

# Numerische Simulation von Gasetonationen in komplexen 3D-Geometrien

R. Redlinger, IKET

## Einleitung

Eines der Hauptrisiken, das mit der Verwendung von Wasserstoff als alternativer Energiequelle oder als Rohstoff in der chemischen Industrie verbunden ist, liegt in der leichten Entzündbarkeit von Wasserstoff in Luft und der damit gegebenen Möglichkeit einer Verbrennung oder sogar Explosion. Erinnerung sei in diesem Zusammenhang an so spektakuläre Ereignisse wie den Absturz des Hindenburg-Zepplins in Lakehurst 1937 oder das Unglück des Challenger Space Shuttles im Jahr 1986.

Bei schweren Unfällen in Kernkraftwerken hätte eine Wasserstoff-Luft-Verbrennung mit Übergang in eine Detonation und daraus folgender Zerstörung des Reaktorgebäudes sehr weitreichende Schadenswirkungen in der Umgebung. Obwohl die Wahrscheinlichkeit derartiger Ereignisse wegen der mehrfach vorhandenen Sicherheitssysteme sehr gering ist, wird doch darüber nachgedacht, wie auch solche etwaige Schäden vermindert werden könnten. Ausgedehnte Studien haben gezeigt, daß es durchaus möglich ist, ein Reaktorgebäude zu bauen, das derartigen Belastungen standhält. Die Schäden wären damit auf die Reaktoranlage selbst beschränkt [1].

Für die Auslegung eines derartigen Reaktorgebäudes muss man insbesondere die maximal auftretenden Drucklasten als Folge von Wasserstoff-Luft-Verbrennungen kennen. Detonationen liefern für diese Lasten eine obere Schranke, und der am IKET (früher INR) für diesbezügliche Modellrech-

nungen verwendete Rechencode DET3D soll im folgenden vorgestellt werden.

## Beschreibung des Rechencodes

Da Detonationen sehr schnelle Vorgänge sind – die übliche Geschwindigkeit der Detonationswelle bei Wasserstoff-Luft-Detonationen bewegt sich im Bereich von 1500 m/s – ist es bei der physikalischen Modellbildung nicht nötig, Effekte wie molekulare Diffusion, Turbulenz, Strahlung oder Wärmeleitung in Betracht zu ziehen. Es genügt, die Eulergleichungen der Gasdynamik für eine Mischung von  $N$  idealen, chemisch reagierenden Gasen zu lösen. Bezeichnet  $\rho^k$  die Dichte der  $k$ -ten Komponente und  $\rho = \sum_k \rho^k$  die Gesamtdichte,  $p$  den Gesamtdruck,  $u = (u_1, u_2, u_3)$  die Geschwindigkeit in 3 Raumdimensionen und  $e = 1/2 u^2 + \varepsilon$  die totale spezifische Energie mit  $\varepsilon$  als spezifischer innerer Energie, so lauten diese Gleichungen in cartesischen Koordinaten  $x_j$  wie folgt ( $k = 1, 2, \dots, N$ ; untere Indizes  $t$  bzw.  $x_j$  bedeuten Ableitung nach der Zeit bzw. nach der räumlichen Koordinate  $x_j$ ; über  $j$  wird jeweils von 1 bis 3 summiert)

$$\rho^k_t + (\rho^k u_j)_{x_j} = S^k$$

*Massenerhaltung*

$$(\rho u)_t + (\rho u u_j)_{x_j} + p_{x_j} = 0$$

*Impulserhaltung ( $i = 1, 2, 3$ )*

$$(\rho e)_t + [(\rho e + p) u_j]_{x_j} = 0$$

*Energieerhaltung*

Der Quellterm  $S^k$  in der Gleichung der Massenerhaltung modelliert dabei Änderungen der Gaskomponentendichten, die

von den chemischen Reaktionen herrühren. Im Code DET3D stellen die Terme  $S^k$  die Summen von elementaren chemischen Reaktionen dar, deren Reaktionsgeschwindigkeit durch ein Arrhenius-Gesetz beschrieben wird. Sowohl die Anzahl  $N$  der Gaskomponenten als auch die Form und Anzahl der elementaren Reaktionen (inklusive der Arrhenius-Konstanten) kann vom Benutzer des Codes frei gewählt werden. Die thermodynamischen Eigenschaften der einzelnen Gase, d.h. die spezifischen inneren Energien und die spezifischen Wärmen, werden als Polynome der Temperatur angegeben, die durch Interpolation der JANAF-Meßdaten [2] erhalten wurden.

Als numerischen Löser benützt DET3D ein modernes Verfahren, das Stoßvorgänge automatisch modelliert („shock capturing“), siehe etwa [3]. Das implementierte Verfahren ist explizit und benützt finite Differenzen. Der Benutzer hat die Wahl zwischen Lösern 1. und 2. Ordnung, doch hat es sich gezeigt, daß für Detonationsrechnungen die Variante 1. Ordnung ausreichend gute Ergebnisse liefert und deshalb aus Rechenzeitgründen vorzuziehen ist.

## Validierung des Codes durch Vergleich mit bekannten analytischen Lösungen

Eines der konzeptionell einfachsten, aber für viele Zwecke ausreichenden Modelle zur Beschreibung einer Detonationswelle beruht auf der Annahme, daß die Detonationsfront aus einer sehr dünnen Diskontinuität besteht, in der die exotherme chemische

Reaktion vollständig abläuft und über die hinweg die bekannten Erhaltungssätze für Stöße mit Energiezufuhr gelten. Bei der Detonationswelle kann man dann im wesentlichen 4 Zonen unterscheiden, wie in Abb. 1 dargestellt [4].

Diese Abbildung zeigt zum Vergleich auch noch das entsprechende, mit DET3D berechnete Druckprofil. Man sieht, daß beide Profile recht gut miteinander übereinstimmen.

Es sei an dieser Stelle bemerkt, daß für Sicherheitsanalysen insbesondere der sogenannte Druckimpuls, d.h. das Integral des Überdruckes über die Zeit, von Belang ist [5, 6]. Eine genauere numerische Auflösung der sehr dünnen Detonationsfront ist meist nicht notwendig, da das Integral über die Detonationsfront norma-

lerweise sehr klein wird. Es genügt, wenn der Zustand des Gases direkt hinter der Front (Chapman-Jouguet-Punkt, siehe Abb. 1) vom Code hinreichend genau reproduziert wird.

### Validierung des Codes durch Vergleich mit Experimenten

Es wurden drei Serien von Experimenten mit Wasserstoff-Luft-Detonationen durchgeführt. Ziel war es dabei, Messdaten für einen hinreichend großen Bereich von Geometrien zu erhalten.

### Ballon-Experimente

In einer ersten, am Fraunhofer-Institut in Berghausen durchgeführten Testreihe [7] wurde ein halbkugelförmiger, mit verschiedenen Wasserstoff-Luft-Gemischen gefüllter Ballon mit einem

Volumen von ca. 50 m<sup>3</sup> zentral gezündet. Abb. 2 zeigt die typische Ausbreitung der Detonationswelle für einen Versuch mit 29% Wasserstoff und 71% Luft.

In Abb. 3 sind die gemessenen und berechneten Druckverläufe an einem Messpunkt innerhalb (Abb. 3a) und außerhalb (Abb. 3b) des Ballons geplottet.

Man beachte, daß die zweite Druckspitze in Abb. 3a von der Reflektion der Welle an der Mediengrenze herrührt (Ballonhülle, außerhalb befindet sich Luft).

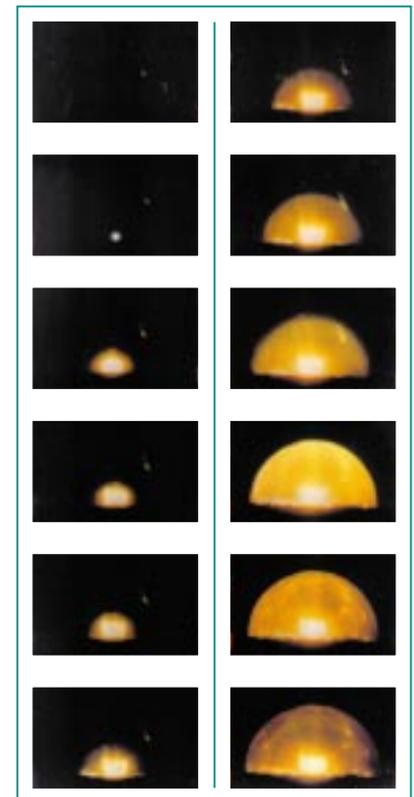


Abb. 2: Wasserstoff-Luft-Detonation in einem halbkugelförmigen Ballon von ca. 6 m Durchmesser mit zentraler Zündung Zeitschrittweite 0.4 ms, Geschwindigkeit der Detonationsfront im Balloninnern ist ca. 1960 m/s.

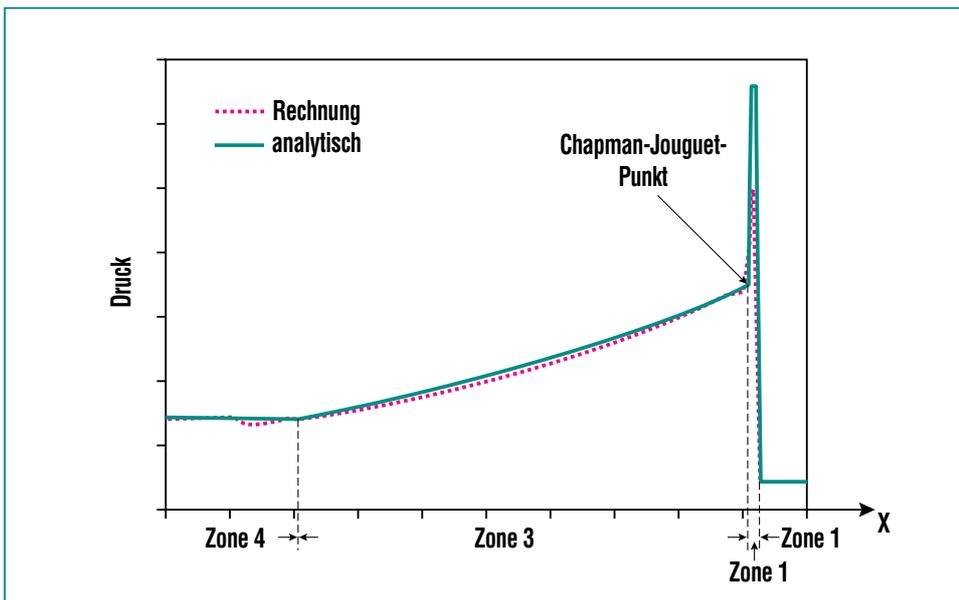


Abb. 1: Druckprofil einer nach rechts laufenden Detonationswelle. Zone 1: Unverbranntes Gasmisch vor der Welle, Zone 2: Stoß mit exothermer chemischer Reaktion (Detonationsfront), Zone 3: Expansionswelle hinter der Front, in der das Gas zur Ruhe kommt, Zone 4: Ruhendes, verbranntes Gasmisch hinter der Welle.

### FZK-Rohr

Experimente mit verschiedenen Gasgemischen und Geometrien (internen Hindernissen) wurden in einem Rohr von 12 m Länge und 35 cm Innendurchmesser durchgeführt, siehe Abb. 4.

Ein typischer Versuchsaufbau mit einem 3-dimensionalen Hindernis (schräg abgeschnittener Zylinder) am rechten Rohrende wird in Abb. 5 gezeigt. Die Zündung erfolgt am linken Ende des Rohres.

Die zugehörigen gemessenen und berechneten Druckdaten für einen Punkt 4.25 m vom linken

Ende sind in Abb. 6 geplottet. Man sieht, daß die eigentliche Detonationswelle (erste Druckspitze + Expansion) sowie die ersten Reflektionen dieser Welle an den Rohrenden von der Rechnung sehr gut wiedergegeben werden. Mit zunehmender Dauer wird die Stärke und Geschwindigkeit der reflektierten Stoßwellen vom Code aber etwas überschätzt. Vermutlich liegt das daran, daß in der Rechnung keine Wärmeverluste berücksichtigt werden.

Die zwei Rechnungen in Abb. 6 unterscheiden sich durch die verwendete Reaktionskinetik: die er-

ste Rechnung verwendet 4 Gas-komponenten ( $H_2$ ,  $O_2$ ,  $N_2$  und Wasserdampf) mit der simplen Kinetik  $2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$ , die zweite dagegen 7 Komponenten (zusätzlich  $H$ ,  $O$  und  $OH$ ) und die komplexe Kinetik  $H_2 \rightarrow 2H$ ,  $H + O_2 \rightarrow OH + O$ ,  $O + H_2 \rightarrow OH + H$ ,  $OH + H_2 \rightarrow H_2O + H$ ,  $H + OH + M \rightarrow H_2O + M$ , mit  $M$  als Katalysator (z.B.  $H_2O$ ).

Wie zu erwarten liefert die zweite Rechnung die etwas besseren Ergebnisse, doch auch die Übereinstimmung der ersten Rechnung mit den Messdaten ist durchaus zufriedenstellend. An-

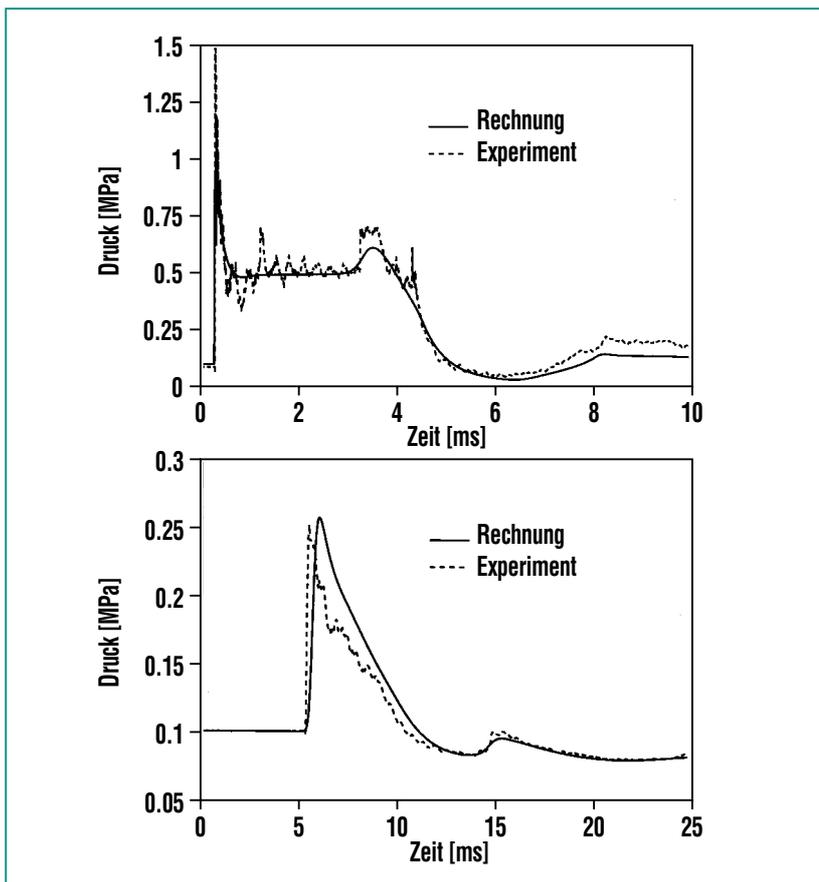


Abb. 3: a) Druckverlauf innerhalb des Ballons, Entfernung zum Zündpunkt 0.75 m; b) Druckverlauf außerhalb des Ballons, Entfernung zum Zündpunkt 6.25 m.



Abb. 4: Das FZK-Rohr zur Untersuchung der Ausbreitung von Detonationswellen.

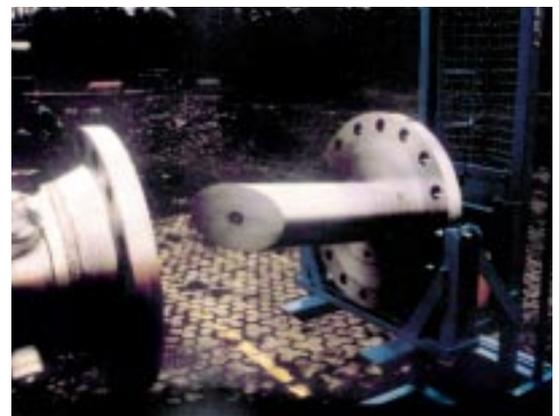


Abb. 5: Eingebautes Target im FZK-Rohr.

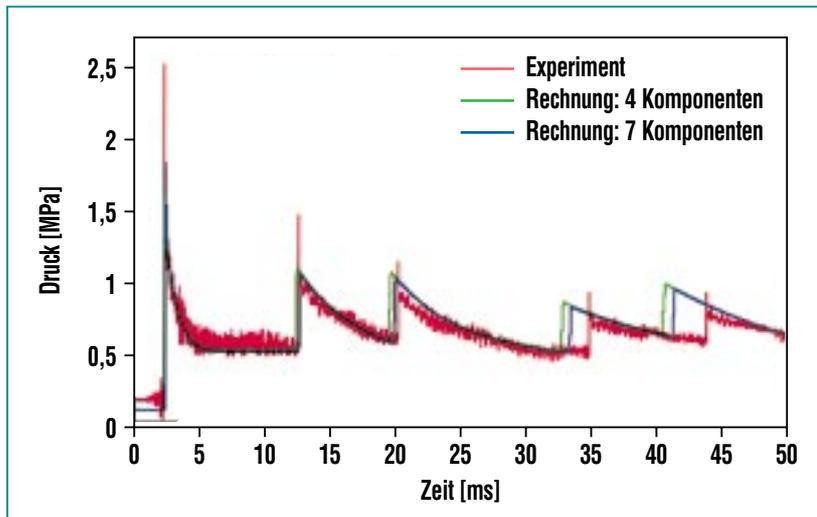


Abb. 6: Druckverläufe im FZK-Rohr 4.25 m vom Zündort. Der Chapman-Jouguet-Druck ist 1.59 MPa.

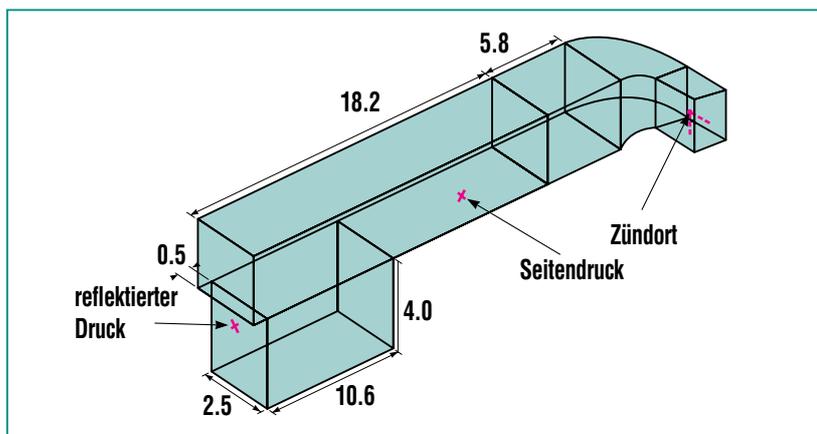


Abb. 7: Skizze der RUT-Anlage, Dimensionen in m.

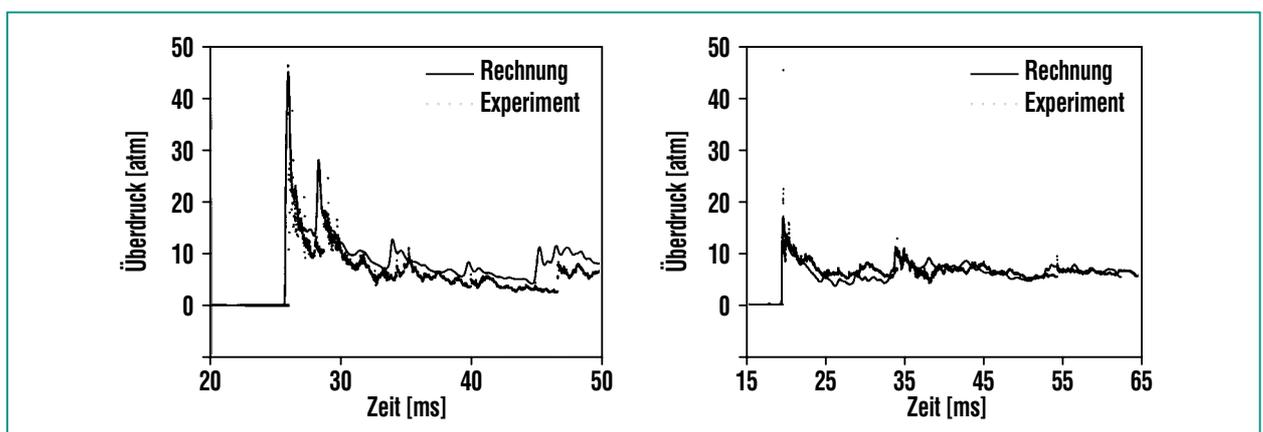


Abb. 8: a) Druckverlauf an einer reflektierenden Wand der RUT-Anlage; b) Druckverlauf an einer Seitenwand der RUT-Anlage.

gesichts einer erheblich angestiegenen Rechenzeit im zweiten Fall wird man sich deshalb bei Rechnungen für Reaktor-Containments auf die einfachere Kinetik beschränken können.

### RUT-Anlage

Sehr viele Experimente in großem Maßstab (maximales Volumen ca. 300 m<sup>3</sup>) und unter komplexen geometrischen Verhältnissen wurden in der RUT-Anlage nahe Moskau durchgeführt. Abb. 7 zeigt eine Skizze dieser Anlage.

Wie bei den beiden ersten Testreihen ergeben sich gute Übereinstimmungen zwischen Messungen und Rechnungen. Man beachte hierzu die Abb. 8a und b, in denen zwei typische Druckverläufe für einen Versuch mit 25 % Wasserstoff und 75 % Luft geplottet sind; Abb. 8a zeigt den Druckverlauf an einer normal reflektierenden und Abb. 8b den an einer Seitenwand der RUT-Anlage. Die genauen Messpositionen und der Zündort können Abb. 7 entnommen werden.

Fall	Druck	Temperatur		H <sub>2</sub>		Wasserdampf		H <sub>2</sub> (Gesamtmasse)
		Dom	sonst	Dom	sonst	Dom	sonst	
A	3 bar	100 °C	40 °C	20%	5%	40%	50%	1220 kg
B	3 bar	120 °C	40 °C	20%	5%	53.3%	2.4%	1194 kg
C	1.23 bar	47 °C		vertikal von 13% auf 7% abnehmend		0%		690 kg

Tab. 1: Typische Anfangszustände der Containment-Atmosphäre bestehend aus Wasserstoff, Luft und Wasserdampf

### Lokale Detonationsrechnungen für ein Reaktorcontainment

Der Code DET3D wurde dazu benützt, Druckverteilungen zu berechnen, die bei einer postulierten Wasserstoff-Luft-Detonation das Reaktor-Containment belasten können [5]. Dazu wurde ein 3-dimensionales Computer-Modell eines solchen Containments erstellt, bestehend aus einem regulären cartesischen Gitter mit ca. 1 Million Zellen von 40 cm Seitenlänge und mit einem Gesamtvolumen von ca. 56000 m<sup>3</sup>. Alle Rechnungen wurden auf IBM RISC/6000 Workstations durchgeführt.

In Tab. 1 sind mit den Fällen A, B und C einige typische Anfangsbedingungen aufgelistet. Abb. 9 zeigt den Verlauf einer Detonation für Fall A: Die Zündung erfolgt

links oben an der unteren Domgrenze (siehe Abb. 10): oberhalb dieser Grenze befindet sich das detonierbare, wasserstoffreiche Gasmisch, unterhalb das magerere Gemisch.

Die Bildfolge zeigt deutlich die schnelle, kugelförmige Ausbreitung der Detonationswelle im Dom (10 bis 30 ms) und die langsamere, stoßinduzierte Verbrennungswelle nach unten in das übrige Containment. Nach ca. 30 ms hat die Detonationswelle den gesamten Dom durchlaufen, und das heiße, verbrannte Gas mischt sich nun durch Konvektion mit dem übrigen mageren Gemisch und führt auch hier zu Verbrennungsvorgängen. Die Schnappschüsse für 40, 60 und 120 ms geben einen Eindruck von der komplexen Struktur der reflektierten und miteinander

wechselwirkenden Stoß- und Verbrennungswellen.

Es besteht bei DET3D die Möglichkeit, vor Beginn der Rechnung eine beliebige Anzahl von „Druckaufnehmern“ zu spezifizieren, d.h. von Punkten, in denen relevante Daten wie Druck, Temperatur oder Gaszusammensetzung als Funktion der Zeit aufgezeichnet werden. Besonders interessant für die Belastung eines Containments sind die Drücke an der Containment-Wand.

In Abb. 10 sind einige dieser Drücke für die Fälle A, B und C geplottet.

Neben den Fällen A-C wurden noch sehr viele weitere Fälle untersucht, die sich hinsichtlich Anfangszustand des Gases und Zündort unterscheiden und damit ein breites Spektrum von möglichen Unfallszenarien abdecken.

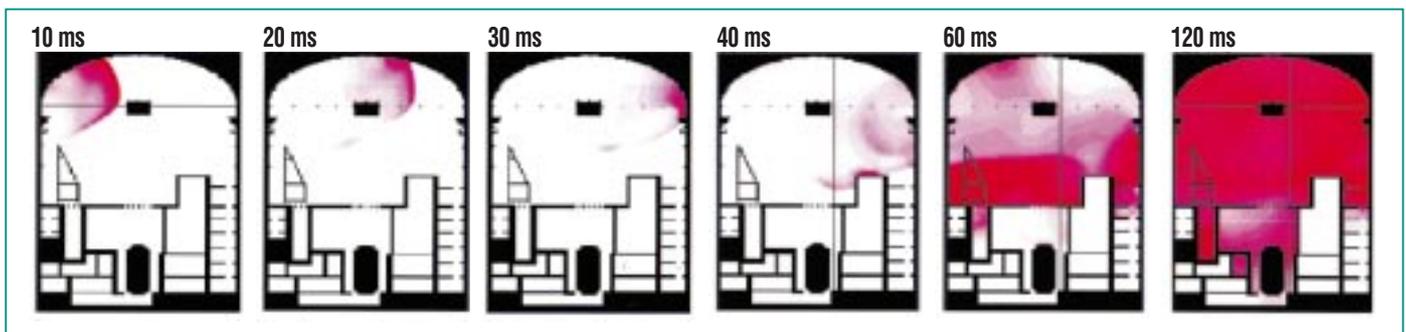


Abb. 9: Numerische Simulation einer Detonation in einem Containment. Anfangsbedingung gemäß Fall A; Zündung links oben an der unteren Domgrenze.

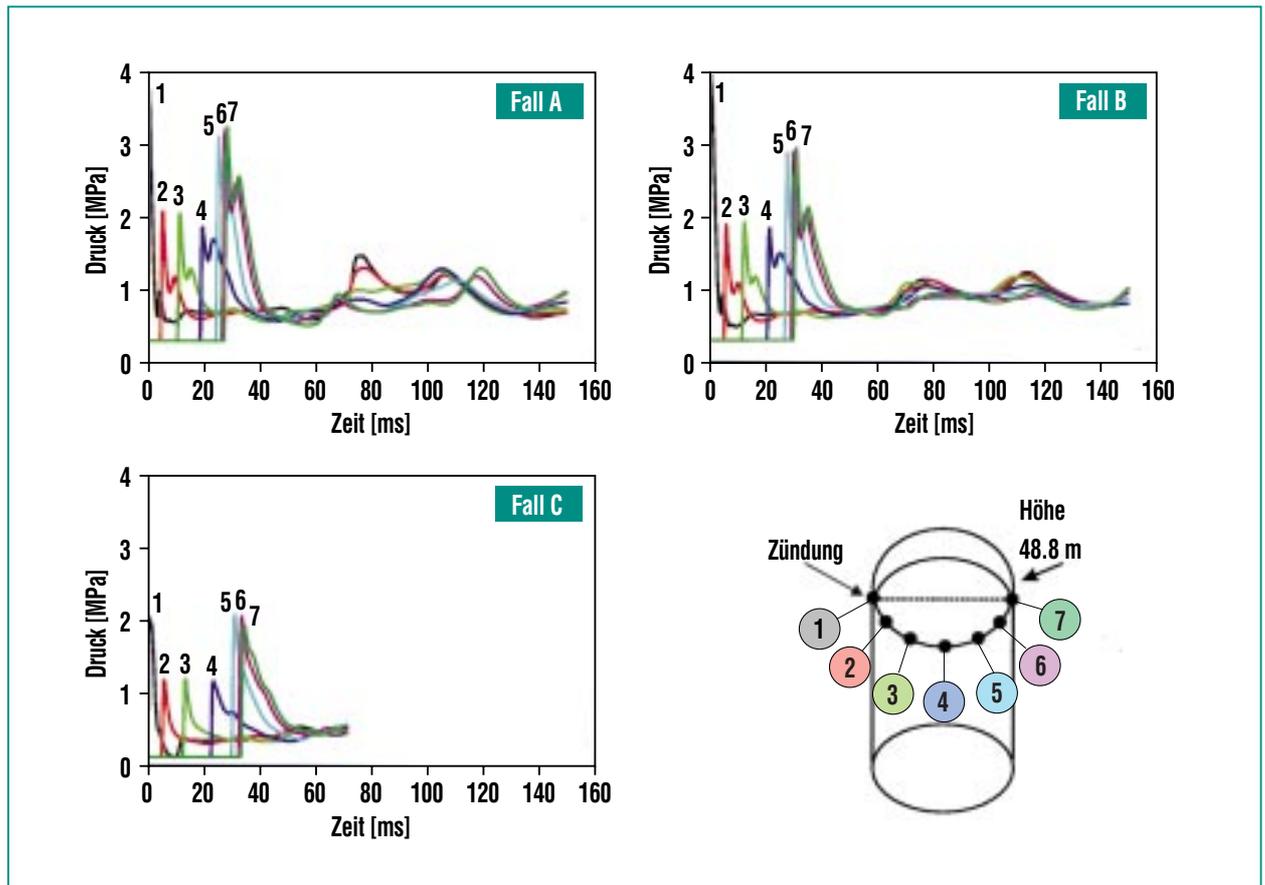


Abb. 10: Druckverläufe am unteren Rand des Doms.

Die zu Anfang im Containment enthaltene Menge an Wasserstoff variierte dabei zwischen ca. 700 und 1850 kg. Die berechneten Drücke stellen eine konservative Obergrenze dar, die später durch feinere physikalische Modelle und Berücksichtigung aktiver Gegenmaßnahmen wie etwa Zünder oder Rekombinatoren reduziert werden kann. Eine wichtige Folgerung aus den DET3D-Rechnungen kann aber schon heute gezogen werden: Der Bau eines Beton-Containments, das allen von Wasserstoff-Luft-Verbrennungen herrührenden Drucklasten standhält, liegt bautechnisch im Bereich des Möglichen [8]. (Dass über die Vertret-

barkeit der dadurch entstehenden Kosten die Meinungen auseinandergehen, ist eine andere Frage.)

### Zusammenfassung

Der im FZK entwickelte explizite, 3-dimensionale, finite Differenzencode DET3D ist ein flexibles Werkzeug zur numerischen Simulation von Detonationen in Gasströmungen. Sowohl die Anzahl der Gaskomponenten als auch das chemische Reaktionsschema können vom Benutzer frei vorgegeben werden. Der Code wurde durch Vergleich mit analytisch bekannten Lösungen und mit einer großen Anzahl von

Experimenten, die einen weiten Bereich von Längenskalen und Geometrien abdecken, validiert.

In den letzten Jahren wurde DET3D dazu benützt, Wasserstoff-Luft-Dampf-Detonationen in einem komplexen Modell-Reaktorcontainment zu simulieren. Die berechneten Lasten liefern eine Datenbasis für Studien zu detonationssicheren Containmentstrukturen.

---

---

## Literatur

- [1] H.H. Hennies, G. Keßler, J. Eibl, *Atomwirtschaft* 37 (1992), 238-247
- [2] JANAF Thermodynamical Tables, *J. Phys. and Chem. Ref. Data* 14 (1985), Supplement
- [3] A. Harten, P.D. Lax, B. van Leer, *SIAM Review* 25 (1983), 35-62
- [4] G. Taylor, *Proc. Royal Soc. London Ser. A* 200 (1950), 235-247
- [5] W. Breitung, R. Redlinger, *Kerntechnik* 59 (1994), 162-170
- [6] W. Breitung, R. Redlinger, *Nuclear Technology* 111 (1995), 420-425
- [7] H. Pförtner, *Ausbreitungsfunktionen detonierender Wasserstoff-Luft-Gemische*, Fraunhofer-Institut für Chemische Technologie, FhG-Projekt Nr. 102 555, Pfanztal 1991
- [8] J. Eibl, *Zur bautechnischen Machbarkeit eines alternativen Containments für Druckwasserreaktoren – Stufe 3*, Karlsruhe 1993