

# Numerische Simulation von Gasedetonationen im ITER-FEAT-Fusionsreaktor

R. Redlinger, IKET; L. Obholz, HIK

## Einleitung

Die Erzeugung von Energie durch Kernfusion ist eine der möglichen Zukunftstechnologien, die gegenwärtig in internationaler Kooperation im ITER-FEAT-Projekt (International Thermonuclear Experimental Reactor-Fusion Energy Advanced Tokamak) auf ihre technologische und wirtschaftliche Machbarkeit hin untersucht wird [1]. Grob gesagt besteht der Hauptteil (das Vakuumgefäß für das Plasma) des geplanten Fusionsreaktors aus 18 Scheiben der in Abb. 1 gezeigten Gestalt.

Für die Lizenzierung des Reaktors sind auch umfangreiche Sicher-

heitsanalysen nötig [2]. Eines der betrachteten Unfallszenarien (der sogenannte „ex-vessel loss of coolant accident“) führt auf die Möglichkeit einer Wasserstoff-Luft-Reaktion im Reaktor, wobei für die Auslegung des Reaktors insbesondere die Drucklasten als Folge dieser Verbrennungsvorgänge von Interesse sind. Detonationen liefern konservative, obere Schranken für diese Drücke, und die numerische Simulation einer derartigen (postulierten) Wasserstoff-Luft-Detonation im geplanten ITER-FEAT-Fusionsreaktor mithilfe einer parallelisierten Version des am IKET entwickelten Rechencodes DET3D soll im folgenden dargestellt werden.

## Beschreibung des Rechencodes

Da Detonationen sehr schnelle Vorgänge sind – die übliche Geschwindigkeit der Detonationswelle bei Wasserstoff-Luft-Detonationen bewegt sich im Bereich von 1500-2000 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 cartesianischen 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**

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

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

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

**Energieerhaltung**

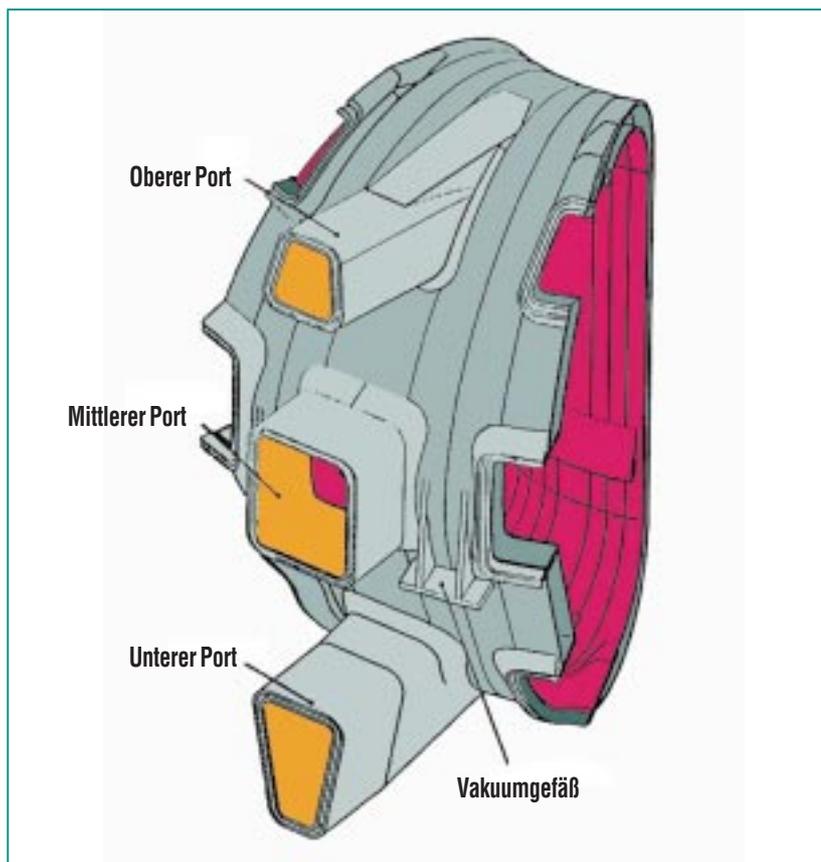


Abb. 1: Eine 20°-„Scheibe“ des ITER-FEAT-Vakuumgefäßes zur Einschließung des Fusionsplasmas.

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 (intern vom Code verwendeten) spezifischen Wärmen, werden als Polynome der Temperatur angegeben, die durch Interpolation von Messdaten [3] erhalten wurden.

Als numerischen Löser benützt DET3D ein modernes Verfahren, das Stoßvorgänge automatisch modelliert („shock capturing“), siehe etwa [4]. Das implementierte Verfahren ist explizit und benützt finite Differenzen, wobei der Benutzer die Wahl zwischen Lösern 1. und 2. Ordnung hat.

Bezüglich der Validierung des Codes an Experimenten und bekannten analytischen Lösungen sowie seiner Anwendung auf Sicherheitsstudien für Kernkraftwerke sei der Leser auf [5] verwiesen.

## Parallelisierung

Zur Parallelisierung von DET3D wurde die Methode der Gebietszerlegung gewählt, d.h. das quaderförmige, 3-dimensionale Re-

chengebiet wird in einzelne Blöcke (kleinere Quader) aufgeteilt, wobei der Benutzer vor Beginn der Rechnung die Anzahl der Unterteilungen in allen 3 Koordinatenrichtungen vorgibt. Eine Zerlegung  $Z = (2, 1, 2)$  bedeutet z.B. 2 Abschnitte in x-, 1 Abschnitt in y- und 2 Abschnitte in z-Richtung, das heißt  $2 \times 1 \times 2 = 4$  Blöcke.

Jeder so erhaltene Block hat dann während der Rechnung „seinen“ zu ihm gehörenden Prozessor. Im eben angeführten Beispiel würde man die Rechnung also auf 4 Prozessoren durchführen.

Implementiert wurde diese Methode der Parallelisierung mit Hilfe von MPI (Message Passing Interface), einem Standard-Programmpaket, das von einer Gruppe von Hard- und Softwarefirmen sowie Benutzern entwickelt wurde [6].

Theoretisch könnte man somit bei  $N$  Prozessoren die Rechenzeit im günstigsten Fall um einen Faktor  $N$  verkleinern. In der Praxis ist das natürlich aus mehreren Gründen nicht durchführbar. Genannt seien hier:

- Nicht alle Teile des Codes sind parallelisierbar.
- Die Prozessoren müssen immer wieder synchronisiert werden. Bei DET3D z.B. jeweils nach Beendigung eines Zeitschritts. Da die einzelnen Prozessoren aber i.a. nicht dieselbe Rechenlast haben (die Blöcke sind ja meistens nicht gleich groß wählbar) und deshalb unterschiedlich lange für einen Zeitschritt brauchen, führt das zu Zeitverlusten.

- Die einzelnen Prozessoren müssen miteinander kommunizieren, d.h. Daten austauschen. Dieser Datenaustausch ist aber eine zusätzliche Aufgabe des parallelisierten Codes, die bei der Rechnung auf nur einem Prozessor gar nicht vorkommt.

Tab. 1 macht diesen Effekt anhand einer Testrechnung auf der SP-Power-3-SMP-Maschine des FZK-Rechenzentrums deutlich (eine ITER-Rechnung wie im nächsten Abschnitt beschrieben mit 500 Zeitschritten): Die theoretisch mögliche Verkürzung der Rechenzeit bei  $N$  Prozessoren um den Faktor  $N$  wird nur für sehr kleine Werte von  $N$  wenigstens annähernd erreicht. Für größere Werte entfernt man sich immer mehr davon.

Man beachte in Tab. 1 auch, dass es dabei durchaus auf die Art der Gebietszerlegung ankommt. Dieser Effekt ist schon bei 4 Prozessoren und den Zerlegungen  $(1, 4, 1)$  und  $(2, 2, 1)$  sichtbar. Überraschender ist der Vergleich der Rechnungen mit 32 und 36 Prozessoren: Die Rechnung mit 36 Prozessoren dauert wegen der ungünstigen Zerlegung  $(6, 6, 1)$  deutlich länger als die Rechnung auf 32 Prozessoren mit der günstigeren  $(4, 4, 2)$ -Zerlegung.

Neben der Verkürzung der Rechenzeit sei noch ein weiterer, sehr wichtiger Vorteil der parallelisierten Rechnung erwähnt: Da das Startfile in kleinen Stücken auf mehrere Prozessoren verteilt wird, lassen sich so wesentlich größere Probleme in Angriff nehmen als dies auf nur einem Prozessor möglich wäre, siehe z.B. die in Abschnitt 5 erwähnten Rechnungen.

Anzahl Prozessoren	Zerlegung			Rechenzeit [s]	Beschleunigungsfaktor
	x	y	z		
1	1	1	1	132732	1.00
2	1	2	1	68576	1.94
4	1	4	1	38004	3.49
4	2	2	1	35171	3.77
9	3	3	1	19280	6.88
16	4	4	1	10634	12.48
25	5	5	1	8372	15.85
32	4	4	2	5575	23.81
36	6	6	1	5969	22.24
50	5	5	2	4112	32.28
72	6	6	2	3568	37.20

**Tab. 1: Einfluss der Anzahl der Prozessoren auf die Rechenzeit. Testrechnung mit ca. 1.25 Mio numerischer Zellen.**

### Simulation einer Gasedetonation im ITER-FEAT Fusionsreaktor

Der parallelisierte Code DET3D wurde dazu benutzt, Druckverteilungen im ITER-FEAT-Reaktor zu berechnen, die durch eine postulierte Wasserstoff-Luft-Detonation entstehen [7]. Als Unfallszenario wird dabei der Bruch eines Kühlrohres angenommen. Dadurch kommt (nach einigen Minuten) der Dampf des Kühlsystems mit dem heißen Beryllium des Vakuumgefäßes in Kontakt, was zur chemischen Erzeugung von Wasserstoff führt. Dieser Wasserstoff seinerseits kann dann später mit der Luft reagieren, die nach Ausströmen des Dampfes durch das gebrochene Kühlrohr in das Vakuumgefäß eindringt [8].

Alle Rechnungen wurden auf einem IBM-RS/6000-Parallelrech-

ner vom Typ SP-Power-3-SMP unter Verwendung von 9 Prozessoren durchgeführt. Als Gebietszerlegung wurde (3, 1, 3) gewählt.

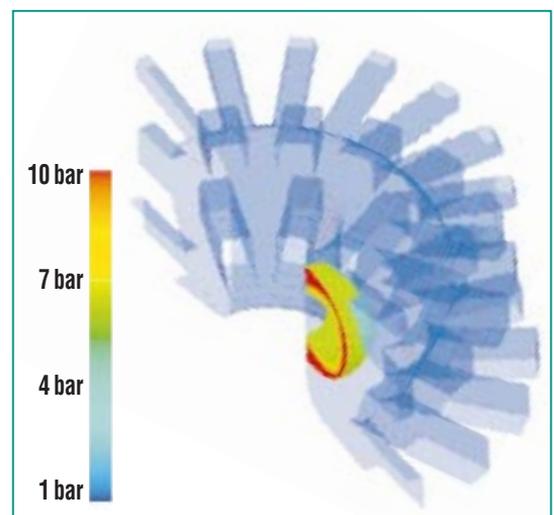
Zunächst wurde anhand vom ITER-Team bereitgestellter Informationen ein 3-dimensionales Modell des Vakuumgefäßes im Code implementiert, das die komplexe Geometrie des Reaktor-Torus' plus Ports analytisch exakt nachbildet. Das diskretisierte numerische Gitter wird dann vom Code nach Eingabe der gewünschten numerischen Maschenweite selbst erstellt.

Im betrachteten Unfallszenario wird nun angenommen, dass insgesamt 5 kg Wasserstoff verbrannt werden. Um für die bei dieser Verbrennung auf das Vakuumgefäß ausgeübten Drucklasten limitierende obere Schranken zu bekommen, wurden folgende Anfangsbedingungen gewählt:

- stöchiometrische Mischung von Wasserstoff und Luft in einem keilförmigen Bereich des Reaktors; ansonsten Luft.
- Zündung in der Spitze des Keils an der inneren Toruswand.
- Anfangsdruck 1 bar, Anfangstemperatur 140° Celsius.
- keine internen Strukturen in den Ports.

Insgesamt ergibt das einen hochexplosiven, keilförmigen Gasbereich von ca. 290 m<sup>3</sup>, während das gesamte Volumen des Vakuumgefäßes plus Ports ca. 2250 m<sup>3</sup> beträgt.

Nach Zündung wird dieser Keilbereich von einer kugelförmigen Detonationswelle durchlaufen. Die Welle hat eine Geschwindigkeit von ca. 1800 m/s und an der Front einen Spitzendruck von ca. 13 bar. Die Situation nach 1 ms veranschaulicht Abb. 2.



**Abb. 2: Druck-Konturplot der kugelförmigen Detonationswelle nach 1 ms. Zündung war im Mittelpunkt der „Detonationskugel“. Gezeigt wird die Hälfte des Reaktormodells; Maschenweite 15 cm, ca. 2.2 Mio. Zellen.**

Außerhalb des Wasserstoff-Luft-Keils breitet sich die Detonationswelle als expansive Druckwelle in den Rest des Reaktors aus, wobei Gasgeschwindigkeit und -druck sehr schnell abnehmen, da dort keine chemischen Reaktionen mehr stattfinden. Ca. 25 ms nach der Zündung treffen die beiden (symmetrischen) Druckwellen auf der gegenüberliegenden Torusseite aufeinander, wobei durch Überlagerung im Gasbereich noch Spitzendrücke von ca. 5 bar erreicht werden können, an den Wänden durch Reflektion sogar um die 10 bar (siehe z.B. Abb. 4d).

Abb. 3 zeigt die Ausbreitung der nach rechts laufenden Detonationswelle im Reaktor in Momentaufnahmen von 1 bis 6 ms anhand eines vertikalen Schnitts durch die Symmetrieebene des Torus. Bei 1 ms ist die Welle (zumindest im

Zentrum des stöchiometrischen Wasserstoff-Luft-Keils) noch annähernd kugelförmig. Die Öffnungen der Ports werden nach ca. 2 ms erreicht, die Portenden nach etwas mehr als 3 ms. Bei 6 ms sieht man schon die reflektierte, nach links laufende Detonationswelle; der gesamte Wasserstoff ist jetzt verbrannt, und es handelt sich nun nur noch darum, die folgenden Stoßwellen und Reflektionen mit dem Code zu simulieren.

### Verkleinern der numerischen Zellgröße

Da die Reaktorgeometrie im Code analytisch in absoluten Einheiten (Meter) implementiert wurde, kann man durch Änderung einer einzigen Eingabegröße, nämlich der numerischen Maschenweite, immer „bessere“, automatisch

vom Code erzeugte, diskretisierte Modelle dieser Geometrie bei der Rechnung verwenden. Der Einfluss der gewählten Maschenweite auf die erhaltenen Rechenergebnisse lässt sich so auf sehr einfache Weise studieren.

Ein prinzipielles Problem bei CFD (Computational Fluid Dynamics)-Rechnungen mit diskretisierten Modellen und Gleichungen ist ja immer die Frage, wie nahe die berechneten Werte an der exakten Lösung liegen. Theoretisch gilt Konvergenz, wenn die Maschenweite gegen Null geht, doch sind über den absoluten Fehler im konkreten Fall bei gegebener Maschenweite im allgemeinen nur sehr vage Aussagen möglich. Die Art, wie die Modell-Geometrie in DET3D implementiert wird, ermöglicht nun folgende Vorgehensweise: Man verfeinert die Ma-

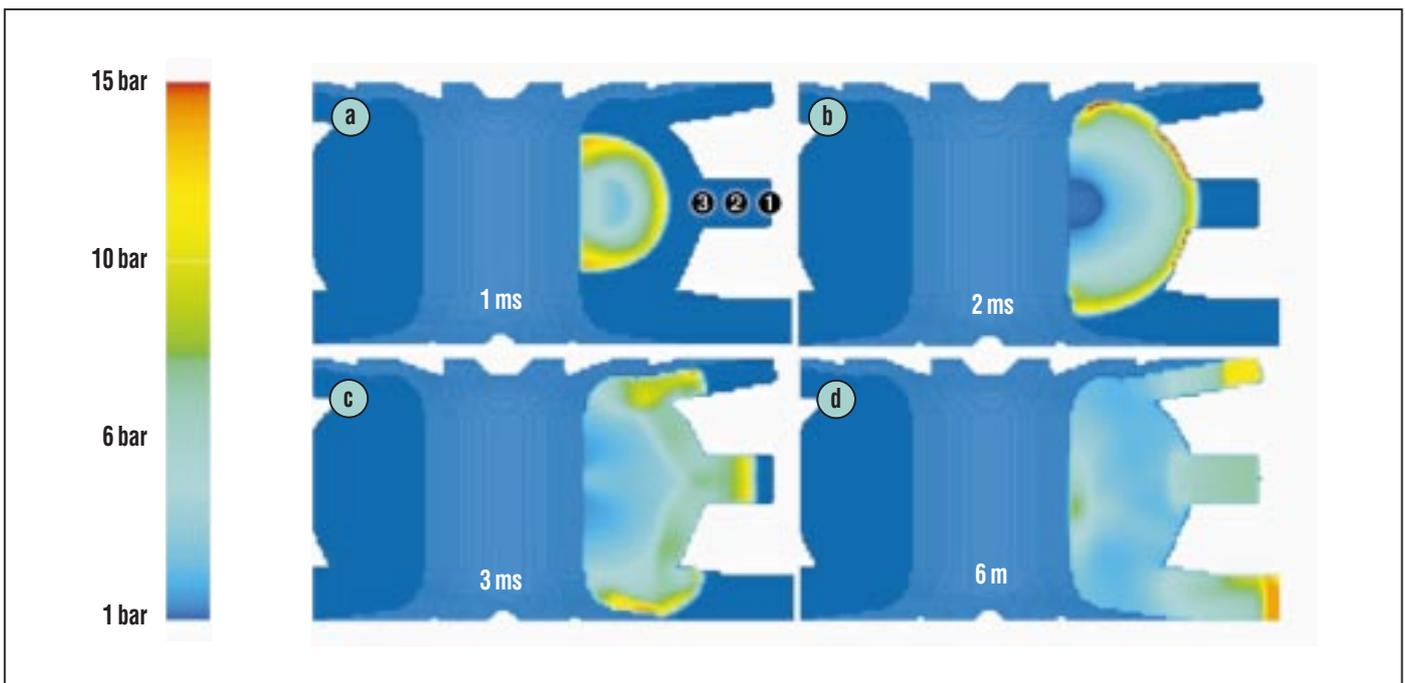


Abb. 3: Ausbreitung der Detonationswelle zu verschiedenen Zeiten nach der Zündung. Die Ziffern im hauptsächlich betroffenen mittleren Port geben die Positionen der Drucksimulationen in Abb. 4 an. Der vertikale Schnitt durch den Torus ist auf der linken Seite nicht ganz vollständig wiedergegeben.

schenweite solange, bis sich die berechneten Druckdaten nicht mehr wesentlich ändern, und akzeptiert dann diese Werte als realistisch. Diese Methode wurde auf das ITER-Szenario angewendet, und zwar für die Maschenweiten 15.0, 11.6 und 8.5 cm.

Abb. 4 zeigt einen Vergleich der Druckverläufe an den drei in Abb. 3a mit 1, 2, 3 markierten Positionen im hochexplosiven Wasser-

stoff-Luft Keil, sowie zusätzlich zum Vergleich einen Druckverlauf im inerten Luft-Bereich, und zwar an einer Position, die dem Zündpunkt an der inneren Torusseite gegenüberliegt.

Man sieht, dass sich die berechneten Daten für die Maschenweite 8.5 cm nicht mehr stark von denen für 11.6 cm unterscheiden. Noch deutlicher wird diese Übereinstimmung, wenn man nicht den

(Über-)Druck selbst, sondern sein Integral über die Zeit betrachtet, den sogenannten Impuls. Es ist bekannt, dass für die Strukturanalyse, d.h. die Untersuchung der Wirkung der Druckwellen auf die Wände, dieser Impuls von entscheidender Bedeutung ist [9], [10].

Plottet man nun diesen Impuls an verschiedenen Positionen, so erhält man für alle 3 Rechnungen je-

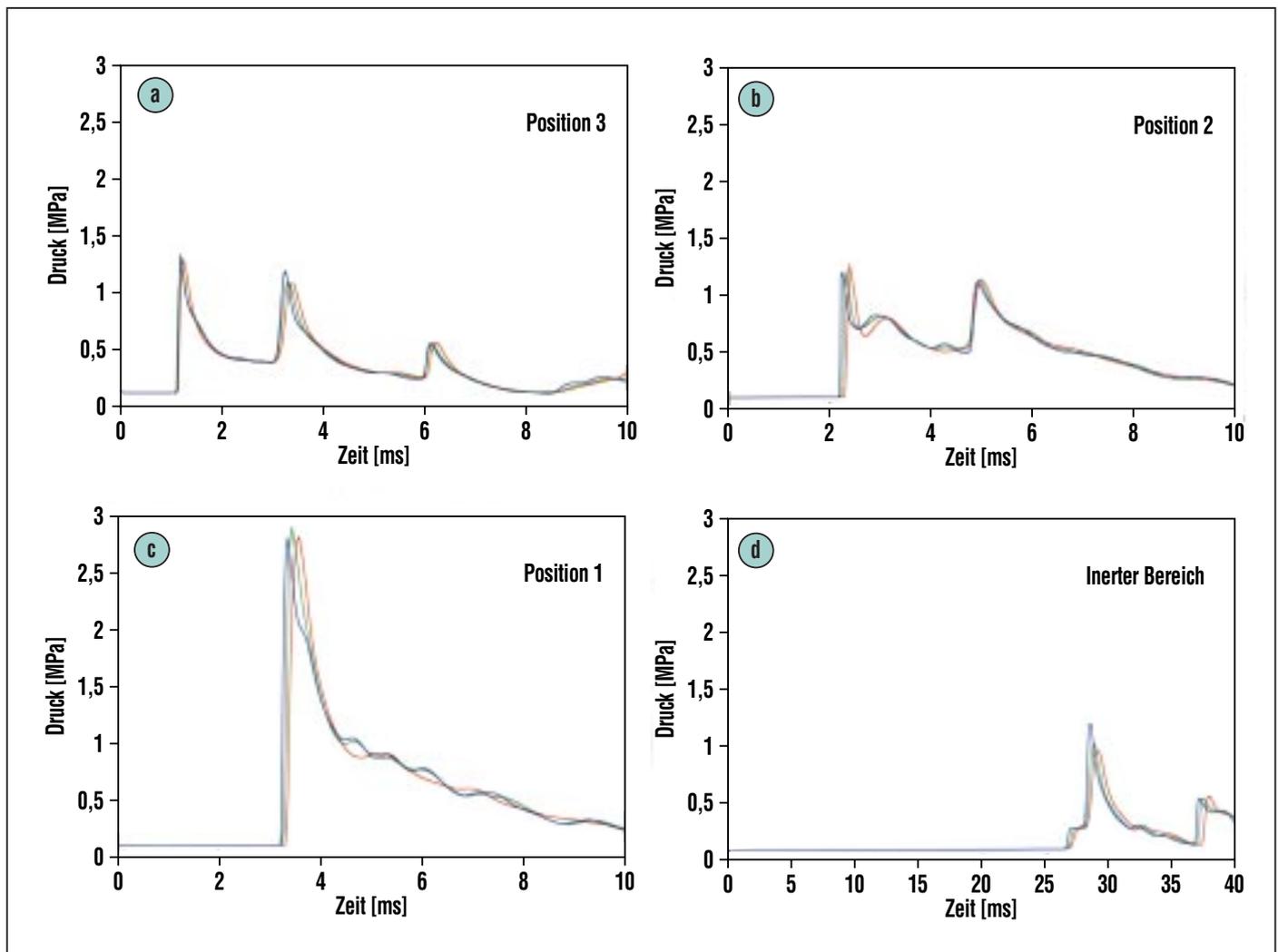


Abb. 4: Druckverläufe an den Positionen 1, 2, 3 der Abb. 3a für Rechnungen verschiedener Maschenweite. Die erste Druckspitze kennzeichnet jeweils die Ankunft der Detonationswelle, die späteren stammen von Reflektionen dieser Welle an den Wänden. Zum Vergleich noch ein Druckverlauf im inerten Bereich: Innere Toruswand, diametral gegenüber der Zündung. Maschenweite 15.0 cm: rot, 11.6 cm: grün, 8.5 cm: blau.

weils praktisch dieselbe Kurve. Ein typisches Beispiel dieser Fast-Übereinstimmung zeigt Abb. 5. Dies bedeutet, dass schon die 15-cm-Rechnung brauchbare Werte

für den Impuls liefert, und dass die mit dieser Rechnung erhaltenen Ergebnisse deshalb für eine Sicherheitsanalyse akzeptiert werden können [7].

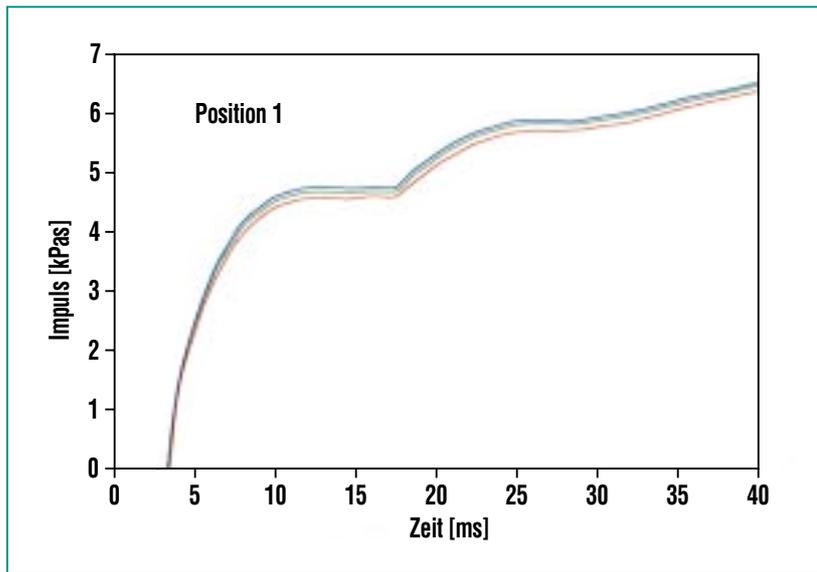


Abb. 5: Impulsverlauf an der Position 1 der Abb. 3a für Rechnungen verschiedener Maschenweite. Maschenweite 15.0 cm: rot, 11.6 cm: grün, 8.5 cm: blau.

## Zusammenfassung

Die parallelisierte Version des Finite-Differenzen-Codes DET3D ermöglicht die 3-dimensionale Simulation von Gasedetonationen auf sehr feinen numerischen Gittern. Rechnungen auf diskretisierten Geometriemodellen mit z.B. 10 Millionen numerischer Zellen sind damit ohne weiteres möglich. Illustriert wird dies im vorliegenden Bericht am Beispiel einer Sicherheitsanalyse für den geplanten ITER-FEAT-Fusionsreaktor.

## Literatur

- [1] W. Bahm, G. Dammertz, M. Glugla, G. Janeschitz, P. Komarek, A. Mack, *Int. Zeitschrift für Kernenergie (atw)* 47 (2002), 96-106
- [2] M.J. Gaeta, B.J. Merrill, H.-W. Bartels, C.R. Laval, L. Topilski, *Fusion Technology* 32 (1997), 23-34
- [3] *JANAF Thermochemical Tables, J. Phys. and Chem. Ref. Data* 14 (1985), Supplement
- [4] A. Harten, P.D. Lax, B. van Leer, *SIAM Review* 25 (1983), 35-62
- [5] R. Redlinger, *Nachrichten-Forschungszentrum Karlsruhe* 32 (2000), 243-249
- [6] Wegen näherer Informationen zu MPI sei auf die MPI-homepage [www-unix.mcs.anl.gov/mpi](http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi) verwiesen.
- [7] W. Baumann, W. Breitung, B. Kaup, R. Redlinger, J.R. Travis, *Wissenschaftliche Berichte – Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6584* (2001), iv + 28 pp.
- [8] W. Baumann, W. Breitung, B. Kaup, G. Necker, P. Royl, J.R. Travis, *Wissenschaftliche Berichte – Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6663* (2001), v + 37 pp.
- [9] W. Breitung, R. Redlinger, *Kerntechnik* 59 (1994), 162-170
- [10] W. Breitung, R. Redlinger, *Nuclear Technology* 111 (1995), 420-425