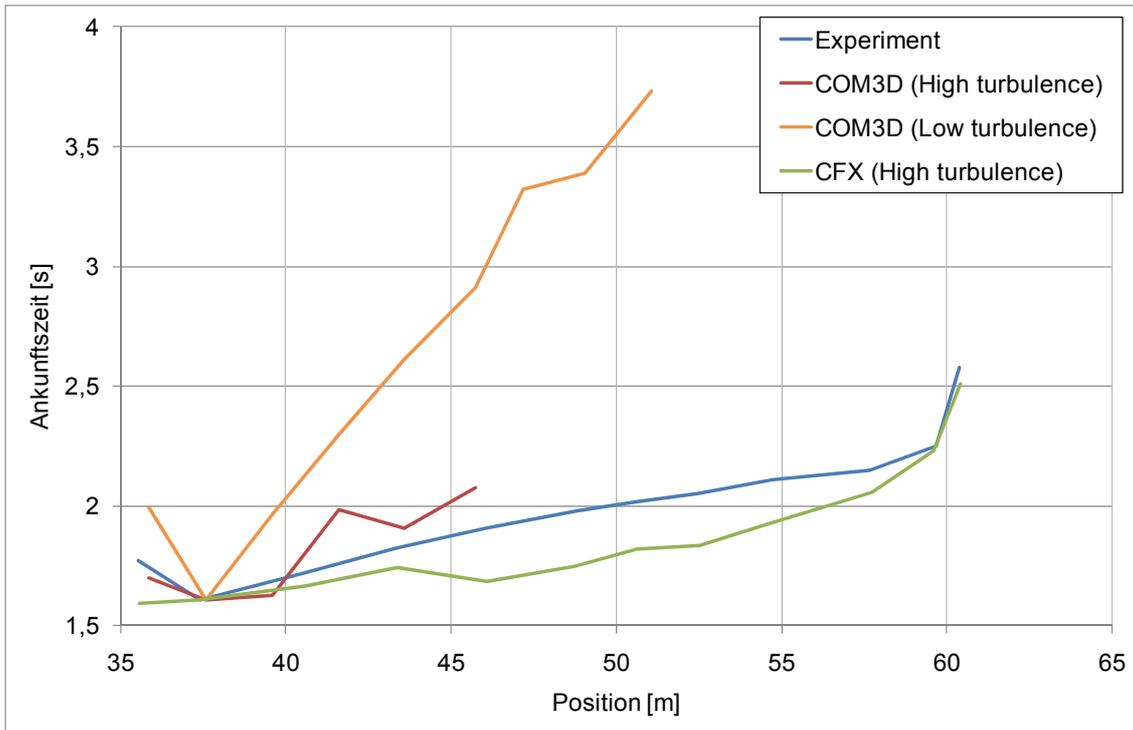


Abb. 8.5-1 Vergleich der Flammenankunftszeiten entlang der oberen Linie für COM3D, CFX und Experiment

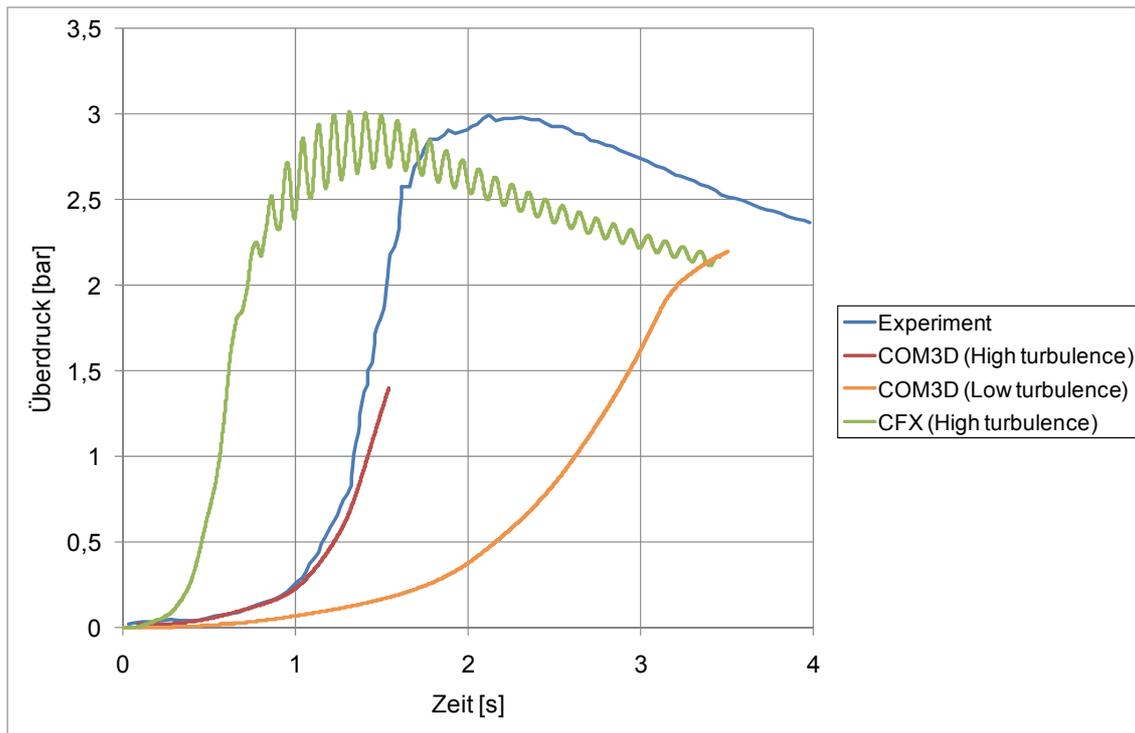


Abb. 8.5-2 Vergleich der mit COM3D und CFX berechneten Druckverläufe

## 8.6 Zusammenfassung und offene Fragen

Ein direkter Vergleich von COM3D und CFX anhand der Nachrechnungen des Experiments HYCOM-13 zeigt, dass beide Programme zu sehr ähnlichen Ergebnissen kommen, wenn man von derselben initialen Turbulenz ausgeht. Sowohl CFX als auch COM3D sind nicht in der Lage, das Experiment richtig zu simulieren, wenn keine Anfangsturbulenz unterstellt wird. Beide Programme sind aber in der Lage, mit  $k_{ini} = 3 \text{ m}^2/\text{s}^2$  das Experiment in guter Übereinstimmung mit dem Experiment zu simulieren.

Hierzu sei jedoch angemerkt, dass diese Aussagen für die Verwendung des KYLCOM-Verbrennungsmodells in der COM3D-Berechnung gelten. Frühere RUT- und HYCOM-Versuchsnachrechnungen mit COM3D und dem EBU-Verbrennungsmodell haben zu guten bis sehr guten Übereinstimmungen mit den experimentellen Daten geführt, auch ohne dass eine Anfangsturbulenz unterstellt wurde /BBB 05/.

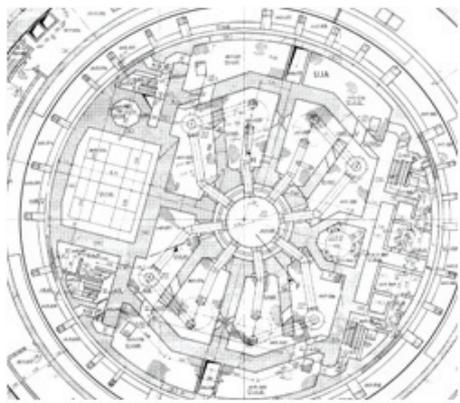
Ob diese Annahme einer Anfangsturbulenz richtig oder falsch ist, lässt sich im Nachhinein nicht mehr klären. Hierzu existieren keinerlei experimentelle Messwerte, die diese These stützen oder widerlegen könnten.

## **9 Erstellung eines Datensatzes für den Sicherheitsbehälter einer KONVOI-Anlage**

Durch den großen Fortschritt bei der Rechnerleistung in den letzten Jahren und durch die Möglichkeit der Parallelisierung ist es mittlerweile möglich, z. B. die Gasverteilung im Containment für einen schweren Störfall mit CFX zu berechnen. Allerdings sind dabei noch immer Kompromisse hinsichtlich des verwendeten Gitters bzw. dessen Feinheit zu machen. Ziel der Arbeiten war es, einen ersten CFX-Datensatz für den Sicherheitsbehälter einer KONVOI-Anlage unter Berücksichtigung wesentlicher Großkomponenten zu erstellen und mit diesem Datensatz die Verteilung und Verbrennung von Wasserstoff bei einem schweren Störfall exemplarisch zu berechnen. Es sollten erste Erfahrungen gewonnen werden, mit welchem Aufwand diese verbunden ist und welche Ergebnisse im Einzelnen erzielt werden können.

### **9.1 Netzerstellung**

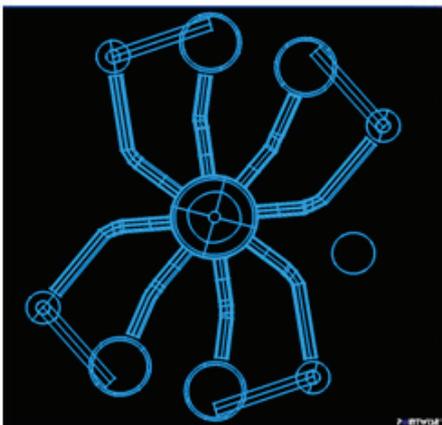
In Abb. 9.1-1 sind die einzelnen Schritte bei der Datensatzerstellung grafisch dargestellt. Zunächst lagen die Anlagendaten als Bauzeichnungen in Papierform vor. Auf den Bauzeichnungen sind einzelne Schnittebenen durch den Sicherheitsbehälter dargestellt. Diese Zeichnungen wurden eingescannt und so in digitale Bilddateien umgewandelt. Mit Hilfe einer Bildverarbeitungssoftware wurden aus den Bilddateien die geometrischen Daten des Sicherheitsbehälters extrahiert /IMJ 09/. Hierzu gehören die räumlichen Koordinaten der einzelnen Räume, von Betonstrukturen, vom Reaktor-druckbehälter und von Primärkreiselementen sowie von der Sicherheitsbehälterschale. Diese Koordinaten wurden miteinander verbunden, so dass Kanten, Flächen und Volumina daraus entstanden. Mit der Netzerstellungssoftware Gridgen wurden auf dieser Basis Flächen- und Volumennetze erstellt sowie diese Netze mit einer Bedeutung versehen (z.B. freies Volumen, Betonstruktur, Primärkreiselement u.s.w.).



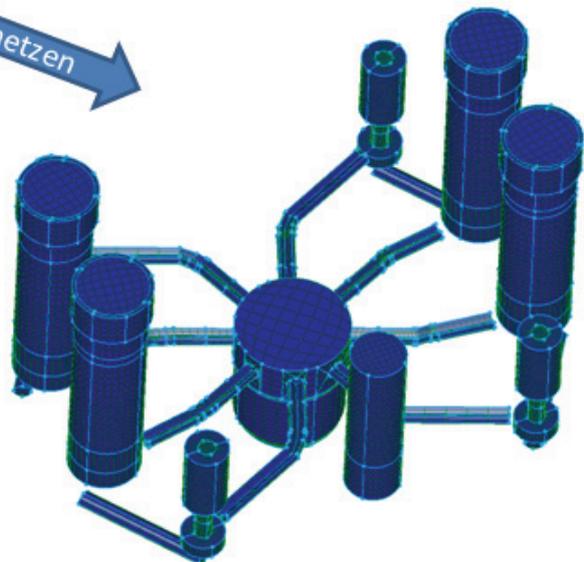
Bauzeichnung auf Papier



Digitales Bild



Geometrische Daten



Volumen-Netz

Abb. 9.1-1 Vorgehensweise bei der Netzerstellung für CFX für eine KONVOI-Anlage

Bei der Erstellung der Netze traten unterschiedliche, teilweise konkurrierende Anforderungen und Problemstellungen auf:

- Die Netze sollten bestimmten *Qualitätsanforderungen* entsprechen (z.B. keine zu kleinen Winkel usw.).
- Die Netze sollten *ausreichend fein* sein, um die physikalischen Prozesse ohne Diskretisierungsfehler abbilden zu können. Die Anforderungen der physikalischen Modelle für Turbulenz, Kondensation, Verbrennung können hierbei sehr unterschiedlich sein.
- Sind die Netze *zu fein*, so führt dieses zu einer deutlichen Erhöhung von Berechnungszeiten und der Hardware-Anforderungen. Gerade für ein komplexes Gebilde wie ein Containment stellen diese Berechnungszeiten eine deutliche Begrenzung des zurzeit Machbaren dar.
- *Strukturierte Netze* haben den Nachteil, dass Netzverfeinerungen oder Netzvergrößerungen an einer Stelle Auswirkungen auf das gesamte andere Netz haben. Vorteil dieser Netze ist aber, dass mit weniger Elementen als bei unstrukturierten Netzen eine hohe Berechnungsgenauigkeit erreicht werden kann.
- *Unstrukturierte Netze* haben den Nachteil, dass mehr Elemente für die gleiche Genauigkeit von strukturierten Netzen verwendet werden müssen. Dafür sind unstrukturierte Netze wesentlich flexibler und anpassungsfähiger an die geometrischen Bedingungen.
- Die manuelle Netzerstellung erfordert einen *sehr hohen Arbeitsaufwand*. Eine Untersuchung von Hansen und Owen (Sandia National Laboratories) kommt zu dem Schluss, dass dem Arbeitsschritt der Vernetzung durchschnittlich 73 % der gesamten Arbeitszeit bei einem Simulationsprozess zukommt /HAN 08/.

## 9.2 CFD-Gitter für ein generisches KONVOI Containment

Insgesamt liegt jetzt das vollständige KONVOI-Gitter mit einem freien Volumen von etwa 70.600 m<sup>3</sup> mit den dazugehörigen Wandstrukturen als hybrides Gitter vor. Hybrid bedeutet, dass das Gitter sowohl strukturierte als auch unstrukturierte Elemente enthält. In Abb. 9.2-1 und Abb. 9.2-2 ist ein vertikaler bzw. horizontaler Schnitt durch das KONVOI-Gitter dargestellt. Hier zeigt sich, dass die freien Volumen hauptsächlich strukturiert vernetzt sind, während die Wände hauptsächlich aus unstrukturierten Git-

tern bestehen. Diese Unterscheidung ist sinnvoll, da mit den strukturierten Gittern im freien Volumen eine effizientere Lösung der Bewegungsgleichungen möglich ist.

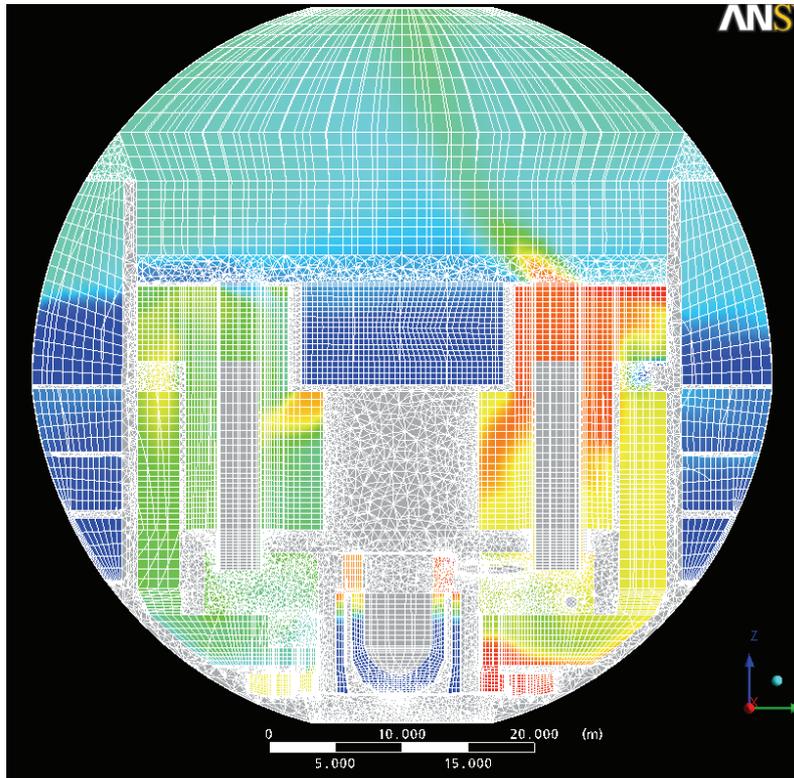


Abb. 9.2-1 Vertikaler Schnitt durch das KONVOI-Gitter

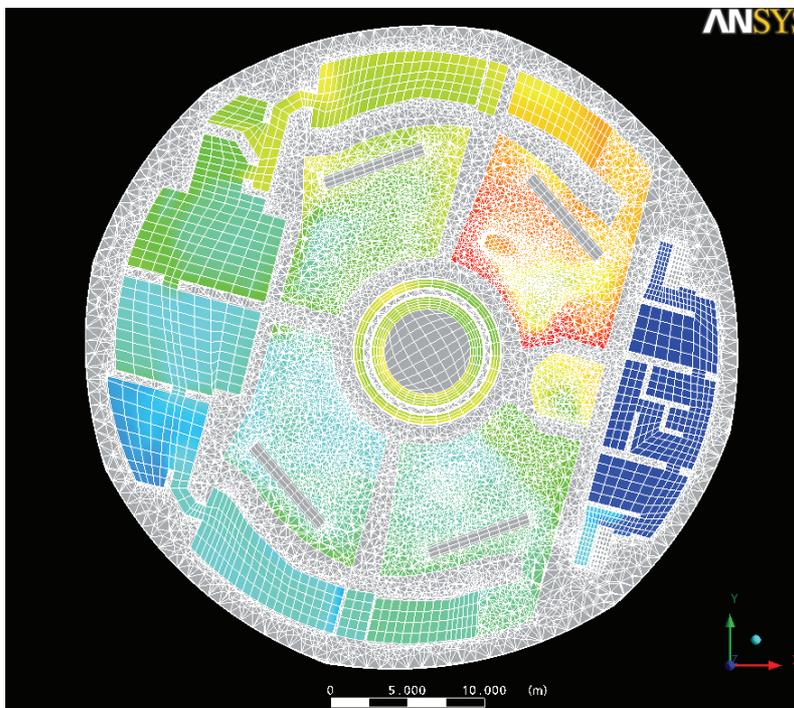


Abb. 9.2-2 Horizontaler Schnitt durch das KONVOI-Gitter

Wie schon in Abschnitt 4.1 gezeigt, hat die Diskretisierung in der Nähe der Gas/Wand Grenzfläche (sowohl im Gas als auch in der Wand) einen teilweise starken Einfluss auf den Wärmetransport in die Strukturen. Insbesondere für Betonwände ist eine sehr feine Diskretisierung (~1-2 mm) an der Grenzfläche notwendig. Vertiefte Untersuchungen zu dieser Fragestellung sind in den Abschnitten 9.3.4 und 9.3.6 zu finden.

Das Gitter besteht insgesamt aus ca. 3.800.000 Elementen. In Tab. 9.2-1 ist eine Übersicht über die einzelnen Komponenten des KONVOI-Datensatzes dargestellt und die jeweilige Anzahl von Elementen aufgeführt. Hierbei wurden die Betonstrukturen, die Metallhülle des Sicherheitsbehälters, sowie wichtige Primärkreiselemente (RDB, HKLs, Pumpen, Dampferzeuger und Druckhalter) modelliert. Alle anderen (kleineren) Elemente wurden vernachlässigt. Die Türen und Berstfolien wurden in diesem ersten Modell zunächst alle als offen stehen angenommen. Im freien Volumen der SB-Atmosphäre liegt die mittlere Elementgröße bei etwa 0,06 m<sup>3</sup>. Damit werden die in den so genannten Best-Practice-Guidelines geforderten Qualitätsanforderungen nicht erfüllt. Diese einzuhalten, ist aber im vorliegenden Fall aufgrund der komplexen Geometrie und der Vielzahl an beteiligten physikalischen Prozessen z.Zt. noch nicht möglich. In Abb. 9.2-3 finden sich weitere Screenshots zur Illustration des erstellten KONVOI-Datensatzes.

Tab. 9.2-1 Netzzumfang des KONVOI-Datensatzes

Beton-Strukturen	2.408.678 Elemente
Freies Volumen (Gasraum)	1.200.774 Elemente
Sicherheitsbehälter	124.488 Elemente
Primärkreis-Elemente	44.364 Elemente
Gesamt	3.778.304 Elemente

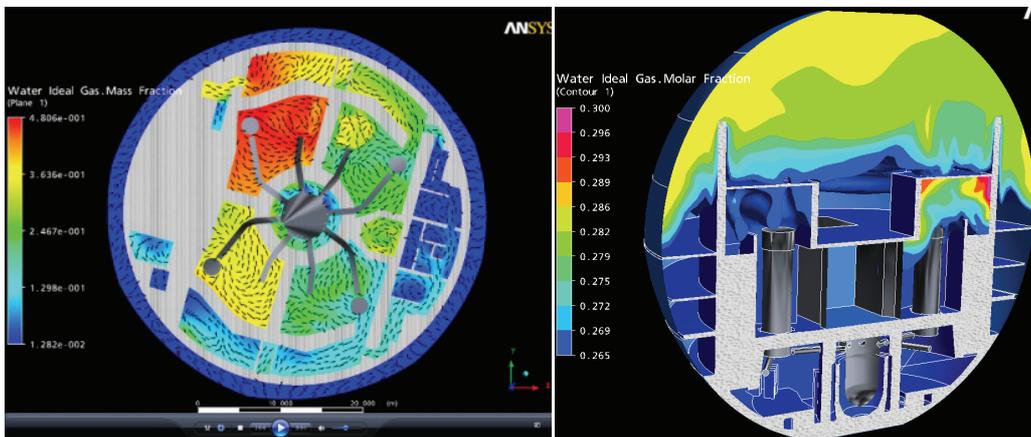
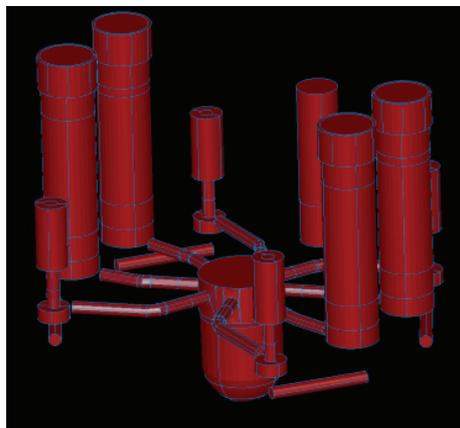
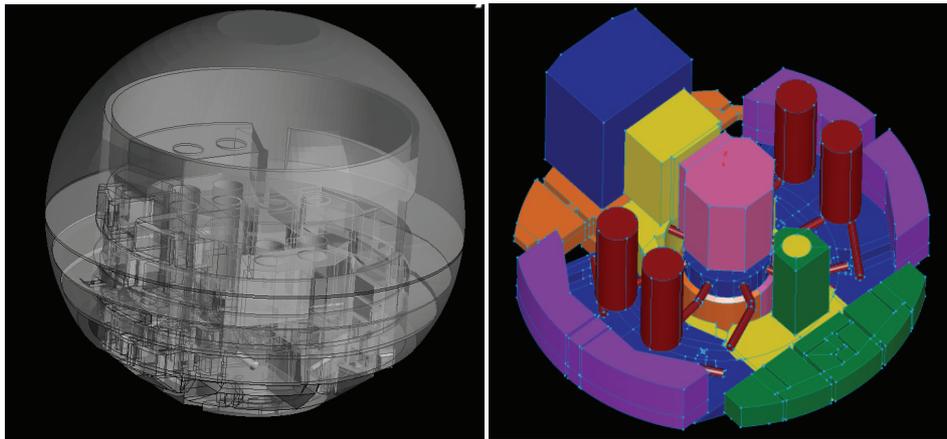


Abb. 9.2-3 Screenshots des KONVOI-Datensatzes; unten mit Gasfreisetzung bei einem unterstellten Störfall

### 9.3 Simulation eines Störfalls und Vergleich mit COCOSYS

Zur Ermittlung der lokalen Luft/Dampf/H<sub>2</sub>-Verteilung in einem unterstellten Störfall wurde eine Rechnung mit dem erstellten KONVOI-Datensatz durchgeführt. Der Vergleich

von CFX- und COCOSYS-Ergebnissen dient der gegenseitigen Überprüfung der unterschiedlichen Rechenansätze. Der Vergleich der Ergebnisse zweier unterschiedlicher Codes ermöglicht es, einzelne Fehler besser zu entdecken und diese zu reduzieren, was die Vorhersagegenauigkeit für den betrachteten Störfall später erhöht.

Im Ergebnis einer COCOSYS-Berechnung liegen zeitabhängige Druck-, Temperatur- und Gaskonzentrationsverteilungen für einzelne Containment-Zonen vor. In der CFX-Berechnung liegt im Vergleich hierzu eine räumlich hochaufgelöste, dreidimensionale zeitliche Verteilung der betrachteten Größen vor. Neben der wesentlich feineren Diskretisierung in CFX unterscheiden sich die Simulationen auch dadurch, dass in CFX der Strömungsimpuls der Gase berücksichtigt wird.

### **9.3.1 Start- und Randbedingungen**

In der vorliegenden Untersuchung wurde exemplarisch das Szenario des kompletten Abrisses der DH-Verbindungsleitung mit unterstelltem Totalausfall der aktiven Notkühlung betrachtet. Die Kernaufheizung und Oxidation setzt etwa nach 1500 s ein. Die Phase der starken Kernoxidation und -zerstörung liegt zwischen 2500 s - 3300 s. Dann hat sich ein großer Schmelzpool im unteren Kernbereich gebildet. Dieser führt zum Versagen der unteren Kerngitterplatte nach ca. 5800 s und Kernmaterial lagert sich ins untere Plenum des RDB um, in dem sich zu diesem Zeitpunkt noch Wasser befindet. Eine kurzzeitige heftige Verdampfungs- und Oxidationsreaktion ist die Folge. Nach 6000 s des Unfallablaufes wird die Analyse mit beiden Codes beendet, bevor es zum versagen des RDB kommt. In Tab. 9.3-1 finden sich die Start- und Randbedingungen für das untersuchte Szenario.

Die eingespeisten Massenströme und Temperaturen stammen aus einer MELCOR-Analyse /SON 98/ und sind in den Abb. 9.3-1 bis Abb. 9.3-5 bis Abb. 9.3-10 dargestellt. Durch den unterstellten kompletten Bruch der DH-Leitung strömen in der Anfangsphase sowohl Wasser als auch Dampf von der „Druckhalter-Seite“ als auch dem Leck an der „Hauptkühlmittel-Seite“ in den unteren Bereich der Anlagenräume des SHB ein. Später erfolgt die Freisetzung von Wasserdampf und H<sub>2</sub> aus der „Hauptkühlmittel-Seite“.

Tab. 9.3-1 Start- und Randbedingungen für das untersuchte Szenario

<b>Geometrie</b>	<b>Freies Volumen</b>	70.601 m <sup>3</sup>			
<b>Wände</b>	<b>Wandfläche</b>	37.092 m <sup>2</sup>			
	<b>Temperatur Beton und Stahlschale</b>	Startwert 30 °C			
	<b>Temperaturrandbedingung Primärkreis</b>	Konstante Temperatur: 60 °C			
<b>Atmosphäre</b>	<b>Druck</b>	Startwert 1 bar			
	<b>Temperatur</b>	Startwert 30 °C			
	<b>Gaszusammensetzung (Startwerte)</b>		<b>Masse</b>	<b>Massenanteile</b>	
			[kg]		
		N <sub>2</sub>	62057,3	0,757	
		O <sub>2</sub>	18854,9	0,230	
		Dampf	1065,7	0,013	
		H <sub>2</sub>	0,0	0,000	
Summe		81977,9	1,000		
<b>Modellwahl</b>	<b>Turbulenzmodell</b>	SST			
	<b>Gasmodell (Dampf)</b>	Redlich-Kwong Wet Steam			
	<b>Gasmodell (N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>)</b>	Ideales Gas			
	<b>Diffusion Dampf</b>	Schirmer: $2,3 \cdot 10^{-5} [\text{m}^2 \text{s}^{-1}] \cdot (T / 273,15)^{1,81}$			
	<b>Diffusion H<sub>2</sub></b>	$6,10 \cdot 10^{-5} [\text{m}^2 \text{s}^{-1}]$			
	<b>Diffusion O<sub>2</sub></b>	$1,76 \cdot 10^{-5} [\text{m}^2 \text{s}^{-1}]$			
<b>Konvergenz</b>		RMS < $1,0 \cdot 10^{-4}$			
<b>Zeit</b>	<b>Problemzeit</b>	6000 s			

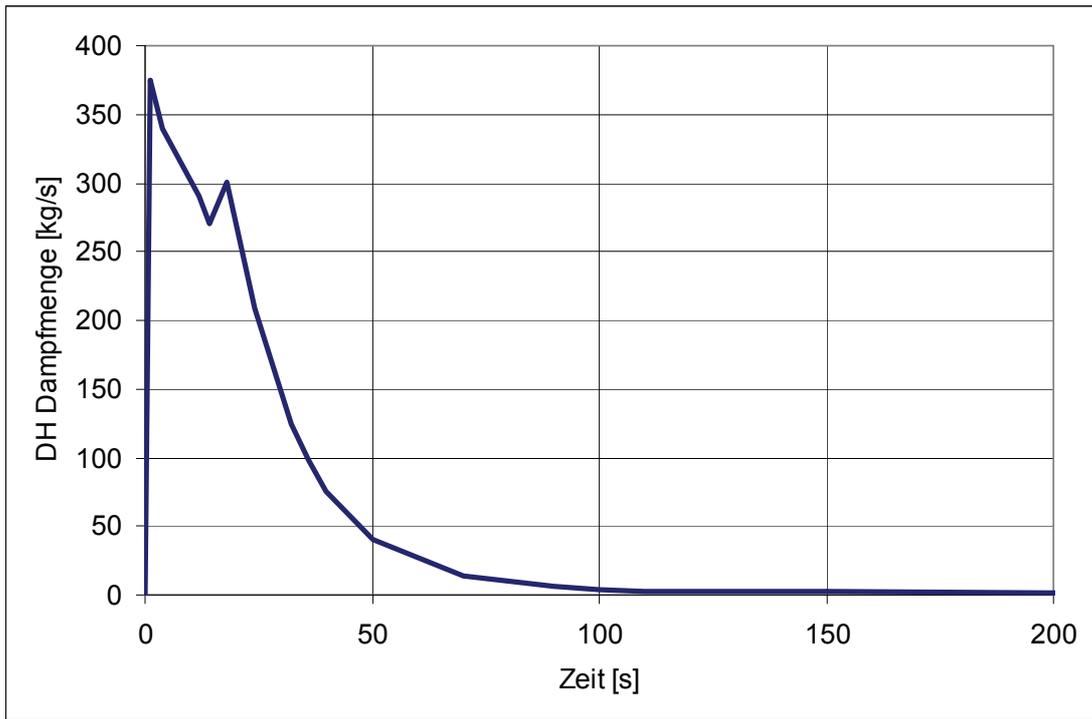


Abb. 9.3-1 Eingespeiste Dampfmenge aus dem Druckhalter (Randbedingung)

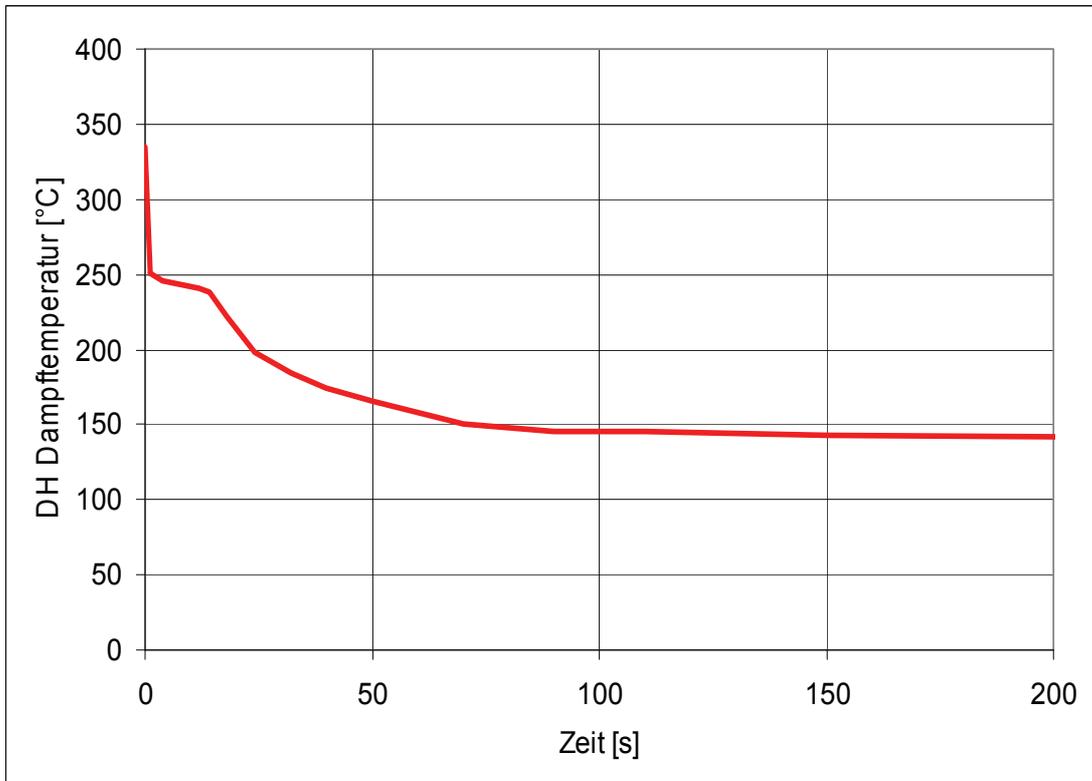


Abb. 9.3-2 Temperatur des eingespeisten Dampfes aus dem Druckhalter

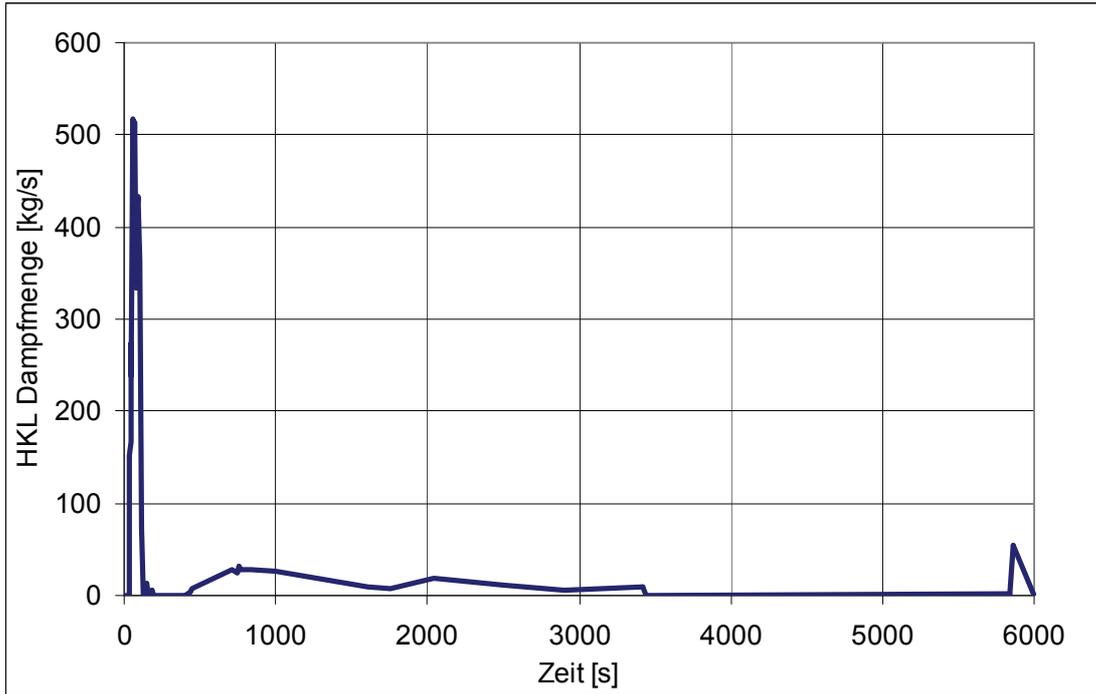


Abb. 9.3-3 Eingespeiste Dampfmenge aus dem Leck an der HKL

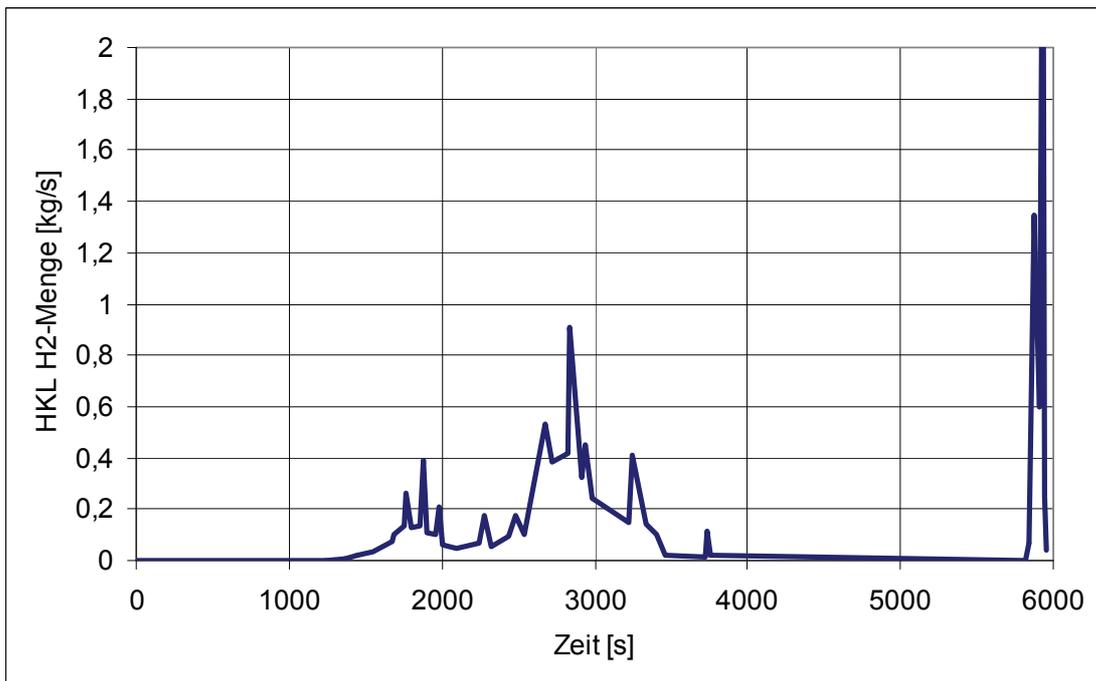


Abb. 9.3-4 Eingespeiste Wasserstoffmenge aus dem Leck an der HKL

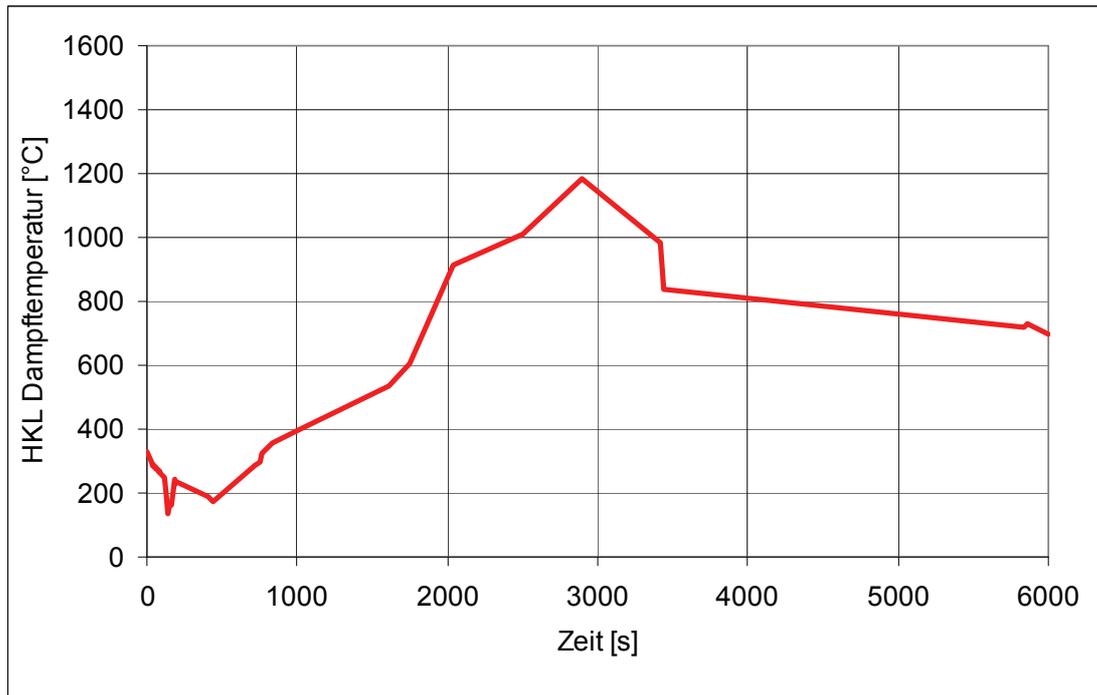


Abb. 9.3-5 Temperaturen (Dampf und Wasserstoff) an der HKL-Seite

Um die Unterschiede in den Simulationsergebnissen möglichst gering zu halten, wurden die Randbedingungen und Datensätze weitgehend aufeinander abgestimmt. Dabei wurden im COCOSYS-Datensatz im Vergleich zum originalen Datensatz folgende Änderungen vorgenommen:

- Anpassung der Strukturoberflächen:  
Im CFX-Datensatz werden nicht alle Strukturen im Detail abgebildet. Daher wurden die Strukturoberflächen im COCOSYS-Datensatz entsprechend reduziert, so dass die Gesamtfläche in beiden Datensätzen übereinstimmt.
- Für alle Zonen wurde die Starttemperatur mit 30 °C und die relative Feuchte mit 50 % festgelegt. Ferner wird die Wassermasse im Lagerbecken nicht mehr berücksichtigt. Der Einfluss dieser Änderungen ist aber vergleichsweise gering.
- Da die Lüftungskanäle im CFX-Datensatz nicht enthalten sind, wurden diese im COCOSYS-Datensatz entfernt.
- Variable Verbindungsöffnungen (Türen, Berstfolien) können in CFX zurzeit nicht oder mit sehr hohem Aufwand simuliert werden. Daher wurden alle Türen als offen angenommen. Entsprechend wurden im COCOSYS-Datensatz Türverbindungen durch normale Atmosphärenverbindungen ersetzt. Entsprechendes gilt für Berstmembranen und Druckabbauklappen. Hier wurde ebenfalls der Öff-

nungsquerschnitt oberhalb der Dampferzeuger in beiden Datensätzen abgestimmt.

- Die implementierten katalytischen Rekombinatoren werden in der Rechnung nicht berücksichtigt.
- Zur Vereinfachung wird die Wasserdampf- und Wasserstoffeinspeisung betrachtet, da auch in den CFX-Rechnungen das flüssige Wasser bisher nicht betrachtet wird.

### **9.3.2 Benötigte Rechenzeiten und Rechnerkapazitäten**

CFX benötigt für die Berechnung des Störfallszenarios von 6000 s Problemzeit eine Rechenzeit von 274 CPU-Tagen. Da 8 parallele Prozessoren verwendet wurden, entspricht dieses einer Rechendauer von etwa 34 Tagen. Die COCOSYS-Analyse dieses Falls benötigt auf einer CPU i.d.R. nicht mehr als 24 h.

### **9.3.3 Vergleich der CFX-Berechnung mit einer COCOSYS-Berechnung**

Im Folgenden werden die zeitlichen Verläufe von Druck, Temperatur und Dampf- und Wasserstoffkonzentration mit einer COCOSYS-Berechnung verglichen und interpretiert. Zur Interpretation gehört auch eine Analyse des Einflusses von einzelnen Berechnungsparametern auf den Kondensationsprozess anhand eines vereinfachten Testbeispiels.

In Abb. 9.3-6 ist exemplarisch für die vorliegenden Ergebnisse die berechnete Dampfverteilung im Sicherheitsbehälter dargestellt (bei  $t \sim 200$  s); in Abb. 9.3-7 die Verteilung des Wasserstoffs im Sicherheitsbehälter (zum Zeitpunkt  $t = 2865$  s) dargestellt.

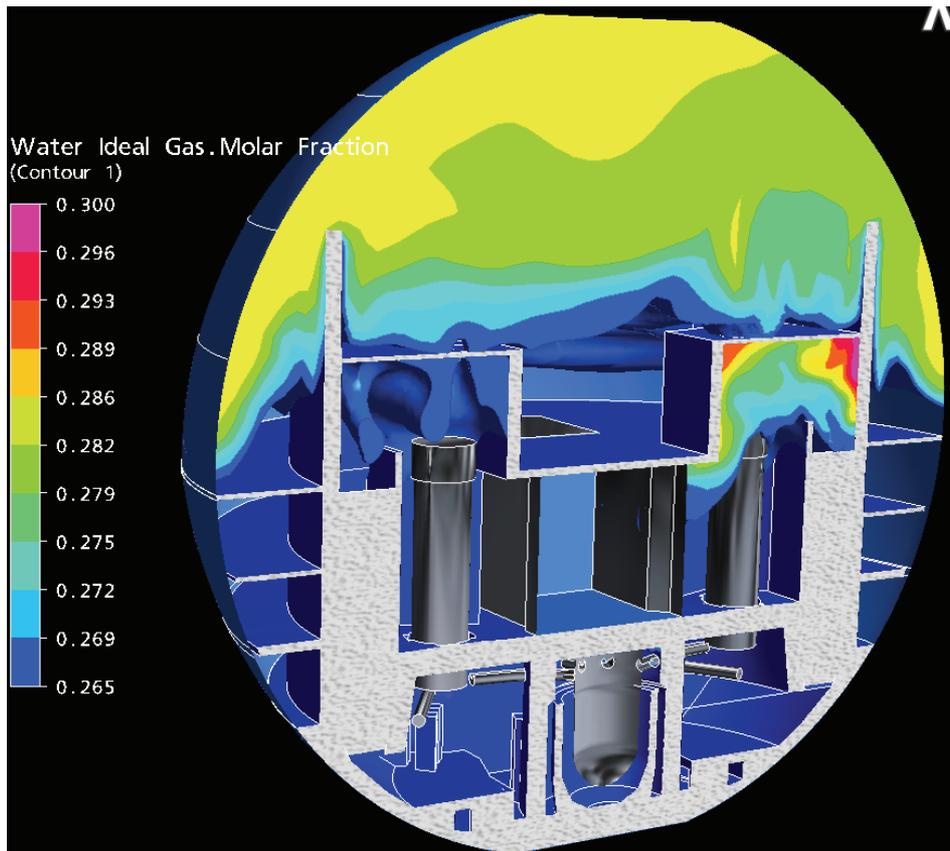


Abb. 9.3-6 Räumliche Verteilung von Wasserdampf im Containment (t ~ 200 s)

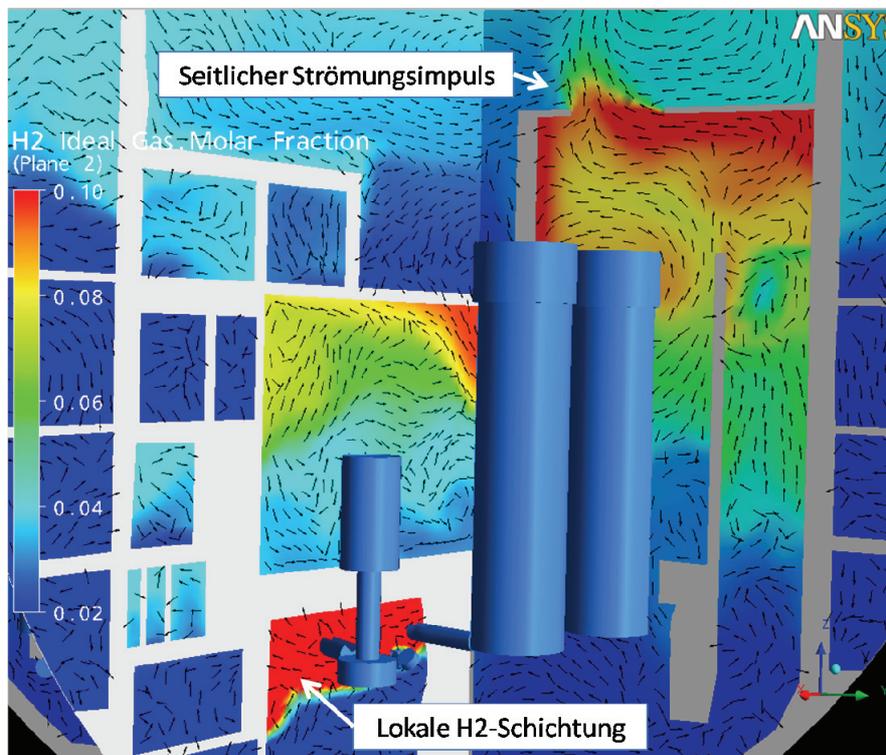


Abb. 9.3-7 Räumliche Wasserstoffverteilung im Containment (t = 2865 s)

Bevor auf Details des Vergleiches eingegangen wird, sollen bei der Untersuchung der mit CFX berechneten Dampf- und Wasserstoffverteilung im Containment festgestellte Beobachtungen zusammengefasst werden:

- Es treten in verschiedenen Räumen im Containment Schichtungsphänomene auf. Dieses ist z.B. der Fall in der Einspeisezone (siehe Abb. 9.3-7) oder auch in der Kuppel des Sicherheitsbehälters. Dieses detaillierte Schichtungsverhalten in einzelnen Zonen wird durch die COCOSYS-Simulation bedingt wiedergegeben, da bei lumped parameter Programmen ein (Konzentrations-)Wert pro Zone berechnet wird. Durch eine detaillierte Nodalisierung in COCOSYS wird versucht diesem Phänomen Rechnung zu tragen.
- Aufgrund des in CFX berücksichtigten Strömungsimpulses können die Dampf- und H<sub>2</sub>-Massenströme z.B. an Aus- und Überströmöffnungen zum Teil eine andere Richtung erhalten, als in der COCOSYS-Simulation. Dieses ist zum Teil auch durch die Nodalisierung in COCOSYS bedingt. Dieses wird z.B. im unteren Bereich bei der Ausströmung aus dem Leck sichtbar. Auch im oberen Bereich beim Übergang aus den DE-Türmen in den Dom-Bereich sind Unterschiede zu beobachten (siehe Abb. 9.3-7).
- Eine Einschätzung der Einflüsse auf das Gesamtanlagenverhalten ist aus diesen ersten Analysen noch nicht möglich.

Im Folgenden werden die Berechnungswerte Druck, Temperatur, Dampf- und H<sub>2</sub>-Konzentration von CFX und COCOSYS miteinander verglichen. Um diesen Vergleich zu ermöglichen, wurde in der CFX-Berechnung ein Mittelwert dieser Berechnungsgrößen über das Volumen verschiedener Raumbereiche entsprechend den COCOSYS-Zonen gebildet. Die in dieser Analyse betrachteten Zonen sind in Abb. 9.3-8 dargestellt. Hierbei handelt es sich um den Leckort (R09B), jeweils eine darunterliegende Zone (R08B), eine darüber liegende Zone (R10A) und die Domkuppel (D50) des Sicherheitsbehälters. Die in CFX berechneten Mittelwerte wurden mit den in COCOSYS berechneten Zonenwerten verglichen.

Abb. 9.3-8 In der vorliegenden Analyse betrachtete Zonen

In Abb. 9.3-9 ist dann der Vergleich des Containmentdrucks dargestellt. Hier ergibt sich insbesondere in der Anfangsphase ein deutlicher Unterschied. Zu einem späteren Zeitpunkt nähern sich die Kurven jedoch wieder an. In Abb. 9.3-10 bis Abb. 9.3-13 wird die mit CFX berechnete mittlere Dampfkonzentration für die Zonen R08B, R09B, R10A und D50 mit der COCOSYS-Berechnung verglichen. Zunächst zeigt sich ein qualitativ ähnlicher Verlauf bei CFX und bei COCOSYS. Insbesondere beim ersten Einströmvorgang bei ca.  $t = 100$  s zeigt sich aber ein deutlicher quantitativer Unterschied. Die mit CFX berechneten Dampfkonzentrationen liegen hier deutlich (20 – 30 vol.%) unterhalb der COCOSYS-Werte. Grundsätzlich sind hierfür zwei mögliche Ursachen denkbar:

- Schnellere räumliche Ausbreitung des Dampfes in der CFX-Berechnung: Diese könnte entstehen durch die prinzipiellen Unterschiede zwischen einer Lumped-Parameter-Berechnung (Vernachlässigung der Impulsgleichung, Verbindung von Zonen durch gerichtete Junctions, ...) und einer CFD-Berechnung (Berück-

sichtigung der Impulsgleichung, Verbindungen von Räumen durch feiner aufgelöste CFD-Gitter, ...).

- Höhere Kondensationsrate in der CFX-Berechnung: Diese könnte entstehen durch eine Abweichung zwischen dem CFX- und dem COCOSYS-Kondensationsmodell, durch unzureichende Verfeinerung des CFX-Gitters in Wandnähe, durch unzureichende Auflösung der Betonwände an der Grenzschicht zur Atmosphäre oder durch weitere Modellunterschiede (Gas-, Diffusions- oder Turbulenzmodellierung).

Welcher dieser Faktoren maßgeblich zu den hier beobachteten Unterschieden beiträgt, wird noch detaillierter untersucht.

Im weiteren zeitlichen Verlauf ( $t > 500$  s) nähern sich die Kurvenverläufe von CFX und COCOSYS etwas mehr an, es bleiben aber Unterschiede bestehen. In den meisten Bereichen (R09B, R10A, D50) ergibt sich in der CFX-Berechnung eine etwas geringere Dampfkonzentration als in der COCOSYS-Berechnung, was für eine verstärkte Kondensation spricht. Dieses gilt für den gesamten weiteren Zeitverlauf.

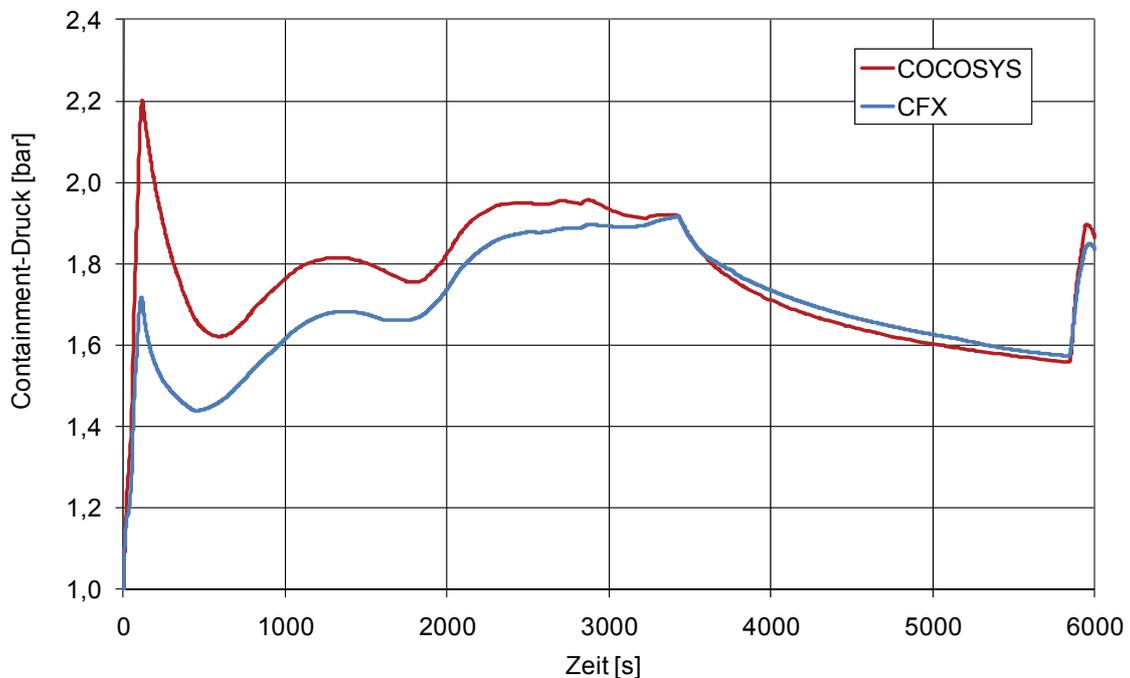


Abb. 9.3-9 Vergleich des Containment-Drucks

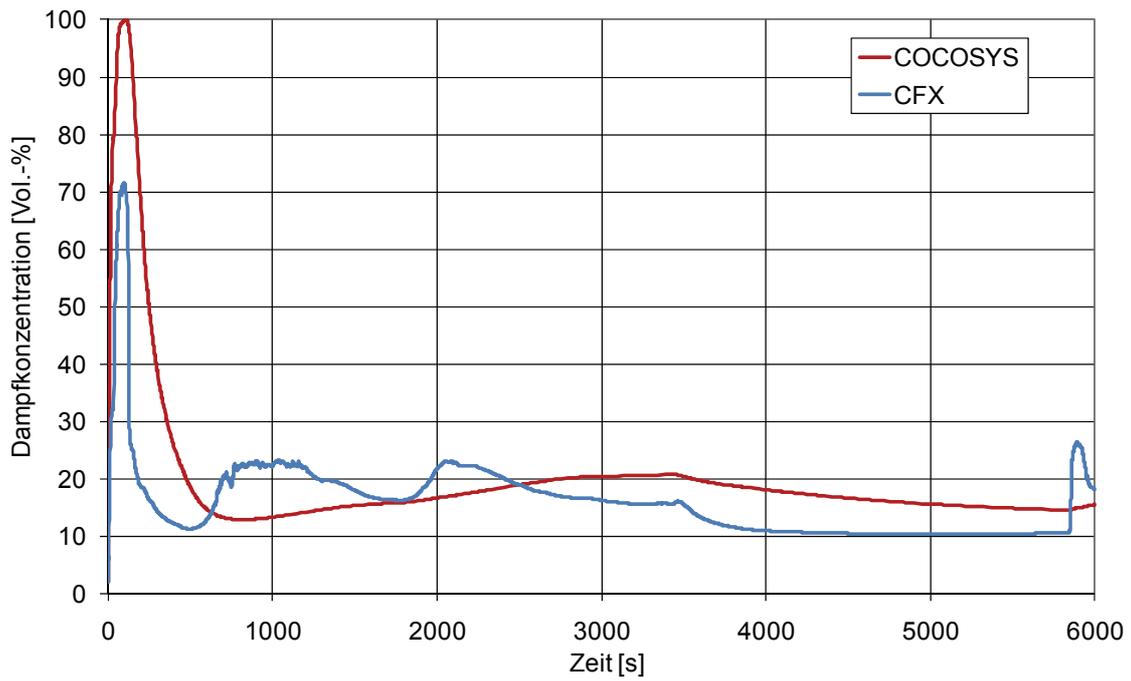


Abb. 9.3-10 Vergleich der mittleren Dampfkonzentration in Zone R08B

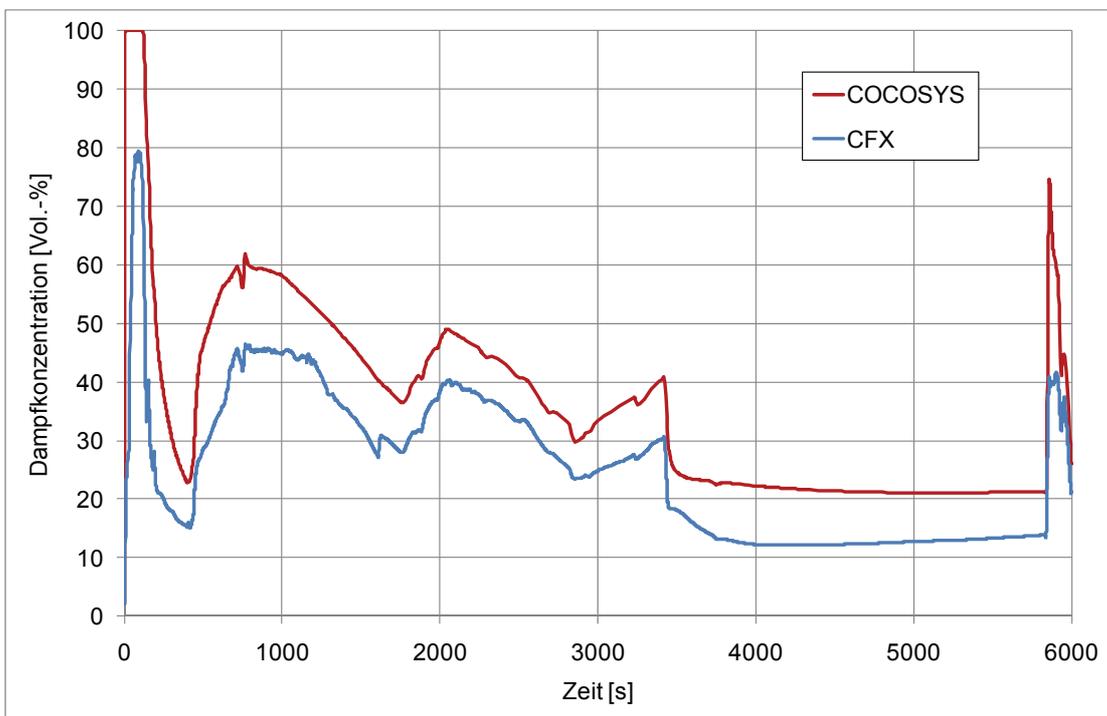


Abb. 9.3-11 Vergleich der mittleren Dampfkonzentration in Zone R09B (Leckraum)

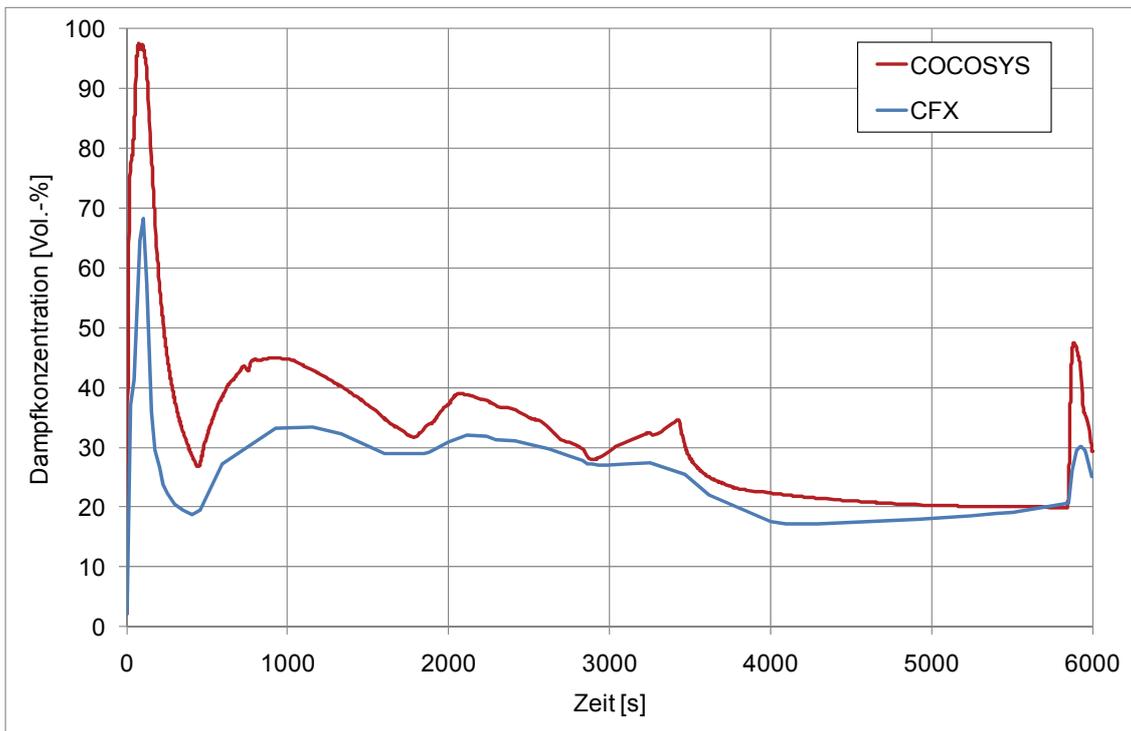


Abb. 9.3-12 Vergleich der mittleren Dampfkonzentration in Zone R10A

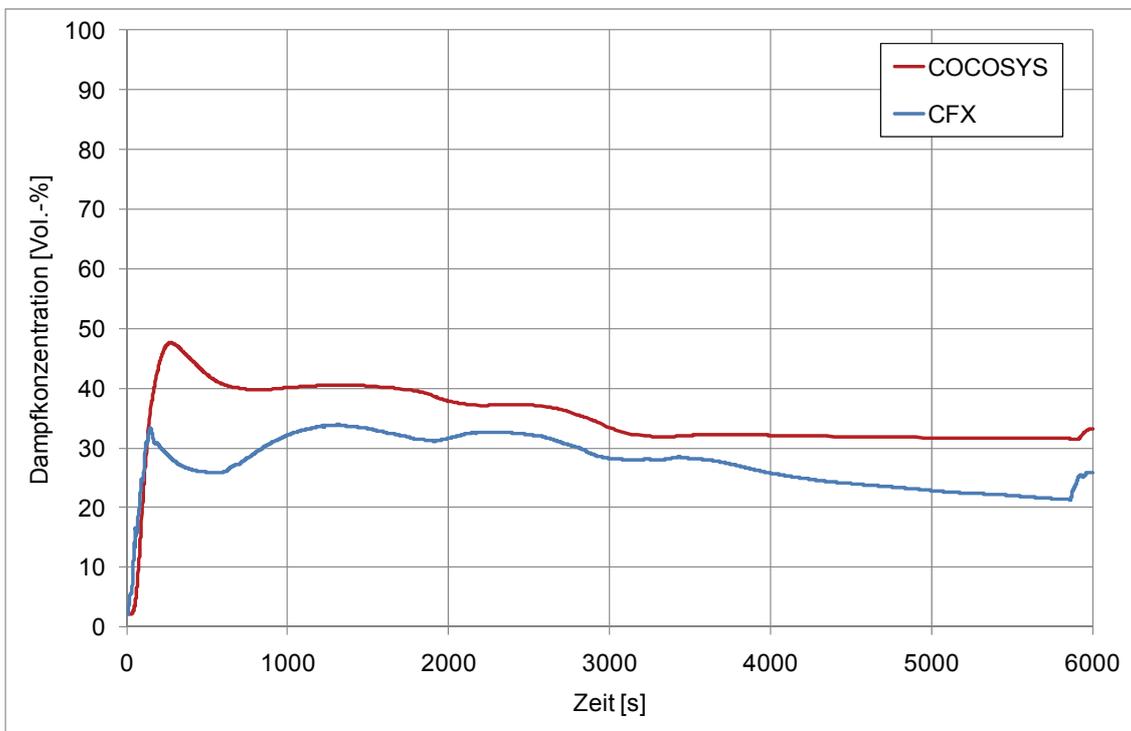


Abb. 9.3-13 Vergleich der mittleren Dampfkonzentration in Zone D50 (Dom)

In Abb. 9.3-14 bis Abb. 9.3-17 werden die mittleren Temperaturen von CFX und COCOSYS in den einzelnen Zonen miteinander verglichen. Auch hier stimmt der prinzipielle Kurvenverlauf qualitativ gut überein. Bei den Temperaturen zeigt sich, insbesondere bei kurzzeitigen starken Einströmungen von Dampf für den Zeitpunkt bei  $t = 100$  s oder H2 am Ende der Simulationsperiode bei  $t = 5800$  s eine deutliche Überhöhung der mit CFX berechneten Temperaturen im Vergleich zu den COCOSYS-Temperaturen. Die Temperaturunterschiede betragen punktuell bis zu  $150$  °C (Zonen R08B, R09B). Im sonstigen Verlauf kommt es jedoch zu einer deutlichen Annäherung der von CFX und von COCOSYS berechneten Temperaturen.

Als Ursache für den deutlichen Temperaturunterschied in der anfänglichen Einspeisephase (bei  $t = 100$  s) könnte eine unterschiedliche Modellierung des Wärmeübergangs in CFX und COCOSYS in Betracht kommen. Hierbei ist insbesondere zu unterscheiden, dass in CFX eine (erzwungene) konvektive Strömung an die Wandstrukturen explizit modelliert wird, während der konvektive Wärmetransport in COCOSYS durch Modellgleichungen approximiert wird (innerhalb einer COCOSYS-Zone findet keine Strömung statt). Der Wärmetransport in der CFX-Berechnung wird daher unter anderem von der Gitterauflösung, lokalen Turbulenzen sowie Strömungsimpulsen (beim Einströmvorgang) bestimmt. Der Wärmetransport in COCOSYS hängt hingegen von anderen Größen ab (z.B. charakteristische Länge,...).

Neben dem Wärmetransport *zur* Wand könnte auch die Modellierung des Wärmetransports *in* der Wand einen Einfluss auf die Zonentemperatur haben. Für den Wärmetransport in der Wand ist insbesondere die Netzauflösung in der Wand nahe der Kontaktfläche zur Atmosphäre ein entscheidender Faktor. mit einem ausreichend feinen Netz insbesondere in schlecht leitenden Betonwänden kann ein realistisches steiles Temperaturprofil in der Wand abgebildet werden. Dieser Aspekt wird weiter unten noch ausführlicher diskutiert, und wurde u. U. durch die unstrukturierten Gitter nicht ausreichend berücksichtigt.

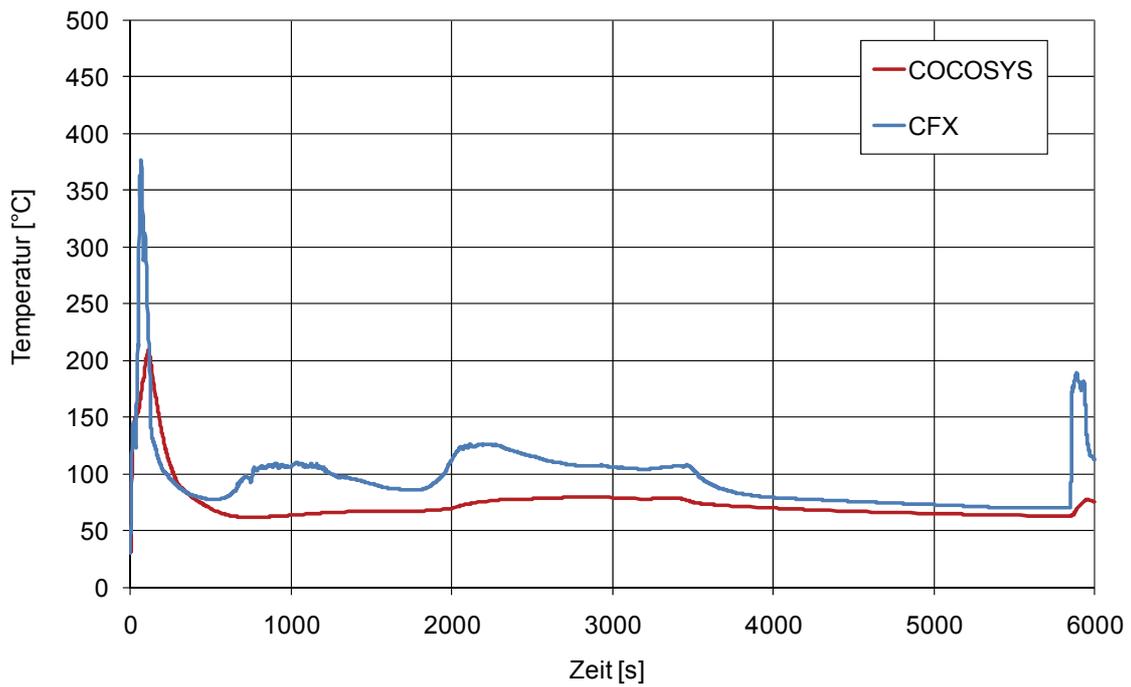


Abb. 9.3-14 Vergleich der mittleren Temperatur in Zone R08B

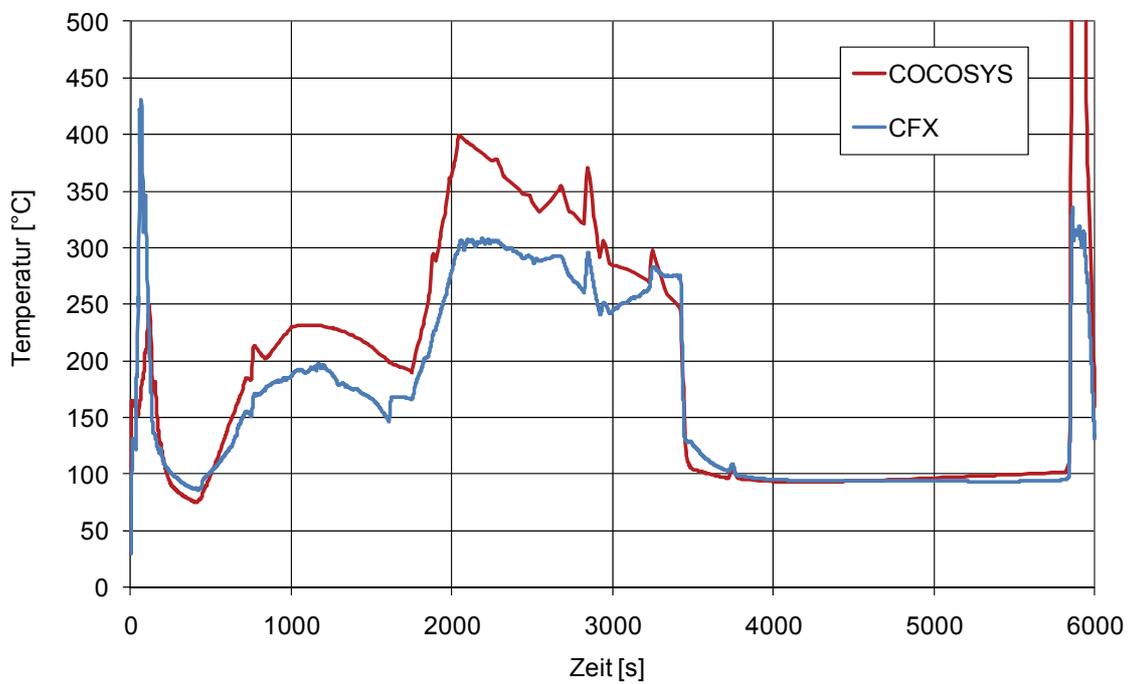


Abb. 9.3-15 Vergleich der mittleren Temperatur in Zone R09B (Leckraum)

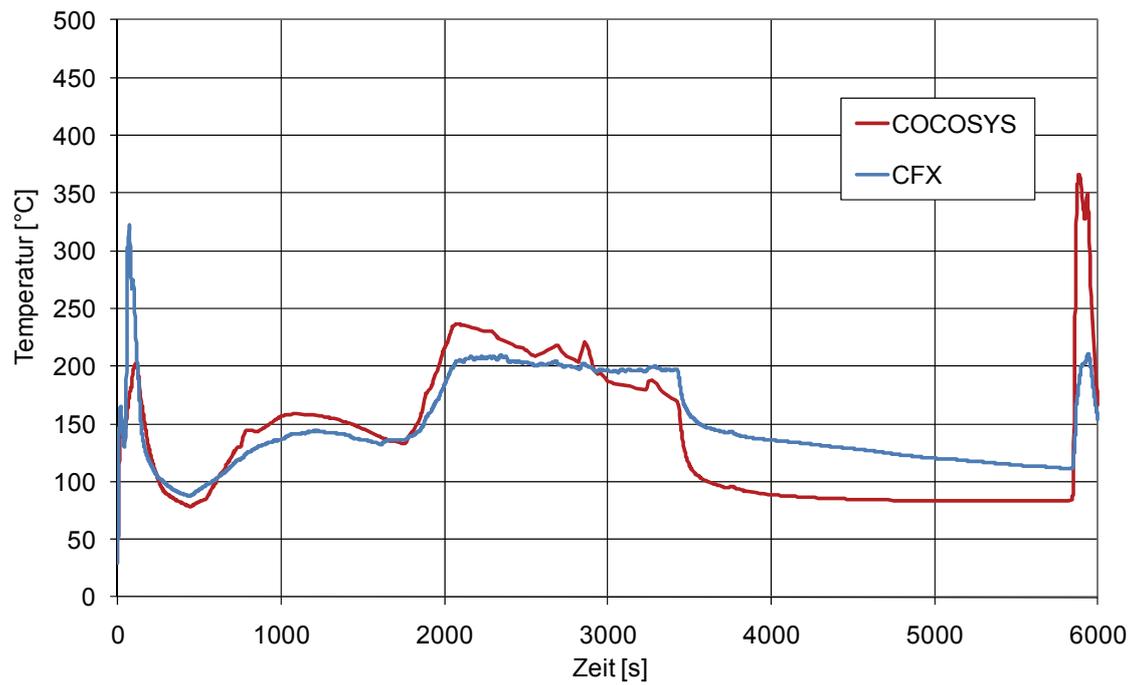


Abb. 9.3-16 Vergleich der mittleren Temperatur in Zone R10A

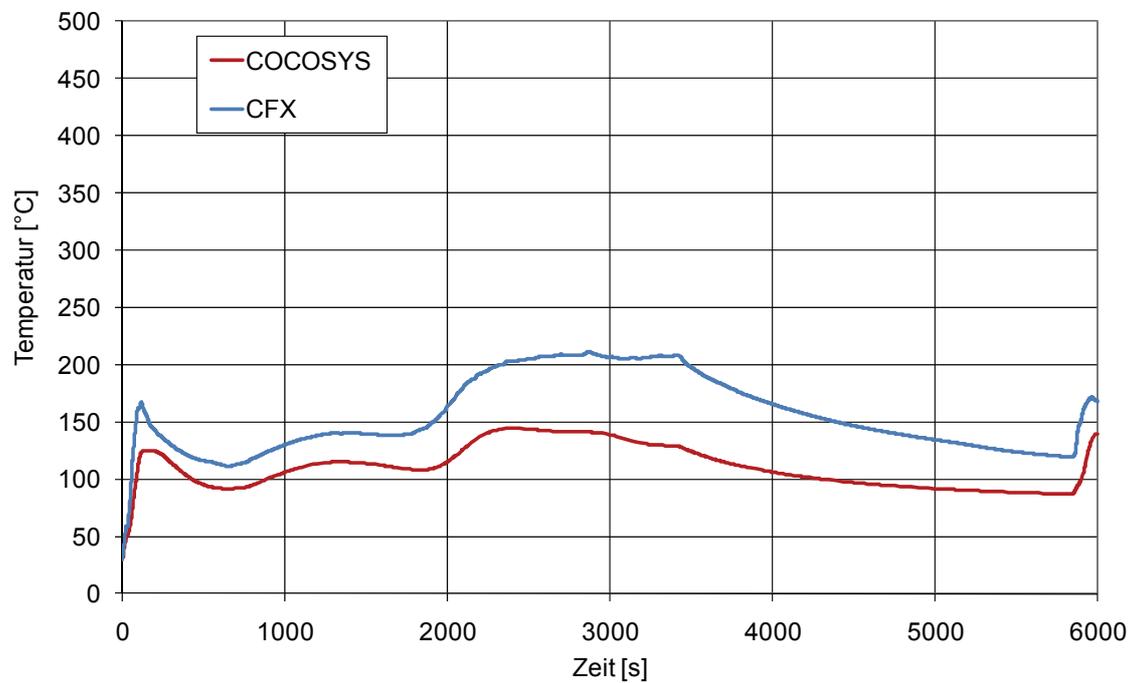


Abb. 9.3-17 Vergleich der mittleren Temperatur in Zone RD50 (Dom)

In Abb. 9.3-18 bis Abb. 9.3-21 werden die von CFX und COCOSYS berechneten Wasserstoffkonzentrationen in den unterschiedlichen Zonen miteinander verglichen. Hier findet sich eine verhältnismäßig gute Übereinstimmung. Dies verwundert insofern, da die Dampfkonzentrationen in CFS i.d.R um 5 vol.% - 10 vol.% unter den Werten von COCOSYS lagen. Insbesondere auch in der Leckzone R09B liegen die Maximalwerte der CFX-Berechnung etwas unterhalb der mit COCOSYS berechneten Maximalwerte (siehe Abb. 9.3-19). Im Bereich des Dom steigt die H<sub>2</sub>-Konzentration in CFX etwas früher an und erreicht zwischen t = 2500 s und t = 6000 s leicht erhöhte Werte gegenüber COCOSYS (siehe Abb. 9.3-21). Die hier beim Wasserstoff beobachteten Unterschiede könnten wieder durch eine unterschiedlich schnelle räumliche Ausbreitungsgeschwindigkeit in CFX und in COCOSYS sowie durch Unterschiede in der Dampfkonzentration erklärt werden.

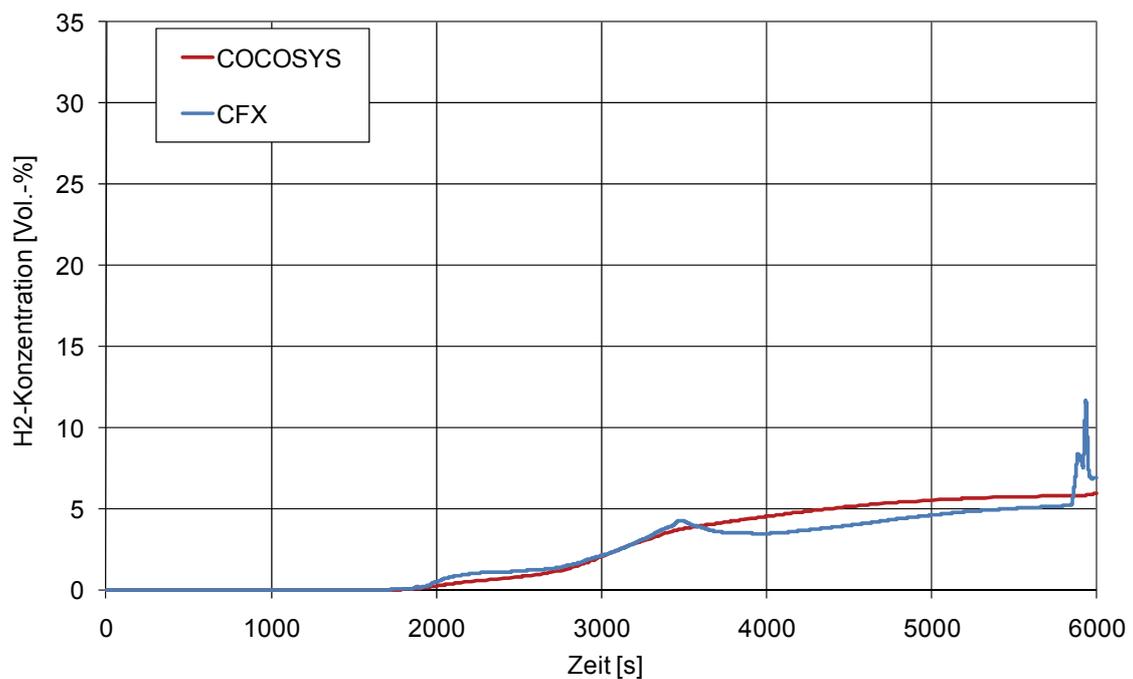


Abb. 9.3-18 Vergleich der mittleren H<sub>2</sub>-Konzentration in Zone R08B

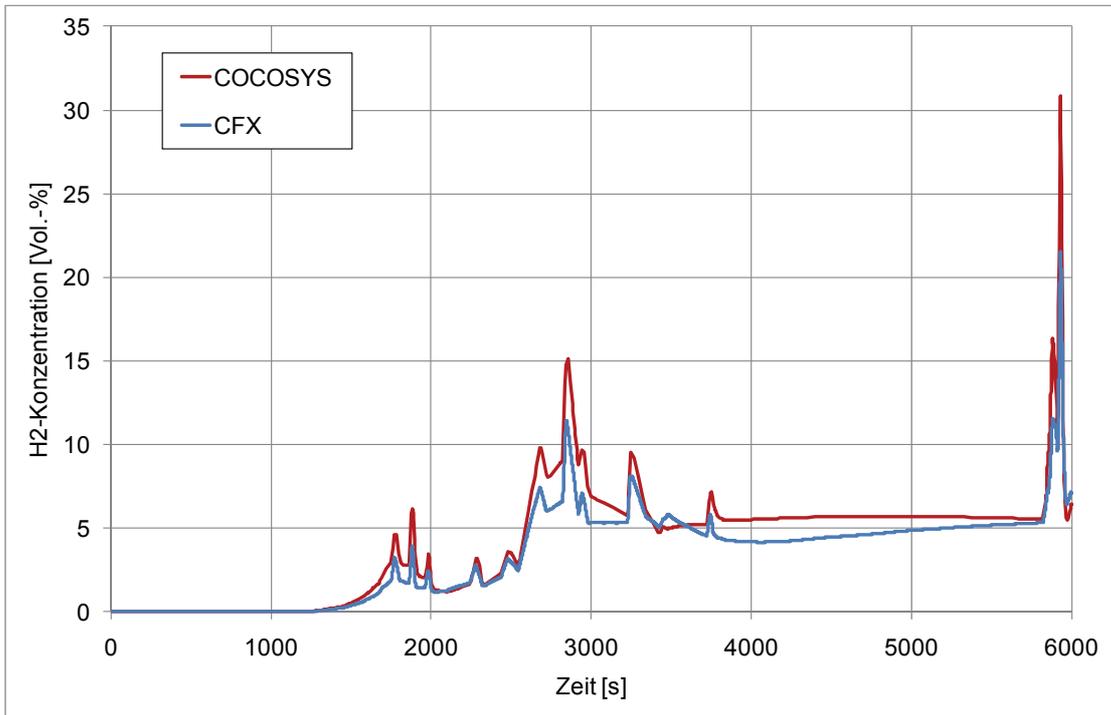


Abb. 9.3-19 Vergleich der mittleren H<sub>2</sub>-Konzentration in Zone R09B (Leckraum)

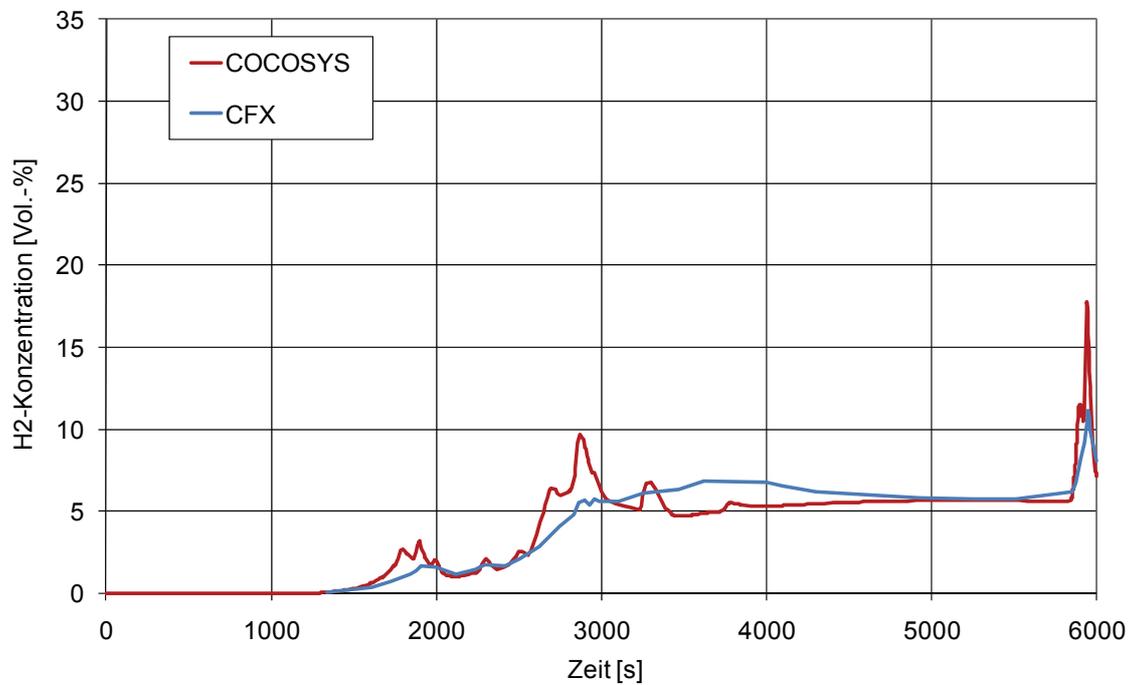


Abb. 9.3-20 Vergleich der mittleren H<sub>2</sub>-Konzentration in Zone R10A

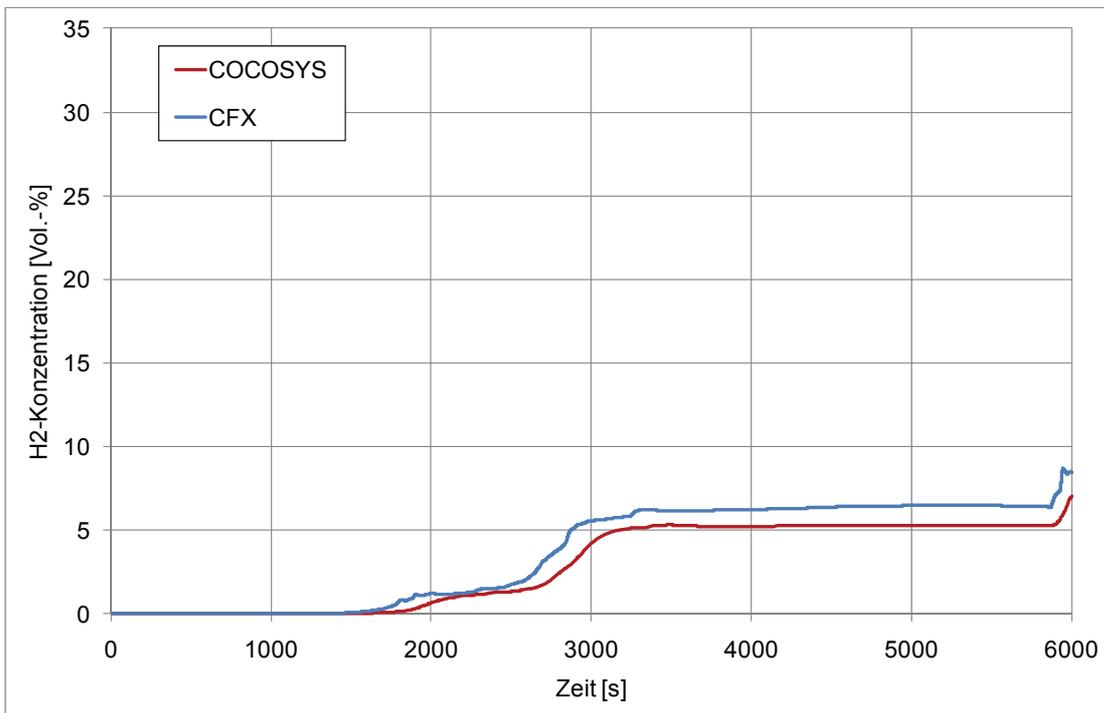


Abb. 9.3-21 Vergleich der mittleren H<sub>2</sub>-Konzentration in Zone D50 (Dom)

In Abb. 9.3-22 werden die berechneten integralen Dampfmassen miteinander verglichen. Es zeigen sich deutliche Unterschiede zwischen der CFX- und der COCOSYS-Berechnung. Dieses zeigt, dass sich die in CFX berechnete Kondensationsrate stark von der in COCOSYS berechneten Rate unterscheidet. Wie bereits oben diskutiert, kommen hierfür unterschiedliche Ursachen in Frage: Unterschiedlich schnelle räumliche Ausbreitung, Abweichung zwischen dem CFX- und dem COCOSYS-Kondensationsmodell, unzureichende Verfeinerung des CFX-Gitters in den Wänden nahe der Oberfläche oder weitere Modellunterschiede (Gas-, Diffusions- oder Turbulenzmodellierung). Diese einzelnen Einflussfaktoren werden weiter unten noch im Rahmen einer Parameterstudie an einem vereinfachten Beispiel analysiert.

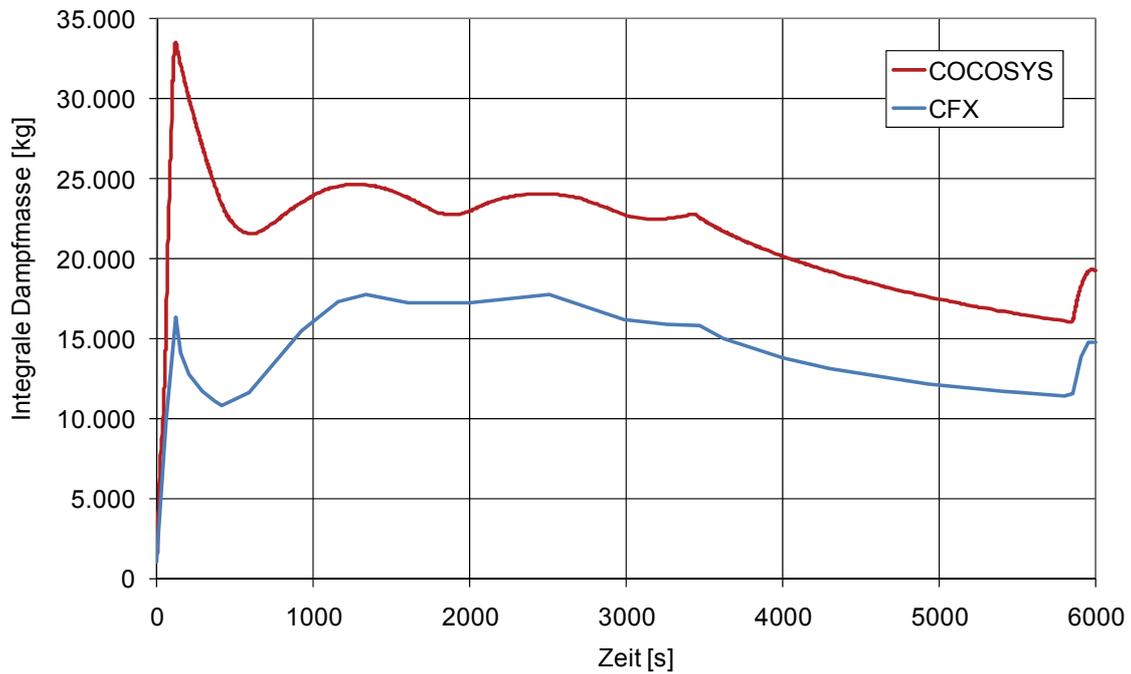


Abb. 9.3-22 Vergleich der integralen Dampfmasse im Containment

Abb. 9.3-23 zeigt den Vergleich der integralen  $H_2$ -Massen im Containment. Diese sollten theoretisch gleich sein, trotzdem gibt es hier kleinere Unterschiede, die möglicherweise auf einen Fehler in der Massenbilanz hinweisen. Solche Fehler können (in CFX) prinzipiell durch ein schärferes Konvergenzkriterium verringert werden. Da dieses jedoch zu einem drastischen Anstieg der ohnehin schon sehr hohen Berechnungsdauer führen würde, wurde hiervon abgesehen.

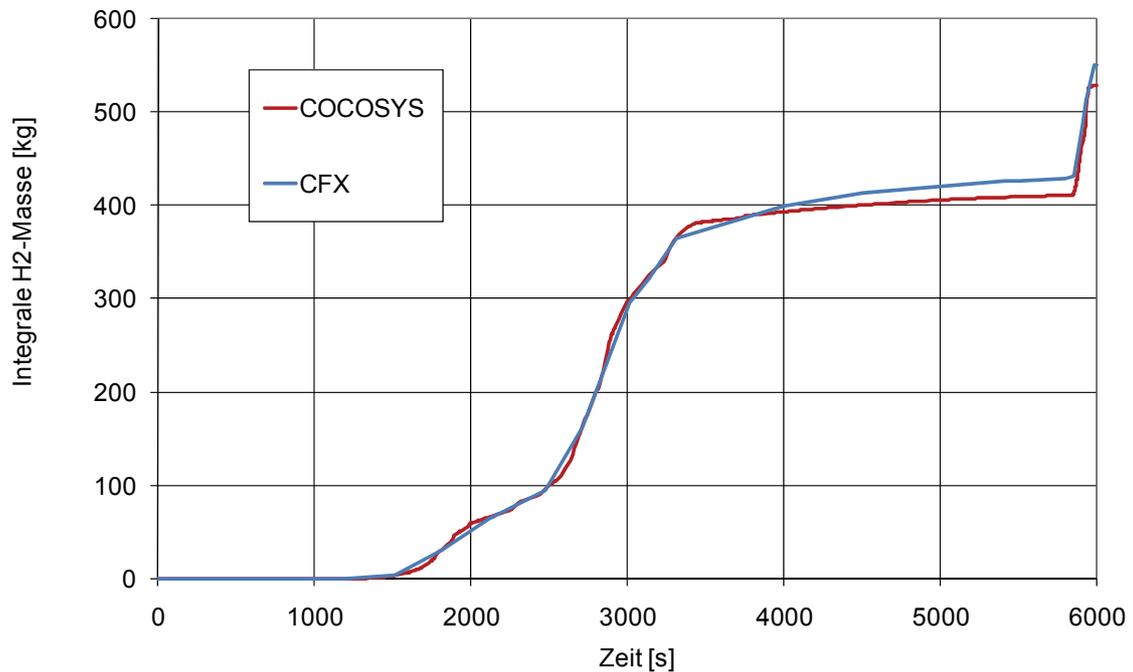


Abb. 9.3-23 Vergleich der integralen H<sub>2</sub>-Masse im Containment

Die Ergebnisse dieser ersten Analyse eines Teils eines Unfallszenariums mit CFX für eine KONVOI-Anlage sind grundsätzlich positiv. Weitere Detailanalysen folgen.

#### 9.3.4 Parameterstudie bzgl. des Kondensationsprozesses

Aus dem Vergleich zwischen der CFX- und der COCOSYS-Berechnung ist klar geworden, dass es bei dieser Rechnung noch zu deutlichen Unterschieden in der jeweils berechneten Kondensationsrate kommt. Bei den bisher analysierten Versuchsnachrechnungen (z.B. TH-2, VANAM) konnte ein derartiger Unterschied zwischen der CFX- und der COCOSYS-Berechnung einerseits, und dem Experiment andererseits nicht beobachtet werden. Da dieser Vorgang aber deutlichen Einfluss auf alle Zielgrößen (Druck, Dampf/H<sub>2</sub>-Konzentration,...) hat, wurde er in dieser Parameterstudie vertieft analysiert.

Hierzu wurde anhand der Beispielgeometrie eines einzelnen Raumes einer Parameterstudie durchgeführt, um die Stärke einzelner Einflussparameter (Kondensationsmodell, CFX-Gitterfeinheit, Gas/Diffusions/Turbulenzmodellierung, Energiegleichung) beurteilen zu können. Die vereinfachte Beispielgeometrie wurde gewählt, weil der Rechen-

zeitaufwand wesentlich geringer ist, als bei der Analyse des gesamten Containments. Später sollen die Ergebnisse dieser Parameterstudie dann in eine Verbesserung der Containmentrechnung münden.

In Abb. 9.3-24 sind die Geometrie und die Einströmbedingungen des vereinfachten Testbeispiels dargestellt. Bei der Geometrie handelt es sich um einen 8 m x 8 m x 8 m großen würfelförmigen Raum, der von allen Seiten von einer 1 m dicken Betonwand umgeben ist. Der Raum enthält zunächst (trockene) Luft. Durch einen seitlichen Einlass strömt Wasserdampf mit hoher Geschwindigkeit in den Raum ein, prallt gegen senkrechte Betonwand des Raumes und verteilt sich dann im gesamten Volumen. Dieses entspricht in etwa den Strömungsbedingungen im Einspeiseraum bei der Containmentrechnung. In

Tab. 9.3-2 sind die Start- und Randbedingungen für das Testbeispiel dargestellt und in Tab. 9.3-3 finden sich die hier untersuchten Parametervariationen.

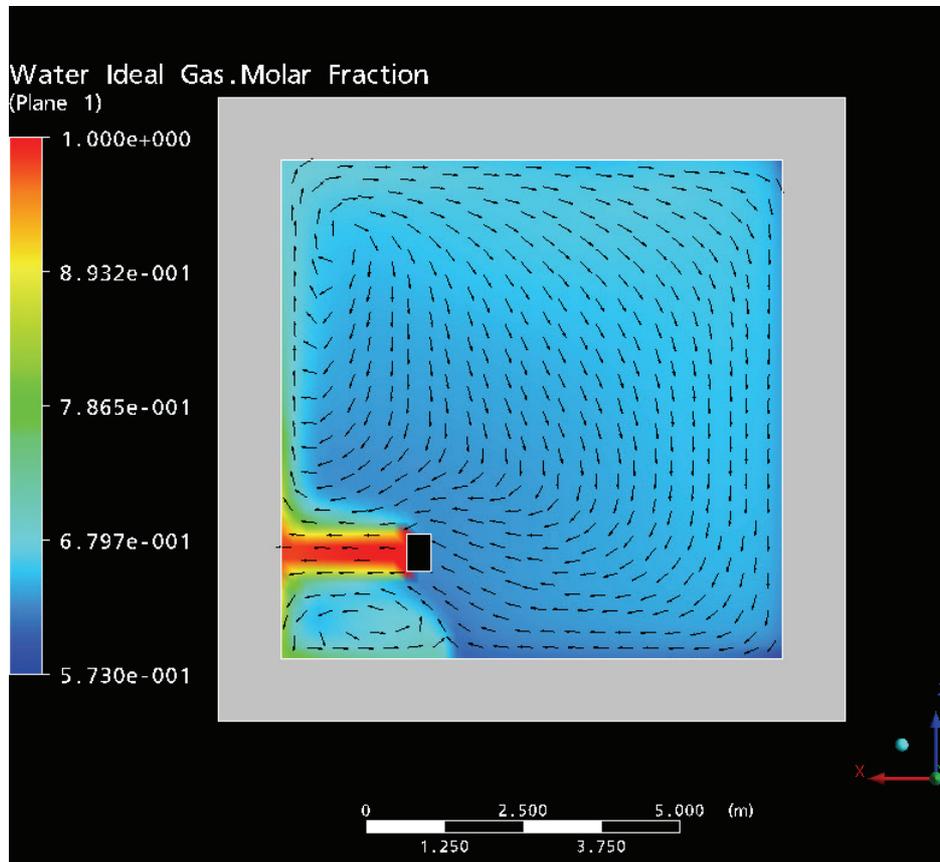


Abb. 9.3-24 Einströmbedingungen beim Testbeispiel

Tab. 9.3-2 Start- und Randbedingungen des Testbeispiels

<b>Startdruck</b>	1 bar	
<b>Starttemperatur (Wand und Atmosphäre)</b>	25 °C	
<b>Dampftemperatur</b>	250 °C	
<b>Massenstrom Dampf</b>	Zeit [s]	Dampfmasse [kg/s]
	0	0
	1	10
	150	10
	151	0

Tab. 9.3-3 Parametervariation des Testbeispiels

<b>Name</b>	<b>Wandkond.</b>	<b>Volumenkond.</b>	<b>Wandgitter</b>	<b>Gasgitter</b>	<b>Gasmodell</b>
Rechnung 01	Aus	Aus	Grob: 0,2 m	Grob: 0,2 m	Ideal
Rechnung 02	Ein	Ein	Grob: 0,2 m	Grob: 0,2 m	Ideal
Rechnung 03	Ein	Ein	Fein: 0,005 m	Grob: 0,2 m	Ideal
Rechnung 04	Ein	Ein	Grob: 0,2 m	Fein: 0,02 m	Ideal
Rechnung 05	Ein	Ein	Fein: 0,005 m	Fein: 0,02 m	Ideal
Rechnung 06	Ein	Aus	Fein: 0,005 m	Grob: 0,2 m	Ideal
Rechnung 07	Ein	Ein	Fein: 0,005 m	Grob: 0,2 m	Redl.-Kwong
Rechnung 08	Ein	Ein	Fein: 0,005 m	Grob: 0,2 m	Redl.-Kwong
Rechnung 09	Ein	Ein	Fein: 0,005 m	Grob: 0,2 m	Redl.-Kwong
Rechnung 10	Aus	Aus	Ohne	Grob: 0,2 m	Ideal
Rechnung 11	Aus	Aus	Ohne	Grob: 0,2 m	Ideal
Rechnung 12	Aus	Aus	Ohne	Grob: 0,2 m	Ideal
Rechnung 13	Aus	Aus	Ohne	Grob: 0,2 m	Ideal
Rechnung 14	Ein	Ein	Fein: 0,005 m	Fein: 0,02 m	Ideal
Rechnung 15	Aus	Aus	Fein: 0,005 m	Fein: 0,02 m	Ideal
<b>Name</b>	<b>Diffusion</b>	<b>Turbulenzmodell</b>	<b>Heat Transfer</b>	<b>Inflow</b>	
Rechnung 01	Ohne	SST	Thermal energy	Total temperature	
Rechnung 02	Ohne	SST	Thermal energy	Total temperature	
Rechnung 03	Ohne	SST	Thermal energy	Total temperature	
Rechnung 04	Ohne	SST	Thermal energy	Total temperature	
Rechnung 05	Ohne	SST	Thermal energy	Total temperature	
Rechnung 06	Ohne	SST	Thermal energy	Total temperature	
Rechnung 07	Ohne	SST	Thermal energy	Total temperature	
Rechnung 08	Mit	SST	Thermal energy	Total temperature	
Rechnung 09	Mit	k-epsilon	Thermal energy	Total temperature	
Rechnung 10	Ohne	SST	Thermal energy	Total temperature	
Rechnung 11	Ohne	SST	Thermal energy	Static temperature	
Rechnung 12	Ohne	SST	Total energy	Total temperature	
Rechnung 13	Ohne	SST	Total energy	Static temperature	
Rechnung 14	Ohne	SST	Total energy	Total temperature	
Rechnung 15	Ohne	SST	Total energy	Static temperature	

In Abb. 9.3-25 ist der Einfluss der Parametervariationen auf den Druckverlauf im Testbeispiel dargestellt. Es zeigt sich, dass insbesondere eine Verfeinerung des Wandgitters in der Nähe der Oberfläche sowie die Wahl der Energiegleichung (Heat transfer: Thermal/total energy) einen sehr deutlichen Einfluss auf den Druckverlauf hat (verglei-

che hierzu die Kurven von Rechnung 02 mit Rechnung 03, bzw. Rechnung 05 mit Rechnung 14).

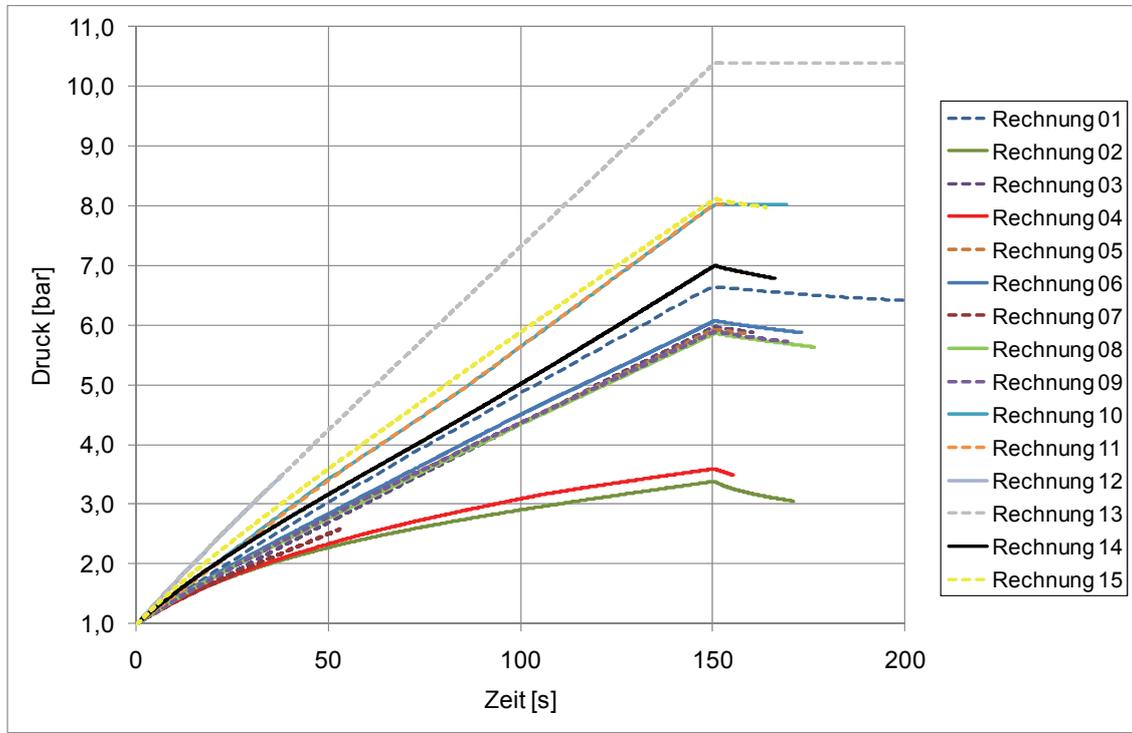


Abb. 9.3-25 Einfluss der Parametervariation auf den Druckverlauf

Um den Einfluss der unterschiedlichen Berechnungsparameter qualitativ miteinander vergleichen zu können, wurde die durch die Parametervariation herbeigeführte Druckdifferenz an einem festen Zeitpunkt (bei  $t = 150$  s) berechnet. Diese Differenz ist in Abb. 9.3-26 dargestellt. Das Einschalten des Kondensationsmodells führte also in diesem Beispiel zu einem Absinken des Drucks um 3,26 bar bei  $t = 150$  s. Eine Verfeinerung des Wandgitters erhöhte den Druck um 2,45 bar, während eine Verfeinerung des Gasgitters eine Erhöhung des Drucks um 0,09 bar bewirkte. Das Wandgitter hat also einen starken Einfluss auf den Druck, während das Gasgitter diesen wenig beeinflusst. Auch das Gasmodell (ideal/Redlich-Kwong), der Diffusionskoeffizient und das Turbulenzmodell (SST/ $k-\epsilon$ ) haben einen, wenn auch eher geringen Einfluss auf den Druck. Weiterhin hat auch die Wahl der Energiegleichung einen deutlichen Einfluss. Das Umschalten des Wärmetransports von „thermal energy“ auf „total energy“ bewirkt einen Anstieg des Drucks um 1,06 bar. „Total energy“ meint hierbei die Berücksichtigung der gesamten Enthalpie  $h_{\text{tot}} = h + \frac{1}{2} U^2$  in der Energiegleichung, während bei der Option „Thermal energy“ die statische Enthalpie und nicht die Bewegungsenergie berücksich-

tigt wird. „Thermal energy“ ist damit eine Approximation der „Total energy“-Gleichung, die bei niedrigen Geschwindigkeiten (kleines U) gut übereinstimmt und numerisch einfacher zu lösen ist. Da in dem vorliegenden Beispiel aber mit hohen Geschwindigkeiten gerechnet wird, ist es hier angebracht, die Option „Total energy“ zu wählen.

Einen ähnlichen Einfluss wie beim Druck haben die genannten Berechnungsparameter auch auf die in CFX berechnete integrale Dampfmasse (siehe Abb. 9.3-27). Und auch beim integralen Wärmestrom zeigt die Auflösung des Wandgitters und der Energiegleichung den stärksten Einfluss auf die Berechnungsergebnisse (siehe Abb. 9.3-28).

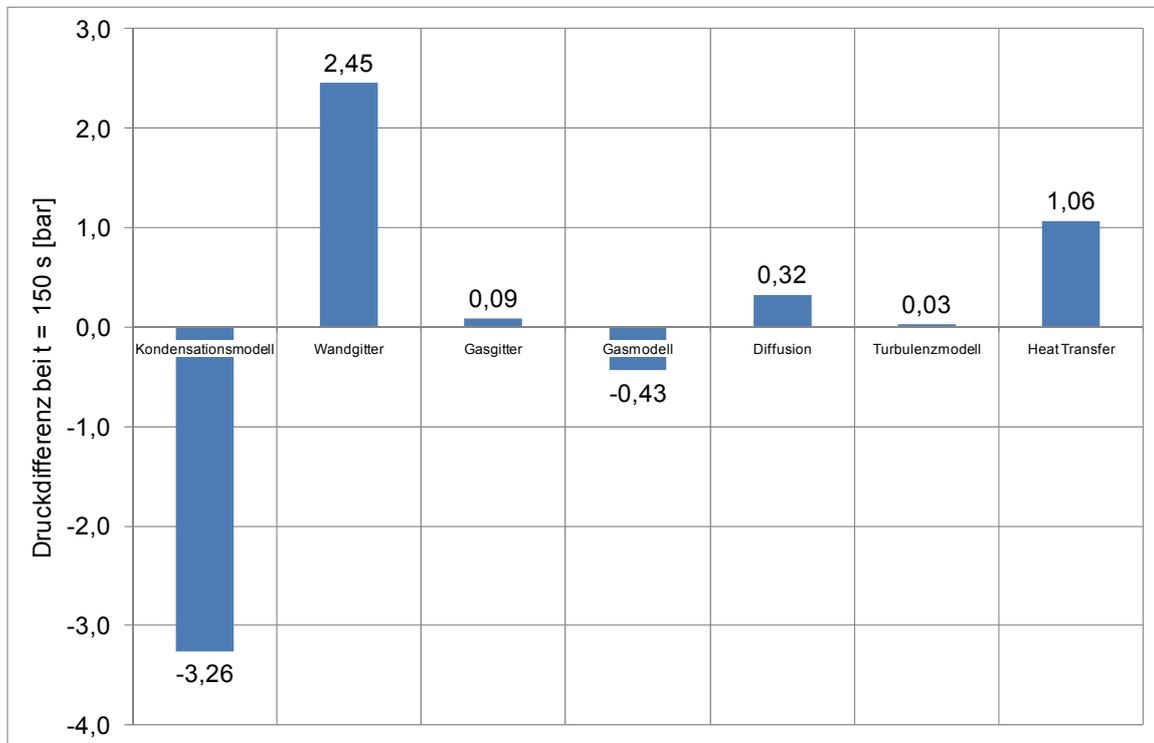


Abb. 9.3-26 Einfluss der Berechnungsparameter auf den Druck

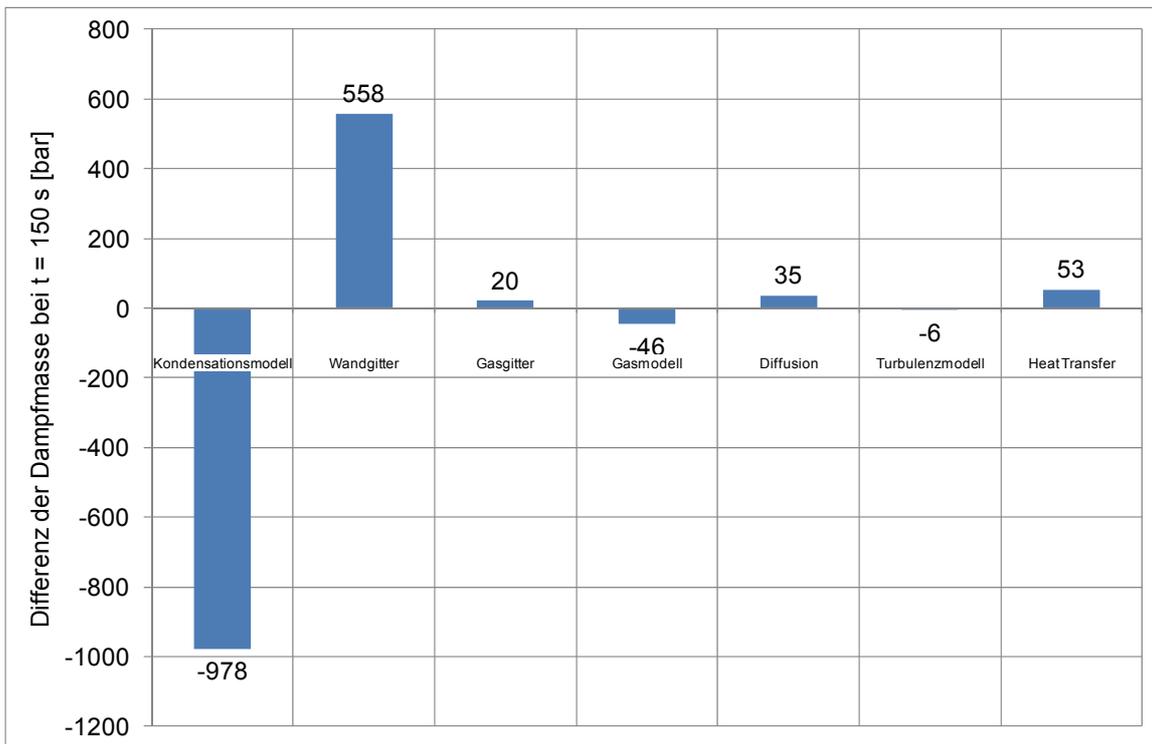


Abb. 9.3-27 Einfluss der Berechnungsparameter auf die integrale Dampfmasse

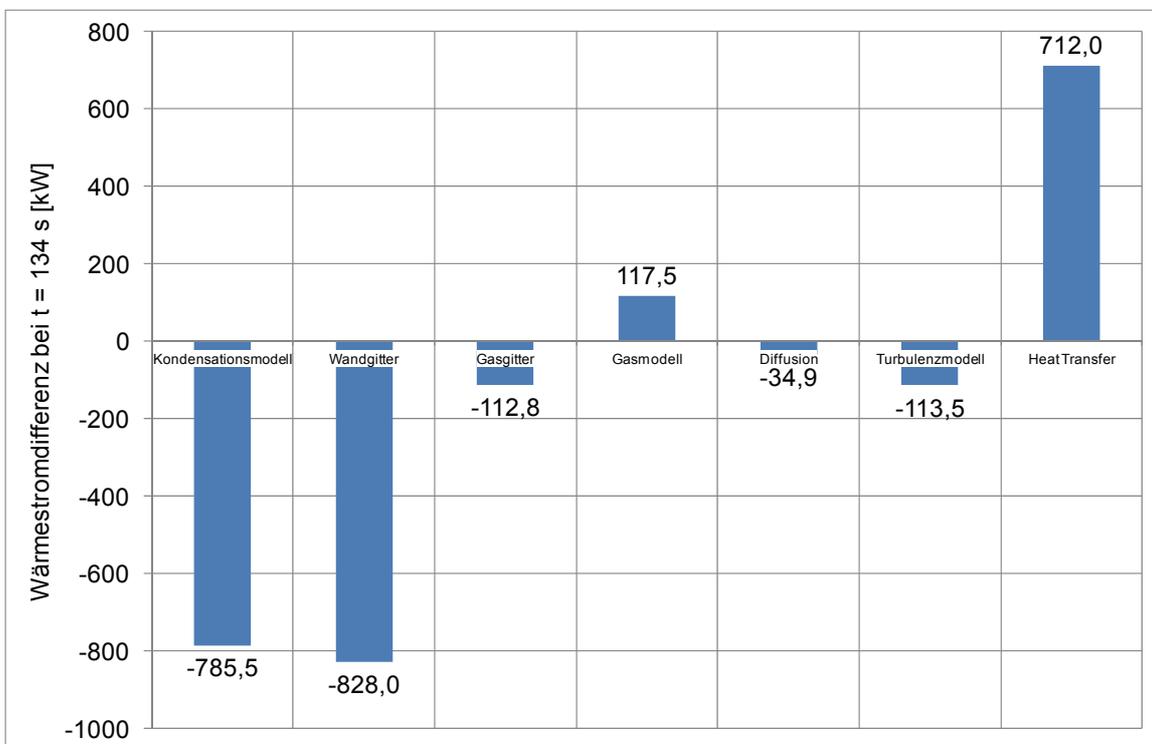


Abb. 9.3-28 Einfluss der Berechnungsparameter auf den integralen Wärmestrom

### 9.3.5 Parameterstudie - Vergleich mit COCOSYS

Beim Vergleich der Berechnungsergebnisse für dieses Testbeispiel mit COCOSYS-Berechnungen ergibt sich zunächst für Berechnung 13 (ohne Wärmeübergang und ohne Kondensation) eine sehr gute Übereinstimmung von berechneter integraler Dampfmasse, Druck, Temperatur und Dampfkonzentration.

Bei der Betrachtung von Rechnung 15 (mit Wärmeübergang und ohne Kondensation) fällt jedoch ein wichtiger Unterschied zwischen CFX und COCOSYS auf: Der Wärmestrom in die Wand wird von CFX deutlich höher eingeschätzt als von COCOSYS (siehe Abb. 9.3-29, Wärmestrom alt). Ursache hierfür ist vermutlich das Anprallen des Dampfstrahles an die Wand, das in CFX explizit simuliert wird, in COCOSYS jedoch nicht. Hierdurch kann in CFX ein höherer Wärmestrom übertragen werden. Dieses führt dann auch zu einem geringeren Druck in der CFX-Berechnung (siehe Abb. 9.3-30). Auch die Gastemperaturen sind in der CFX-Berechnung aufgrund des höheren Wärmestroms niedriger (siehe Abb. 9.3-31).

In COCOSYS ist es möglich, den Wärmestrom in die Wand fest vorzugeben, so dass der zeitliche Verlauf mit dem in CFX übereinstimmt. Bei Anpassung des Wärmestroms in der COCOSYS-Berechnung an die CFX-Werte (Abb. 9.3-29, Wärmestrom neu) ergibt sich auch für den Druck und die Temperaturen ein gleicher Verlauf wie in CFX (Abb. 9.3-30/Abb. 9.3-31, Wärmestrom neu).

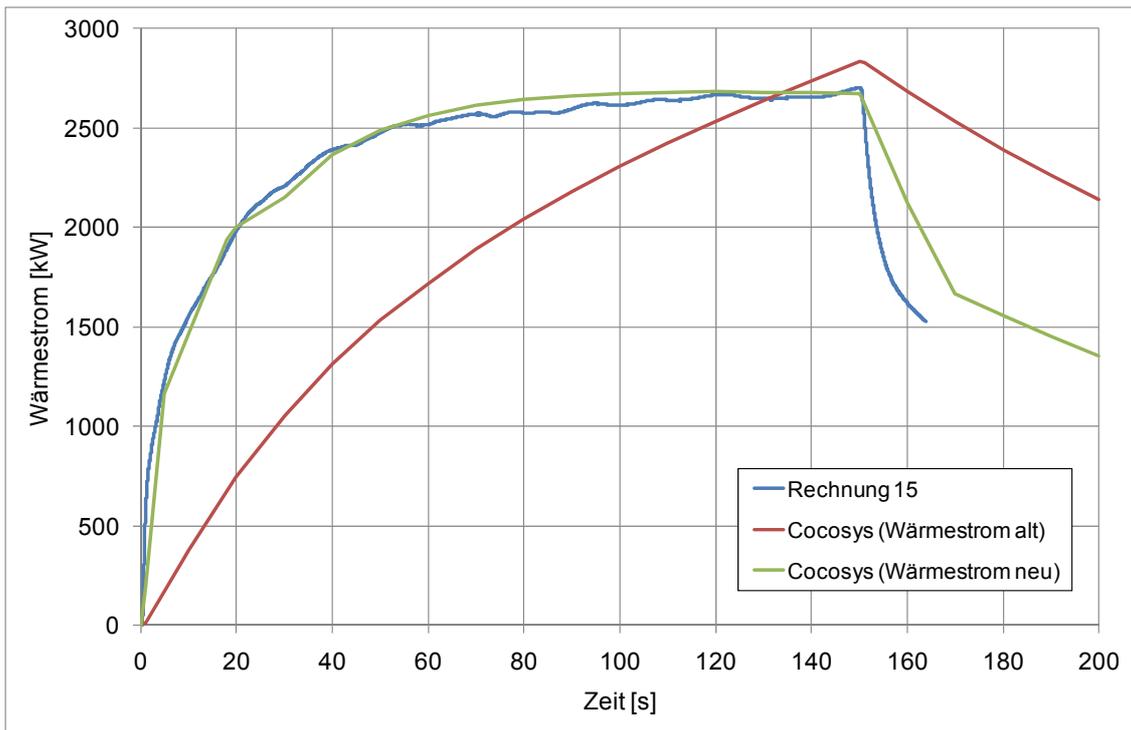


Abb. 9.3-29 Vergleich des integralen Wärmestroms in die Betonwand im Testbeispiel

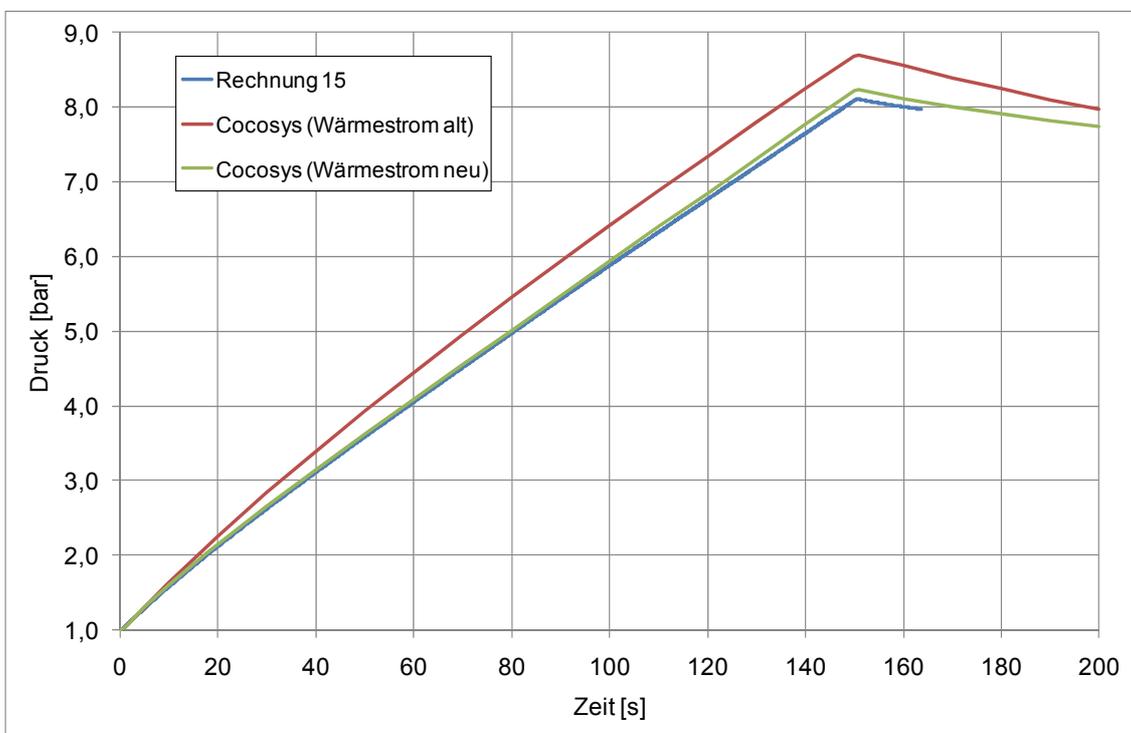


Abb. 9.3-30 Vergleich des Druckverlaufs im Testbeispiel

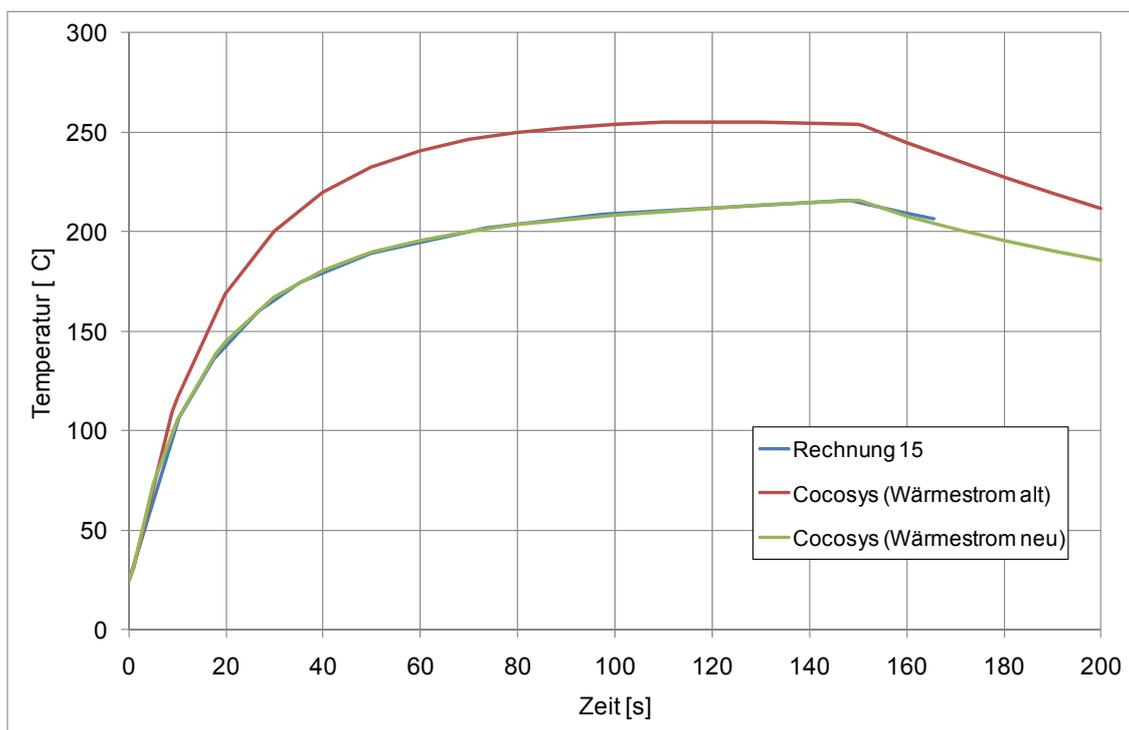


Abb. 9.3-31 Vergleich der Gastemperaturen im Testbeispiel

Darüber hinaus gibt es noch einen Unterschied zwischen CFX und COCOSYS, der auf der Art der Kondensationsmodellierung beruht. Dieses zeigt sich, wenn man die Ergebnisse von Berechnung 14 (mit Wärmestrom und mit Kondensation) mit COCOSYS-Ergebnissen (Wärmestrom neu, mit Kondensation) vergleicht. Ursache hierfür ist vermutlich die grundlegend unterschiedliche Modellierung der Kondensation: In CFX wird der turbulente Transport von Dampf zur Wand explizit simuliert, während dieser Vorgang in COCOSYS durch eine Korrelation approximiert wird.

### 9.3.6 Verfeinerung des CFX-Wandgitters im KONVOI-Containment

Die Durchführung und Auswertung des Testbeispiels hat gezeigt, dass es insbesondere eine deutliche Abhängigkeit des berechneten Drucks und der berechneten Kondensatmenge von der Auflösung des Gitters in den Betonwänden in der Nähe der Wandoberfläche gibt, die in der bisherigen KONVOI-Rechnung noch nicht ausreichend berücksichtigt wurde. Aus diesem Grund wurde damit begonnen, die Betonwände des Containments in der Nähe der Beton/Gas-Grenzfläche zu verfeinern. Bei der Energiegleichung war ohnehin schon „total energy“ für die bisherigen Rechnungen verwendet worden.

Abb. 9.3-32 zeigt wie das Gitter verfeinert wurde. Unmittelbar an der Grenzschicht gibt es eine sehr feine Wandschicht mit einer Dicke von wenigen Millimetern. In Abb. 9.3-33 sind die bei Abschluss des Projektes bereits verfeinerten Wandstrukturen im Containmentgitter dargestellt. Es handelt sich zunächst um den Einspeiseraum sowie um weitere Wandflächen, die sich in der bisherigen Containmentrechnung durch einen hohen Wärmestrom in die Wand ausgezeichnet haben. Da der Arbeitsaufwand der manuellen Wandverfeinerung jedoch sehr hoch ist, konnte bisher ein Teil und nicht alle Wandflächen im Containment im Rahmen der im Projekt verbliebenen Zeit verfeinert werden.

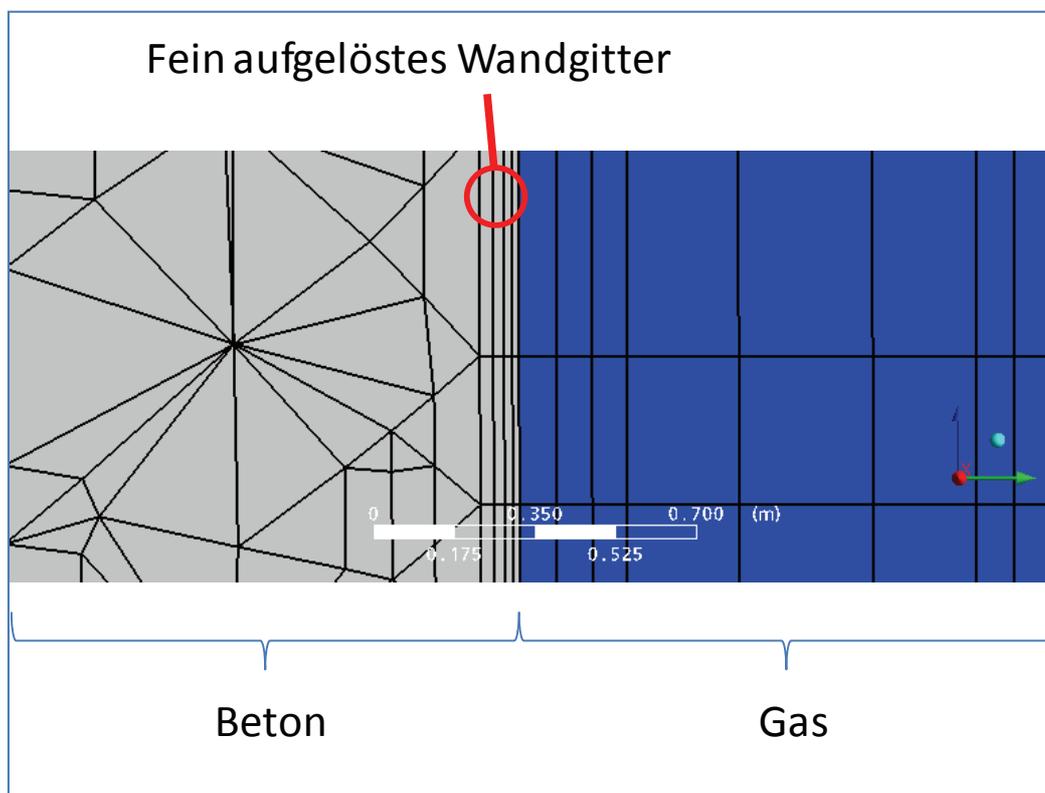


Abb. 9.3-32 Links: Unstrukturiertes Betongitter (grob), Mitte: Feiner aufgelöstes Wandgitter, Rechts: Strukturiertes Gasgitter

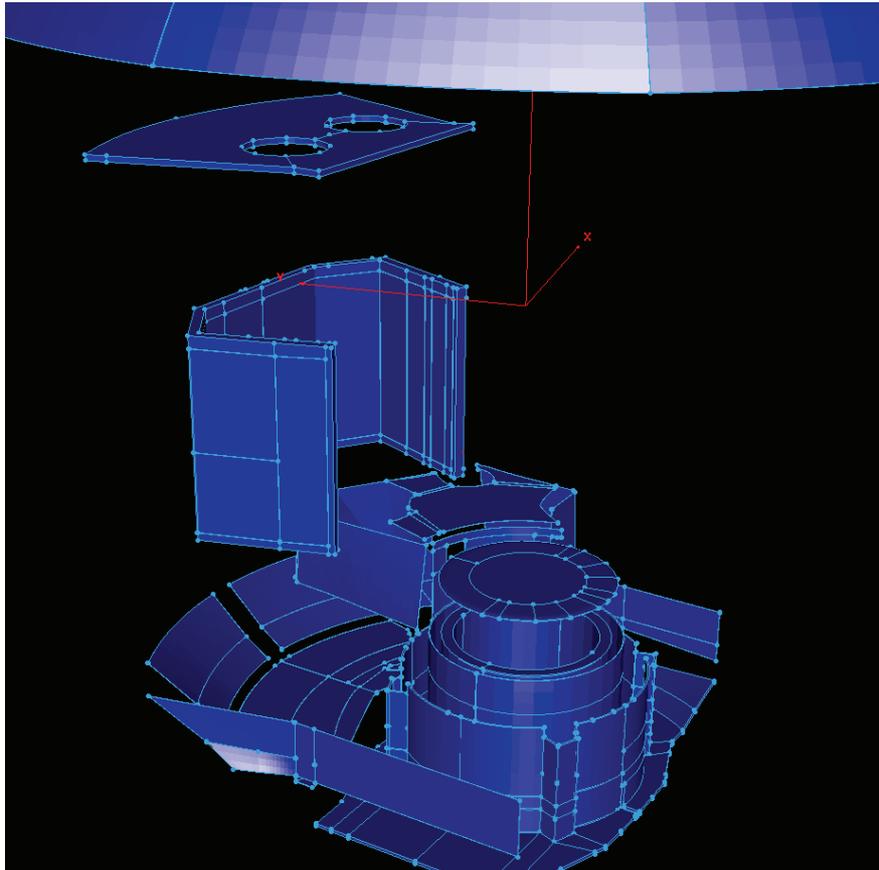


Abb. 9.3-33 Bereiche mit verfeinerter Wandstruktur im Containmentgitter

In Abb. 9.3-39 ist dargestellt, welchen Einfluss diese (noch unvollständige) Wandverfeinerung auf den mit CFX berechneten Druck im Containment jetzt bereits hat. Hierbei wird der Zeitbereich von 0 bis 1000 s dargestellt. Es zeigt sich auch hier, dass mit zunehmender Verfeinerung einzelner Wandflächen der durch CFX berechnete Druck ansteigt und sich dem COCOSYS-Druck annähert. Hierdurch lässt sich also zu mindestens ein Teil der Unterschiede zwischen CFX und COCOSYS erklären. Vergleichbar zum Druck ändert sich auch die integrale Dampfmasse im Containment durch die Wandverfeinerung.

Abb. 9.3-35 zeigt, dass die oben genannte Verfeinerung der Wandstrukturen bislang einen geringen Einfluss auf die mittlere Temperatur in Zone R09B (Leckzone) hat. Zwar verringert sich die Maximaltemperatur in der CFX-Berechnung geringfügig, dieses reicht jedoch bei weitem nicht aus, um den verbleibenden deutlichen Unterschied zwischen der CFX-Berechnung und der COCOSYS-Berechnung an dieser Stelle zu erklären. Gründe für die unterschiedlichen Temperaturen, Konzentrationen, etc. im

Leckraum können in der detaillierten Modellierung des Dampfstrahls der Einspeisung aus dem Leck liegen, der gegen eine Wand strömt.

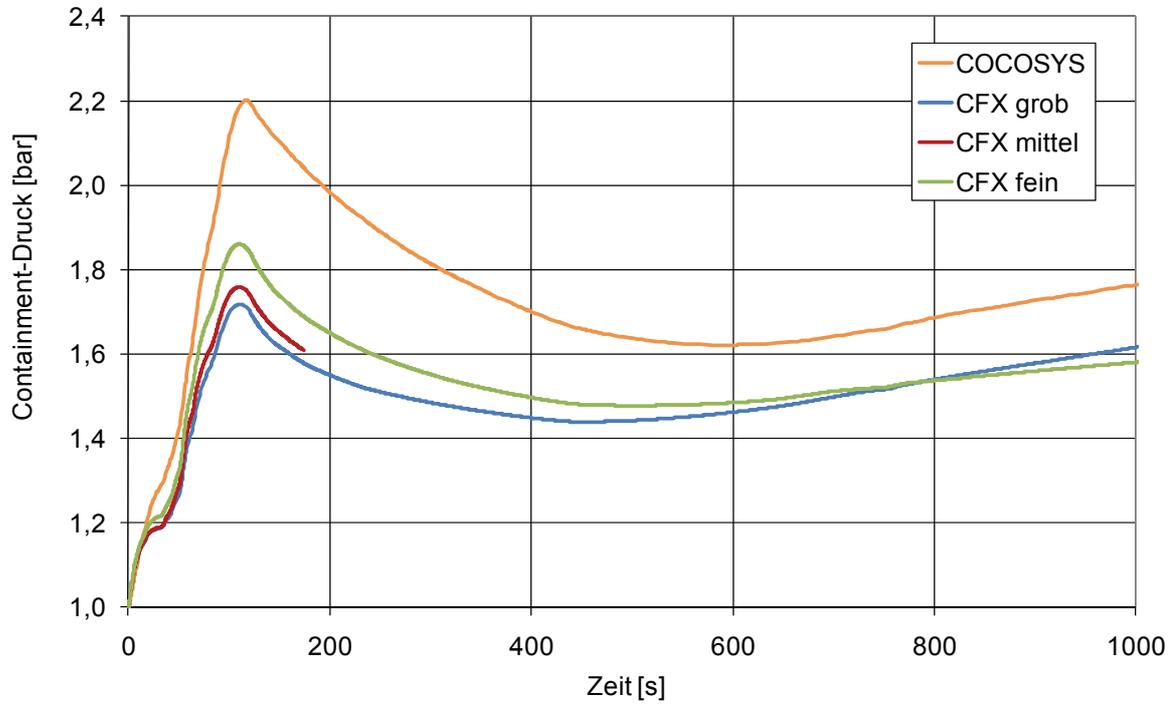


Abb. 9.3-34 Einfluss der Wandverfeinerung auf den Druck in der Containment-Berechnung

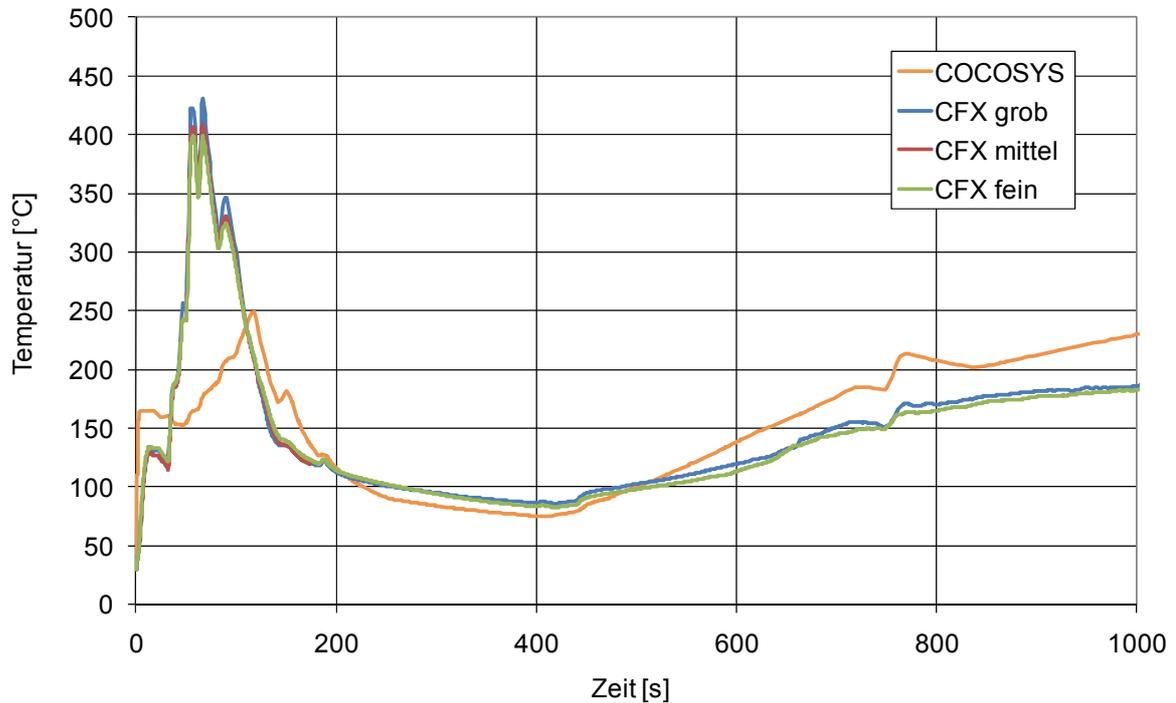


Abb. 9.3-35 Einfluss der Wandverfeinerung auf die mittlere Temperatur in Zone R09B (Einspeisezone)

Auf die in Abb. 9.3-36 dargestellte lokale Dampfkonzentration (in Zone D50) hat die Wandgitterverfeinerung einen (wenn auch geringen) Einfluss. Insgesamt scheint die Verfeinerung der Wandstrukturen zu einer Annäherung der CFX-Ergebnisse an die COCOSYS-Berechnung zu führen. Dieser Einfluss des Wandgitters scheint jedoch noch nicht auszureichen, um alle Unterschiede (insbesondere in einzelnen Zonen) zwischen der CFX-Berechnung und der COCOSYS-Berechnung zu erklären. Weitere Analysen sind dazu erforderlich

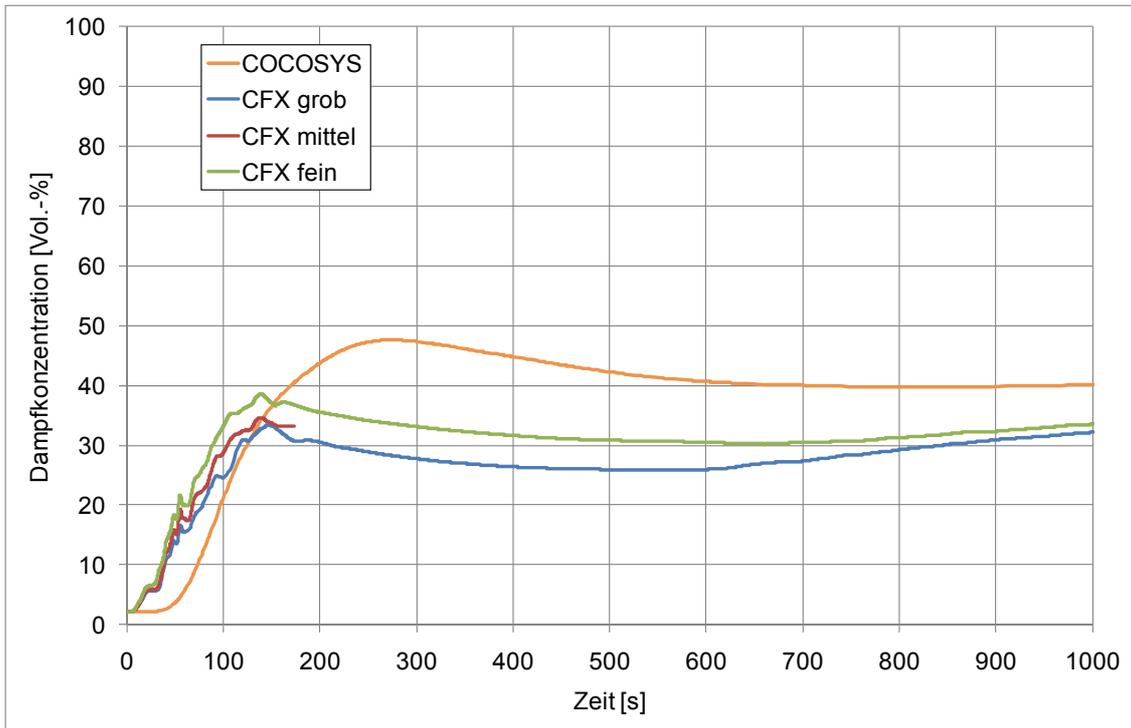


Abb. 9.3-36 Einfluss der Wandverfeinerung auf die mittlere Dampfkonzentration in Zone D50 (Domkuppel)

### 9.3.7 Analyse von lokalen Schichtungsphänomenen mit CFX

Wie bereits oben ausgeführt, zeigen sich in einzelnen Zonen des Containments in der CFX-Berechnung lokale Schichtungen von Dampf bzw. Wasserstoff. Hiervon sind insbesondere die H<sub>2</sub>-Schichtungen interessant, da sie den sicherheitstechnisch bedeutendsten Einfluss haben können, wenn sich zündfähig Gemische lokal bilden sollten.

Abb. 9.3-37 zeigt zeitweilige Wasserstoffschichtungen in verschiedenen Bereichen des Containments, z.B. unter der Dampferzeugerdecke oder im RDB-Stützenraum. Diese Schichtungen sind jedoch nicht so stark ausgeprägt, wie Schichtung im Leckraum, auf die nachfolgend eingegangen.

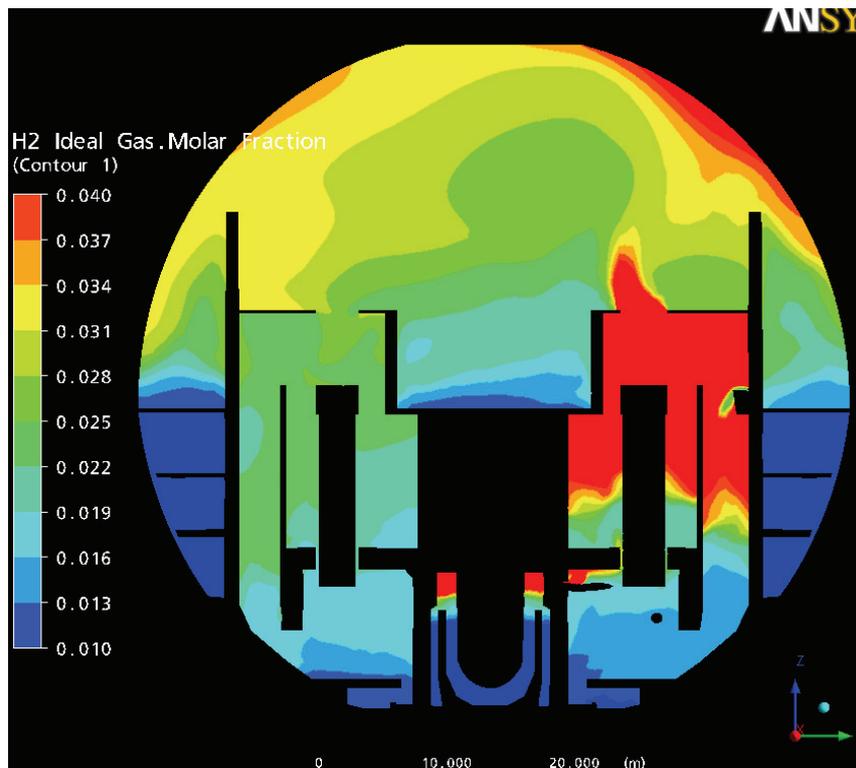


Abb. 9.3-37 H<sub>2</sub>-Schichtungen bilden sich unter anderem auch an der Dampferzeuger-Raumdecke und im RDB-Stützenraum (t = 2714,5 s)

In Abb. 9.3-38 ist exemplarisch eine lokale Wasserstoffschichtung (oben) und eine lokale Dampfschichtung (unten) in der Leckzone (R09B) zum Zeitpunkt t = 2865 s dargestellt. Der aus der Bruchstelle austretende Wasserstoff und Wasserdampf steigen nach oben und sammeln sich in erhöhter Konzentration unter der Raumdecke, bevor er entlang der Dampferzeuger weiter nach oben steigt. Aus sicherheitstechnischer Sicht sind nun insbesondere die folgenden Fragen von Bedeutung:

1. Verhalten sich Wasserstoff und Wasserdampf in dieser Situation ähnlich?
2. Wie stark ist die Schichtung, also wie groß sind die Konzentrationsunterschiede zwischen Raumboden und Raumdecke?
3. Wie stabil ist die Schichtung, d.h. über was für einen Zeitraum besteht die Schichtung?
4. Wie ist die Position von Rekombinatoren in dieser Zone - und wird deren Wirkungsweise von der vorliegenden lokalen Wasserstoffverteilung innerhalb der Zone beeinflusst?
5. Liegen zündfähige Gasgemische vor? Welchen Einfluss hat eine Wasserstoffschichtung auf den Verlauf einer möglichen H<sub>2</sub>-Verbrennung?

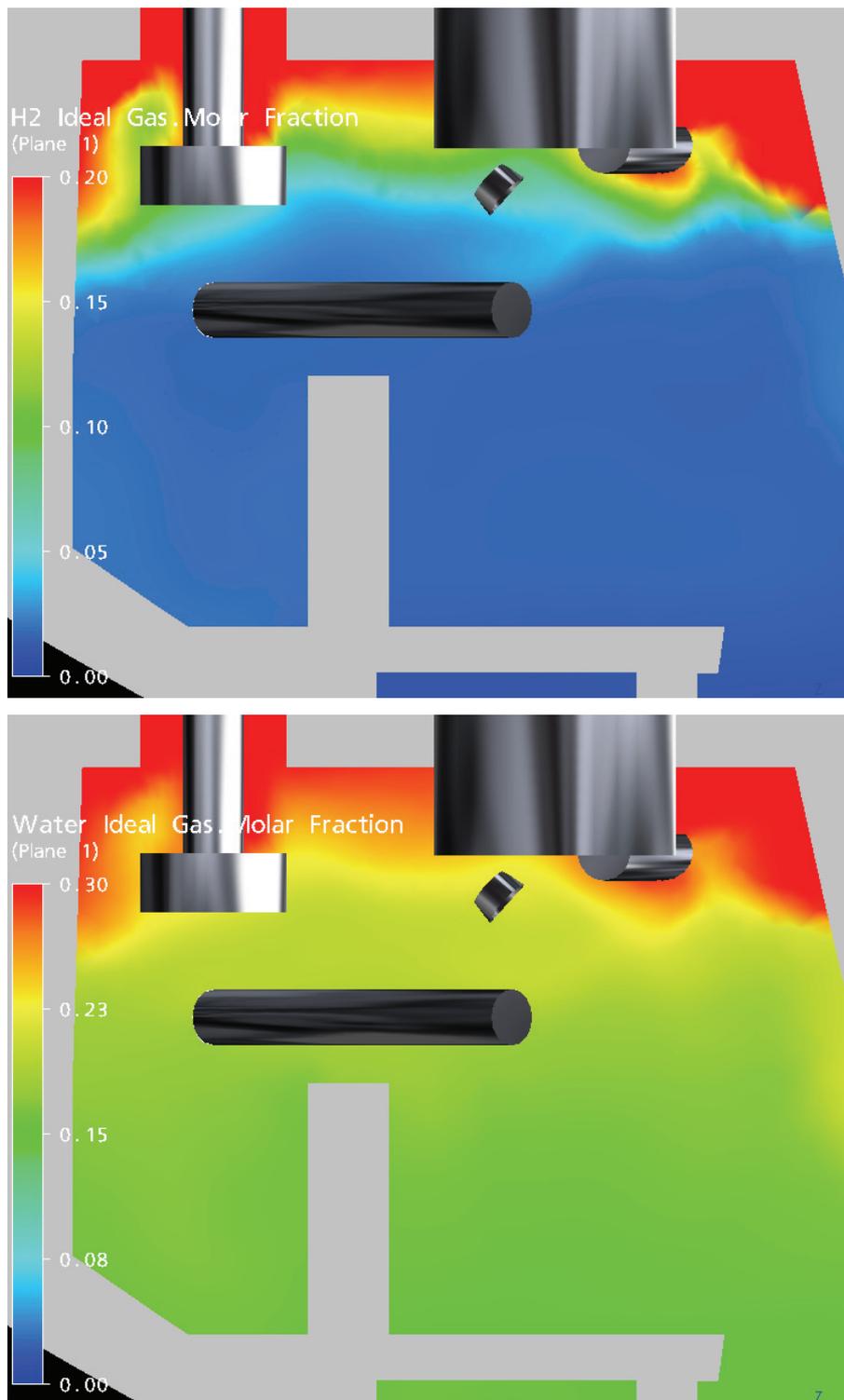


Abb. 9.3-38 Wasserstoffschichtung (oben) und Dampfschichtung (unten) in Zone R09B zum Zeitpunkt  $t = 2865$  s

Um die ersten beiden Fragen zu beantworten, wurden in der CFX-Berechnung zusätzliche Monitorpunkte in Zone R09B eingeführt. Ein Monitorpunkt zeigt die H<sub>2</sub>-

Konzentration unter der Raumdecke (in 8,5 m Höhe) und ein anderer Monitorpunkt zeigt die H<sub>2</sub>-Konzentration unten in Zone R09B (in 4,5 m Höhe). Der zeitliche Verlauf der H<sub>2</sub>-Konzentration an diesen beiden Monitorpunkten, sowie die (über die ganze Zone) gemittelte H<sub>2</sub>-Konzentration sind in Abb. 9.3-39 dargestellt. Der gemittelte Wert entspricht dem Wert der COCOSYS-Berechnung, die an dieser Stelle nicht feiner unterteilt. Mit einem Lumped-Parameter-Code sind einer differenzierten Betrachtung von lokalen Schichtungen innerhalb einer einzelnen Zone prinzipiell Grenzen gesetzt. Weitere Untersuchungen dazu sollen im Nachfolgevorhaben erfolgen.

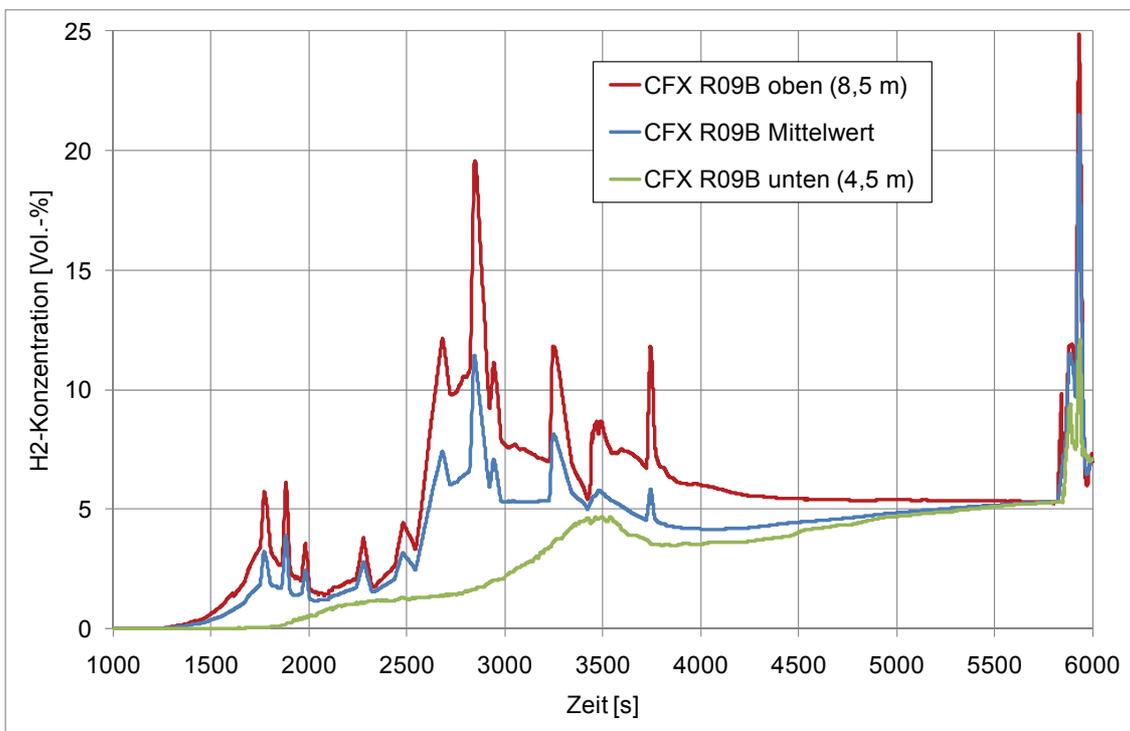


Abb. 9.3-39 Unterschiedliche lokale H<sub>2</sub>-Konzentrationen in Zone R09B

In Abb. 9.3-40 ist zusätzlich zu den lokalen H<sub>2</sub>-Konzentrationen auch noch die lokale Dampfkonzentration eingetragen. Diese Information ist notwendig, um zu entscheiden ob lokal genügend H<sub>2</sub>- und Luft vorhanden ist, um ein brennbares Gemisch zu erzeugen. Um die Kriterien zur Brennbarkeit (sowie Flammbeschleunigung und Detonation) zu prüfen, werden sowohl H<sub>2</sub>- als auch Dampfkonzentration gegeneinander aufgetragen. Dieses ist exemplarisch für den Zeitpunkte t = 2865 s in Abb. 9.3-41 dargestellt. Hier sind weiterhin auch die Grenzkurven für die unterschiedlichen Verbrennungsregimes eingetragen. Da in diesem Arbeitspunkt eine erste Testrechnung durchgeführt

werden sollte, sind die vorliegenden Ergebnisse noch nicht allzu sehr belastbar. Trotzdem ist in Abb. 9.3-41 prinzipiell zu erkennen, dass die lokalen Gemischzusammensetzungen sich durchaus von den über eine Zone gemittelten Werten deutlich unterscheiden können und lokal zündfähig sein können.

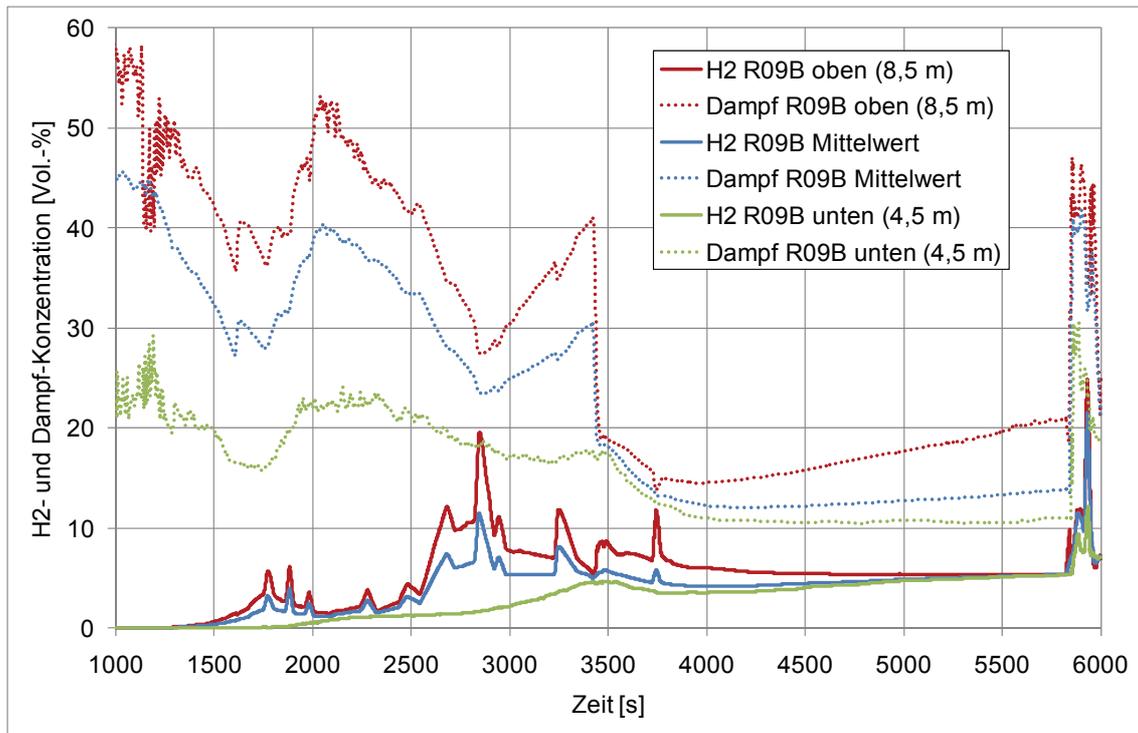


Abb. 9.3-40 Berücksichtigung der lokalen Dampfkonzentrationen.

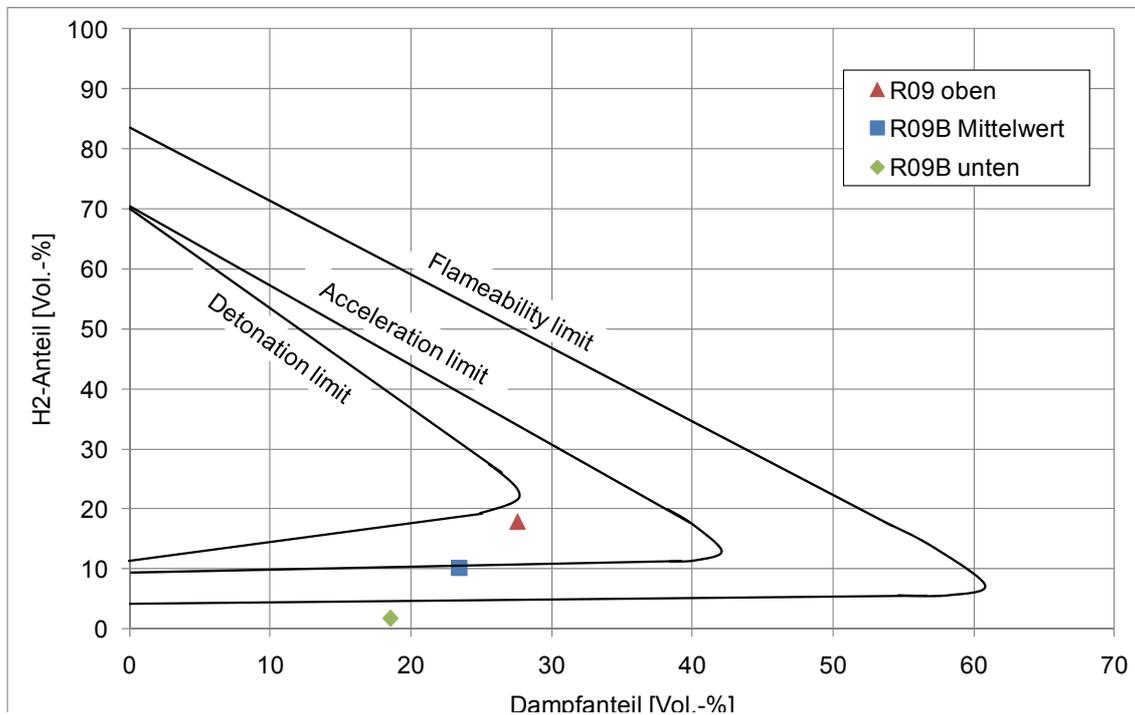


Abb. 9.3-41 Lokale Auswertung der Entflammbarkeits- und Flammbeschleunigungskriterien ( $t = 2865 \text{ s}$ ).

#### 9.4 Fazit und Ausblick

Es wurde erstmals mit CFX ein Rechengitter für eine KONVOI-Anlage erstellt, das maßgebliche Beton- und Stahlstrukturen (Hauptkomponenten) berücksichtigt. Hierbei handelt es sich um ein hybrides Gitter bestehend aus 3,8 Millionen Elementen. Es hat sich gezeigt, dass sowohl die räumliche Komplexität als auch die Vielzahl an beteiligten physikalischen Prozessen maximale, teilweise konkurrierende Anforderungen an den Vernetzungsprozess stellen. Die in den Best-Practice-Guidelines geforderte Netzfeinheit kann nicht im gesamten Containment erreicht werden, da diese z.B. für den Kondensationsprozess eine Netzfeinheit im Millimeterbereich in Wandnähe erfordern würde.

Zur Ermittlung der lokalen Luft/Dampf/ $\text{H}_2$ -Verteilung in einem exemplarischen Störfall wurde eine erste Rechnung mit dem erstellten KONVOI-Datensatz durchgeführt. In der vorliegenden Untersuchung wurde das Szenario eines kompletten Bruchs der DH-Verbindungsleitung betrachtet. Die Analyse umfasste die ersten 6000 s des Ablaufs.

Einschränkungen bei der Berechnung betreffen z.Zt. noch die Vernachlässigung des Wassereintrags aus dem Leck, die Vernachlässigung der Freisetzung von Aerosolen und Spaltprodukten sowie der Bildung von Gebäudesümpfen. Die mit CFX berechneten zeitlichen Verläufe von Druck, Temperatur und Dampf- und Wasserstoffkonzentration wurden mit einer entsprechend angepassten COCOSYS-Berechnung verglichen. Der Vergleich von CFX- und COCOSYS-Ergebnissen dient der gegenseitigen Überprüfung der unterschiedlichen Rechenansätze und damit einer Erhöhung der Vorhersage-Zuverlässigkeit.

Der Vergleich der beiden Berechnungen zeigt eine gute qualitative Übereinstimmung der jeweiligen Kurvenverläufe für weite Zeitbereiche. Es zeigen sich gerade in der Anfangsphase der Einspeisung (bei  $t = 100$  s) deutliche quantitative Unterschiede bzgl. Druck, Dampfkonzentrationen und Temperaturen. Im weiteren zeitlichen Verlauf findet eine stärkere Annäherung der Kurvenverläufe statt. Bei dem Verlauf der  $H_2$ -Konzentrationen in den einzelnen Zonen ergibt sich insgesamt eine bessere Übereinstimmung zwischen CFX und COCOSYS als bei den Dampfkonzentrationen. Die quantitativen Unterschiede bzgl. Druck und integraler Dampfmasse konnten zu mindestens zum Teil auf die folgenden Ursachen zurückgeführt werden:

- Das grobe Wandgitter in der CFX-Berechnung führte zu einer Erniedrigung der Temperatur an der Wand/Gas-Grenzfläche, wodurch die Kondensation und der Wärmeübergang verstärkt wurden. Dieser Sachverhalt wurde zunächst an einem kleineren Testbeispiel untersucht und dann begonnen, auch auf das Gitter zu überarbeiten. Die begonnene Verfeinerung des Wandgitters im Containmentdatensatz führte zu einer Annäherung der globalen Größen (Druck, integrale Dampfmasse) von CFX und COCOSYS.
- Insbesondere im Leckraum gibt es einen unterschiedlich hohen Wärmestrom in die Wand. Dieses konnte im Rahmen des Testbeispiels gezeigt werden. Durch den Dampfstrahl, der gegen die Betonwand prallt, gibt es in CFX einen hohen Wärmestrom in die Betonwand. Dieser Vorgang wird in COCOSYS nicht explizit abgebildet, da es hier eine homogene Leckzone gibt. Durch den unterschiedlichen Wärmeübergang werden auch der Druck und die Temperaturen beeinflusst.
- Auch die unterschiedliche Modellierung der Kondensation hat einen Einfluss auf den Druck und die integrale Dampfmasse. In CFX wird der turbulente Transport

von Dampf zur Wand explizit modelliert, während dieser Prozess in COCOSYS durch eine Korrelation beschrieben wird.

Zur genauen Aufklärung, ob diese Ursachen alle Unterschiede zwischen der COCOSYS- und der CFX-Berechnung erklären, bedarf es aber noch weiterer Untersuchungen sowie insbesondere einer experimentellen Aufklärung der offenen Fragen in der Kondensationsmodellierung. Dazu sind Arbeiten im Nachfolgevorhaben geplant.

Ob die in der CFX-Rechnung aufgefundenen lokalen Schichtungen von Dampf- und Wasserstoff, die innerhalb einzelner Räume bzw. Zonen beobachtet wurden, von sicherheitstechnischer Bedeutung sind, werden weitere Untersuchungen zeigen. Im Rahmen der CFX-Berechnung wurde gezeigt, dass derartige Schichtungen auftreten und dass die Konzentrationsunterschiede in einzelnen Zonen stark und zeitlich stabil sein können.

## 10 Zusammenfassung

Der vorliegende Abschlussbericht zum Vorhaben RS1181: „**Qualifizierung von CFX für die Simulation der Thermohydraulik im Sicherheitseinschluss**“ beschreibt den erreichten Stand der Arbeiten der GRS, die im Verlauf von drei Jahren erreicht wurden. Ziel des Projekts war die Validierung und gezielte Erweiterung von CFX für verschiedene unfalltypische Phänomene. Die längerfristige Zielsetzung ist die dreidimensionale Simulation der Thermodynamik im Sicherheitseinschluss unter Stör- und Unfallbedingungen.

Die Arbeiten waren in vier verschiedenen Arbeitspaketen gebündelt:

- AP1: Mitarbeit bei der Bereitstellung einer für die Simulation der Gasverteilung im Sicherheitseinschluss erweiterten CFX-Version
  - AP1.1: Wand- und Volumen Kondensation
  - AP1.2: H<sub>2</sub>-Rekombinatoren
  - AP1.3: Wärmeleitung in Wände und andere Strukturen
  - AP1.4: Vergleichende Tests unterschiedlicher Modellansätze für die Turbulenz
  - AP1.5: Vergleich der Leistungsfähigkeit der Gasverteilungsmodellierung in CFX und dem FZK-Code GASFLOW
- AP2: Testen der Wasserstoffverbrennungsmodellierung in CFX
  - AP2.1: Nachrechnung von H<sub>2</sub>-Verbrennungsversuchen
  - AP2.2: Vergleich der Leistungsfähigkeit der H<sub>2</sub>-Verbrennungsmodellierung in CFX und dem FZK-Code COM3D
- AP3: Erstellung eines Datensatzes für den Sicherheitsbehälter einer KONVOI-Anlage
- AP4: Koordination des CFD-Verbunds zu Fragestellungen des 'Sicherheitseinschlusses'

Alle im Arbeitsplan vorgesehenen Arbeiten konnten im vollen Umfang abgearbeitet werden. Zusätzlich zu den im Arbeitsprogramm vorgesehenen Arbeiten konnten zu ei-

nigen Arbeitspunkten zusätzliche Analysen durchgeführt werden, z. B. Parameterstudie bzgl. der Kondensation in einem einzelnen Raum mit Dampfeinspeisung oder die Teilnahme an einem Verbrennungsbenchmark im Rahmen des Europäischen Netzwerks of Excellence - SARNET-2.

Die Versuchsnachrechnungen (z. B. TH-2, VANAM M3, PANDA-4bis) mit CFX und dem einfachen GRS-Kondensationsmodell haben gezeigt, dass dieses Modell in der Lage ist, die Kondensationsrate und die dabei freiwerdende Kondensationswärme hinreichend genau zu simulieren. Für eine hinreichend genaue Modellierung der Wandkondensation ist eine sehr feine Diskretisierung an der Grenzschicht Gas/Wand notwendig. Gegenwärtig wird das bei der Kondensation gebildete Wasser bei der Simulation noch nicht weiterverfolgt, d. h. die Massenerhaltung ist nicht gewährleistet und die Ausbildung von Wasserpools kann nicht simuliert werden. Das ist auch der Grund, weshalb es gegenwärtig nicht möglich ist, Verdampfungsvorgänge in Wasservorlagen zu simulieren. Arbeiten dazu sind in einem Nachfolgevorhaben gemeinsam mit Partnern von FZJ vorgesehen.

In deutschen KKW, aber auch in KKW im Ausland, sind passive autokatalytische Wasserstoffrekombinatoren als Notfallmaßnahme zur Verhinderung von großräumigen H<sub>2</sub>-Verbrennungen installiert. Ein einfaches Modell zur Simulation von passiven autokatalytischen Wasserstoffrekombinatoren wurde erfolgreich in CFX-11 implementiert. In diesem Modell wird die Abbaurate mittels von AREVA bereitgestellten Korrelationen berechnet. Dieses Rekombinatormodell wurde zur Simulation von drei neuen Versuchen an der THAI-Anlage (HR-2, HR-5, HR-12) verwendet, bei denen Rekombinatoren der Firma AREVA eingesetzt waren. Die Experimente unterschieden sich hinsichtlich des Drucks und der Dampfkonzentration während der Rekombination. Weitere Verbesserungen am Modell sind vorgesehen, um z. B. die Startbedingungen oder die Verteilung der bei der Reaktion freiwerdenden Wärme auf den Gasmassenstrom und die Einbauten des Rekombinators besser zu bestimmen.

Durch die Simulation von verschiedenen Versuchen (TH21, TH22, VANAM M3) konnte gezeigt werden, dass CFX in der Lage ist, den Wärmetransport in Wände und Strukturen mit ausreichender Genauigkeit zu berechnen. Dazu ist eine ausreichend feine Diskretisierung der Grenzschicht Gas/Festkörper notwendig. Bei Verwendung des SST-Turbulenzmodells muss für die Diskretisierung im Gas das Kriterium  $y^+ < 100$  eingehalten werden. Insbesondere bei Festkörpern mit einer schlechten Wärmeleitfähig-

keit wie z. B. Beton ist darauf zu achten, dass auch im Festkörper eine ausreichend feine Diskretisierung vorhanden ist. Im Beton sollte die erste Zelle an der Grenze zum Gas in senkrechter Richtung zum Interface nicht größer als 1 - 2 mm sein. Ansonsten ist mit einer Überschätzung des Wärmetransports zu rechnen, da die Oberflächentemperatur des Betons unterschätzt wird.

Im Vorhaben wurden zahlreiche Versuche mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen berechnet (TH-18, TH-20, PANDA-4, ...). Bei einem Teil der Versuche konnten die Turbulenz, die Strömungsgeschwindigkeit, etc. mit dem SST- und dem  $k-\epsilon$ -Turbulenzmodell in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden (z. B. PANDA-4). Dabei haben das SST- und das  $k-\epsilon$ -Turbulenzmodell meist ähnliche Ergebnisse geliefert. Bei einigen Versuchen z. B. (TH-18) konnte durch Verwendung von Reynolds-Stress-Turbulenzmodellen (z. B. SSG-Modell bei TH-18) eine weitere leichte Verbesserung der Simulationsergebnisse erzielt werden, die verwendeten Reynolds-Stress-Turbulenzmodelle waren insbesondere bei Mehrkomponentenströmungen numerisch instabil. Deshalb erscheinen sie in der jetzigen Implementierung für Containmentanwendungen bedingt geeignet.

Bei anderen Versuchen, insbesondere bei der Auflösung von stabilen Leichtgasschichtungen, kam es zu größeren Abweichungen (z. B. TH-20). Beim TH-20 Experiment wurde zwar das qualitative Verhalten der Schichtungsauflösung richtig beschrieben (z. B. stärkerer Jet -> schnellere Vermischung; größere Dichteunterschiede -> langsamere Vermischung), aber kein Projektpartner (ANSYS; IKE; GRS) war in der Lage, die Geschwindigkeit der Schichtungsauflösung mit den Standardturbulenzmodellen richtig zu berechnen. Um diese Modelldefizite zu beseitigen, wurde vom IKE und von ANSYS im Rahmen der vom BMWi geförderten Projekte 1501337 und 1501339 ein verbessertes Turbulenzmodell entwickelt. Dieses Modell soll im Rahmen eines geplanten Folgevorhabens einer vom Entwickler unabhängigen Validierung unterzogen werden.

Durch die Simulation verschiedener Versuche zur  $H_2$ -Verbrennung von Luft /  $H_2$ -Gemischen wurden die Verbrennungsmodelle mit CFX weiter erprobt. Es wurde das Burning-Velocity-Modell und das um den Said-Borghgi-Faktor erweiterte Eddy-Dissipation-Modell verwendet. Insgesamt hat sich gezeigt, dass das Burning-Velocity-Modell eine bessere Prognosefähigkeit besitzt als das Eddy-Dissipation-Modell. Bei einigen Versuchen (z. B. blinde Vorausrechnung der ENACCEF-Versuche im Rahmen von SARNET-2) konnte eine gute Übereinstimmung mit den Experimenten erzielt wer-

den. Es haben sich aber auch beim BVM-Modell noch Modellschwächen gezeigt, wie z. B. die „spontane“ Zündung aufgrund numerischer Fehler beim Ix-2 Versuch. Außerdem konnte noch nicht abschließend geklärt werden, warum bei den großskaligen HYCOM-Versuchen ein anderer Modellparameter im Zimont-Modell verwendet werden sollte als der Standardparameter, der bei den ENACCEF-Versuchen zu guten Ergebnissen führt. In zukünftigen Arbeiten sollte das Burning-Velocity-Modell um einen weiteren Mischungsbruch erweitert werden, um auch die Verbrennung von Wasserstoff/Dampf/Luftgemischen simulieren zu können. Dies ist für ein Nachfolgevorhaben vorgesehen.

Der Versuch HYCOM13 wurde auch mit dem Verbrennungscode COM3D im Rahmen eines kurzen Forschungsaufenthalts am Forschungszentrum Karlsruhe nachgerechnet. Bei Annahme einer gleichen Anfangsturbulenz berechnet COM3D mit dem KYLCOM-Modell einen ähnlichen Druckverlauf und eine ähnliche Flammgeschwindigkeit wie CFX mit dem Burning-Velocity-Modell.

Erstmals wurde ein relativ vollständiges CFD-Gitter für einen generischen Sicherheitsbehälter einer KONVOI-Anlage inklusive maßgeblicher Beton- und Stahlstrukturen (große Hauptkomponenten) erstellt. Kleinere Einbauten, Rohrleitungen, Tretgitter und andere Turbulenz generierende oder löschende Einbauten konnten nicht berücksichtigt werden. Hierbei handelt es sich um ein hybrides Gitter bestehend aus 3,8 Millionen Elementen. Insgesamt war der Aufwand der Datensatzerstellung beginnend bei der Auswertung herkömmlicher Zeichnungen, ihrer elektronischen Aufbereitung mit Bildbearbeitungssoftware und der Vernetzung erheblich. Es hat sich dabei gezeigt, dass sowohl die räumliche Komplexität als auch die Vielzahl an beteiligten physikalischen Prozessen maximale, teilweise konkurrierende Anforderungen an den Vernetzungsprozess stellen. Die in den Best-Practice-Guidelines für CFD-Codes geforderte Netzfeinheit kann nicht im gesamten Containment erreicht werden, da diese z. B. für den Kondensationsprozess eine Netzfeinheit im Millimeterbereich in Wandnähe sowie in der Wand selbst erfordern würde. Der Datensatz wurde für Phasen eines Unfallablauf getestet und lokalen Luft / Dampf / H<sub>2</sub>-Verteilungermittelt. In der vorliegenden Untersuchung wurde das Szenario eines Bruchs der DH-Verbindungsleitung betrachtet. Der Quellterm an Dampf und Wasserstoff in den Sicherheitsbehälter wurde aus einer älteren MELCOR-Analyse abgeleitet. Die mit CFX berechneten zeitlichen Verläufe von Druck, Temperatur und Dampf- und Wasserstoffkonzentration wurden mit einer COCOSYS-Berechnung verglichen. Der Vergleich der beiden Berechnungen zeigt eine

gute qualitative Übereinstimmung der jeweiligen Kurvenverläufe für weite Bereiche, aber auch gerade in der Anfangsphase der Einspeisung deutliche quantitative Unterschiede bzgl. Druck, Dampfkonzentrationen und Temperaturen. Die CFX-Rechnung zeigt auch lokale Schichtungen von Wasserstoff in einzelnen Räumen, die so nicht mit einem lumped parameter code wie COCOSYS aufgezeigt wurden. Hier sind weitere Arbeiten im Nachfolgevorhaben geplant.

Während der dreijährigen Projektlaufzeit wurde der nationale CFD-Verbund mit Partnern von FZJ/Uni Aachen, Uni München, IKE Stuttgart, KIT und FZK organisiert. Auf diesem wurden regelmäßig die Erfahrungen in der Anwendung von CFD-Programmen für containmentrelevante Fragestellungen ausgetauscht. Das Gremium hat sich als ein wertvolles Mittel etabliert, Forschungsergebnisse themenbezogen und zeitnah auszutauschen. Es ist beabsichtigt, den CFD-Verbund unter Leitung der GRS auch während der Laufzeit der Nachfolgevorhaben fortzusetzen.

## 11 Literaturverzeichnis

- /ARD 98/ Ardey, N.  
Struktur und Beschleunigung turbulenter Wasserstoff-Luft-Flammen in Räumen mit Hindernissen. PhD Thesis, TU München, 1998
- /AUB 05/ Auban, O. et al.  
PANDA Test Facility Description and Geometrical Data, Paul Scherrer Institut, 2005
- /BBB 05/ Breitung, W., et al.  
Innovative Methoden zu Analyse und Kontrolle des Wasserstoffverhaltens bei Kernschmelzunfällen, Abschlussbericht zu Teilprojekt 1 des HGF Strategiefondsprojekts 98 / 07, Institut für Kern- und Energietechnik, Forschungszentrum Karlsruhe, Februar 2005
- /CAC 07/ de Cachard, F. et al.  
OECD-SETH Project Large-scale Experimental Investigation of Gas Mixing and Stratification in LWR Containments, Paul Scherrer Institut, 2007
- /CFX 07/ CFX-11.0 Manual, CFX ANSYS Inc, Canonsburg, USA, 2007
- /CHA 09/ Chaumeix, N., Bentaib, A.  
ISP 49 - Specification of ENACCEF test, IRSN FRM-285, 2009
- /CHA 10/ Chaumeix, N., Bentaib, A.  
SARNET H2 Combustion Benchmark Specification of ENACCEF test, IRSN Rapport DSR/SAGR n°102, 2010
- /DÖB 08/ Döbbener, G., Scheuerer, G.  
Entwicklung von CFD-Software zur Simulation mehrdimensionaler Strömungen in Sicherheitseinschlüssen von Kernreaktoren,  
Vortrag beim Treffen des CFD-Verbundes, Stuttgart, 16.07.2008

- /FGU 09/ Fischer, K., Gupta, S.  
Auslegungsbericht für blinde Simulationen des THAI-Versuchs TH22 „Auflösung einer Leichtgasschicht durch Naturkonvektion“, Becker Technologies GmbH, Eschborn, Januar 2009
- /FIG 09/ Fischer, K., Gupta, S.  
Auslegungsbericht für blinde Simulationen der THAI-Versuchsreihe TH21 „Naturkonvektion bei unterschiedlicher Wandbeheizung“, Becker Technologies GmbH, Berichts-Nr. 150 1325-TH21-AB, Eschborn, 2009
- /FIR 97/ Firnhaber, M., Kanzleiter, T., Schwarz, S., Weber, G.  
Specification of the International Standard Problem ISP37, GRS-A-Bericht 2504, 1997
- /FIS 06/ Fischer, K., Heitsch, M., Einzinger, J., Scheuerer, G.  
Technischer Fachbericht - Blinde Simulationen des THAI-Gebläseversuchs TH 18, 2006
- /FIS 07/ Fischer, K., Kanzleiter, T.  
Auslegungsbericht für Simulationen der THAI-Versuchsreihe TH 20, 2007
- /FIS 09/ Fischer, K., Gupta, S.  
Auslegungsbericht für blinde Simulationen der THAI-Versuchsreihe TH-21 „Naturkonvektion bei unterschiedlicher Wandbeheizung“, Becker Technologies GmbH, Berichts-Nr. 150 1325-TH-21-AB, Eschborn, 2009
- /GAS09/ GASFLOW Manual and Validation Library (CD-ROM), Version November 2009, GASFLOW Workshop
- /HAN 08/ Hansen, G., Owen, St.  
Mesh generation technology for nuclear reactor simulation; barriers and opportunities, Nuclear Engineering and Design 238 (2008), 2590-2605
- /HET 00/ Heitsch, M.  
Vertiefte Modellierung der turbulenten Verbrennung und katalytischen Rekombination zum Abbau von Wasserstoff, GRS-A-2818, 2000

- /HET 03/ Heitsch, M.  
Validierung von Modellen zur Simulation von Verbrennungsvorgängen im Sicherheitsbehälter (HYCOM) Abschlussbericht GRS-A-3137, 2003
- /HET 05/ Heitsch, M., Schramm, B.  
Hydrogen Management for the VVER-440/213 Containment, Hungary, HU2002/000-632-04-01, GRS 2005, Final Report
- /HIL 03/ Hill, Movahed  
Passive Autocatalytic Recombiner – Empirical Equation for H<sub>2</sub> and CO Depletion Rate Calculation, NGPS5/2003/en/0040, 2003
- /IMJ 09/ Internetseite der Bildverarbeitungssoftware ImageJ:<http://rsbweb.nih.gov/ij/>, 19.07.2009
- /KAN 03/ Kanzleiter, T., et al.  
Versuchsanlage und Programm zur Untersuchung offener Fragen zum Spaltproduktverhalten im Sicherheitsbehälter, Teil 1, Becker Technologies GmbH, Eschborn, Oktober 2003
- /KAN 07/ Kanzleiter T., Fischer K.  
Quick Look Report Helium/Hydrogen Material Scaling Test HM-2, Quick Look Report , Becker Technologies GmbH, Eschborn, 2007
- /KAN 08/ Email von Kanzleiter, T.  
Korrelation für OECD-THAI Type FR1-380T/1/2, Auszug aus NESB-G/Et, Sept. 10. 2008
- /KAN 09/ Kanzleiter, T.  
Hydrogen Recombiner Tests HR-1 to HR-5, HR-27 and HR\_28, Becker Technologies, 2009
- /KAN 09b/ Kanzleiter, T.  
Hydrogen Recombiner Tests HR-6 to HR-13, HR-29 and HR-30 (tests with steam, using an AREVA PAR), Quick Look Report, Becker Technologies GmbH, Eschborn, August 2009

- /KAN 93/ Kanzleiter, T.  
VANAM-Mehrraum-Aerosolabbau-Versuch M3 mit löslichem Aerosolmaterial, Technischer Fachbericht, Battelle-Institut e.V., Frankfurt am Main, Juli 1993
- /KLE 09/ Klein-Heßling, W., et al.  
Gezielte Validierung von COCOSYS und ASTEC sowie generische Anwendungsberechnungen mit diesen Rechenprogrammen, Abschlussbericht RS 1170, GRS-A-3489, Köln, August 2009
- /LAU 08/ Laurien, E., Zirkel, A.  
Turbulenzmodellierung für CFD-Methoden zur Simulation von Strömungen im Sicherheitsbehälter, Vortrag beim Treffen des CFD-Verbundes, Stuttgart, 16.07.2008
- /MOV 08/ Movahed et al.  
Comparison of CFX and COM3D Prediction for Hydrogen Combustion, AREVA NESB-G/2008/en/0220
- /OEC 00/ OECD experts  
State of the Art report, Flame Acceleration and Deflagration-to-Detonation Transition in Nuclear Safety, 2000
- /POR 02/ Poruba, C.  
Turbulente Flammenausbreitung in Wasserstoff-Luft-Gemischen, PhD Thesis, TU München, 2002
- /SB 88/ Said, R., Borghi, R.  
A simulation with a cellular automation for turbulent combustion modelling, 22nd Symposium (Int.) on Combustion, University of Washington - Seattle, USA, 1988
- /SCH 99/ Schwarz, S.  
Verifikation und Validierung von COCOSYS an dem Experiment VANAM M3, GRS-A-Bericht 2686, 1999

- /SCHI 38/ Schirmer, R. , Beiheft VDI-Zeitschrift, Verfahrenstechnik 6, 1938
- /SCHO 04/ Scholtyssek, W., et al.  
Integral large scale experiments on hydrogen combustion for severe accident code validation – HYCOM Final Report, Extended Version, Forschungszentrum Karlsruhe, June 2004
- /SON 98/ Sonnenkalb, M.  
Unfallanalysen für DWR mit dem Integralcode MELCOR 1.8.3, GRS-A-2579, Juni 1998
- /SPE 08/ Spengler, C., et al.  
Weiterentwicklung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC, Abschlussbericht RS 1159, GRS-A-3441, Köln, November 2008
- /TRA 08/ Travis, J.R., et al.  
GASFLOW – A Computational Fluid Dynamics Code for Gases, Aerosols and Combustion, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe 2008
- /YAN 10/ Yanez, J.  
Forschungszentrum Karlsruhe: Persönliche Mitteilung, 2010
- /ZBO 06/ Zboray, R., et al.  
PANDA Test 4 bis-1 Quick-Look Report, Paul Scherrer Institut, 2006

## 12 Verteiler

		Exemplare: gedruckte Form	CD-ROM
<b>BMWi</b>			
Referat III B 4		1 x	
<b>GRS-PT/B</b>			
Internationale Verteilung	(FIZ)	10 x	30 x
Projektbegleiter	(stu)	2 x	1 x
<b>GRS</b>			
Bereichsleiter	(erv, lim, prg, paa, rot, zir)	PDF	
Abteilungsleiter	(som, gls)	PDF	
Projektleiter	(smm)	PDF	
Projektbetreuung	(wal)	PDF	
Informationsverarbeitung	(nit)	PDF	
Autor	(smm)	1 x	
Bibliothek	(Köln)	1 x	
<b>Gesamtauflage</b>		<b>Exemplare 15</b>	<b>31</b>

**Gesellschaft für Anlagen-  
und Reaktorsicherheit  
(GRS) mbH**

Schwertnergasse 1  
**50667 Köln**  
Telefon +49 221 2068-0  
Telefax +49 221 2068-888

Forschungszentrum  
**85748 Garching b. München**  
Telefon +49 89 32004-0  
Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200  
**10719 Berlin**  
Telefon +49 30 88589-0  
Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4  
**38122 Braunschweig**  
Telefon +49 531 8012-0  
Telefax +49 531 8012-200

**[www.grs.de](http://www.grs.de)**