



---

**Forschungszentrum Karlsruhe**  
in der Helmholtz-Gemeinschaft

**Wissenschaftliche Berichte**  
FZKA 7085

# **Innovative Methoden zu Analyse und Kontrolle des Wasserstoffverhaltens bei Kernschmelzunfällen**

**Abschlussbericht zu Teilprojekt 1 des  
HGF-Strategiefondsprojekts 98/07**

**W. Breitung, W. Baumann, U. Bielert,  
B. Burgeth, S. Dorofeev, B. Kaup,  
A. Kotchourko, G. Necker, R. Redlinger,  
P. Royl, J. Starflinger, G. Stern,  
J. R. Travis, A. Veser, Z. Xu**

**Institut für Kern- und Energietechnik  
Programm Nukleare Sicherheitsforschung**

**Februar 2005**



# **Forschungszentrum Karlsruhe**

in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 7085

## **Innovative Methoden zu Analyse und Kontrolle des Wasserstoffverhaltens bei Kernschmelzunfällen**

**Abschlussbericht zu Teilprojekt 1 des HGF-Strategiefondsprojekts 98/07**

W. Breitung, W. Baumann, U. Bielert, B. Burgeth, S. Dorofeev, B. Kaup,  
A. Kotchourko, G. Necker\*\*, R. Redlinger, P. Roysl, J. Starflinger, G. Stern\*\*,  
J. R. Travis\*, A. Vesper\*\*, Z. Xu

Institut für Kern- und Energietechnik  
Programm Nukleare Sicherheitsforschung

\*Ing. Büro Dubois, Pitzer, Travis, Offenbach

\*\*Pro-Science GmbH, Ettlingen

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

2005

**Impressum der Print-Ausgabe:**

**Als Manuskript gedruckt  
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor**

**Forschungszentrum Karlsruhe GmbH  
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe**

**Mitglied der Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft  
Deutscher Forschungszentren (HGF)**

**ISSN 0947-8620**

**urn:nbn:de:0005-070858**

# **Innovative Methoden zu Analyse und Kontrolle des Wasserstoffverhaltens bei Kernschmelzunfällen**

## **Abschlussbericht zu Teilprojekt 1 des HGF-Strategiefondsprojekts 98/07**

### **ZUSAMMENFASSUNG**

Ziel des HGF-Strategiefondsprojekts 98/07 ist die Entwicklung von Methoden zur deterministischen Beschreibung von Wasserstoffverteilungs- und Verbrennungsvorgängen bei Kernschmelzunfällen in DWR-Anlagen. Die Ergebnisse werden für die Optimierung und Weiterentwicklung von Wasserstoffkontrollkonzepten für laufende und zukünftige Reaktoren eingesetzt. Die Arbeiten dienen der weiteren Verminderung des Restrisikos aus dem Betrieb von kerntechnischen Anlagen.

Hauptergebnis des Teilprojekts 1 ist die Entwicklung einer durchgehenden und konsistenten Analysemethodik für das H<sub>2</sub>-Verhalten bei Kernschmelzunfällen. Die jetzt vorliegenden Tools erlauben eine hinreichend genaue Berechnung der Wasserstoff- und Dampfverteilung in einem komplexen Reaktorcontainment, eine Abschätzung der maximal möglichen Verbrennungsgeschwindigkeiten und die numerische 3D-Simulation des entsprechenden Verbrennungsvorgangs (langsame Deflagration, schnelle turbulente Deflagration oder Detonation).

Diese Analysemethodik wurde ganz oder teilweise auf Störfallabläufe in DWRs und in SWRs angewendet (8 DWRs, 3 SWRs). Die Modellierungen für deutsche Reaktoren haben den Zulassungsprozess von katalytischen Rekombinatoren in deutschen DWR-Anlagen unterstützt, indem die Wirksamkeit des Betreiberkonzepts in hochauflösenden 3D-Rechnungen nachgewiesen werden konnte. Die entwickelten FZK-Programme GASFLOW und COM3D werden auch von Framatome ANP zum Nachweis der H<sub>2</sub>-Beherrschung im EPR eingesetzt. Die theoretischen und experimentellen Erfahrungen aus dem nuklearen Bereich werden derzeit von FZK auch für nicht- nukleare Wasserstoffsicherheitsfragen eingesetzt.

**Innovative methods for hydrogen analysis and control  
in reactor core-melt accidents  
Final report for Part 1 of HGF-Strategiefonds-Projekt 98/07**

**ABSTRACT**

The objective of Part 1 of the HGF-Strategiefonds-Projekt 98/07 is the deterministic description of hydrogen distribution and combustion processes during core-melt accidents in Pressurized Water Reactors (PWRs). The results are used for optimization and improvement of hydrogen control methods in operating and future nuclear reactors. The activities aim at further reduction of the residual risk from the operation of nuclear installations.

The main result of Part 1 of the HGF-Strategiefonds-Projekt 98/07 is the development of a complete and consistent analysis methodology for the hydrogen behaviour in core-melt accidents. The now existing tools permit a sufficiently precise 3d computation of the hydrogen and steam distribution in a complex reactor containment, the estimation of the maximum possible combustion velocities and the numerical 3d simulation of the respective combustion regime (slow deflagration, fast turbulent deflagration or detonation).

This analysis procedure was applied fully or in parts to severe accident sequences in pressurized and boiling water reactors (8 PWRs, 3 BWRs). The computations for German plants have supported the licensing process of catalytic recombiners in German PWRs by confirming the effectiveness of the utility concept with high resolution 3d simulations. The programs developed in this project for hydrogen distribution (GASFLOW) and turbulent combustion (COM3D) are now used by Framatome for design and proof of a hydrogen control concept in the European Pressurized Reactor (EPR). The theoretical and experimental know-how gained in the nuclear field will also be applied to non-nuclear hydrogen safety investigations.

# INHALTSVERZEICHNIS

	Seite
1. Einleitung	1-1
1.1 Problemstellung und Ziele des HGF-Strategiefondprojekts	1-1
1.2 Realisierung des Projekts	1-2
1.3 Teilprojekte und Industriepartner	1-2
2. Numerische Simulation des Wasserstoffverhaltens	2-1
3. Begründung für CFD-Modellierung bei FZK	3-1
4. Analysenmethodik	4-1
4.1 Anlagengeometrie	4-1
4.2 Wasserstoff-Gegenmaßnahmen	4-1
4.3 Unfallszenario	4-2
4.4 Wasserstoff- und Dampfquellen	4-3
4-5 Wasserstoffverteilung	4-3
4.6 Zündung	4-4
4.7 Flammenbeschleunigung	4-5
4.8 DDT (Deflagration to Detonation)	4-5
4.9 Verbrennungssimulation	4-7
4.10 Mechanische und thermische Lasten	4-7
4.11 Strukturverhalten	4-8
4.12 Weitere Beschreibung der Arbeiten zur Entwicklung der Analysenmethodik	4-8
5. Übersicht zur Entwicklung und Verifikation von Wasserstoffverteilungsrechnungen	5-1
5.2 Verifikationsproblemstellungen	5-5
6. Verifikation von Modellen für Gegenmaßnahmen	6-1
6.2 Verifikationsproblemstellung 6.2	6-3
7. Risikopotential	7-1
7.1 Versuchsanlagen zu Untersuchung des Risikopotentials von Wasserstoff- Luft- Dampf Gemischen	7-1
7.1.1 FZK 7.2 m Rohr	7-4
7.1.2 FZK 12 m Rohr	7-4
7.1.3 Torpedo-Rohr	7-4
7.1.4 RUT Anlage	7-4
7.1.5 Brennbarkeit eines Wasserstoff-Luft-Dampf-Gemisches	7-5
7.2 Flammenbeschleunigung	7-5
7.3 Detonationsübergang	7-6
7.4 Verifikation auf großen Skalen	7-7
7.5 Implementierung und Verifikation der Kriterien in GASFLOW	7-8
8. Wasserstoffverbrennung	8-1
8.1 Mögliche Verbrennungsregimes in Wasserstoff-Luft-Gemischen	8-1
8.2 Verifikation des Codes V3D	8-6
8.2.1 Beschreibung des Verbrennungscodes V3D	8-6
8.2.2 Stoßrohrexperiment in FZK 12 m Rohr	8-6

8.3	Verifikation des Codes FLAME3D	8-7
8.3.1	Beschreibung des Verbrennungscodes FLAME3D	8-7
8.3.2	Testfall 1D Detonation	8-7
8.3.3	Symmetrische Ausbreitung einer Detonationsfront	8-8
8.3.4	Verbrennungsexperimente in der RUT Anlage Konfiguration 1	8-9
8.3.5	Blinde Vorausrechnung von Verbrennungsexperimente in der Rut Anlage Konfiguration 1	8-10
8.4	Verifikation des Codes COM3D	8-11
8.4.1	Beschreibung de Verbrennungscodes COM3D	8-11
8.4.2	Testfall 2D-Stufe	8-12
8.4.3	Testfall Flamme-Wirbel-Wechselwirkung	8-13
8.4.4	Stoßrohrexperiment in FZK 12 m Rohr	8-14
8.4.5	Verbrennungsexperimente in FZK 12 m Rohr	8-15
8.4.6	Verbrennungsexperimente in RUT Anlage Konfiguration 1	8-16
8.4.7	Verbrennungsexperimente in RUT Anlage Konfiguration 2	8-17
8.5	Verifikation des Codes DET3D	8-18
8.5.1	Beschreibung des Detonationscodes DET3D	8-18
8.5.2	Testfall 1D Detonation	8-19
8.5.3	Detonation in einem hemispherischen Ballon	8-20
8.5.4	Detonationsexperimente im FZK 12 m Rohr	8-21
8.5.5	Großskalige Detonationsversuche in der RUT Anlage	8-22
9.	Strukturverhalten	9-1
9.1	Einmassenschwinger Modell	9-1
9.2	Anwendung auf reale Drucklasten	9-2
10.	Reaktor Anwendungen: Analyse realer Anlagen	10-1
10.1	HDR mit CO <sub>2</sub> -Verdünnung	10-1
10.2	BIBLIS-A mit Sumpfordampfung	10-1
10.3	BIBLIS A mit NIS –Rekombinatoren	10-4
10.4	GKN-2 mit Siemens-Rekombinatoren und Stahlschale	10-5
10.5	GKN-2 Surge-Line LOCA	10-6
10.5.1	Siemens Platten-Rekos	10-7
10.5.2	Jülich Netz Rekos	10-9
10.5.3	Thincat Folie	10-10
10.5.4	Katalytische Oberflächen	10-11
10.6	GKN-2 Small Break Loca mit Siemens Rekombinatoren	10-11
11.	Reaktor Anwendungen: Studien für zukünftige Konzepte	11-1
11.1	EPR ohne und mit Zünder	11-1
11.2	EPR ohne Gegenmaßnahmen	11-3
11.3	EPR/LOOP mit Siemens-Rekombinatoren	11-4
11.4	EPR/LOOP mit Rekombinatoren und Zündern	11-5
11.5	EPR/SB-LOCA mit Rekombinatoren	11-6
11.6	EPR/SB-LOCA mit direkter Dampfeinspeisung	11-6
11.7	Verbund-Containment	11-7
12.	Zusammenfassung und Ergebnisse von Teilprojekt 1	12-1

# 1. EINLEITUNG

## 1.1 Problemstellung und Ziele des HGF-Strategiefondprojekts 98/07

Der Unfall von Three-Mile-Island (1979) hat gezeigt, dass der Sicherheitsbehälter bei Kernschmelzunfällen vor allem durch unkontrollierte Wasserstoffverbrennungsprozesse gefährdet wird. Die spontane Verbrennung von etwa 350 kg Wasserstoff verursachte die einzige ernstzunehmende Druckbelastung während des gesamten Unfalls (Abb.1.1). Da das TMI-Containmentgebäude dieser Belastung standhielt, ergaben sich praktisch keine Konsequenzen für die Umwelt. Der Unfall in Tschernobyl, bei dem Containmentversagen eintrat, hatte dagegen enorme radiologische Belastungen zur Folge (Abb.1.2). Der Vergleich der Unfälle von TMI und Tschernobyl zeigt sehr nachdrücklich welche zentrale Bedeutung dem Containment als letzte Barriere gegen Spaltproduktfreisetzung zukommt. Auch der quantitative Vergleich von Schadensindikatoren mit anderen Energieträgern bestätigt dies (Abb.1.3). Wenn man den Tschernobyl-Unfall ausklammert, also nur TMI mit in die Schadensstatistik einbezieht, ergibt die Kernenergie geringere oder vergleichbare Risiken als andere Energieformen. Die Weiterentwicklung des heutigen nuklearen Sicherheitskonzepts in Richtung auf eine langfristig zukunftsfähige Kerntechnik erfordert deshalb, dass selbst bei einem Kernschmelzunfall die radiologischen Konsequenzen im wesentlichen auf die Anlage beschränkt bleiben müssen. Dies bedeutet, dass bei zukünftigen Reaktoren Kernschmelzunfälle von vorneherein mit in den Anlagendesign einbezogen werden müssen und nicht wie bisher, einem Restrisikobereich zugeschlagen werden.

Ziel dieses Projekts ist daher die Entwicklung von Methoden und Werkzeugen für die Wasserstoffbeherrschung bei Kernschmelzunfällen und Ausschluß von Containmentversagen bei schweren Unfällen in zukünftigen Reaktoranlagen, wie z.B. dem EPR (Abb.1.4). Dazu sind folgende Arbeiten notwendig

- Entwicklung moderner 3-D CFD-Software zu mechanistischen Beschreibung von Wasserstoffverteilung und -verbrennung in Reaktorsicherheitsbehältern,
- Integrale Reaktoranalysen für die Entwicklung von tragfähigen H<sub>2</sub>-Kontrollkonzepten, vor allem basierend auf katalytischen Rekombinatoren,
- Optimierung und Weiterentwicklung bestehender Rekombinatorsysteme, sowie Untersuchung neuer innovativer Komponenten zur H<sub>2</sub>-Kontrolle.

Die Beherrschung der Wasserstoffproblematik stellt eine wichtige Frage der Reaktorsicherheit dar. Ihre Lösung ist eine wesentliche Voraussetzung für die weitere Verringerung des Risikos aus dem Betrieb kerntechnischer Anlagen und für eine zukunftsfähige Kerntechnik.

## 1.2 Realisierung des Projekts

Die Realisierung von Wasserstoffkontrollsystemen in deutschen Reaktoranlagen erfordert eine enge Industriekooperation und ein stufenweises Vorgehen.

Die erste Stufe befasst sich mit der Konzepterstellung. Die notwendigen Partner dazu sind die deutschen Kraftwerksbetreiber als der Endkunde, Siemens / Framatome als Anlagenhersteller, sowie die HGF-Zentren FZK und FZJ mit F+E-Beiträgen. Dabei übernimmt FZK-IKET Softwareentwicklung und Reaktoranalysen, FZK-ISR1 die Softwareoptimierung und spezielle Anwendungen, sowie FZJ-ISR2 die Entwicklung von fortgeschrittenen Rekombinatoren.

Die zweite Stufe ist die Genehmigung des nachgewiesenen H<sub>2</sub>-Kontrollkonzepts durch die entsprechenden Länderbehörden. Gegenstand dieses Projektvorschlags ist aus Laufzeitgründen nur die erste Stufe. Das HGF-Strategiefondsprojekt vertieft und erweitert schon bestehende Zusammenarbeitsverträge mit den Kraftwerksbetreibern (seit 1996) und Siemens-Framatome (seit 1993).

## 1.3 Teilprojekte und Industriepartner

Die Aufgaben und die Vernetzung der Teilprojekte sind in Abb.1.5 zusammengefasst.

**Teilprojekt 1** entwickelt verifizierte Software zur Simulation der wesentlichen physikalischen Prozesse die das Wasserstoffverhalten bestimmen. Zu diesen Prozessen werden relevante experimentelle Daten gesammelt (Verteilung) bzw. durch eigene Versuche auf reaktorrelevanter Skala ergänzt (Verbrennung). Die daran verifizierten numerischen Programme werden dann für Anwendungsrechnungen verwendet. Hier sind zwei Arten von Anwendungen in Bearbeitung:

1. Analysen für bestehende und zukünftige Reaktoranlagen,
2. Analysen zur Optimierung von neuen nuklearen H<sub>2</sub>-Kontrollsystemen die in Teilprojekt 3 erarbeitet werden.

**Teilprojekt 2** übernimmt die CFD-Optimierung und Anwendung der speziellen FZJ-Codes (CFX, AIXCO, SHOCKIN und D3UNS) sowie der im Teilprojekt 1 entwickelten FZK-Codes mit den Verbrennungsprogrammen COM3D, DET2D und DET3D für massiv-parallele Rechner (T3D). FZ-Jülich spielt in diesem Bereich der massivparallelen Datenverarbeitung eine zentrale Rolle unter den Großforschungszentren, sowohl in Bezug auf die Software- und Hardwareinfrastruktur als auch bei praktischen Erfahrungen und Anwendungen. Weitere Einzelheiten sind dazu in dem Endbericht zu Teilprojekt 2 dargestellt.

Die auf dem Jülicher Cray-Komplex parallelisierten CFD-Programme (FZJ-Codes und FZK-Codes) sollen später außerhalb des HGF-Projekts auch auf nicht-nukleare Wasserstoffsysteme angewandt werden (z.B. bei der H<sub>2</sub>-Technologie).

**Teilprojekt 3** befasst sich mit Hardware-Entwicklungen für die H<sub>2</sub>-Kontrolle. Ausgangspunkt sind von Siemens-Framatome (FANP) hergestellte katalytische Rekombinatoren in Plattenanordnung. Dieser Rekombinatortyp soll im Hinblick auf weitere Verbesserungsmöglichkeiten untersucht, und dort wo möglich, optimiert werden.

Das zweite Arbeitsgebiet im Teilprojekt 3 betrifft die Entwicklung neuer innovativer Technologien für den Wasserstoffabbau bei schweren Störfällen in Druck- und Siedewasserreaktoren. Die hierbei verfolgten Forschungsziele betreffen insbesondere eine Erhöhung der H<sub>2</sub>-Abbauraten (derzeit wenige Gramm H<sub>2</sub>/s pro Modul), Vermeidung von Selbstzündung und Verbesserung des Startverhaltens. Weitere Details sind in dem Endbericht zu Teilprojekt 3 dargestellt.

Der Industriepartner des Projektvorschlags ist Siemens-Framatome ANP vormals Siemens-KWU. FANP hat in der Vergangenheit verschiedene Hardware-Komponenten zur Wasserstoffkontrolle entwickelt und für Störfallbedingungen qualifiziert. FANP hat im Rahmen dieses Projekts geeignete H<sub>2</sub>-Abbaukonzepte für reale Anlagen vorgeschlagen und in gemeinsamen Reaktoranalysen mit FZK überprüft (Teilprojekt 1). FANP unterstützt weiterhin die Rekombinatoroptimierung im Rahmen von Teilprojekt 3.

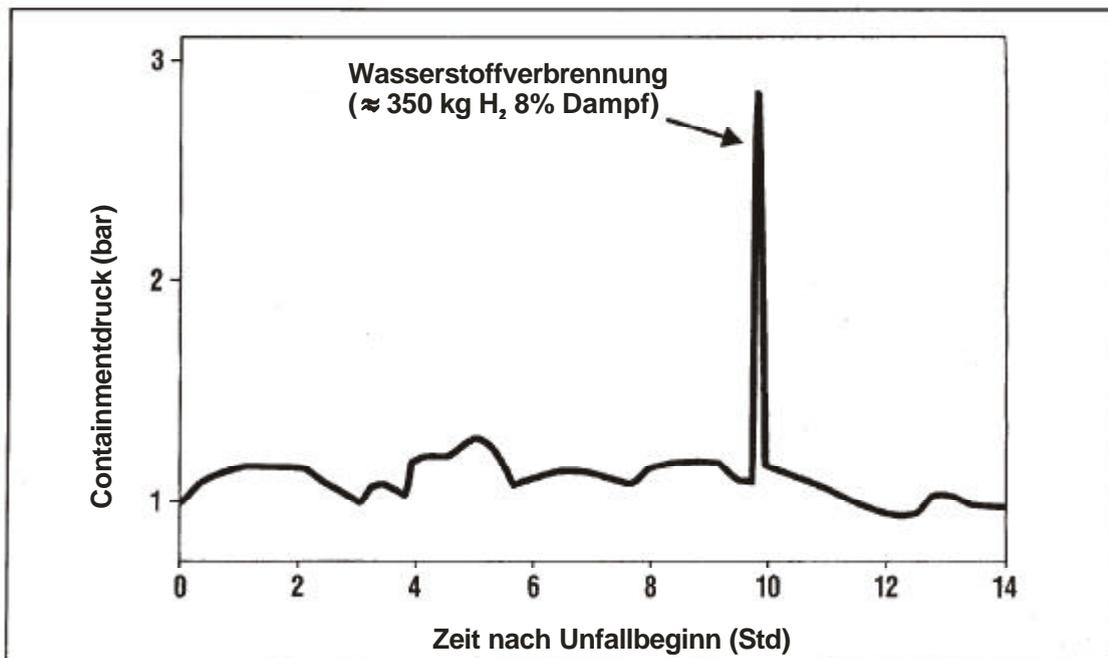


Abb. 1.1: Druckverlauf im TMI-2 Containment während des Unfalls. Nur die Wasserstoffverbrennung verursacht eine nennenswerte Belastung des Containments von nahezu 3 bar. Da kein Containmentversagen auftrat ergaben sich keine radiologischen Belastungen in der Umwelt.

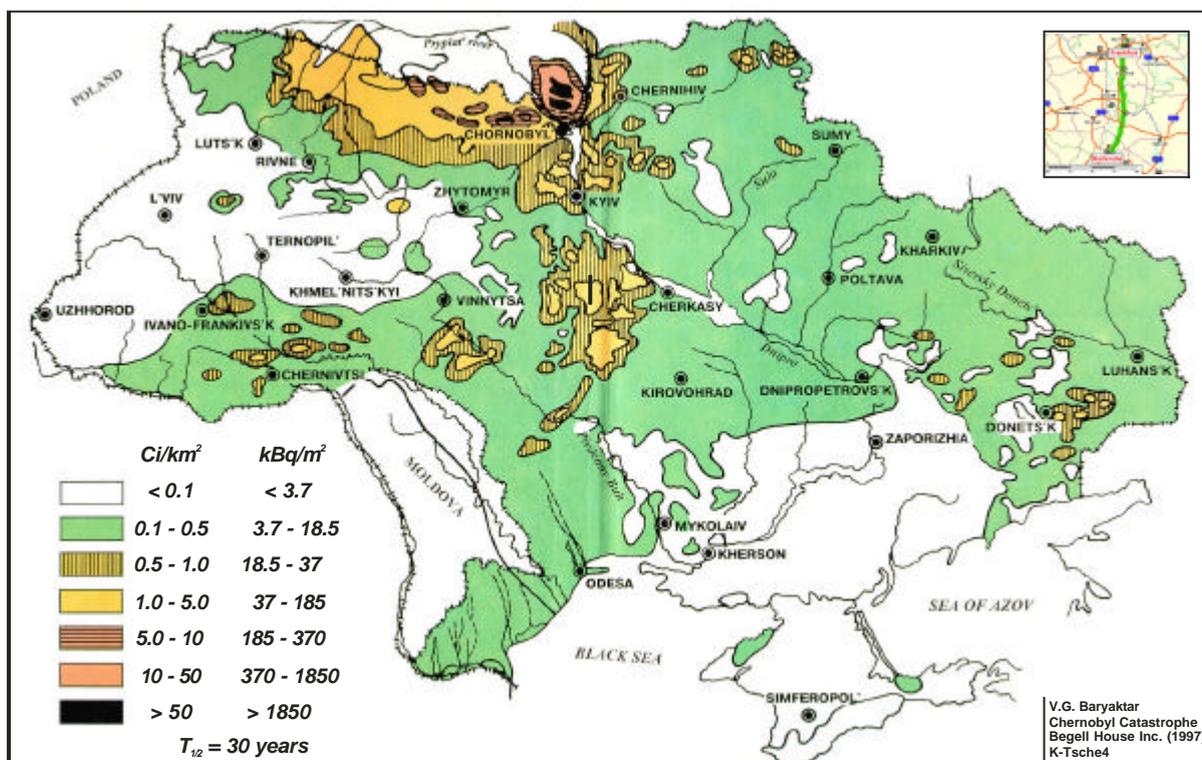


Abb. 1.2: Bodenkontamination mit Cs-137 als Folge des Tschernobyl-Unfalls.

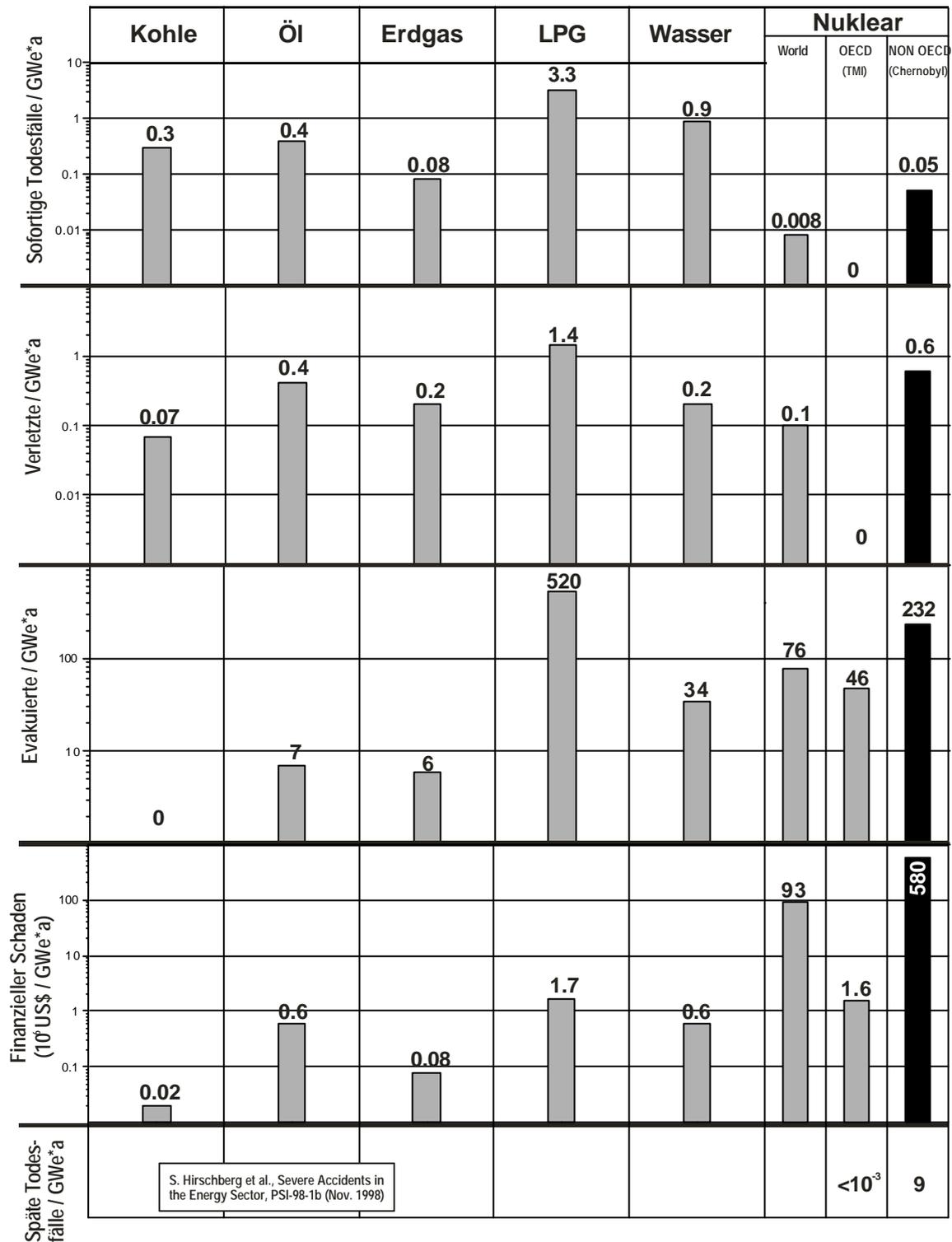


Abb. 1.3: Vergleich von Schadensindikatoren für schwere Unfälle mit verschiedenen Energieträgern. Wenn man den Tschernobylunfall ausklammert Spalte ganz rechts), zeigt die Kernenergie trotz TMI ein vergleichbares oder geringeres Risiko als andere Energieträger (sogar Wasserkraft). In einer weiterentwickelten und zukunftsfähigen Reaktortechnik muss deshalb Containmentversagen ausgeschlossen sein.

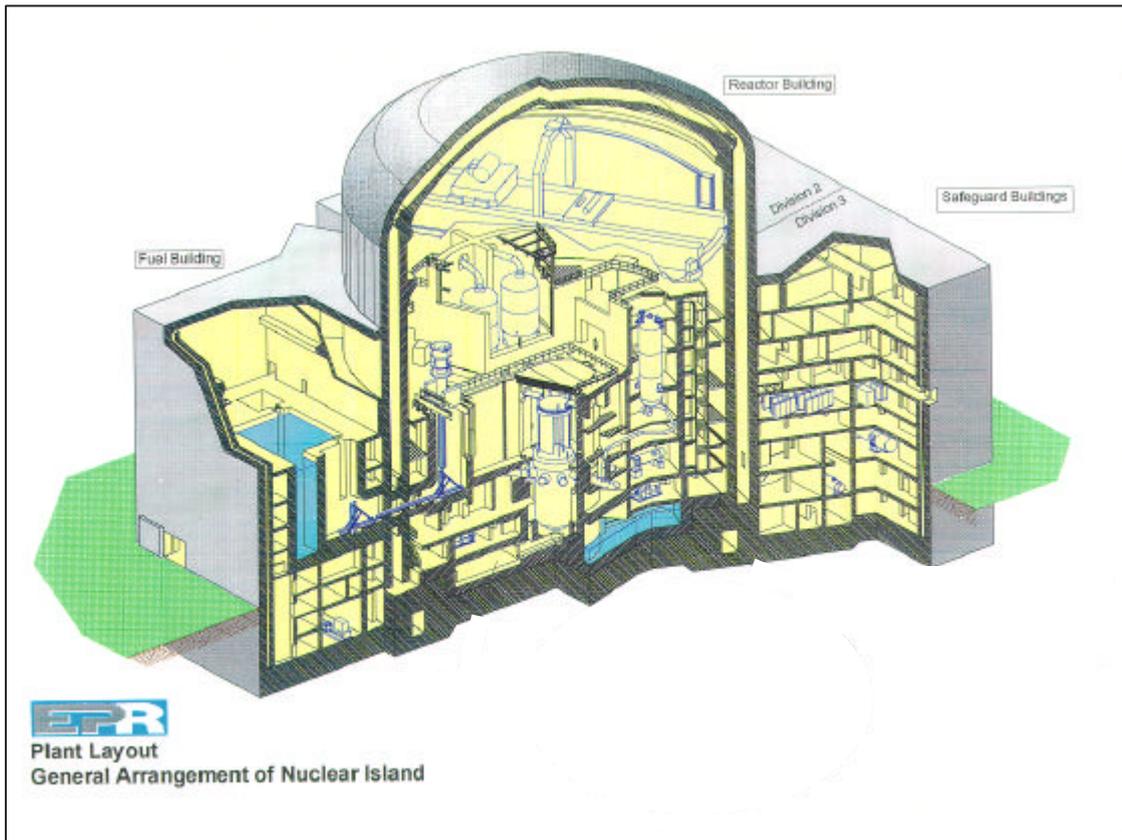


Abb. 1.4: Ansicht des EPR

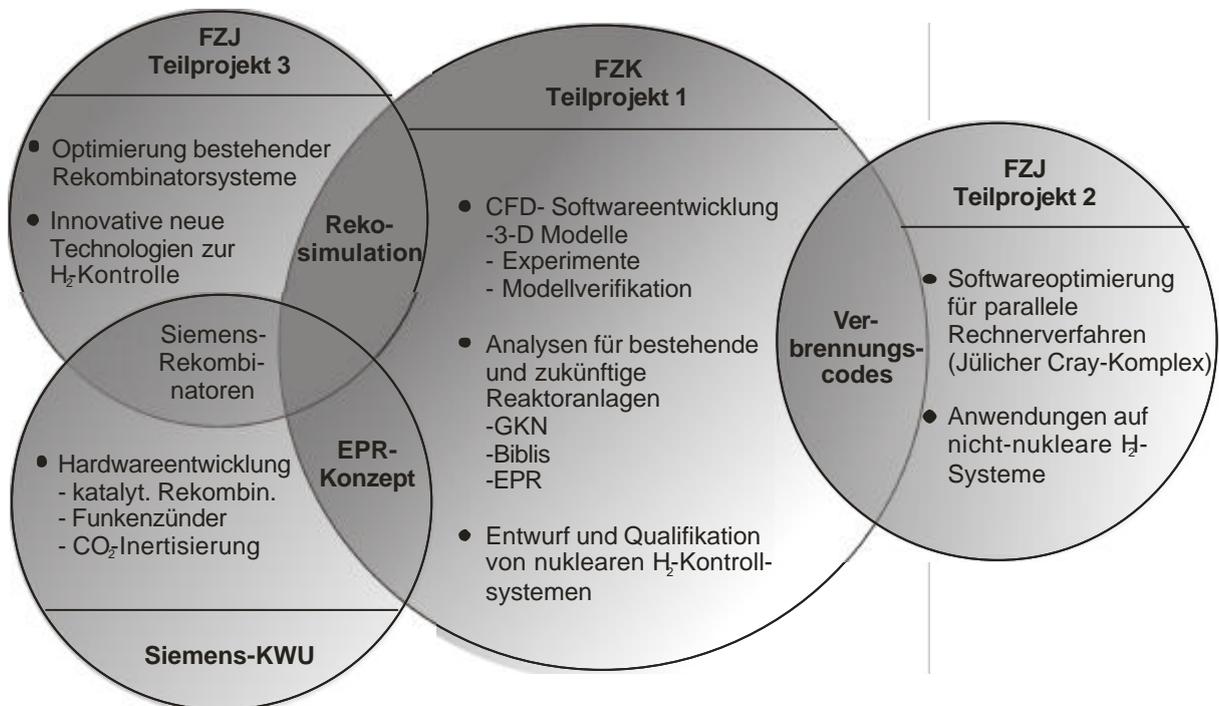


Abb.1.5: Teilprojekte und Kooperationen

## 2. NUMERISCHE SIMULATION DES WASSERSTOFF- VERHALTENS

Das Wasserstoffverhalten bei Kernschmelzunfällen wird von vielen physikalischen Prozessen beeinflusst die auf z.T. stark unterschiedlichen Zeit- und Längenskalen ablaufen. Die wichtigsten Phänomene sind:

- Freisetzung von Wasserstoff und Dampf am Primärkreisleck (Quelle),
- Verteilung und Durchmischung mit der im Gebäude vorhandenen Luft,
- Zündung bei Vorliegen einer brennbaren Mischung,
- langsame quasi-laminare Deflagration,
- schnelle turbulente Deflagration,
- Deflagrations-Defonationsübergang (DDT genannt),
- Detonation,
- Druck- und Temperaturlasten auf das Reaktorgebäude.

Für die Beschreibung dieser Phänomene müssen spezielle Modelle entwickelt werden, die sich alle unter dem Überbegriff "Reaktive Strömungssimulation" zusammenfassen lassen. Vor jeder Modellbildung muß man sich über die grundsätzlichen Anforderungen für eine erfolgreiche numerische Simulation im klaren sein:

1. Das Gesamtproblem lässt sich in Teilprobleme zerlegen, z.B. in der Strömungsmechanik in Diffusion, Konvektion, Wärmeleitung, Wärmestrahlung, Turbulenz usw.
2. Jeder physikalische Teilprozess kann mathematisch beschrieben werden.
3. Die Modellgleichungen für die Teilprozesse sind geschlossen.
4. Die Genauigkeit des mathematischen Modells ist für die vorliegende Fragestellung ausreichend.
5. Die numerische Lösung des Gesamtsystems ist stabil, eindeutig und konvergent (z.B. nicht Nutzerabhängig).
6. Zeit - und Kostenaufwand sind vertretbar.

Da jede Modellbildung in der Strömungsmechanik mit empirischen Ansätzen auf einer bestimmten physikalischen Ebene beginnt (außer DNS), müssen die entwickelten Modelle und auch die numerischen Lösungsalgorithmen an experimentellen Ergebnissen überprüft werden. Eine belastbare Verifikation muß folgenden Ansprüchen genügen:

- Es werden Versuchsdaten auf verschiedenen geometrischen Längenskalen simuliert,
- jedes Teilmodell sollte an Einzeleffektversuchen überprüft werden,
- Kombinationen von Teilmodellen sollten an Versuchen mit gekoppelten Prozessen verifiziert werden,
- alle Teilmodelle sollten gemeinsam an integralen Versuchen getestet werden,
- die Validierungsmatrix sollte auch blinde Vorrausrechnungen enthalten,
- die numerischen Programme sollten in gemeinsamen Benchmarks mit anderen Codes verglichen werden.

Die Software-Entwicklung des FZK zur Beschreibung von Wasserstoffphänomenen folgt deshalb dem in Abb.2.1 gezeigten Ablaufschema. Vor der Anwendung eines

Simulationsprogramms auf die volle Rektorskala, die in der Validierungsbasis nicht enthalten ist, muß die Skalierfähigkeit der Modelle überprüft und nachgewiesen werden. Beispielsweise wurden für die oben genannte Freisetzung von Wasserstoff und Dampf Versuche in einem speziell errichteten Modellcontainment (BMC) und einem stillgelegten relativ kleinen Reaktorgebäude (HDR) durchgeführt. Abb. 2.2 verdeutlicht die Skalierungsschritte vom BMC ( $600 \text{ m}^3$ ) über den HDR ( $11.300 \text{ m}^3$ ) zum KONVOI-Reaktor ( $65.000 \text{ m}^3$ ). Nur wenn sowohl die Versuche im BMC als auch die HDR-Experimente zufriedenstellend nachgerechnet werden können, darf man von einem vorraussagefähigen Programm sprechen. Skalierbarkeit setzt auch voraus, dass die beherrschenden physikalischen Prozesse die gleichen sind und dieselben Grundgleichungen diese Vorgänge mathematisch hinreichend genau beschreiben. Abb. 2.3 zeigt ein schönes Beispiel für die Ähnlichkeit (Skalierbarkeit) turbulenter Strömungen selbst bei sehr großen Masstabsunterschieden.

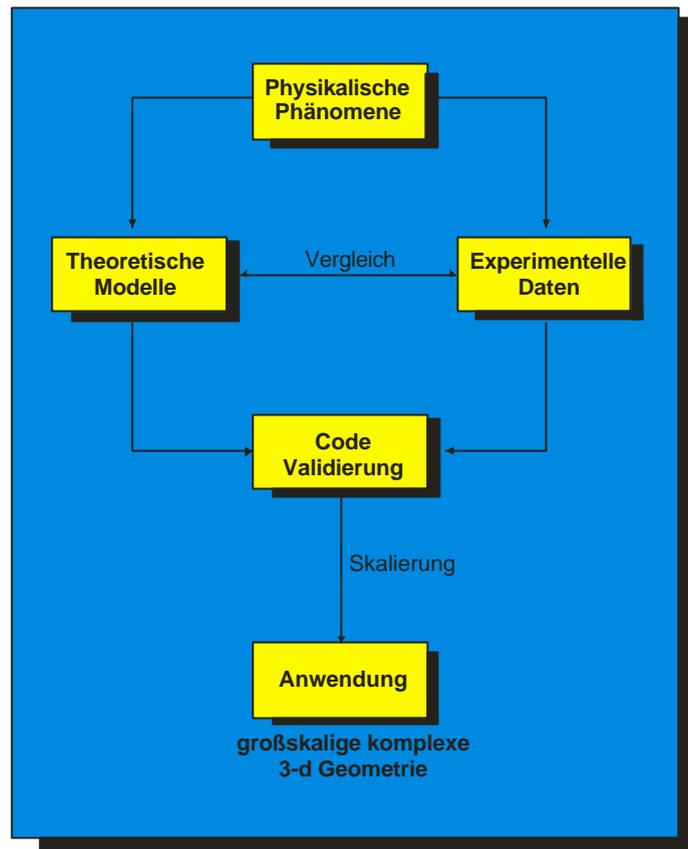


Abb. 2.1: Ablaufschema für die Entwicklung der FZK- 3D- Programme zur Beschreibung des Wasserstoffverhaltens in kerntechnischen Anlagen.

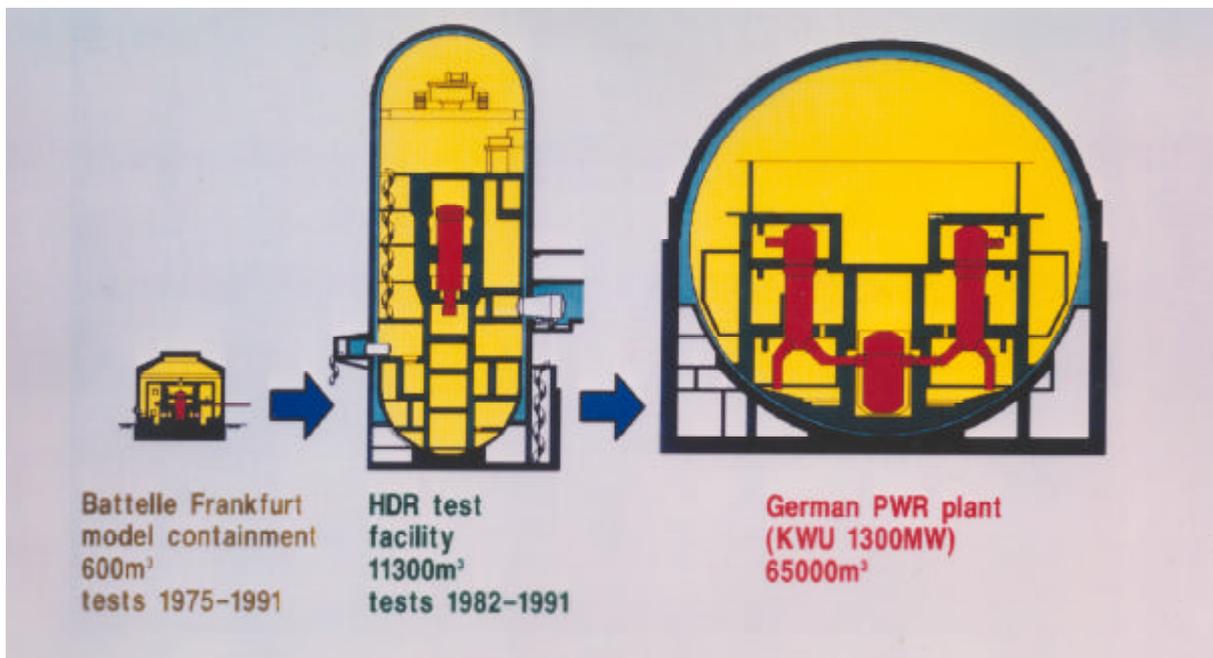
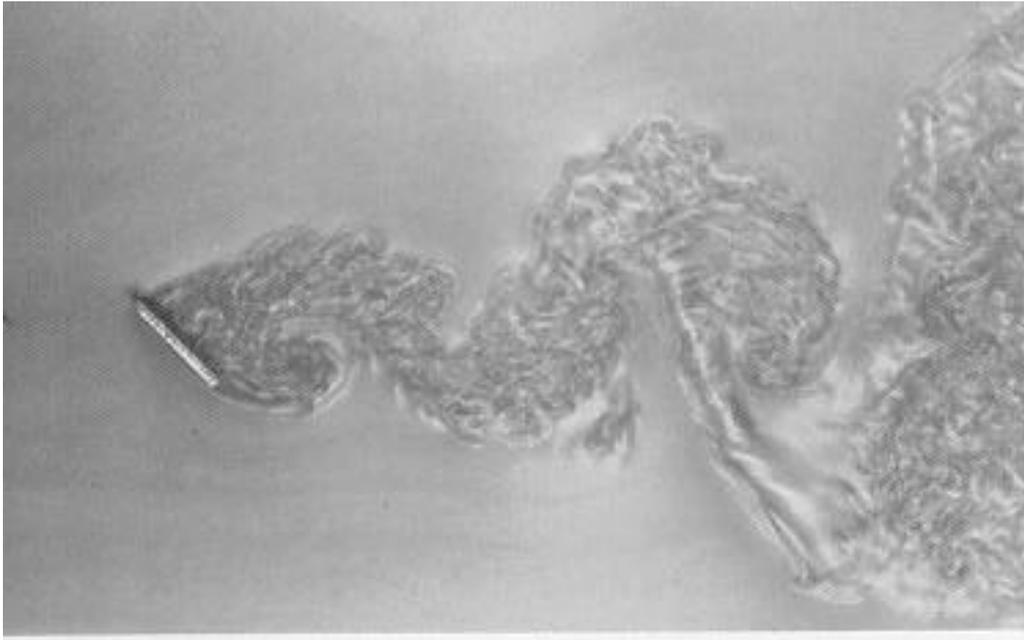


Abb.2.2: Skalierungsschritte zur Verifikation von Wasserstoffverteilungsprogrammen.

- Laborversuch: Wirbelstraße hinter einer geneigten Platte,  $Re = 4300$ ,  $45^\circ$ ,



- Wirbelstraße hinter einem auf Grund gelaufenen Tankschiff (Argo Merchant, 1976)

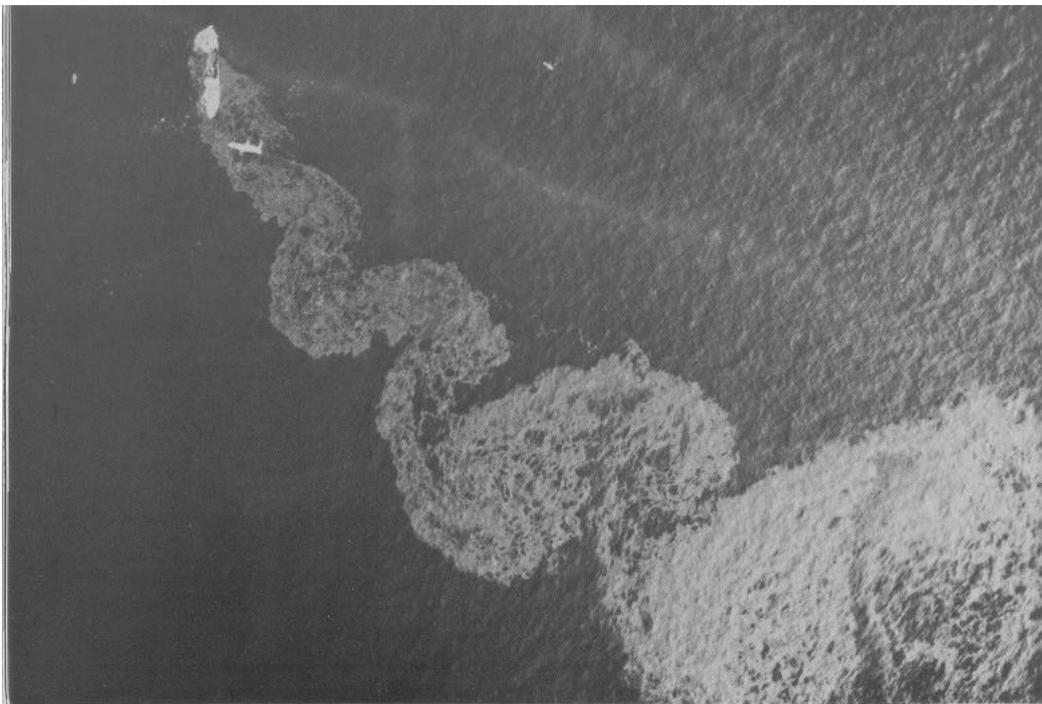


Abb.2.3: Beispiel für die Ähnlichkeit turbulenter Strömungen selbst bei sehr großen Massstabsunterschieden. Skalierbarkeit ist eine Voraussetzung für die erfolgreiche numerische Simulation von Wasserstofftransport in großen Reaktorgebäuden.

### 3. BEGRÜNDUNG FÜR CFD-MODELLIERUNG BEI FZK

Für die Simulation des Wasserstoffverhaltens bei Kernschmelzunfällen stehen im Prinzip zwei verschiedene Modellansätze zur Verfügung

- a) sogenannte "Lumped Parameter" (LP) Modelle, und
- b) Computational Fluid Dynamics (CFD) Modelle.

CFD-Codes lösen die allgemein gültigen 3d Navier-Stokes Gleichungen (NS) in einer gemittelten Form, die nicht die Feinstruktur einer realen turbulenten Strömung aufweist. Dazu wird ein Turbulenzmodell eingeführt, das den turbulenten Transport von Masse, Energie und Impuls beschreibt.

LP-Codes vereinfachen die Erhaltungsgleichungen erheblich in dem die Bilanzen nur für null-dimensionale Knotenpunkte und unter Vernachlässigung der Impulsbilanz gelöst werden. Die letzte Annahme führt dazu, dass LP-Modelle nur für eine Teilklasse von Strömungsproblemen geeignet sind, nämlich solche bei denen der Einfluß des Impulstransports auf die Strömung sehr viel kleiner ist, als der Einfluß von Druckgradienten. Da im LP-Modell nur skalare Gleichungen gelöst werden, gibt es auch keine berechnete Richtungsinformation. Die Strömungsrichtung wird durch die gewählte Anordnung der nulldimensionalen Bilanzknoten im Raum definiert, d.h. die Konvektionspfade werden vom Codebenutzer durch die "Nodalisierung" vorbestimmt oder zumindest eingeschränkt. Im allgemeinen werden in LP-Codes die Verbindungen zwischen Zonen nur mit einem Strömungspfad modelliert, so dass gleichzeitige Gegenströmung nicht möglich ist.

Durch die grobe Aufteilung des Raumes in LP-Codes in wenige Zonen tritt der Effekt der numerischen Diffusion im Vergleich zu CFD-Codes relativ stark auf. Die typische Anzahl von Zonen liegt bei LP-Containmentsimulationen in der Größenordnung von 10-100, während bei CFD-Rechnungen 100.000 und mehr numerische Zellen eingesetzt werden können. Numerische Diffusion wird in CFD-Codes auch durch geeignete Lösungsverfahren höherer Ordnung bei der Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen begrenzt. Die Vereinfachungen in den Modellgleichungen und in der räumlichen Diskretisierung führt bei LP-Codes naturgemäß auch auf größere Unsicherheiten in den Rechenergebnissen, insbesondere lassen sich Verbrennungsvorgänge nicht hinreichend genau abbilden.

Aus diesen Gründen konzentriert sich die Modellentwicklung bei FZK auf vorhersagefähige 3D CFD-Programme, die an geeigneten experimentellen Daten verifiziert werden. Damit können insbesondere lokale Werte für Konzentration, Temperatur und Geschwindigkeit besser aufgelöst werden. Solche lokalen Größen können wichtige Prozesse beeinflussen wie z.B. die Kondensation von Dampf an Wänden oder die Abbauleistung eines katalytischen Rekombinators der von der lokalen H<sub>2</sub>-Konzentration am Reko-Eingang bestimmt wird.

Als Beispiel wurden in Abb.3.1 Ergebnisse einer LP- und einer CFD-Rechnung für eine deutsche KONVOI-Anlage verglichen. Oben sind berechnete H<sub>2</sub>-Konzentrationen in der Kuppel der Anlage gezeigt, nämlich die mit RALOC (LP) und GASFLOW (CFD) ermittelten Werte. Die GASFLOW-Kurven beziehen sich auf die mittlere und maximale H<sub>2</sub>-Konzentration in der RALOC-Zone. Die relativ grobe RALOC Nodalisierung führt dazu, dass schnelle transiente Änderungen in der H<sub>2</sub>-Konzentration verschleppt und Spitzenwerte geglättet werden. In der GASFLOW

Rechnung wird die H<sub>2</sub>-Luft-Dampfmischung in der Kuppel kurzzeitig brennbar (bei c. 6000 s), während die RALOC-Rechnung überhaupt keine brennbaren Gemische ergibt. Einen weiteren möglichen Effekt bei LP-Rechnungen zeigt Abb. 3.1 unten, die Temperaturen im Domraum vergleicht. Da die große RALOC-Zone bis zur äußeren, mit einem Wasserfilm bedeckten Stahlschale reicht, bleibt die RALOC-Gastemperatur konstant auf der Sättigungstemperatur. In GASFLOW treten dagegen wegen der feinen Nodalisierung Überhitzungszustände in der Gasatmosphäre mit viel höheren Temperaturen auf.

Die beiden möglichen Analysenmethoden für die Thermohydraulik in Reaktorgebäuden werden in Abb. 3.2 zusammenfassend gegenübergestellt. LP-Modell erlauben insbesondere schnelle vereinfachte Abschätzungen zu den wichtigen Wasserstoffverteilungsparametern. Im allgemeinen verlangt aber die Komplexität der thermohydraulischen Vorgänge bei einem Unfall fortgeschrittene 3D CFD-Simulationen, insbesondere weil die Identifikation von Gefährdungszuständen, wie z.B. lokale detonationsfähige Mischungen, eine gute Auflösung von Gemischgradienten erfordert.

Die mittlerweile vorliegenden Erfahrungen haben gezeigt, dass LP-Ansätze zur Berechnung der H<sub>2</sub> – Verteilung zu nicht- konservativen Aussagen bezüglich des Gefährdungspotentials führen können.

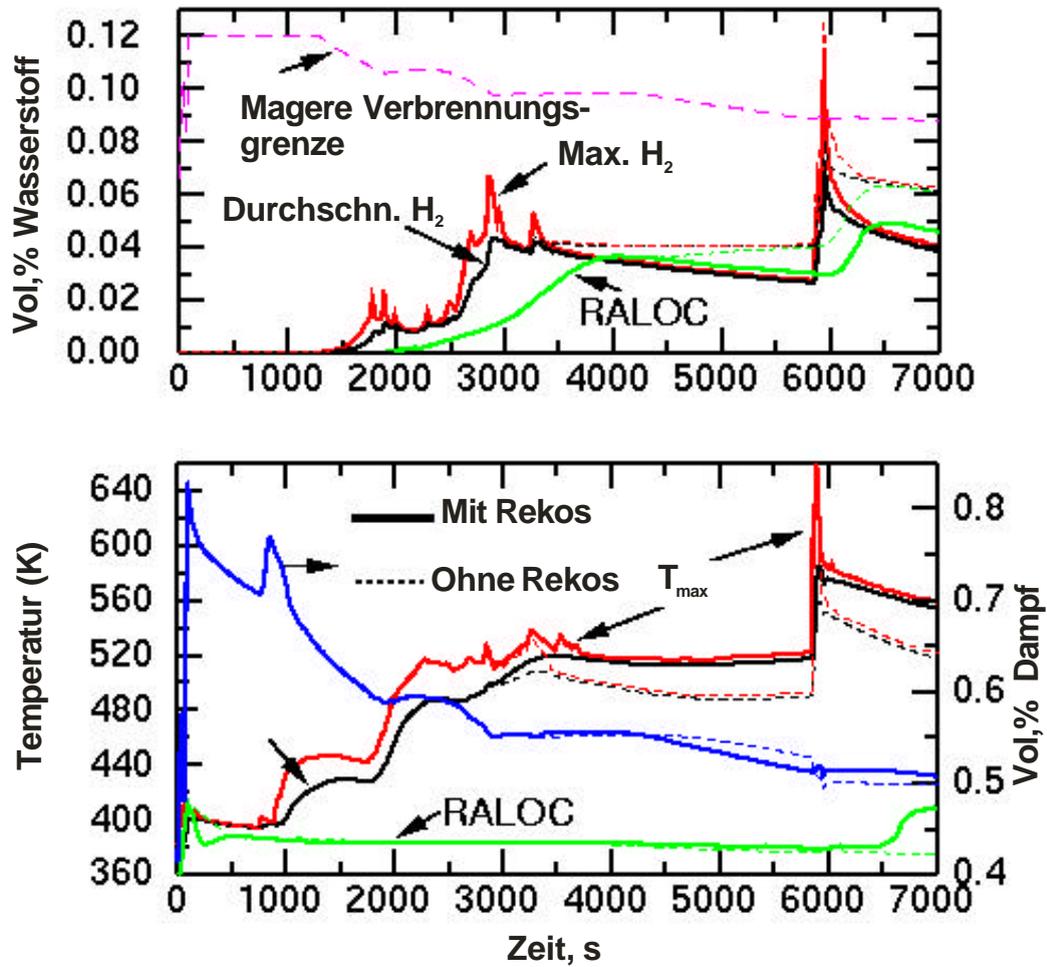


Abb. 3.1: Vergleich von Ergebnissen aus einer LP-Rechnung (RALOC) und einer entsprechenden CFD - Rechnung (GASFLOW) für den Atmosphärenzustand in der Kuppel einer KONVOI - Anlage bei einem postulierten Kernschmelzunfall.

	Modellansatz	
	1. Stufe (LP)	2. Stufe (CFD)
Erhaltungsgleichungen	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Masse</li> <li>- Energie</li> </ul> } Integrale Bilanzen für „homogenen Reaktor“ <ul style="list-style-type: none"> <li>- Gleichungssystem mit offenen Eingabeparametern</li> <li>- Keine Richtungsinformation</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Masse</li> <li>- Energie</li> <li>- Impuls</li> </ul> } Kompressible Navier – Stokes Gleich. mit Turbulenz <ul style="list-style-type: none"> <li>- Nach Verifikation geschlossenes System</li> </ul>
Modellannahmen	<ul style="list-style-type: none"> <li>- homogene Gaszustände in Kontrollzone</li> <li>- langsame Druckausgleichsströmung</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- universell gültig ohne Einschränkungen</li> <li>- Druckausgleich und Impulstransport (Vektor)</li> </ul>
Räumliche Diskretisierung	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 0- dimensionale</li> <li>- mittlere Kontrollzone <math>\approx 1000 \text{ m}^3</math></li> <li>- 50 -80 Kontrollzonen für Containment</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 3-dimensional, Finite Volumen</li> <li>- mittlere Rechenzelle <math>\approx 1 \text{ m}^3</math></li> <li>- ca. 100000 Rechenzellen</li> <li>- verringerte numerische Diffusion</li> <li>- Wechselwirkung Struktur/ Strömung</li> </ul>
Ergebnisse	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mittelwerte für Zustandsgrößen in Kontrollzonen</li> <li>- Benutzereffekte über freie Eingabeparameter, Erfahrungen erforderlich (Strömungsrichtungen)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Auflösung von Gradienten (lokal u. global)</li> <li>- genauere Auflösung der Dynamik</li> <li>- Einfluss von Eigenimpuls</li> <li>- mechanistische Prognosen zur Strömungsrichtung</li> <li>- zusätzliche physikalische Prozesse erfasst</li> </ul>

Abb. 3.2.: Modellhierarchie für die Analyse von thermohydraulischen Vorgängen in Reaktorgebäuden.

## **4. ANALYSEMETHODIK**

Ein wesentliches Hauptergebnis dieses Teilprojekts ist die Entwicklung einer durchgehenden Analysemethodik für die vollständige und deterministische Beschreibung des Wasserstoffverhaltens in schweren Störfällen. Im folgenden werden die Einzelschritte dieser Methodik (Abb.4.1) kurz beschrieben, insbesondere die benötigten Eingabedaten und die resultierenden Teilergebnisse. Die Darstellung bezieht sich überwiegend auf dreidimensionale Simulationsmethoden.

### **4.1 Anlagengeometrie**

Startpunkt jeder Analyse ist die Erstellung eines Geometriemodells der Anlage auf der Basis von 2D-Schnitten oder 3D-CAD Dateien. Der Anlagendesign hat viele wichtige Konsequenzen auf die späteren Schritte in der CFD-Analyse, z.B. bestimmen der Anlagentyp (DWR oder SWR) oder die Leistungsgröße des Kerns wichtige Parameter des Wasserstoffquellterms. Die Containmentform und das freie Volumen beeinflussen die H<sub>2</sub>-Konzentrationen und die räumliche Verteilung von Stahl und Beton im Sicherheitsbehälter entscheidet über die Dampfkondensation sowie die resultierende Dampfkonzentration in der Unfallatmosphäre.

Mathematisch gesehen definiert die Anlagengeometrie die Randbedingungen für die Lösung der dreidimensionalen Gleichungen der Strömungsmechanik. Die Erstellung eines 3D-Rechengitters für ein großes komplexes Reaktorcontainment ist eine sehr anspruchsvolle und zeitaufwendige Aufgabe. Oft muss ein Kompromiss zwischen dem wünschenswerten Detaillierungsgrad der Geometrie und den rechentechnischen Möglichkeiten gefunden werden. Die Erfahrungen aus diesem Teilprojekt haben gezeigt, dass ein hoher Anteil des gesamten Modellierungsaufwands für die Erstellung des 3D-Geometriemodells und dessen unabhängiger Überprüfung durch Anlagenpersonal aufgewendet werden muss. Falsch oder nicht modellierte Strömungspfade können großen Einfluss auf die berechneten Konvektionsloops und die daraus folgenden H<sub>2</sub>- und Dampfverteilungen im Gebäude haben.

### **4.2 Wasserstoff-Gegenmaßnahmen**

Für die Modellierung einer gegebenen Anlage muss als nächstes entschieden werden, welche Maßnahmen zur Wasserstoffkontrolle bei schweren Unfällen vorgesehen sind. Für diese Komponenten müssen verifizierte CFD-Untermodule vorhanden sein, damit ihre Wirksamkeit beim Wasserstoffabbau und die Effekte auf andere relevante Parameter während des Unfalls zuverlässig vorher gesagt werden können.

In dem hier beschriebenen Projekt werden deshalb numerische Modelle für alle wichtigen H<sub>2</sub>-Abbausysteme wie Funkenzünder, Glühzünder, Siemens- und NIS-Rekombinatoren entwickelt, an verschiedenen Testserien im Battelle Modell Containment verifiziert und in das 3d-Verteilungsprogramm GASFLOW implementiert.

Wenn für eine gegebene Reaktoranlage z.B. Funkenzünder und katalytische Rekombinatoren als Gegenmaßnahmen geplant sind, muss die Position dieser Module innerhalb der Gitterauflösung des CFD-Geometriemodells definiert werden. Falls die weitere Analyse des Wasserstoffverhaltens (in dem nachfolgend beschriebenen Ablauf) zu unakzeptablen Containmentbelastungen führen sollte, müssen die im ersten Ansatz vorgesehenen Wasserstoffgegenmaßnahmen verbessert werden, bis Containmentversagen ausgeschlossen werden kann.

### 4.3 Unfallszenario

Für eine gegebene Anlage mit definierten H<sub>2</sub>-Abbausystemen stellt sich als nächstes die Frage welche schweren Unfälle physikalisch möglich sind und welche Sequenzen als repräsentative Fälle ausgewählt und durchgehend analysiert werden sollten. Ein schwerer Unfall erfordert, dass nach einem bestimmten auslösenden Ereignis alle redundanten und diversen Sicherheitseinspeisesysteme für eine ausgedehnte Zeitperiode (Stunden) nicht zur Verfügung stehen. Alle theoretisch denkbaren Unfallsequenzen können in zwei Gruppen eingeteilt werden, nämlich LOCA's (Loss of coolant accidents) oder Transienten. Bei Transienten besteht Ungleichgewicht zwischen Wärmeezeugung im Kern und Wärmeabfuhr.

Es ist weder möglich noch notwendig alle Sequenzen hinsichtlich ihres Wasserstoffrisikos zu untersuchen. In Deutschland wurden mehrere Kriterien vorgeschlagen die es erlauben aus dem breiten Spektrum von physikalisch möglichen Unfallabläufen eine Untermenge zu definieren, die die höchst möglichen Anforderungen an Wasserstoff-Kontrollsysteme stellen [4.1]. Mit anderen Worten, es wird untersucht, welche Kernschmelzunfälle die schwierigsten Bedingungen für Wasserstoffabbausysteme stellen könnten.

Unter diesem Gesichtspunkt sollten die ausgewählten "Wasserstoffsznarien" die beiden großen Unfallklassen "LOCA's" und "Transienten" abdecken, sie sollten ungünstige H<sub>2</sub>-Quelleigenschaften umfassen wie z.B. große integrale H<sub>2</sub>-Menge, hohe Freisetzungsrates, geringer Dampfanteil, hoher Freisetzungsort, und sie sollten weiterhin schwierige Containmentzustände berücksichtigen, wie z.B. geringer Dampfgehalt oder Dampfschichtung der Atmosphäre zu Beginn der H<sub>2</sub>-Freisetzung.

Basierend auf diesen und weiteren Überlegungen sollten für eine umfassende Analyse des Wasserstoffverhaltens in einem schweren Kernreaktorunfall fünf Szenarien analysiert werden:

1. Surge-line LOCA (großer Bruch des Primärkreises)
2. Small-break LOCA (50 cm<sup>2</sup> Bruchquerschnitt) ohne verfügbare sekundäre Wärmesenke, einschließlich RDB Versagen
3. LOOP (Loss of off-site power) mit primärseitiger Druckabsenkung und Fluten des Kerns nach Wiederherstellung der Netzversorgung, ohne RDB-Versagen.
4. Ausfall der Speisewasserversorgung mit primärseitiger Druckabsenkung
5. Dampferzeugerheizrohrleck mit offenem Sekundärkreislauf (By-pass Szenario)

Diese fünf ausgesuchten Wasserstoffsznarien ergeben zusammen gesehen, ein weites Spektrum von hohen Anforderungen an Wasserstoffkontrollsysteme. Andere Unfallszenarien sollten damit abgedeckt sein, weil sie aller Voraussicht nach, keine

neuen Containmentssituationen hervorrufen, die schwieriger zu beherrschen sind. Die Einschränkungen der Szenarien auf eine deutlich geringere Anzahl, wie z.B. nur ein oder zwei, würde offene Fragen zur generellen Effektivität des gewählten H<sub>2</sub>-Kontrollsystems bei Kernschmelzunfällen zurücklassen.

#### **4.4 Wasserstoff- und Dampfquellen**

Nach der Definition der relevanten Wasserstoffszenarios stellt sich nun die Frage, welche Quellstärken an Dampf und Wasserstoff erwartet werden können. Für eine konsistente CFD Rechnung werden die Masse, der Impuls und die Energie der freigesetzten Spezies über die gesamte Dauer der Unfallsimulation benötigt. Außerdem muss die Lage und die Richtung des Quellstrahls festgelegt werden.

In vielen Fällen ist die Bestimmung der gesamten Wasserstoff- und Dampfquelle nur durch die Kombination von „Lumped-parameter Codes“ und „Best Estimate“-Prozeduren für den immer noch mit großen Unsicherheiten behafteten Erzeugungsprozess möglich. Im allgemeinen ist die Quelle von Wasserstoff und Dampf am besten in der frühen In-Vessel-Unfallphase bestimmbar, jedoch variieren Simulationsergebnisse von verschiedenen Codes für das gleiche Störfallszenario sehr stark, insbesondere beim Zeitpunkt des Einsetzens der Brennstabzerstörung bzw. -verlagerung und bei der damit verbundenen Wasserstoffproduktionsrate. Die Unsicherheiten erhöhen sich im Laufe des Fortschreitens des Unfalls, weil die Anfangs- und Randbedingungen für die Metall-Wasser-Reaktion (wie Temperatur und Fläche des zur Oxidation zur Verfügung stehenden Metalls oder die Dampfzufuhr) sowie die auftretenden physikalischen Phänomene komplexer und undurchsichtiger werden.

Für die späte In-Vessel-Phase, die vor allem durch die Schüttbettbildung und das Schmelzepoolverhalten dominiert wird, existieren derzeit nur parametrische Modelle. Für die Bestimmung der Wasserstoffquelle müssen jedoch die Dampfzufuhr, die Temperatur und die zur Oxidation zur Verfügung stehende metallische Zirkoniumoberfläche (alle zeitlich aufgelöst) des verlagerten Kerns bekannt sein.

Derzeit gibt es keine belastbaren Modelle für die Wasserstoff- und Dampfproduktion bei:

- Oxidation von U-Zr-O-Schmelzen,
- Wiederflutung des überhitzten, trocknen Kerns,
- Versagen des Reaktordruckbehälters und
- Ex-Vessel Dampf/Metallreaktionen, weder für milde oder energetische Fälle.

Der einzige einigermaßen verifizierte Prozess in der „Ex-Vessel-Phase“ eines Kernschmelzunfalls stellt die Schmelze-Beton-Wechselwirkung dar, bei der neben H<sub>2</sub> auch signifikante Mengen an CO gebildet werden.

Zudem sollte betont werden, dass eine adequate Datenbasis auch für die Dampfquellen vorhanden sein sollte, da das Auftreten einer schnellen Verbrennung, die das höchste Schadenspotenzial für den Sicherheitsbehälter aufweist, nicht nur von der Wasserstoff-, sondern auch von der Dampfkonzentration im Sicherheitsbehälter abhängt.

#### **4.5 Wasserstoffverteilung**

Mit den bekannten Charakteristika der Wasserstoff- und Dampfquelle, d.h. zeitlich aufgelöster Masse, Energie und Impuls, besteht nun die nächste Aufgabe in der

Berechnung des Transports, der Verteilung und der Zusammensetzung des Wasserstoffs und des Dampfes mit der Luft im Sicherheitsbehälter. Das Resultat dieser Simulation sollte der räumliche und zeitliche Verlauf der Temperatur, des Drucks und der Zusammensetzung des H<sub>2</sub>/Dampf/Luft-Gemisches sein.

Eine große Anzahl von miteinander verbundenen physikalischen Prozessen und thermodynamischen Zuständen müssen mit einer hohen räumlichen Auflösung simuliert werden, um Gaszusammensetzungen innerhalb einer ausreichend kleinen Fehlerbandbreite zu ermitteln, was dann aussagekräftige Simulationen der Wasserstoffverbrennung erlaubt. Angemessene Forschungsziele sind die Vorhersage der Wasserstoffkonzentration mit einer Genauigkeit von wenigen Prozent absolut (z.B.  $12 \pm 2\%$  H<sub>2</sub>), der Dampfkonzentration innerhalb von 5%-Punkten (z.B.  $30 \pm 5\%$  H<sub>2</sub>O) und eine örtliche Auflösungen von 1 m<sup>3</sup> pro Rechenzelle. Die wichtigsten Modellschwerpunkte sind hierbei die Beschreibung von:

- 3D kompressiblen Fluidströmungen
- konvektiver Wärmeübergang zwischen Gas und Wand
- Strahlungswärmeübergang (bei hohen Dampfkonzentrationen und –temperaturen)
- Verdampfung und Kondensation von Wasser
- Wärmeleitung in Strukturen
- Turbulenzmodellierung und
- Effekte von mitigativen Gegenmaßnahmen wie Rekombinatoren oder Zünder.

Zur Modellierung der 3D-Wasserstoffverteilung in einem Sicherheitsbehälter stehen zum einen der CFD-Code GASFLOW [4.2] und der sich noch im Entwicklungsstadium befindliche Code TONUS von CEA und IPSN [4.3] zur Verfügung.

## 4.6 Zündung

Durch Verteilungsanalysen werden für typische Sequenzen schwerer Unfälle in Kernreaktoren brennbare Mischungen für bestimmte Zeiten und Orte im Containment ausgewiesen. Um den Verbrennungsprozess nun zu starten und gleichzeitig eine potenzielle Gefahr für den Sicherheitsbehälter zu verursachen, ist ein Zündungsereignis erforderlich. An dieser Stelle der Analyse ist der Ort und der Zeitpunkt einer ersten Zündung, die zu einer stabilen Flammenausbreitung führt, zu bestimmen.

Zündquellen können in zufällige und absichtliche Ereignisse (z.B. Zünder) unterteilt werden. Werden Zünder in die Analyse berücksichtigt, sind Ort und Zeitpunkt der ersten Zündung durch die Entwicklung und Expansion der H<sub>2</sub>/Luft/Dampf-Wolke im Sicherheitsbehälter eindeutig bestimmt. Sobald ein zündfähiges Gemisch ( $\geq 4\%$  H<sub>2</sub>) den ersten aktiven Zünder erreicht, wird die Zündung eingeleitet. Mit korrekt entworfenen Zündungssystemen wird die Zündung des Gemisches in der Nähe der Quelle kurz nach dem Beginn der Wasserstoffeinleitung in den Sicherheitsbehälter auftreten, der diesem Zeitpunkt nur geringe H<sub>2</sub>- Inventare enthält.

Ohne eine absichtliche Zündung können Ort und Zeitpunkt einer ersten Zündung nicht vorhergesagt werden. Eine große Anzahl an potenziellen Zündquellen können im Verlauf eines schweren Unfalls identifiziert werden, so z.B. elektrische Anlagen, platzende Rohrleitungen oder Kernschmelzepartikel. In diesem Fall müssen die

Konsequenzen einer zufälligen Zündung untersucht werden. Eine Ausnahme bildet die Selbstzündung eines  $H_2$ /Dampf-Gemisches in der Nähe der Quelle, die mit mechanistischen Codes beschreiben werden kann.

In jedem Fall muss eine Zündung entweder mechanistisch (durch Zünder oder Selbstentzündung) bestimmt oder örtlich und zeitlich postuliert werden. Die Einbeziehung von Zündern kann als eine Möglichkeit angesehen werden, den Zündvorgang zu einem augenscheinlich günstigen, frühen Zeitpunkt einzuleiten, bevor sich hohe Wasserstoffkonzentrationen im Sicherheitsbehälter ansammeln können. Vom Standpunkt der Risikominderung aus erscheint die frühe Verbrennung des Wasserstoffs effektiver zu sein, als zu warten, bis eine unkontrollierte, zufällige Zündung eintritt, was spät, d.h. bei hohen Wasserstoffkonzentrationen, der Fall sein kann.

Die Bestimmung des Ortes und des Zeitpunktes der ersten Zündung ist sehr wichtig, weil sie die nicht-reaktive Phase der Unfallablaufs beendet und die Anfangsbedingung für die nun beginnende reaktive Phase darstellt.

#### **4.7 Flammenbeschleunigung**

Nach der Zündung startet die Flamme zunächst als langsame, quasi-laminare, vorgemischte  $H_2$ /Luft/Dampf-Verbrennung. Sie wird sich vorzugsweise in Richtung der höchsten Brennrates ausbreiten, d.h. im allgemeinen entlang des höchsten Wasserstoff/Dampf-Konzentrationsgradienten hin zu reicheren und/oder trockeneren Gemischen und in Regionen mit hoher Turbulenz. Dieser Effekt und auch die selbst-induzierte Turbulenz, die durch die Expansion des hinter der Flammfront verbrannten Gases erzeugt wird, kann einen Übergang von einer langsamen laminaren zu einer schnellen turbulenten Verbrennung bewirken.

Das  $\sigma$ -Kriterium, das nachfolgend in Kap 7 beschrieben wird, wird in den FZK-Analyseprozeduren zur konservativen Abschätzung des Flammenbeschleunigungspotenzials verwendet. Wird dieses Kriterium nicht erfüllt, ist mit einer langsamen laminaren Verbrennung zu rechnen, die dann mit einem geeigneten Code modelliert werden kann. Wenn das  $\sigma$ -Kriterium die Möglichkeit einer Flammenbeschleunigung aufzeigt, muss die Frage untersucht werden, ob die betrachtete Mischung einem Übergang zu einer Detonation unterworfen sein kann.

#### **4.8 DDT (Deflagration to Detonation Transition)**

An diesem Punkt wird das  $\lambda$ -Kriterium, das in Kap. 7 beschreiben wird und das die charakteristische Abmessung der reaktiven Wasserstoffwolke zu ihrer mittleren Detonationszellgröße  $\lambda$  ins Verhältnis setzt, als Entscheidungshilfe herangezogen. Wenn die lineare charakteristische Länge nicht für DDT ausreicht, muss eine schnelle turbulente Verbrennung modelliert werden, für die am FZK z.B. der Code COM3D verwendet wird. Andernfalls ist die Simulation einer Detonation erforderlich, z.B. mit dem Code DET3D (siehe Kap. 8).

Die drei diskutierten Übergangskriterien für

- Zündung (inert zu brennbar)
- Flammenbeschleunigung (langsame zu schnelle Verbrennung,  $\sigma$ -Kriterium) und
- Einsetzen der Detonation (DDT,  $\lambda$ -Kriterium)

werden verwendet, um den zugehörigen Verbrennungsmodus und das entsprechende numerische Simulationswerkzeug auszuwählen. Solche Übergangskriterien sind für eine mechanistische Analyse des Wasserstoffs notwendig, da die direkte numerische Simulation der eigentlichen Übergangsprozesse, infolge der im Vergleich zu Verteilungs- oder Verbrennungssimulationen viel kleineren aufzulösenden Längenskalen, ausgeschlossen ist. Beispielsweise verlangt die mechanistische Modellierung eines Zündvorgangs die Auflösung des Zündkerns inklusive detaillierter Chemie und Berücksichtigung der Strahlung. Beim Flammbeschleunigungsprozess muß der Übergang von der laminaren zur turbulenten Verbrennung und beim Einsetzen einer Detonation muß die Modellierung eines „Hot-Spots“ mit starker Zündung und ihre Verstärkung im umgebenden Gemisch numerisch aufgelöst werden.

Es ist wichtig zu beachten, dass die Bestimmung der drei Übergangskriterien nur Informationen zu Konzentrationen und geometrischen Abmessungen des brennbaren Gemisches benötigt, das sich während eines schweren Unfalls bildet. Diese Informationen sind aus dem vorhergehenden Schritt, der 3D-Verteilungsrechnung, bekannt. Daher können die drei Kriterien bereits „online“ während der Verteilungsanalyse dazu genutzt werden, das zeitliche und örtliche Auftreten von Risikosituationen zu identifizieren. Wichtig sind hierbei das:

- Auftreten brennbarer Gemische
- Potenzial für Flammenbeschleunigung zu schnellen, sich mit Schallgeschwindigkeit ausbreitenden Flammen und
- Einsetzen der Detonation.

Die Kriterien können daher frühe Hinweise auf die maximal mögliche Verbrennungsgeschwindigkeit und auf mechanische Lasten auf den Sicherheitsbehälter geben, ohne eine voll-reaktive Verbrennungssimulation zu beginnen. Sie bilden daher auch einen einfachen Weg, die Wirksamkeit von Gegenmaßnahmen, die zu Beginn der Analyse in Schritt 4 vorgestellt wurden, zu überprüfen und zu optimieren. Wenn beispielsweise durch Gegenmaßnahmen lokale Detonationen ausgeschlossen werden sollen, muss gewährleistet sein, dass das  $\lambda$ -Kriterium (Kap. 7) mit einem deutlichen Sicherheitsfaktor, der die Unsicherheiten aus anderen Schritten der Analyse, z.B. Freisetzungsrates oder Gesamtmasse des Wasserstoffs, mit einschließt, nicht erfüllt wird. Diese Methode kann auch zur Bestimmung der Anzahl und Position von Zündern im Sicherheitsbehälter verwendet werden, um in einem gegebenen Szenario oder Gruppen von Szenarien lokale Detonationen sicher auszuschließen.

Zusammenfassend haben die beschriebenen Kriterien zwei wichtige Funktionen bei der Analyse des Wasserstoffverhaltens:

- frühe Einschätzung des schnellstmöglichen Verbrennungsregimes und der damit verbundenen maximalen Belastungen des Sicherheitsbehälters ohne eine aufwendige Verbrennungsanalyse und
- ausgehend von der Verteilungssimulation die Auswahl des geeigneten numerischen Verbrennungsprogramms für die 3D-Analyse.

## 4.9 Verbrennungssimulation

Die drei folgenden, die verschiedenen Verbrennungsregimes abdeckenden 3D-Codes werden am Forschungszentrum Karlsruhe entwickelt und angewendet:

- V3D und FLAME3D für die langsame Verbrennung (langsame vorgemischte Verbrennung und stehende, nicht-vorgemischte Diffusionsflammen)
- COM3D für schnelle vorgemischte turbulente Verbrennung und
- DET3D für stabile Detonationen in vorgemischten H<sub>2</sub>/Luft/Dampf-Atmosphären.

In V3D wird ein semi-implizites, in COM3D ein explizites numerisches Schema für die Lösung der reaktiven Navier-Stokes-Gleichungen verwendet [4.4, 4.5]. FLAME3D und DET3D verwenden einen expliziten Löser für die reaktiven Euler-Gleichungen [4.6]. Alle Codes verwenden frei-wählbare Randbedingungen und interne Strömungshindernisse. Eine grafische Benutzerschnittstelle erlaubt eine leichte Erstellung von sehr komplexen 3D Geometriemodellen mit Hilfe einiger Geometriebausteine (Platten, Würfel, Kugeln, etc.) innerhalb eines zuvor definierten Rechengebietes. In diesem Projekt ist ein intensiver Validierungsprozess für alle physikalischen Modelle und numerischen Methoden unter der Verwendung der geeigneten experimentellen Daten auf verschiedenen Geometrieskalen durchgeführt worden. Diese Validierungsarbeiten werden im Kapitel 8 zusammengefasst.

Langsame Verbrennungsregimes, die mit V3D beschrieben werden, gefährden den Sicherheitsbehälter nicht im Sinne von Drucklasten, sondern über Temperaturbelastungen. Stehende Diffusionsflammen können thermische Lasten auf den Sicherheitsbehälter über drei verschiedene Wärmeübertragungsmechanismen ausüben:

- Direkter Kontakt mit den Strukturen
- Strahlungswärmeübertragung, hauptsächlich durch die Infrarotstrahlung des Dampfes
- Konvektion der heißen Verbrennungsprodukte (Dampf, Stickstoff) und damit verbundener Gas/Struktur-Wärmeübertragung.

Entsprechende numerische Modelle in V3D wurden anhand klein-skaliger Experimente mit H<sub>2</sub>/Luft/Dampf-Diffusionsflammen bewertet.

Schnelle turbulente Verbrennung (modelliert mit COM3D) und stabile Detonationen (modelliert mit DET3D) führen hauptsächlich zu Druck- und Impulslasten, da die hohen Verbrennungsraten praktisch keine Zeit für den Wärmetransport an Strukturen zulassen. Die meiste Verbrennungsenergie wird in Wärme- und kinetische Energie der Gasphase und schließlich zu Druckwellen umgewandelt. Nur dünne Strukturen, die entweder thermisch isoliert sind oder eine geringe Wärmeleitfähigkeit haben, wie Plastik-Liner oder Kabel, sind für entsprechende thermische Lasten empfänglich.

## 4.10 Mechanische und thermische Lasten

Der weitere Analysevorgang schließt sich nahtlos an die Verbrennungsanalyse an. Die thermischen und mechanischen Lasten aus der 3D-Simulation (vor allem Temperatur- und Druckverlauf) des betrachteten Verbrennungsprozesses werden

zeitlich aufgelöst für verschiedene Positionen im Sicherheitsbehälter aufgezeichnet. Welcher dieser beiden Lasttypen vorherrscht, wird hauptsächlich durch das erste Zündereignis im Sicherheitsbehälter bestimmt. Frühe Zündungen führen meistens zu niedrigen Druckspitzen, jedoch zu hohen thermischen Lasten aufgrund von stehenden Diffusionsflammen. Späte Zündungen einer aufkonzentrierten Wasserstoffansammlung verursachen hohe transiente Drucklasten, allerdings ist die Temperaturerhöhung in großen Strukturen in solchen Fällen vernachlässigbar. In beiden Fällen wird die gleiche Verbrennungsenergie frei, aber auf sehr unterschiedlichen Zeitskalen (Stunden im Vergleich zu Sekunden) und mit den dementsprechend unterschiedlichen Wärmefreisetzungsraten.

#### **4.11 Strukturverhalten**

Die berechneten Lasten stellen Eingabeparameter für den letzten Schritt der Analyse, der Untersuchung des Strukturverhaltens, dar. Thermische Lasten durch stehende Diffusionsflammen sollten nicht zu einem Sicherheitsbehälterversagen, beispielsweise durch das Versagen sensibler Strukturkomponenten wie Kabeldurchführungen oder Schleusendichtungen, führen. Außerdem sollten Anlagenkomponenten, die zur Beendigung des Unfalls benötigt wird, wie z.B. Notkühlsysteme, nicht durch eine heiße Atmosphäre oder durch Beschädigung von Kabeln ausfallen.

Mechanische Lasten durch schnelle Flammen umfassen Druckwellen, Impulse und möglicherweise Einschläge von Trümmern, die durch Verbrennungsstoßwellen erzeugt werden (sog. Missiles). Wenn schnelle Verbrennungsvorgänge nicht durch Gegenmaßnahmen ausgeschlossen werden können, ist eine weitergehende Untersuchung des Strukturverhaltens aufgrund solcher mechanischer Lasten erforderlich, um ein Versagen des Sicherheitsbehälters auszuschließen.

Diese Untersuchung wird dadurch erschwert, dass der Sicherheitsbehälter aus unterschiedlichen Komponenten mit unterschiedlichen mechanischen und thermischen Eigenschaften besteht. Das Spektrum reicht von dicken Betonstrukturen, bis zu dünnen elastischen Dichtungen in den Personenschleusen. Temperaturen, Druck- oder Strahlungsbelastungen bei schweren Unfällen können auch komplexe Synergieeffekte des Strukturverhaltens zur Folge haben, so z.B. für die Materialien von elastischen Dichtungen [4.7].

Erste grobe Abschätzungen zum Strukturverhalten von Containmentkomponenten unter gasdynamische Lasten können mit einem Einmassenschwinger-Modell gemacht werden. Kapitel 9 beschreibt das in diesem Projekt entwickelte numerische Modell. Falls das Einmassenschwinger-Modell Hinweise auf Gefährdungszustände liefern sollte, müssen genauere 3D- Finite- Elemente Rechnungen eingesetzt werden um Aussagen zur strukturmechanischen Integrität zu erhalten.

Endgültiges Ziel der hier beschriebenen Wasserstoffanalysemethodik ist Nachweis der Containmentintegrität unter postulierten Störfallszenarien.

#### **4.12 Weitere Beschreibung der Arbeiten zur Entwicklung der Analysenmethodik**

In den nachfolgenden Kapiteln dieses Endberichts werden die durchgeführten Arbeiten zu den einzelnen Schritten der beschriebenen Analysenmethodik zusammengefasst (Kapitel 5-9). Die Arbeiten zur Methodenentwicklung konzentrierten sich vor allem auf die Verifikation der numerischen Modelle. Die

entsprechenden Kapitel beginnen deshalb mit einer Übersichtstabelle zu den Teilprozessen, dem gewählten Modellierungsansatz und den durchgeführten Verifikationsrechnungen. Die Kapitel 10 und 11 beschreiben die durchgeführten Reaktoranalysen. Diese Berichtsstruktur entspricht Abb. 1.5, mittlerer Kreis.

## Referenzen

- [4.1] Rohde, J., Breitung, W., 1997. Selection of representative accident sequences for design and evaluation of H<sub>2</sub>-control measures in PWR-containments, 141<sup>st</sup> Session of RSK Light Water Reactor Committee, January 30.
- [4.2] Travis, J.R., Royl, P., Redlinger, R., Necker, G., Spore, J.W., Lam, K.L., Wilson, T.L., Nichols, B.D., Müller, C., 1998. GASFLOW-II: A Three-Dimensional-Finite-Volume Fluid-Dynamics Code for Calculating the Transport, Mixing, and Combustion of Flammable Gases and Aerosols in Geometrically Complex Domains, Theory and Computational Model, vol. 1. Reports FZKA-5994, LA-13357-MS.
- [4.3] Paillere, H., Dada, L., Dabbene, F., Magnaud, J.-P., Gauvain, J., 1999. Development of Hydrogen Distribution and Combustion Models For The Multi-Dimensional / Lumped-Parameter Tonus Code, 8th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics, NURETH-8 Paper Log. No. 230, Kyoto, Japan, September 30- October 4.
- [4.4] A. Vesper, A. Kotchourko, W. Breitung, Experiments On Turbulent Combustion And COM3D Verification, Proceedings Jahrestagung Kerntechnik 99, Kerntechnische Gesellschaft e.V. Deutsches Atomforum e.V. Annual Meeting on Nuclear Technology 99, ISSN 0720-9207, Karlsruhe, 18.-20. Mai 1999
- [4.5] A. Kotchourko, W. Breitung, A. Vesper, Reactive Flow Simulations In Complex 3D Geometries Using The COM3D Code, Proceedings Jahrestagung Kerntechnik 99, Kerntechnische Gesellschaft e.V. Deutsches Atomforum e.V. Annual Meeting on Nuclear Technology 99, ISSN 0720-9207, Karlsruhe, 18.-20. Mai 1999, p. 173
- [4.6] Redlinger, R., 1999. DET2D: A Code For Calculating Detonations In Reactor Containments, Tagungsbericht Proceedings, Jahrestagung Kerntechnik 99, Kerntechnische Gesellschaft e.V. Deutsches Atomforum e.V. Annual Meeting on Nuclear Technology'99, ISSN 0720-9207. Karlsruhe, 18-20 Mai, p. 191.
- [4.7] Vanini, P., Becue, P., Orden Martinez, A., Forasassi, G., Pinno, E., 1997. Benchmarks on containment penetration sealing areas behaviour, FISA-97 Symposium on EU Research on Severe Accidents, Luxembourg, November 17-19, p. 303.

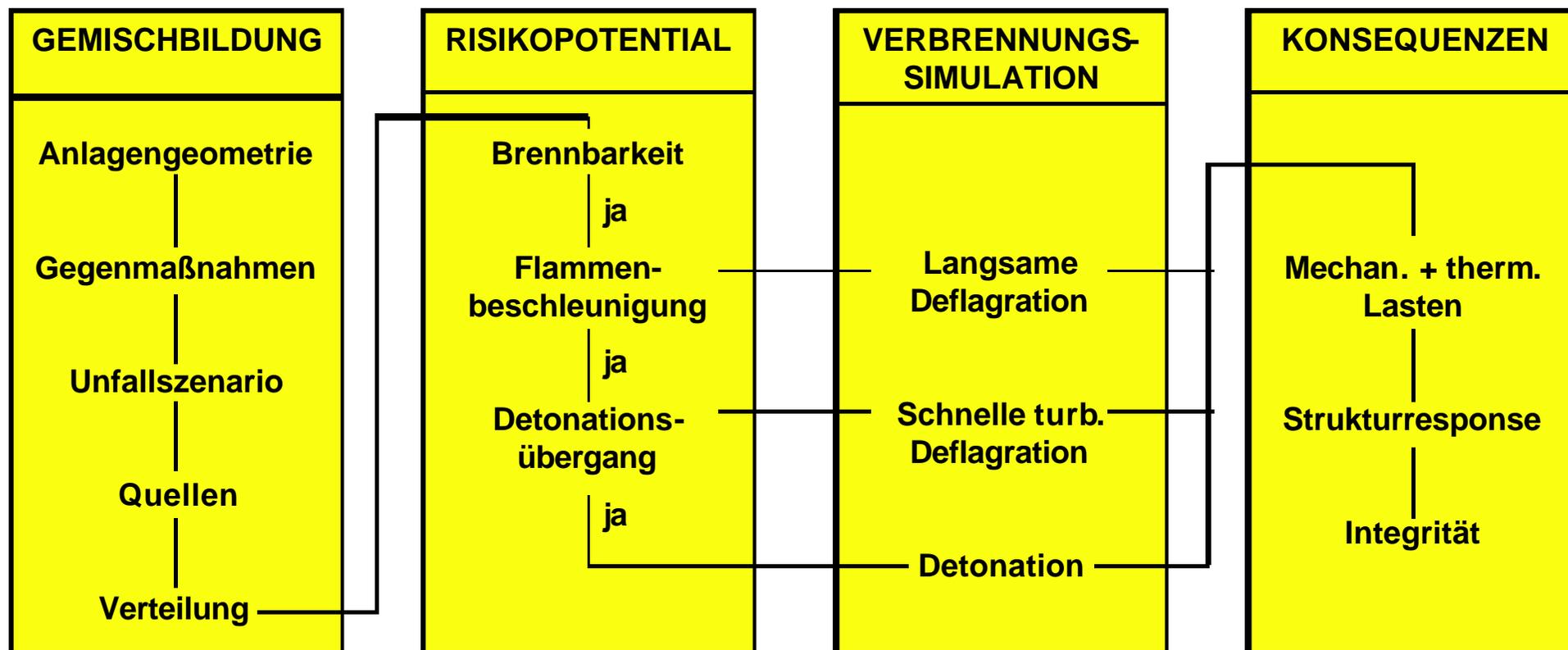


Abb. 4.1: Die im Rahmen von Teilprojekt 1 entwickelte generelle Analysemethodik für das Wasserstoffverhalten bei Kernschmelzunfällen.

## 5.1 Übersicht zur Entwicklung und Verifikation von Wasserstoffverteilungsrechnungen

Zur Beschreibung von Wasserstoffverteilungsprozessen bei FZK wurde das ursprünglich in Los Alamos begonnene Programm GASFLOW übernommen und seit 1994 eigenständig weiter entwickelt. GASFLOW ist ein drei-dimensionaler (3D) Fluidodynamik-Code, mit dem die Strömung von Gasen und Aerosolen innerhalb geschlossener Gebäude mit inneren Raumstrukturen simuliert werden kann. Sein Haupteinsatzgebiet liegt in der Sicherheitsanalyse von schweren Unfällen in Kernkraftwerken mit Druckwasserreaktoren; hierbei bildet insbesondere die Simulation der Verteilung von Wasserstoff und Wasserdampf in einem Containment einen Einsatzschwerpunkt des Codes.

Die Strömung bzw. der Transport von Wasserstoff und Wasserdampf in einem geschlossenen Raum wird von vielen Faktoren beeinflusst, zu denen neben den Randbedingungen, die durch die Quelle vorgegeben werden, Effekte in der Gasphase wie Druck- und Temperaturverteilung, Kondensations- und Verdampfungsvorgänge, Turbulenz, Wärmetransport, chemische Reaktionen etc., gehören. Diese sich gegenseitig beeinflussenden Mechanismen sind in GASFLOW modelliert und diese Modelle dann anhand von Einzeleffekt- und Integralexperimenten verifiziert worden.

Die folgende Tab. 5.1 zeigt, wie und anhand welcher Experimente einzelne in GASFLOW implementierte Modellansätze verifiziert worden sind. Sie kann vereinfachend in zwei Blöcke unterteilt werden: **Verteilung** und **Gegenmaßnahmen**. Jeder der beiden Blöcke enthält eine Auflistung der zu verifizierenden *Teilprozesse*, deren Umsetzung in GASFLOW (*Modellierung*) und die eigentliche *Verifikationsmatrix*, die selber wiederum in die Punkte *analytische Lösungen*, *Einzeleffektversuche* und *Integralversuche* unterteilt werden kann.

Die Teilmodelle werden, soweit wie möglich, zunächst an bekannten analytischen Lösungen verifiziert. Die zweite Verifikationsstufe bestand in der Nachrechnung von Einzeleffektversuchen. Hier versuchte man einzelne Modelle möglichst weitgehend isoliert über den gewünschten Parameterbereich zu überprüfen.

Die dritte Verifikationsstufe betraf die Modellierung von Integralversuchen, bei denen eine Vielzahl von physikalischen Prozessen miteinander wechselwirken. Solche, zum Teil als blinde Benchmarkrechnungen durchgeführte Simulationen testen die Wechselwirkung der angesprochenen Teilmodelle und geben entscheidende Hinweise auf die Leistungsfähigkeit des integralen numerischen Programms.

Die erste Spalte im Block **Verteilung** enthält Transportgrößen und -eigenschaften, wie molekularer Transport und thermophysikalische Eigenschaften, die aus Tabellenwerken entnommen sind, sowie thermodynamische Prozesse wie Wärmeübertragung, Turbulenz, Verdampfung- und Kondensation, für die in GASFLOW eigene Modellansätze existieren. Diese Ansätze sind stichwortartig in der zweiten Spalte aufgeführt; Details können dem GASFLOW-Manual entnommen werden [5.1]. In der daran anschließenden dreigeteilten Verifikationsmatrix kennzeichnen schwarze Punkte, welches Experiment oder welche analytische Lösung zur Verifikation eines bestimmten GASFLOW-Modells herangezogen wurde.

So zeigt beispielsweise der erste Punkt in der Spalte *analytische Lösungen*, dass eine laminare Kanalströmung mit GASFLOW gerechnet wurde, was als Teilverifikation des Modells für Strömung und Transport, hier die 3D-Navier-Stokes Gleichungen, angesehen werden kann. Die daneben stehende Zahl gibt die Abbildungsnummer an, in welcher weiterführende Informationen über diese Verifikationsrechnung enthalten sind (hier Abb. 5.2).

Als ein weiteres Verifikationsbeispiel sei hier exemplarisch der Integralversuch HDR E11.2 genannt, der zur Überprüfung der GASFLOW-Modelle für Strömung und Transport, Turbulenz, Wärmeleitung in Strukturen sowie Verdampfung und Kondensation dient. Details dieser Rechnung können Abb. 5.13 entnommen werden.

Der untere zweite Block der Tabelle mit der Überschrift **Gegenmaßnahmen** hat den gleichen Aufbau wie der obere Block **Verteilung**, so dass sich eine detaillierte Beschreibung hier erübrigt. Zu den untersuchten Gegenmaßnahmen gehören Rekombinatoren unterschiedlicher Bauart, Zünder, Sumpferdampfung und CO<sub>2</sub>-Verdünnung. Jedes GASFLOW-Modell einer Gegenmaßnahme ist mit mindestens einer Rechnung verifiziert worden. Auch hier kennzeichnen die Nummern in der ersten Zeile des zweiten Tabellenabschnitts die Abbildung, in der weitere Details zur jeweiligen Verifikationsrechnung dargestellt sind (hier Abb. 6.1-6.5).



## Modellgleichungen

Die in GASFLOW implementierten 3D-Modellgleichungen sind in integraler Form in den Abb. 5.1.1-5.1.8 zusammengefaßt. Es handelt sich dabei um die Erhaltungsgleichungen von Volumen und Masse, letztere aufgeteilt in die Gesamtmischung und die Spezienerhaltung (siehe Abb. 5.1.1) und um die Erhaltungsgleichungen für Impuls und Energie (siehe Abb. 5.1.2). In den beiden nachfolgenden Abbildungen sind die Gleichungen des  $k$ - $\epsilon$ -Turbulenzmodells aufgeführt, wobei die turbulente kinetische Energie und ihre Dissipationsrate in Abb. 5.1.3 sowie die Terme für Produktion und Senken und die im Modell verwendeten Konstanten in Abb. 5.1.4 gegeben sind.

Zustandsgleichungen und allgemeine Ansätze zur Berechnung der thermophysikalischen Eigenschaften der Gase sind in Abb. 5.1.5 dargestellt, ohne im Detail auf die Konstantensätze, die größtenteils den JANAF Tabellen [5.2] entnommen sind, einzugehen. Die Gleichungen zur Berechnung der molekularen Transporteigenschaften finden sich in Abb. 5.1.6. Die Berechnungsvorschriften für die Wärmeleitfähigkeit, der dynamischen Viskosität und des Diffusionskoeffizienten einer Gaskomponente in einer Mischung sind der CHEMKIN-Bibliothek [5.3] entnommen. Die Konstantensätze sind auch hier nicht aufgeführt.

GASFLOW besitzt ein sog. Einschnitt-Verbrennungsmodell, welches in den Abb. 5.1.7 und 5.1.8 kurz erläutert wird. Reaktionsgleichung, und -rate sind ebenso aufgeführt, wie Modellparameter und Gleichgewichtskonstanten.

Nachfolgend werden nun die Beispiele erläutert, an denen GASFLOW verifiziert worden ist. Am Beginn einer jeden Verifikationsproblemstellung ist eine Tabelle aufgeführt, in der stichwortartig die wichtigsten Informationen wie Problemstellung, Zweck, Numerik zusammengefasst sind. Unter dieser Tabelle finden sich in einem Kommentar weitere Informationen über die durchgeführte Simulationsrechnung.

## Referenzen

- [5.1] J.W. Spore, J. Travis, P. Royle, G. Necker, GASFLOW: A Computational Fluid Dynamics Code for Gases, Aerosols, and Combustion, LA-13357-MS, FZKA-5994, Forschungszentrum Karlsruhe, 1998.
- [5.2] JANAF THERMOCHEMICAL TABLES 3rd ed., vols. 1-2 M.W. Chase, American Chemical Society, 1986
- [5.3] R.J. Kee, F.M. Rupley, J.A. Miller, CHEMKIN-II: a FORTRAN Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics, Sandia Report SAND89-8009B UC-706, Sandia National Laboratories, 1993.

## Verifikationsproblemstellung 5.2

### Problembeschreibung:

Stationäre, zwei-dimensionale laminare Kanalströmung eines inkompressiblen Fluids (Luft) zwischen zwei senkrechten parallelen Platten. Die Strömung wird allein durch Gravitation verursacht.

### Zweck:

Validation der Impulsdiffusions- (viskose Spannungen) und Gravitationsterme in der Impulsbilanzgleichung. Konvergenz der Finite-Differenzen-Lösung und der (hier ableitbaren) analytischen Lösung der partiellen Differentialgleichung soll gezeigt werden.

### Validationskriterium:

Übereinstimmung des mit GASFLOW berechneten Geschwindigkeitsprofils mit der analytischen Lösung.

### Numerik:

- Gitter: 2D, kartesisches Gitter in y-z Richtung: 1 x 33 x 25 Zellen (4 x 8 x 100 cm)
- Randbedingungen: Haftbedingungen an den Kanalwänden
  
- Codeversion: GASFLOW 2.1.0.13
- Hardware: Sun Ultra 2 / 200, Sun OS 5.5.1
- Compiler: Edinburgh Portable FORTRAN 90 Compiler. Vers. 1.5.1.6, Opt=O3
- Rechenzeit: 3115,7s oder 373,5 ms / Zelle / Zeitschritt

### Ergebnisse und Schlussfolgerungen:

Die GASFLOW Ergebnisse stimmen sehr gut mit der analytischen Lösung überein (siehe Abb.5.2).

### Kommentar:

Die analytische Lösung ergibt sich aus der Integration der partiellen Differentialgleichung für die Impulsstromdichte, wobei nur der instationäre, der konvektive und der Gravitationsterm berücksichtigt werden. Druckgradienten und Dissipation werden vernachlässigt. Damit reduziert sich die Impulsleichung zu:

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + g$$

mit folgenden Anfangs- und Randbedingungen:

$$w = 0 \text{ für } 0 \leq y \leq H; t = 0$$

$$w = 0 \text{ bei } y = 0; t > 0$$

$$u = 0 \text{ bei } y = H; t > 0$$

Mit Hilfe der Methode der „Separation der Variablen“ erhält man folgende stationäre Lösung für das Geschwindigkeitsprofil über der Kanalhöhe  $H$  (vgl. Abb. 5.2.1), das sehr gut von GASFLOW wiedergegeben wird:

$$w(y) = \frac{gH^2}{8n} \left[ \frac{y}{H} - \left( \frac{y}{H} \right)^2 \right]$$

### Verifikationsproblemstellung 5.3

<b>Problembeschreibung:</b> Eindimensionale binäre Diffusion von Wasserstoff in Luft
<b>Zweck:</b> Validation der Diffusionsterme in der Impulsbilanz
<b>Validationskriterium:</b> Übereinstimmung der mit GASFLOW berechneten Wasserstoffkonzentration entlang des 1D-Kanals mit der hier ableitbaren analytischen Lösung.
<b>Numerik:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- Gitter: 1D, kartesisches Gitter in x-Richtung: 100 Zellen (10 cm)</li><li>- Codeversion: GASFLOW 2.1.0.13</li><li>- Hardware: Sun Ultra 2 / 200, Sun OS 5.5.1</li><li>- Compiler: Edinburgh Portable FORTRAN 90 Compiler. Vers. 1.5.1.6, Opt=O3</li><li>- Rechenzeit: 59,1s oder 282,7 ms / Zelle / Zeitschritt</li></ul>
<b>Ergebnisse und Schlussfolgerungen:</b> Die GASFLOW Ergebnisse stimmen sehr gut mit der analytischen Lösung überein (siehe Abb.5.3).

#### Kommentar:

Die analytische Lösung ergibt sich aus der Integration des sog. 2. Fick'schen Gesetzes (Diffusionsgleichung):

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D_{AB} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

mit folgenden Anfangs- und Randbedingungen:

$$f(x, t) = f_0 \text{ für } 0 \leq x \leq \infty; t = 0 \quad \text{und} \quad f(x, t) = f_b \text{ bei } x = 0; t > 0$$

Die Lösung der obigen Dgl. ist eine komplementäre Errorfunktion der Form:

$$\frac{f - f_0}{f_b - f_0} = \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{D_{AB}t}}\right)$$

Bei der numerischen Simulation mit GASFLOW wurde folgendes Zeitschrittkriterium wirksam:

$$\frac{D_{AB}\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2}$$

Auf weitere zeitliche und örtliche Konvergenzuntersuchungen wurde aufgrund der hervorragenden Übereinstimmung mit der analytischen Lösung (Abb. 5.3) verzichtet.

## Verifikationsproblemstellung 5.4

**Problembeschreibung:**

Turbulente Strömung von Luft in einem Rechteckkanal bei konstantem Umgebungsdruck und konstanter Temperatur.

**Zweck:**

Validation des Turbulenzmodells

**Validationskriterium:**

Übereinstimmung der GASFLOW-Ergebnisse für die dimensionslose Schubspannungs-geschwindigkeit als Funktion des dimensionslosen Wandabstands mit Experimenten von Comte-Bellot und Theorie von Spalding.

**Numerik:**

**Fall 1:**  $Re = 228000$  (Abb. 5.4.1)

- Gitter: 1D, kartesisches Gitter
- Feine Auflösung mit 159 Zellen über der Kanalbreite (18 cm)
- Rechenzeit: X,1s oder Y ms / Zelle / Zeitschritt

-

**Fall 2:**  $Re = 228000$  (Abb. 5.4.2)

- Gitter: 1D, kartesisches Gitter
- Grobe Auflösung mit 5 Zellen über der Kanalbreite (18 cm)
- Rechenzeit: X,1s oder Y ms / Zelle / Zeitschritt

-

**Fall 3:**  $Re = 920000$  (Abb. 5.4.3)

- Gitter: 1D, kartesisches Gitter
- Feine Auflösung mit 79 Zellen über der Kanalbreite (18 cm)
- Rechenzeit: X,1s oder Y ms / Zelle / Zeitschritt

- Codeversion: GASFLOW 2.1.0.13
- Hardware: Sun Ultra 2 / 200, Sun OS 5.5.1
- Compiler: Edinburgh Portable FORTRAN 90 Compiler. Vers. 1.5.1.6, Opt=O3

**Ergebnisse und Schlussfolgerungen:**

Die GASFLOW Ergebnisse stimmen gut mit den Experimenten von Comte-Bellot und der Theorie von Spalding überein, liegen tendenziell aber leicht über den experimentellen Daten.

**Kommentar:**

Bei diesem Verifikationsproblem wird die turbulente Strömung von Luft in einem Rechteckkanal bei konstantem Umgebungsdruck und konstanter Temperatur untersucht. GASFLOW-Ergebnisse werden mit experimentellen Daten von Comte-Bellot und mit theoretischen Werten von Spalding verglichen.

Die Abb. 5.4.1 bis 5.4.3 zeigen jeweils zwei Grafiken: In der oberen ist jeweils der Verlauf der lokalen zur maximalen Strömungsgeschwindigkeit über der mit dem halben

Kanaldurchmesser  $D$  entdimensionierten Höhe linear aufgetragen, in der unteren die Schubspannungsgeschwindigkeit logarithmisch über dem dimensionslosen Wandabstand. Die von Comte-Bellot experimentell gewonnenen Daten sind in Form von Kreisen [5.4] gegeben, die Kurven repräsentieren die GASFLOW Werte (hell) und die Theorie von Spalding (dunkel), [5.5].

Die Abb. 5.4.1 und 5.4.2 zeigen dasselbe Experiment, das mit verschiedenen großen Gittern in GASFLOW abgebildet wurde; Abb. 5.4.3 zeigt eine Nachrechnung eines Experiments mit höherer Reynoldszahl.

Bei der ersten GASFLOW-Rechnung (Abb. 5.4.1) sind 159 Zellen über der halben Kanalhöhe  $D$  gewählt worden, welche die Grenzschicht bis zur Höhe  $y^+ = 10$  aufzulösen vermögen.

Im der oberen Grafik von Abb. 5.4.1 kann eine recht gute Übereinstimmung von GASFLOW und dem Experiment festgestellt werden. GASFLOW-Werte liegen leicht über den Versuchsdaten. Bei der unteren, logarithmischen Darstellen zeigt sich, dass die GASFLOW-Werte im  $y^+$ -Intervall von 10 bis 100 die Experimente weitaus besser wiedergeben als die Theorie von Spalding. Ab  $y^+ > 100$  überschätzt GASFLOW die experimentellen Daten, Spalding hingegen unterschätzt die Werte.

Die Abb. 5.4.2 zeigt die Nachrechnung des gleichen Experimentes mit weniger Zellen über der halben Kanalhöhe (hier fünf). Aufgrund der geringen Zellanzahl wird die Grenzschicht nicht unter  $y^+ = 15$  aufgelöst. Wie die beiden Grafiken zeigen, genügt schon eine geringe Zellanzahl, um zumindest eine gute tendenzielle Übereinstimmung mit den Experimenten zu erreichen.

In Abb. 5.4.3 ist der Vergleich einer GASFLOW-Simulation mit einem Experiment mit höherer Reynoldszahl 920000 dargestellt. Ansonsten sind die Randbedingungen des Versuchs identisch. Für die halbe Kanalbreite genügen hier 79 Zellen, was eine Auflösung bis auf  $y^+ = 100$  ermöglicht. Auch in diesem Beispiel zeigt sich, dass GASFLOW sehr gut in der Lage ist, das Experiment von Comte-Bellot wiederzugeben.

Zusammenfassend zeigt sich, dass GASFLOW isotherme turbulente Strömungen gut abzubilden vermag.

## Referenzen

- [5.4] G. Comte-Bellot, *Ecoulement Turbulent entre Deux Parois Paralleles*, Publications Scientifiques et Techniques du Ministere de l'Air, Magasin de Vente: 2, Avenue de la Porte-D'Issy, Paris (15<sup>e</sup>), 1965.
- [5.5] B. E. Launder and D. B. Spalding, "The Numerical Computation of Turbulent Flows," *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **3**, 269 (1974).

## Verifikationsproblemstellung 5.5

**Problembeschreibung:**

Turbulente Strömung von Luft zwischen zwei parallelen Platten bei konstantem Umgebungsdruck und konstanter Temperatur (C/B1-Versuche).

**Zweck:**

Validation des k-ε-Turbulenzmodells.

**Validationskriterium:**

Übereinstimmung des von GASFLOW berechneten Geschwindigkeitsprofils mit dem von Karman'schen Wandgesetz und mit Experimenten von Comte-Bellot.

**Numerik:**

- Gitter: 2D, kartesisches Gitter in y-z Richtung: B x C Zellen (A x B x C cm)
- Randbedingungen: Haftbedingungen an den Kanalwänden
  
- Codeversion: GASFLOW 2.1.0.13
- Hardware: Sun Ultra 2 / 200, Sun OS 5.5.1
- Compiler: Edinburgh Portable FORTRAN 90 Compiler. Vers. 1.5.1.6, Opt=O3

**Ergebnisse und Schlussfolgerungen:**

Die GASFLOW Ergebnisse stimmen gut den Experimenten von Comte-Bellot überein (siehe Abb. 5.4).

**Kommentar:**

Das k-ε-Turbulenzmodell in GASFLOW wurde anhand von Experimenten von Comte-Bellot [5.4] verifiziert. Luft strömt dabei bei konstantem Druck und konstanter Temperatur zwischen zwei parallelen Platten. Der Abstand der Platten beträgt 18cm und die gesamte Kanallänge 12m, um eine vollständig ausgebildete Strömung zu gewährleisten. Am Ende dieses Kanals bei 12m werden die Messwerte entlang der Kanalhöhe aufgenommen.

Die Abb. 5.5.1 zeigt die dimensionslose Geschwindigkeit  $u^+$  aufgetragen über dem logarithmischen Wandabstand  $y^+$ . Die Comte-Bellot-Experimente sind dabei mit schwarzen Punkten gekennzeichnet, die Rauten repräsentieren die von GASFLOW berechneten Geschwindigkeiten. Bis  $y^+=500$  besteht eine sehr gute Übereinstimmung zwischen GASFLOW und dem Experiment, zwischen 500 und 3000 überschätzt GASFLOW die Werte leicht, ab 3000 besteht wieder eine sehr gute Übereinstimmung. Zum Vergleich ist auch das von Karman'sche logarithmische Wandgesetz

$$u^+ = 2,5 \ln(y^+) + 5,5 \text{ für } y^+ \geq 30$$

ingezeichnet. Es gibt die experimentellen Daten von Comte-Bellot vom Beginn des Gültigkeitsbereiches bei  $y^+=30$  bis etwa  $y^+=1000$  sehr gut wieder. Darüber unterschätzt es die Werte in dem Maße, in dem GASFLOW sie überschätzt.

Die Abb. 5.5.2 gibt die gemessene und die berechnete turbulente kinetische Energie in Abhängigkeit vom Verhältnis  $y/D$  (Variable  $D$  ist hier die halbe Kanalhöhe) für eine Reynoldszahl von 228000 wieder. Unterhalb von  $y^+=0,5$  unterschätzt GASFLOW die experimentellen Daten um ca. 10%. Oberhalb von  $y^+=0,5$  ist eine bessere Übereinstimmung erkennbar.

Abb. 5.5.3 zeigt die Ergebnisse eines Experiments mit einer höheren Reynoldszahl. Der Versuchsaufbau ist identisch. In diesem Fall kann eine durchweg gute Übereinstimmung festgestellt werden.

## Verifikationsproblemstellung 5.6

### Problembeschreibung:

Im Benchmark-Versuch HYJET Jx7 wird Helium als Ersatz für Wasserstoff in das Battelle-Modellcontainment (BMC, 600m<sup>3</sup>) eingespeist. In diesem Versuch werden die Strömungsverhältnisse in der Nähe der Einspeisestelle untersucht, d.h. der Strahl und die aufsteigende He-Luft Wolke.

### Zweck:

Der Benchmark-Versuch dient insbesondere der Verifikation der GASFLOW-Modelle für Strömung und Transport sowie Turbulenz

### Validationskriterium:

Zeitlicher Verlauf der Konzentration von Helium an verschiedenen Stellen des Modellcontainments.

### Numerik:

**Fall 1:** Grobes Gitter (wird nicht weiter betrachtet)

- Gitter: 3D, Zylinderkoordinaten (11 x 24 x 18 = 4752 Zellen in r- $\phi$ -z)

**Fall 2:** Feines Gitter (Abb. 5.6.1)

- Gitter: 3D, Zylinderkoordinaten (30 x 51 x 88 = 58140 Zellen in r- $\phi$ -z)
- Randbedingungen: Algebraisches Turbulenzmodell
- Codeversion: GASFLOW 2.1.0.13
- Hardware: Sun Ultra 2 / 200, Sun OS 5.5.1
- Compiler: Edinburgh Portable FORTRAN 90 Compiler. Vers. 1.5.1.6, Opt=O3
- Rechenzeit: ca. 1 Woche

### Ergebnisse und Schlussfolgerungen:

Die GASFLOW Ergebnisse stimmen recht gut mit den experimentellen Daten überein

### Kommentar:

Diese Vergleichsrechnung entstand im Rahmen eines blinden Benchmark-Versuchs, an dem fünf Organisationen mit fünf verschiedenen Codes teilnahmen [5.6]. Außer GASFLOW kamen bei diesem Benchmark die CFD-Codes CFX und GOTHIC, sowie die „Lumped-Parameter-Codes“ RALOC und WAVCO zum Einsatz.

In Abb. 5.6.1 ist ein Schnitt durch das GASFLOW-Nodalisationsschema des Battelle-Modellcontainments (BMC) dargestellt. Im Vordergrund ist der Heliumstrahl zu erkennen, der mit 42 m/s durch auf mehreren Ebenen vorhandene Öffnungen bis unter die Kuppel des Containments aufsteigt. Die Einspeisemenge beträgt 9,1 kg über einen Zeitraum von 190s.

Links und rechts sind jeweils zwei Diagramme dargestellt. Auf der linken Seite befinden sich zwei Konzentrations-Zeit-Diagramme, auf der rechten Seite zwei Konzentrations-Abstands-Diagramme, die eine Momentaufnahme bei t=200s zeigen.

Wie die Diagramme auf der linken Seite von Abb. 5.6.1 verdeutlichen, ist GASFLOW sehr gut in der Lage, den zeitlichen Verlauf der Konzentration an verschiedenen Stellen des Modellcontainments wiederzugeben. Im oberen Raum wird der Konzentrationsanstieg an Helium gut nachgebildet, ebenso ist die gleichbleibend geringe Konzentration am Boden zu erkennen.

Auf der rechten Seite sind die Konzentrationsverläufe entlang eines vertikalen Schnittes (oberes Diagramm) und entlang eines horizontalen Querschnitts nahe der Einspeisestelle (unteres Diagramm) dargestellt. Beim vertikalen Schnitt sind leichte Abweichungen im Konzentrationsverlauf zu erkennen; der horizontale Querschnitt wird gut wiedergegeben.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass GASFLOW das Jx7-Experiment im Battelle-Modellcontainment sehr gut wiedergegeben hat.

## **Referenzen**

[5.6] T. Kanzleiter et al.: HYJET-/PACOS-Versuche im Modellcontainment. Abschlußbericht BF-R40.075-01. Battelle Ingenieurtechnik GmbH, Eschborn, Dez. 1996.

## Verifikationsproblemstellung 5.7

**Problembeschreibung:**

Einspeisung von Helium in die mit Luft gefüllte „Large-Scale Gas Mixing Facility“ (LSGMF, ca. 1000 m<sup>3</sup>) bei AECL in Whiteshell, Manitoba, Kanada

**Zweck:**

Skalierungsuntersuchungen: Verifikation der GASFLOW-Modellansätze für Strömung und Transport sowie Turbulenz.

**Validationskriterium:**

Übereinstimmung der zeitabhängigen Helium-Konzentration mit Messdaten.

**Numerik:**

- Gitter: 3D, kartesisches Gitter: 10 x 12 x 25 Zellen (¼ Geometrie) (kleinste Zelle: 20 cm)
- Codeversion: GASFLOW 2.1.1.0
- Hardware: CRAY J90
- Compiler: CRAY FORTRAN 90 Compiler. Vers. 2, Opt=O3
- Rechenzeit: ca. 80000s für 600s Problemzeit

**Ergebnisse und Schlussfolgerungen:**

Die GASFLOW Ergebnisse stimmen gut mit den gemessenen Daten überein. Die Skalierung ist damit verifiziert.

**Kommentar:**

Die Abb. 5.7.1 zeigt eine Skizze der „Large-Scale Gas Mixing Facility“, die in Whiteshell, Kanada aufgebaut ist. In einen etwa 1000 m<sup>3</sup> großen mit Luft gefüllten Raum wird Helium eingespeist und dessen Verteilung gemessen. Die Jetgeschwindigkeit beträgt etwa 8,6 m/s und liegt damit unter der Geschwindigkeit bei den BMC-Versuchen (siehe Problemstellung 5.6).

Da aber beide Anlagenvolumina (Whiteshell und BMC) und die Randbedingungen ähnlich sind (Luftfüllung etc.), können Aussagen über die Skalierbarkeit der in GASFLOW implementierten Modelle an einer drei-dimensionalen Anlage gewonnen werden.

Die Abb. 5.7.2. zeigt hierzu einen Vergleich der gemessenen Helium-Konzentrationen und der berechneten: GASFLOW unterschätzt die Konzentrationen bis etwa 300s nach Beginn der Einspeisung. Nach 300s ist eine sehr gute Übereinstimmung festzustellen [5.7].

In Übereinstimmung zur Verifikationsrechnung 5.6 kann hier festgestellt werden, dass GASFLOW die Eindüsung von Gasen – auch mit hohen Einströmgeschwindigkeiten - in große Räume gut simulieren kann.

[5.7]: W. Baumann. "Effects of Oversized Jet Flow Areas in GASFLOW Analyses, Investigations of Canadian Gas Mixing Tests", in B. Mühl, Projekt Nukleare Sicherheitsforschung Jahresbericht 1998, FZKA 6300, 1999, S. 41ff.

## Verifikationsproblemstellung 5.8

### Problembeschreibung:

DATETH-Versuche (Data Base on Turbulent Heat Transfer): Zwei-dimensionale Luftströmung in einem Plattenkanal, wobei in der ersten Versuchsreihe die Luft und die Wand isotherm gehalten werden. In einer zweiten Versuchsreihe wird die untere Wand stark aufgeheizt. Gemessen werden die Geschwindigkeitsprofile, Temperatur und Dichteverlauf entlang der Kanalhöhe.

### Zweck:

Verifikation der GASFLOW-Modelle für Strömung und Transport sowie für den turbulenten Wärmeübergang Gas/Wand. Insbesondere wird hier das Augenmerk auf die Wandfunktionen gerichtet.

### Validationskriterium:

Übereinstimmung des Geschwindigkeitsprofils, des Temperatur- und des Dichteverlaufs über der Höhe des Kanals

### Numerik:

**Fall 1:** Grobes Gitter (wird nicht weiter betrachtet)

- Gitter: 2D, kartesische Koordinaten (200x 20 x 11 Zellen) im Rechteckkanal (Abb. 5.8.1) mit 1,6 x 20 x 168 cm

**Fall 2:** Feines Gitter (Abb. 5.8.2)

- Gitter: 2D, kartesische Koordinaten (200 x 20 x 41 Zellen) entsprechend 1,6 x 20 x 168 cm
- Randbedingungen: k-ε Turbulenzmodell
- 
- Codeversion: GASFLOW 2.1.0.13
- Hardware: Iketgf Linux box
- Compiler: Edinburgh Portable FORTRAN 90 Compiler. Vers. 1.5.1.6, Opt=O3
- Rechenzeit: ca. 2,5 Stunden
- 

### Ergebnisse und Schlussfolgerungen:

Die GASFLOW Ergebnisse stimmen gut mit Messungen überein.

### Kommentar:

Die DATHET-Versuche [5.8] dienen zur Verifikation des turbulenten Wärmeübergangs von/an eine(r) beheizte Wand. In einer ersten Versuchsreihe sind isotherme Randbedingungen bei  $T = 330 \text{ K}$  gewählt worden, die als Vergleichsdatenbasis für Versuche mit Wärmeübertragung zur Verfügung stehen.

Die Abb. 5.8.2 zeigt eine Prinzipskizze des isothermen Experiments. Darunter ist das Verhältnis  $U/U_m$  der lokalen zur maximalen Geschwindigkeit über der dimensionslosen Kanalhöhe  $y/H$  für zwei unterschiedliche Nodalisationen aufgetragen. Bei 11 Zellen über

der halben Kanalhöhe wird das Geschwindigkeitsprofil tendenziell richtig, aber erst mit 41 Zellen gut wiedergegeben.

Mit diesen 41 Zellen sind nun auch die GASFLOW-Rechnungen zu den nicht-isothermen Versuchen durchgeführt worden. Abb. 5.8.3 zeigt oben eine Skizze des Kanals, der nun zwei unterschiedliche Wandtemperaturen hat (die untere ist auf 870 K, die obere auf 330 K aufgeheizt worden) und durch den Luft mit einer Temperatur von 600 K strömt. Die Messebene befindet sich 168cm vom Kanaleintritt entfernt.

Unterhalb dieser Skizze sind drei Diagramme dargestellt, in denen das erste wiederum das dimensionslose Geschwindigkeitsprofil über der Höhe zeigt, das mittlere die Temperaturverteilung über der Höhe und das untere die Luftdichte auch als Funktion von  $y/H$ . Das Geschwindigkeitsprofil wird im Wandbereich ( $y/H < 0,2$  bzw.  $y/H > 0,8$ ) von GASFLOW unterschätzt, ansonsten ist eine sehr gute Übereinstimmung erkennbar. Bei den beiden anderen Diagrammen ist eine über die gesamte Kanalhöhe durchweg gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten gegeben.

Zusammenfassend kann hier festgestellt werden, dass der turbulente Wärmeübergang an eine Wand als verifiziert gelten kann, auch wenn das Geschwindigkeitsprofil in Wandnähe leichte Abweichungen zeigt.

## Referenzen

[5.8] K. Suenaga, H. Yoshida, S. Sorimachi, R. Echigo, Jpn. Soc. Mech. Eng. of the 69th JSME Fall Annual Meeting, Vol. B, No. 910-62, 403 (1991)

## Verifikationsproblemstellung 5.9

### **Problembeschreibung:**

Ergänzende Untersuchungen zu DATHET ohne Experiment: Turbulente Strömung von Luft in einem Plattenkanal mit Wärmeübergang und Kondensation.

Der Versuchsaufbau Comte-Bellot wird in seinen Randbedingungen für weiterführende Untersuchungen genutzt. Geschwindigkeitsprofile bei Strömungen mit Wärmeübertragung von und zu einer Wand wurden mit GASFLOW berechnet und mit von Reichardt abgeleiteten Profilen verglichen.

### **Zweck:**

Verifikation des  $k$ - $\epsilon$ -Turbulenzmodells und der Modelle für Kondensation und Verdampfung

### **Validationskriterium:**

Übereinstimmung des von GASFLOW berechneten Geschwindigkeitsprofils mit theoretisch abgeleiteten Profilen.

### **Numerik:**

- Gitter: 2D, kartesisches Gitter in y-z Richtung: A x B x C Zellen (A x B x C cm)
- Randbedingungen: Haftbedingungen an den Kanalwänden
  
- Codeversion: GASFLOW 2.1.0.13
- Hardware: Iketgf Linux box
- Compiler: Edinburgh Portable FORTRAN 90 Compiler. Vers. 1.5.1.6, Opt=O3
- Rechenzeit: 2,5 Stunden

### **Ergebnisse und Schlussfolgerungen:**

Die GASFLOW Ergebnisse stimmen gut mit den Profilen von Reichardt [5.9] überein.

### **Kommentar:**

Nachdem im vorherigen Verifikationsproblem 5.8 Strömungsprofile in einem Plattenkanal unter isothermen und nicht-isothermen Randbedingungen analysiert worden sind, ist hier der Einfluß des Wärmeübergangs und der Kondensation auf das Strömungsprofil anhand eines weiterführender GASFLOW-Rechnungen untersucht worden. Dabei sind vereinfachend die Versuchsrandbedingungen der Experimente von Comte-Bellot übernommen worden.

Als Vergleich dienen die Strömungsprofile, die sich aus der numerischen Integration der Grenzschichtdifferentialgleichungen für stationäre, zwei-dimensionale inkompressible nicht-reagierende Strömungen ergeben. Als Modell für die Schubspannungsgeschwindigkeit und die Wirbelstärke dienen die Gleichungen von Reichardt [Reichardt].

Die Abb. 5.9.1 zeigt oben eine Skizze des „Versuchsaufbaus“ und der Randbedingungen für die Rechnung. Als fiktive Messebene wird wiederum der

Querschnitt bei 1060cm hinter dem Beginn des Kanals. Die Kanalwände haben eine konstante Temperatur von 400K, die Eintrittstemperatur der Luft beträgt 300K bei 1 bar Systemdruck. Unterhalb dieser Skizze sind zwei Diagramme dargestellt, die mit GASFLOW berechnete Geschwindigkeits- und das Temperaturprofile, aufgetragen über dem logarithmischen Wandabstand, zeigen. Als diskrete Werte sind GASFLOW-Ergebnisse dargestellt, die Linien geben die mit dem Modell von Reichardt [5.9] berechneten Werte wieder. Im Diagramm a) sind 9 äquidistante Zellen über die Kanalhöhe, in Diagramm b) 39 Zellen für die GASFLOW-Simulation verwendet worden. Ein Vergleich der beiden Diagramme zeigt, dass selbst bei 9 Zellen das Geschwindigkeitsprofil sehr gut von GASFLOW abgebildet werden kann. Bei 39 Zellen wird die Grenzschicht bei gleichbleibend guter Übereinstimmung natürlich besser aufgelöst.

In Abb. 5.9.2 ist die zu Abb. 5.9.1 komplementäre Situation dargestellt. Unter den gleichen Annahmen wie zuvor, hat nun die Wand eine niedrigere Temperatur (300K) als die einströmende Luft (400K, 1 bar). In der „Messebene“ sind wiederum das Geschwindigkeits- und das Temperaturprofil von GASFLOW berechnet und mit den theoretisch abgeleiteten Profilen verglichen worden. In den beiden Diagrammen unter der Skizze sind wiederum die Profile über dem logarithmischen Wandabstand aufgetragen, wobei in a) 9 und in b) 39 Zellen über der Kanalhöhe gewählt worden sind. Die GASFLOW-Ergebnisse sind auch hier mit diskreten Werten, die mit dem Modell von Reichardt abgeleiteten Profilen mit Linien gekennzeichnet.

Wie schon zuvor ist eine gute Übereinstimmung mit den theoretischen Profilen zu erkennen.

In der Nachrechnung, die Abb. 5.9.3 zeigt, ist zusätzlich zum Wärmeübergang noch der Einfluß der Kondensation auf das Wandprofil untersucht worden. Die Wandtemperatur beträgt 300K, das einströmende Medium ist diesmal eine Mischung aus 50 vol-% Dampf und 50 vol-% Luft bei einer Temperatur von 400K. Dadurch resultiert auch ein Systemdruck von 4,95 bar.

Oben in Abb. 5.9.3 zeigt eine Skizze den „virtuellen“ Versuchsaufbau. Da in diesem Fall auch Kondensation untersucht wird, werden nun 3 Profile (Geschwindigkeit, Temperatur und Konzentration) in der fiktiven Messebene berechnet. Diese sind in dimensionsloser Form in den beiden unter der Skizze abgebildeten Diagrammen a) und b) über dem logarithmischen Wandabstand aufgetragen. Das obere gibt eine Nachrechnung der Profile mit 9 Zellen, das untere Profile mit 39 Zellen über der Kanalhöhe wieder.

Ein Vergleich der beiden Diagramme zeigt deutlich die Abhängigkeit der mit GASFLOW berechneten Profile von der Nodalisation. Bei 9 Zellen (a) werden das Geschwindigkeits- und Temperaturprofil ausreichend gut wiedergegeben, das Konzentrationsprofil wird von GASFLOW überschätzt. Bei 39 Zellen (b) ist eine gute Übereinstimmung mit den theoretischen Profilen festzustellen, wobei das Konzentrationsprofil in Wandnähe überschätzt, weiter entfernt aber sehr gut reproduziert wird. Das Temperaturprofil zeigt eine durchweg gute Übereinstimmung, währenddessen das Geschwindigkeitsprofil bei dieser Auflösung leicht unterschätzt wird.

Zusammenfassend zeigt sich, dass GASFLOW die Geschwindigkeitsprofile bei turbulenten Strömungen mit Wärmeübergang gut wiedergibt. Bei zusätzlicher Kondensation sind kleine Abweichungen erkennbar, allerdings besteht auch hier noch

eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit den theoretisch abgeleiteten Profilen von Reichardt.

### **Referenzen**

[5.9] H. Reichardt, "Die Grundlagen des Turbulenten Wärmeüberganges", Arclt. Ges. Wärmetech., Vol. 2, pp.129-142, 1951.

## Verifikationsproblemstellung 5.10

**Problembeschreibung:**

Strahlungswärmeübertragung zwischen Wand und Gas

**Zweck:**

Verifikation der in GASFLOW implementierten sog. Momentennäherung für die Strahlungswärmeübertragung anhand analytischer Lösungen

**Validationskriterium:**

Übereinstimmung mit gemessenen Strahlungswärmeströmen und Wandtemperaturen.

**Numerik:**

**Fall 1:** 1D Strahlungsproblem (Abb. 5.10.1)

- Gitter: 2D, kartesisches Gitter in y-z Richtung: (1 x) 33 x 25 Zellen (4 x 8 x 100 cm)
- Randbedingungen: Haftbedingungen an den Kanalwänden

**Fall 2:** 2D Strahlungsproblem (Abb. 5.10.2)

**Fall 3:** 2D Strahlungsproblem (Abb. 5.10.3)

**Fall 4:** 3D Strahlungsproblem (Abb. 5.10.4)

**Ergebnisse und Schlussfolgerungen:**

Die GASFLOW Ergebnisse stimmen ausreichend gut mit analytischen Lösungen überein. Es ist eine Erhöhung der Rechenzeit um 40% gegenüber Rechnungen ohne Strahlungsmodell zu verzeichnen.

**Kommentar:**

Das Strahlungsmodell in GASFLOW, die sog. Momentennäherung, stellt einen Kompromiss zwischen Rechengenauigkeit und Rechenaufwand dar. Ein auf Sichtfaktoren basierendes, wellenlängenabhängiges Strahlungsmodell wäre sicherlich akkurater als die hier verwendete Momentennäherung, jedoch sind solche Modelle sehr rechenzeitintensiv und können aufgrund ihrer Struktur und Komplexität nicht mit dem Lösungsalgorithmus in GASFLOW gekoppelt werden.

Vereinfacht lässt sich die hier verwendete Momentennäherung wie folgt beschreiben: Aus der Strahlungs-Transport-Gleichung lassen sich Momentengleichungen für die Momente der Verteilungsfunktion (unter anderem für Energie und Impuls) ableiten. Man erhält einen Satz unendlich vieler, gekoppelter partieller Differentialgleichungen, welche die Strahlungs-Transport-Gleichung vollständig und eindeutig beschreiben. Die Näherung ergibt sich dadurch, dass eben nicht unendlich viele Differentialgleichungen gelöst werden können, sondern nur eine endliche Anzahl. In den meisten Fällen sind dies die drei Momentengleichungen für den Strahlungswärmestrom, die -intensität und den Strahlungsdruck. Es handelt sich dabei um Differentialgleichungen, die „Felder“ beschreiben, ähnlich dem Geschwindigkeitsfeld. Nach der Diskretisierung lassen sich

diese im Gegensatz zur Strahlungs-Transport-Gleichung sehr gut in das Matrizen-Lösungsschema von GASFLOW implementieren.

Wie die nachfolgenden Verifikationsrechnungen dokumentieren, ist in einigen Fällen eine Abweichung der Näherungslösung von analytischen Lösungen in der Größenordnung von ca. 20%; in den meisten Anwendungen aber eine von kleiner 5% zu erkennen! Gerade bei reaktortypischen Anwendungen sind die Abweichungen recht gering. Mit einer Erhöhung der Rechenzeit um bis zu 40% muss gerechnet werden.

Die folgende Abb. 5.10.1 zeigt eine eindimensionale Strahlungswärmeübertragung von einer heißen zu einer kalten Platte, zwischen denen sich ein Gas mit konstantem Absorptionskoeffizienten befindet. Die untere Platte ist auf  $T_h$  aufgeheizt, die obere hat die Temperatur  $T_c$ . Die absoluten Werte sind in diesem Beispiel nicht von Bedeutung, da der Strahlungswärmestrom normiert ist. In Abb. 5.10.1 ist nun dieser normierte Wärmestrom über der dimensionslosen optischen Dicke dargestellt. Sie ist der Quotient der mittleren freien Weglänge der Photonen und dem Abstand der Platten voneinander. Die mittlere freie Weglänge der Photonen ist wiederum ein Maß für die optische Dichte des Mediums zwischen den Platten.

In Abb. 5.10.1 sind zwei Kurven eingezeichnet, wobei die durchgezogene Linie die analytische Lösung der Strahlungs-Transport-Gleichung (in diesem eindimensionalen Fall analytisch ableitbar [5.10]) wiedergibt und die gestrichelte Kurve die exakte Lösung der Momentennäherung (die Differentialgleichung für den Strahlungswärmestrom ist in diesem Fall auch analytisch lösbar). Die Punkte zeigen die numerischen Ergebnisse von GASFLOW, die deckungsgleich mit den beiden Kurven sind.

Die darauf folgende Abb. 5.10.2 zeigt einen zweidimensionalen Testfall für eine Strahlungswärmeübertragung eines grauen Gases an diffusreflektierende Wände für drei verschiedene mittlere Photonenweglängen [5.11, 5.12]. Das Gas hat in diesem Beispiel eine Temperatur von 2000K, die Wände haben eine Anfangstemperatur von 0K. In Abb. 5.10.2 ist der normierte Wärmestrom  $q^*$  auf die untere Platte über der horizontalen dimensionslosen Länge  $x/L_x$  aufgetragen. Bei einem  $L/\lambda$ -Verhältnis von 10 überschätzt GASFLOW die Lösung der Strahlungstransportgleichung um ca. 20% (obere Kurve), bei einem Verhältnis von 1 (mittlere Kurve) oder 0,1 (untere Kurve) ist eine sehr gute Übereinstimmung zu erkennen.

Ein weiteres zweidimensionales Verifikationsbeispiel ist in Abb. 5.10.3 dargestellt. Im Gegensatz zu Abb. 5.10.2 ist hier die untere Wand auf 2000K aufgeheizt und die anderen wie zuvor drei Wände auf 0K gesetzt worden. Als Vergleichswert dient diesmal für eine mittlere freie Weglänge  $L/\lambda = 1$  die entdimensionierte Temperatur entlang Mittellinie senkrecht zur unteren heißen Wand (siehe auch die Skizze in Abb. 5.10.3). Die entdimensionierte Temperatur sinkt mit steigendem Abstand von der heißen Wand. Dies wird von der Lösung der Transportgleichung [5.13] und auch mit leichten Abweichungen von GASFLOW wiedergegeben.

Der letzte hier dargestellte Testfall ist dreidimensional mit reaktorrelevanten Abmessungen. Abb. 5.10.4 zeigt dabei den Strahlungswärmetransport in einer quasisphärischen Geometrie mit isothermen, diffus reflektierenden grauen Wänden. Das Rechengebiet besteht aus  $32^3$  quadratischen Zellen (ca. 33000), die eine Kantenlänge von 2m aufweisen. Dadurch wird ein Containment von 60m Seitenlänge aufgespannt, in dem sich eine Stahlhülle mit 52m Durchmesser befindet, die als feine

Linie in der rechten Grafik von Abb. 5.10.4 eingezeichnet ist. In das Containment, das mit Luft (1bar, 300K) gefüllt ist, strömt 1500K heißer Dampf mit 10m/s ein.

Die anschließende Abb. 5.10.5 zeigt den zeitlichen Verlauf der Durchschnittstemperatur und des -drucks im Containment einmal mit und einmal ohne Verwendung des Strahlungsmodells. Der mit Strahlungsmodell berechnete Druck liegt fast um den Faktor 2 niedriger, die Temperatur erreicht sogar nur noch 1/3 der Werte, die ohne Strahlungsmodell berechnet worden sind.

Zusammenfassend gilt, dass die GASFLOW Resultate mit ausreichender Genauigkeit mit den analytischen Lösungen übereinstimmen. Jedoch ist mit einer Erhöhung der Rechenzeit um bis zu 40% zu rechnen.

## Referenzen

[5.10] D.G. Deissler. Diffusion Approximation for Thermal Radiation in Gases with Jump Boundary Condition, J. Heat Transfer, 86C, 240-246, (1964).

[5.11] N. Shah. New Method of Computation of Radiation Heat Transfer in Combustion Chambers, Ph.D. dissertation, Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science and Technology, University of London, 1979.

[5.12] W.A. Fiveland. Discrete-Ordinates Solutions of the Radiative Transport Equation for Rectangular Enclosures, J. Heat Transfer, 106, 699-706, (1984).

[5.13] Crosbie, A.L. and Schrenker, R.G., "Radiation Transfer in a Two-Dimensional Rectangular Medium Exposed to Diffuse Radiation," J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 31, 339-372, (1984).

## Verifikationsproblemstellung 5.11

**Problembeschreibung:**

In der PASCO-Versuchsanlage werden freie Konvektionsströmungen untersucht. Luft steigt in einem Kanal hoch, von dem eine Wand beheizt wird und dessen andere Wände adiabatisch gehalten werden. Gemessen werden Wandtemperaturen und Wärmeströme.

**Zweck:**

Verifikation der GASFLOW-Modelle für Strömung und Transport sowie Strahlung.

**Validationskriterium:**

Übereinstimmung gemessener und berechneter Wärmeströme.

**Numerik:**

- Gitter: 3D, kartesisches Gitter: 1 x 33 x 25 Zellen (4 x 8 x 100 cm)
- Randbedingungen: Haftbedingungen an den Kanalwänden
  
- Codeversion: GASFLOW 2.1.0.13
- Hardware: Iketgf Linux
- Compiler: Edinburgh Portable FORTRAN 90 Compiler. Vers. 1.5.1.6, Opt=O3

**Ergebnisse und Schlussfolgerungen:**

Die GASFLOW Ergebnisse stimmen qualitativ mit den Experimenten überein.

**Kommentar:**

Die obere Teil von Abb. 5.11.1 zeigt eine Skizze der PASCO Versuchsanlage am FZK [5.14]. Luft strömt von unten in den senkrecht stehenden Rechteckkanal, der eine variable Querschnittsfläche von 0,5 x 0,5m bis 0,5 x 1m aufweist. Die beheizte Höhe sind 8m. Auf drei verschiedenen Ebenen befinden sich querverlaufende Messstationen, an denen Wärmeströme, Vertikalgeschwindigkeiten und Temperaturen erfaßt werden.

Im unteren Teil von Abb. 5.11.1 ist eine Tabelle mit vier Versuchen und den dazugehörigen Rechnungen von GASFLOW und des Codes FLUTAN dargestellt. Die dunkelgrau unterlegten Zeilen geben die von der beheizten Wand an das aufsteigenden Gas abgegebene Wärmemenge an. GASFLOW überschätzt die Wärmemengen um etwa 20%. Die FLUTAN-Ergebnisse sind scheinbar besser, jedoch entsprechen hier die zur Berechnung verwendeten Massenströme an Luft nicht denjenigen des Experimentes. Daher sind die „guten“ FLUTAN-Ergebnisse mehr als fragwürdig.

Die Abb. 5.11.2 gibt einen Vergleich des berechneten und gemessenen Temperatur- und Geschwindigkeitsprofils der Versuchs M040 über der Kanalbreite wieder. Tendenziell werden beide Profile gut wiedergegeben, jedoch überschätzt GASFLOW sowohl Temperatur als auch die Geschwindigkeit, was auf die Überschätzung des übertragenen Wärmestroms zurückgeführt werden kann. Eine dreidimensionale Temperaturdarstellung zeigt Abb. 5.11.3. Die niedrigste Temperatur ist mit knapp 320K

unten am Eintritt zu erkennen. Am Kanalaustritt hat sie sich über den gesamten Querschnitt um mindestens 10K erwärmt. Über der Kanalhöhe ist das Aufheizen und die Entwicklung eines Temperaturprofils gut zu erkennen. Die Gastemperatur am Ausgang der Teststrecke ist oberhalb des Kanals in Abb. 5.11.3 dargestellt. In den Ecken sind die lokal höchsten Temperaturen zu verzeichnen, was an der guten Isolation und am sehr geringen Gasaustausch mit dem Bulk liegt.

Zusammenfassend kann eine zufriedenstellende Übereinstimmung festgestellt werden.

## Referenzen

[5.14] Peter Royl, Validation of Radiation Model; GASFLOW workshop, KAERI, Korea, April 23-26, 2001, Lecture 10; [www.fzk.iiket.de/GASFLOW](http://www.fzk.iiket.de/GASFLOW)

## Verifikationsproblemstellung 5.12

### **Problembeschreibung:**

Der Intergraltest HDR T31.5, auch als Internationales Standardproblem ISP23 der OECD bekannt, simuliert einen sog. LOCA in einem Leichtwasserreaktor und die damit verbundene Freisetzung von Dampf und Helium (als Leichtgasersatz für Wasserstoff) in das HDR-Containment. Die HDR-Versuchsanlage in Kahlstein/Main (mittlerweile zurückgebaut) hat einen Durchmesser von 20m, eine Höhe von 60m und stellt mit über 11300m<sup>3</sup> eine realitätsnahe Abbildung eines Containments dar.

### **Zweck:**

Verifikation der Modelle für Strömung und Transport, Turbulenz, Wärmeleitung in Strukturen sowie Verdampfung und Kondensation.

### **Validationskriterium:**

Übereinstimmung der berechneten und gemessenen Leichtgasprofile, Temperaturen und Drücke an verschiedenen Stellen des Containments.

### **Numerik:**

- Gitter: 3D, Zylinderkoordinaten (11 x 24 x 40 = 4752 Zellen in r- $\phi$ -z)
- Modellierung der inneren Strukturen
  
- Codeversion: GASFLOW 2.1.0.13
- Hardware: Siemens Fujitsu VPP 5000

### **Ergebnisse und Schlussfolgerungen:**

Die GASFLOW Ergebnisse stimmen sehr gut mit den gemessenen Werten überein.

### **Kommentar:**

Im Intergraltest HDR T31.5 [5.15], auch als Internationales Standardproblem ISP23 der OECD bekannt, wird ein sog. LOCA in einem Leichtwasserreaktor und die damit verbundene Freisetzung von Dampf und Helium in das HDR-Containment simuliert. Die HDR-Versuchsanlage in Kahlstein/Main hat einen Durchmesser von 20m, eine Höhe von 60m und stellt mit über 11300m<sup>3</sup> eine sehr realitätsnahe Abbildung eines Containments dar. Allein das freie Volumen des Doms beträgt 5000 m<sup>3</sup>. Im Inneren des Containments befinden sich Räume und freie Volumina, durch welche die Gase in weiter Teile der Anlage strömen können. Einen Querschnitt des HDR-Containments ist im oberen Teil von Abb. 5.12.1 dargestellt. In Detailzeichnungen ist das sog. Blowdown-Rohr, durch das der Dampf ins Containment eintritt, und das sog. Gas-Injection-Rohr, durch welches das Helium hineingelangt eingezeichnet. Beide Rohre befinden sich etwa auf halber Höhe des Containments nahe an der Außenwand.

Unterhalb dieser Zeichnungen zeigen zwei Diagrammen die Versuchsrandbedingungen. Die obere Zeichnung ist dabei ein zeitlicher Ausschnitt von 1 min Dauer der Blowdown-Phase des LOCA-Unfalls. In dieser Zeit werden mehrere Tonnen Dampf und Wasser in das Containment eingetragen. Zu Beginn des Eintrags haben Dampf und Wasser eine Temperatur von ca. 240°C, am Ende etwa noch 130°C.

Die untere Grafik zeigt die Quellstärke von Dampf und Leichtgas, letzteres bestehend aus 85 vol-% He und 15% H<sub>2</sub>, über die gesamte Versuchsdauer von 60 min. Der linke Balken gibt die um Größenordnungen höheren Einspeiseraten zu Beginn der Blow-down wieder.

Nach etwa 20min Versuchszeit wird zunächst 1900 kg Dampf mit einem Dampfgehalt von  $x=0,5$  in das Containment eingespeist. Die Rate liegt etwas über 2kg/s bei einer Temperatur von 143°C. Nach ca. 36 min wird anstelle des Dampfes insgesamt 168 kg Leichtgas mit einer anfänglichen Rate von ca. 0,4 kg/s zugeführt, die dann auf etwa 0,2 kg/s im Laufe der 14 min Einspeisezeit absinkt. Nach Ende der Gaszufuhr werden noch ca. 10 min lang Temperaturen, Konzentrationen und Geschwindigkeiten gemessen, um die Verteilung des Leichtgases in der Luft-Dampf-Atmosphäre zu erfassen.

Die HDR Geometrie ist in ein Modell für GASFLOW umgesetzt worden, das in Abb. 5.12.2 dargestellt ist. Wie der Querschnitt und die daneben angeordneten Längsschnitte zeigen, sind manche Abrundungen in Kanten umgewandelt worden, um numerische Probleme zu vermeiden. Im Prinzip wird die Geometrie, insbesondere die freien Volumina und die Öffnungen sehr gut vom numerischen Gitter wiedergegeben.

Die Abb. 5.12.3 zeigt einen Vergleich gemessener und berechneter Daten für den HDR-Versuch T31.5. Auf der linken Seite sind Temperatur- und Druckverlauf dargestellt, auf der rechten Seite befinden sich drei Diagramme, welche die Leichtgaskonzentration auf verschiedenen Ebenen zeigen.

Das obere linke Bild zeigt die Messwerte des Druckaufnehmers CP7407. Der Druckverlauf wird während des gesamten Versuchs gut durch die GASFLOW-Rechnung wiedergegeben. Eine nicht so gute, aber immer noch zufriedenstellende Nachbildung des Temperaturverlaufs zeigen die beiden Grafiken darunter, in denen die Daten der Thermoelemente CT0403 und CT7403 aufgetragen sind. Die Temperaturen des an der höchsten Stelle des Doms angebrachte Thermoelementes werden zu Beginn leicht unterschätzt, gegen Ende des Versuchs leicht überschätzt. Größere Abweichungen sind beim Thermoelement im Bruchraum in der Nähe der Quelle zu erkennen. Dies liegt an der recht groben Gitterauflösung in der Nähe der Quelle. Hier verteilt GASFLOW den heißen Dampf diffusiv, währenddessen beim Versuch eine mehr gerichtete Ausströmung vorgelegen haben wird.

Auf der rechten Seite von Abb. 5.12.3 sind drei Diagramme gegeben, welche die Leichtgaskonzentration im Dom bei 49m Höhe, bei der Wendeltreppe in 26,5m Höhe und am unteren Ende der Wendeltreppe bei 12m zeigen. Bis auf den Raum in der Nähe der Einspeisung, in dem die Leichtgaseinspeisung gegen Ende der Einspeisung um ca. 15% überschätzt wird, reproduziert GASFLOW die Konzentrationsverläufe mit zufriedenstellender Genauigkeit.

Zusammenfassend zeigt sich hier, dass GASFLOW sehr gut die Verteilung und Strömung in großen Geometrien simulieren kann.

## Referenzen

[5.15] G. Katzenmeier (Hrsg.): HDR-Sicherheitsprogramm: 14. Statusbericht des Projektes HDR-Sicherheitsprogramm des Kernforschungszentrums Karlsruhe, 12. Dez. 1990. Arbeitsbericht 05.48/90.

## Verifikationsproblemstellung 5.13

### **Problembeschreibung:**

Der Intergraltest HDR E11.2 ist ein weiterer Integralversuch in der Anlage Kahlstein/Main zur Untersuchung der Verteilung von Dampf und Leichtgasen in einem Reaktorcontainment (SB-LOCA-Unfall in einem Leichtwasserreaktor). Der Versuch findet im selben Gebäude wie HDR T31.5 statt, nur dass in diesem Fall eine hochliegende Quelle vorliegt, wodurch sich eine Anreicherung des Leichtgases im Dom entwickelt.

### **Zweck:**

Verifikation der Modelle für Strömung und Transport, Turbulenz, Wärmeleitung in Strukturen sowie Verdampfung und Kondensation.

### **Validationskriterium:**

Übereinstimmung der berechneten und gemessenen Leichtgasprofile, Temperaturen und Drücke an verschiedenen Stellen des Containments.

### **Numerik:**

- Gitter: 3D, Zylinderkoordinaten (11 x 24 x 40 = 10560 Zellen in r- $\phi$ -z)
- Modellierung der Wärmeleitung in inneren Strukturen
  
- Codeversion: GASFLOW 2.1.0.13
- Hardware: Siemens Fujitsu VPP 5000

### **Ergebnisse und Schlussfolgerungen:**

Die GASFLOW Resultate stimmen sehr gut mit den Versuchsdaten überein. Insbesondere hat der Versuch gezeigt, dass Lumped-Parameter Codes die Experimente nur unzureichend wiedergeben können.

### **Kommentar:**

In derselben Versuchsanlage wie zuvor beschrieben ist das Experiment HDR E11.2 durchgeführt worden, wobei hier eine sog. hochliegende Einspeisung von Dampf und Leichtgas realisiert worden ist (SB-LOCA in einem Leichtwasserreaktor) [5.16]. Im Gegensatz zu T31.5 bewirkt eine hochliegende Einspeisung, dass sich die Leichtgase im Dom und den oben liegenden Bereichen der Versuchsanlage anreichern und eine Stratifikation ausbilden. Begünstigt wird dies zusätzlich durch das Versprühen von Wasser auf die Außenfläche des Doms. Durch diese Außenkühlung kondensiert der Dampf auf der Innenseite, was die Anreicherung von Leichtgas dort noch begünstigt.

Die HDR E11.2 Geometrie ist in Abb. 5.13.1 dargestellt. Sie zeigt auf der linken Seite einen Schnitt durch die HDR-Versuchsanlage mit der Kennzeichnung der Positionen von Thermoelementen, Druckaufnehmern, Einspeiseöffnungen von Dampf, Leichtgas etc. Die rechte Seite zeigt ist das zugehörige GASFLOW-Modell. Die Pfeile darin kennzeichnen die Flächen, die mit dem Sprühsystem gekühlt werden.

Die Quellen sind in Abb. 5.13.2 aufgetragen. Dampf strömt bis etwa 40000s nach Beginn des Experiments in das Containment. Anschließend wird Leichtgas (wiederum 85% He und 15% H<sub>2</sub>) und Dampf durch die obere Einspeisestelle zugeführt, was etwas mehr als 1 Std. beansprucht. Nach Beendigung dieser Einspeisung strömt Dampf durch die 2. Zugangsstelle in das Gebäude, was ca. 3 Std. dauert. Die letzte Phase dieses Versuchs kennzeichnet das Abkühlen des oberen Bereiches des Doms durch Sprühwasser, was noch mal 4 Std. in Anspruch nimmt. Das Experiment endet nach ca. 20 Std.

Unter der Grafik, in der die Quellen gegeben sind, ist der gemessene und der mit GASFLOW berechnete Druckverlauf im Containment dargestellt. Die Nachrechnung zeigt eine gute Übereinstimmung. Ab ca. 60.000s sind größere Abweichungen von den experimentellen Daten zu erkennen.

Weitere Ergebnisse der Nachrechnung sind in Abb. 5.13.3 abgebildet. In einem Zeitfenster von 4000 bis 8000s sind gemessene und berechnete Leichtgas-Konzentrationen aufgetragen. Neben dem CFD-Code GASFLOW sind auch hier Nachrechnungen der Lumped-Parameter-Codes WAVCO, RALOC, GOTHIC, CONTAIN und MELCOR eingezeichnet. Keiner der Lumped-Parameter-Codes ist in der Lage, die Stratifikation bzw. die Anreicherung des Leichtgases im oberen Bereich des Containments abzubilden. Allein GASFLOW zeigt das physikalisch richtige Verhalten, wenn auch Abweichungen von den absoluten Werten zu erkennen sind.

Die gleiche Tendenz zeigt sich in einem Bodenraum. Hier berechnen die Lumped-Parameter-Codes eine Leichtgaskonzentration, die beim Versuch gar nicht vorhanden war. Nur GASFLOW kann die geringe Konzentration wiedergeben, wobei hier eine sehr gute Übereinstimmung mit den Messdaten festzustellen ist.

Dieser Vergleich zeigt deutlich die Nachteile von Lumped-Parameter Codes gegenüber CFD-Codes: Die zu grobe Nodalisierung und das Fehlen der Impulstransportgleichung läßt das Leichtgas in die Anlagenräume diffundieren. Eine Anreicherung, wie die GASFLOW als CFD-Code richtig vorhersagt, ist nur künstlich durch geeignete Wahl der Stratifikations-ebenen zu erreichen. Damit ist die Vorhersagemöglichkeit von Lumped-Parameter-Codes erheblich eingeschränkt. Bei GASFLOW bestehen Abweichungen in den absoluten Werten, alle Tendenzen werden aber richtig simuliert.

## Referenzen

- [5.16] P. Royl, G. Necker, J. R. Travis: GASFLOW Simulation of Hydrogen Recombination with Radiation Transport from Catalytic Foils in the Recombiner Foil Test HDR E11.8.1, Procs Jahrestagung Kerntechnik, Dresden, May 15-17, 2001, Germany (available as #7.pdf)

## Verifikationsproblemstellung 5.14

**Problembeschreibung:**

Die ThAI-Versuche (Thermal Hydraulics, Aerosols, Iodine) dienen zur Verifikation von Modellen zur Thermohydraulik und Spaltproduktverhalten im Containment. Dampf wird dabei in das Modellcontainment eingespeist und dessen Verteilung, Geschwindigkeiten und die aktuellen Temperaturen an verschiedenen Stellen gemessen.

**Zweck:**

Verifikation der Modelle für Strömung und Transport, Turbulenz, den Sumpf sowie Verdampfung und Kondensation.

**Validationskriterium:**

Übereinstimmung des Geschwindigkeitsfeldes, vom Dampfgehalt und Temperaturmeßdaten.

**Numerik:**

- Gitter: 3D, 45°-Segmentausschnitt in Zylinderkoordinaten (25 x 6 x 71 = 10650 Zellen in r-φ-z)
- Codeversion: GASFLOW 2.1.0.13
- Hardware: Sun Ultra 2 / 200, Sun OS 5.5.1
- Compiler: Edinburgh Portable FORTRAN 90 Compiler. Vers. 1.5.1.6, Opt=O3
- Rechenzeit: ca. 1 Woche

**Ergebnisse und Schlussfolgerungen:**

Die GASFLOW Ergebnisse stimmen ausgezeichnet mit den Experimenten überein.

**Kommentar:**

Die ThAI-Versuche (Thermal Hydraulics, Aerosols, Iodine) von Becker-Technology dienen zur Verifikation von Modellen zur Thermohydraulik und Spaltproduktverhalten im Containment [5.17]. Dampf wird dabei in das 60m<sup>3</sup> große Modellcontainment eingespeist, das mit Luft bei Umgebungsbedingungen (1 bar, 25°C) gefüllt ist, und dessen Verteilung, Geschwindigkeiten und die aktuellen Temperaturen an verschiedenen Stellen gemessen.

Die Versuchsanlage besteht aus einem 9,2m hohen zylindrischen Behälter mit einem Durchmesser von 3,2m, an dessen Innenwänden Kühler angebracht sind. Innerhalb dieses Behälters ist ein Innenzylinder installiert, an dem vier Kondensatpfannen befestigt sind. Jede diese Pfannen versperren einen 30° Ausschnitt eines 45°-Sements (siehe die linke Grafik in Abb. 5.14.1). Am Boden des Behälters ist ein mit Wasser gefüllter Sumpf.

Der Versuch TH1 ist mit GASFLOW nachgerechnet worden. Die mittlere beiden Grafiken von Abb. 5.14.1 zeigen einen Quer- und einen Längsschnitt durch das in GASFLOW umgesetzte Gitter. Rechts ist eine 3D-Ansicht des numerischen Gitters dargestellt. Es zeigt sich, dass die ThAI-Anlage eine 45° Symmetrie besitzt, so dass nur dieses Segment modelliert werden muß.

Die Abb. 5.14.2 zeigen drei 2D-Vertikalschnitte der ThAI-Anlage, worin mit GASFLOW berechnete Daten eingezeichnet sind. Links ist das Temperaturfeld, in der Mitte die vertikale Geschwindigkeitskomponente und rechts der Dampfgehalt für den Versuch TH1 eingezeichnet. Die Dampfeinspeisung befindet sich am Boden des Behälters, so dass sich eine Aufwärtsströmung im Innenzylinder einstellt. Die Strömung wird am Deckel umgelenkt und entlang der Kühler nach unten geführt. Im Temperaturfeld und bei den vertikalen Geschwindigkeiten ist die Position der Kondensatpfannen deutlich erkennbar. Sie lenken die Strömung um und beeinflussen so Temperatur und Vertikalgeschwindigkeit. Der Dampfgehalt scheint davon relativ unbeeinflusst.

Die Abb. 5.14.3 zeigt 3D-Strömungsfelder und Wandtemperaturen bei 2000s (links) und bei 9000s (rechts) innerhalb der ThAI-Versuchsanlage. Zu einem frühen Zeitpunkt sind hohe Temperaturen (ca. 420K) am Deckel zu bemerken und niedrige (ca. 300K) am Boden, wo sich der Sumpf befindet. Das Wasser in der Kondensatpfanne hat 303K. Die Strömung bei 2000s ist in einem „Kern“ aufwärts gerichtet, wird dann am Deckel umgelenkt und strömt einerseits im Innenzylinder, andererseits nahe der gekühlten Behälterwand abwärts.

Die Behälterwandtemperaturen bei  $t=9000s$  sind in der rechten Grafik dargestellt. Die höchste Temperatur wird am Deckel bestimmt, die niedrigste am Behälterboden unterhalb einer Kondensatpfanne. Diese wirkt als Strömungshindernis für den abwärtsströmenden Dampf und unter ihr werden relativ niedrige Temperaturen gemessen, was auf die fehlende Kondensationswärme zurückgeführt werden kann.

Zusammenfassend zeigt die Nachrechnung des TH1-Versuchs eine sehr gute Übereinstimmung mit den gemessenen Werten.

## Referenzen

[5.17] T. Kanzleiter: ThAI Experiment TH2 on Formation and Dissolution of a Stratified Containment Atmosphere, Jahrestagung Kerntechnik, Stuttgart, 14.-16. Mai 2002.

## Verifikationsproblemstellung 5.15

**Problembeschreibung:**

In der französischen PHEBUS Anlage werden Thermohydraulik-Tests durchgeführt. Im Versuch FPT0 wird dabei die Kondensation von Dampf in einer Inertgasatmosphäre untersucht.

**Zweck:**

Verifikation der Modelle für Strömung und Transport, Turbulenz, Wärmeleitung in Strukturen sowie Verdampfung und Kondensation.

**Validationskriterium:**

Übereinstimmung des Druckverlaufs im Containment über der Zeit.

**Numerik:**

- Gitter: 3D, Segmentausschnitt in Zylinderkoordinaten ( $11 \times 5 \times 11 = 605$  Zellen in  $r-\phi-z$ )
- Codeversion: GASFLOW 2.1.0.13
- Hardware: Sun Ultra 2 / 200, Sun OS 5.5.1
- Compiler: Edinburgh Portable FORTRAN 90 Compiler. Vers. 1.5.1.6, Opt=O3

**Ergebnisse und Schlussfolgerungen:**

Die GASFLOW Ergebnisse stimmen tendenziell mit den experimentellen Daten überein.

**Kommentar:**

In der französischen PHEBUS Anlage werden in der Regel Thermohydraulik-Experimente zum Transport von Spaltprodukten durchgeführt. Die Versuchsanlage besteht aus einem sog. Drive-Core, einem Rohrabschnitt, der eine typische Dampferzeugergeometrie darstellen soll und einem Behälter, der das Containment repräsentiert. Im Versuch FPT0 kommt allerdings nur das Containment zum Einsatz [5.18].

In der Abb. 5.15.1 ist die Containmentgeometrie schematisch dargestellt. Im Zentrum wird Dampf und Wasserstoff vertikal eingespeist. Auf etwa halber Höhe hängt ein Plattenkondensator von der Decke, der im oberen Teil mit 353K mit Kondensat benetzt ist und dessen unterer Teil wegen der 392K heißen Wand trocken ist. Auf der linken Seite von Abb. 5.15.1 ist das gemessene Geschwindigkeitsfeld dargestellt, auf der rechten Seite das mit GASFLOW berechnete. Bis auf den zentralen Node gibt es eine gute Übereinstimmung. In diesem Node berechnet GASFLOW eine aufwärtsgerichtete Geschwindigkeit, im Experiment ist eine abwärts gerichtete gemessen worden. Dieser Unterschied kann mit der Wahl der Nodalisierung begründet werden. Die zentrale Zelle beinhaltet den aufwärtsströmenden Jet und der Impuls der Quelle wird nicht genügend dissipiert, so dass im zentralen Node eine Aufwärtsströmung erhalten bleibt.

Trotz dieser Diskrepanz kann der Druckverlauf im Containment von GASFLOW gut simuliert werden. In Abb. 5.15.2 sind leichte Abweichungen zu Beginn der Wasserstoffeinspeisung zu erkennen. Wie Abb. 5.15.2. weiterhin zeigt, liefert in diesem

speziellen Fall das Verwenden des  $k\text{-}\epsilon$ -Turbulenzmodells nicht so gute Ergebnisse im Druckverlauf wie eine Rechnung ohne Turbulenz, d.h. auch ohne Haftbedingung an der Wand. Es sollte an dieser Stelle darauf hingewiesen werden, dass das Geschwindigkeitsfeld ja nicht gut reproduziert wird, weshalb die vorherige Aussage über die Benutzung des Turbulenzmodells nicht allgemeingültig ist.

Zusammenfassend zeigt sich bei der Nachrechnung dieses Beispiels, dass es selbst für einen auf vielen Gebieten verifizierten Code Problemstellungen gibt, die zu einer fehlerhaften Beschreibung der Verhältnisse führen. Solche Fragestellungen sind Gegenstände aktueller Untersuchungen und Rechnungen mit GASFLOW.

## Referenzen

- [5.18] P. Royl, C. Müller, J. R. Travis, T. Wilson, "Validation of GASFLOW for Analysis of Steam/Hydrogen Transport and Combustion Processes in Nuclear Reactor Containments," Procs 13th Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology, August 13-18, 1995 Porto Alegre, RS, Brazil HDR T31.5, FPT0

- Allgemeine Erhaltungsgleichung

$$\frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}t} \int_V \Phi dV = \oint_S \Phi(\mathbf{b} - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{A} dS + \int_V S_\Phi dV$$

- Volumenerhaltung

$$\frac{\mathcal{I}V}{\mathcal{I}t} = \oint_S \mathbf{b} \cdot \mathbf{A} dS$$

- Massenerhaltung

Gesamtmischung

$$\frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}t} \int_V \mathbf{r} dV = \oint_S \mathbf{r}(\mathbf{b} - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{A} dS + \int_V S_r dV$$

Spezienerhaltung

$$\frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}t} \int_V \mathbf{r}_a dV = \oint_S \mathbf{r}_a(\mathbf{b} - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{A} dS - \oint_S (\mathbf{J}_a \cdot \mathbf{A}) dS + \int_V S_r dV$$

$$\mathbf{J}_a \cdot \mathbf{A} = \begin{Bmatrix} -A_x \left[ cM_a D_a \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}x} \left( \frac{c_a}{c} \right) - \left( \frac{c\mathbf{r}_a}{\mathbf{r}} \right)_b \sum_b M_b D_b \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}x} \left( \frac{c_b}{c} \right) \right] \\ -A_y \left[ cM_a D_a \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}y} \left( \frac{c_a}{c} \right) - \left( \frac{c\mathbf{r}_a}{\mathbf{r}} \right)_b \sum_b M_b D_b \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}y} \left( \frac{c_b}{c} \right) \right] \\ -A_z \left[ cM_a D_a \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}z} \left( \frac{c_a}{c} \right) - \left( \frac{c\mathbf{r}_a}{\mathbf{r}} \right)_b \sum_b M_b D_b \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}z} \left( \frac{c_b}{c} \right) \right] \end{Bmatrix}$$

Abb.5.1.1: GASFLOW Modellgleichung (1)

- Impulserhaltung

$$\frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}t} \int_V \mathbf{r} \mathbf{u} dV = \oint_S \mathbf{r} \mathbf{u} (\mathbf{b} - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{A} dS - \oint_S p dS + \int_V \mathbf{r} \mathbf{g} dV$$

$$- \oint_S (\mathbf{t} \cdot \mathbf{A}) dS + \oint_S (\mathbf{D}_d \cdot \mathbf{A}) dS + \int_V S_M dV$$

$$\mathbf{D}_d \cdot \mathbf{A} = \left\{ \begin{array}{l} \left[ -\frac{A_x}{2} [C_{fx}|u| + C_x](ru) \right] \\ \left[ -\frac{A_y}{2} [C_{fy}|v| + C_y](rv) \right] \\ \left[ -\frac{A_z}{2} [C_{fz}|w| + C_z](rw) \right] \end{array} \right\}$$

- Energieerhaltung

$$\frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}t} \int_V \mathbf{r} I dV = \oint_S \mathbf{r} I (\mathbf{b} - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{A} dS - \oint_S p (\mathbf{u} \cdot \mathbf{A}) dS$$

$$- \int_V \left[ \frac{p}{V} \frac{\mathcal{I}V_{h_2o}}{\mathcal{I}t} \right] dV - \oint_S (\mathbf{q} \cdot \mathbf{A}) dS + \int_V S_I dV$$

$$\frac{p}{V} \frac{\mathcal{I}V_{h_2o}}{\mathcal{I}t} = -R_{h_2o} T S_{r, h_2o}$$

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{A} = \left\{ \begin{array}{l} \left[ -A_x \left[ \mathbf{f}_x \frac{\mathcal{I}T}{\mathcal{I}x} - \sum_a h_a J_{x,a} \right] \right] \\ \left[ -A_y \left[ \mathbf{f}_y \frac{\mathcal{I}T}{\mathcal{I}y} - \sum_a h_a J_{y,a} \right] \right] \\ \left[ -A_z \left[ \mathbf{f}_z \frac{\mathcal{I}T}{\mathcal{I}z} - \sum_a h_a J_{z,a} \right] \right] \end{array} \right\}$$

Abb.5.1.2: GASFLOW Modellgleichung (2)

- $k - \epsilon$  Turbulenzmodell

turbulente kinetische Energie

$$\frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}t} \int_V \mathbf{r} k dV = \oint_S \mathbf{r} k (\mathbf{b} - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{A} dS - \oint_S (\mathbf{K} \cdot \mathbf{A}) dS + \int_V H_k dV$$

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{A} = \left\{ \begin{array}{l} -A_x \left[ \left( \mathbf{m}' + \frac{\mathbf{m}'}{\text{Pr}_k} \right)_x \frac{\mathcal{I}k}{\mathcal{I}x} \right] \\ -A_y \left[ \left( \mathbf{m}' + \frac{\mathbf{m}'}{\text{Pr}_k} \right)_y \frac{\mathcal{I}k}{\mathcal{I}y} \right] \\ -A_z \left[ \left( \mathbf{m}' + \frac{\mathbf{m}'}{\text{Pr}_k} \right)_z \frac{\mathcal{I}k}{\mathcal{I}z} \right] \end{array} \right\}$$

Dissipationsrate der turb. kin. Energie

$$\frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}t} \int_V \mathbf{r} \epsilon dV = \oint_S \mathbf{r} \epsilon (\mathbf{b} - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{A} dS - \oint_S (\mathbf{E} \cdot \mathbf{A}) dS + \int_V H_\epsilon dV$$

$$\mathbf{E} \cdot \mathbf{A} = \left\{ \begin{array}{l} -A_x \left[ \left( \mathbf{m}' + \frac{\mathbf{m}'}{\text{Pr}_k} \right)_x \frac{\mathcal{I}\epsilon}{\mathcal{I}x} \right] \\ -A_y \left[ \left( \mathbf{m}' + \frac{\mathbf{m}'}{\text{Pr}_k} \right)_y \frac{\mathcal{I}\epsilon}{\mathcal{I}y} \right] \\ -A_z \left[ \left( \mathbf{m}' + \frac{\mathbf{m}'}{\text{Pr}_k} \right)_z \frac{\mathcal{I}\epsilon}{\mathcal{I}z} \right] \end{array} \right\}$$

Abb.5.1.3: GASFLOW Modellgleichung (3)

- $k - \epsilon$  Turbulenzmodell

Terme für Produktion und Senken

$$H_k = P + G - \frac{2}{3} (\mathbf{r}k) \nabla \cdot \mathbf{u} - \mathbf{r}\epsilon$$

$$H_\epsilon = C_{e_1} \frac{\epsilon}{k} (P + G) - C_{e_3} (\mathbf{r}\epsilon) \nabla \cdot \mathbf{u} - C_{e_2} \frac{\epsilon}{k} \mathbf{r}\epsilon$$

$$P = \frac{\mathbf{m}'}{2} \sum_i \sum_j \left[ \left( \frac{\mathcal{I}u_i}{\mathcal{I}x_j} + \frac{\mathcal{I}u_j}{\mathcal{I}x_i} \right) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{d}_{ij} \right]^2$$

$$G = \mathbf{a} \mathbf{m}' \mathbf{g} \cdot \nabla T$$

$$\mathbf{m}' = \mathbf{r} C_m \frac{k^2}{\epsilon}$$

Turbulenzkonstante

$$C_m = 0.09, \text{Pr}_k = 1.0, \text{Pr}_\epsilon = 1.4245,$$

$$C_{e_1} = 1.44, C_{e_2} = 11/6, C_{e_3} = 1.96$$

Abb.5.1.4: GASFLOW Modellgleichung (4)

- Zustandsgleichung

$$p = \frac{T \sum_{a \neq \text{H}_2\text{O liquid}} R_a x_a}{1 - q}$$

$$q = 1 - \frac{r_{\text{H}_2\text{O liquid}}^{\text{thermo}}}{r_{\text{H}_2\text{O liquid}}}$$

- Thermophysikalische Eigenschaften der Gase

$$I_a = I_{\text{reference},a} + \int_{T_{\text{reference},a}}^T C_{v,a} dT$$

Wärmekapazität einer Gaskomponente (JANAF Tabellen)

$$C_{v,a}(T) = a_{1,a} + a_{2,a}T + a_{3,a}T^2 + a_{4,a}T^3$$

Innere Energie einer Gaskomponente

$$I_a(T) = a_{0,a} + a_{1,a}T + a_{2,a}T^2 + a_{3,a}T^3 + a_{4,a}T^4$$

Innere Energie der Gasmischung

$$I(T) = \sum_a x_a a_{0,a} + T \left\{ \sum_a x_a a_{1,a} + T \left[ \sum_a x_a a_{2,a} + T \left( \sum_a x_a a_{3,a} + T \sum_a x_a a_{4,a} \right) \right] \right\}$$

Abb.5.1.5: GASFLOW Modellgleichung (5)

- Molekulare Transporteigenschaften von Gasen

CHEMKIN Bibliothek (Wärmeleitfähigkeit, Dynamische Viskosität und Diffusionskoeffizient)

$$\ln(\Omega) = a + b \ln(T) + b \ln(T)^2 + b \ln(T)^3 + b \ln(T)^4$$

Wärmeleitfähigkeit der Mischung ( $f$ )

$$f = \frac{1}{2} \left( \sum_{a=1}^N Y_a f_a + \frac{1}{\sum_{a=1}^N Y_a / f_a} \right)$$

Dynamische Viskosität der Mischung ( $m$ )

$$m = \sum_{a=1}^N \left( \frac{Y_a m_a}{\sum_{b=1}^N Y_a \Psi_{ab}} \right)$$

$$\Psi_{ab} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left( 1 + \frac{M_a}{M_b} \right)^{-\frac{1}{2}} \left[ 1 + \left( \frac{m_a}{m_b} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{M_b}{M_a} \right)^{\frac{1}{4}} \right]^2$$

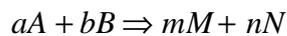
Diffusionskoeffizient der Komponente  $a$  in der Gasmischung ( $D_{a \rightarrow \text{mixture}}$ )

$$D_{a \rightarrow \text{mixture}} = \frac{\sum_{b \neq a} Y_b}{\sum_{b \neq a} Y_b / D_{a \rightarrow b}}$$

Abb.5.1.6: GASFLOW Modellgleichung (6)

- Einschritt-Verbrennungsmodell

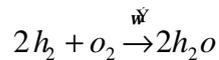
Reaktionsgleichung



Reaktionsrate

$$-\frac{1}{a} \frac{dc_A}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{dc_B}{dt} = +\frac{1}{m} \frac{dc_M}{dt} = +\frac{1}{n} \frac{dc_N}{dt} = \dot{w}$$

H<sub>2</sub> / O<sub>2</sub> Reaktion



$$-\frac{1}{2} \frac{dc_{h_2}}{dt} = -\frac{dc_{o_2}}{dt} = +\frac{1}{2} \frac{dc_{h_2o}}{dt} = \dot{w}$$

$$\dot{w} = k_f(T) c_{h_2} c_{o_2}$$

$$k_f(T) = C_f \cdot T^n \cdot e^{-\frac{E}{RT}}$$

Verbrennungswärme

$$\int_V S_{I,combustion} dV = V \cdot C_c \cdot \dot{w}$$

Modellparameter

$$n = 0, C_f = 5 \cdot 10^{12} \text{ [cm}^3 \text{ / mole - s]}$$

$$E = 7.8 \cdot 10^{11} \text{ [ergs / mole]}, C_c = 4.778 \cdot 10^{12} \text{ [ergs / mole]}$$

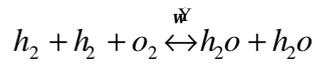
Analytische Lösung

$$\frac{1}{c_{h_2}(0) - 2c_{o_2}(0)} \ln \left[ \frac{c_{o_2}(0) c_{h_2}(t)}{c_{h_2}(0) c_{o_2}(t)} \right] = k_f(T) \cdot t$$

Abb.5.1.7: GASFLOW Modellgleichung (7)

- Gleichgewichtskonstanten

H<sub>2</sub> / O<sub>2</sub>



$$-\frac{1}{2} \frac{dc_{h_2}}{dt} = -\frac{dc_{o_2}}{dt} = +\frac{1}{2} \frac{dc_{h_2o}}{dt} = \dot{w}$$

$$\dot{w} = k_f(T)c_{h_2}^2 c_{o_2} - k_b(T)c_{h_2o}^2$$

$$k_f(T) = C_f \cdot T^f \cdot e^{-\frac{E_f}{RT}} \quad \text{and} \quad k_b(T) = C_b \cdot T^b \cdot e^{-\frac{E_b}{RT}}$$

Modellparameter

Reaktions- rate	C	E/R	τn
Hin, $k_f$	5.0000x10 <sup>17</sup>	9.37514x10 <sup>3</sup>	n=0
Zurück, $k_b$	6.2132x10 <sup>21</sup>	6.96287x10 <sup>4</sup>	n=-1

Abb.5.1.8: GASFLOW Modellgleichung (8)

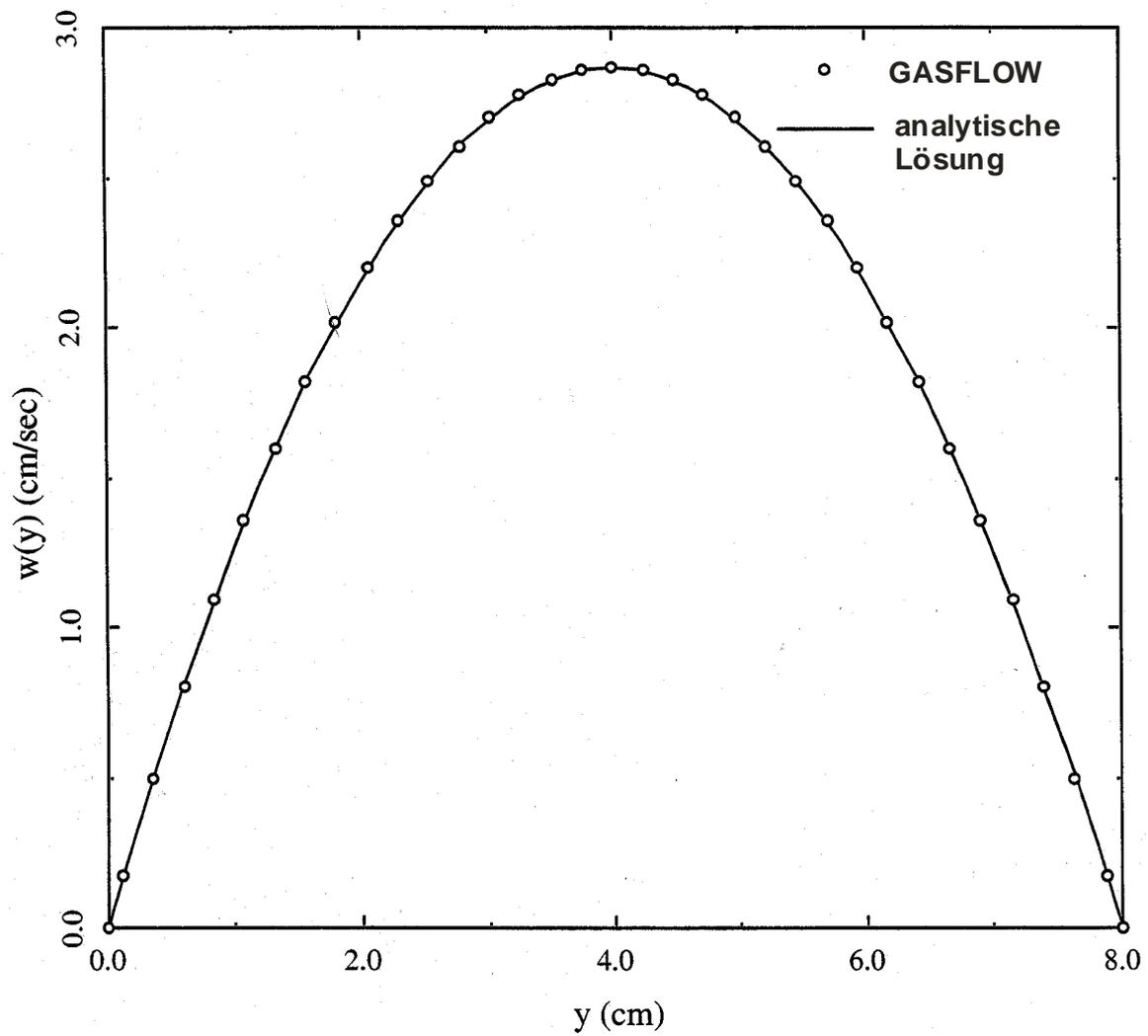
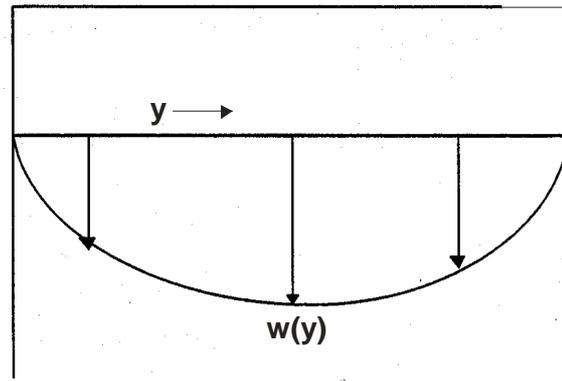


Abb.5.2: Stationäre Strömung zwischen parallelen Platten  
 a) Skizze des Geschwindigkeitsprofils  $w(y)$   
 b) Vergleich der numerischen GASFLOW- Lösung mit analytischer Lösung

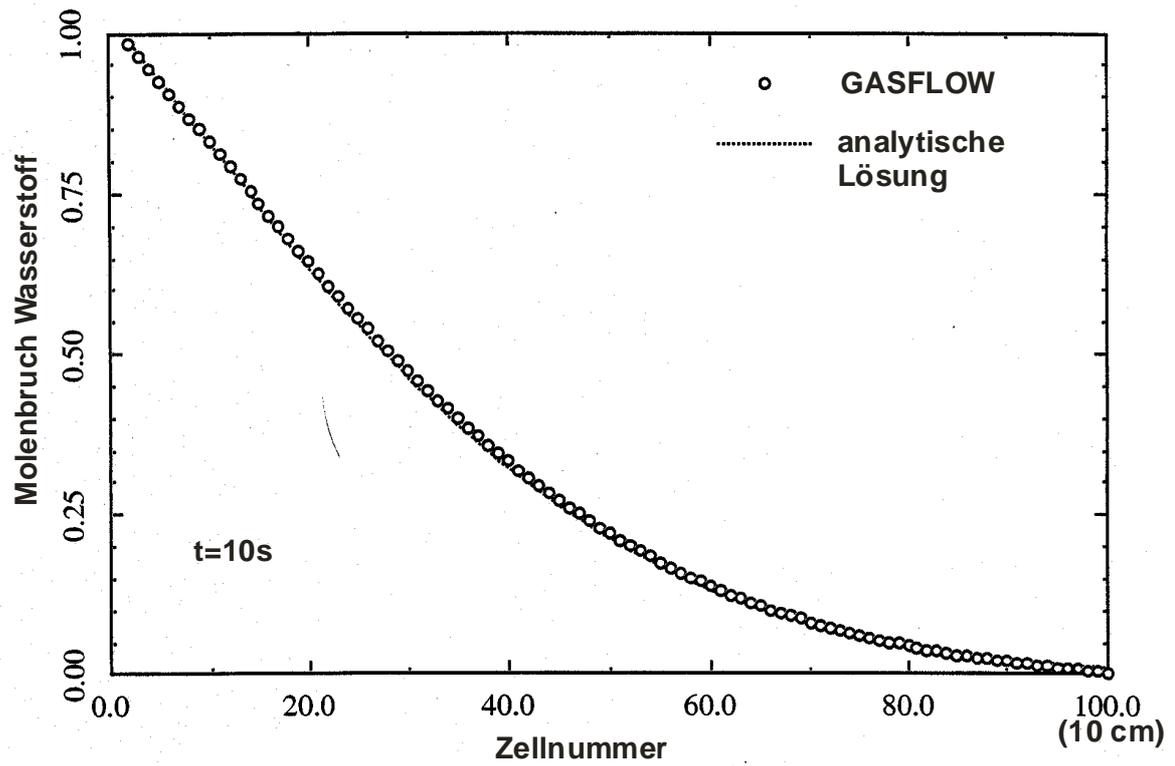


Abb.5.3: Diffusion von Wasserstoff in Luft. Validierung der Diffusionsgleichung an ein-dimensionalen Problem mit bekannter analytischer Lösung. Anfangs- und Randbedingungen: 100% H<sub>2</sub> am linken Rand, sonst Luft bei t = 0. Zellbreite 1mm.

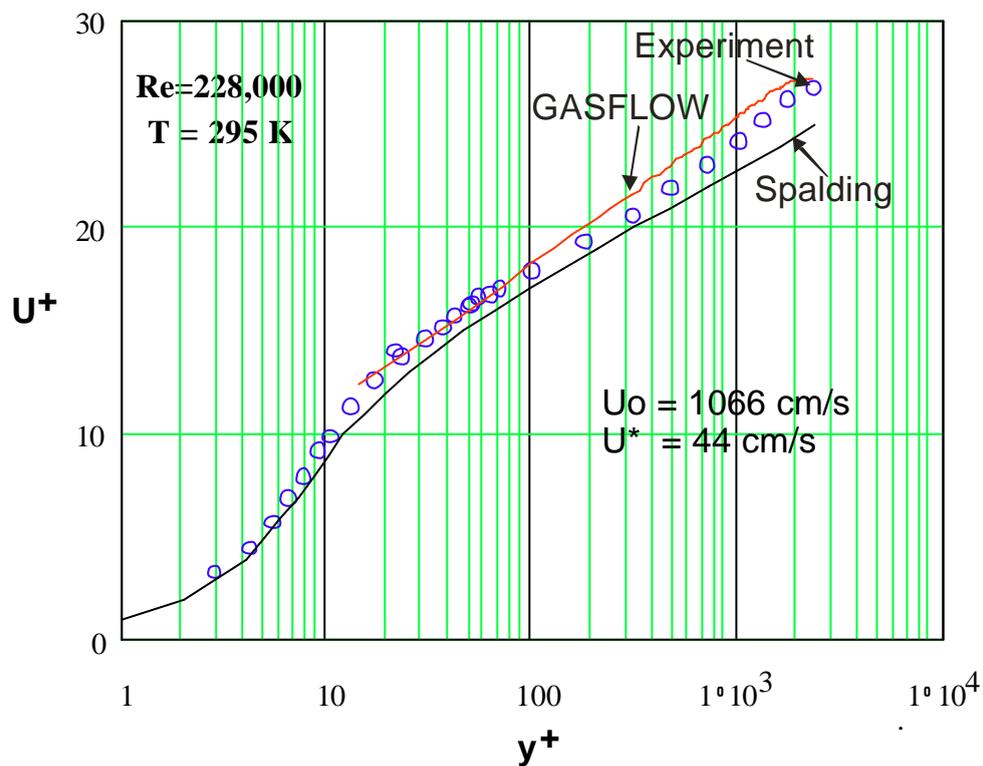
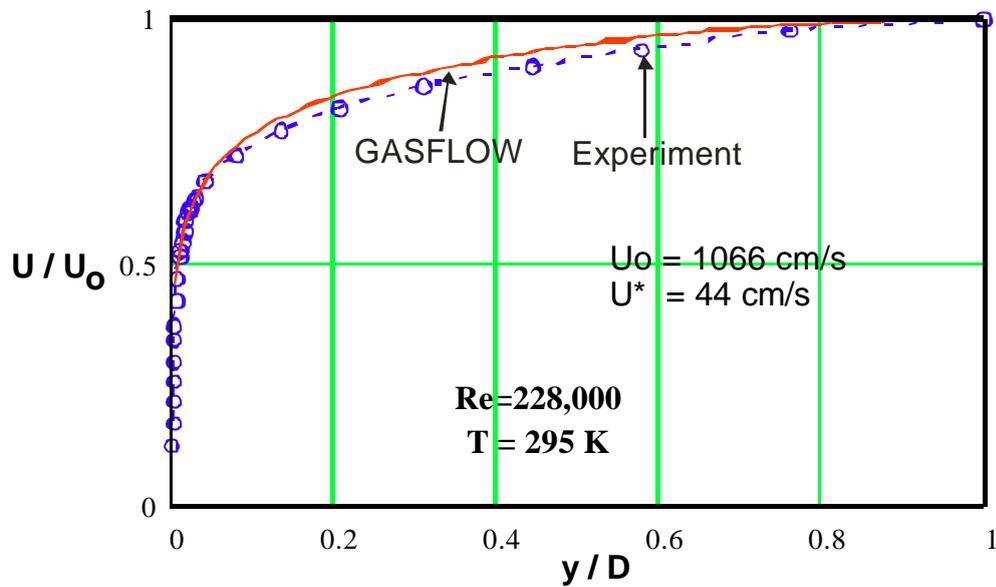


Abb.5.4.1: Turbulente Strömung von Luft im Rechteckkanal für  $Re=228.000$ ,  $T=295K$ ,  $p=1\text{bar}$ . Vergleich der numerischen GASFLOW- Lösung mit Experiment und Theorie von Spalding. Feines Rechengitter mit 159 äquidistanten Zellen Kanalbreite 18 cm.

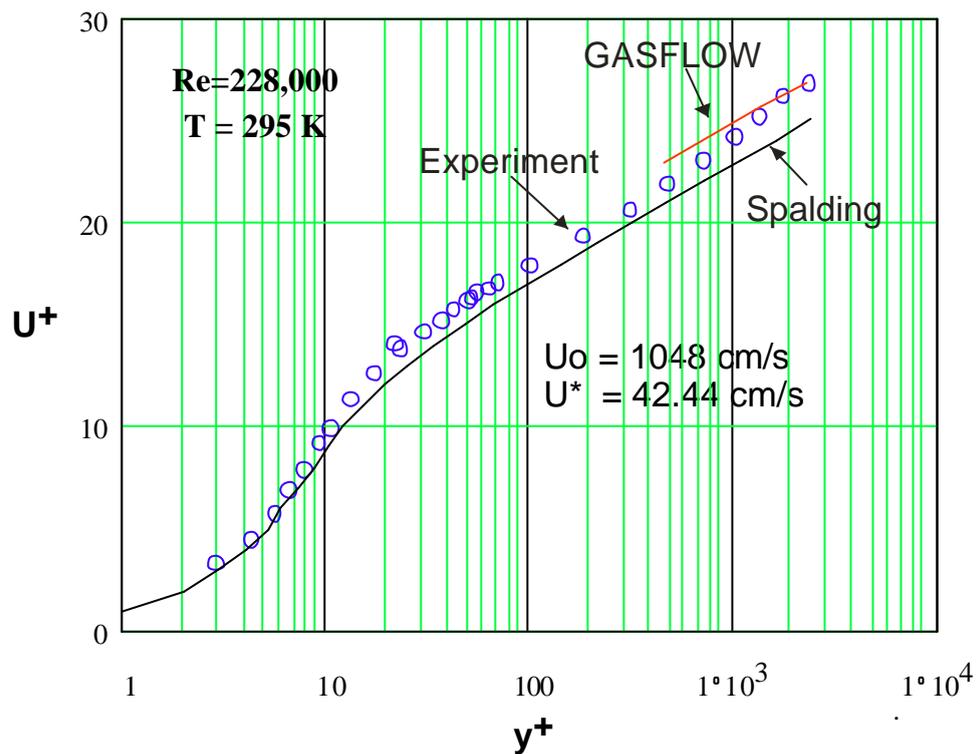
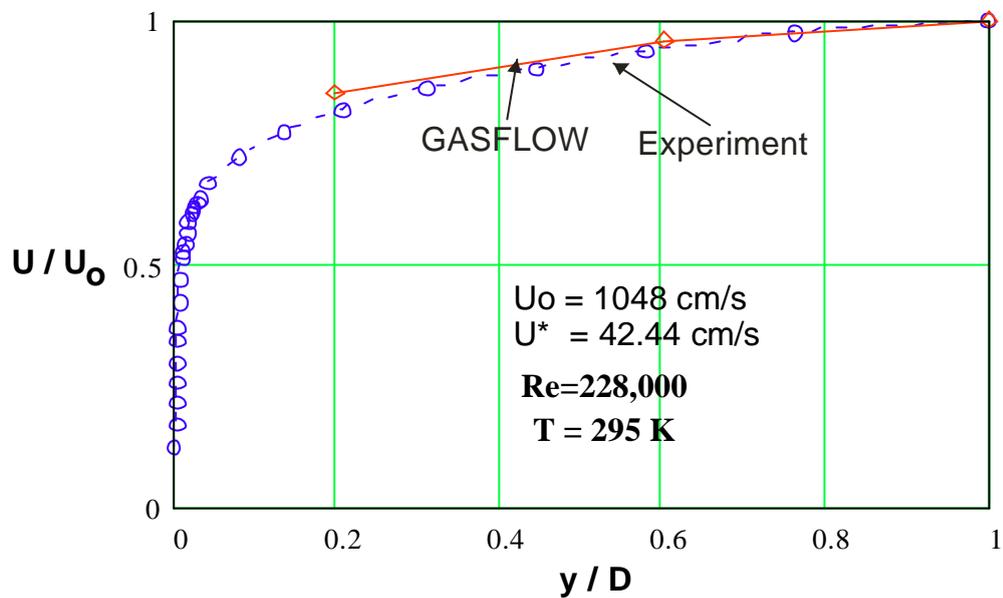


Abb.5.4.2: Turbulente Strömung von Luft im Rechteckkanal für  $Re=228.000$ ,  $T=295K$ ,  $p=1\text{bar}$ . Vergleich der numerischen GASFLOW- Lösung mit Experiment und Theorie von Spalding. GASFLOW-Rechnung mit grobem Gitter, 5 Zellen über 18 cm Kanalbreite.

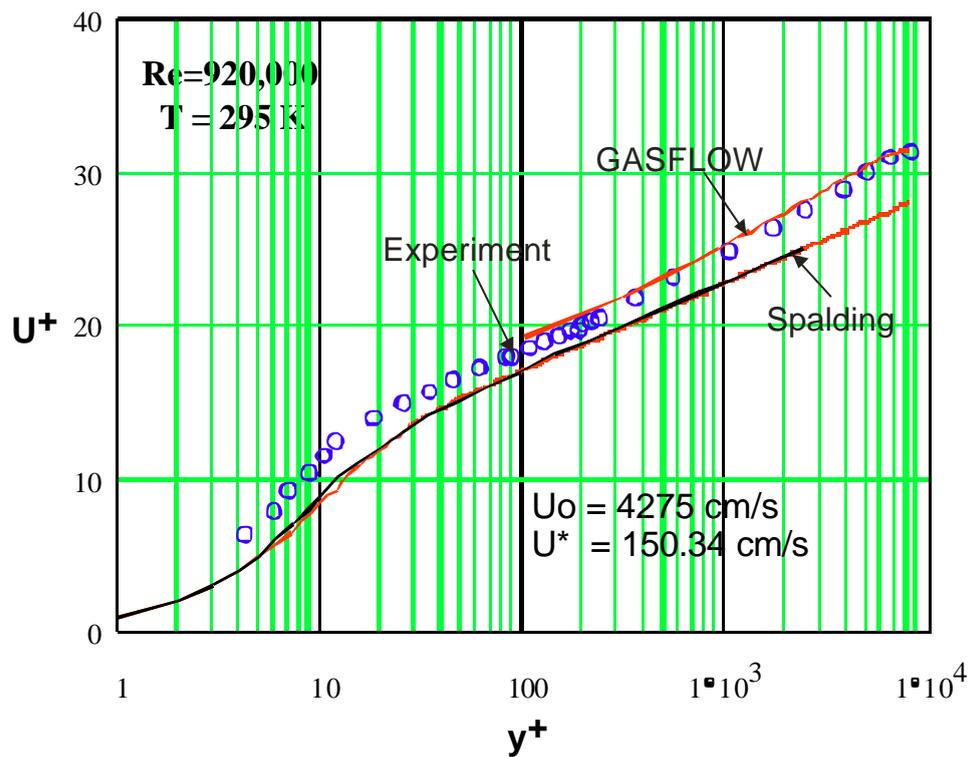
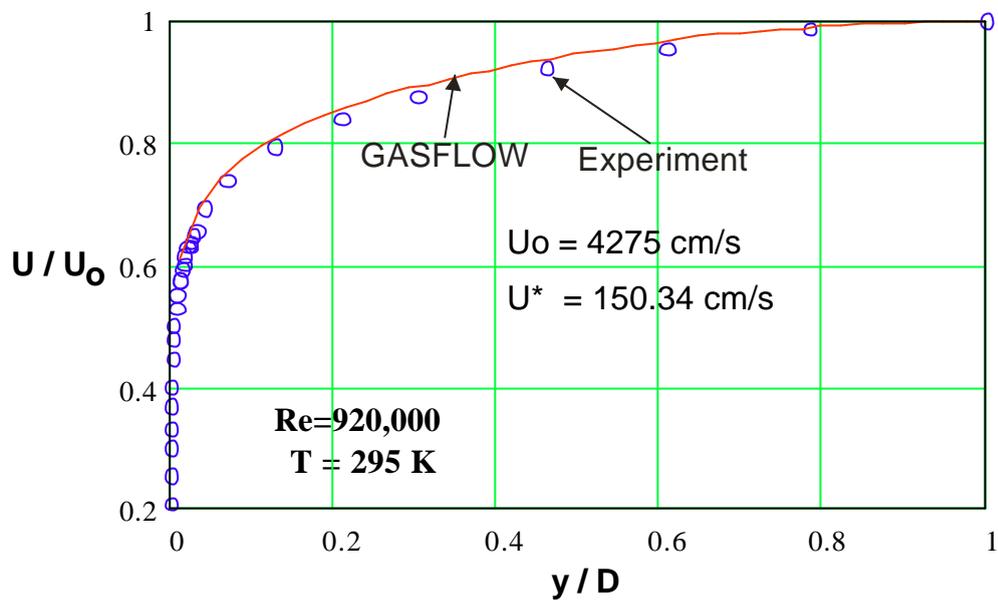


Abb.5.4.3: Turbulente Strömung von Luft im Rechteckkanal für  $Re=920.000$ . Vergleich der numerischen GASFLOW- Lösung mit Experiment und Theorie von Spalding. Rechengitter mit 79 äquidistanten Zellen für 18 cm Kanalbreite.

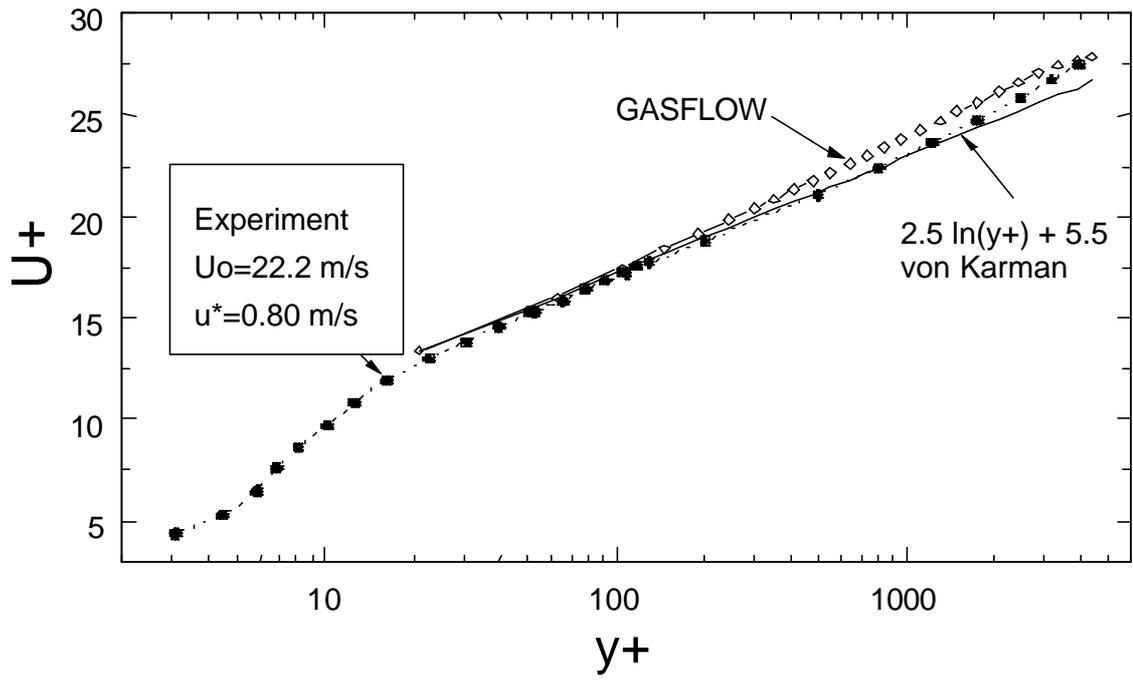


Abb.5.5.1: Gemessene und berechnete Geschwindigkeitsprofile bei turbulenter Strömung von Luft zwischen parallelen Platten (1bar, 20°C, Re=240.000).

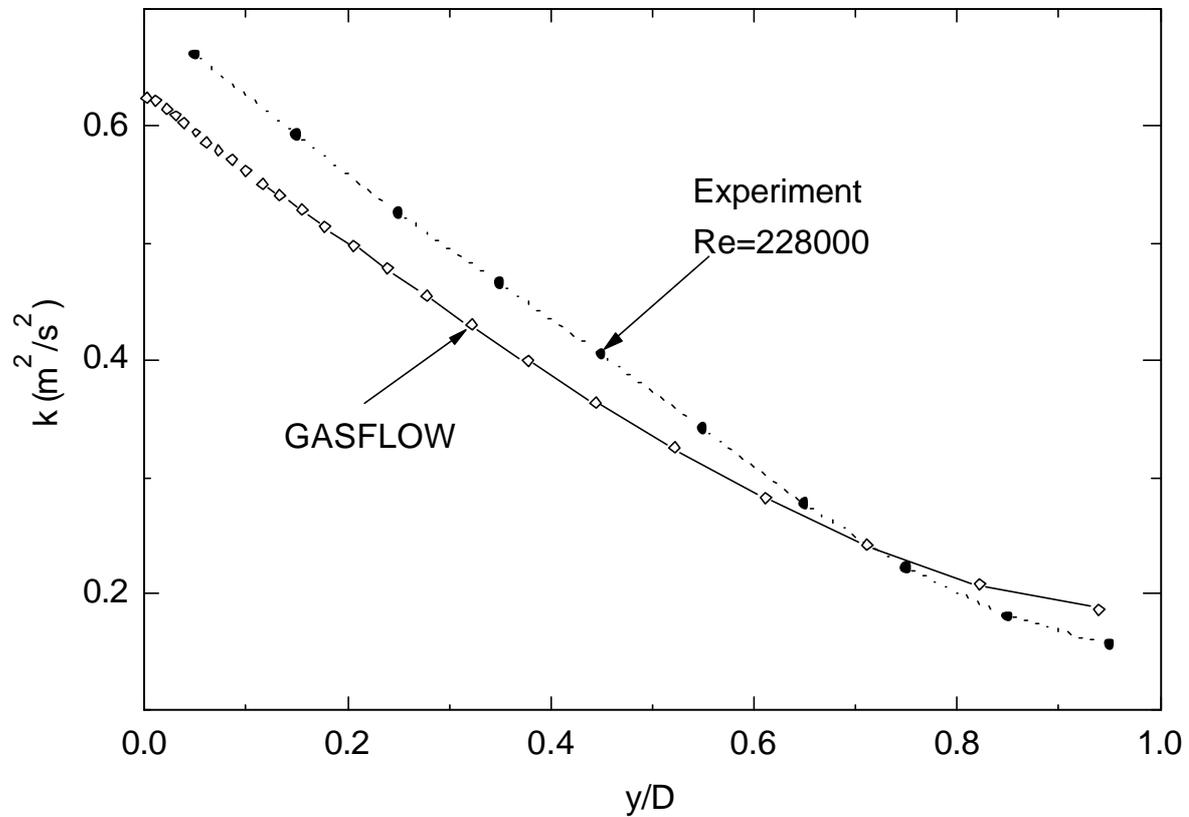


Abb.5.5.2: Gemessene und berechnete turbulente kinetische Energie bei turbulenter Strömung von Luft zwischen parallelen Platten.

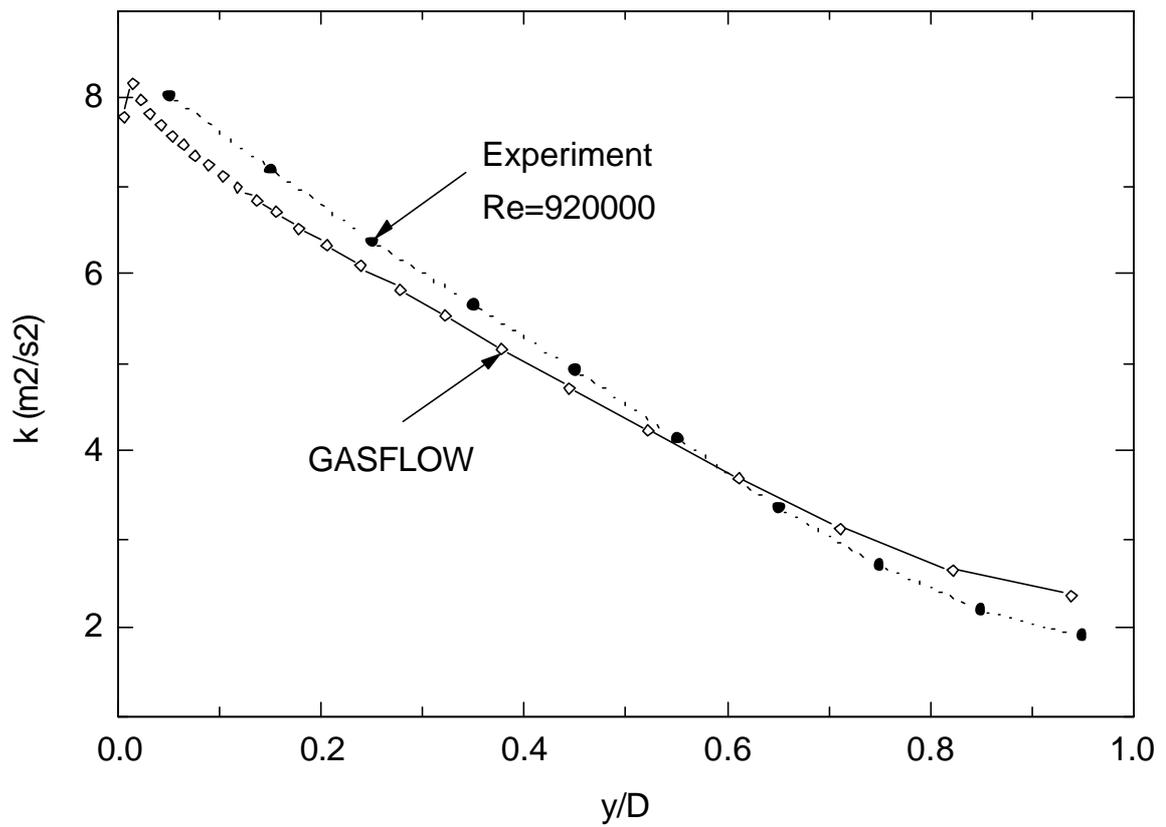


Abb.5.5.3: Gemessene und berechnete turbulente kinetische Energie bei turbulenter Strömung von Luft zwischen parallelen Platten. (1bar, 20°C, Plattenabstand 2D=18cm).

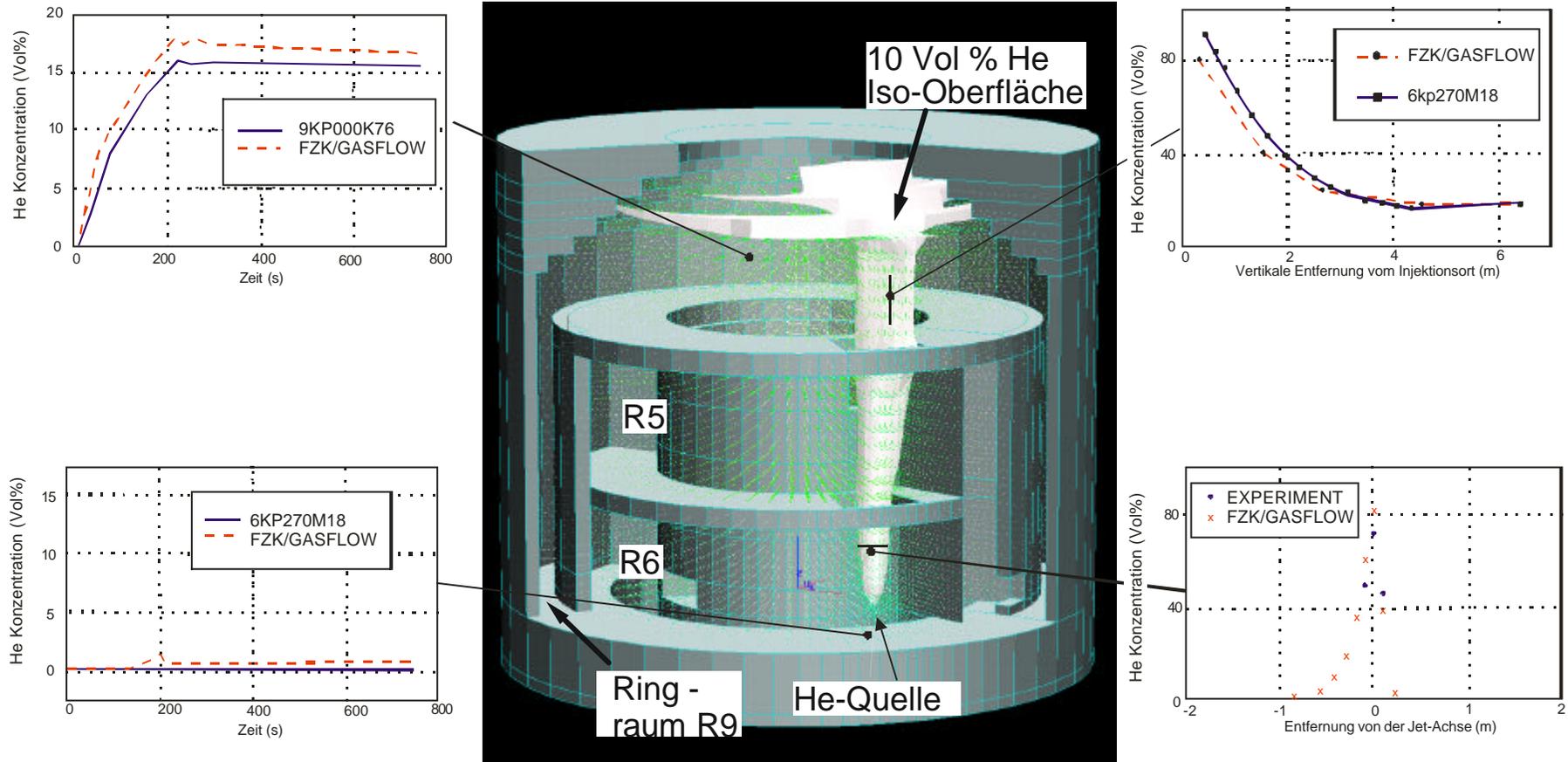


Abb.5.6.1: Blinde Benchmark-Rechnung mit GASFLOW für BMC-Test Jx7. Vertikaler He-Strahl in Luft, 42 m/s, 200s Dauer. Vergleich berechneter und gemessener He-Konzentrationen an verschiedenen Orten in Modell-Containment.

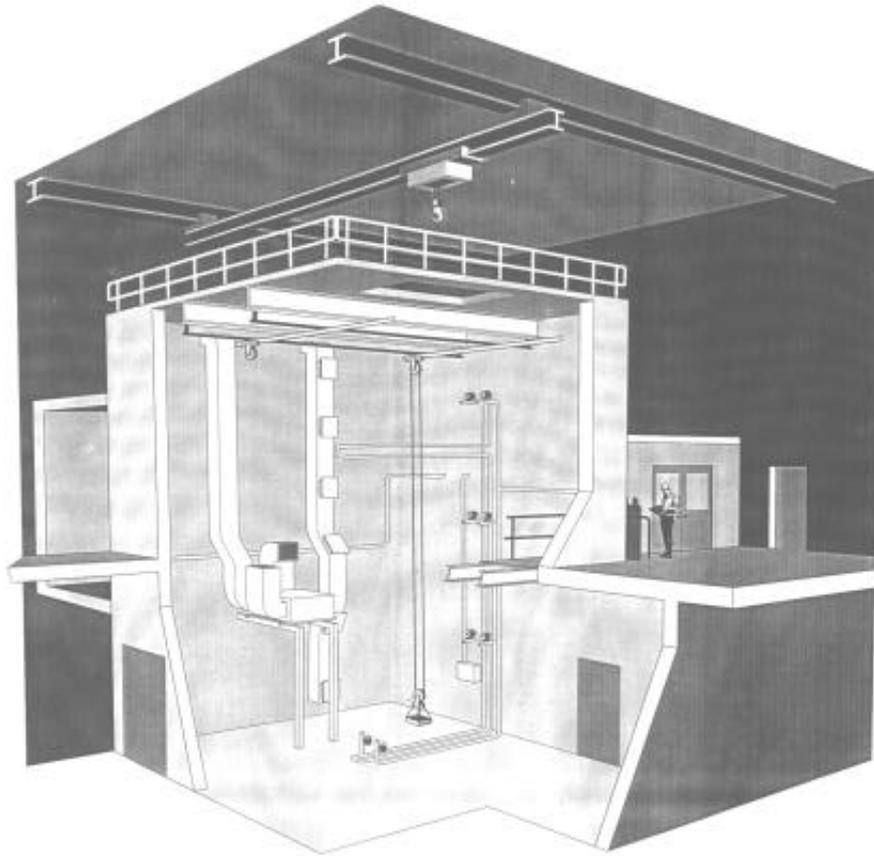


Abb.5.7.1: Skizze der „Large-Scale gas mixing Facility (LSGMF)“ in Whiteshell, Kanada in der He-Luft Verteilungsversuche durchgeführt wurden um Skalierungseffekte zu untersuchen. Gesamtvolumen ca.  $1000\text{m}^3$ .

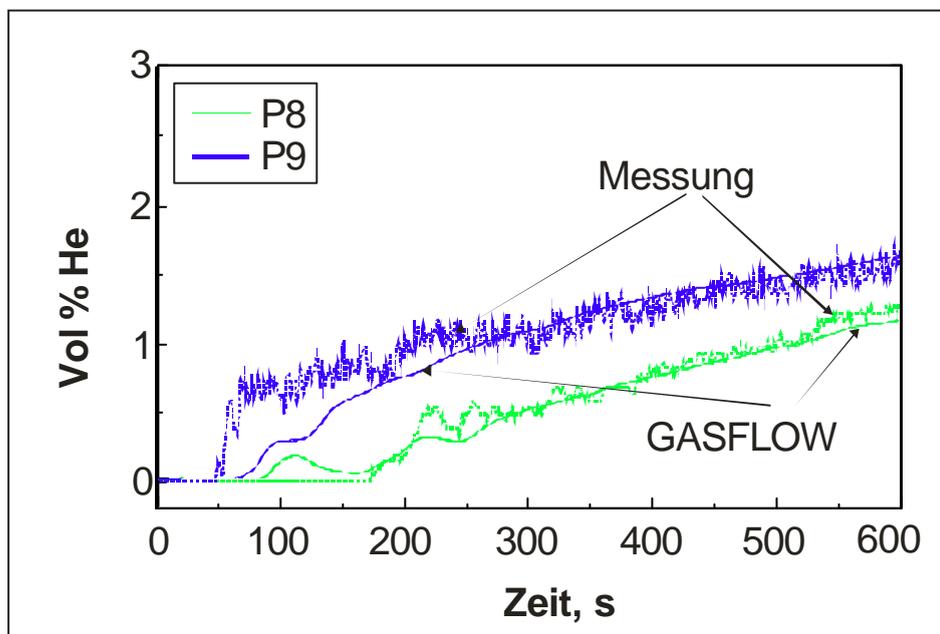


Abb.5.7.2: Vergleich von gemessenen und berechneten zeitabhängigen He-Konzentrationen für Verteilungsexperiment in der LSGMF (Whiteshell). Jetdurchmesser 5cm, He-Austrittsgeschwindigkeit 8.6 m/s.

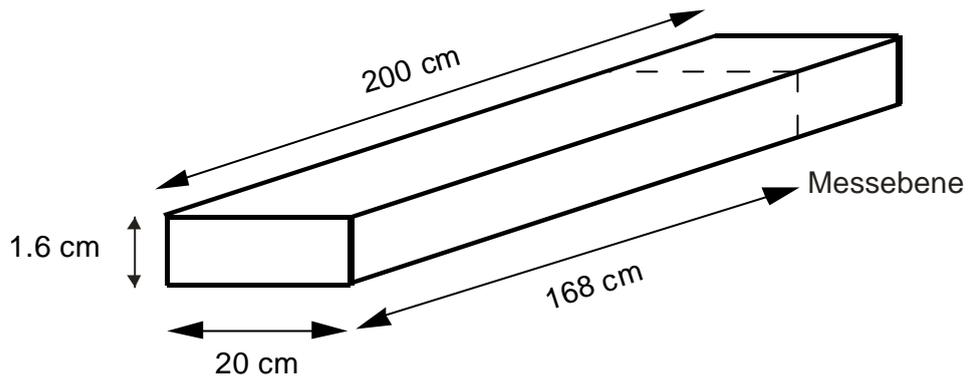


Abb.5.8.1: Prinzipskizze der DATHET-Versuche im Rechteckkanal ( Data Base On Turbulent Heat Transfer).

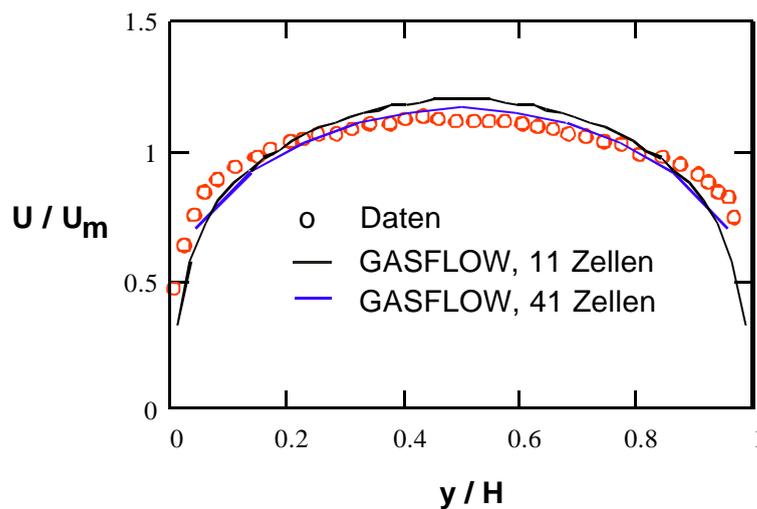
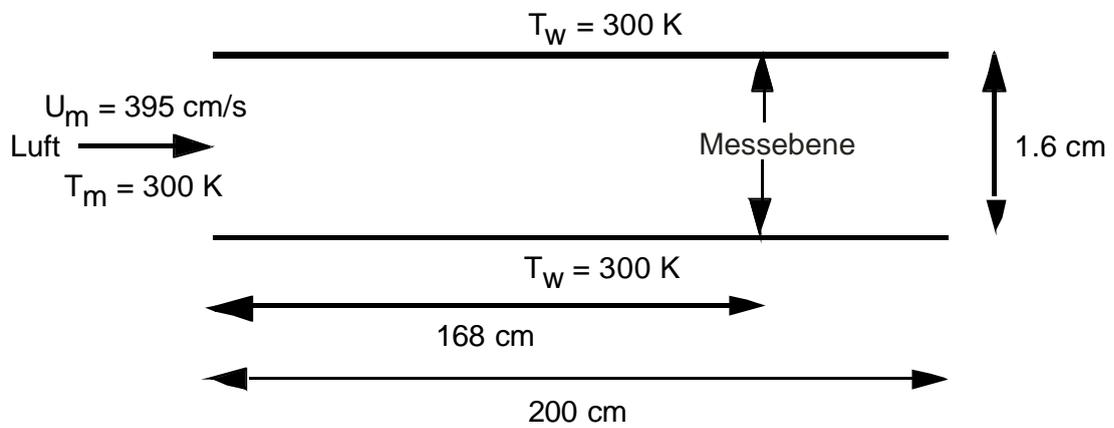


Abb.5.8.2: Vergleich von gemessenen und berechneten Geschwindigkeitsprofilen bei isothermer Strömung von Luft im Rechteckkanal.

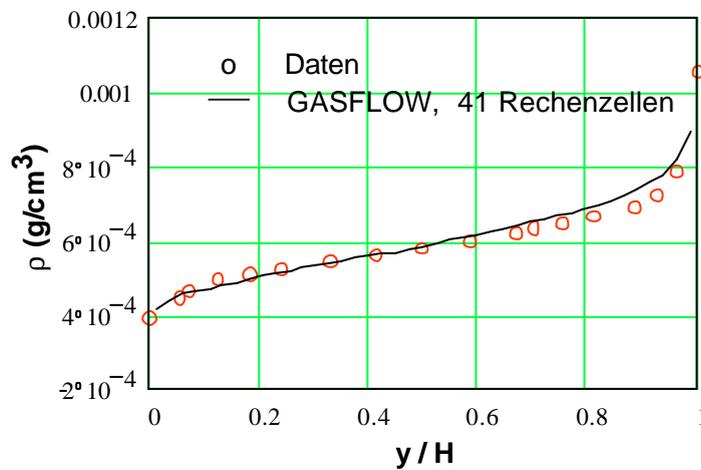
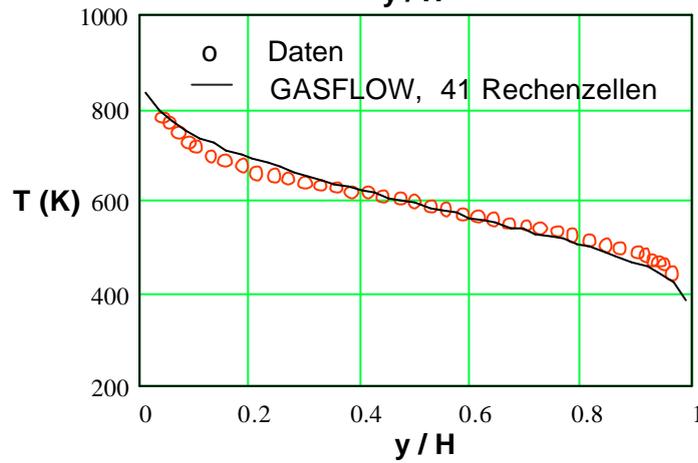
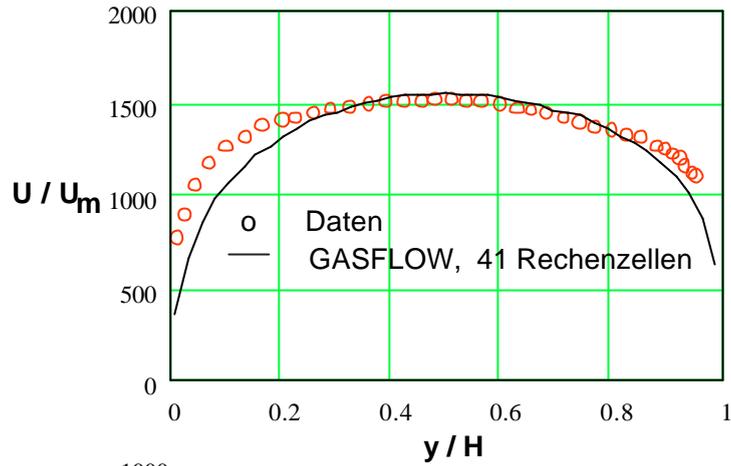
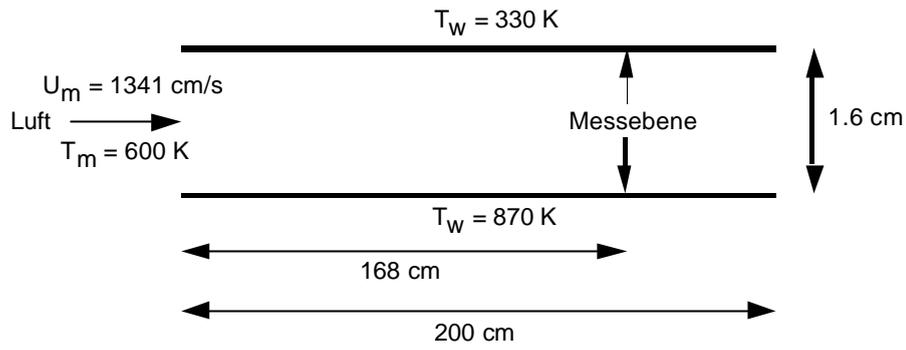


Abb.5.8.3: Vergleich von gemessenen und berechneten Geschwindigkeits- Temperatur- und Dichteprofilen bei turbulenter Strömung von Luft mit Wärmeübertragung.

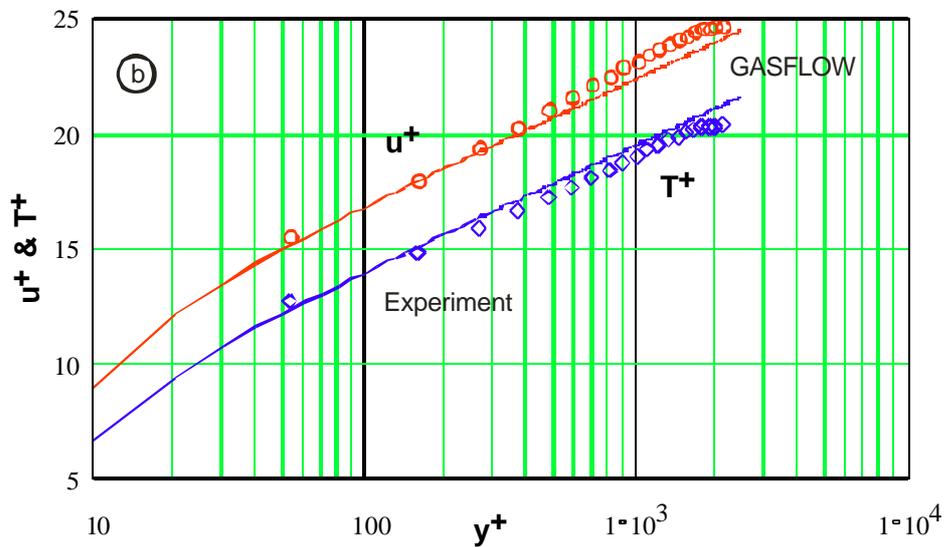
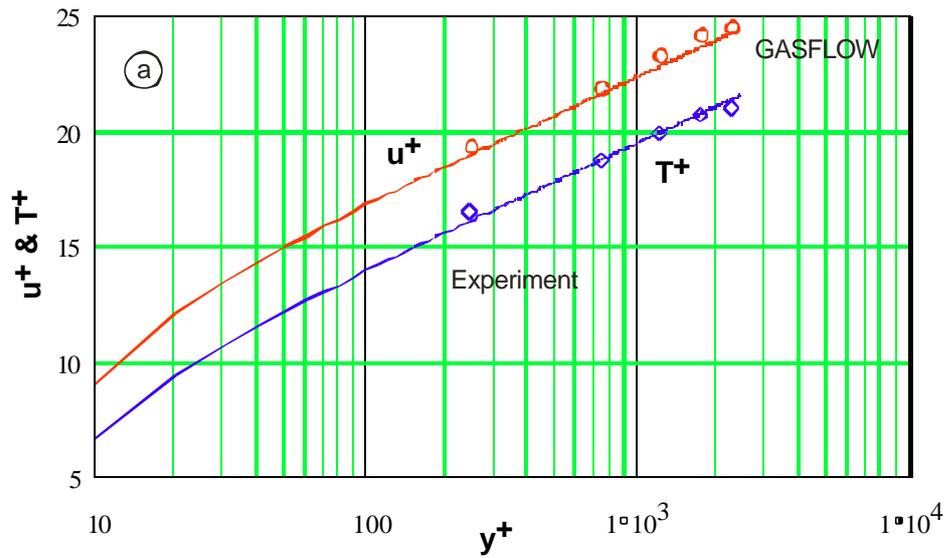
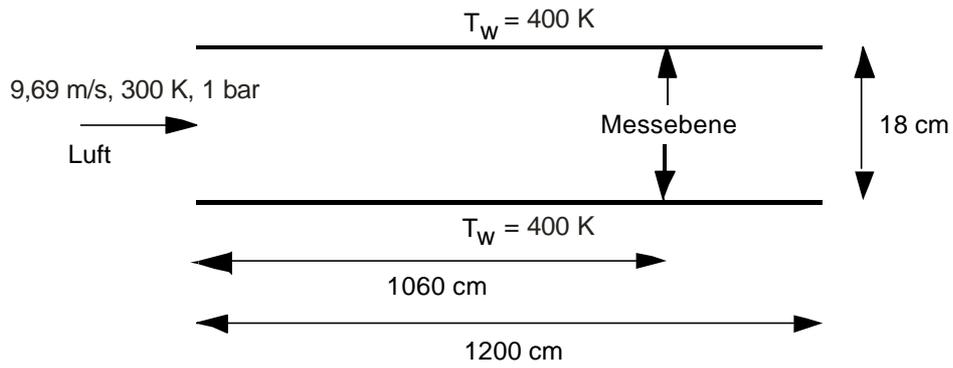


Abb.5.9.1: Gemessene und berechnete Geschwindigkeits- und Temperaturprofile bei turbulenter Strömung von Luft in einem geheizten Kanal.

- a) GASFLOW mit grobem Rechengitter, 9 äquidistante Zellen über Kanal
- b) GASFLOW mit feinem Gitter, 39 äquidistante Zellen über Kanal

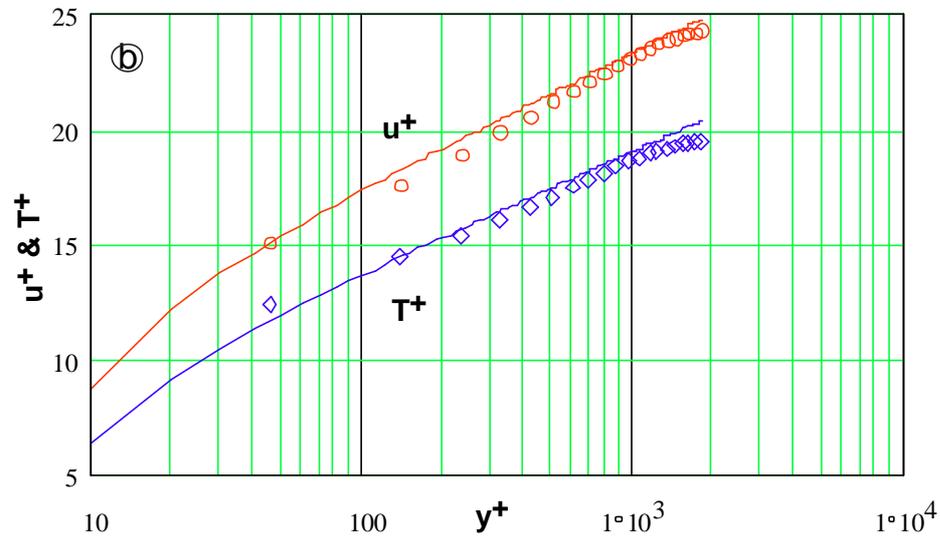
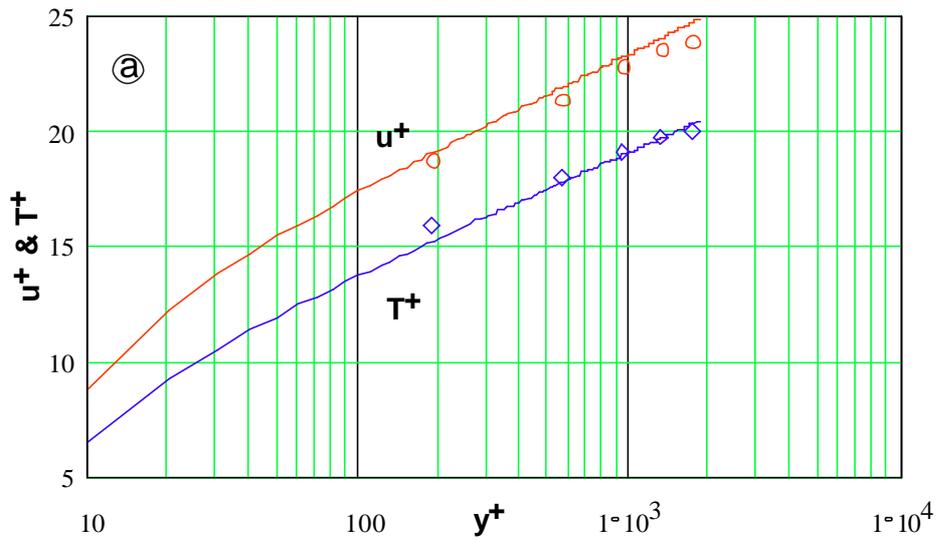
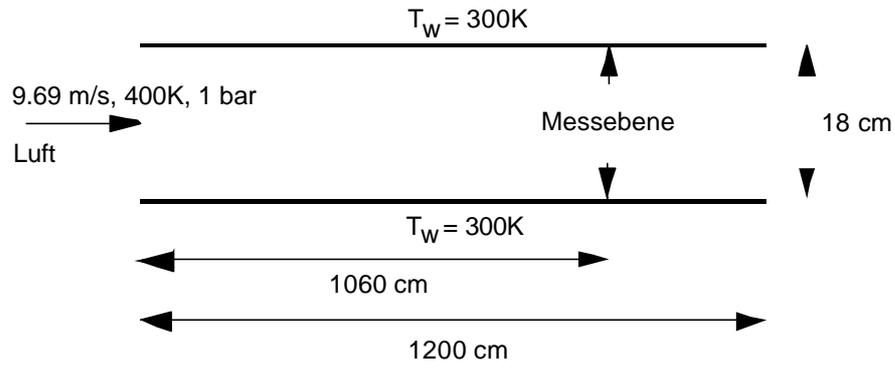


Abb.5.9.2: Gemessene und berechnete Geschwindigkeits- und Temperaturprofile bei turbulenter Strömung von Luft in einem gekühlten Rechteckkanal.

- a) GASFLOW Rechnung mit grobem Rechengitter, 9 äquidistante Zellen über Kanal
- b) GASFLOW Rechnung mit feinem Gitter, 39 äquidistante Zellen über Kanal

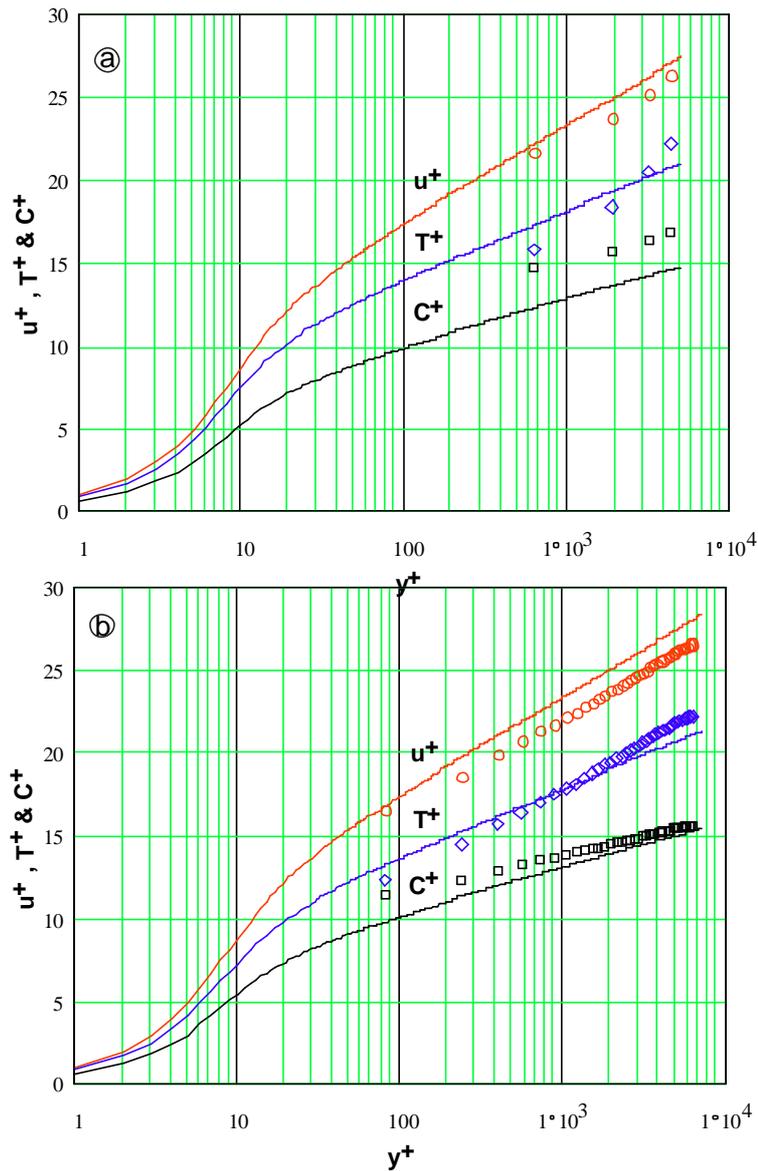
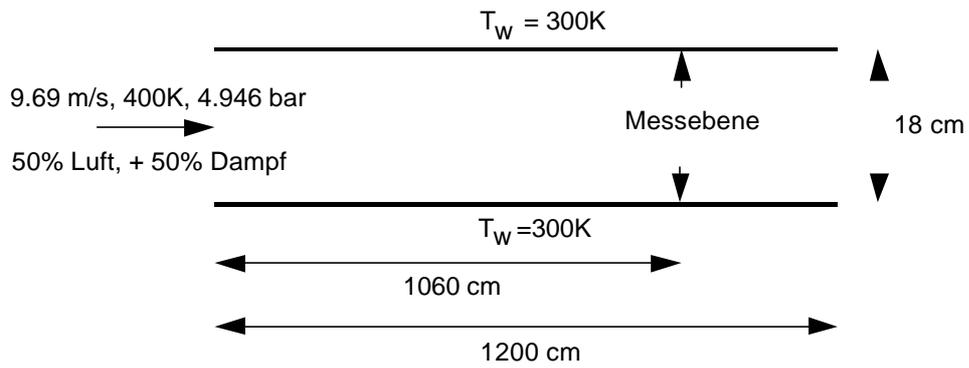


Abb.5.9.3: Gemessene und berechnete Geschwindigkeits-, Temperatur- und Dampfprofile bei turbulenter Strömung mit Kondensation in einem Kanal.  
 a) GASFLOW Rechnung mit grobem Rechengitter, 9 äquidistante Zellen über Kanalbreite  
 b) GASFLOW Rechnung mit feinem Rechengitter, 39 äquidistante Zellen über Kanalbreite

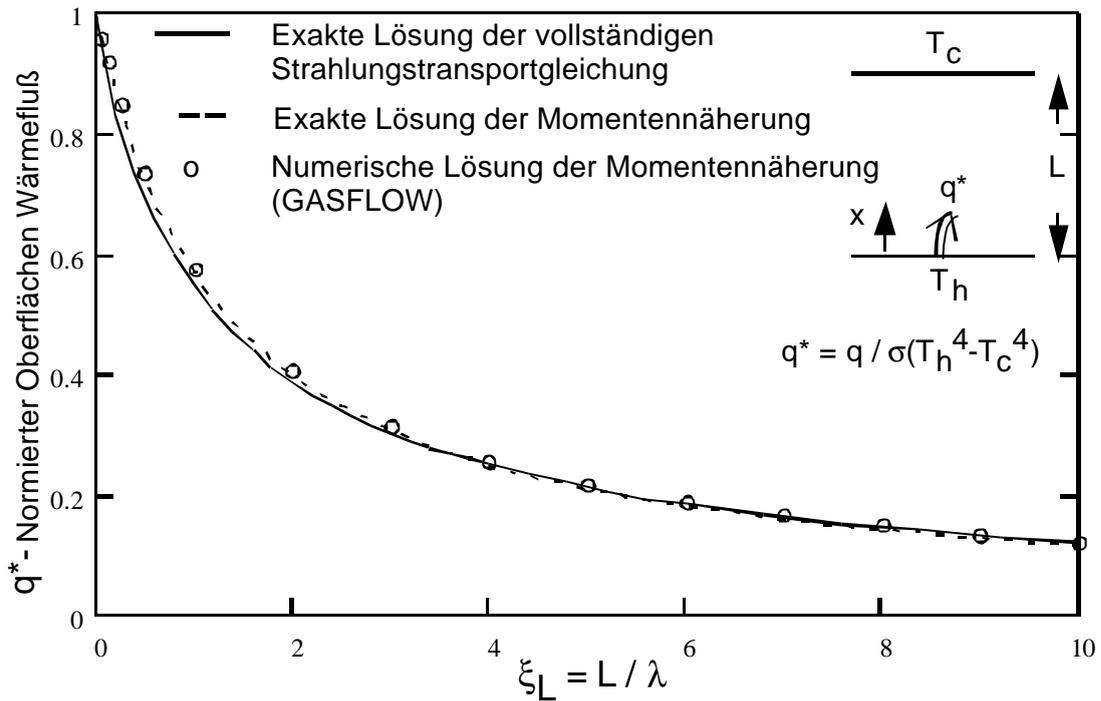


Abb.5.10.1: Vergleich von verschiedenen Lösungen für die normierten Wärmeströme  $q^*$  bei eindimensionalem Strahlungswärmetransport zwischen parallelen Platten durch ein Medium mit konstantem Absorptionskoeffizienten.  $\lambda$  = mittlere Photonenweglänge

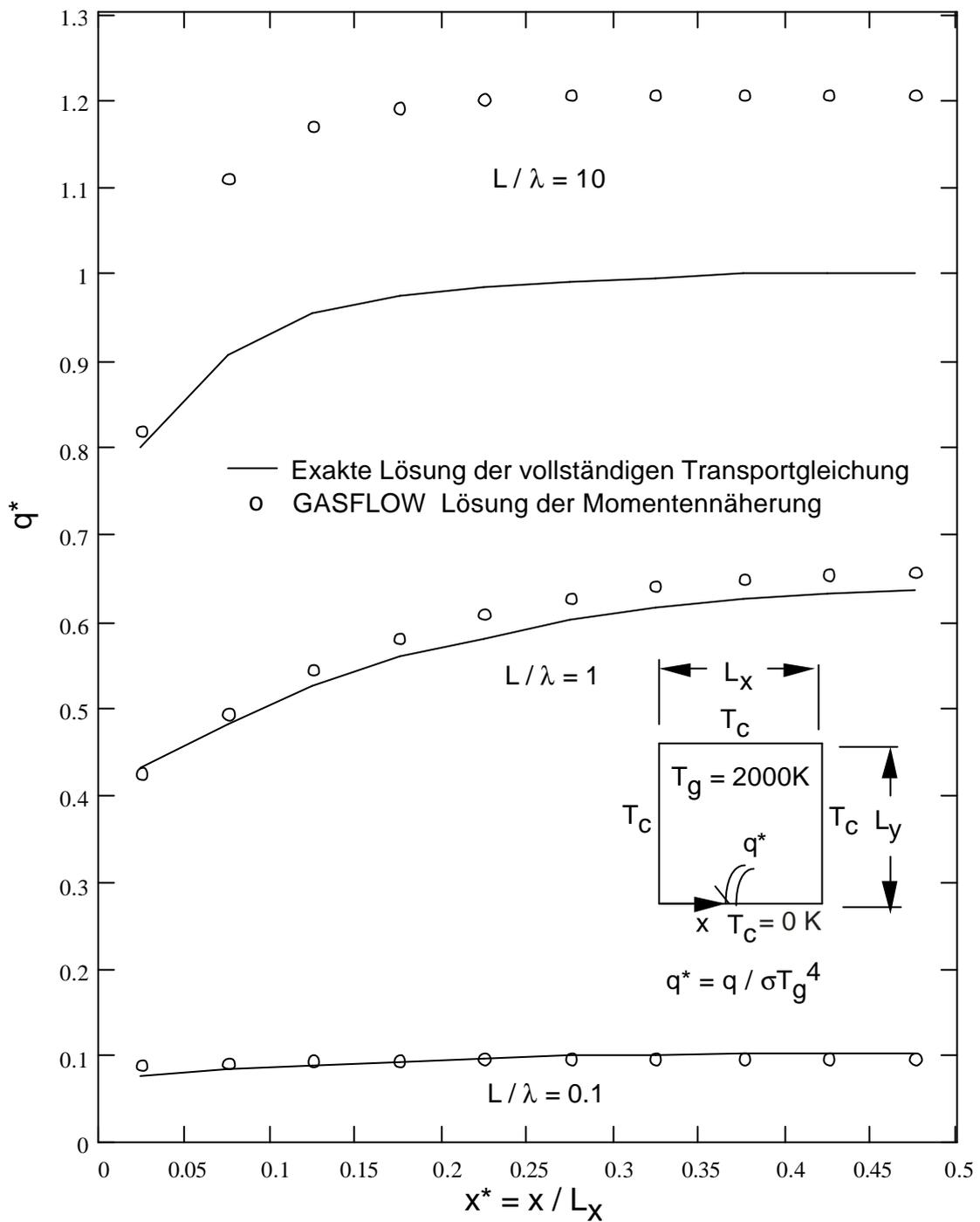


Abb.5.10.2:Zweidimensionales Testproblem für das GASFLOW Strahlungsmodell: Strahlungstransport von einem heißen grauen Gas an diffusreflektierende Wände für drei verschiedene relative mittlere Photonenweglängen  $L/\lambda$

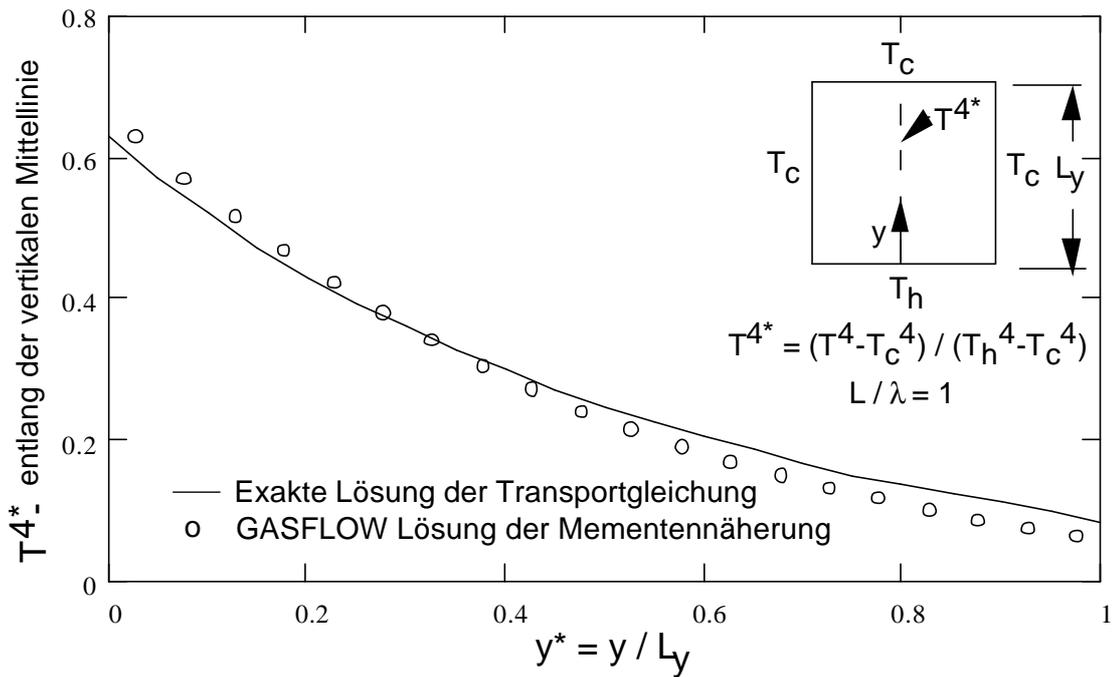


Abb.5.10.3: Zweidimensionales Testproblem für das GASFLOW- Strahlungsmodell: Strahlungsaustausch zwischen drei kalten und einer heißen Wand, berechnete relative Temperaturverteilungen entlang der vertikalen Mittellinie für  $L/\lambda = 1$

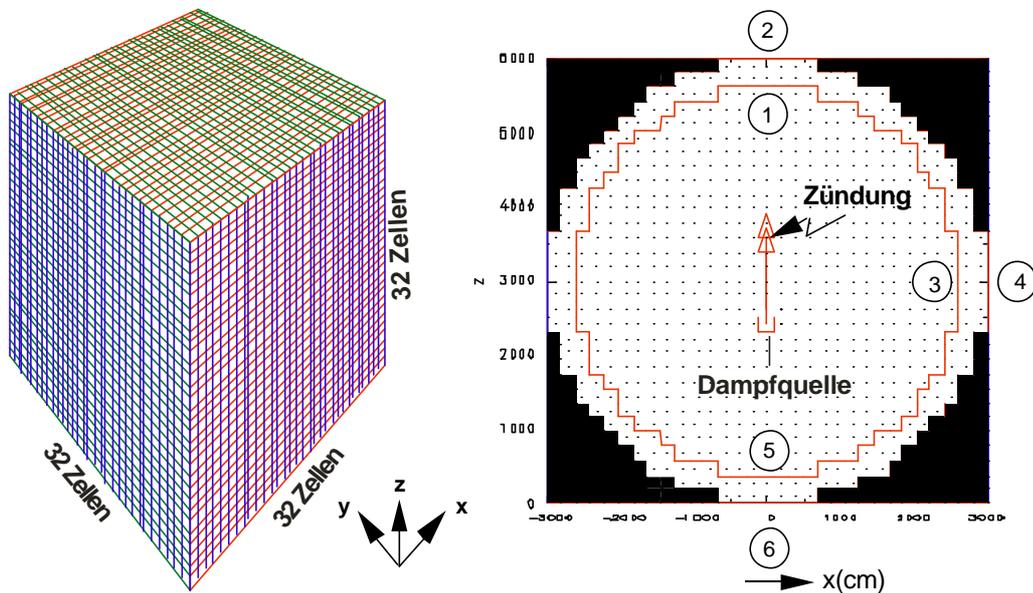


Abb.5.10.4: Rektorrelevantes Testproblem für Strahlungstransport in einer quasisphärischen Geometrie mit isothermen, diffusion reflektierenden, grauen Wänden. Kubisches Gitter mit  $32^3 \approx 33.000$  Zellen, 2m Zellengröße, der inneren Stahlschale 52 m, Durchmesser der äußeren Betonschale 60 m, vertikale Injektion von überhitztem Dampf (1500 K, 10 m/s) in Luft (1 bar, 300 K)

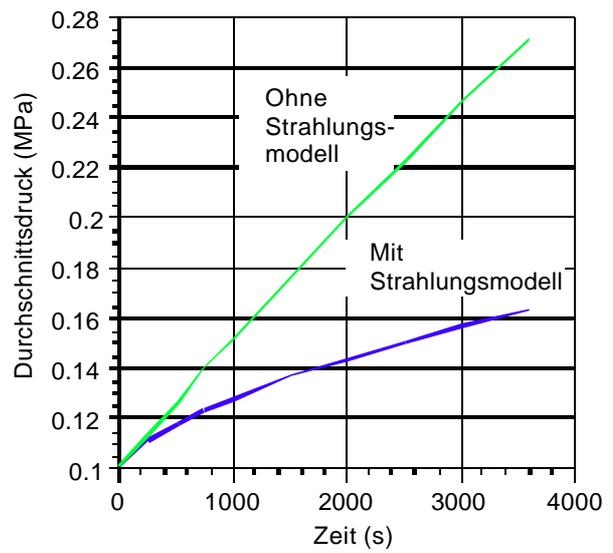
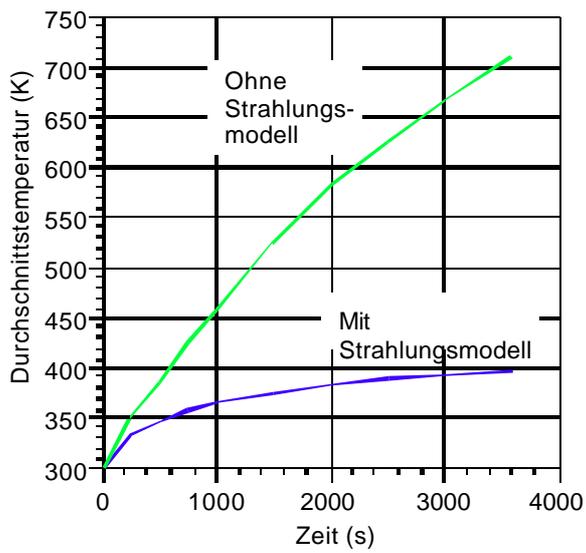
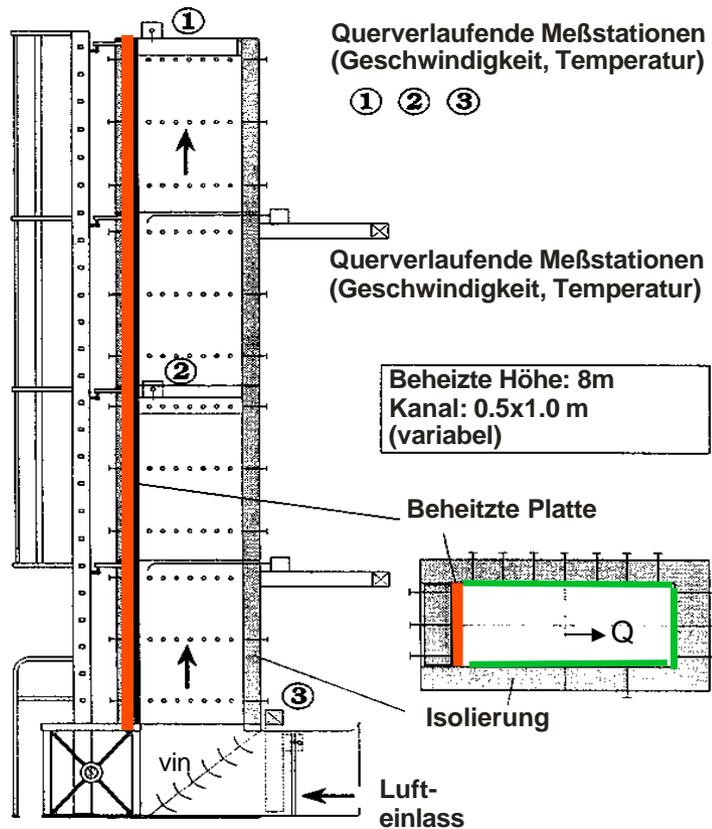


Abb.5.10.5: Vergleich von Durchschnittstemperatur und Druck der Containmentatmosphäre bei Dampfinkjektion, mit und ohne Strahlungsmodell.

## PASCO VERSUCHSANLAGE



ERGEBNISSE			VERSUCH			
			M014	M019	M022	M040
Messdaten	Test Strecke	-	0.5mx1m			0.5mx0.5m
	Heizer Temp	C	100	150	175	150
	Eintritt Temp	C	23.34	22.4	23.04	14.3
	Massenstrom	g/s	332	410	540	304
	Q	kW	3.33	6.58	8.23	6.57
FLUTAN	Q	kW	3.38	6.97	9.03	6.92
	Qconv	kW	1.56	3.05	3.79	3.24
	Qrad	kW	1.82	3.92	5.24	3.68
	Qrad/Qconv	-	1.17	1.29	1.38	1.14
	Massenstrom	g/s	278	392	462	304
GASFLOW	vin	cm/s	58.3	78.7	90.8	101
	Q	kW	3.90	7.93	10.47	7.87
	Qgasf/Qtest		1.17	1.21	1.27	1.20
	Qconv	kW	1.53	3.02	3.90	3.29
	Qrad	kW	2.37	4.91	6.57	4.58
	Qrad impinge	kW	1.26	2.74	3.59	2.69
	Qrad/Qconv	-	1.55	1.63	1.68	1.39

Abb.5.11.1: Aufbau, Versuchsdaten und numerische Ergebnisse aus FLUTAN und GASFLOW Simulation.

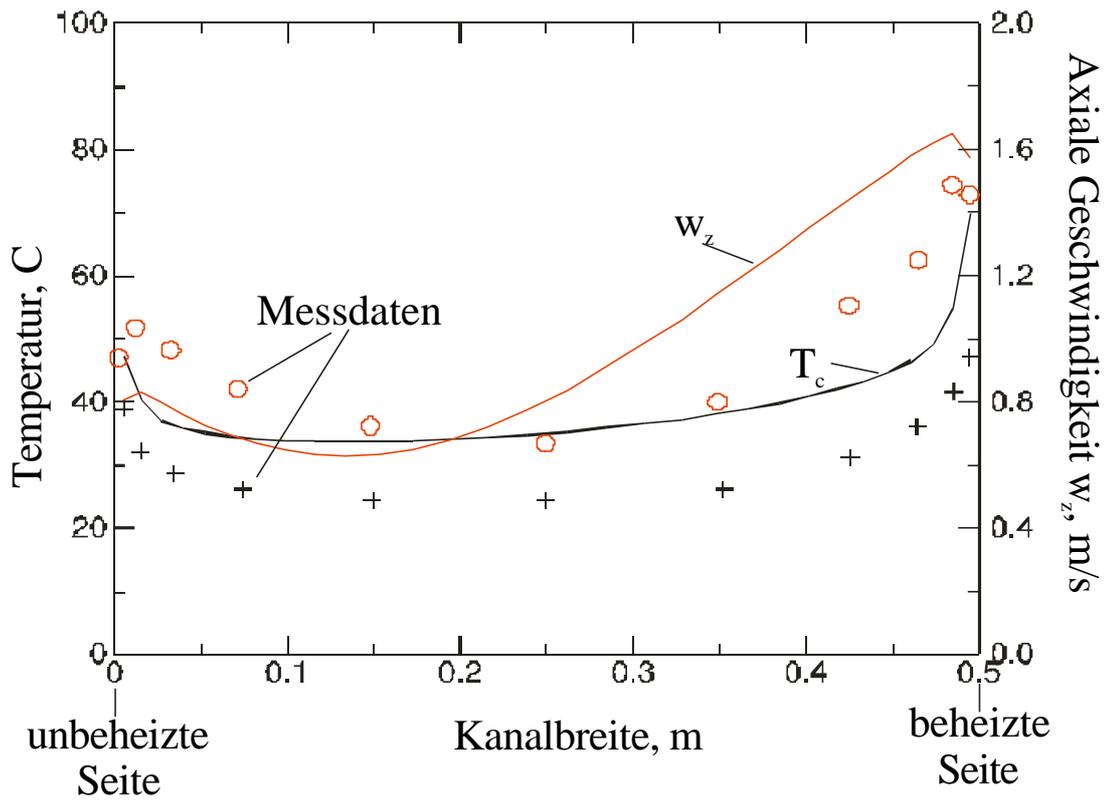


Abb.5.11.2: Messung und GASFLOW Rechnung für PASCO-Versuch M040. Ergebnisse für Temperaturprofil und axiale Geschwindigkeit  $w_z$ .

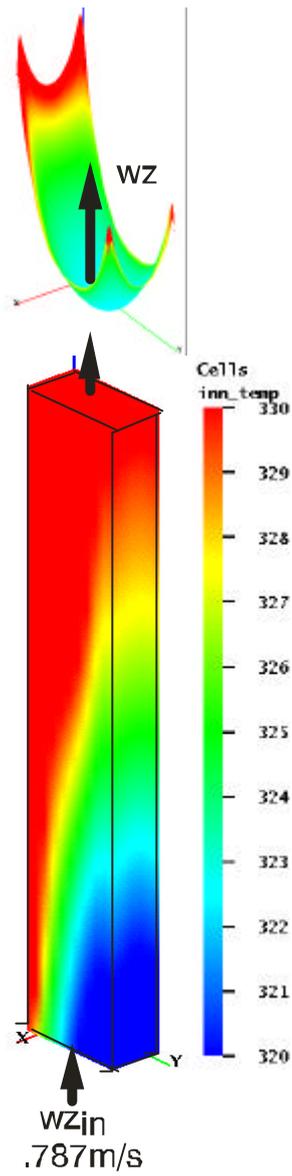


Abb.5.11.3: Dreidimensionale Darstellung von Wandtemperaturen und Gastemperaturen am Ausgang der Teststrecke.

### HDR-Querschnitt

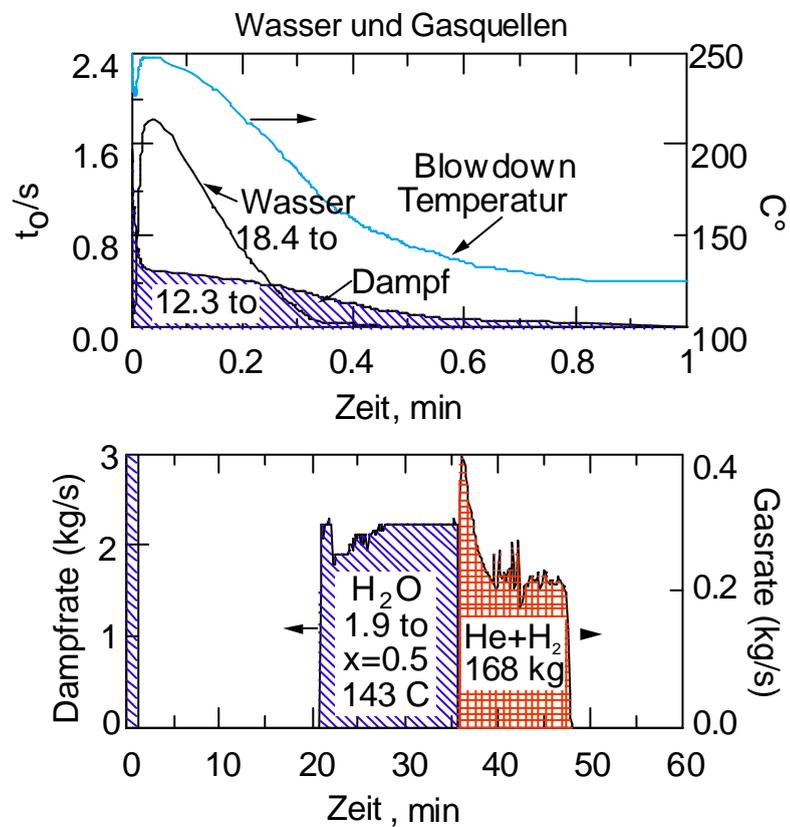
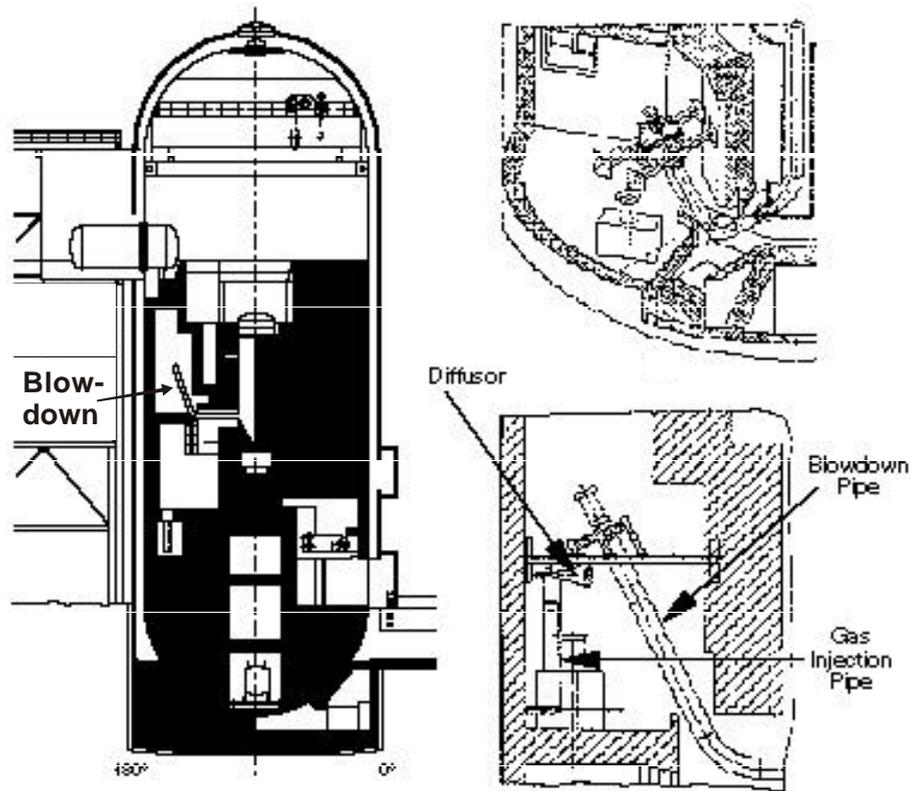


Abb.5.12.1: Versuchsgeometrie und Quellen bei HDR-Versuch T31.5. Anstelle von Wasserstoff wurde Leichtgas (85% He+15% H<sub>2</sub>) in das Containment eingespeist.

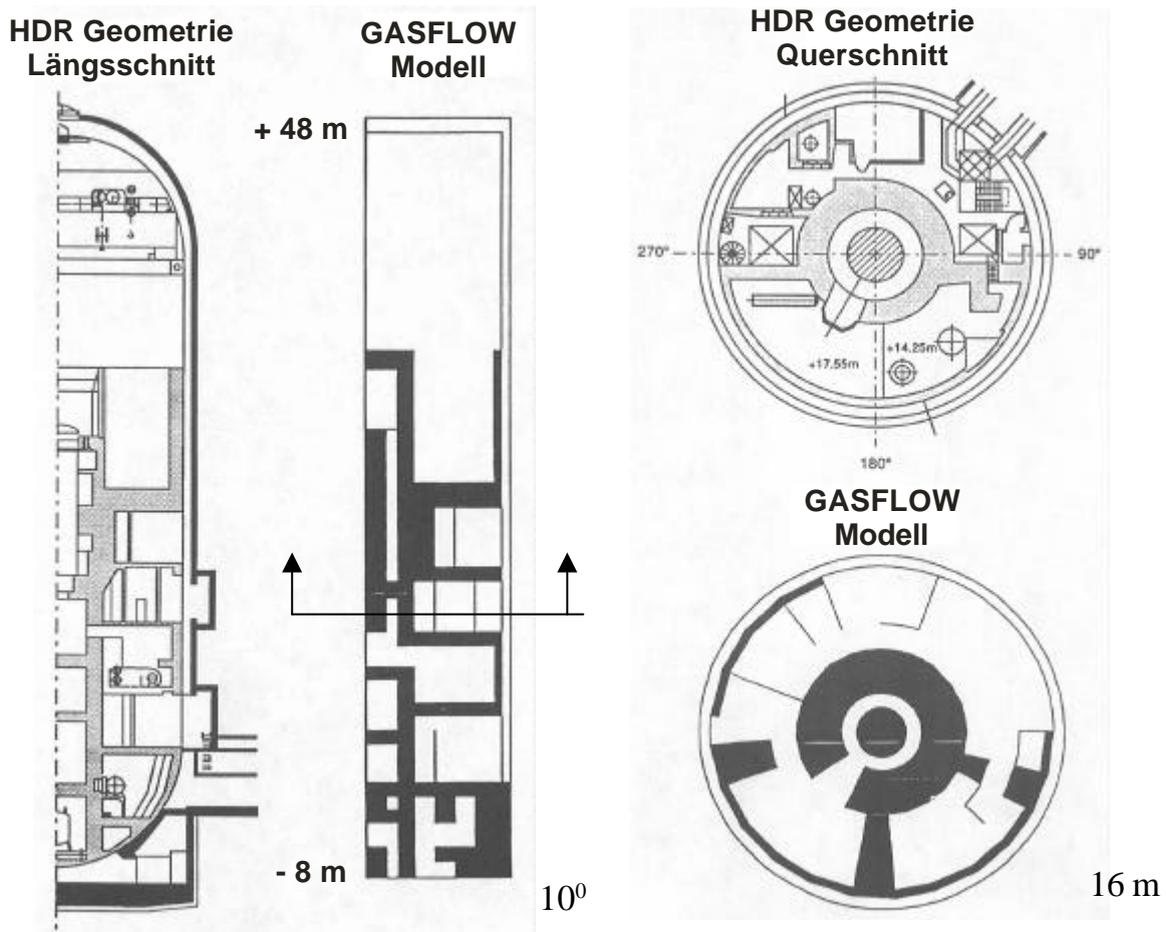


Abb.5.12.2: Vergleich zwischen HDR- Geometrie und GASFLOW- Modell in Zylinderkoordinaten (mit 11 radialen, 24 azimuthalen, 40 axialen Nodes, ca. 12300 Rechenzellen).

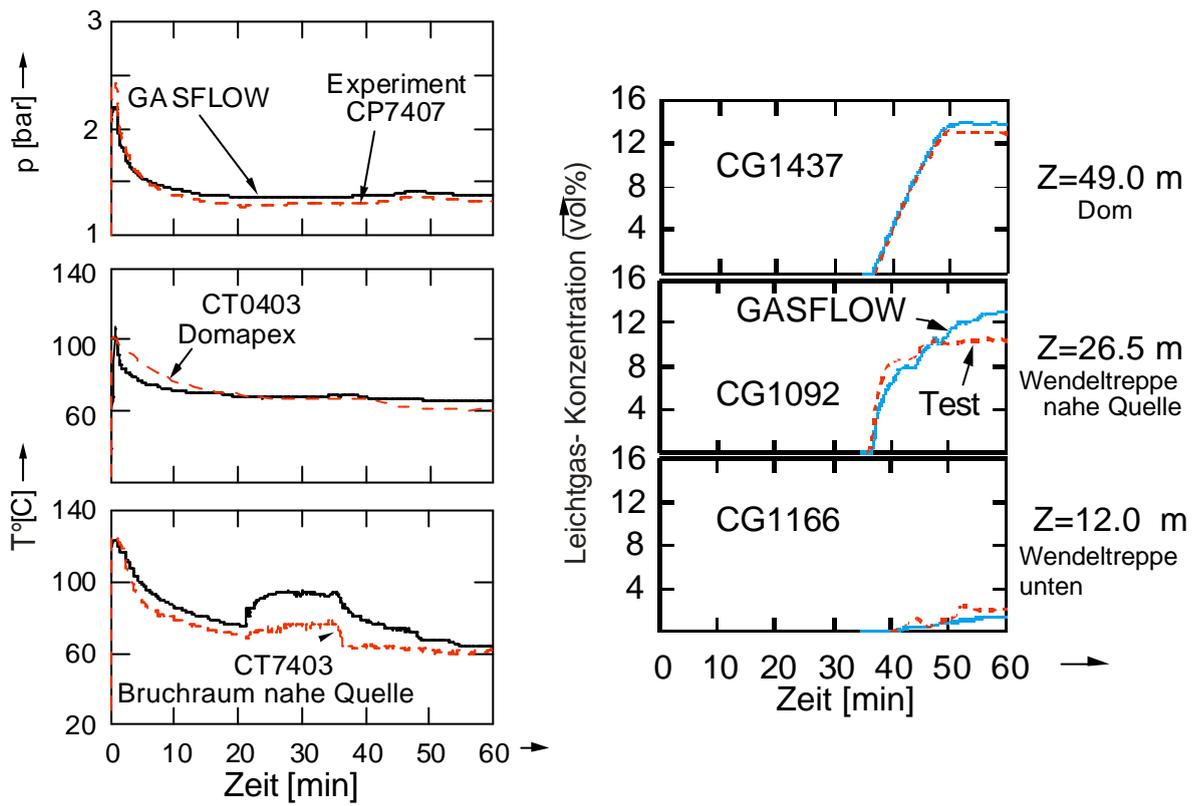


Abb.5.12.3: Vergleich gemessener und berechneter Daten für HDR- Versuch T31.5.

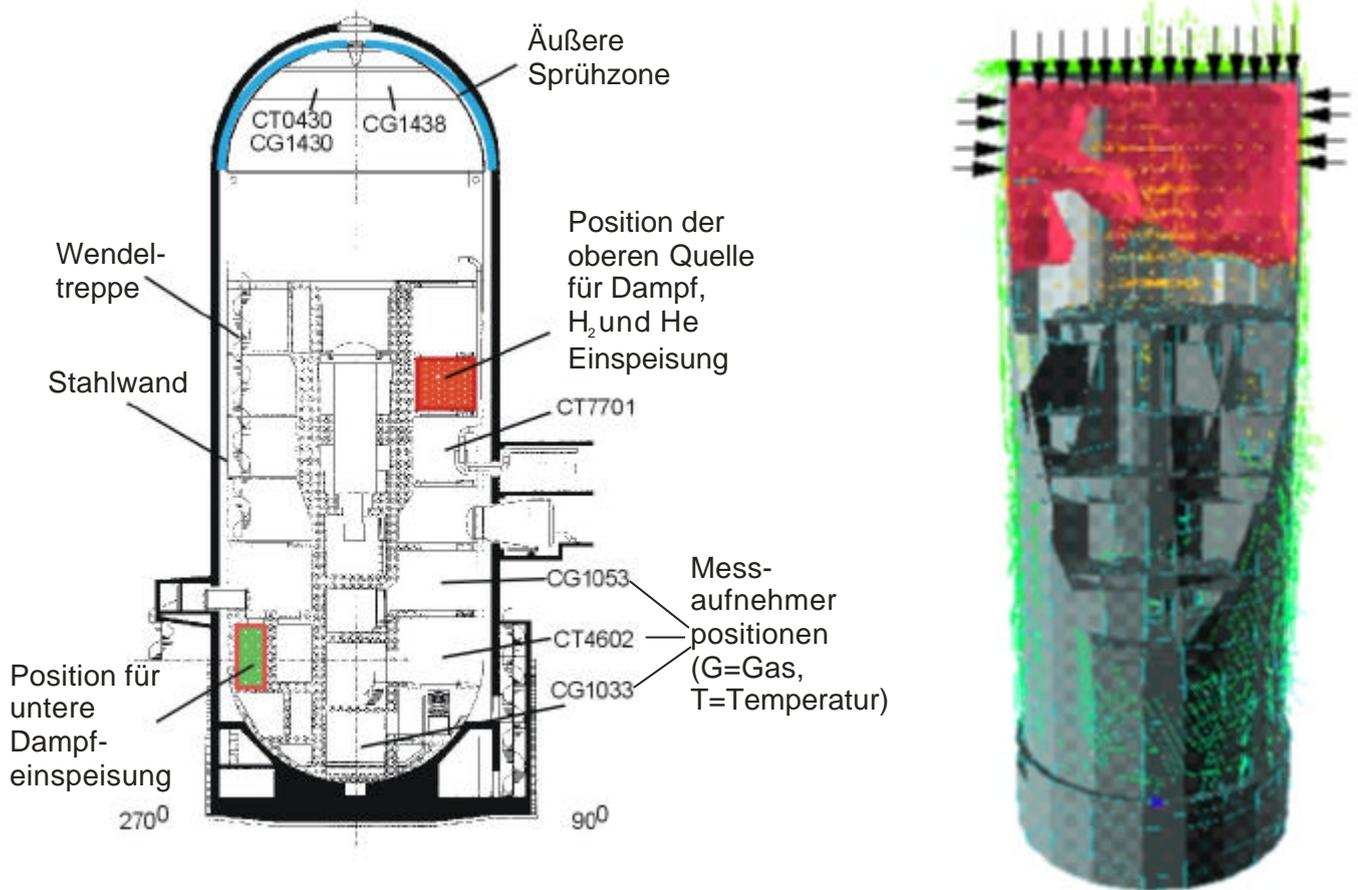


Abb.5.13.1: HDR- Geometrie und GASFLOW- Geometriemodell für HDR Versuch E11.2

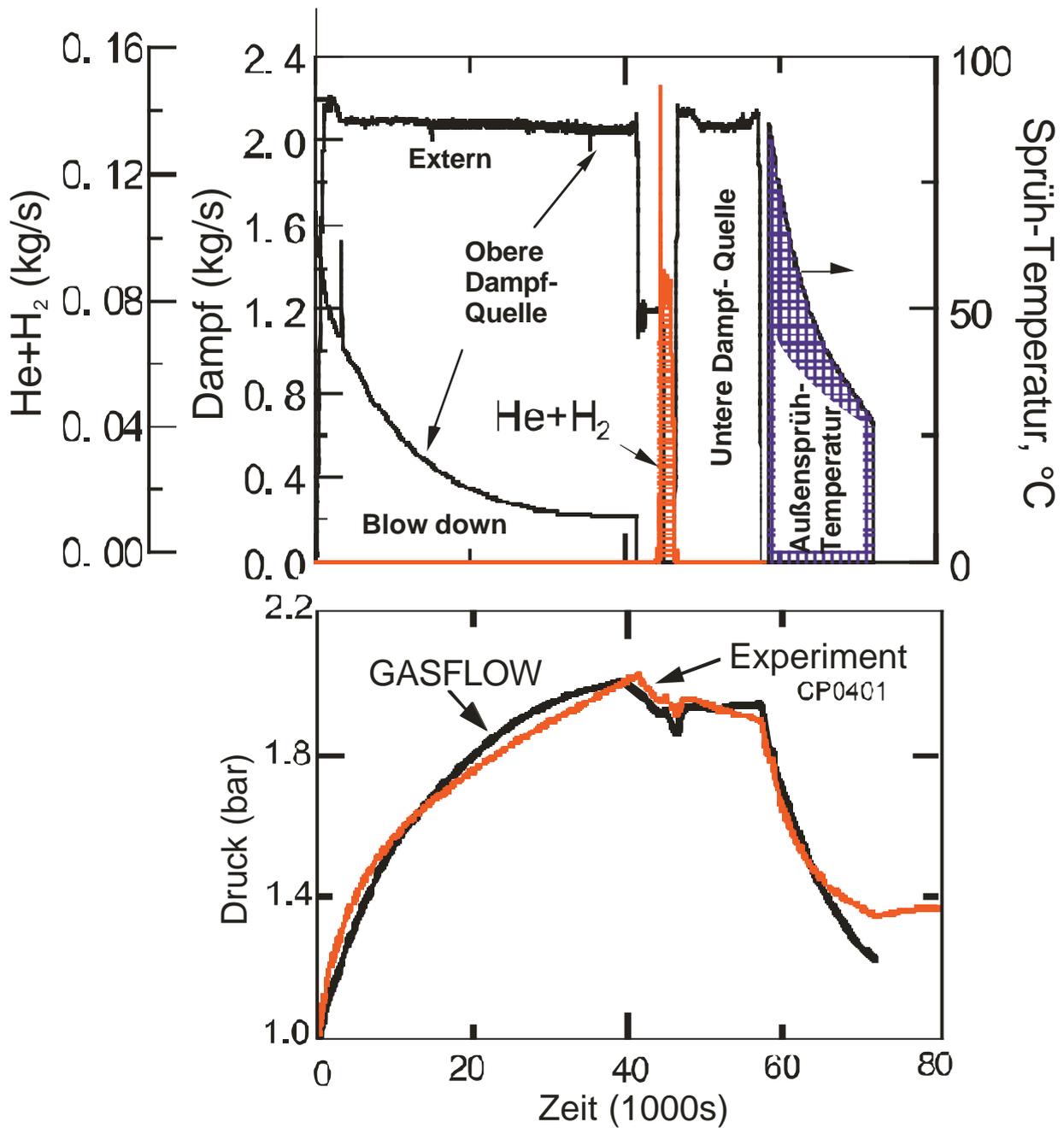


Abb.5.13.2: Dampf- und Leichtgasquellen bei HDR- Versuch E11.2 (oben) sowie gemessene und berechnete Drücke im Containment (unten). Aus Sicherheitsgründen wurde ein Leichtgas bestehend aus 85 vol% H<sub>2</sub> und 15 vol% H<sub>2</sub> freigesetzt.

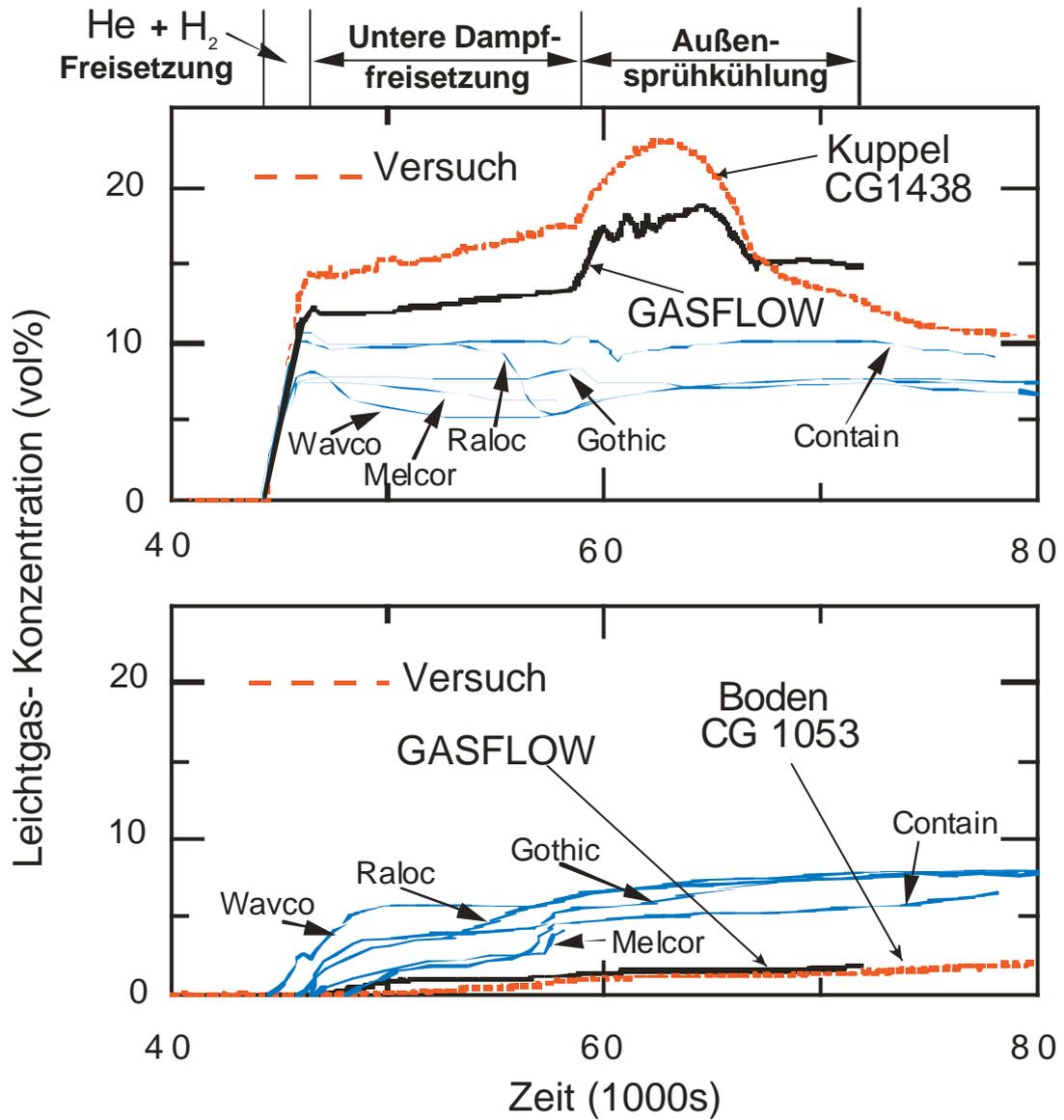
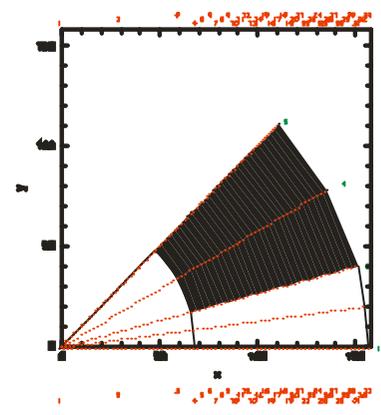
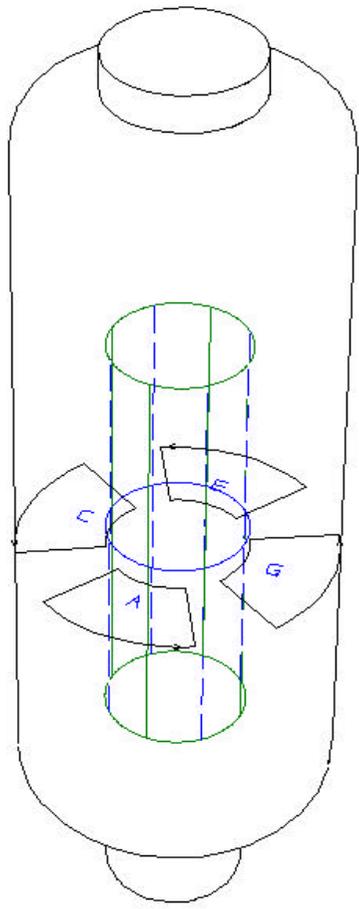


Abb.5.13.3: Vergleich gemessener und berechneter Leichtgas- Konzentrationen in HDR- Versuch E11.2. Im Gegensatz zu den Lumped Parameter Rechnungen mit WAVCO, MELCOR, RALOC, GOTHIC und CONTAIN kann GASFLOW die beobachtete Stratifikation weitgehend wiedergeben.



Quelle

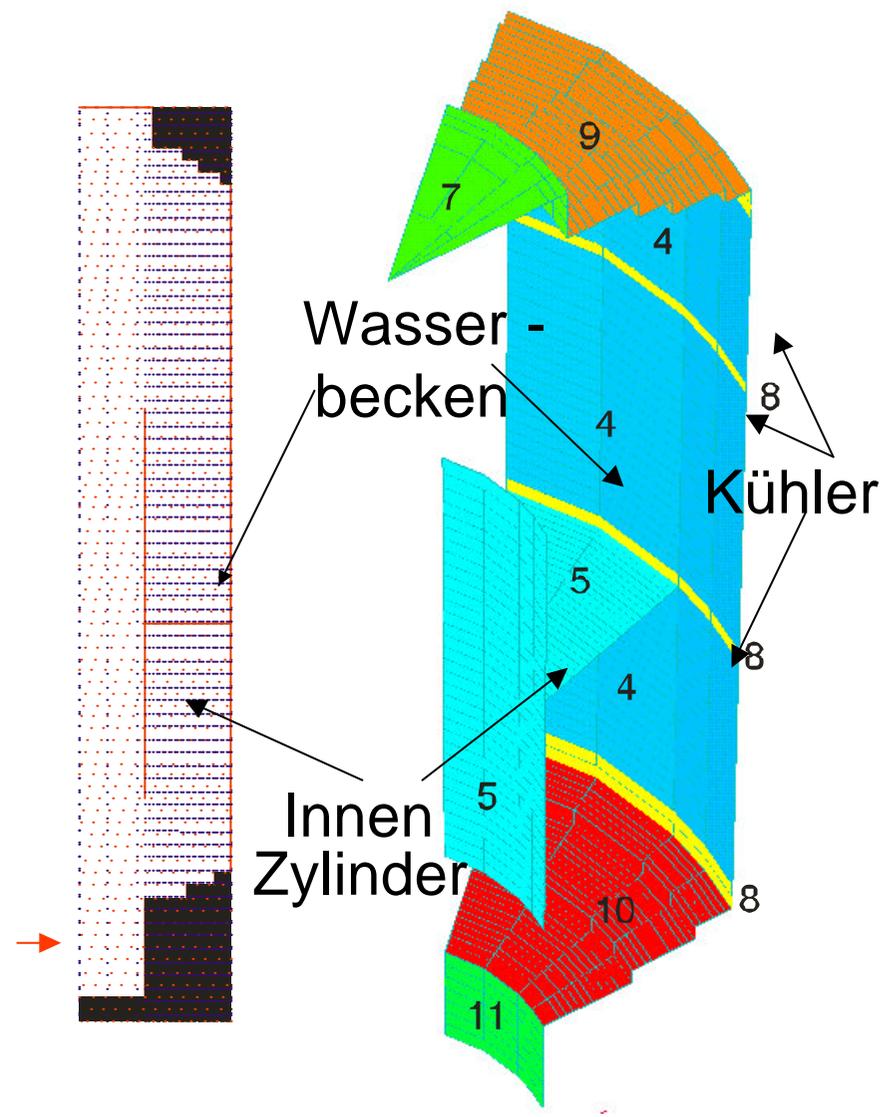


Abb.5.14.1: Aufbau und Abmessungen der ZHAF Versuchsanlage. Aus Symmetriegründen wird in GASFLOW ein 45°- Segment der Anlage mit xxx Gitterzellen simuliert.

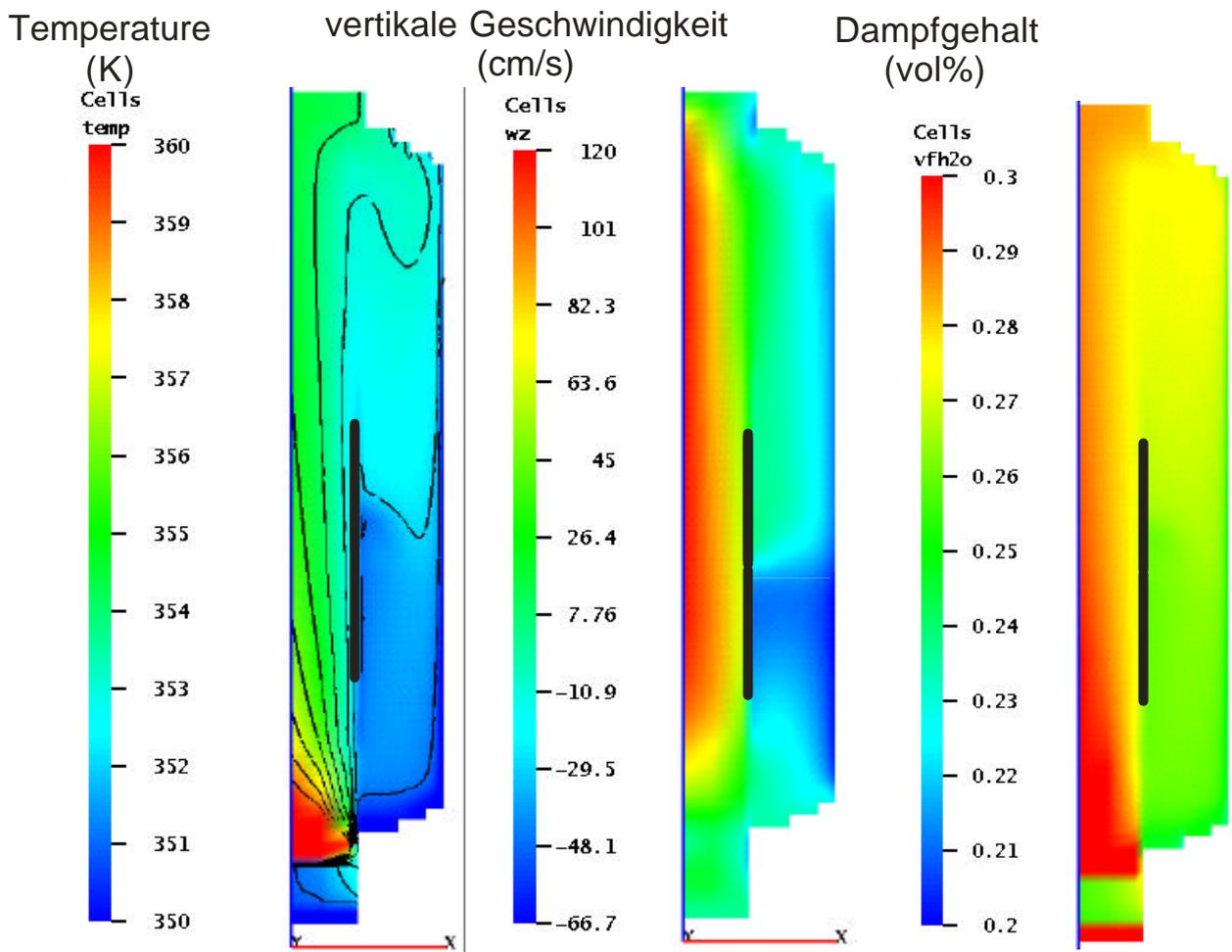


Abb.5.14.2: Berechnete 2D Temperatur-, Geschwindigkeits- und Dampfverteilungen bei Versuch THAI:

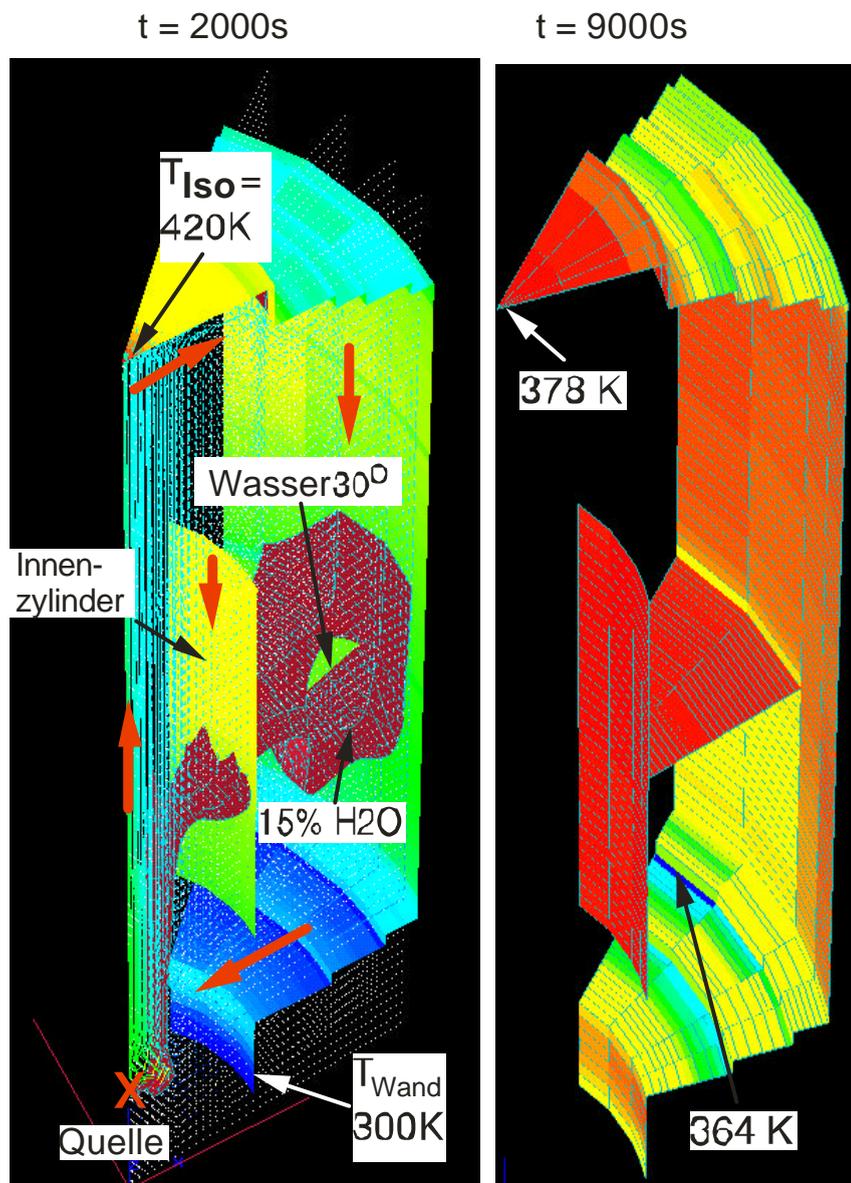


Abb.5.14.3: Berechnete 3D Strömungspfade und Temperaturverteilungen für Versuch THAI

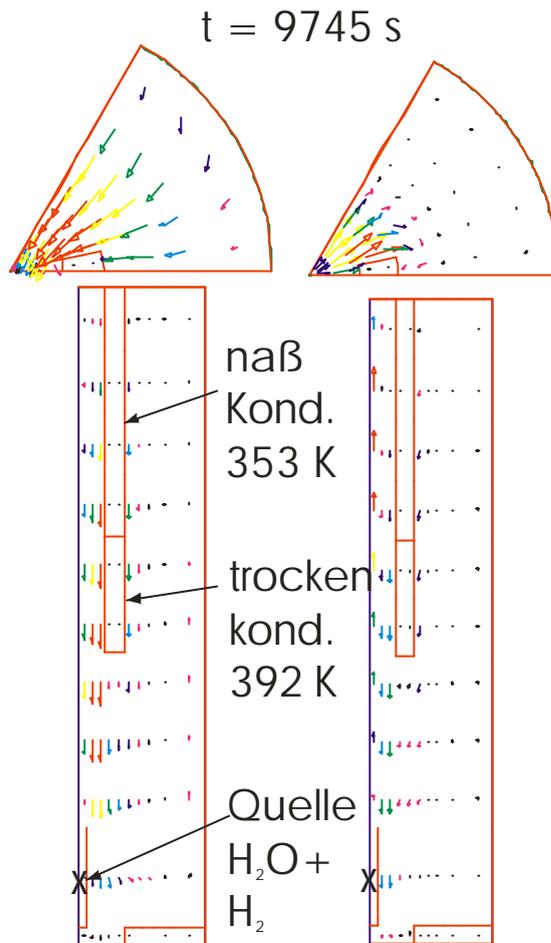


Abb.5.15.1: Geometrie und GASFLOW von PHEBUS Versuch FPTO Modell

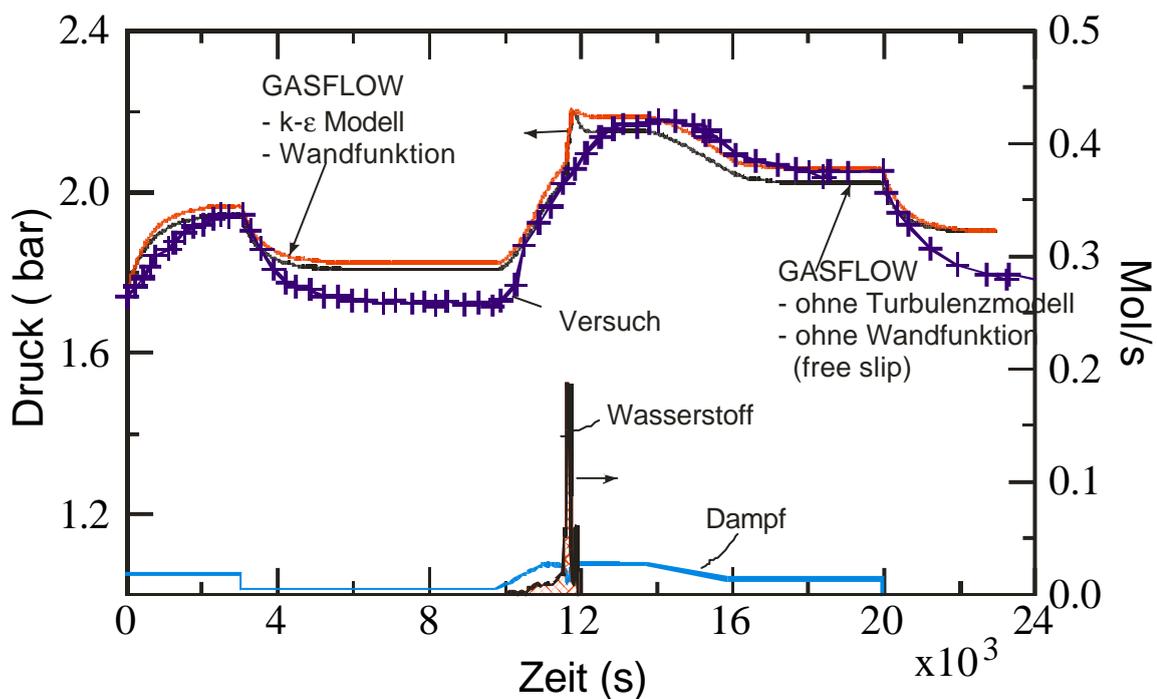


Abb.5.15.2: Einspeiseraten von Wasserstoff und Dampf im Versuch FPTO, sowie Vergleich von gemessenem und berechnetem Druckverlauf (mit und ohne  $k/\epsilon$  Turbulenzmodell)



## 6. Verifikation von Modellen für Gegenmaßnahmen

Mit dem Computercode GASFLOW können nicht nur die Verteilung von Wasserstoff und Wasserdampf in einem Containment simuliert, sondern auch die Wirksamkeit möglicher Gegenmaßnahmen analysiert und bewertet werden. Als eine denkbare Gegenmaßnahme kann z.B. die Menge des brennbaren Gases mit Hilfe von Rekombinatoren verringert werden. Weiterhin ist es möglich das brennbare Gemisch zu einem frühen Zeitpunkt kontrolliert (über Zünder) abzubrennen. Alternativ dazu kann auch ein Inertgas, beispielsweise Stickstoff oder Dampf, in das Containment eingespeist und damit die brennbare Mischung verdünnt werden. Alle diese Maßnahmen haben den Zweck, das Schadensausmaß einer Wasserstoffexplosion zu verringern, wenn nicht gar das Auftreten einer Explosion zu vermeiden.

In GASFLOW sind Modelle eingebaut, die das Abbauverhalten von Wasserstoff in einem Rekombinator beschreiben. Die folgende Abb. 6.1 zeigt beispielsweise das Einzellen-Modell für die Abbauleistung eines katalytisch wirkenden Siemens-Rekombinators und die zugehörigen Berechnungsgleichungen.

Rekombinatoren von Siemens und NIS sind in umfangreichen Versuchsprogrammen getestet worden. Die Nachrechnungen mit GASFLOW sind in den Abschnitten 6.2-6.5 dargestellt. Nachfolgend wird kurz das in GASFLOW implementierte Berechnungsmodell für einen Rekombinator diskutiert.

### Modellgleichungen für katalytische Rekombinatoren

In Abb. 6.1 ist das Einzellenmodell zur Beschreibung des katalytischen Wasserstoffabbaus in einem Rekombinator dargestellt. Die linke Abbildung zeigt gemessene Wasserstoffabbauraten als Funktion der Wasserstoffkonzentration am Einlaß. Außerdem ist die sog. Effizienz, definiert als:

$$h = 1 - \frac{y_{H_2}^{out}}{y_{H_2}^{in}}$$

mit dem Molenbruch  $y_{H_2}^{in}$  des in das Kontrollvolumen einströmenden und dem Molenbruch  $y_{H_2}^{out}$  des ausströmenden Wasserstoffs. Beispielhaft ist für eine Wasserstoffkonzentration von 3,9 vol-% die Rekombinationsrate (ca. 1,8 g/cm<sup>2</sup>/s) und die Effektivität (ca. 86%) des Rekombinators eingezeichnet.

In der Mitte von Abb. 6.1 ist die GASFLOW-Nodalisierung einer „Reko-Box“ dargestellt. Das Reco-Geometriemodell besteht immer aus einer Zelle, mit einem Einlaß von unten und einem zeitlichen Auslaß. Die restlichen vier Seiten der Zelle werden durch Wände abgeschirmt. Die Reaktionswärme  $Q_{reco}$  des Wasserstoffabbaus wird in der Mitte der Reko-Box freigesetzt und erwärmt das sie durchströmende Gas. Die Wände werden vereinfacht als adiabat angenommen. Die rechte Seite von Abb. 6.1 gibt die wichtigsten Berechnungsgleichungen wieder.

Nachfolgend werden nun die zur Verifikation des Modells durchgeführten Experimente und deren Nachrechnung mit GASFLOW in Tabellenform kurz dargestellt und erläutert. Tabelle 6.1, die identisch mit Tabelle 5.1 ist, zeigt eine Zusammenfassung der analysierten Verifikationsexperimente.



## Verifikationsproblemstellung 6.2

<b>Problembeschreibung:</b> HDR Versuch E11.8.1: Einspeisung von Luft und Wasserstoff in einem Kugelbehälter, in dem sich eine 1m x 0,4m große Rekombinatorfolie befindet.
<b>Zweck:</b> Verifikation der Modelle für Strömung und Transport sowie des Modells für den Siemens-Rekombinator.
<b>Validationskriterium:</b> Übereinstimmung des Druckverlaufs und Innenoberflächentemperaturen in der Kugel.
<b>Numerik:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- Gitter: 3D, Segmentausschnitt in Zylinderkoordinaten (11 x 5 x 11 = 605 Zellen in r-φ-z)</li><li>- Codeversion: GASFLOW 2.1.0.13</li><li>- Hardware: Sun Ultra 2 / 200, Sun OS 5.5.1</li><li>- Compiler: Edinburgh Portable FORTRAN 90 Compiler. Vers. 1.5.1.6, Opt=O3</li></ul>
<b>Ergebnisse und Schlussfolgerungen:</b> Die GASFLOW Ergebnisse stimmen tendenziell gut mit den experimentellen Daten überein.

### Kommentar:

Im Versuch E11.8.1 ist die Wirksamkeit einer sog. Rekombinatorfolie, ein Bestandteil eines Siemens-Rekombinators, getestet worden. Dazu wurde die Folie an einer innen eingebauten senkrechten Wand des 9,5 m<sup>3</sup> großen Kugelbehälters befestigt (siehe der Querschnitt in der linken Grafik von Abb. 6.2.1) und dieser anschließend mit Dampf befüllt. Die Stahlwand der Kugel hat eine konstante Temperatur von 100°C.

Zu Beginn des Versuchs wird Luft eingespeist, was den Druck im Behälter auf ca. 2,25 bar ansteigen lässt (siehe rechte Grafik von Abb. 6.2.1). Nach 800s Versuchsdauer werden dem Behälter etwa 0,3 mol/s Wasserstoff für ca. 400s zugeführt. Die gesamte Versuchsdauer beträgt ca. 3600s. In der rechten Grafik von Abb. 6.2.1 ist der Druckverlauf über der Versuchsdauer dargestellt. Zunächst ist der Druckanstieg während der Lufteinspeisung zu erkennen. Anschließend ist bis zum Ende der Wasserstoffeinspeisung ein weiterer Druckaufbau zu verzeichnen. Bedingt durch die Rekombinationswirkung (aus 1 mol H<sub>2</sub> und 0,5 mol O<sub>2</sub> ergibt sich 1 mol H<sub>2</sub>O) sinkt der Druck zu höheren Zeiten hin wieder ab.

GASFLOW gibt diesen Druckverlauf bis zum Ende der Lufteinspeisung gut wieder. Ab da unterschätzt der Code den Druck zunächst und überschätzt ihn von etwa 900s Versuchsdauer bis zum Ende.

In Abb. 6.2.2 sind links lokale Wasserstoffkonzentrationen und rechts berechnete Folien-Temperaturen dargestellt. Die Grafik im linken oberen Teil von Abb. 6.2.2 zeigt Oberflächentemperaturen der Kugelschale, während die Grafik auf der rechten oberen Seite die Temperatur der Rekombinatorfolie und die Verteilung des

Wasserstoffs in der Kugel bei 1100 s Problemzeit wiedergibt. Unterhalb dieser Grafiken sind insgesamt zehn kleinere Diagramme gegeben, wobei die linken fünf gemessene und mit GASFLOW berechnete Wasserstoffkonzentrationen an verschiedenen Stellen des Kugelvolumens dokumentieren. Die fünf Diagramme auf der rechten Seite zeigen den Temperaturverlauf über der Versuchszeit. Die helleren Punkte kennzeichnen jeweils die experimentellen Daten, die dunkleren Punkte die GASFLOW-Werte. Insgesamt kann eine qualitativ gute Übereinstimmung festgestellt werden, wobei allerdings lokal größere Abweichungen auftreten [6.1].

Die Abweichungen können von den zum Teil unbekanntem thermischen Randbedingungen herrühren, wie z.B. den Wärmeverlusten an der nicht isolierten Einstiegs Luke, die einen Einfluß auf die Konvektionsströmungen in der Kugel und den Gastransport zu und von der Rekofole haben.

## **Referenzen**

- [6.1] P. Royl, G. Necker, J. R. Travis: GASFLOW Simulation of Hydrogen Recombination with Radiation Transport from Catalytic Foils in the Recombiner Foil Test HDR E11.8.1, Procs Jahrestagung Kerntechnik, Dresden, May 15-17, 2001, Germany

### Verifikationsproblemstellung 6.3

**Problembeschreibung:**

Versuch MC-3: Einspeisung von Wasserstoff in das mit Luft und Dampf gefüllte Battelle-Modell-Containment (BMC, vgl. auch Verifikationsproblem 5.6), in dem sich ein NIS-Rekombinator befinden.

**Zweck:**

Verifikation der Modelle für Strömung und Transport sowie des Modells für den NIS-Rekombinator.

**Validationskriterium:**

Übereinstimmung der Wasserstoffkonzentration am Eingang und Ausgang des Rekombinators.

**Numerik:**

- Gitter: 3D, Segmentausschnitt in Zylinderkoordinaten ( $11 \times 5 \times 11 = 605$  Zellen in  $r-\phi-z$ )
- Codeversion: GASFLOW 2.1.0.13
- Hardware: Sun Ultra 2 / 200, Sun OS 5.5.1
- Compiler: Edinburgh Portable FORTRAN 90 Compiler. Vers. 1.5.1.6, Opt=O3

**Ergebnisse und Schlussfolgerungen:**

Die GASFLOW Ergebnisse stimmen tendenziell mit den experimentellen Daten überein.

**Kommentar:**

Im Versuch MC-3 wird Wasserstoff in das Battelle-Modell-Containment (BMC, vgl. auch Verifikationsproblem 5.6) eingespeist, das mit einer Luft-Wasserdampf-Atmosphäre gefüllt ist und in dem sich ein NIS-Rekombinator befindet. Die Abb. 6.3.1 zeigt eine 3D-Darstellung der GASFLOW-Nodalisation bei einer Versuchszeit von 10.000 s, wobei zur besseren Übersicht hier die Außenwand entfernt wurde. Deutlich ist zu erkennen, dass die Wasserstoffquelle und der Rekombinator nicht im selben Raum angeordnet sind, so dass der Wasserstoff zunächst konvektiv über verschiedenen Pfade, die schematisch in der oberen Grafik von Abb. 6.3.2 gegeben sind, zur Abbauposition strömt. Unterhalb dieser Skizze mit den Strömungspfaden sind zum einen die integrale Quellstärke von Wasserstoff als auch die  $H_2$ -Masse im Raum, in dem sich die Quelle befindet, dargestellt. Darunter befindet sich ein Diagramm, welches die volumetrische Wasserstoffkonzentration am Reko-Ein- und -ausgang zeigt. Die Messwerte sind gestrichelt, die GASFLOW-Werte sind mit einer durchgezogenen Linie gekennzeichnet [6.2]. Während der ersten Einspeisung (rampenförmiger Verlauf im oberen Diagramm von Abb. 6.5.2) steigt auch die Wasserstoffkonzentration am Reko-Eingang auf etwa 3,4 vol-%. Der katalytische Abbau von Wasserstoff im Rekombinator erfolgt nicht vollständig, wie der Konzentrationsverlauf am Reko-Ausgang zeigt. Zwischen der ersten und der zweiten Einspeisung wird der am Rekombinatoreingang vorliegende Wasserstoff bis auf fast 1 vol-% abgebaut. In der zweiten Einspeisephase steigt die Konzentration kurzfristig

wieder bis auf etwa 3,8 vol-% an, anschließend sinkt sie bis zum Versuchsende bei etwa 4,5 h wieder auf ca. 1 vol-% ab.

Der Wasserstoffaufbau und die Rekombinatorwirkung kann von GASFLOW tendenziell gut simuliert werden. Bis zum Ende der ersten Einspeiserampe beschreibt GASFLOW die Konzentration am Eintritt in den Reko sehr gut; während der ersten Abbauphase überschätzt GASFLOW die Konzentration um etwa 0,5 vol-% absolut. Am Reko-Austritt ist eine qualitativ zufrieden stellende Übereinstimmung mit den Messdaten festzustellen, die selbst experimentellen Unsicherheiten unterliegen.

## Referenzen

- [6.2] P. Royl, J. R. Travis, E. A. Haytcher, and H. Wilkening, "Analysis of Mitigating Measures during Steam/Hydrogen distributions in Nuclear Reactor Containments with the 3D Field Code GASFLOW," presented at the OECD/NEA CSNI Workshop on the Implementation of Hydrogen Mitigation Techniques, Winnipeg, Canada, May 13–15, 1996. HDR E11.2 , MC3

## Verifikationsproblemstellung 6.4

**Problembeschreibung:**

In den BMC-Versuchen Gx4 und Gx6 wird das Abbauverhalten eines Siemens-Rekombinators im Battelle-Modelle Containment analysiert. Im Versuch Gx7 wird das sog. duale Konzept untersucht, d.h. die Wirksamkeit des Wasserstoffabbaus eines Rekombinators in Kombination mit einem Funkenzünder.

**Zweck:**

Verifikation der Modelle für Strömung und Transport, sowie Rekombinatoren und Zünder

**Validationskriterium:**

Übereinstimmung des Druckverlaufs im Containment über der Zeit.

**Numerik:**

- Gitter: 3D, Segmentausschnitt in Zylinderkoordinaten ( $11 \times 5 \times 11 = 605$  Zellen in  $r-\phi-z$ )
- Codeversion: GASFLOW 2.1.0.13
- Hardware: Sun Ultra 2 / 200, Sun OS 5.5.1
- Compiler: Edinburgh Portable FORTRAN 90 Compiler. Vers. 1.5.1.6, Opt=O3

**Ergebnisse und Schlussfolgerungen:**

Die GASFLOW Ergebnisse stimmen tendenziell mit den experimentellen Daten überein.

**Kommentar:**

In den BMC-Versuchen Gx4 und Gx6 wird das Abbauverhalten eines Siemens-Rekombinators im Battelle-Modelle Containment (BMC) analysiert [6.3]. In Gx7 wird in der selben Versuchsanlage das sog. duale Konzept, d.h. ein Rekombinator und ein Funkenzünder, untersucht. Das duale Konzept arbeitet wie folgt: Bei hohen Freisetzungsraten kann die Leistungsfähigkeit der Rekombinatoren überfordert und die Zündgrenze kurzfristig überschritten werden. Dann beseitigen die Zünder den überschüssigen Wasserstoff durch Verbrennung, bevor unzulässig hohe Wasserstoffkonzentrationen auftreten können. Verbleibende Wasserstoffmengen und später mit geringer Rate freigesetzter Wasserstoff können wieder katalytisch im Rekombinator abgebaut werden, selbst bei dampfinertisierten Zuständen.

Der Unterschied zwischen den Versuch Gx4 und Gx6 liegt in der Schichtung in den Versuchsräumen. Bei Gx4 befinden sich ca. 25% Dampf im oberen und ca. 15% Dampf im unteren Versuchsraum, die aufgrund der resultierenden unterschiedlichen Gasdichte eine geschichtete Atmosphäre verursachen. Beim Versuch Gx6 ist keine Atmosphärensichtung erkennbar, hier unterstützen Ventilatoren die Konvektionsströmung. Die resultierenden Ausgleichsvorgänge zwischen den unteren und oberen Räumen sind weitaus stärker ausgeprägt, als beim Versuch Gx4.

Diese unterschiedlichen Versuchsrandbedingungen spiegeln sich in den Quellen wieder, die in Abb. 6.4.1 aufgetragen sind. Die drei Diagramme zeigen, wann Wasserstoff oder Dampf in welchen Raum eingespeist wird. Im Versuch Gx4 strömt zusätzlich zum Dampf noch Luft ins Containment, für den Versuch Gx6 ist der

Zeitpunkt mit angeschalteten Ventilatoren, die für eine gute Durchmischung der Atmosphäre verantwortlich sind, eingezeichnet, und im Versuch Gx7 sind jene Zeitintervalle gekennzeichnet, in denen die Funkenzünder aktiv sind.

Die resultierenden Wasserstoffkonzentrationen bei den Versuchen Gx4 und Gx6 sind in Abhängigkeit von der Versuchsdauer in Abb. 6.4.2 dargestellt. Die Nachrechnung mit GASFLOW ist dabei schwarz, die gemessenen Werte rot eingetragen. Der Vergleich zeigt eine durchweg gute Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment.

Die Wasserstoffkonzentration und die Brennbarkeitsgrenze in verschiedenen Räumen im Versuch Gx7 ist in Abb. 6.4.3 gegeben. Wiederum sind die Messwerte rot, die GASFLOW-Ergebnisse schwarz dargestellt. Deutlich ist der Abbau des Wasserstoffs durch die Funkenzünder ersichtlich, wodurch die  $H_2$ -Konzentration wieder auf die Brennbarkeitsgrenze (4 vol-%) reduziert wird. Bis auf die Versuchsphase beim Zünden wird die Wasserstoffkonzentration sehr gut von GASFLOW reproduziert. Während des Zündens unterschätzt GASFLOW die verbrannte Menge und berechnet daher zu hohe Wasserstoffkonzentrationen.

Eine 3D-Darstellung der GASFLOW-Ergebnisse des Gx7-Versuchs ist in Abb. 6.4.4 dargestellt. Besonderes Augenmerk wird auf den Raum R5 bei  $t=5,26$  h (linke Zeichnung), in dem sich der Reko befindet, und auf den Raum R6 mit dem Zünder bei  $t=8,99$ h gelegt (rechte Zeichnung). Zu einem frühen Zeitpunkt (5,26h) wird der meiste Wasserstoff über den Rekombinator abgebaut. Trotz recht hoher  $H_2$  - Konzentrationen zündet das Gas nicht, weil die Zündgrenze wegen des Dampfgehalts über der erforderlichen Wasserstoffkonzentration liegt (vgl. dazu das oberste Diagramm in Abb. 6.4.3). In der späten sog. Zündphase wird der Wasserstoff einfach verbrannt und der Überschuß katalytisch abgebaut.

Zusammenfassend kann eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den Experimenten und den GASFLOW-Ergebnissen festgestellt werden.

## Referenzen

[6.3] T. Kanzleiter. Versuche zur Wirksamkeit von Wasserstoffgegenmaßnahmen in einer Mehrraumgeometrie. Abschlußbericht Nr. B1eV-R67.036-01; Battelle Ingenieurtechnik GmbH, Eschborn, Nov. 1991.

## Verifikationsproblemstellung 6.5

**Problembeschreibung:**

Die BMC-Versuche Rx4 und Rx5 dienen zur Untersuchung des Einflusses des Sumpfes auf die Wasserstoff-Durchmischung und die Ausbildung von Konvektionsströmungen in DWR-Containments.

**Zweck:**

Verifikation der Modelle für Strömung, Transport und Sumpferdampfung.

**Validationskriterium:**

Übereinstimmung des zeitlichen Verlaufs der Temperatur und der Wasserstoffkonzentration an verschiedenen Stellen des Containments.

**Numerik:**

- Gitter: 3D, Segmentausschnitt in Zylinderkoordinaten ( $11 \times 5 \times 11 = 605$  Zellen in  $r-\phi-z$ )
- Codeversion: GASFLOW 2.1.0.13
- Hardware: Sun Ultra 2 / 200, Sun OS 5.5.1
- Compiler: Edinburgh Portable FORTRAN 90 Compiler. Vers. 1.5.1.6, Opt=O3

**Ergebnisse und Schlussfolgerungen:**

Die GASFLOW Ergebnisse stimmen gut mit den experimentellen Daten überein.

**Kommentar:**

Die BMC-Versuche Rx4 und Rx5 dienen zur Untersuchung des Einflusses des Sumpfes auf die Wasserstoff-Durchmischung und die Ausbildung von Konvektionsströmungen in DWR-Containments [6.4, 6,5]. Zwei Schemazeichnungen, die für jeden Versuch einen Schnitt des BMC zeigen, sind in Abb. 6.5.1 dargestellt. Sie dokumentieren die unterschiedlich gewählten Randbedingungen der Dampfeinspeisung in das Containment in den beiden Versuchen.

Im Versuch Rx4 verdampft Wasser aus einem im zentralen Raum des BMC-Containment liegenden Sumpf, dessen Temperatur kontrolliert variiert wird (siehe die obere Grafik von Abb. 6.5.2). Die Atmosphäre des BMC besteht aus Luft bei Normalbedingungen. Der Wasserstoff gelangt durch den Sumpf in das Containment.

Im Versuch Rx4 steigt die Mischung aus feuchter warmer Luft und Wasserstoff im zentralen Raum zur Decke und wird dort zu den äußeren Räumen umgelenkt. Sobald die feuchte Luft Kontakt zu den kalten Betonwänden erhält, kondensiert der Dampf an der Oberfläche. Die nach der Kondensation spezifisch schwerere  $H_2$ -Luft Mischung sinkt entlang der Außenwände nach unten, wo sie durch Strömungsöffnungen wieder in den zentralen Raum gelangt. Die Sumpferdampfung und die Kondensation an den Wänden fördern die Ausbildung einer Konvektionswalze (siehe linke Schemazeichnung von Abb. 6.5.1) und dadurch die homogene Verteilung des Wasserstoffs im gesamten BMC. Die untere Grafik von Abb. 6.5.2 zeigt die Wasserstoffkonzentration und die relative Luftfeuchtigkeit im Ringraum. Die entsprechende Meßposition ist in Abb. 6.5.1 mit einem „H“ gekennzeichnet. Wie das Diagramm 6.5.2 unten verdeutlicht, besteht eine sehr gute

Übereinstimmung zwischen den gemessenen und den mit GASFLOW berechneten Werten.

Der Unterschied des Versuchs Rx5 zu Rx4 liegt in den unterschiedlichen Randbedingungen. Bei Rx5 erfolgt zunächst eine reine Dampfeinspeisung (vgl. Abb. 6.5.3 oben), was die Atmosphäre und die Wände des Containments erwärmt. Die Wasserstoffeinspeisung erfolgt erst relativ spät, ca. 8,5 nach Beginn des Versuchs. Bei diesem Versuch ist nur eine sehr schwache Konvektionsströmung beobachtet worden. Eine mit Wasserdampf angereicherte Atmosphäre befindet sich unter der Kuppel des BMC. Der einströmende Wasserdampf kondensiert zwar noch an den Wänden, aber nicht in dem Maße, als dass er eine Konvektionswalze wie beim Versuch Rx4 verursacht.

Der Wasserstoff wird bei diesem Versuch in zwei Phasen eingespeist. Wie an den drei unteren Diagrammen in Abb. 6.5.3 zu erkennen ist, genügt schon ein relativ kurzer Zeitraum von einigen Minuten, um den Wasserstoff von der Einspeisestelle (Messposition 1) in die Kuppel (Position 2) und den Ringraum (Position 3) zu leiten. Die Konzentrationsunterschiede an den drei Messpositionen sind zwar während der Einspeiseperiode signifikant, doch ist eine nahezu homogene Verteilung des Wasserstoffs kurz nach Ende der jeweiligen Einspeisung erkennbar. An allen drei Messpositionen werden dann übereinstimmend zunächst ca. 1 vol-%, und nach der zweiten Einspeisung 2 vol-% Wasserstoff gemessen.

Der Versuch Rx5 hat gezeigt, dass schon eine schwache Konvektionsströmung genügt, um eine homogene Verteilung des Wasserstoffs im Containment zu erzielen. Eine Anreicherung des Wasserstoffs unter der Kuppel des BMC ist nicht festgestellt worden. Als Antriebsmechanismus der Konvektionswalze kann auch hier die Kondensation des Dampfes und dann das langsame Absinken der (jetzt ohne Dampf) spezifisch schwereren Atmosphäre angenommen werden.

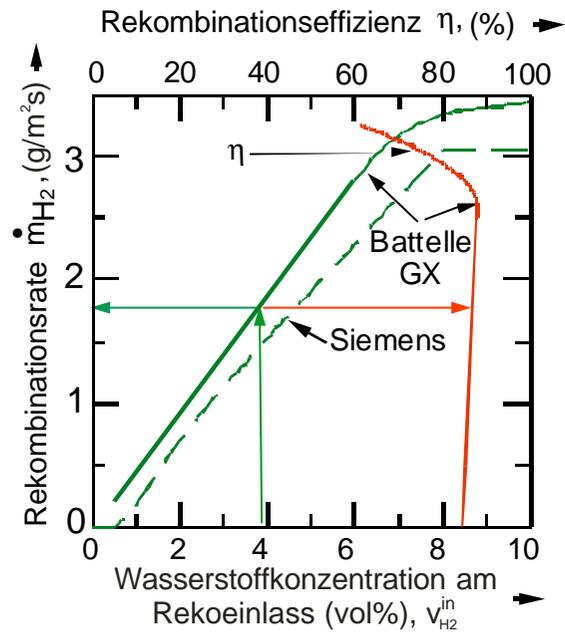
GASFLOW gibt die Messwerte des Versuchs Rx5 im Verlauf sehr gut wieder, nur überschätzt der Code die Temperaturmesswerte um ca. 10°C. Eine weitaus bessere Übereinstimmung ist bei der Wasserstoffkonzentration erkennbar, wo GASFLOW nur während der Einspeisephase die Messwerte um max. 0,5 vol-% absolut überschätzt.

## Referenzen

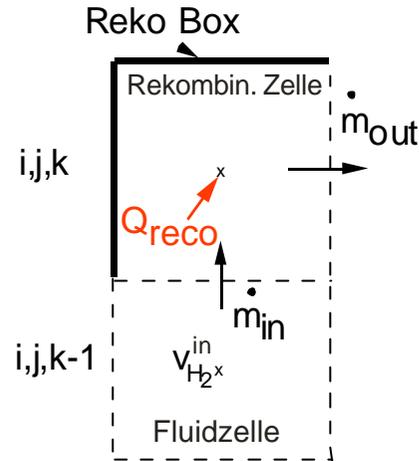
[6.4] P. Royl, W. Breitung, J.R. Travis, H. Wilkening, L. Seyffarth: Simulation of Hydrogen Transport with Mitigation Using the 3D Field Code GASFLOW. Proceedings of the 1997 International Meeting on Advanced Reactors Safety, Orlando, Florida, June 1-5, 1997, pp. 578-588.

[6.5] K. Petersen, H. Pamme, L. Seyffarth, L. Wolf: Wasserstoff-Durchmischung durch Naturkonvektion in DRW-Containments. Atomwirtschaft 11, Nov. 1994, S. 758 ff.

### Gemessene Korrelationen



### GASFLOW- Gitter



### Berechnungsgleichungen

- limitierte Gaskonzentration (H<sub>2</sub> oder O<sub>2</sub>)

$$c_{H_2} = \min \left( v_{H_2}^{in}, \frac{v_{O_2}}{(0.5 * \eta)} \right) / 100$$

- asymptotische Gasgeschwindigkeit

$$v_0 = \frac{\dot{m}_{H_2}}{(\eta * c_{H_2})} * \frac{R_{H_2} * T_{in}}{p} =$$

- transiente Anlaufgeschwindigkeit

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{\tau} * (v_0 - v), \tau = 10 \text{ s}$$

- Massendurchsatz

Eintrittsfläche x Eintrittsgeschw. x Gasdichte

$$\dot{m}_{in} = A \cdot v \cdot \bar{\rho}$$

-Effizienz

$$\eta = 1 - \frac{v_{H_2}^{out}}{v_{H_2}^{in}}$$

Abb.6.1: Einzellen- Modell für die Abbauleistung eines katalytischen Siemens - Rekombinators

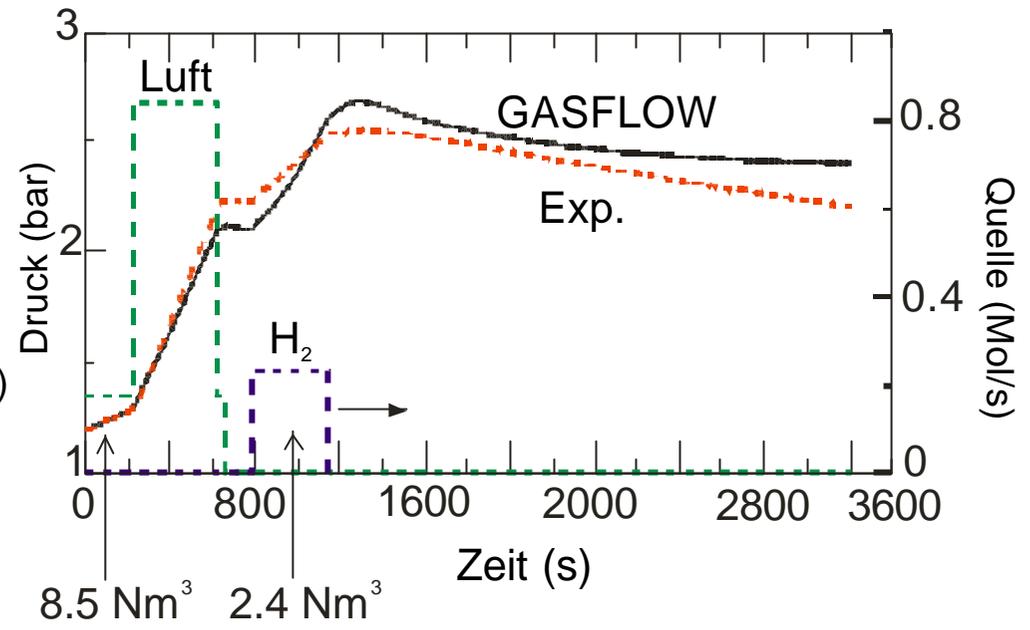
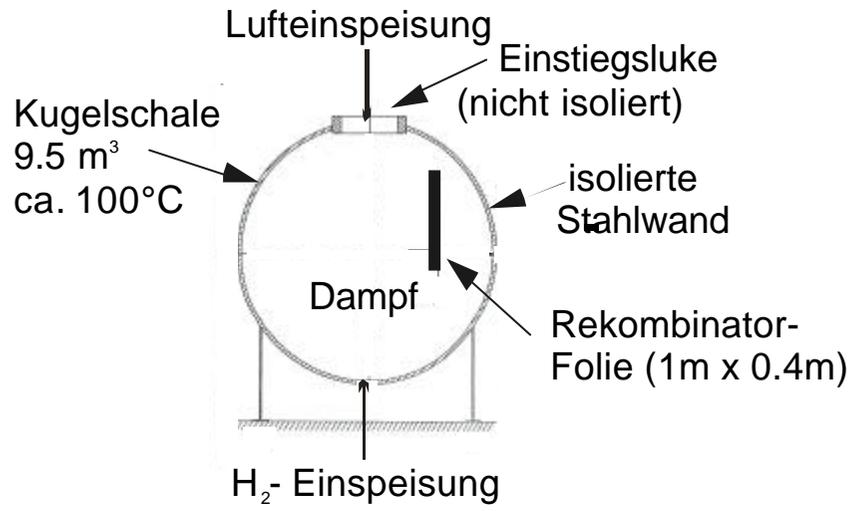
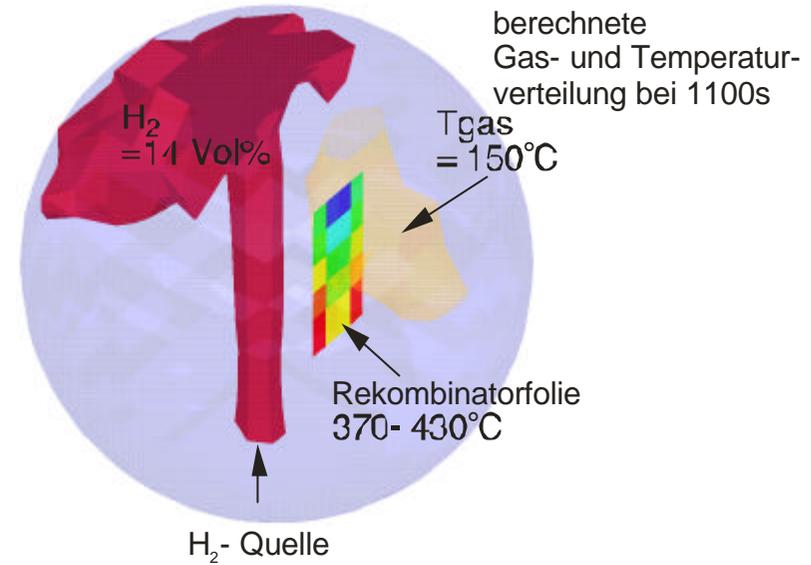
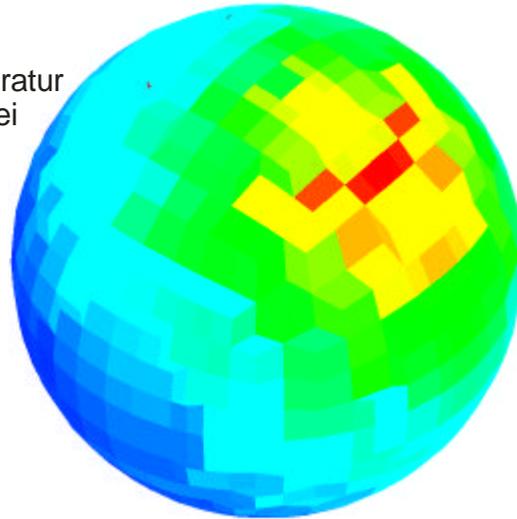
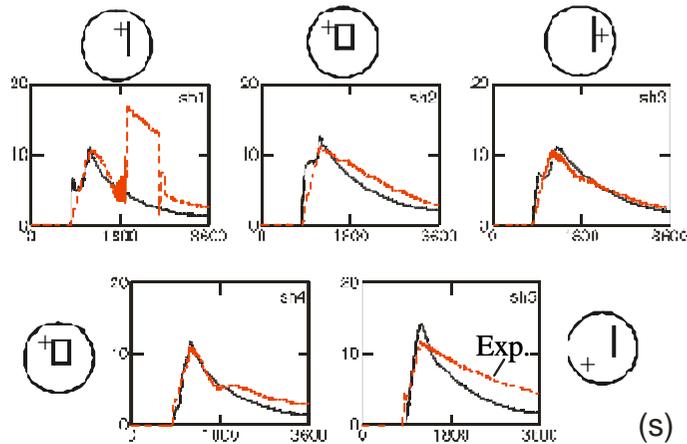


Abb.6.2.1: GASFLOW Simulation von HDR Versuch E11.8.1 mit Einspeisung von Luft und Wasserstoff in eine Dampfatmosfera.

Berechnete  
Oberflächentemperatur  
der Kugelschale bei  
1100 Sekunden  
(100-110°C)



lokale Wasserstoffkonzentrationen (vol%)



lokale Folientemperatur (°C)

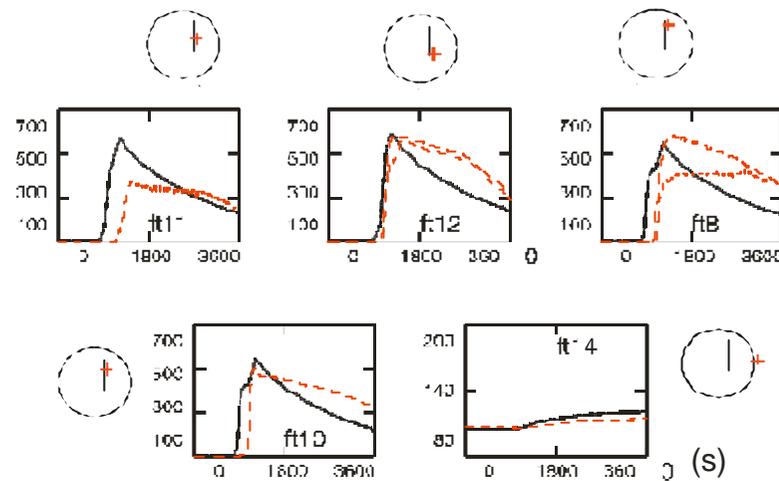


Abb.6.2.2: Vergleich von gemessenen und berechneten Daten für Versuch E11.8.1 mit einer katalytisch aktiven Folie in einer H<sub>2</sub>-Luft- Dampf-Atmosphäre

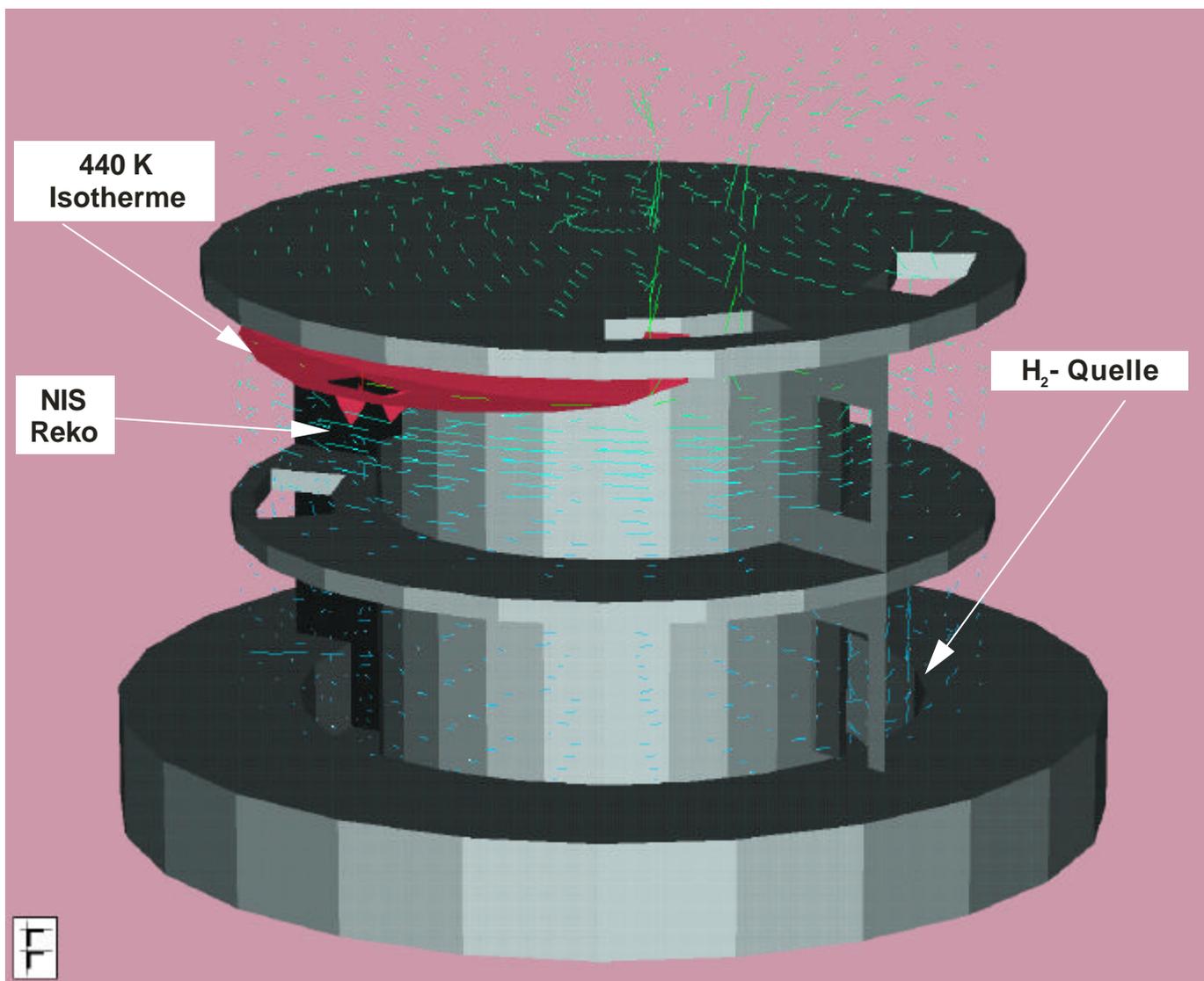


Abb.6.3.1: GASFLOW Simulation von Battelleversuch MC-3 mit NIS Rekombinatoren. Zur besseren Darstellung der Ergebnisse ist die äußere Zylinderwand des Containments in dieser Ansicht entfernt (Zeit=10.000s)

### Abwicklung der zylindrischen BMC Geometrie

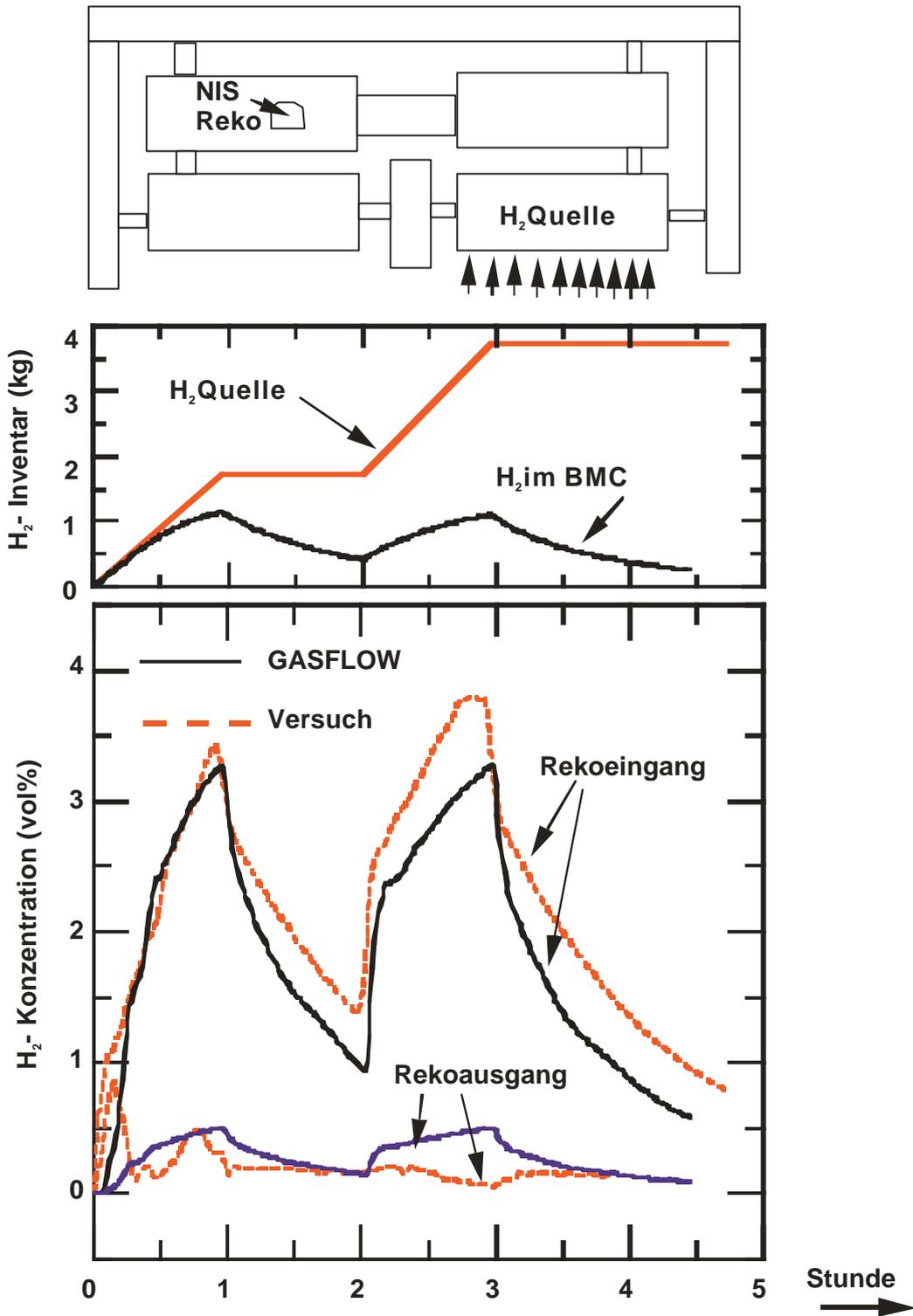


Abb.6.3.2: Prinzipieller Aufbau von BMC Versuch MC3, sowie Vergleich von gemessenen und berechneten Daten.

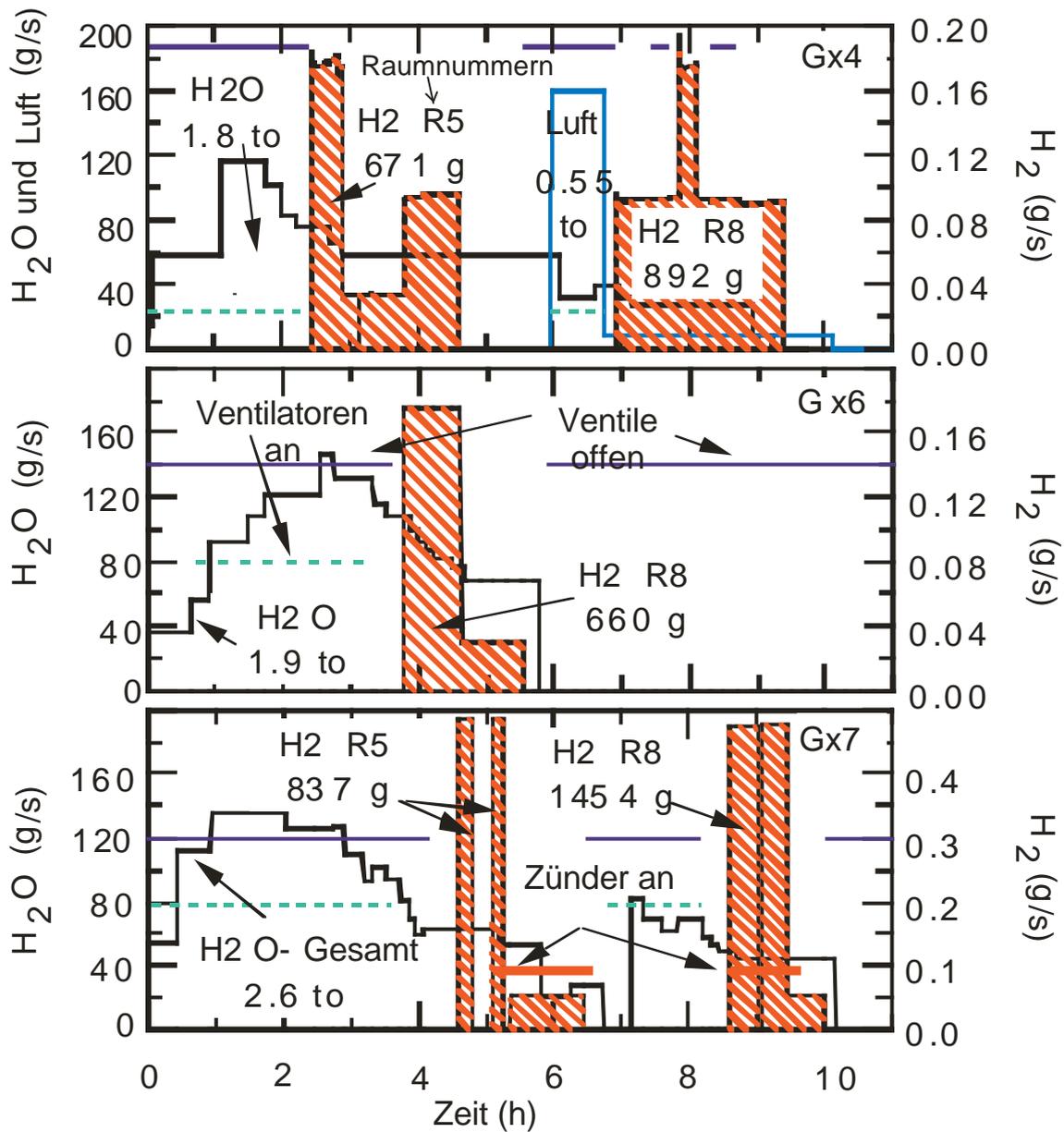


Abb.6.4.1: Einspeiseraten für Dampf, Luft, und Wasserstoff sowie weitere Versuchsparameter bei den BMC- Versuchen Gx4, Gx6 und Gx7 zur Untersuchung von Siemens Rekombinatoren und Zündern.

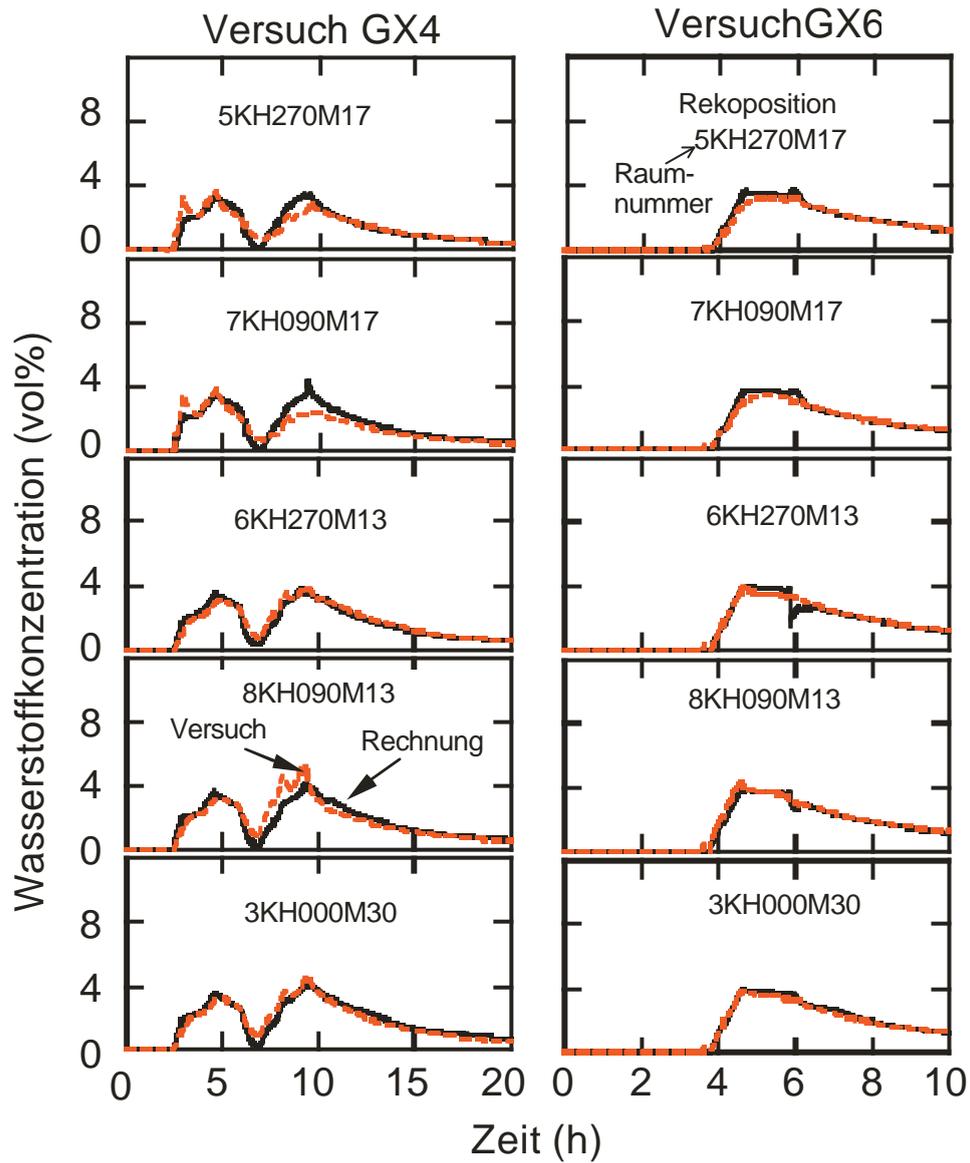


Abb.6.4.2: Vergleich von gemessenen und mit GASFLOW berechneten lokalen Wasserstoffkonzentrationen in den BMC Versuchen Gx4 und Gx6.

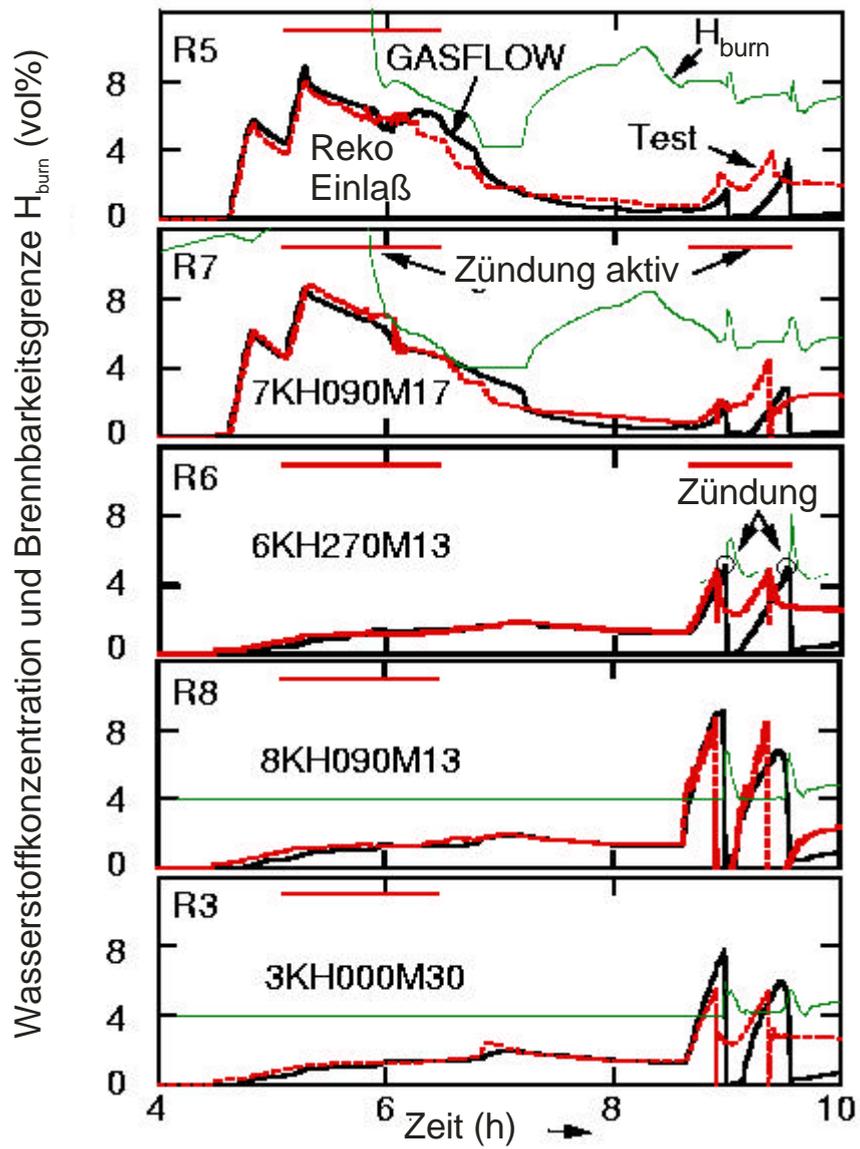
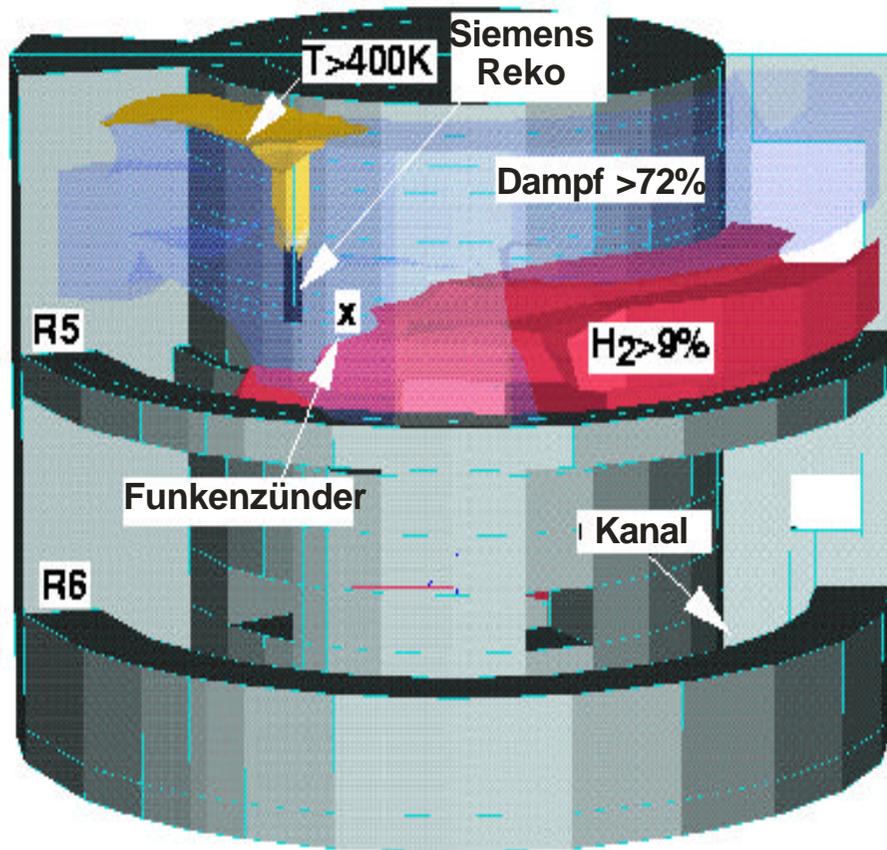
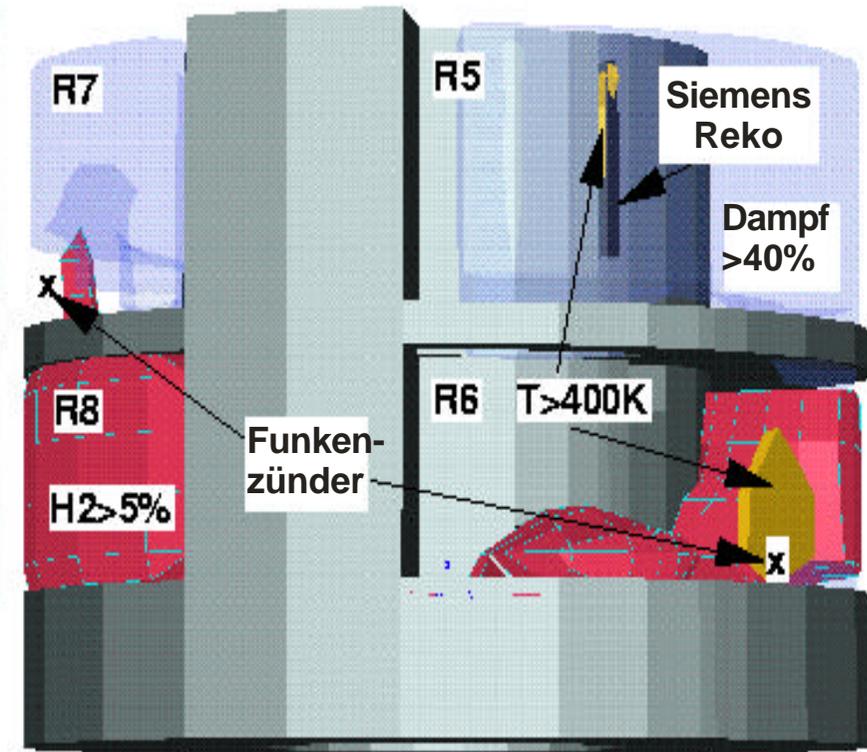


Abb.6.4.3: Vergleich von gemessenen und mit GASFLOW berechneten Daten für BMC Versuch Gx7 mit kombiniertem Einsatz von Rekombinatoren und Zündern (Duales Konzept).



**Rekombination im R5 (5.26 Std)**



**Zündung im R6 (8.99 Std)**

Abb.6.4.4: 3D- Darstellung von GASFLOW Ergebnissen aus der Rekombinationsphase und Zündphase des Gx7-Versuchs.

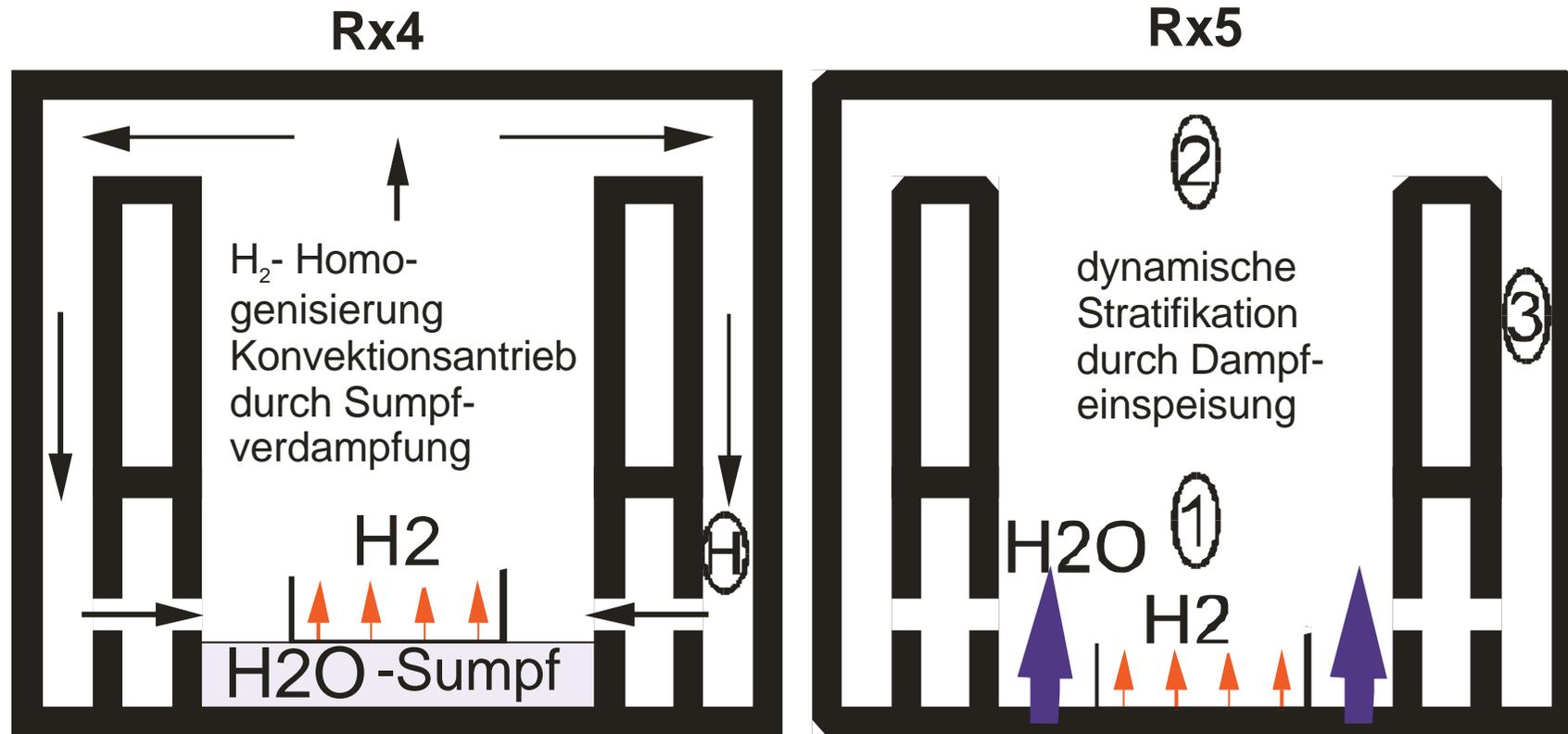


Abb.6.5.1: Prinzipskizze des Battelle- Modell- Containments (BMC) und Zielsetzung der Versuche Rx4 und Rx6

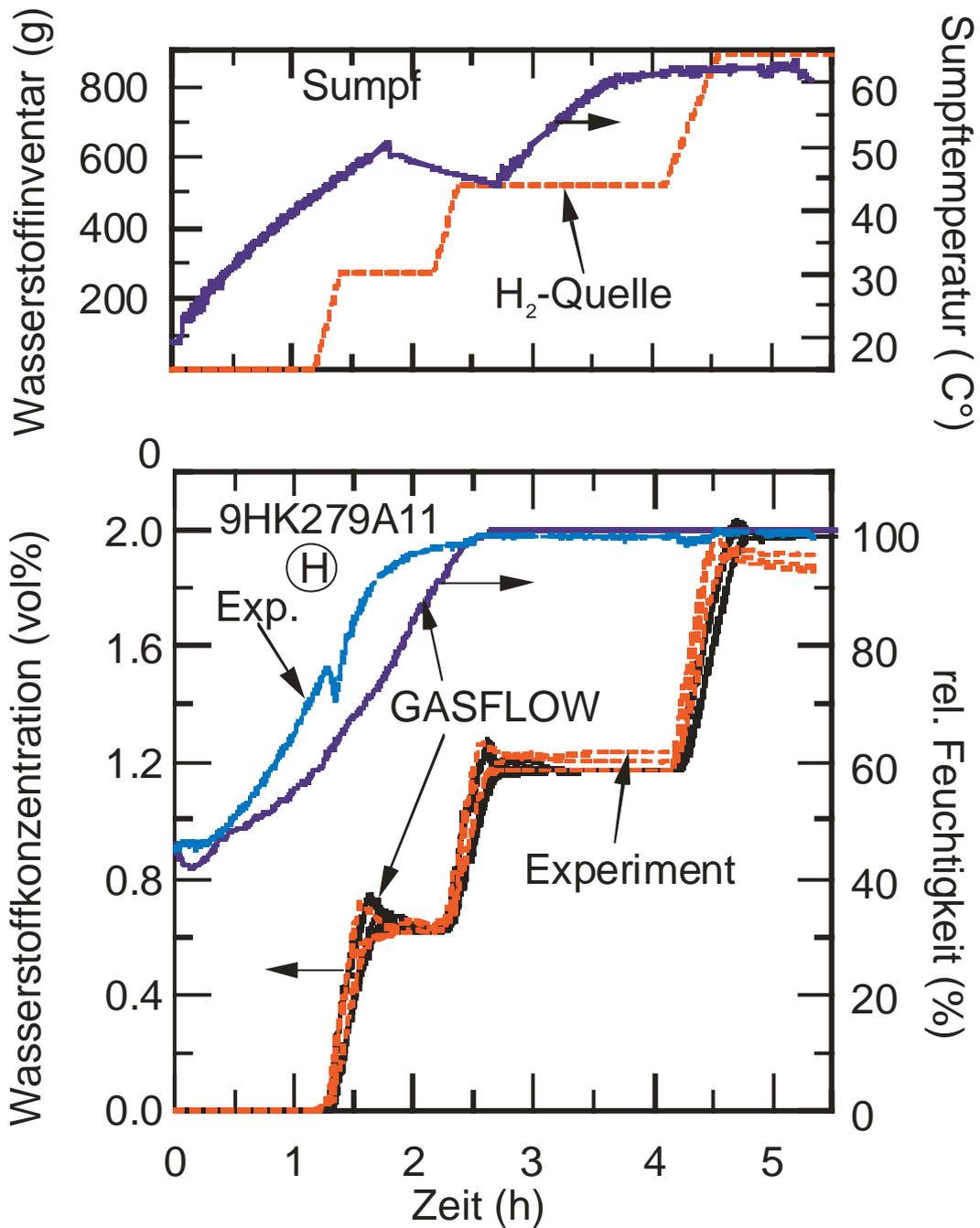


Abb.6.5.2: Versuchparameter im BMC Versuch Rx4 (oben), sowie Vergleich von gemessenen und berechneten lokalen Wasserstoffkonzentrationen und Feuchtigkeiten. H=Messposition in Abb. 6.5.1.

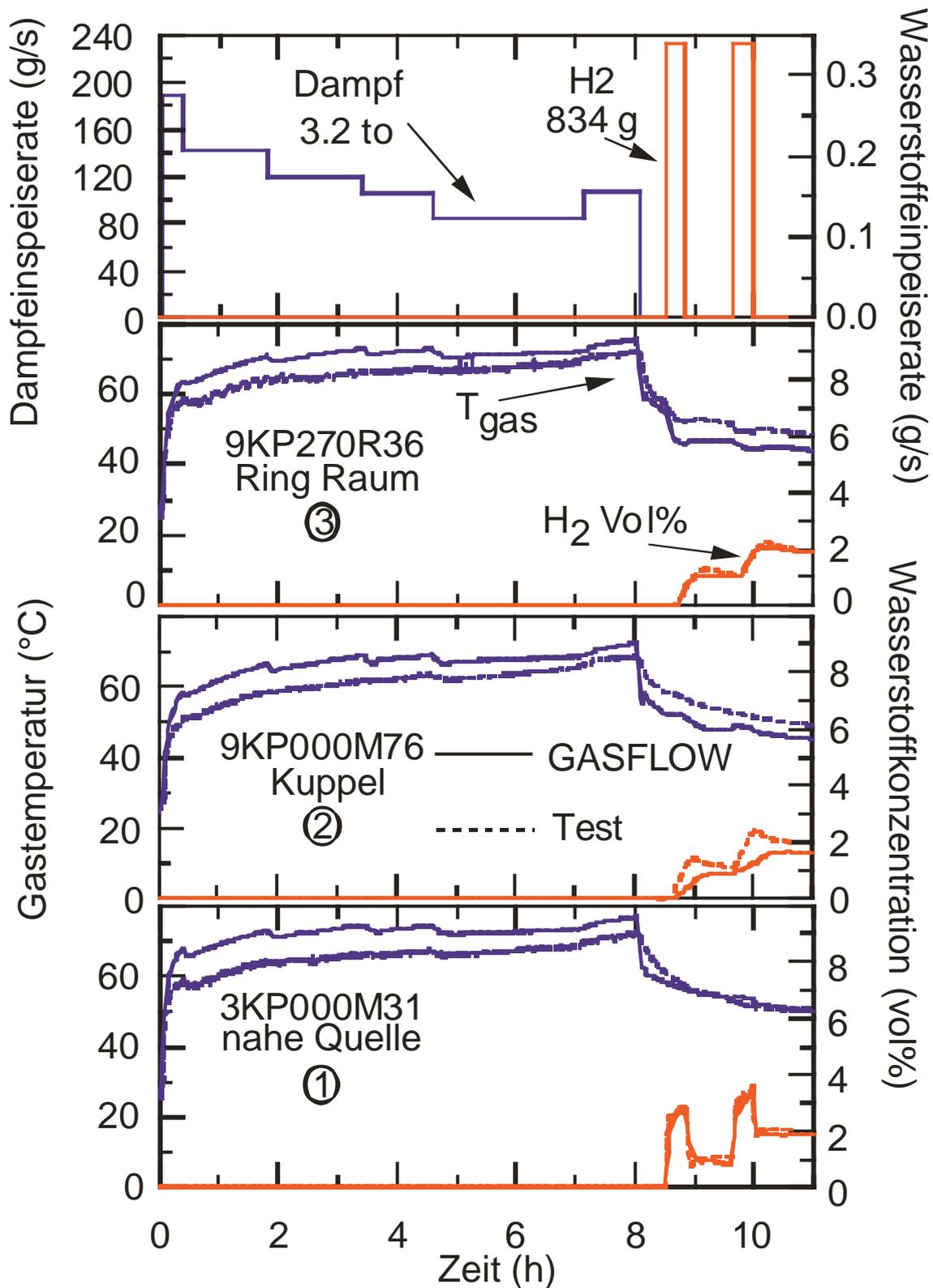


Abb.6.5.3: Einspeiseraten für BMC Versuch Rx5, sowie Vergleich von gemessenen und berechneten Gastemperaturen und Wasserstoffkonzentrationen. 1,2,3 = Detektorposition aus Abb. 6.5.1.

## 7. Risikopotenzial

Verbrennungsvorgänge in Wasserstoff-Luft-Gemischen können in verschiedenen Verbrennungsregimes ablaufen. Die verschiedenen Verbrennungsregimes unterscheiden sich erheblich durch die zu erwartenden gasdynamischen Lasten und bestimmen damit auch das Risikopotenzial der Gemischwolke.

Bild 7.1.1 zeigt beispielhaft gemessene Flammengeschwindigkeiten als Funktion der dimensionslosen Flammenposition in geschlossenen, teilversperrten Rohren. Dargestellt werden Ergebnisse aus verschiedenen Versuchsanlagen und mit unterschiedlichen Wasserstoffkonzentrationen.

Es lassen sich drei verschiedene Verbrennungsregimes unterscheiden:

- **Langsame Deflagration**  
Die Flammengeschwindigkeit bleibt über der gesamten Rohrlänge im Unterschallbereich. Die beobachteten Druckverläufe zeigen Überdrucke in der Größenordnung von bis zu 1 bar (für  $p_0 = 1$  bar).
- **Schnelle turbulente Deflagration**  
Die Flammengeschwindigkeit ist in der Größenordnung der Schallgeschwindigkeit im verbrannten Gas. Der maximale Überdruck liegt in der Größenordnung von bis zu 10 bar.
- **Quasi-Detonation**  
Die Flammengeschwindigkeit ist deutlich größer als die Schallgeschwindigkeit im verbrannten Gas. Es werden Maximaldrücke bis über 30 bar beobachtet.

Diese unterschiedlichen Verbrennungsregimes entsprechen somit auch verschiedenen Risikopotenzialen. Zur Abschätzung des Risikopotenzials einer Wasserstoff-Luft-Dampf-Gemischwolke können drei Kriterien dienen:

- Brennbarkeit des Gemisches,
- Möglichkeit der Flammenbeschleunigung,
- Detonierbarkeit des Gemisches.

Zur Herleitung der Kriterien wurden umfangreiche experimentelle Untersuchungen in verschiedenen Versuchsanlagen durchgeführt und dimensionslose Kennzahlen abgeleitet die Aussagen über die Möglichkeit der verschiedenen Verbrennungsregimes zulassen. Tabelle 7.1 fasst die nachfolgend beschriebenen Versuche und die Datenbasis zusammen. Die entsprechenden Referenzen sind am Ende dieses Kapitels zu finden.

### 7.1 Versuchsanlagen zur Untersuchung des Risikopotenzials von Wasserstoff-Luft-Dampf Gemischen.

Für die Herleitung von Kriterien und ihre Anwendbarkeit auf Reaktoranlagen ist es erforderlich den Maßstabseinfluss zu kennen. Dies erfordert Verbrennungsversuche auf unterschiedlichen Größenmaßstäben:

Bild 7.1.2 zeigt einen Überblick zu den Hauptabmessungen der verschiedenen Rohranlagen, die für die Untersuchung der Flammenbeschleunigung und des Deflagrations-Detonations-Übergangs eingesetzt wurden.

Im einzelnen wurden Experimente in folgenden Anlagen durchgeführt:

- FZK 7.2 m Rohr (Bild 7.1.3)
- FZK 12 m Rohr (Bild 7.1.4 und 7.1.5)
- Torpedo Rohr des Kurchatov Instituts (Bild 7.1.6)
- RUT Anlage (Bild 7.1.7)

**Tabelle 7.1: Kriterium für Risikopotential von H<sub>2</sub>-Luft- Dampf Gemischen**

Verbrennungsregime	Kriterium	Abb.	Datenbasis / Verifikation					
			Mischung	Äquivalenz Verhältnis	Temperatur (K)	Druck (bar)	Kanaldurchmesser (mm)	BR
<ul style="list-style-type: none"> <li><b>BRENNBARKEIT</b></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Multivariabler Fit gemessener Zündgrenzen (GP-Programm)</li> </ul>	7.1.8	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /N <sub>2</sub> /H <sub>2</sub> O mit H <sub>2</sub> =0.04-0.88 O <sub>2</sub> =0.03-0.21 N <sub>2</sub> = 0.0-0.79 H <sub>2</sub> O= 0 – 0.76	0.2 - 10	300 - 700	0.8–7.0	-	-
<ul style="list-style-type: none"> <li><b>FLAMMENBESCHLEUNIGUNG</b></li> <li>Expansionsverhältnis <math>\sigma</math></li> <li>kritische <math>\sigma</math>-Werte für Flammenbeschleunigung in geschlossenen Anlagen</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Sigma-Kriterium: <math>\sigma &gt; \sigma_{crit}</math></li> <li>thermodyn. Berechnung</li> <li>empirisch aus Experimenten abgeleitet</li> </ul>	7.2	<ul style="list-style-type: none"> <li>STANJAN Rechnungen für alle Mischungen</li> <li>H<sub>2</sub>/Luft</li> <li>H<sub>2</sub>/Luft/H<sub>2</sub>O</li> <li>H<sub>2</sub>/Luft/CO<sub>2</sub></li> <li>H<sub>2</sub>/Luft/Luft</li> <li>H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/Ar</li> <li>H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/He</li> <li>H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub></li> </ul>	0.2 - 4	293 - 650	1.0	80 - 2250	0.1 – 0.9
<ul style="list-style-type: none"> <li><b>DETONATIONSÜBERGANG (DDT)</b></li> <li>Detonationszellgröße <math>\lambda</math></li> <li>charakteristische Größe D</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li><math>\lambda</math>-Kriterium: <math>D &gt; 7\lambda</math></li> <li>Messdaten, H2CELL-Programm</li> <li>Vorschrift aus Experimenten abgeleitet z.B. Wolke <math>D=(V)^{1/3}</math></li> </ul>	7.3	<ul style="list-style-type: none"> <li>Berechnung für alle Mischungen möglich</li> <li>H<sub>2</sub>/Luft</li> <li>H<sub>2</sub>/Luft/H<sub>2</sub>O</li> <li>H<sub>2</sub>/Luft/CO<sub>2</sub></li> </ul>	<1, >1	290 - 650	1.0	80 - 2250	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Verifikation auf großer Skala, RUT nst-Serie</li> </ul>	-	7.4	H <sub>2</sub> /Luft/H <sub>2</sub> O	≈ 0.5	370	1.0	2250	0.6
<ul style="list-style-type: none"> <li>Modellierung in GASFLOW</li> <li><math>\sigma</math>-Kriterium</li> <li><math>\lambda</math>-Kriterium</li> <li>Testfall BMC</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>1-Raum-Geometrie</li> </ul>	7.5	H <sub>2</sub> /Luft	variabel	300	1.0	41 m <sup>3</sup>	-

### 7.1.1 FZK 7.2 m Rohr

Das am Forschungszentrum Karlsruhe betriebene Versuchsrohr hat eine Länge von 7.2m und einen rechteckigen Rohrquerschnitt mit einer Kantenlänge von 0.1m. Die Besonderheit des Rohres ist eine drehbare Lagerung, die es erlaubt Experimente sowohl in horizontaler als auch in vertikaler Lage des Rohres durchzuführen. Damit lassen sich somit Auftriebseffekte des leichteren Wasserstoffgases und der Einfluss der Schwerkraft auf die Flammenbeschleunigung gezielt untersuchen.

Die Instrumentierung des Rohres besteht aus Drucksonden und Photodioden zur Flammendetektion, die längs des Rohres angeordnet sind. Verschiedene Ansichten des Rohres sind in Bild 7.1.3 dargestellt.

### 7.1.2 FZK 12 m Rohr

Dieses Versuchsrohr hat eine Länge von 12 m und einen Innendurchmesser von 350 mm.

Das Rohr ist in Bild 7.1.4 dargestellt. Im Rohr können Hindernisse mit verschiedenen Versperrungsgraden zwischen 10 % und 90 % montiert werden. Eine ausgebaute Hindernisstrecke ist in Bild 7.1.5 wiedergegeben. In den meisten Versuchen betrug der Abstand zwischen zwei benachbarten Hindernissen einen Rohrdurchmesser (350 mm).

Die Instrumentierung dieses Rohres besteht ebenfalls aus einer Reihe von Drucksensoren und Photodioden.

### 7.1.3 Torpedo - Rohr

Die Torpedo - Anlage des Kurchatov Instituts ist in Bild 7.1.6 darstellt. Bei dieser Anlage handelt es sich um ein Rohr von 30 m Länge und einem Innendurchmesser von 520 mm. Als Hindernisse wurden ebenfalls ringförmige Blenden mit Versperrungsgraden zwischen 10 % und 90 % und einem Abstand von 520 mm (ein Rohrdurchmesser) eingesetzt.

### 7.1.4 RUT Anlage

Die RUT Anlage die in Bild 7.1.7 schematisch dargestellt ist, ist die größte Versuchsanlage, die im Rahmen dieser Untersuchungen und weltweit für schnelle Wasserstoffverbrennungsversuche zur Reaktorsicherheit eingesetzt wurde. Sie besteht aus mehreren Kanälen und angrenzenden Räumen, die mit verschiedenen Hindernisanordnungen bestückt werden können. Die Gesamtlänge der Anlage beträgt etwa 60 m. Der erste Kanal hat eine Länge von 34 m und einen Querschnitt von etwa 2.5 m x 2.5 m.

In der gesamten Anlage sind an verschiedenen Stellen Drucksensoren und Photodioden zur Flammenerkennung installiert.

### 7.1.5 Brennbarkeit eines Wasserstoff-Luft-Dampf-Gemisches

Aus Experimenten ergibt sich für jedes Gemisch direkt, ob es zündfähig ist oder nicht.

Die in diesem Projekt neu gemessenen experimentellen Daten sowie weitere Daten aus der Literatur wurden durch einen multivariablen Fit für eine automatische Auswertung in einem numerischen Programm (GP) verfügbar gemacht [ Referenz GP].

Bild 7.1.8 zeigt Beispiele für die Ausgabe des GP-Programms. Die äußerste Linie zeigt jeweils für verschiedene Temperaturen die berechneten Brennbarkeitsgrenze von H<sub>2</sub>-Luft-Dampfgemischen bei 2 bar Gesamtdruck.

## 7.2 Flammenbeschleunigung

Die Verbrennung eines vorgemischten Wasserstoff-Luft-Gemisches wird durch die geometrischen Randbedingungen beeinflusst. Durch die Wechselwirkung zwischen der verbrennungsinduzierten Verdrängungsströmung und Strömungshindernissen kommt es zur Turbulenzerzeugung. Die zunehmende Turbulenz führt zu einem höheren Reaktionsumsatz und damit zu einer schnelleren Verbrennung mit einer schnelleren Verdrängungsströmung. Dieser positive Rückkopplungsmechanismus führt letztlich zur Erhöhung der Brennrate und zur Beschleunigung der Flammenausbreitung.

Bild 7.2.1 [7.1, 7.2] verdeutlicht diesen Mechanismus am Beispiel von Schlierenaufnahmen aus einem Rechteckkanal. Die Randbedingungen sind der Bildunterschrift zu entnehmen. Zu Beginn der Flammenausbreitung zwischen den ersten Hindernissen zeigt die Flammenfront eine relativ glatte, grobzellige Struktur. Die Flamme breitet sich zunächst in der Nähe der Rohrachse aus. Die wandnahen Bereiche zwischen den Hindernissen werden erst relativ spät hinter der führenden Front verbrannt. Im direkten Vergleich der Verbrennung an den Hindernissen 5 und 6 ist die Beschleunigung der Flammenbeschleunigung deutlich erkennbar. Der gezeigte Verbrennungsvorgang ist eine langsame Deflagration und Druckwellen, die der Verbrennungsfront vorauslaufen, sind nicht erkennbar.

Bild 7.2.2 zeigt nochmals eine Zusammenstellung von gemessenen Flammengeschwindigkeiten als Funktion der dimensionslosen Flammenweglänge. In diesem Diagramm sind Ergebnisse aus vier unterschiedlichen Versuchsanlagen zusammengefasst. Es wird deutlich, dass die Versuche in zwei Gruppen fallen. Bei den Experimenten der ersten Gruppe (offene Symbole) tritt keine starke Flammenbeschleunigung auf und die Maximalgeschwindigkeiten liegen deutlich unter der Schallgeschwindigkeit im verbrannten Gas. Die Experimente der zweiten Gruppe (geschlossene Symbole) zeigen dagegen eine ausgeprägte Beschleunigungsphase und es werden Flammengeschwindigkeiten in der Größenordnung der lokalen Schallgeschwindigkeit im verbrannten Gas erreicht.

Für die Umsetzung dieser Versuchsergebnisse in ein Kriterium zur Bewertung des Risikopotentials eines Gasmisches, ist es erforderlich die wesentlichen Einflußgrößen zu identifizieren. Bild 7.2.3 zeigt daher dieselben Versuche wie in Bild 7.2.2 noch einmal in einer anderen Darstellung. Aufgetragen ist das

Expansionsverhältnis der Gasmischung über der dimensionslosen Längenskala  $D/\delta$ . Jeder Punkt in diesem Bild entspricht einem Experiment. Die Symbole kennzeichnen das jeweilige Verbrennungsregime. In dieser Darstellung lassen sich die schnellen und die langsamen Deflagrationen deutlich unterscheiden. Oberhalb eines kritischen Wertes für das Expansionsverhältnis werden nur schnelle Verbrennungsvorgänge beobachtet. Bei Versuchen mit einem Expansionsverhältnis unterhalb des kritischen Wertes läuft die Verbrennung langsam ab. Für die dargestellten Versuche mit einer Anfangstemperatur von  $\sim 300$  K liegt der kritische Wert für das Expansionsverhältnis  $\sigma$  bei 3.75, dies entspricht einer Wasserstoffkonzentration von 10.5 % in Luft.

Zum besseren Verständnis ist in Bild 7.2.4 die physikalische Bedeutung des Expansionsverhältnisses  $\sigma$  illustriert. Ein brennbares Gas mit dem Ausgangszustand  $p_1, v_1$  wird zunächst bei konstantem Volumen verbrannt. Dabei steigt der Druck und das verbrannte Gas hat den Zustand  $p_2, v_1$ . Dabei entspricht  $p_2$  dem AICC Druck (adiabatic isochoric complete combustion). In einem zweiten Schritt wird das Gas aus dem Zustand 2 nun auf den Ausgangsdruck expandiert. Im Zustand 3 haben wir also den Druck  $p_1$  und ein größeres Volumen  $v_3$ . Das Expansionsverhältnis ist nun das Verhältnis der beiden Volumina  $v_3$  und  $v_1$ :

$$\sigma = v_3/v_1$$

$\sigma$  kann auch dargestellt werden als Verhältnis der Dichten von unverbranntem zu verbranntem Gas beim konstanten Ausgangsdruck. Bild 7.2.5 zeigt die beobachteten Verbrennungsregimes bei Versuchen mit unterschiedlichen Ausgangstemperaturen. Dargestellt ist das Expansionsverhältnis über der Ausgangstemperatur. Die verschiedenen Symbole kennzeichnen wieder das jeweilige Verbrennungsregime. Diese Darstellung macht deutlich, dass das kritische Expansionsverhältnis mit zunehmender Temperatur merklich abnimmt.

In Bild 7.2.6 ist das kritische Expansionsverhältnis für Flammenbeschleunigung als Funktion der Gemischzusammensetzung für Wasserstoff-Dampf-Luft Gemische und Temperatur dargestellt. Die gezeigte Fläche ergab sich aus dem Least-Square Fit aller bekannten Messdaten Tabelle 7.2.1. Unsicherheiten in der Datenbasis bestehen noch für überstöchiometrische Gemische oberhalb von  $100^\circ\text{C}$ .

### 7.3 Detonationsübergang

Nachdem sich eine schnelle turbulente Deflagration entwickelt hat, kann es zu einem Detonationsübergang kommen. Ein Beispiel für einen solchen Vorgang ist in Bild 7.3.2 dargestellt. Bei diesem Versuch in der RUT Anlage wurde das Gasgemisch im ersten Kanal gezündet und es kam zu einer Flammenausbreitung durch die gesamte Anlage. Im oberen Teil des Bildes sind mit Photodioden gemessene Projektionen der Detonationsfront in der Kavität dargestellt. Die Front breitet sich vom Ende des ersten Kanals zylinderförmig in die Kavität aus und durchläuft schließlich auch den zweiten Kanal. Im unteren Teil des Bildes ist das Weg-Zeit-Diagramm der Detonationsfront dargestellt. Man erkennt, dass die Detonation schon innerhalb des ersten Kanals ausgebildet ist und dann mit konstanter Geschwindigkeit durch die Kavität und den zweiten Kanal läuft. Die Geschwindigkeit der Front stimmt gut mit dem theoretischen Wert für eine Chapman Jouguet Detonation überein.

Die interne Struktur einer Detonation besteht aus einzelnen Detonationszellen, die durch die Wechselwirkung von transversalen Druckwellen entstehen. Detonationen können durch die Detonationszellgröße  $\lambda$  charakterisiert werden.

Damit sich eine Detonation ausbilden kann, ist es erforderlich, dass die Gemischwolke, in der die Verbrennung stattfindet, eine gewisse Mindestgröße besitzt, so daß sich eine hinreichende Anzahl von Detonationszellen ausbilden kann. Bild 7.3.1 zeigt eine Auswertung aller bekannten Versuche mit einem Deflagrations-Detonations-Übergang (DDT). Tabelle 7.3.2 enthält nähere Informationen über die verwendeten experimentellen Parameter.

In Abb. 7.3.1 ist das Verhältnis aus charakteristischer Wolkenabmessung und Detonationszellgröße als Funktion der Wolkengröße dargestellt. Die Versuche mit Detonationsübergang sind durch dunkle Symbole und die Versuche ohne Detonationsübergang sind durch helle Symbole gekennzeichnet. Das Bild zeigt, dass für eine erfolgreiche Stabilisierung und Ausbreitung der Detonation eine Wolkengröße von mindestens 7 Detonationszellen erforderlich ist. Dabei ist allerdings zu beachten, dass die Berechnung der Detonationszellgröße  $\lambda$  auch eine gewisse Unsicherheit hat und oft nicht besser als ein Faktor 2 bekannt ist.

Die Detonationszellgröße  $\lambda$  hängt stark von der Gemischzusammensetzung ab. Dies ist in Bild 7.3.3 für Wasserstoff-Dampf-Luft Gemische bei einer Ausgangstemperatur von 375 K und einem Anfangsdruck von 1 bar dargestellt. Für die sensitivsten Mischungen beträgt die Detonationszellgröße etwa 1 cm. Für weniger sensitive Mischungen steigt sie stark an.

In dem Diagramm sind nur  $\lambda$  - Werte bis 5 m dargestellt weil der 7-fache Wert bereits der Größe des gesamten Reaktorsicherheitsgebäudes nahe kommt. Die Berechnung der Detonationszellgrößen für dieses Diagramm erfolgte mit dem Programm H2CELL.

Bild 7.3.4 zeigt Ergebnisse aus verschiedenen Experimentserien mit H<sub>2</sub>-Luft-Dampf Gemischen in der RUT Anlage. Dargestellt ist das Verbrennungsregime als Funktion der Gemischzusammensetzung. Zusätzlich sind Linien mit konstanter Detonationszellgröße eingetragen. Es zeigt sich, dass in dieser Anlage nur hinreichend sensitive Gemische ( $\lambda \sim 1.2$  m) zur Detonation führen können, was erneut das 7  $\lambda$  Kriterium bestätigt.

#### **7.4 Verifikation auf großen Skalen**

Zur internen Überprüfung der Kriterien zur Flammenbeschleunigung und zum Detonationsübergang auf großer Skala wurden weitere Experimente in der RUT Anlage durchgeführt. In dieser Versuchsserie wurden unterschiedliche Gasgemische im ersten Kanal und im Rest der Anlage eingesetzt. Die Ergebnisse dieser Experimente sind in Bild 7.4.1 in tabellarischer Form zusammengefasst. Für das Auftreten einer Detonation ist es notwendig, dass sowohl eine genügend hohe Flammengeschwindigkeit erreicht wird (Schallgeschwindigkeit) und dass die Gemischwolke hinreichend groß ist (7  $\lambda$  Kriterium). Wie aus der Tabelle zu erkennen ist, wurde in der Tat nur dann ein Deflagrations – Detonations – Übergang beobachtet, wenn beide Bedingungen erfüllt waren. Wird nur eine der Bedingungen nicht erfüllt, kommt es nicht zur Detonation.

Bei der Auswertung der Kriterien für inhomogene Mischungen in komplexen Geometrien ist es erforderlich das Expansionsverhältnis des Gasgemisches und die Detonationszellgröße zu bestimmen. Wie dies in der praktischen Anwendung erfolgt

ist in Bild 7.4.2 beschrieben. Bei einem inhomogenen Gemisch werden zunächst Gebiete, in denen eine Mindestkonzentration überschritten wird, identifiziert (Bild Mitte). Für die so bestimmten Bereiche können dann Durchschnittskonzentrationen bestimmt werden. Für die Flammenbeschleunigung (links) wird der Quotient aus dem Expansionsverhältnis der Durchschnittsmischung und dem kritischen Expansionsverhältnis gebildet. Die Möglichkeit einer schnellen Flammenausbreitung wird dann durch die Bedingung  $\sigma_{ind} \geq 1$  beschrieben. Für das Detonationskriterium muss eine charakteristische Abmessung der Gemischwolke bestimmt und mit der Detonationszellgröße verglichen werden. Die in Bild 7.4.2 rechts dargestellte Bedingung besagt, dass Werte größer als 1 ein Risiko für DDT anzeigen.

## 7.5 Implementierung und Verifikation der Kriterien in GASFLOW

Für den Einsatz der vorgestellten Kriterien innerhalb der Verteilungssimulation mit GASFLOW müssen die erforderlichen Daten in geeigneter Form verfügbar sein. Zur Bestimmung des Expansionsverhältnisses der Gasmischung wird auf tabellierte Werte zurückgegriffen und eine lineare Interpolation zwischen den Tabellenwerten durchgeführt. Der kritische Wert für das Expansionsverhältnis ist sowohl von der Temperatur als auch von der Gemischzusammensetzung abhängig. Der funktionale Zusammenhang ist in Bild 7.2.6 dargestellt. In der Simulationsrechnung wird zur Bestimmung des kritischen Expansionsverhältnisses ebenfalls eine lineare Interpolation durchgeführt.

Wie in Bild 7.5.1 schematisch dargestellt wird, ist die Verteilung und Mischung von Wasserstoff und Dampf mit Luft ein instationärer Prozess. Zu verschiedenen Zeitpunkten hat die Wolke daher unterschiedliche Ausdehnungen. Die Auswertung der beschriebenen Kriterien muss daher in jedem Zeitschritt erneut erfolgen. Wie in dem Bild dargestellt, muss dazu das Volumen der Gemischwolke, die mittlere Wasserstoffkonzentration und die mittlere Dampfkonzentration in der Wolke ermittelt werden.

Die Anwendung der Kriterien in GASFLOW wird nun an drei Beispielrechnungen in der BMC - Geometrie demonstriert. Bei dieser Geometrie handelt es sich um einen halbkreisförmigen Ringraum mit einem Gesamtvolumen von  $41 \text{ m}^3$ . Die Geometrie wird in GASFLOW durch ein Rechengitter mit 315 Zellen abgebildet. Wasserstoff strömt an einer definierten Stelle im Boden des Raumes mit einem definierten Zustand ein (300 K, 1 bar, 1 m/s, Massenstrom 21.6 g/s). Untersucht wurden drei Fälle, die sich durch den Ort der Zündung des Gasgemisches unterscheiden.

Bild 7.5.2 zeigt zunächst Ergebnisse für den reinen Verteilungsfall, ohne Gemischzündung. Das Diagramm oben rechts zeigt den zeitlichen Verlauf der brennbaren Wolkengröße. Erwartungsgemäß nimmt die Wolkengröße mit zunehmender Freisetzungszeit zu. Im Diagramm in der Mitte links ist der zeitliche Verlauf der Wasserstoffkonzentration an drei verschiedenen Raumpositionen dargestellt. An der Position 1 direkt oberhalb der Wasserstoffquelle steigt die Konzentration schnell an und bleibt dann während der Freisetzung auf einem konstanten hohen Wert. An der Position 2, die sich am seitlichen Ende des Raumes befindet, steigt die Konzentration wesentlich später an und erreicht deutlich niedrigere Werte. An der Position 3 am Boden des Raumes kommt der Wasserstoff noch später an und erreicht nur geringe Konzentrationen. Diese Ergebnisse sind

plausibel und entsprechen der erwarteten Verteilung des Wasserstoffs. Das Diagramm in der Mitte rechts zeigt den Verlauf der mittleren Detonationszellgröße der brennbaren Wolke mit der Zeit. In den ersten zehn Sekunden der Freisetzung nimmt die Zellgröße zunächst zu. Dies entspricht der zunächst auftretenden Verdünnung des an der Quelle freigesetzten reinen Wasserstoffs. Im weiteren Verlauf nimmt die mittlere Zellgröße wieder ab, da nun die Konzentration in weiten Bereichen des Rechenggebietes ansteigt. Das letzte Diagramm unten links zeigt den Verlauf des berechnete Detonationsindex  $D/7\lambda$ . Dieser nimmt zu Beginn der Freisetzung zunächst hohe Werte nahe an der Quelle an. Allerdings ist zu diesem Zeitpunkt die Ausdehnung der Wolke noch gering, so dass keine große Gefährdung vorliegt. Nach 17 Sekunden überschreitet der Index dann allerdings erneut den kritischen Wert. Zu diesem Zeitpunkt liegt auch ein hinreichendes Wasserstoffinventar vor, so dass eine Detonation nicht mehr ausgeschlossen werden kann.

Abb. 7.5.3 zeigt Ergebnisse für die gleiche Situation, jetzt allerdings mit einem hoch liegenden Zünder in der Nähe der Konzentrationsprobe 2. Sobald an dieser Stelle die Zündgrenze überschritten wird, setzt die Verbrennung ein. In der Beispielrechnung erfolgt die Zündung nach ca. 12 s. Zu diesem Zeitpunkt hat die Wasserstoffwolke eine Größe von etwa 2.8 m und das Wasserstoffinventar beträgt etwa 250 g. Der Detonationsindex zum Zeitpunkt der Zündung ist kleiner als 1 und es kann daher nicht zu einer Detonation kommen.

Im dritten Beispiel (Bild 7.5.4) wird die gleiche Ausgangssituation betrachtet. Allerdings befindet sich der Zünder nun am Boden an der ungünstigen tiefen Position 3. Die Zündung erfolgt damit deutlich später, erst nach etwa 37 s. Das Wasserstoffinventar beträgt zu diesem Zeitpunkt bereits etwa 800 g und der Detonationsindex ist deutlich größer als 1. In dieser Situation kann eine Detonation nicht mehr ausgeschlossen werden.

Die drei vorgestellten Beispielrechnungen zeigen, wie Kriterien für Flammenbeschleunigung und Detonationsübergang für die erfolgreiche Optimierung von Schutzkonzepten eingesetzt werden können.

## Referenzen

- [7.1] S. B. Dorofeev, M. S. Kuznetsov, V. I. Alekseev, A.A. Efimenko, and W. Breitung. Evaluation of limits for effective flame acceleration in hydrogen mixtures. *Journal of Loss Prevention in the Processes Industries*, 2001, Vol. 14/6 pp 583-589
- [7.2] S. B. Dorofeev, V. P. Sidorov, M. S. Kuznetsov, I. D. Matsukov, and V. I. Alekseev. Effect of scale on the onset of detonations. *Shock Waves*, 2000, v. 10, pp. 137-149
- [7.3] M. S. Kuznetsov, V. I. Alekseev, S. B. Dorofeev, Comparison of critical conditions for DDT in regular and irregular cellular detonation systems. *Shock Waves*, 2000, v. 10, pp. 217-224
- [7.4] A.I. Gavrikov, A.A. Efimenko, and S. B. Dorofeev. A model for detonation cell size prediction from chemical kinetics. *Combustion and Flame*, 2000, vol. 120, pp.19-33,

- [7.5] V.P. Sidorov, S. B. Dorofeev. Influence of initial temperature, dilution, and scale on DDT conditions in hydrogen-air mixtures. *Archivum Combustionis*, 1998, vol. 18, no. 1-4, pp. 87-103
- [7.6] U. Bielert, W. Breitung, B. Burgeth, S. Dorofeev, et al. Large Scale Experiments for Validation of Hydrogen. *Combustion Models and Criteria*. Jahrestagung Kerntechnik, Stuttgart, May 14 – 16, 2002, (2002)
- [7.7] U. Bielert, W. Breitung, B. Burgeth, S. Dorofeev, et al., Integral Large Scale Experiments on Hydrogen Combustion for Severe Accident Code Validation HYCOM. *Proceedings of FISA-2001*, Euroatom, Luxembourg, 2001, pp 446-457.
- [7.8] S. B. Dorofeev, M. S. Kuznetsov, V. I. Alekseev, A.A. Efimenko, and W. Breitung. Evaluation of limits for effective flame acceleration in hydrogen mixtures. *Proceedings of 3<sup>rd</sup> International Symposium on Hazards, Prevention, and Mitigation of Industrial Explosions*, Tsukuba, Japan, October 23-27, 2000, pp. 314-319
- [7.9] M.S. Kuznetsov, V.I. Alekseev, S. B. Dorofeev. Comparison of critical conditions for DDT in regular and irregular cellular detonation systems. *Proc. of the 22<sup>nd</sup> International Symposium on Shock Waves*. (London, UK, July 18-23, 1999), 1999, p. 180
- [7.10] S. B. Dorofeev, V. P. Sidorov, M. S. Kuznetsov, I. D. Matsukov, and V. I. Alekseev. Effect of scale on the onset of detonations, *Proc. of the 17th ICDERS (Heidelberg, Germany, July 25-30, 1999)*, 1999, ISBN 3-932217-01-2, p. 141.1-141.4
- [7.11] W. Breitung and S. B. Dorofeev. Summary of DDT Criteria For Nuclear Power Plant Analysis, *Proceedings, Annual Meeting on Nuclear Technology'99*, Deutsches Atomforum e.V, ISSN 0720-9207, Karlsruhe, 18.-20. May 1999, p.185
- [7.12] S. B. Dorofeev. Effect of Scale on the Onset of Detonations in Gas-Phase DDT. *Proceedings of 7<sup>th</sup> International Conference on Numerical Combustion*. York, UK, 1998, p. 24
- [7.13] V. P. Sidorov, and S. B. Dorofeev. Influence Of Initial Temperature, Dilution, And Scale On DDT Conditions In Hydrogen-Air Mixtures. *International Symposium on Hazards, Prevention, and Mitigation of Industrial Explosions*. *Proceedings of the Colloquium on Gas, Vapor, Hybrid and Fuel-Air Explosions*, 21-25 September, 1998, Schaumburg, IL, USA pp. 414-433
- [7.14] S. B. Dorofeev, V. P. Sidorov, W. Breitung, and A. S. Kotchourko. Large-scale combustion tests in the RUT facility: Experimental study, Numerical simulations and analysis on turbulent deflagrations and DDT, *Transactions of 14<sup>th</sup> International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology*, Lyon, France, v. 10, pp. 275-283, 1997
- [7.15] A. S. Kotchourko, S. B. Dorofeev, W. Breitung, V. P. Sidorov. Experiments and Numerical Simulations on Turbulent H<sub>2</sub>-air Combustion in Large Enclosure. *Proceedings of 16<sup>th</sup> International Colloquium on Dynamic of Explosions and Reactive Systems*, Poland, Cracow, 1977, p.465.
- [7.16] Dorofeev, S. B., Efimenko A.A., Kochurko A.S., and Sidorov V.P., Experimental investigation and analysis of hydrogen combustion, Heat and mass transfer in severe nuclear reactor accidents, J.T. Fogers, Ed., Begell House, Inc. New York, Wallingford (UK), 1996, p. 360
- [7.17] Breitung W., Dorofeev, S. B., and Travis J.R., A mechanistic approach to safe igniter implementation for hydrogen mitigation, *OECD/NEA/CSNI Workshop on*

- the Implementation of Hydrogen Mitigation Techniques, Winnipeg, Manitoba, Canada, 1996, AECL-11762, NEA/CSNI/R(96)8, pp. 199-219
- [7.18] Dorofeev, S. B., Turbulent combustion and DDT events as an upper bound for hydrogen mitigation techniques, OECD/NEA/CSNI Workshop on the Implementation of Hydrogen Mitigation Techniques, Winnipeg, Manitoba, Canada, 1996, AECL-11762, NEA/CSNI/R(96)8, pp. 415-433
- [7.19] Breitung W., Dorofeev, S. B., Efimenko A.A., Kochurko A.S. Redlinger R., and Sidorov V.P., Large scale experiments on hydrogen-air detonation and their numerical simulation, Proc. of ARC'94 Int. Topical Meeting Advanced Reactor Safety, Pittsburgh, PA, p.733
- [7.20] S. B. Dorofeev, M.S. Kuznetsov, V.I. Alekseev, A.A. Efimenko, and W. Breitung. A potential for effective flame acceleration in hydrogen mixtures. 28<sup>th</sup> Symposium International on Combustion. Edinburgh, Scotland, 2000, W-I-PP Abstracts, p. 125.
- [7.21] S. B. Dorofeev, M. S. Kuznetsov, V. I. Alekseev, A. A. Efimenko, A. V. Bezmelnitsyn, Yu. G. Yankin, and W. Breitung. Effect of scale and mixture properties on behavior of turbulent flames in obstructed areas. Preprint IAE-6127/3, RRC "Kurchatov Institute" Report FZKA-6268, Forschungszentrum Karlsruhe, 1999
- [7.22] M. Kuznetsov, V. Alekseev, A. Bezmelnitsyn, W. Breitung, S. Dorofeev, I. Matsukov, A. Vesper, and Yu. Yankin. Effect of obstacle geometry on behavior of turbulent flames. Preprint IAE-6137/3, RRC "Kurchatov Institute", Report FZKA-6328, Forschungszentrum Karlsruhe, 1999
- [7.23] S. B. Dorofeev, M.S. Kuznetsov, V.I. Alekseev, A.A. Efimenko, and W. Breitung, Evaluation of limits for effective flame acceleration in hydrogen mixtures. Preprint IAE-6150/3, FZKA 6349. – M., 1999, 26p
- [7.24] W. Breitung and S. B. Dorofeev. Criteria for Deflagration-to-Detonation Transition (DDT) in Nuclear Containment Analysis, 15<sup>th</sup> International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology, Post-Conference Seminar on Containment of Nuclear Reactors, Hoam Convention Center, Seoul, Korea, August 23-24, 1999.
- [7.25] V. P. Sidorov, and S. B. Dorofeev. Large-Scale Experiments And Scaling Of DDT Conditions In Hydrogen-Air-Steam Mixtures - An Overview. Proceedings of the Workshop on Severe Accident Research in Japan (SARJ-97) JAERI-Conf 98-009., p.162, 1998
- [7.26] Dorofeev, S. B., Efimenko A.A., Kochurko A.S., and Sidorov V.P., Recent experimental and analytical results on hydrogen combustion at RRC - Kurchatov Institute, Proc. of the 23<sup>rd</sup> Water Reactor Safety Information Meeting NUREG/CP-0149, vol. 2, p. 325, 1996,

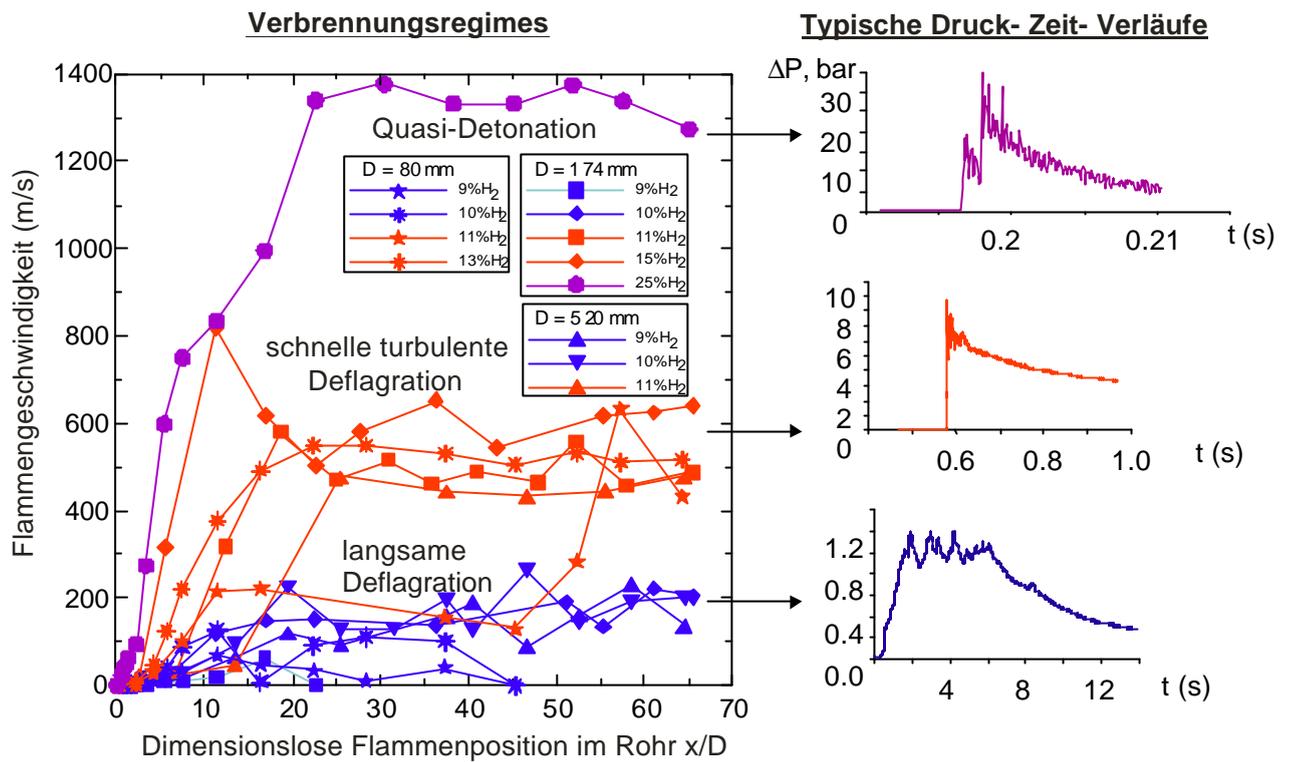


Abb.7.1.1: Gemessene Verbrennungsregimes in geschlossenen, teilversperrten Röhren und typische Druckverläufe,  $x$  = axiale Rohrposition,  $D$  = Rohrdurchmesser, Versperrungsgrad 60%, H<sub>2</sub>-Luftgemische, Zündung am linken Rohrrand ( $x/D = 0$ ). Es treten drei charakteristische Verbrennungsregimes auf: langsame Deflagration, schnelle turbulente Deflagration und Quasi-Detonation mit stark unterschiedlichen Spitzendrücken und Zeitskalen.

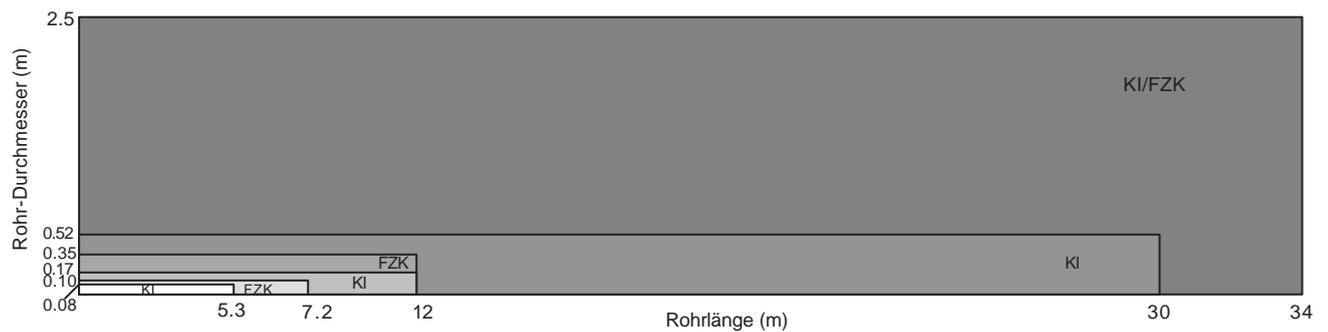


Abb.7.1.2: Länge und Durchmesser der Rohranlagen die in gemeinsamen Versuchsserien von FZK und Kurchatov Institut Moskau (KI) eingesetzt wurden um Skalierungsgesetze für spontane Flammenbeschleunigung und Deflagrations-Detonationsübergang abzuleiten.



Abb.7.1.3: FZK- Rohr für  $H_2$ -Luft Verbrennungsversuche, Abmessungen 0.1m x 7.2m am linken Ende (oben) drehbar gelagert für Experimente in horizontaler und vertikaler Anordnung.



Abb.7.1.4: FZK- Versuchsrohr für  $H_2$ -Luft Verbrennungsversuche, Abmessungen 0.35m Durchmesser, 12 m Länge. Der Rohrquerschnitt kann mit ringförmigen Hindernisse teilweise versperrt werden, Blockierungsgrad z.B. 30, 60 oder 90%, BR= blockage ratio.

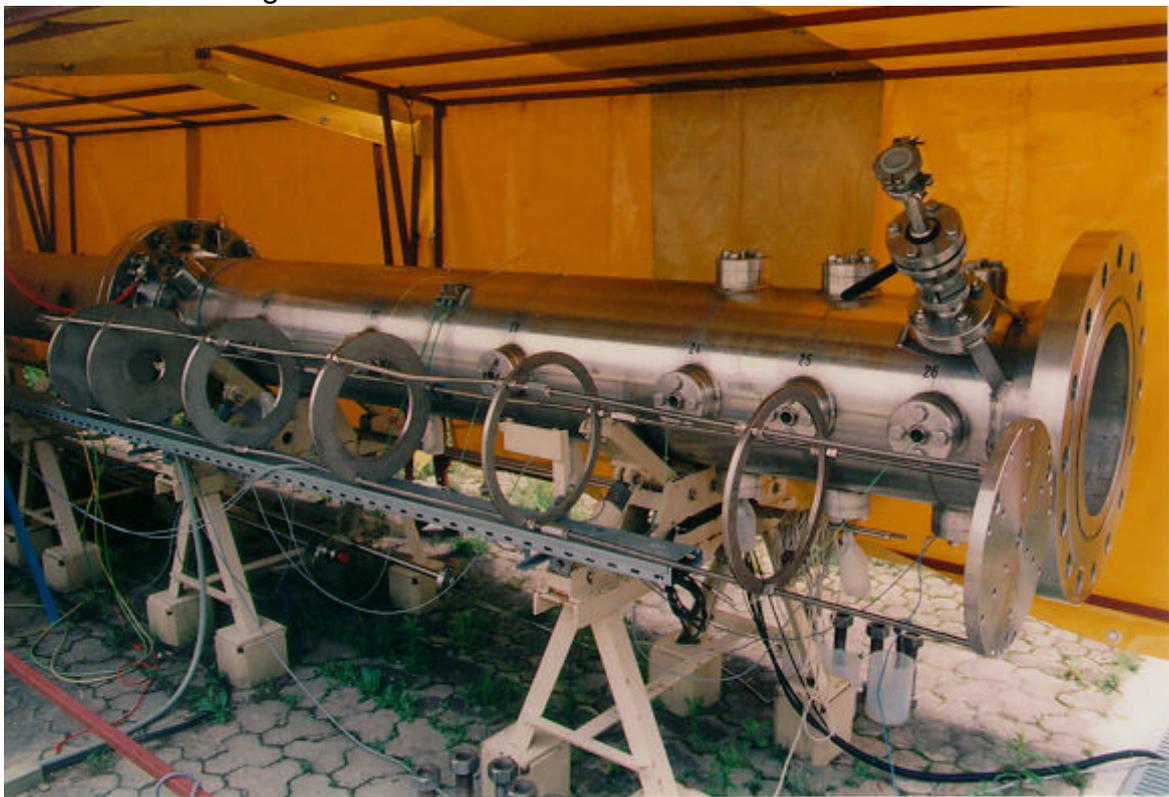


Abb.7.1.5: FZK- 12m Rohr mit ausgebauter Hindernisstrecke und variabler Versperrung von 30 auf 90%.



Abb.7.1.6: TORPEDO- Rohr des Kurchatov Instituts Moskau für  $H_2$ -Luft Verbrennungsversuche, Durchmesser 0.52, Länge 30 m.

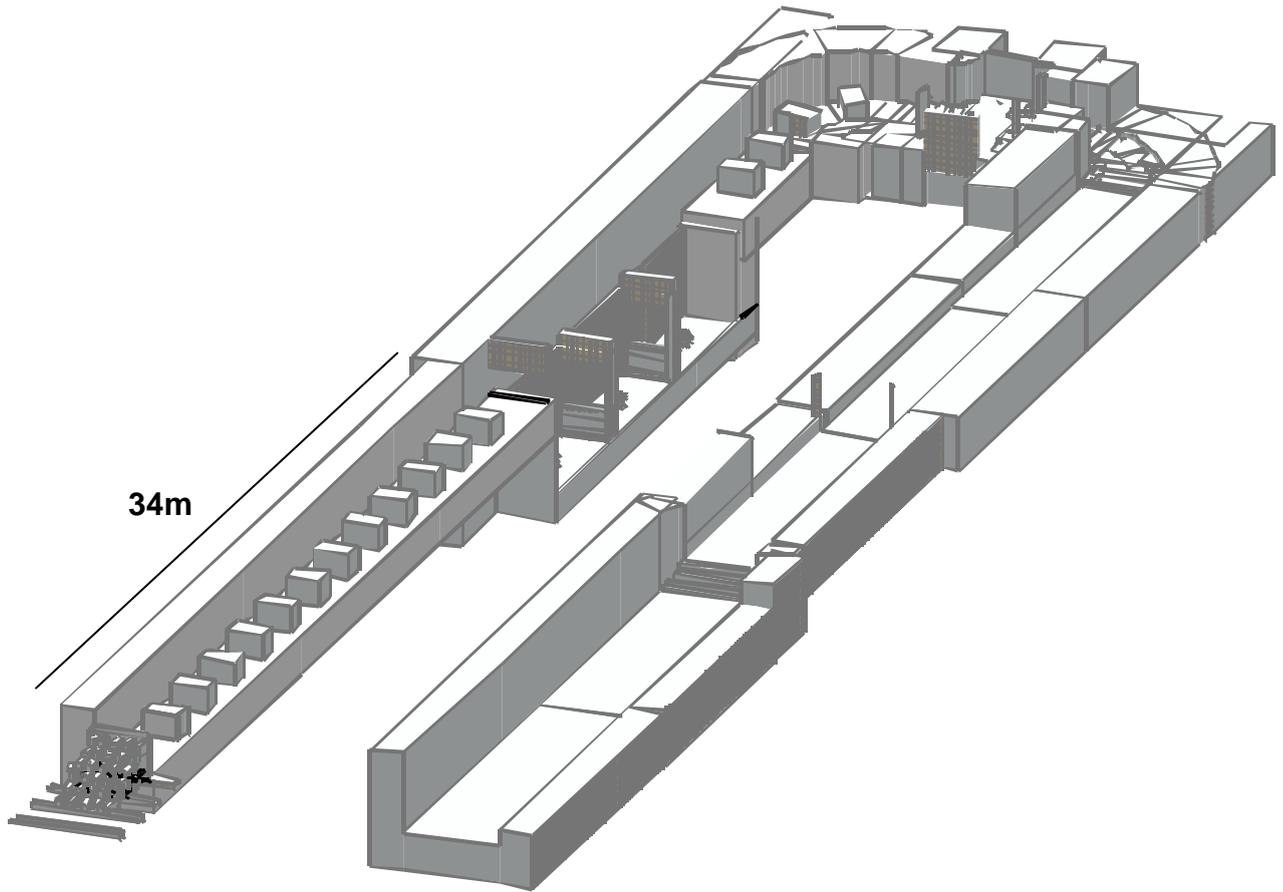


Abb.7.1.7: Schema der russischen RUT- Anlage die für gemeinsame Verbrennungsversuche des FZK und KI benutzt wurde. Abmessungen des linken Kanals 2.5m x 2.5m x 34m.

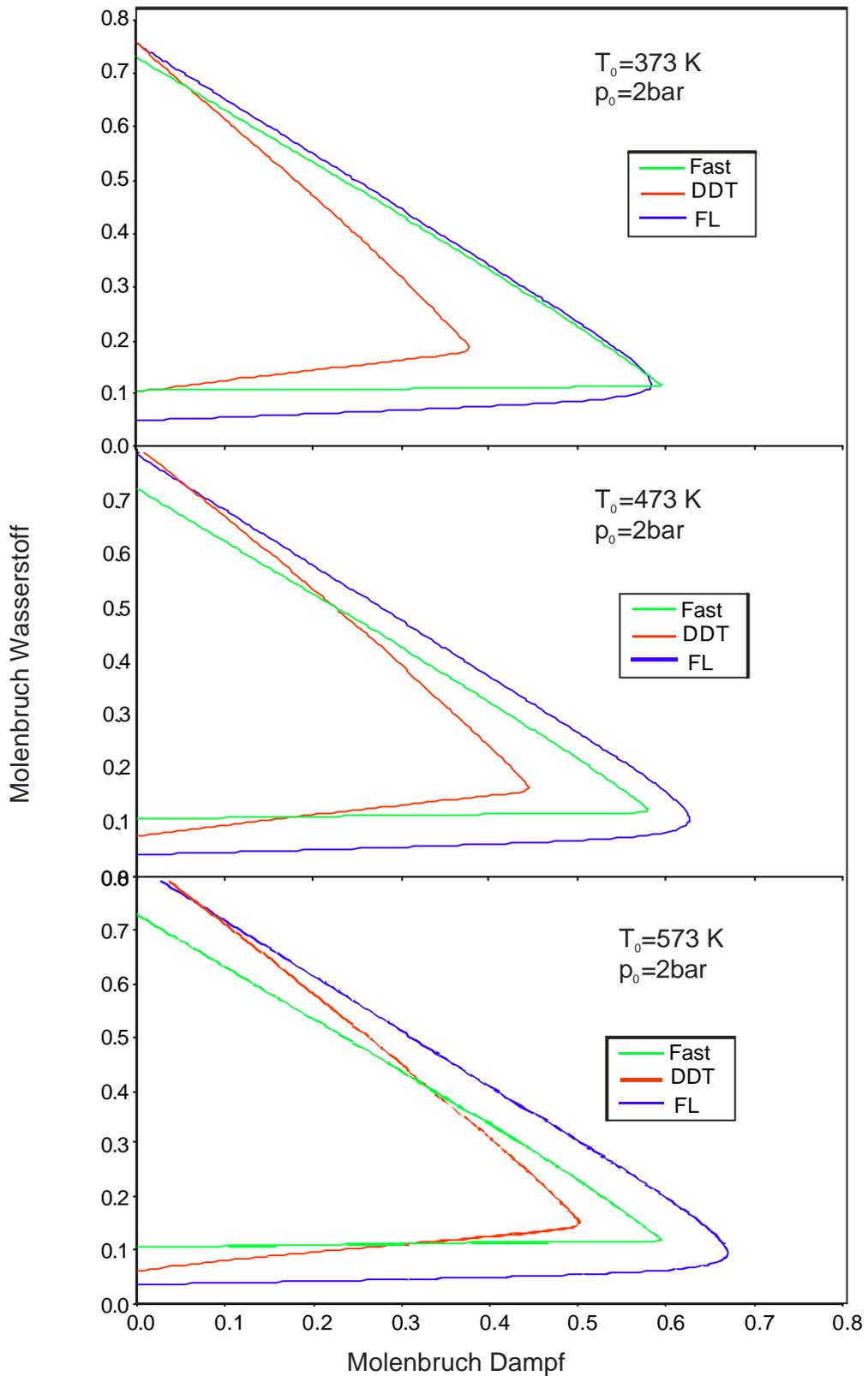


Abb.7.1.8: Beispiel für Ausgabe des GP- Programms für unfallrelevante  $\text{H}_2$ -Luft- Dampf- mischungen. FL = Brennbarkeitsgrenze, FA= Flammenbeschleunigungs- grenze, DDT = Deflagrations- Detonationsübergang (für  $\lambda = 1 \text{ m}$ ).

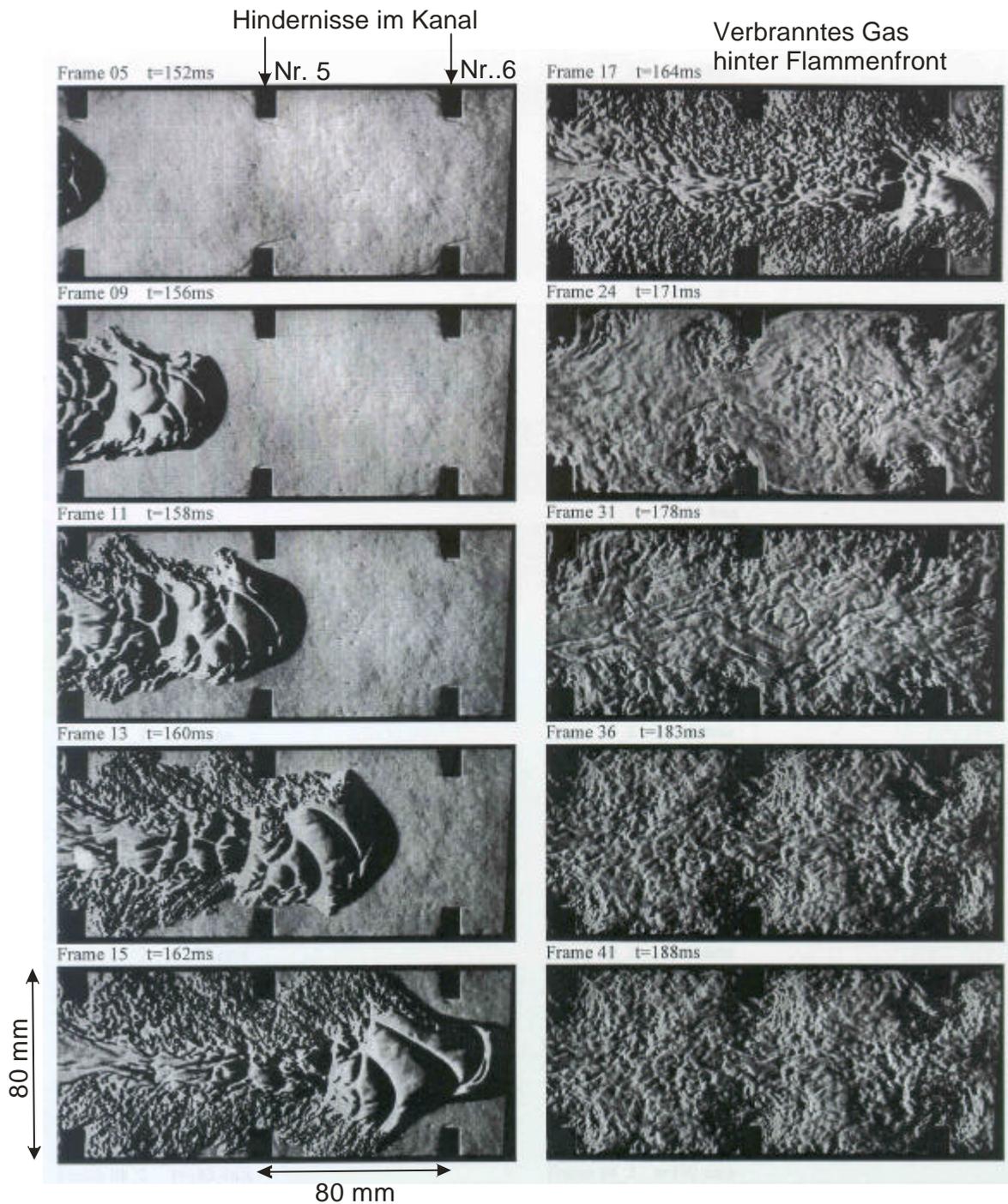


Abb.7.2.1: Schlierenphotos einer turbulenten Flammenausbreitung in einem teilversperrten Rechteckkanal. Kanalabmessungen 80 x 80 x 5280 mm, 10 vol%  $\text{H}_2$  in Luft,  $T_0 = 293 \text{ K}$ ,  $p_0 = 1\text{bar}$ , Versperrungsgrad der Hindernisse 30%, Hindernissabstand 80 mm, Zündung am linken Rohrende, Flammengeschwindigkeit ca. 20 m/s, langsame Deflagration.

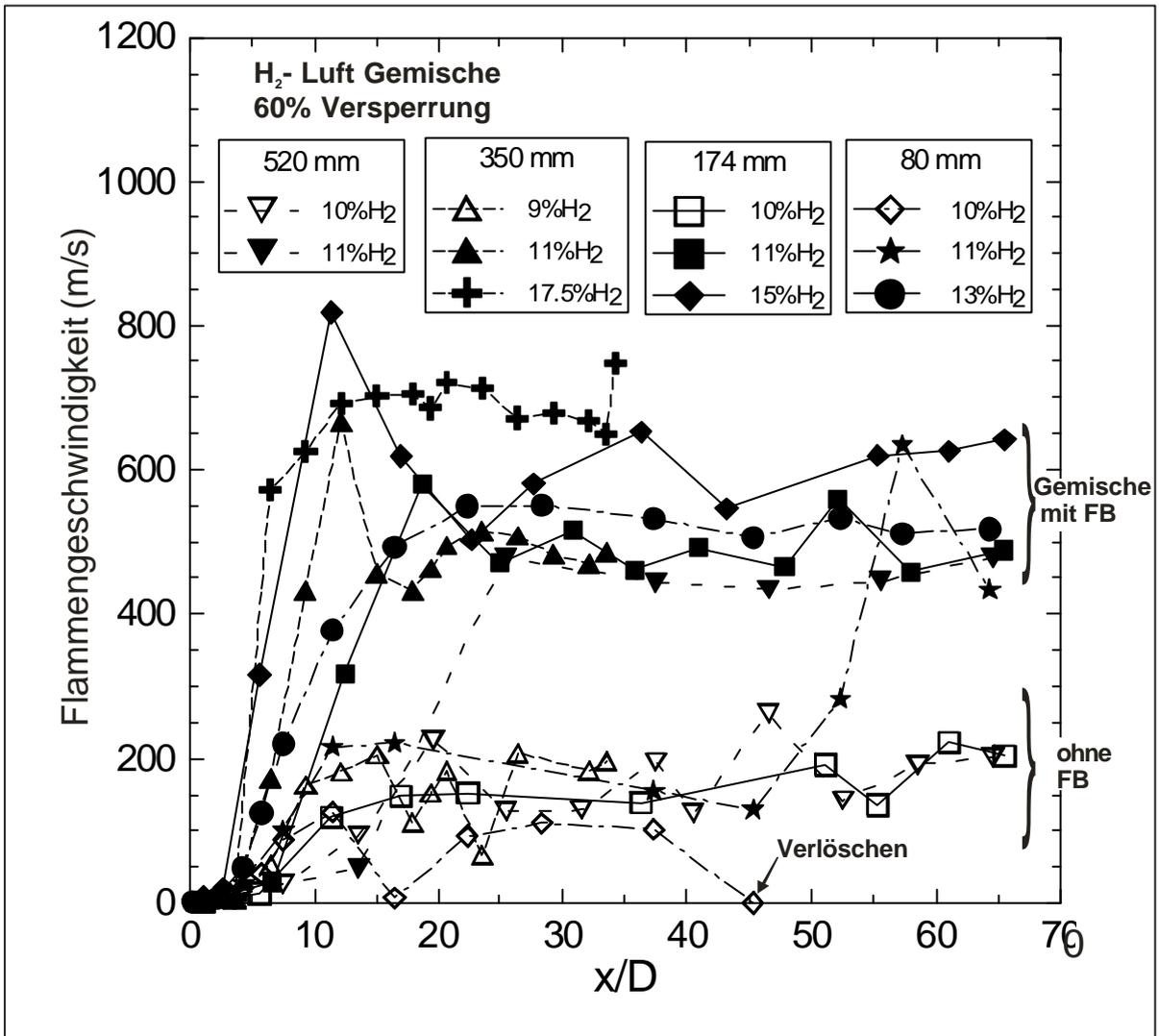
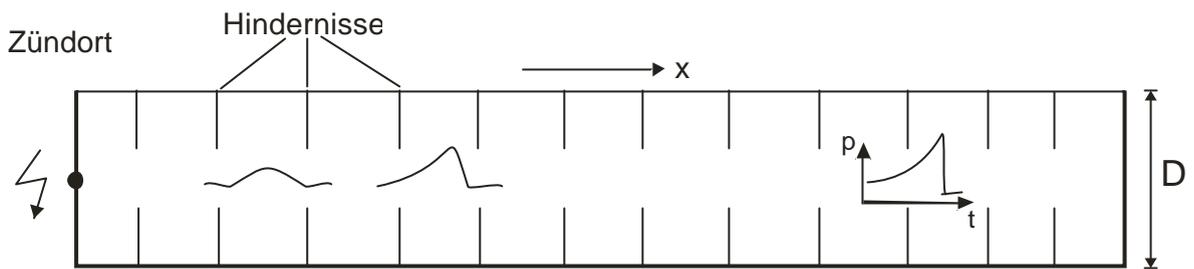


Abb.7.2.2: Gemessene Flammengeschwindigkeiten in vier verschiedenen Röhren als Funktion der dimensionslosen Flammenweglänge  $x/D$ . Es gibt eine systematische Trennung zwischen langsamen brennenden (schwachen) Mischungen ohne Flammenbeschleunigung und starken Mischungen mit Flammenbeschleunigung.

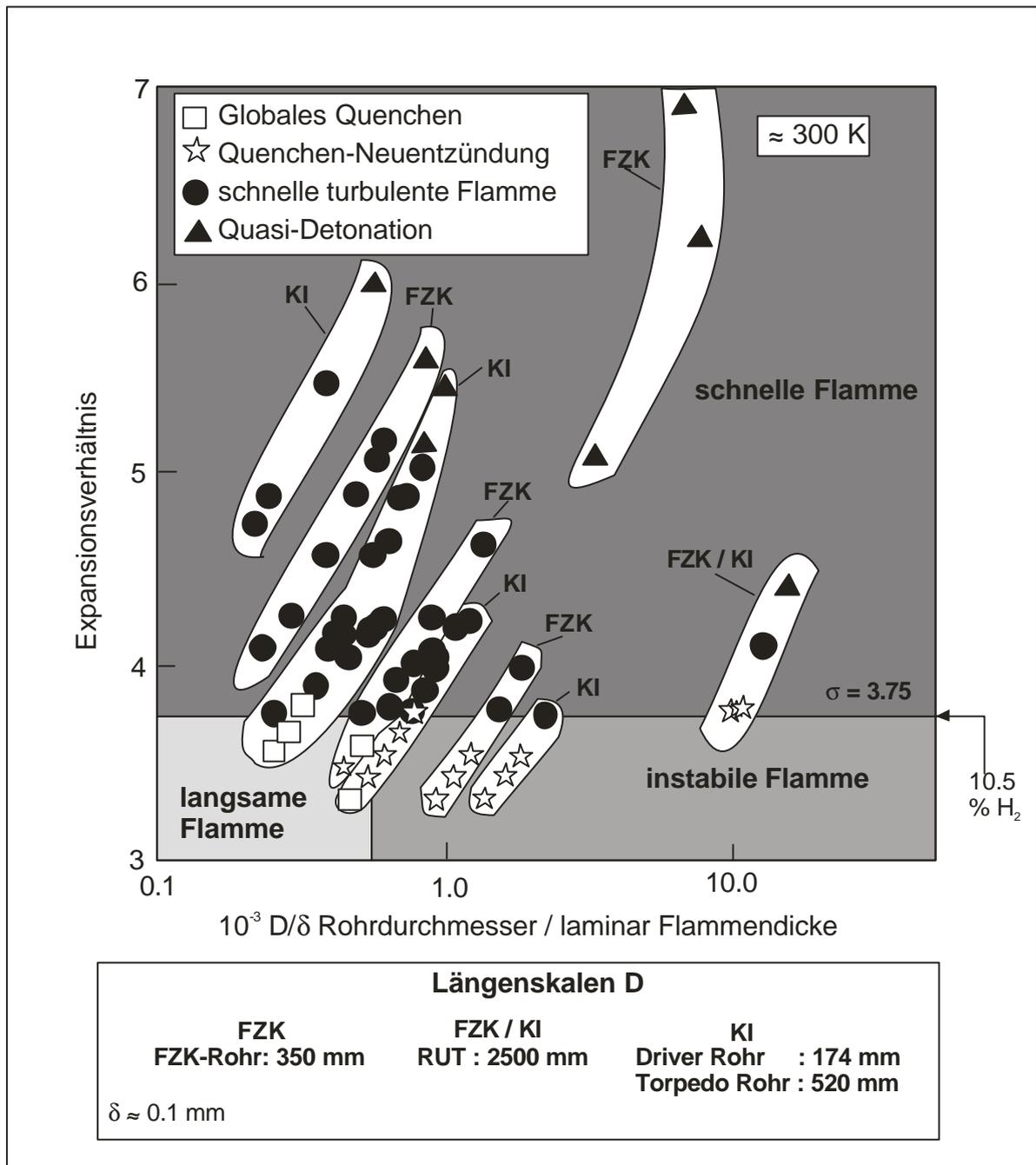


Abb.7.2.3: Darstellung der Rohrversuche mit H<sub>2</sub>-Luft- Mischungen und der beobachteten Verbrennungsregimes als Funktion der dimensionslosen Längenskala  $D/\delta$  und des Expansionsverhältnisses  $\sigma$  der eingesetzten Gasmischung. Jeder Punkt entspricht einem Rohrexperiment.  
 Ergebnis: Flammenbeschleunigung tritt nur bei Mischungen mit  $\sigma > 3.75 (\pm 0.1)$  auf, unabhängig von der untersuchten Längenskala ( $T \approx 300\text{ K}$ ). Dies entspricht  $\geq 10.5\%$  H<sub>2</sub> in Luft.

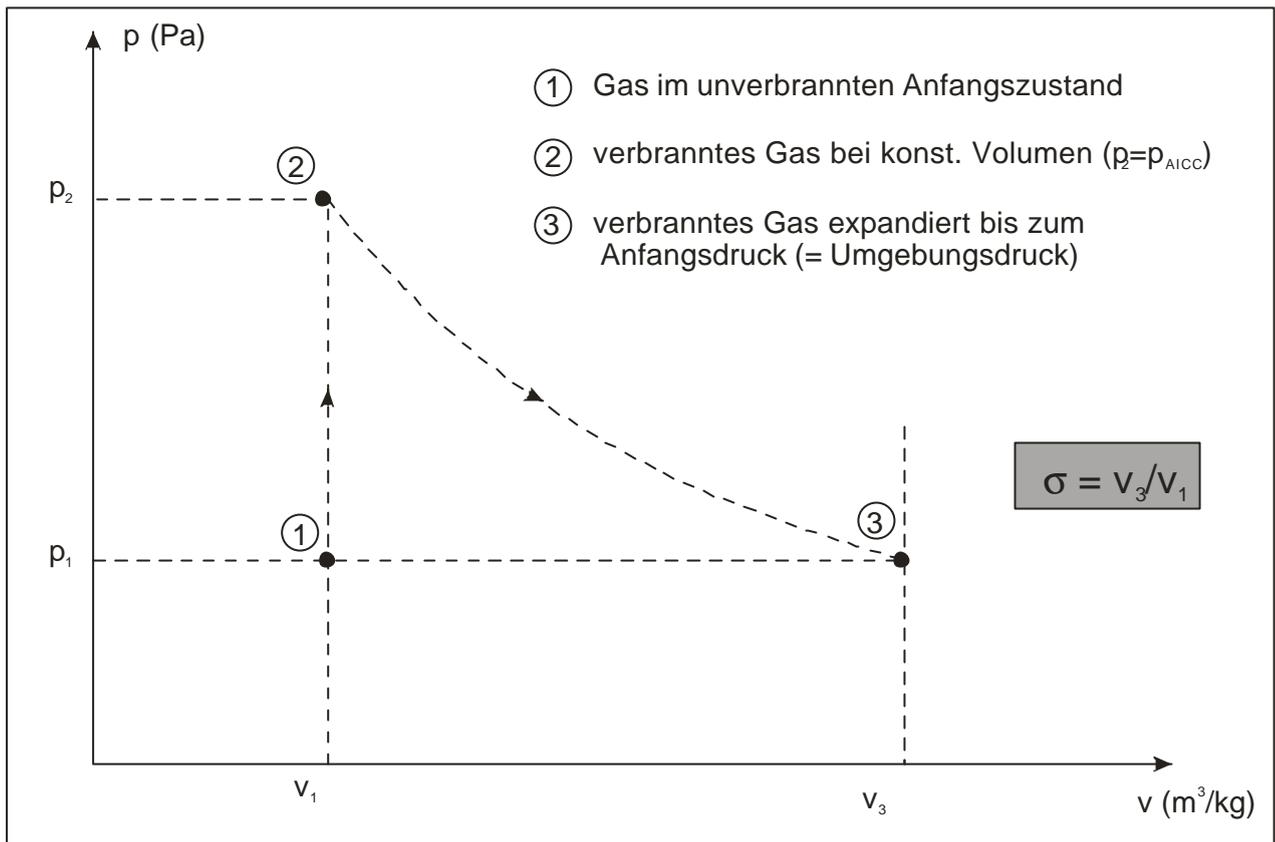


Abb.7.2.4: Definition des Expansionsverhältnisses  $\sigma$  einer brennbaren Gasmischung.

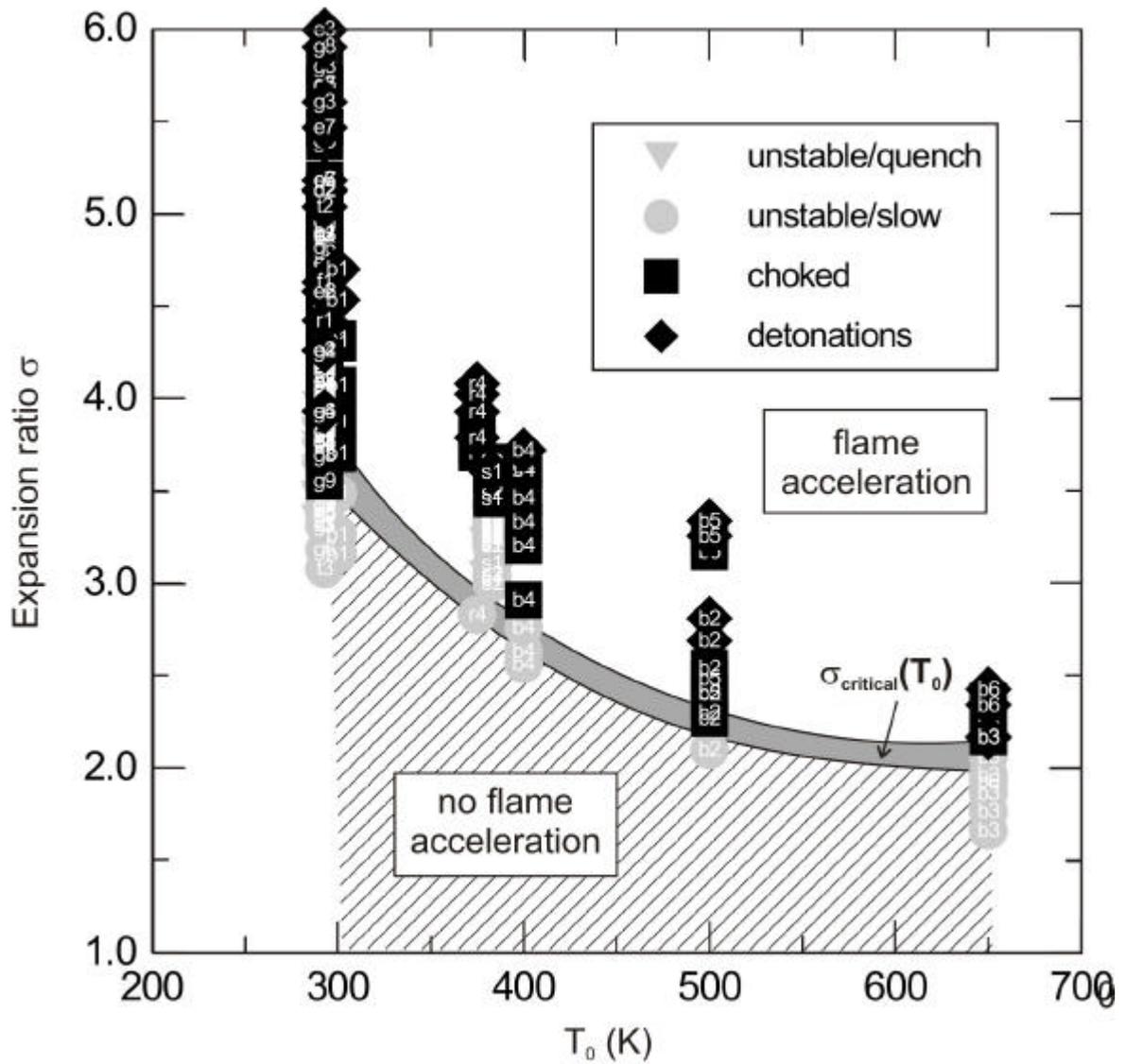


Abb.7.2.5: Verbrennungsregime von  $H_2$ - Luft- Dampf Mischungen als Funktion von Expansionsverhältnis  $\sigma$  und Anfangstemperatur  $T_0$ . Das kritische  $\sigma$  oberhalb dessen schnelle Verbrennungsformen auftreten können fällt mit zunehmender Temperatur (Daten aus Tabelle 7.2.1).

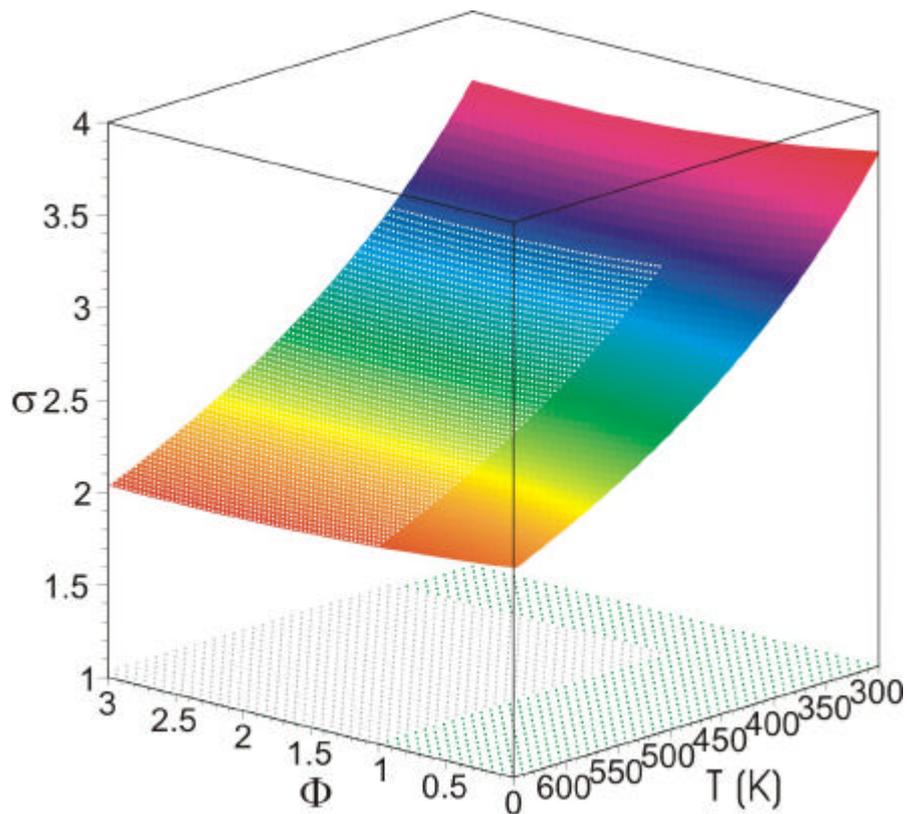


Abb. 7.2.6: Kritisches Expansionsverhältnis  $s_{\text{krit}}$  für Flammenbeschleunigung in  $\text{H}_2$ -Luft-Dampfmischungen als Funktion der Ausgangstemperatur  $T$  des Gemisches und des Äquivalenzverhältnisses  $\Phi$  ( $p_{\text{H}_2}/2p_{\text{O}_2}$ ), Least-Square-Fit aus allen verfügbaren experimentellen Daten. Unsicherheiten bestehen noch für überstöchiometrische Gemische mit Temperaturen oberhalb von  $100^\circ\text{C}$  (gepunkteter Bereich).

Tabelle 7.2.1 Experimentelle Daten die zur Ableitung des Flammenbeschleunigungs-kriteriums benutzt werden.

Quelle	Kenn- zeichen	Ver- sperrung BR	Rohr- Größe L, mm	Anfangs- temperatur T, K	Gas- mischung	Äquivalenz- verhältnisf
HTCF-BNL [3.11]	b1	0.43	273	300	H <sub>2</sub> /air	<1
HTCF-BNL [3.11]	b2	0.43	273	500	H <sub>2</sub> /air	<1
HTCF-BNL [3.11]	b3	0.43	273	650	H <sub>2</sub> /air	<1
HTCF-BNL [3.11]	b4	0.43	273	400	H <sub>2</sub> /air/H <sub>2</sub> O	<1
HTCF-BNL [3.11]	b5	0.43	273	500	H <sub>2</sub> /air/H <sub>2</sub> O	<1
HTCF-BNL [3.11]	b6	0.43	273	650	H <sub>2</sub> /air/H <sub>2</sub> O	<1
CHANNEL-RRCKI [3.9]	c1	0.1	80	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
CHANNEL-RRCKI [3.9]	c2	0.3	80	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
CHANNEL-RRCKI [3.9]	c3	0.6	80	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
CHANNEL-RRCKI [3.9]	c4	0.9	80	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
CHANNEL-RRCKI [3.9]	c5	0.6	80	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /He	1
CHANNEL-RRCKI [3.9]	c6	0.6	80	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /Ar	1
DRIVER-RRCKI [3.9]	d1	0.09	174	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
DRIVER-RRCKI [3.9]	d2	0.3	174	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
DRIVER-RRCKI [3.9]	d3	0.6	174	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
DRIVER-RRCKI [3.9]	d4	0.9	174	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
DRIVER-RRCKI [3.9]	d5	0.09	174	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /N <sub>2</sub>	1
DRIVER-RRCKI [3.9]	d6	0.3	174	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /N <sub>2</sub>	1
DRIVER-RRCKI [3.9]	d7	0.6	174	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /N <sub>2</sub>	1
DRIVER-RRCKI [3.9]	d8	0.9	174	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /N <sub>2</sub>	1
DRIVER-RRCKI [3.9]	e1	0.09	174	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /He	1
DRIVER-RRCKI [3.9]	e2	0.3	174	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /He	1
DRIVER-RRCKI [3.9]	e3	0.6	174	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /He	1
DRIVER-RRCKI [3.9]	e5	0.09	174	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /Ar	1
DRIVER-RRCKI [3.9]	e6	0.3	174	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /Ar	1
DRIVER-RRCKI [3.9]	e7	0.6	174	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /Ar	1
FLAME-SNL [3.15]	f1	0.33	1830	293	H <sub>2</sub> /air	<1
FLAME-SNL [3.15]	f2	0	1830	293	H <sub>2</sub> /air	<1
FZK [3.9]	g1	0.6	350	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
FZK [3.9]	g2	0.6	350	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /N <sub>2</sub>	1
FZK [3.9]	g3	0.6	350	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /He	1
FZK [3.9]	g4	0.6	350	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /Ar	1
FZK [3.9]	g5	0.6	350	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /CO <sub>2</sub>	1
FZK [3.9]	g6	0.6	350	293	H <sub>2</sub> /air/CO <sub>2</sub>	.5
FZK [3.9]	g7	0.6	350	293	H <sub>2</sub> /air/CO <sub>2</sub>	1
FZK [3.9]	g8	0.6	350	293	H <sub>2</sub> /air/CO <sub>2</sub>	2
FZK [3.9]	g9	0.6	350	293	H <sub>2</sub> /air/CO <sub>2</sub>	4
RUT-RRCKI [3.13]	r1	0.6	2250	293	H <sub>2</sub> /air	<1
RUT-RRCKI [3.13]	r2	0.3	2250	293	H <sub>2</sub> /air	<1
RUT-RRCKI [3.13]	r3	0	2250	293	H <sub>2</sub> /air	<1
RUT-RRCKI [3.14]	r4	0.3	2250	375	H <sub>2</sub> /air/H <sub>2</sub> O	≤1
HDT-SNL [3.12]	s1	0.6	406	383	H <sub>2</sub> /air	>1
HDT-SNL [3.12]	s2	0.3	406	383	H <sub>2</sub> /air/H <sub>2</sub> O	>1
TORPEDO-RRCKI [3.9]	t1	0.6	520	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
TORPEDO-RRCKI [3.9]	t2	0.6	520	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /He	1
TORPEDO-RRCKI [3.9]	t3	0.3	520	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
TORPEDO-RRCKI [3.9]	t4	0.1	520	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1

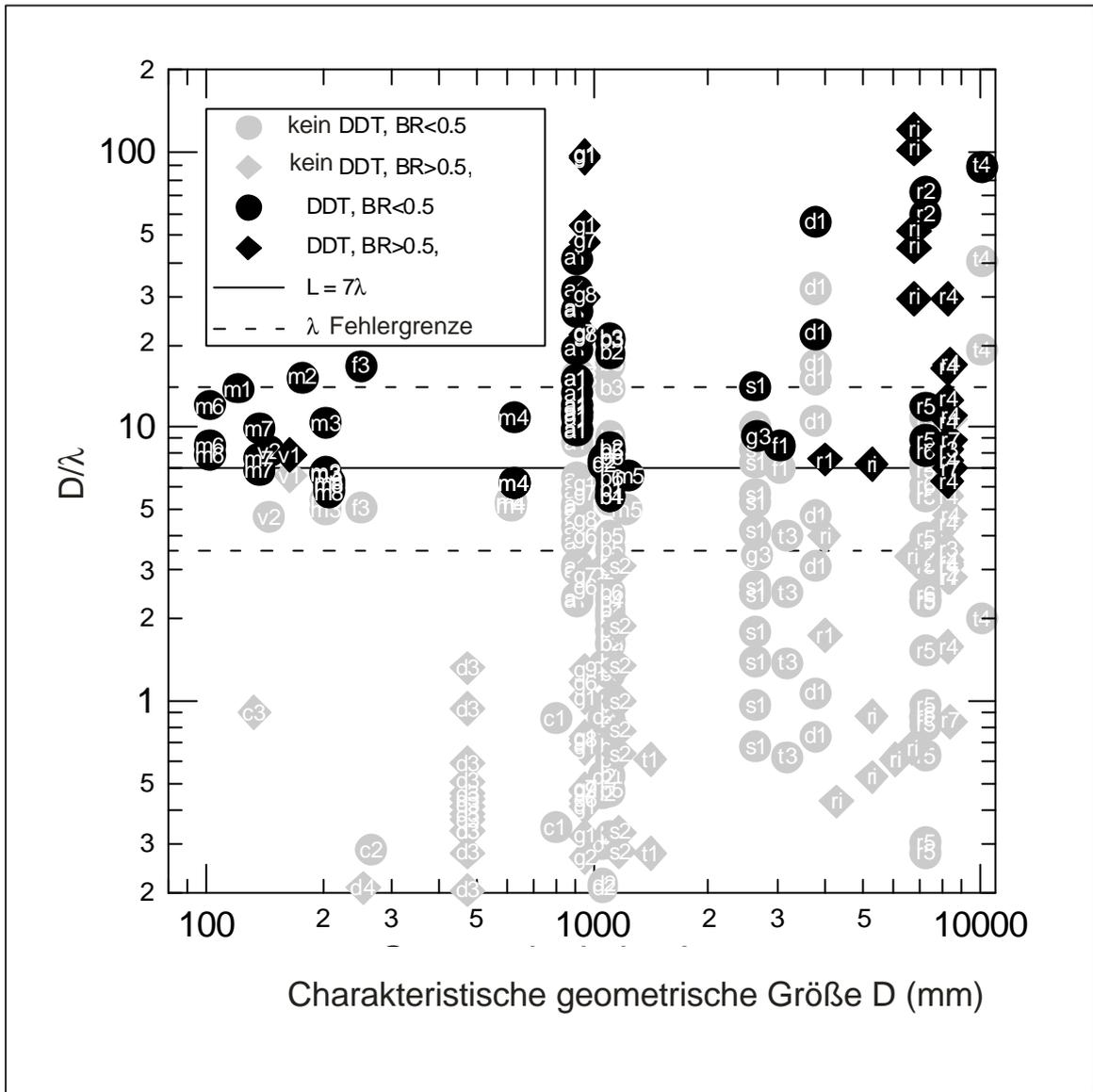
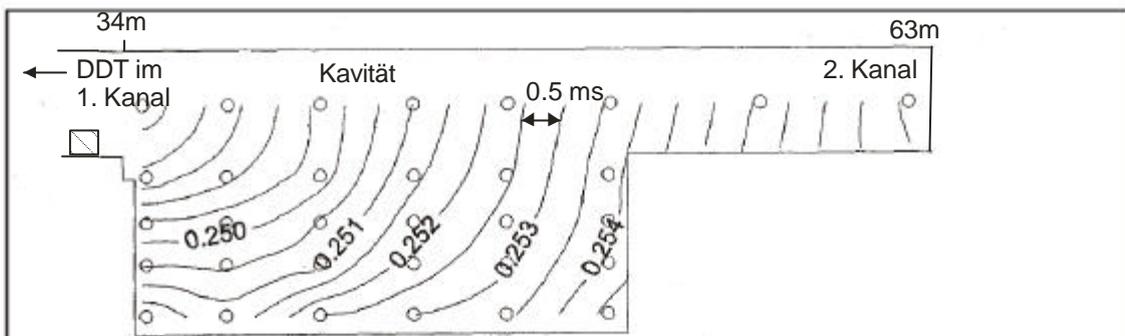


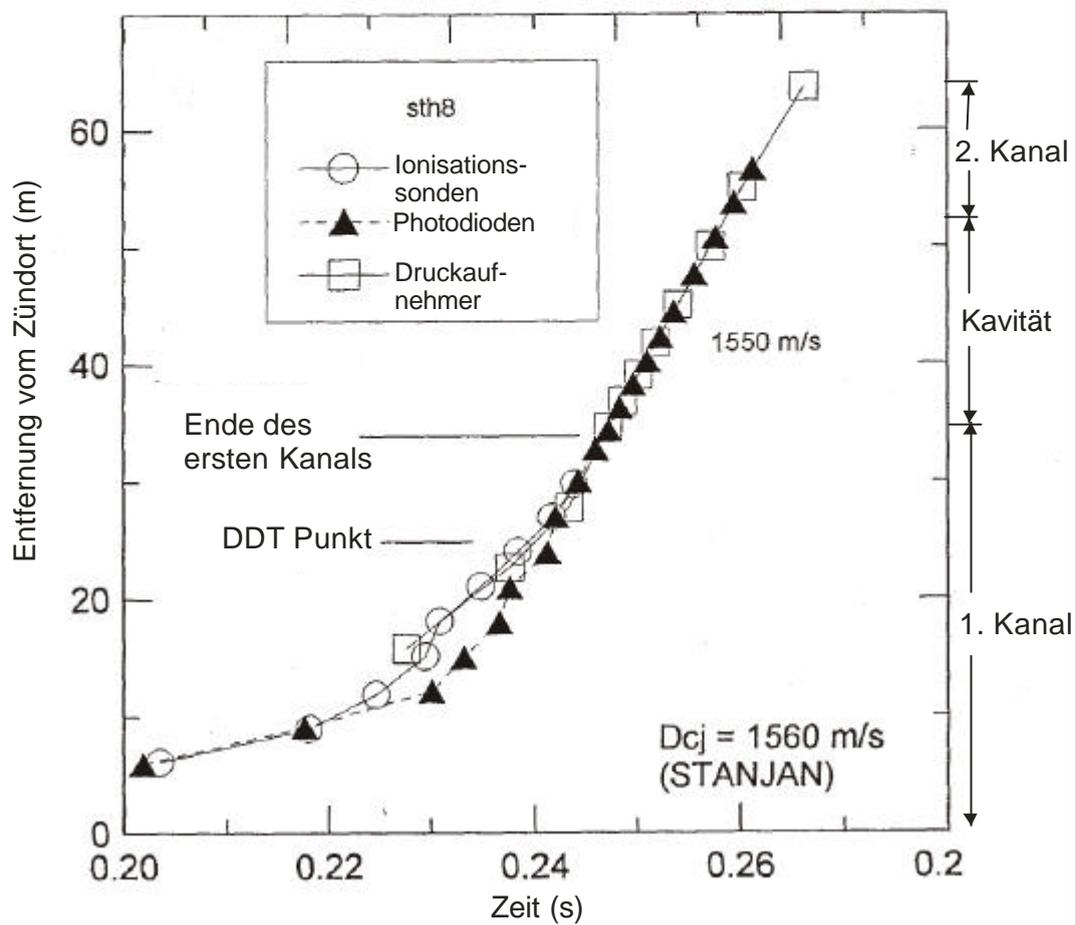
Abb.7.3.1: Darstellung aller bekannten DDT Versuche mit  $H_2$  im Format  $D/\lambda$  über  $D$  wobei  $D$  die charakteristische geometrische Größe der reagierenden  $H_2$ -Luftmischungen und  $\lambda$  die mittlere Detonationszellgröße der Mischung darstellt. Deflagrations/ Detonationsübergänge werden nur für  $d/\lambda \geq 7$  beobachtet. Die Versuchsdaten sind in Tabelle 7.3.2 aufgeführt.

Tabelle 7.3.2 Experimentelle Daten für D/λ- Korrelation

Quelle	Kenn- zei- che	Ver- sperrung BR	Rohr- Größe L, mm	Anfangs- temperatur T, K	Gas- mischung	Äquivalenz- verhältnisf
AECL [3.21]	a1	0.31	280	373	H <sub>2</sub> /air/H <sub>2</sub> O	
HTCF-BNL [3.11]	b1	0.43	273	300	H <sub>2</sub> /air	<1
HTCF-BNL [3.11]	b2	0.43	273	500	H <sub>2</sub> /air	<1
HTCF-BNL [3.11]	b3	0.43	273	650	H <sub>2</sub> /air	<1
HTCF-BNL [3.11]	b4	0.43	273	400	H <sub>2</sub> /air/H <sub>2</sub> O	<1
HTCF-BNL [3.11]	b5	0.43	273	500	H <sub>2</sub> /air/H <sub>2</sub> O	<1
HTCF-BNL [3.11]	b6	0.43	273	650	H <sub>2</sub> /air/H <sub>2</sub> O	<1
CHANNEL-RRCKI [3.9]	c1	0.1	80	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
CHANNEL-RRCKI [3.9]	c2	0.3	80	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
CHANNEL-RRCKI [3.9]	c3	0.6	80	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
DRIVER-RRCKI [3.9]	d1	0.09	174	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
DRIVER-RRCKI [3.9]	d2	0.3	174	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
DRIVER-RRCKI [3.9]	d3	0.6	174	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
DRIVER-RRCKI [3.9]	d4	0.9	174	293	H <sub>2</sub> /air	<1
FLAME-SNL [3.15]	f1	0.33	1830	293	H <sub>2</sub> /air	<1
mini-FLAME-SNL [3.47]	f3	0.33	150	293	H <sub>2</sub> /air	<1
FZK [3.9]	g1	0.6	350	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
FZK [3.9]	g2	0.6	350	293	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> /N <sub>2</sub>	1
FZK [3.9]	g3	0.3	350	293	H <sub>2</sub> /air	1
FZK [3.9]	g6	0.6	350	293	H <sub>2</sub> /air/CO <sub>2</sub>	.5
FZK [3.9]	g7	0.6	350	293	H <sub>2</sub> /air/CO <sub>2</sub>	1
FZK [3.9]	g8	0.6	350	293	H <sub>2</sub> /air/CO <sub>2</sub>	2
FZK [3.9]	g9	0.6	350	293	H <sub>2</sub> /air/CO <sub>2</sub>	4
McGill [3.25]	m1	0.44	16 x 57 x 50	293	H <sub>2</sub> /air	<1
McGill [3.25]	m2	0.44	16 x 57 x 100	293	H <sub>2</sub> /air	<1
McGill [3.26]	m3	0.43	50	293	H <sub>2</sub> , CH-fuels/air	<1
McGill [3.26]	m4	0.43	150	293	H <sub>2</sub> , CH-fuels/air	<1
McGill [3.26]	m5	0.43	300	293	H <sub>2</sub> , CH-fuels/air	<1
McGill [3.27]	m6	0.44	65 x 52 x 32	293	H <sub>2</sub> , CH-fuels/air	<1
McGill [3.27]	m7	0.44	65 x 52 x 64	293	H <sub>2</sub> , CH-fuels/air	<1
McGill [3.27]	m8	0.44	65 x 52 x 128	293	H <sub>2</sub> , CH-fuels/air	<1
RUT-RRCKI [3.13]	r1	0.6	2250	293	H <sub>2</sub> /air	<1
RUT-RRCKI [3.13]	r2	0.3	2250	293	H <sub>2</sub> /air	<1
RUT-RRCKI [3.13]	r3	room	10.5 x 6 x 2.3 m	293	H <sub>2</sub> /air	<1
RUT-RRCKI [3.14]	r4	room	10.5 x 6 x 2.3 m	375	H <sub>2</sub> /air/H <sub>2</sub> O	≤1
RUT-RRCKI [3.14]	r5	0.3	2250	375	H <sub>2</sub> /air/H <sub>2</sub> O	≤1
RUT-RRCKI [3.40]	r6	0.3	2250	293	H <sub>2</sub> /air/CO <sub>2</sub>	<1
RUT-RRCKI [3.40]	r7	room	10.5 x 6 x 2.3 m	293	H <sub>2</sub> /air/CO <sub>2</sub>	<1
RUT-RRCKI [3.45]	ri	room	15 x 6 x 2.3 m	293	H <sub>2</sub> -injection	≤1
HDT-SNL [3.12]	s1	0.6	406	383	H <sub>2</sub> /air	>1
HDT-SNL [3.12]	s2	0.3	406	383	H <sub>2</sub> /air/H <sub>2</sub> O	>1
TORPEDO-RRCKI [3.9]	t1	0.6	520	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
TORPEDO-RRCKI [3.9]	t3	0.3	520	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
TORPEDO-RRCKI [3.9]	t4	0.1	520	293	H <sub>2</sub> /air	<1; >1
mini-RUT-RRCKI [3.44]	v1	0.3	46	293	H <sub>2</sub> /air	<1
mini-RUT-RRCKI [3.44]	v2	room	210 x 120 x 50	293	H <sub>2</sub> /air	<1



- Projektion der Detonationsfront in der Kavität bei Versuch sth8. Zahlen zeigen die Zeit nach Zündung der Mischung am Anfang des 1. Kanals (links)



- Weg-Zeit Diagramm des Verbrennungsprozesses im Versuch sth8

Abb.7.3.2: Beispiel für DDT in RUT- Versuch sth8

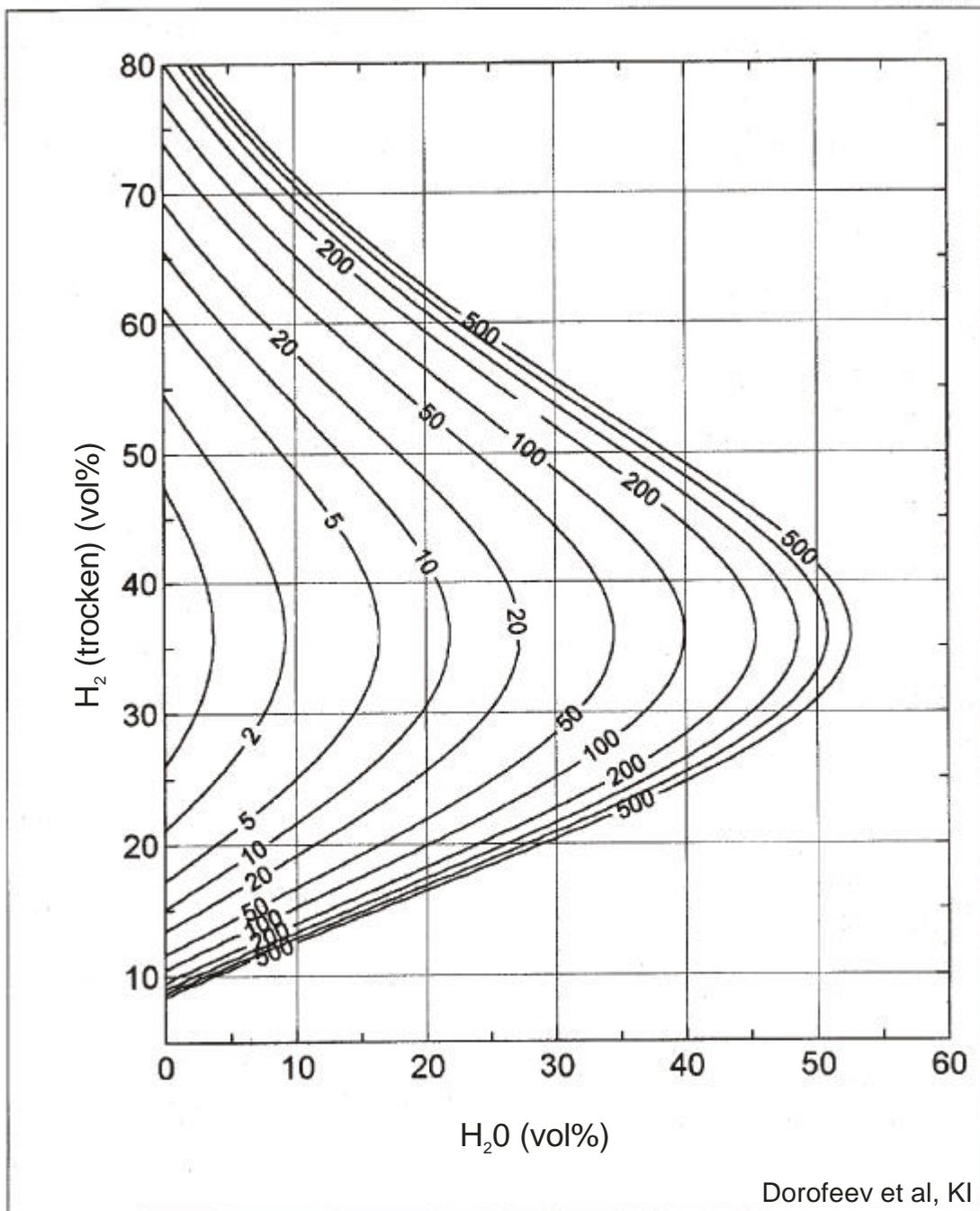


Abb.7.3.3: Berechnete Detonationszellgrößen (in cm) von Wasserstoff- Luft- Dampf Gemischen bei 375 K und 1 bar als Funktion des Dampfgehalts und der trockenen H<sub>2</sub>-Konzentration [ $H_2^{\text{trocken}} = H_2/(H_2+Luft)$ ].

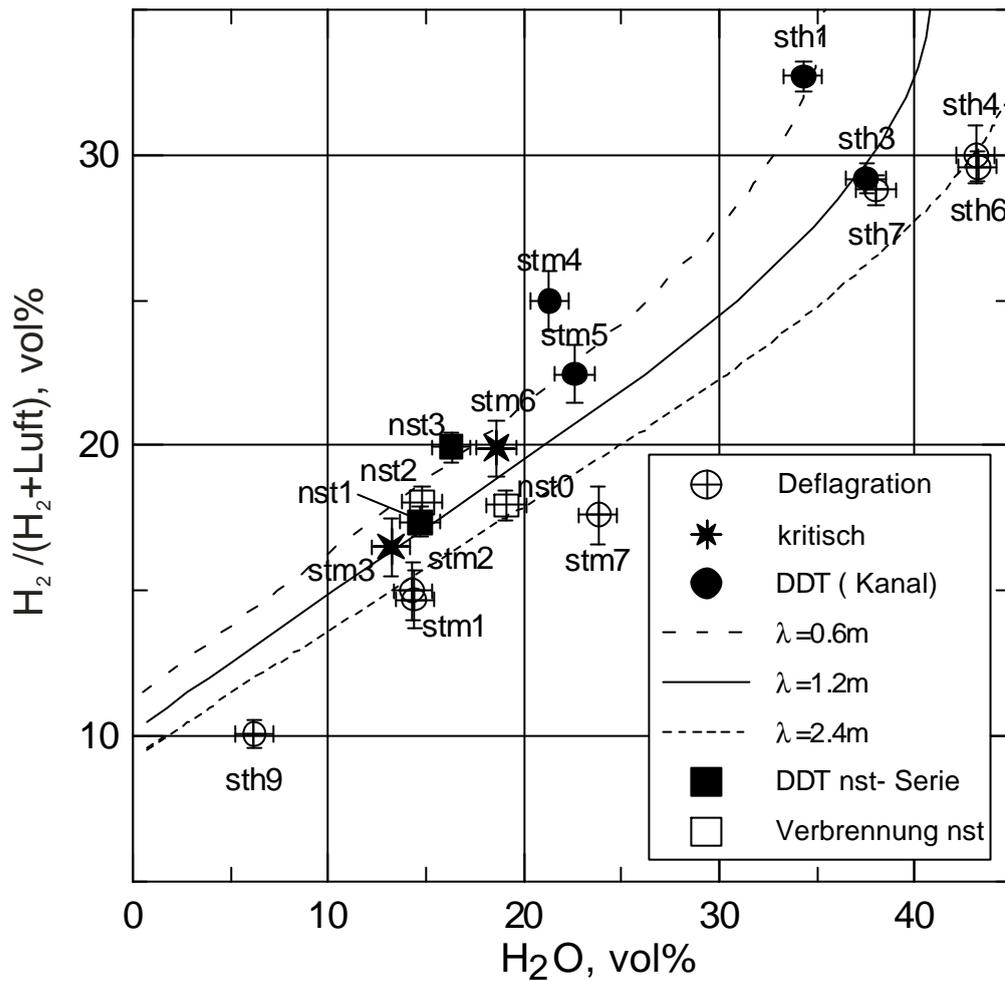
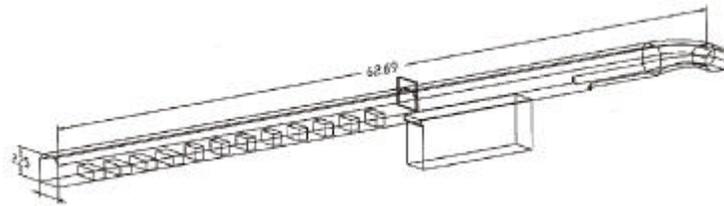


Abb.7.3.4: Mittlere Gemischzusammensetzungen der drei RUT- Versuchsserien stm, sth und nst mit H<sub>2</sub>- Luft- Dampf Gemischen ( $T \approx 100^\circ\text{C}$ ,  $p_0 \approx 1 \text{ bar}$ ) und beobachtete Verbrennungsregimes. Übergänge Deflagration zur Detonation (schwarze Symbole) treten nur bei hinreichend sensitiven Gemischen auf (z.B.  $\lambda \approx 1.2\text{m}$  für DDT in der Kavität)



Versuchs bezeichn.	Gasmischung				Experimentelle Ergebnisse		
	Erster Kanal		Kavität		Flamme erreicht Schall- geschw. im Kanal	Größe der Kavität ausreichend	DDT in Kavität
	% H <sub>2</sub> trock.	% Dampf	% H <sub>2</sub> trock.	% Dampf			
nst 0	13.8	14.8	17.9	18.5	+	-	-
nst 1	14.1	16.0	18.0	14.6	+	+	+
nst 2	12.2	14.9	18.0	14.8	-	+	-
nst 3	12.2	14.6	20.0	16.3	+	+	+
Anmerk.	± 0.5 %	± 1 %	± 0.5 %	± 1 %	$v_{\text{flame}} \approx c_{\text{products}}$	$D_{\text{canyon}} \geq 7\lambda$	$v_{\text{flame}} \approx d_{\text{cj}}$

Abb.7.4.1: Versuche in der RUT- Anlage mit unterschiedlichen Gasmischungen im 1. Kanal und Kavität. Notwendige Bedingungen für den Übergang von Deflagration zu Detonation (DDT) sind Flammenbeschleunigung auf Schallgeschwindigkeit (sonic flame) und hinreichende große Abmessung der reagierenden Gasmischungen ( $D \geq 7\lambda$ ).

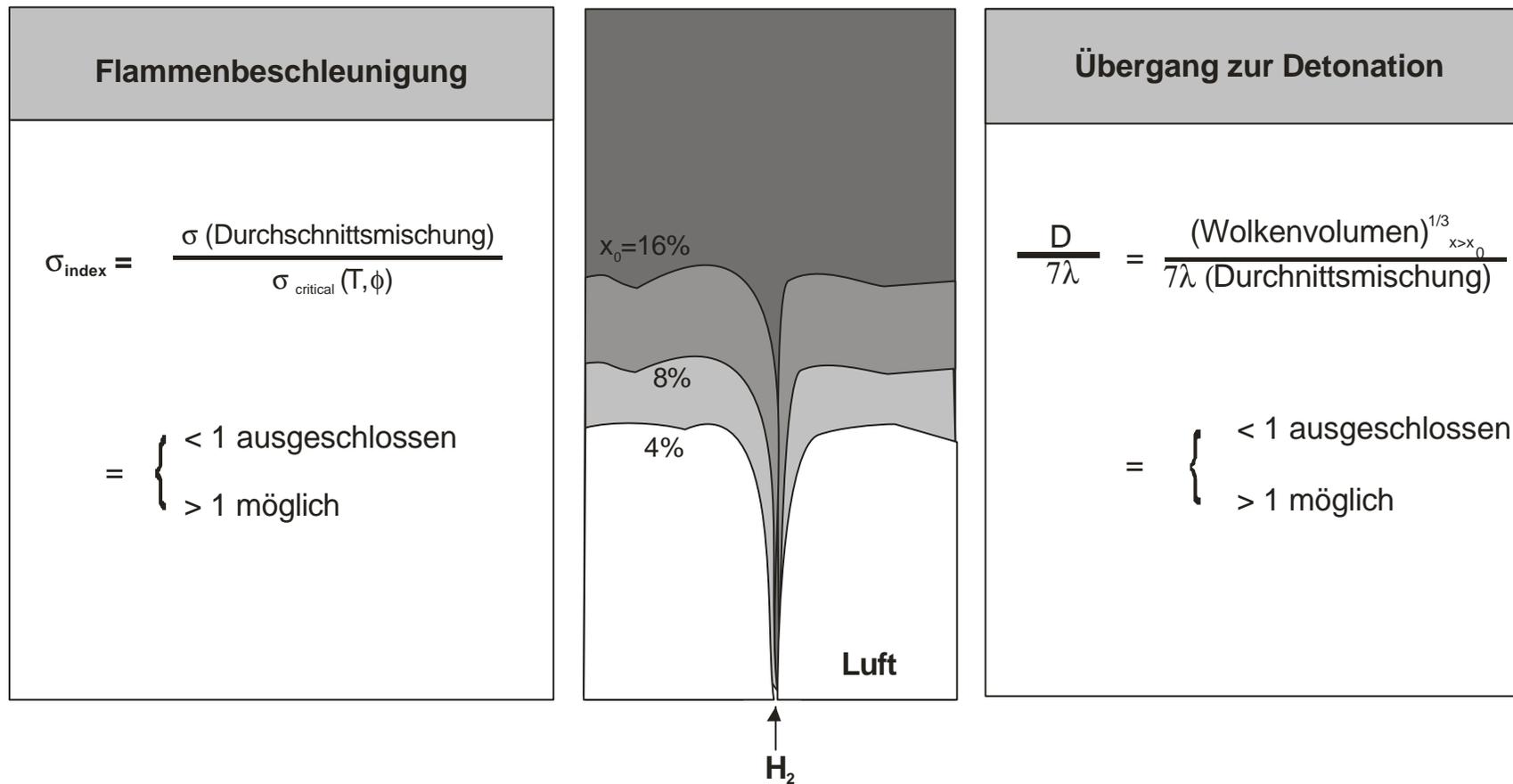


Abb.7.4.2: Zusammenfassung der notwendigen Kriterien für Flammenbeschleunigung und Deflagrations / Detonationsübergang in H<sub>2</sub>-Luft-Dampfgemischen.

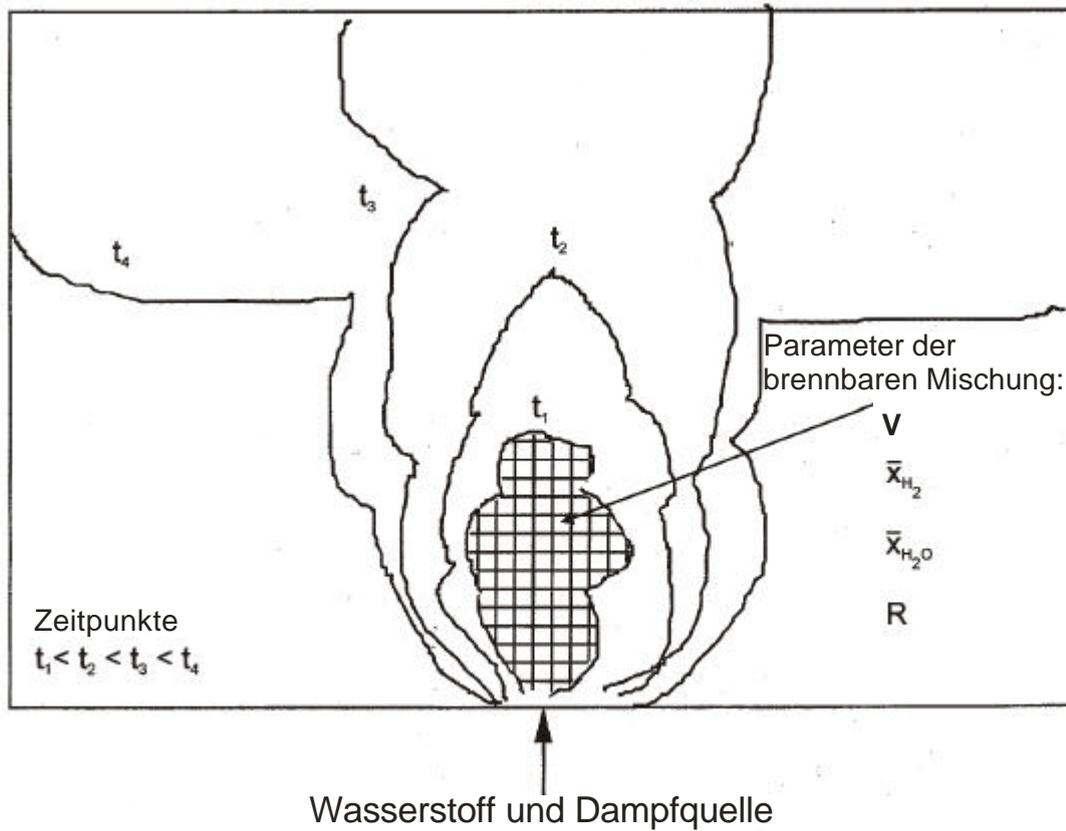


Abb.7.5.1: Schematische Darstellung zur Ausbreitung der brennbaren Gasmischung bei Injektion von Wasserstoff und Dampf in einen luftgefüllten Raum. Im GASFLOW- Modell wird zu jedem Zeitpunkt  $t$  das Volumen der brennbaren Mischung, die mittlere  $H_2$ - Konzentration, Dampfkonzentration, Temperatur und Detonationszellgröße berechnet. Hiermit lassen sich die Kriterien für Flammenbeschleunigung und DDT in ihrer zeitlichen Entwicklung auswerten.

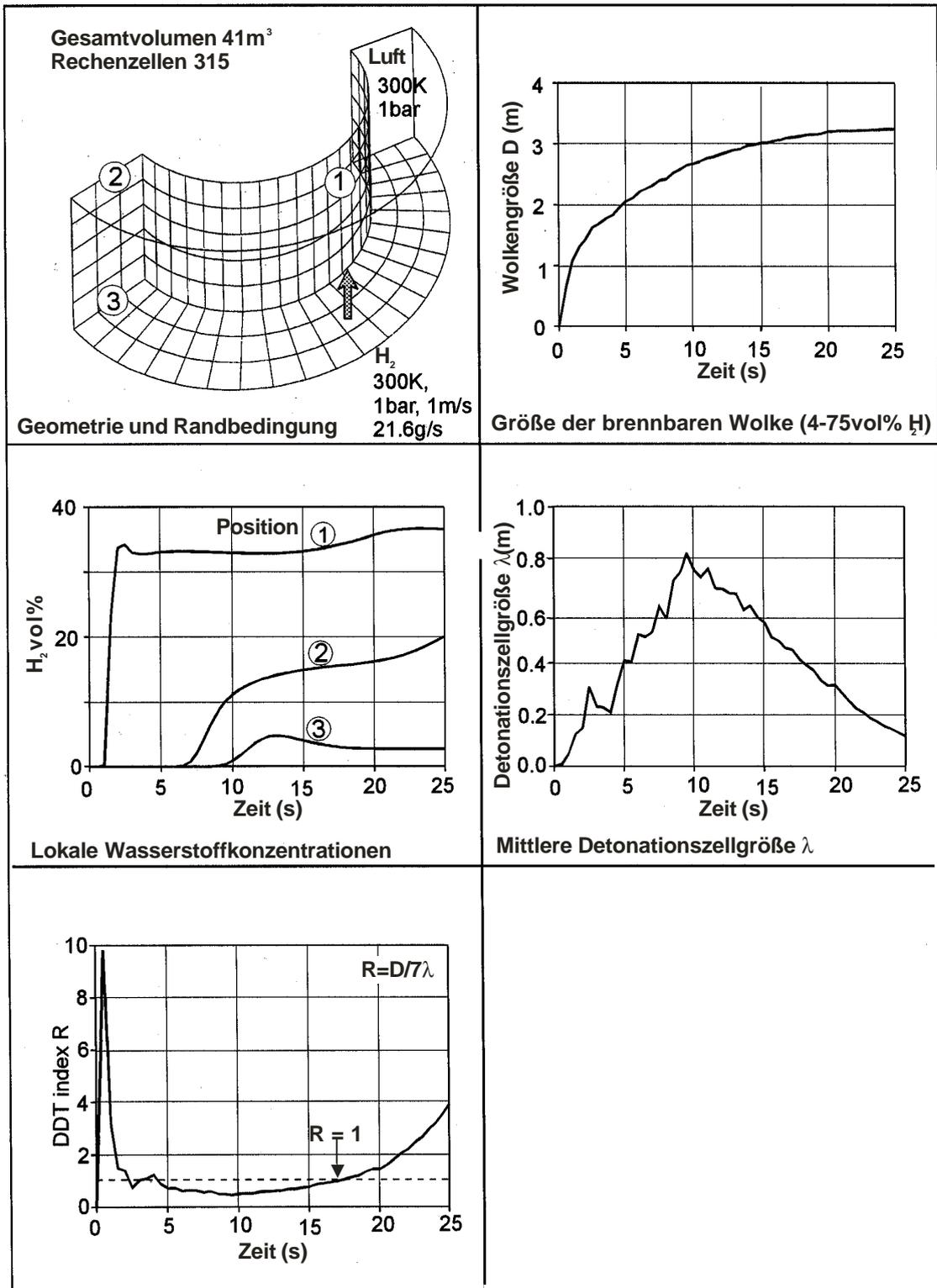


Abb.7.5.2: GASFLOW Testrechnung zur Bestimmung des DDT-Index  $R = D/7\lambda$  bei Injektion von Wasserstoff in Luft, BMC- Raum ohne Zündung. DDT ist möglich nach ca. 17 s ( $R \geq 1$ ).

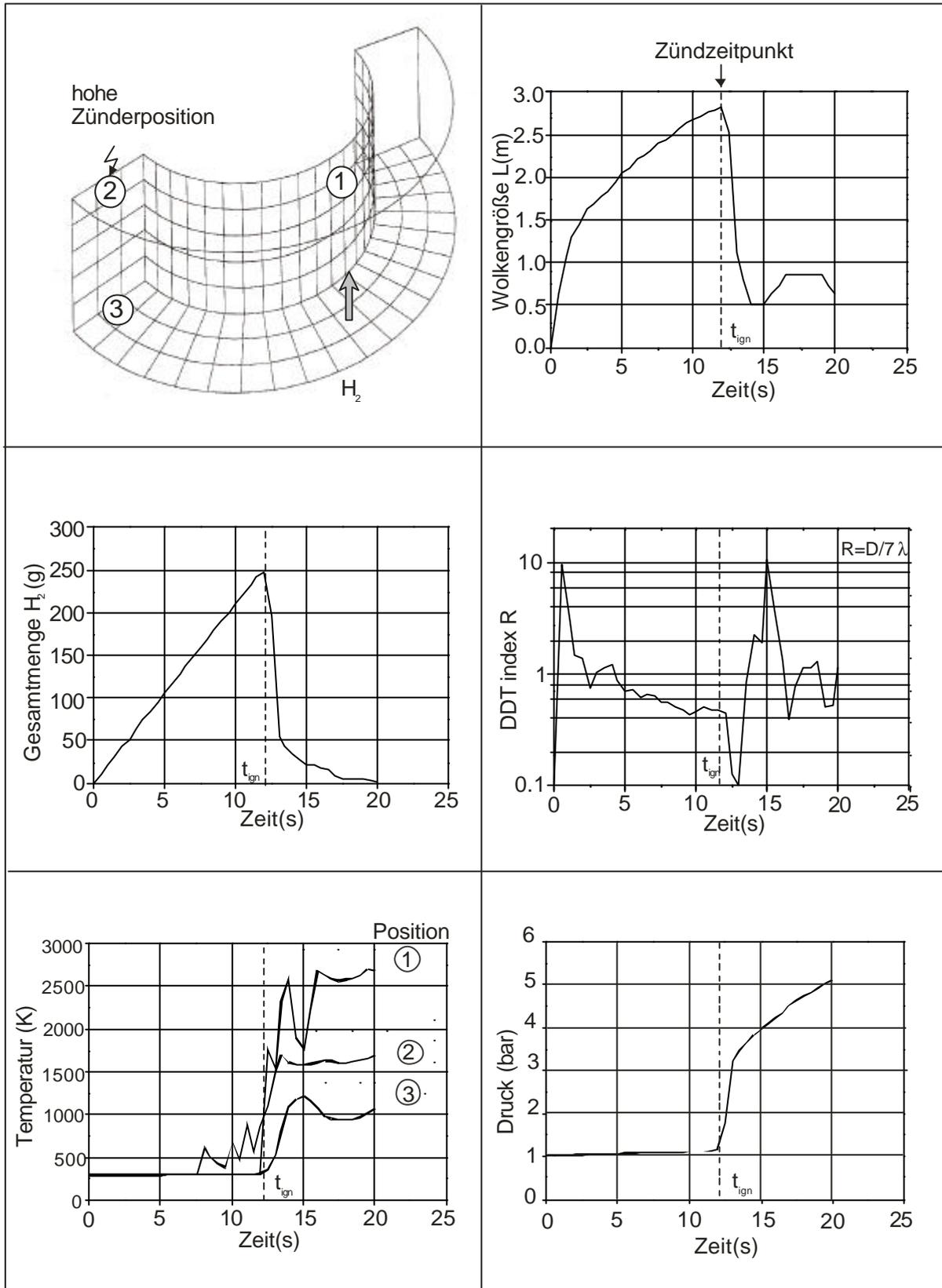


Abb.7.5.3: GASFLOW Analyse des Testproblems von Abb. 7.5.2 mit hoch angebrachtem Zünder. Diese Zünderposition führt zu einer frühen Zündung bei ca. 12 s ohne DDT- Potential ( $R(t_{ign}) < 1$ ). Etwa 250 g Wasserstoff brennen aus.

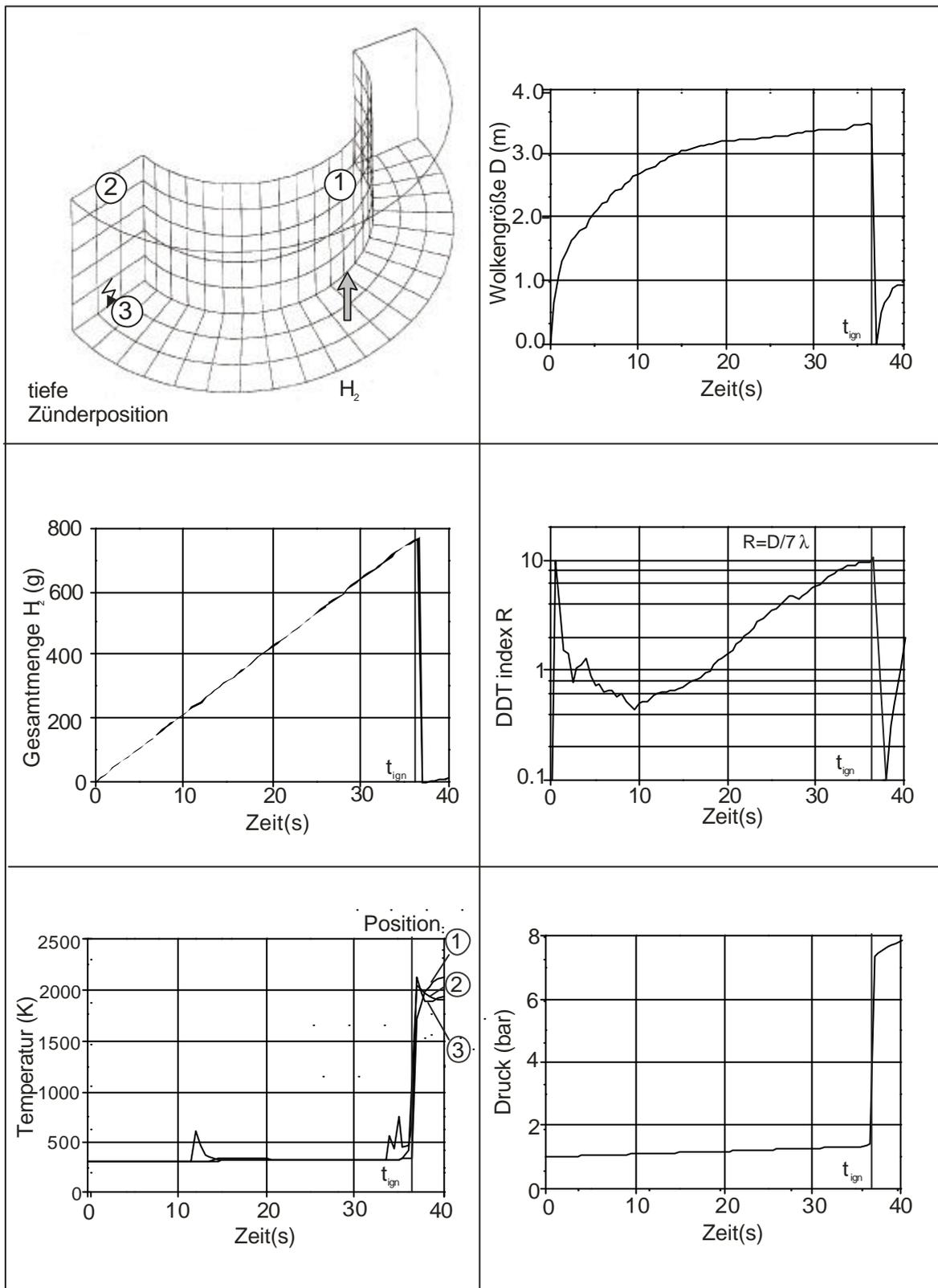


Abb.7.5.4: GASFLOW Analyse des Testproblems von Abb. 7.5.2 mit tiefer Zünderposition. Eine brennbare  $H_2$ -Konzentration ( $> 4\%$ ) wird an dieser Stelle erst nach ca. 37 s Einspeisung bei einem Inventar von fast 800g  $H_2$  erreicht. Der DDT- Index R hat zu dieser Zeit Werte  $\gg 1$  erreicht, d.h. ein DDT Ereignis wäre bei dieser ungünstigen Zünderlage nicht auszuschließen.



## 8. Wasserstoffverbrennung

### 8.1 Mögliche Verbrennungsregimes in Wasserstoff-Luft-Gemischen

Wasserstoffverbrennungsvorgänge können je nach den Anfangs- und Randbedingungen auf sehr unterschiedliche Art ablaufen. Die dabei auftretenden maximalen Drücke und maximalen Flammengeschwindigkeiten können um mehrere Größenordnungen variieren. Bild 8.1.1 zeigt beispielhaft schlierenphotographische Aufnahmen von Wasserstoffverbrennungsvorgängen in einem Rechteckkanal. In der linken Abbildung ist eine laminare Wasserstoffflamme dargestellt. Die laminare Flammengeschwindigkeit ist von der Größenordnung 1 m/s, die Flamme breitet sich also mit Unterschallgeschwindigkeit aus. Dieser Verbrennungsmodus kann beispielsweise unmittelbar nach der Zündung in einem anfangs ruhenden Medium beobachtet werden. Das mittlere Bild zeigt eine turbulente Flamme. Die Flammengeschwindigkeit ist von der Größenordnung 300 m/s und liegt damit in der Nähe der Schallgeschwindigkeit des unverbrannten Gases. Ein hinreichend sensitives Gasmisch wird in der Regel mit einer turbulenten Flamme verbrennen. Die rechte Aufnahme in Bild 8.1.1 zeigt eine sich ausbildende Detonationsfront. Deutlich ist die interne Struktur einer solchen Front zu erkennen. Die Front breitet sich mit Überschallgeschwindigkeit aus.

Wie Bild 8.1.2 zeigt, sind die zu erwartenden Maximaldrücke direkt von der auftretenden Flammenausbreitungsgeschwindigkeit abhängig. In dem Diagramm sind experimentelle Ergebnisse aus den verschiedenen Versuchsanlagen sowie die Vorhersagen eines ebenen Flammenausbreitungsmodells zusammengefasst. Je schneller die Flamme brennt, desto größer sind auch die auftretenden Druckspitzen.

Bild 8.1.3 zeigt gemessene Druckverläufe für verschiedene Versuche in der RUT Anlage. Aus den drei Diagrammen wird deutlich, dass das Verbrennungsregime nicht nur den Maximaldruck sondern auch die Zeitskala der Druckbelastung bestimmt. Im Falle einer langsamen Deflagration (obere Kurve) treten relativ geringe Überdrücke von etwa 1 bar auf, diese bleiben aber für mehrere hundert Millisekunden wirksam. Im Falle einer Detonation, der schnellstmöglichen Verbrennungsform werden Drücke von mehr als 30 bar beobachtet, aber die Druckspitzen dauern nur wenige Millisekunden. Derartige Daten sind für die Beurteilung des Antwortverhaltens von Anlagenstrukturen wichtig.

Eine systematische Unterteilung turbulenter Verbrennungsvorgänge ist mit Hilfe des Borghi-Diagramm möglich wie in Bild 8.1.4 dargestellt. In diesem Diagramm werden dimensionslose Geschwindigkeiten über einem dimensionslosen Längenmaß aufgetragen. Die jeweiligen Werte werden aus dem Verhältnis der charakteristischer Größen der Turbulenz zu charakteristischen Größen der Verbrennung gebildet. Die verschiedenen Bereiche des Borghi-Diagramm werden durch die turbulente Reynoldszahl, die Damköhlerzahl und die Karlovitzzahl bestimmt. Die Definitionsgleichungen dieser Kennzahlen sind ebenfalls in Bild 8.1.4 angegeben. Die Damköhlerzahl ist damit das Verhältnis der charakteristischen Zeitskala der makroskopischen Wirbel zur Zeitskala der laminaren Verbrennung. Die Karlovitzzahl ist analog das Verhältnis der charakteristischen Zeitskala der kleinsten Wirbel zur Zeitskala der laminaren Verbrennung. Für hinreichend kleine Turbulenzgrößen verläuft die Verbrennung laminar (Bereich 1). Ist das Längenmaß der Turbulenz wesentlich größer als die laminare Flammendicke, so wird die laminare

Flammenfront durch die Wirkung der Turbulenz lediglich gewellt (Bereich 2) bzw. gefaltet (Bereich 3). Aufgrund der geringen laminaren Flammendicke wird man bei einer Konzentrationsmessung entweder vollständig verbranntes Gas oder vollständig unverbranntes Gas feststellen. Zwischenprodukte werden praktisch nicht gefunden. Für die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion einer Reaktionsfortschrittsvariablen bedeutet dies, dass eine bimodale Verteilung mit Spitzen bei 0 und 1 vorliegt. Steigt die Turbulenzintensität weiter an, so wird die Struktur der laminaren Flamme selbst durch die Turbulenz modifiziert (verdickte Flammen, Bereich 4). Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion hat in diesem Fall wiederum Maxima an den Enden bei 0 und 1 zusätzlich existiert aber eine dritte Spitze in der Mitte für teilweise reagiertes Gemisch. Wird die turbulente Vermischung noch stärker, so läuft die Reaktion praktisch gleichzeitig im gesamten Volumen ab. Dies ist der Fall eines homogenen Reaktors (Bereich 5). Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion verschwindet für diesen Fall an den Rändern, da man praktisch überall teilweise reagiertes Gas findet. Mit zunehmender Turbulenz wird das Maximum dabei aber immer steiler. Die verschiedenen beschriebenen Bereiche erfordern unterschiedliche Modellierungsansätze, da jeweils unterschiedliche Prozesse den Verbrennungsvorgang kontrollieren.

Für die Simulation von Verbrennungsvorgängen ist es wichtig, das richtige Verbrennungsregime vorherzusagen und die dabei zu erwartenden Lasten richtig zu beschreiben. Da in den verschiedenen Verbrennungsregimes verschiedene physikalische Effekte dominieren werden mehrere Verbrennungscodes eingesetzt. Die nachfolgende Tabelle 8.1.1 gibt eine Übersicht über die in diesem Projekt entwickelten Verbrennungscodes und ihre wesentlichen Eigenschaften. Weitere Einzelheiten zu diesen Programmen finden sich in den in der Tabelle angegebenen Abschnitten.

Für die Verifikation der verschiedenen Verbrennungscodes wurden für verschiedene Problemstellungen Vergleiche mit analytischen oder numerischen Lösungen sowie mit experimentellen Daten durchgeführt. Tabelle 8.1.2 gibt eine Übersicht über die durchgeführten Verifikationsversuche und die dazugehörigen Rechnungen. In der Tabelle sind die jeweiligen Kapitel angegeben, in denen weitere Informationen zu den Tests dokumentiert sind. Die entsprechenden **Referenzen** sind am Ende des Kapitels zu finden.

**Tabelle 8.1.1 Zusammenfassung wesentlicher Charakteristika der verschiedenen Verbrennungscodes**

Verbrennungsregime	Code	Modellierung	Bemerkung
Stehende Diffusionsflamme	V3D		Siehe 8.2
	Löser	Semi-impliziter Löser (ALE)	
	Geometrie	3d, kubisches Gitter, GUI	
	Strömung & Transport	3d, Navier-Stokes, voll kompressibel	
	Thermodynamik	JANAF, CHEMKIN	
	Turbulenz	k-ε	
	Chemische Reaktion	Arrhenius Ansatz	
Langsame Deflagration	FLAME3D		Siehe 8.3
	Löser	Expliziter Löser (HLL)	
	Geometrie	3d, kubisches Gitter, GUI	
	Strömung & Transport	3d, Euler, voll kompressibel	
	Thermodynamik	JANAF	
	Turbulenz	Keine	
	Chemische Reaktion	Vorgegebene Brennrate	
Schnelle turbulente Deflagration	COM3D		Siehe 8.4
	Löser	Expliziter Löser (TVD)	
	Geometrie	3d, kubisches Gitter, GUI	
	Strömung & Transport	3d, Navier-Stokes, voll kompressibel	
	Thermodynamik	JANAF, CHEMKIN	
	Turbulenz	k-ε, RNG k-ε	
	Chemische Reaktion	Eddy Break Up (EBU) Prob. Densitz Function (PDF)	
	Flammengeschwindigkeit	Wellenfrontansatz	
Detonation	DET3D		Siehe 8.5
	Löser	Expliziter Löser	
	Geometrie	3d, kubisches Gitter, GUI	
	Strömung & Transport	3d, Euler, voll kompressibel	
	Thermodynamik	JANAF	
	Turbulenz	Keine	
	Chemische Reaktion	Effektive Reaktionswärme $Q(\Phi, x_{H_2O})$ aus D(STANJAN)	

**Tabelle 8.1.2: Wasserstoffdeflagration**

VERBRENNUNGSREGIME	MODELLIERUNG	Abb.	VERIFIKATION						
			Analyt. oder num.Lösung	Einzeleffektversuche			Integralversuche		
STEHENDE DIFFUSIONSFLAMME V3D	- semi-impliziter Löser			Abb. 8.2.1 FZK-Rohr versuche	Abb. 8.2.2 Stehende Flamme				
Geometrie	- 3d, kubisches Gitter, GUI			●		●			
Strömungsmechanik	- 3d, Navier-Stokes, voll. Kompr.			●		●			
Thermodynamik	- JANAF, CHEMKIN			●		●			
Turbulenz	- k/ε			●		●			
Chemische Reaktion	- Arrhenius								
• LANGSAME DEFLAGRATION, FLAME3D:	Abb. - expliziter Löser		8.3.1	8.3.2		8.3.3			
- Geometrie	- 3d, kubisches Gitter, GUI			RUT HYC		RUT HYC 11-14 (blind)			
- Strömungsmechanik	- 3d, Euler, voll kompressibel			●		●			
- Thermodynamik	- JANAF			●		●			
- Turbulenz	- keine			●		●			
- Chemische Reaktion	- vorgegebene Brennrate		• 1,2D Deton	●		●			
• SCHNELLE TURBULENTE DEFLAGRATION, COM3D:	Abb.	8.4.1	8.4.2	8.4.3	8.4.4	8.4.5	8.4.5	8.4.6	8.4.7
- Geometrie	- 3d, kubisches Gitter, GUI		• 2D Stufe	Vortex	FZK-12m-Rohrversuche			RUT Konf. I	RUT Konf. II
- Strömungsmechanik	- 3d Navier-Stokes, voll kompr.		●	●	●	●	●	●	●
- Thermodynamik	- JANAF, CHEMKIN		●	●	●	●	●	●	●
- Turbulenz	- k/ε, RNG k/ε			●	●	●	●	●	●
- Chemische Reaktion	- Eddy Break Up (EBU) Wahrsch.dichtefunktion (PDF)			●	●	●	●	●	●
- Flammgeschwindigkeit	- Wellenfrontansatz								

**Tabelle 8.1.3: Wasserstoffdetonation**

VERBRENNUNGSREGIME	MODELLIERUNG	VERIFIKATION			
		Analyt. oder num.Lösung	Einzeleffektversuche		Integralversuche
• DETONATION, DET3D:	- expliziter Löser <span style="float: right;">Abb. 8.5.1</span>	8.5.2	8.5.3 Ballon	8.5.4 FZK-12m-Rohr	8.5.5 RUT
- Geometrie	- 3d, kubisches Gitter, GUI		•	•	•
- Strömung und Transport	- 3d Euler Gleichungen, voll kompr.		•	•	•
- Thermodynamik	- JANAF		•	•	•
- Chemische Reaktion	- effektive Reaktionswärme $Q(\phi, x_{H_2O})$ aus D(STANJAN)	• 1D-Detonat. • Codevergl. • STANJAN	•	•	•
			mit Code-Benchmark		

## 8.2 Verifikation des Codes V3D

### 8.2.1 Beschreibung des Verbrennungscodes V3D

Der Verbrennungscode V3D wird für die Simulation von Diffusionsflammen und von langsamen vorgemischten Verbrennungsvorgänge eingesetzt. Das Programm kombiniert die kompressiblen Navier-Stokes Gleichungen mit dem k-ε-Turbulenzmodell. Das daraus resultierende Gleichungssystem ist in Bild 8.2.1.1 wiedergegeben. Ergänzt werden diese Gleichungen durch ein Verbrennungsmodell (siehe Bild 8.2.1.2). Dieses Verbrennungsmodell verwendet einen Arrhenius-Ansatz zur Beschreibung der Umsatzrate der globalen chemischen Reaktionen.

Als Lösungsverfahren kommt die ALE-Methode zum Einsatz. Dies ist ein implizites Verfahren. Die Diskretisierung der Gleichungen erfolgt in einem äquidistanten Gitter.

### 8.2.2 Stoßrohrexperiment in FZK 12 m Rohr

<b>Problembeschreibung:</b> Stoßwellenausbreitung in einem Rohr mit Hindernissen (Experiment R1096_03). Anlagengeometrie gemäß Bild 8.4.4.1. Anfangsbedingungen: Hochdruckteil – Helium 5 bar, Niederdruckteil – Luft 0.99 bar.
<b>Zweck:</b> Verifikation von Fluidodynamik und Turbulenzmodell.
<b>Validationskriterium:</b> Vergleich mit experimentellen Daten.
<b>Numerik:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- Gitter: 3D, äquidistant, <math>\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.0175\text{m}</math></li><li>- Gitterauflösung: <math>10 \times 10 \times 686 = 68600</math> Zellen</li><li>- Gleichungslöser: ALE-Verfahren</li><li>- Codeversion: 1.2.3</li><li>- Hardware: IBM RISC 6000</li></ul>
<b>Ergebnisse:</b> V3D mit standard k-ε Modell zeigt gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten.
<b>Kommentar:</b> Vergleich Experiment /Rechnung in Abb. 8.4.4.5

## 8.3 Verifikation des Codes FLAME3D

### 8.3.1 Beschreibung des Verbrennungscodes FLAME3D

Das Programm FLAME3D ermöglicht die schnelle Simulation turbulenter Verbrennungsvorgänge mit einem vereinfachten Verfahren. Das verwendete Gleichungssystem ist in Bild 8.3.1.1 zusammen gefasst. In dem hier verwendeten Modell wird die Strömung durch die Eulergleichungen beschrieben, das heißt, dass die Reibungsterme in den Erhaltungsgleichungen vernachlässigt werden. Die chemische Reaktion wird durch eine einzelne Globalreaktion beschrieben, die im wesentlichen die Energiefreisetzung bei der Verbrennung beschreibt. Die Ausbreitung der Flamme erfolgt durch einen Ausbreitungsmechanismus, der die Reaktion in einer Zelle des Rechengitters startet, sobald die Reaktion in den Nachbarzellen einen Grenzwert überschreitet. Zur Lösung des Gleichungssystems wird ein HLL-Verfahren auf einem äquidistanten Gitter eingesetzt.

### 8.3.2 Testfall 1D Detonation

<b>Problembeschreibung:</b> Fortschreiten einer eindimensionalen Detonationsfront.
<b>Zweck:</b> Verifikation des Gleichungslösers und des Verbrennungsmodells.
<b>Validationskriterium:</b> Vergleich mit analytischer Lösung.
<b>Numerik:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- Gitter: 3D, äquidistant, <math>\Delta x = 0.04</math> m</li><li>- Gitterauflösung: 1 x 1 x 2500 Zellen</li><li>- Gleichungslöser: HLL-Verfahren</li><li>- Hardware: PC</li></ul>
<b>Ergebnisse:</b> Die Struktur der eindimensionalen Detonationsfront wird richtig wiedergegeben.
<b>Kommentar:</b> Bild 8.3.2.1 zeigt Druckverläufe der Simulationsrechnung.

### 8.3.3 Symmetrische Ausbreitung einer Detonationsfront

**Problembeschreibung:**

Ausbreitung einer kreisförmigen Detonationsfront in einer quadratischen Rechendomäne.

**Zweck:**

Verifikation des Gleichungslösers.

**Validationskriterium:**

Symmetrie der Lösung.

**Numerik:**

- Gitter: 3D, äquidistant,  $\Delta x = 0.04$  m
- Gitterauflösung: 1 x 250 x 250 Zellen
- Gleichungslöser: HLL-Verfahren
- Hardware: SP-Power-3-SMP (4 Prozessoren)

**Ergebnisse:**

Das numerische Verfahren zeigt keine Vorzugsrichtungen.

**Kommentar:**

Ein Beispiel für eine Simulationsrechnung ist in Bild 8.3.3.1 dargestellt.

### 8.3.4 Verbrennungsexperimente in RUT Anlage – Konfiguration 1

<b>Problembeschreibung:</b> Turbulente Verbrennung in einer Großanlage. Anlagengeometrie gemäß Bild 8.3.4.1 Verschiedene Wasserstoff-Luft Gemische.
<b>Zweck:</b> Verifikation der Zusammenwirkung aller Teilmodelle: Strömung, Thermodynamik und chemische Reaktion.
<b>Validationskriterium:</b> Vergleich mit experimentellen Daten.
<b>Numerik:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- Gitter: 3D, äquidistant, <math>\Delta x = 0.1</math> m</li><li>- Gitterauflösung: <math>66 \times 63 \times 277 = 1151766</math> Zellen</li><li>- Gleichungslöser: HLL-Verfahren</li><li>- Codeversion:</li><li>- Hardware: SP-Power-3-SMP (8 Prozessoren)</li><li>- Rechenzeit: us / Zelle / Zeitschritt</li></ul>
<b>Ergebnisse:</b> Die Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment ist bei richtiger Wahl der Parameter des Verbrennungsmodells gut.
<b>Kommentar:</b> Bild 8.3.4.2 zeigt den Einfluß der Parameter des Verbrennungsmodelles auf den Druckverlauf. Bild 8.3.4.3 und Bild 8.3.4.4 zeigen einen Vergleich der gemessenen und berechneten Drücke für zwei andere Positionen in der Anlage mit dem gleichen Parametersatz ( $k = 5$ m/s). Bild 8.3.4.5 vergleicht gemessene und berechnete Druckverläufe für ein anderes Experiment (HYCOI) mit geringerer Wasserstoffkonzentration und angepasstem k-Wert.

### 8.3.5 Blinde Vorausrechnung von Verbrennungsexperimenten in RUT Anlage – Konfiguration 2

**Problembeschreibung:**

Blinde Vorausrechnung.

Turbulente Verbrennung in einer Großanlage.

Anlagengeometrie gemäß Skizzen in Bild 8.3.5.1. Gegenüber Versuchen HYCO1 und HYCO2 werden zusätzliche Decken über den unteren Raum installiert.

Verschieden Wasserstoff-Luft Gemische.

**Zweck:**

Verifikation der Zusammenwirkung aller Teilmodelle: Strömung, Thermodynamik und chemische Reaktion.

**Validationskriterium:**

Vergleich mit experimentellen Daten.

**Numerik:**

- Gitter: 3D, äquidistant,  $\Delta x = 0.1$  m
- Gitterauflösung: 66 x 63 x 277 Zellen
- Gleichungslöser: HLL-Verfahren
- Hardware: SP-Power-3-SMP (8 Prozessoren)

**Ergebnisse:**

Die Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment ist für alle simulierten Experimente gut.

**Kommentar:**

Die Bilder 8.3.5.1 und 8.3.5.2 zeigen einen Vergleich zwischen Simulation und Experiment für eine Wasserstoffkonzentration von 10 % (Experiment HYC11). Die Bilder 8.3.5.3 und 8.3.5.4 zeigen analoge Daten für eine Wasserstoffkonzentration von 11.5 % und Zündung im linken Kanalende (Experimente HYC12). In den Bildern 8.3.5.5 und 8.3.5.6 hat sich gegenüber den vorherigen Bildern die Lage des Zündortes geändert.

## 8.4 Verifikation des Codes COM3D

### 8.4.1 Beschreibung des Verbrennungscodes COM3D

Der Verbrennungscode COM3D wird für die Simulation schneller turbulenter Verbrennungsvorgänge eingesetzt. Die Struktur des Programmpaketes mit den wesentlichen Eigenschaften ist in Bild 8.4.1.1 dargestellt. Das Programmpaket umfasst neben dem eigentlichen Rechenprogramm auch Werkzeuge zur Geometrieingabe, zur „Realtime“ Darstellung des Simulationsverlaufes und zur Weiterverarbeitung der Simulationsergebnisse.

Das gasdynamische Modell umfasst Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie sowie Erhaltungsgleichungen für die verschiedenen Gasspezies. Diese Gleichungen sind in Bild 8.4.1.2 zusammengefasst. Dieses Gleichungssystem muss mit einem Turbulenzmodell ergänzt werden. Dabei stehen zwei Modelle zur Auswahl. Das Standard  $k-\epsilon$  Turbulenzmodell ist in Bild 8.4.1.3 beschrieben und das RNG  $k-\epsilon$  Turbulenzmodell in Bild 8.4.1.4. Die chemischen Reaktionen können wahlweise durch ein erweitertes Eddy-Break-Up Modell (siehe Bild 8.4.1.5) oder ein PDF Modell (siehe Bild 8.4.1.6) beschrieben werden. Das PDF Modell verwendet eine  $\beta$ -PDF und löst eine zusätzliche Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie. Der Vorteil der  $\beta$ -PDF für das Verbrennungsmodell liegt in ihrer flexiblen Form. Bild 8.4.1.7 zeigt Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen, die aus einer direkten numerischen Simulation ermittelt wurden. Bild 8.4.1.8 zeigt verschiedene Verteilungen die mit der  $\beta$ -PDF modelliert werden können. Aus dem Vergleich der beiden Bilder wird deutlich, dass die wesentlichen Verläufe der direkten Simulation durch den  $\beta$ -PDF Ansatz wiedergegeben werden können. Für eine weitergehende Auswertung der Simulationsergebnisse ist es wünschenswert die lokale Flammengeschwindigkeit zu ermitteln. Das Vorgehen hierzu ist in Bild 8.4.1.9 dargestellt.

### 8.4.2 Testfall 2D-Stufe

**Problembeschreibung:**

Stationäre Überschallströmung in einem ebenen Kanal mit einer Stufe  
Anfangsbedingungs- und Randbedingungen: Stickstoff bei 1 bar, 298 K, Mach 3

**Zweck:**

Verifikation der Fluidodynamik und der Gleichungslöser

**Validationskriterium:**

Vergleich mit bekannten numerischen Lösungen des Problems

**Numerik:**

- Gitter: 2D, äquidistant
- Gitterauflösung: 20 x 60, 40 x 120, 100 x 300 Zellen
- Gleichungslöser: TVD-Verfahren
- Codeversion: 1.2.3, 2.2.0
- Hardware: Cray T3E
- Rechenzeit: 10 us/Zelle/Zeitschritt

**Ergebnisse:**

Die Ergebnisse stimmen gut mit der bekannten numerischen Lösung überein.

**Kommentar:**

Bild 8.4.2.1 zeigt die berechnete Druckverteilung für die verschiedenen Gitterauflösungen.

Bild 8.4.2.2 zeigt den Vergleich mit der Lösung des Problems in Fluent 5.7.

### 8.4.3 Testfall Flamme-Wirbel-Wechselwirkung

**Problembeschreibung:**

3D Simulation der Wechselwirkung einer Flamme mit einem Wirbel. Ein ebener Kanal mit einer angeschlossenen Kavität ist mit Brenngas gefüllt. Das Gemisch wird an einem Ende gezündet und die Flamme breitet sich in die Kavität aus. Am anderen Ende des Kanals wird eine Druckwelle initiiert, die beim Eintritt in die Kavität einen Wirbel erzeugt.

Gasgemisch 15 % Wasserstoff in Luft.

**Zweck:**

Verifikation von Fluidodynamik, Turbulenzmodell und Verbrennungsmodell.

**Validationskriterium:**

Erreichen plausibler Werte für Drücke, Verbrennungsdauer und Ausbrand.

**Numerik:**

- Gitter: 3D, äquidistant
- Gitterauflösung:  $100 \times 10 \times 300 = 300000$
- Gleichungslöser: TVD-Verfahren
- Codeversion: 1.2.3
- Hardware: IBM SP2
- Rechenzeit: 15 us/Zelle/Zeitschritt

**Ergebnisse:**

Die Simulation kann die wesentlichen Effekte, die bei der Wechselwirkung zwischen Reaktion und Turbulenz erwartet werden, qualitativ reproduzieren.

**Kommentar:**

Bild 8.4.3.1 zeigt die Dichtegradienten im Strömungsfeld für zwei verschiedene Zeitpunkte der Simulation. In der oberen Abbildung trifft der erste Stoß gerade auf frontal auf die Flammenfront, in der unteren Abbildung hat der Wirbel bereits zu einem teilweisen Verlöschen der Flamme geführt. Bild 8.4.3.2 zeigt die zeitliche Entwicklung des Vorganges.

#### 8.4.4 Stoßrohrexperiment in FZK 12 m Rohr

**Problembeschreibung:**

Stoßwellenausbreitung in einem Rohr mit Hindernissen (Experiment R1096\_03).  
Anlagengeometrie gemäß Bild 8.4.4.1.  
Anfangsbedingungen: Hochdruckteil – Helium 5 bar, Niederdruckteil – Luft 0.99 bar.

**Zweck:**

Verifikation von Fluidodynamik und Turbulenzmodell.

**Validationskriterium:**

Vergleich mit experimentellen Daten.

**Numerik:**

- Gitter: 3D, äquidistant,  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.01\text{m}$
- Gitterauflösung: 18 x 18 x 1200 ~ 390000 Zellen
- Gleichungslöser: TVD-Verfahren
- Codeversion: 1.2.3
- Hardware: Cray T3E
- Rechenzeit: 10 us / Zelle / Zeitschritt

**Ergebnisse:**

Standard k- $\epsilon$  Modell und RNG k- $\epsilon$  Modell zeigen gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten.

**Kommentar:**

Bild 8.4.4.2 zeigt den Vergleich zwischen berechneten und gemessenen Druckverläufen an verschiedenen Positionen entlang des Versuchsrohres. Bild 8.4.4.3 zeigt die resultierenden Weg-Zeit-Diagramme für die einlaufende und reflektierte Stoßwelle.

Dieser Testfall wurde als Benchmark auch mit den Codes GASFLOW und V3D gerechnet. Bild 8.4.4.4 zeigt einen Vergleich der Simulationsparameter für die verschiedenen Codes. Bild 8.4.4.5 zeigt einen Ausschnitt aus den berechneten Druckverläufen für die verschiedenen Codes. Rechnungen mit Löser 2.Ordnung und mit Turbulenz zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten.

### 8.4.5 Verbrennungsexperimente in FZK 12 m Rohr

**Problembeschreibung:**

Turbulente Verbrennung in einem geschlossenen Rohr mit Hindernissen.

Geometrie gemäß Bild 8.4.5.1.

Verschiedene Gasgemische, verschiedene Versperrungsraten.

**Zweck:**

Verifikation von Fluidodynamik und Verbrennungsmodell.

**Validationskriterium:**

Vergleich mit experimentellen Daten.

**Numerik:**

- Gitter: 3D, äquidistant,  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.01\text{m}$
- Gitterauflösung:  $18 \times 18 \times 1200 \sim 390000$  Zellen
- Gleichungslöser: TVD-Verfahren
- Codeversion: 1.2.3, 2.2.1
- Hardware: Cray T3E
- Rechenzeit: 10 us / Zelle / Zeitschritt

**Ergebnisse:**

Gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment für einen weiten Bereich von Versuchsbedingungen.

**Kommentar:**

Bild 8.4.5.2 gibt ein Beispiel für die Übereinstimmung zwischen den berechneten Druckverläufen und den experimentellen Daten für das Eddy-Break-Up Modell. Bild 8.4.5.3 zeigt den Parameterbereich, für den dieses Verbrennungsmodell eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten liefert. Beispiele für das  $\beta$ -PDF Modell werden in Bild 8.4.5.4 und Bild 8.4.5.5 gezeigt. Das erste Bild zeigt verschiedene Profile der Reaktionsfortschrittsvariablen (siehe auch Kapitel 8.4.1) nahe an der Reaktionszone. Das zweite Bild zeigt einen Vergleich der berechneten Druckverläufe mit experimentellen Daten.

### 8.4.6 Verbrennungsexperimente in RUT Anlage – Konfiguration 1

**Problembeschreibung:**

Turbulente Verbrennung in einer Großanlage.  
Anlagengeometrie gemäß Bild 8.4.6.1.  
Verschieden Wasserstoff-Luft und Wasserstoff-Dampf-Luft Gemische.

**Zweck:**

Verifikation der Zusammenwirkung aller Teilmodelle: Strömung, Thermodynamik, Turbulenz und chemische Reaktion auf reaktortypischen Längenskala

**Validationskriterium:**

Vergleich mit experimentellen Daten.

**Numerik:**

- Gitter: 3D, äquidistant, 0.12m
- Gitterauflösung: 54 x 52 x 229 ~ 643000
- Gleichungslöser: TVD-Verfahren
- Codeversion: 1.2.3
- Hardware: IBM SP2
- Rechenzeit: 15 us / Zelle / Zeitschritt

**Ergebnisse:**

Die Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment ist gut. Abweichungen zu späten Zeitpunkten sind durch Verluste in der Versuchsanlage erklärbar.

**Kommentar:**

Bild 8.4.6.2 zeigt ein Beispiel für die Simulation der Flammenausbreitung in der RUT Anlage. Bild 8.4.6.3 gibt für dieses Beispiel einen Vergleich von berechneten und gemessenen Druckverläufen. In der Rechnung werden Leckverluste der Anlage nicht berücksichtigt, daher zeigt die Simulation in der späten Phase erwartungsgemäß höhere Drücke. Bild 8.4.6.4 zeigt ähnliche Vergleiche für verschiedene Experimente mit unterschiedlichen Anfangsbedingungen. Im Versuch stm2 wurde eine H<sub>2</sub>-Luft-Dampf-Mischung verbrannt. Bild 8.4.6.5 vergleicht die zugehörigen Weg-Zeit-Diagramme für die Flammenausbreitung.

#### 8.4.7 Verbrennungsexperimente in RUT Anlage – Konfiguration 2

**Problembeschreibung:**

Turbulente Verbrennung in einer Großanlage.  
Anlagengeometrie gemäß Bild 8.4.7.1.  
Verschieden Wasserstoff-Luft und Wasserstoff-Dampf-Luft Gemische.

**Zweck:**

Blinde Vorausrechnung.  
Verifikation der Zusammenwirkung aller Teilmodelle: Strömung, Thermodynamik, Turbulenz und chemische Reaktion auf reaktortypischer Längenskala.

**Validationskriterium:**

Vergleich mit experimentellen Daten.

**Numerik:**

- Gitter: 3D, äquidistant, 6.7 x 6.7 x 6.7 cm
- Gitterauflösung: 97 x 93 x 415 ~3.800.000 Rechenzellen
- Gleichungslöser: TVD-Verfahren
- Codeversion: 1.2.3
- Hardware: Cray T3E, 80 CPUs
- Rechenzeit: 10 us / Zelle / Zeitschritt

**Ergebnisse:**

Die Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment ist gut.

**Kommentar:**

Bild 8.4.7.2 zeigt das verwendete Geometriemodell. Bild 8.4.7.3 zeigt für einen Zeitpunkt die Verteilung der Wasserstoffkonzentration. Bild 8.4.7.4. gibt einen Vergleich von berechneten und gemessenen Druckverläufen. Bild 8.4.7.5 zeigt eine berechnete Flammenverteilung in der Versuchsanlage.

## **8.5 Verifikation des Codes DET3D**

### **8.5.1 Beschreibung des Detonationscodes DET3D**

Der Code DET3D ist für die Berechnung von Detonationsproblemen konzipiert. Da molekulare Transportphänomene vernachlässigt werden können, müssen hier nicht die Navier-Stokes Gleichungen gelöst werden, sondern die Verwendung der einfacheren Eulergleichungen ist ausreichend (siehe Bild 8.5.1.1). Bild 8.5.1.2 fasst die wesentlichen Eigenschaften der klassischen Detonationsmodelle nach Chapman-Jouguet (CJ) und Zeldovic, von Neumann, Döring (ZND) zusammen. Während das CJ-Modell die Detonationsfront als Diskontinuität behandelt, hat die Reaktionsfront im ZND Modell eine endliche Dicke und eine interne Struktur. Beide Modelle sind eindimensional und stellen eine starke Vereinfachung der physikalischen Vorgänge dar. Eine reale Detonation besitzt eine dreidimensionale interne Struktur, die wesentlich durch die Wechselwirkung von Transversalwellen bestimmt wird. Diese Struktur ist in Bild 8.5.1.3 schematisch dargestellt. Dieses Bild zeigt außerdem Ergebnisse einer zweidimensionalen Detonations-Simulation, in der die typischen Detonationszellenmuster auftreten. Für Simulationen bei denen die interne Struktur der Detonationsfront nicht aufgelöst wird, ist ein Vergleich mit dem CJ- Modell hilfreich. Bild 8.5.1.4 zeigt deshalb die Geschwindigkeits-, Druck- und Temperaturprofile hinter der Detonationsfront für die CJ -Theorie.

## 8.5.2 Testfall 1D Detonation

**Problembeschreibung:**

Ausbreitung einer eindimensionalen Detonationsfront.

**Zweck:**

Verifikation des Gleichungslösers und des Verbrennungsmodells

**Validationskriterium:**

Vergleich mit analytischer Lösung.

**Numerik:**

- Gitter: 3D, äquidistant,  $\Delta x = 0.01$  m
- Gitterauflösung: 1 x 1 x 1000 Zellen
- Gleichungslöser: HLL-Verfahren
- Hardware: IBM 3090

**Ergebnisse:**

Die eindimensionale Struktur der CJ-Detonation wird durch Simulation gut wiedergegeben.

**Kommentar:**

Bild 8.5.2.1 zeigt einen Vergleich zwischen analytischer Lösung und Simulationsrechnung für den Druckverlauf in der Umgebung der Detonationsfront. Bild 8.5.2.2 zeigt einen Vergleich mit einem anderen 3D-Simulationsprogrammen. Zusätzlich zur Detonationsfront wird auch die Reflektion der Druckwelle an einer festen Wand dargestellt. Für die mechanische Belastung von schweren Bauteilen ist der Impuls entscheidend. Bild 8.5.2.3 vergleicht daher die berechneten Impulsverläufe mit der analytischen Lösung. Bild 8.5.2.4 belegt durch einen Vergleich mit Ergebnissen von STANJAN, dass auch die Detonationsgeschwindigkeit korrekt wiedergegeben wird. Bild 8.5.2.5 zeigt den Effekt verschiedener Reaktionsmodell für den Fall einer hinreichend aufgelösten Front und für den Fall einer nicht hinreichend aufgelösten Front.

### 8.5.3 Detonation in einem hemispherischen Ballon

**Problembeschreibung:**

Ausbreitung einer kugelsymmetrischen Detonationsfront in einer Halbebene.  
Geometrie gemäß Bild 8.5.3.1

**Zweck:**

Verifikation des Gleichungslösers und des Verbrennungsmodells in Kugelkoordinaten.

**Validationskriterium:**

Vergleich mit experimentellen Daten.

**Numerik:**

- Gitter: 3D, äquidistant,  $\Delta x = 0.01$  m
- Gitterauflösung: 1 x 1 x 2500 Zellen
- Gleichungslöser: HLL-Verfahren
- Hardware: IBM 3090

**Ergebnisse:**

Die zeitlichen Druckverläufe im Nah- und im Fernfeld werden durch die Rechnung gut wiedergegeben.

**Kommentar:**

In Bild 8.5.3.2 sind Hochgeschwindigkeitsaufnahmen eines Experimentes in dieser Versuchsanordnung wiedergegeben. Die gemessene Detonationsgeschwindigkeit liegt nahe an den Werten der CJ Theorie. Bild 8.5.3.3. zeigt einen Vergleich experimenteller und berechneter Druckverläufe für zwei Messpositionen.

## 8.5.4 Detonationsexperimente im FZK 12m Rohr

**Problembeschreibung:**

Detonation von Wasserstoff-Luft Gemischen in verschiedenen dreidimensionalen Geometrien des FZK 12 m Rohres.  
Geometrie gemäß Bild 8.5.4.1, 8.5.4.4 und 8.5.4.6.

**Zweck:**

Verifikation der Strömungsmechanik, Thermodynamik und des Verbrennungsmodells.

**Validationskriterium:**

Vergleich mit experimentellen Daten.

**Numerik:**

- Gitter: 3D, äquidistant,  $\Delta x = 0.035$  m
- Gitterauflösung:  $5 \times 10 \times 343 = 17.150$  Zellen
- Gleichungslöser: HLL-Verfahren
- Hardware: IBM RISC 6000

**Ergebnisse:**

Die zeitliche Abläufe und Drücke in den verschiedenen Anordnungen können hinreichend gut beschrieben werden.

**Kommentar:**

Bild 8.5.4.2 zeigt das verwendete Rechengitter für die Geometrie aus Bild 8.5.4.1. Bild 8.5.4.3 zeigt einen Vergleich experimenteller Druckverläufe mit verschiedenen Simulationsrechnungen. In Bild 8.5.4.5 ist der Vergleich der gemessenen und berechneten Detonationsgeschwindigkeiten für die Geometrie aus Bild 8.5.4.4 dargestellt. Bild 8.5.4.7 zeigt ein Beispiel berechneter Druckverteilungen für die Geometrie aus Bild 8.5.4.6. Bild 8.5.4.8 zeigt für diesen Fall einen Vergleich mit experimentellen Druckverläufen. Bild 8.5.4.9 demonstriert den Einfluss des reaktionskinetischen Modells auf die Simulationsergebnisse.

### 8.5.5 Großskalige Detonationsversuche in der RUT Anlage

<b>Problembeschreibung:</b> Detonation von Wasserstoff-Luft Gemischen in der komplexen dreidimensionalen Geometrie der RUT Anlage. Geometrie gemäß Bild 8.5.5.1.
<b>Zweck:</b> Verifikation der Strömungsmechanik, Thermodynamik und des Verbrennungsmodells auf reaktorrelevanter Längenskala.
<b>Validationskriterium:</b> Vergleich mit experimentellen Daten.
<b>Numerik:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- Gitter: 3D, äquidistant</li><li>- Gitterauflösung:</li><li>- Gleichungslöser: Verfahren</li><li>- Codeversion:</li><li>- Hardware:</li><li>- Rechenzeit:</li></ul>
<b>Ergebnisse:</b> Die Detonationsabläufe und –Drücke in den verschiedenen Anordnungen können gut beschrieben werden.
<b>Kommentar:</b> Bild 8.5.5.2 zeigt ein Beispiel der berechneten Druckverteilungen in der RUT Anlage zu drei unterschiedlichen Zeitpunkten. In Bild 8.5.5.3 ist der zeitliche Druckverlauf an zwei Positionen in der Anlage dargestellt (Simulation und Experiment).

### Referenzen

- [8.1] A. Kotchourko, W. Breitung, S. Dorofeev, A. Vesper, H. Ohlmeyer. 3D-Analyse der gasdynamischen Lasten im KKB-Sicherheitsbehälter aus der Verbrennung von Radiolysegas. Tagungsbericht: Jahrestagung Kerntechnik 2003, 20.-22. Mai 2003, Berlin, SS. 153-158.
- [8.2] U. Bielert, W. Breitung, A. Kotchourko. Simulation of hydrogen behavior during a nuclear power plant accident. pp. 435 – 456. In: Modelling in Natural Sciences. Ed.: T. Müller, H. Müller. Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New-York 2003.
- [8.3] A. Kotchourko, A. Lelyakin, S. Dorofeev. Performance of presumed PDF approach to model slow and fast flames. In: Proceedings of 19 ICDERS, July 27 - August 1, 2003, Hakone, Japan.
- [8.4] S. B. Dorofeev, M. S. Kuznetsov, V. I. Alekseev, A.A. Efimenko, and W. Breitung. Evaluation of limits for effective flame acceleration in hydrogen mixtures. Journal of Loss Prevention in the Processes Industries, 2001, Vol. 14/6 pp 583-589
- [8.5] S. B. Dorofeev, V. P. Sidorov, M. S. Kuznetsov, I. D. Matsukov, and V. I. Alekseev. Effect of scale on the onset of detonations. Shock Waves, 2000, v. 10, pp. 137-149
- [8.6] A.I. Gavrikov, A.A. Efimenko, and S. B. Dorofeev. A model for detonation cell size prediction from chemical kinetics. Combustion and Flame, 2000, vol. 120, pp.19-33,

- [8.7] U. Bielert, W. Breitung, B. Burgeth, S. Dorofeev, et al. Large Scale Experiments for Validation of Hydrogen. Combustion Models and Criteria. Jahrestagung Kerntechnik, Stuttgart, May 14 – 16, 2002, (2002)
- [8.9] U. Bielert, W. Breitung, B. Burgeth, S. Dorofeev, et al., Integral Large Scale Experiments on Hydrogen Combustion for Severe Accident Code Validation HYCOM. Proceedings of FISA-2001, Euroatom, Luxembourg, 2001, pp 446-457.
- [8.10] S. B. Dorofeev, V. P. Sidorov, M. S. Kuznetsov, I. D. Matsukov, and V. I. Alekseev. Effect of scale on the onset of detonations, Proc. of the 17th ICDERS (Heidelberg, Germany, July 25-30, 1999), 1999, ISBN 3-932217-01-2, p. 141.1-141.4
- [8.11] W. Breitung and S. B. Dorofeev. Summary of DDT Criteria For Nuclear Power Plant Analysis, Proceedings, Annual Meeting on Nuclear Technology'99, Deutsches Atomforum e.V, ISSN 0720-9207, Karlsruhe, 18.-20. May 1999, p.185
- [8.12] S. B. Dorofeev, V. P. Sidorov, W. Breitung, and A. S. Kotchourko. Large-scale combustion tests in the RUT facility: Experimental study, Numerical simulations and analysis on turbulent deflagrations and DDT, Transactions of 14<sup>th</sup> International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology, Lyon, France, v. 10, pp. 275-283, 1997
- [8.13] A. S. Kotchourko, S. B. Dorofeev, W. Breitung, V. P. Sidorov. Experiments and Numerical Simulations on Turbulent H<sub>2</sub>-air Combustion in Large Enclosure. Proceedings of 16<sup>th</sup> International Colloquium on Dynamic of Explosions and Reactive Systems, Poland, Cracow, 1977, p.465.
- [8.14] Breitung W., Dorofeev, S. B., Efimenko A.A., Kochurko A.S. Redlinger R., and Sidorov V.P., Large scale experiments on hydrogen-air detonation and their numerical simulation, Proc. of ARC'94 Int. Topical Meeting Advanced Reactor Safety, Pittsburgh, PA, p.733
- [8.15] M. Kuznetsov, V. Alekseev, A. Bezmelnitsyn, W. Breitung, S. Dorofeev, I. Matsukov, A. Veser, and Yu. Yankin. Effect of obstacle geometry on behavior of turbulent flames. Preprint IAE-6137/3, RRC "Kurchatov Institute", Report FZKA-6328, Forschungszentrum Karlsruhe, 1999
- [8.16] S. B. Dorofeev, M.S. Kuznetsov, V.I. Alekseev, A.A. Efimenko, and W. Breitung, Evaluation of limits for effective flame acceleration in hydrogen mixtures. Preprint IAE-6150/3, FZKA 6349. – M., 1999, 26p
- [8.17] W. Breitung and S. B. Dorofeev. Criteria for Deflagration-to-Detonation Transition (DDT) in Nuclear Containment Analysis, 15<sup>th</sup> International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology, Post-Conference Seminar on Containment of Nuclear Reactors, Hoam Convention Center, Seoul, Korea, August 23-24, 1999.
- [8.18] Dorofeev, S. B., Efimenko A.A., Kochurko A.S., and Sidorov V.P., Recent experimental and analytical results on hydrogen combustion at RRC - Kurchatov Institute, Proc. of the 23<sup>rd</sup> Water Reactor Safety Information Meeting NUREG/CP-0149, vol. 2, p. 325, 1996,

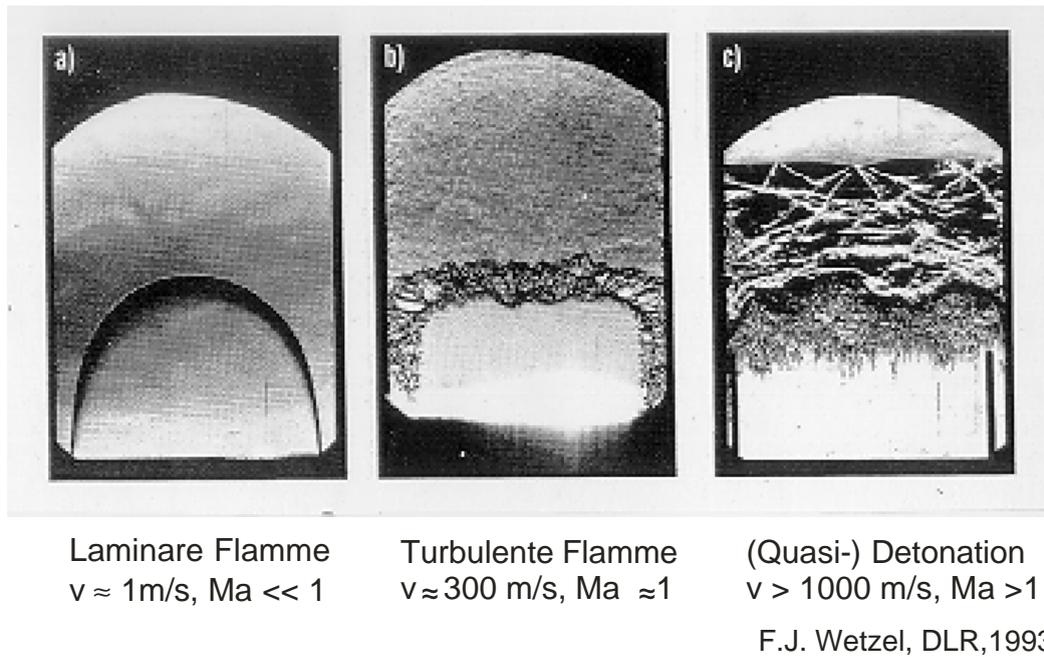


Abb.8.1.1: Schlierenaufnahmen von Wasserstoff- Luft Flammen in einem Rechteckkanal. Je nach Wasserstoffkonzentration und Turbulenzgrad im Strömungsfeld lassen sich drei grundlegend verschiedene Verbrennungsregimes unterscheiden.

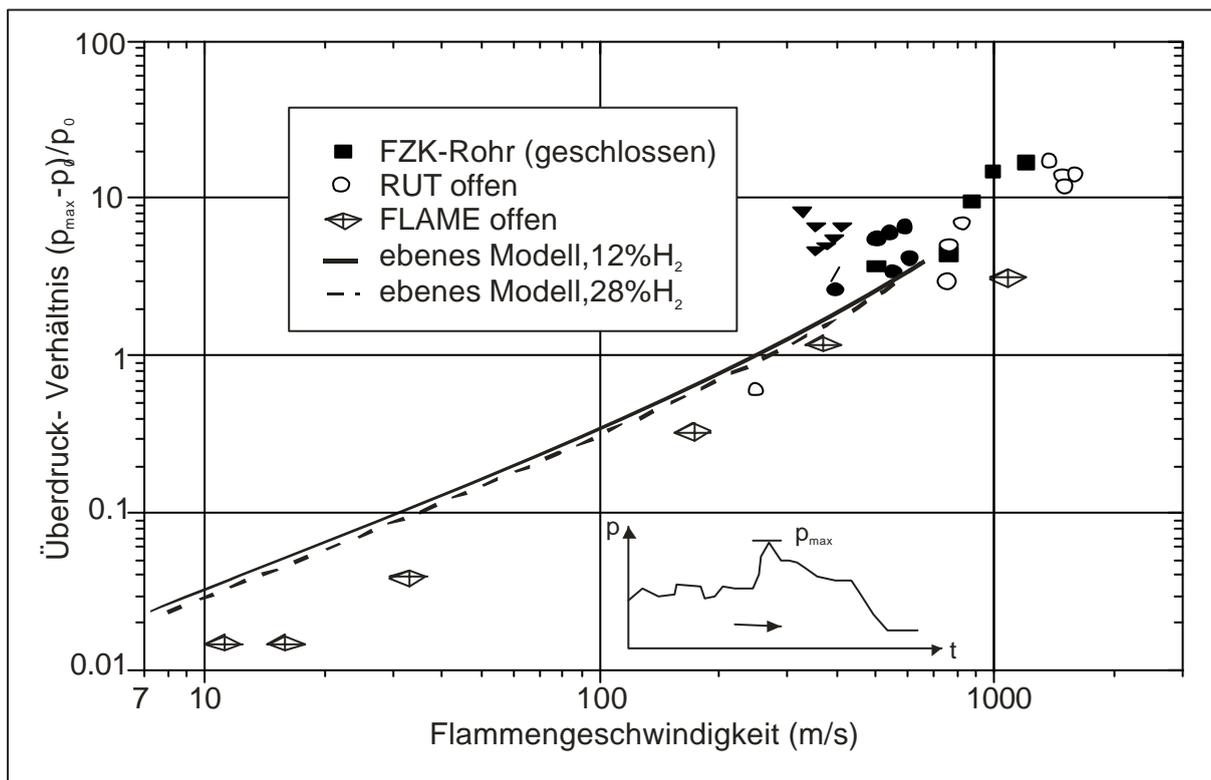


Abb.8.1.2: Gemessene und berechnete Überdrücke für Wasserstoff- Luft Verbrennungen als Funktion der Flammgeschwindigkeit. Die bei einer Verbrennung auftretende maximale Flammgeschwindigkeit ist der entscheidende Parameter für die mechanischen Drucklasten.

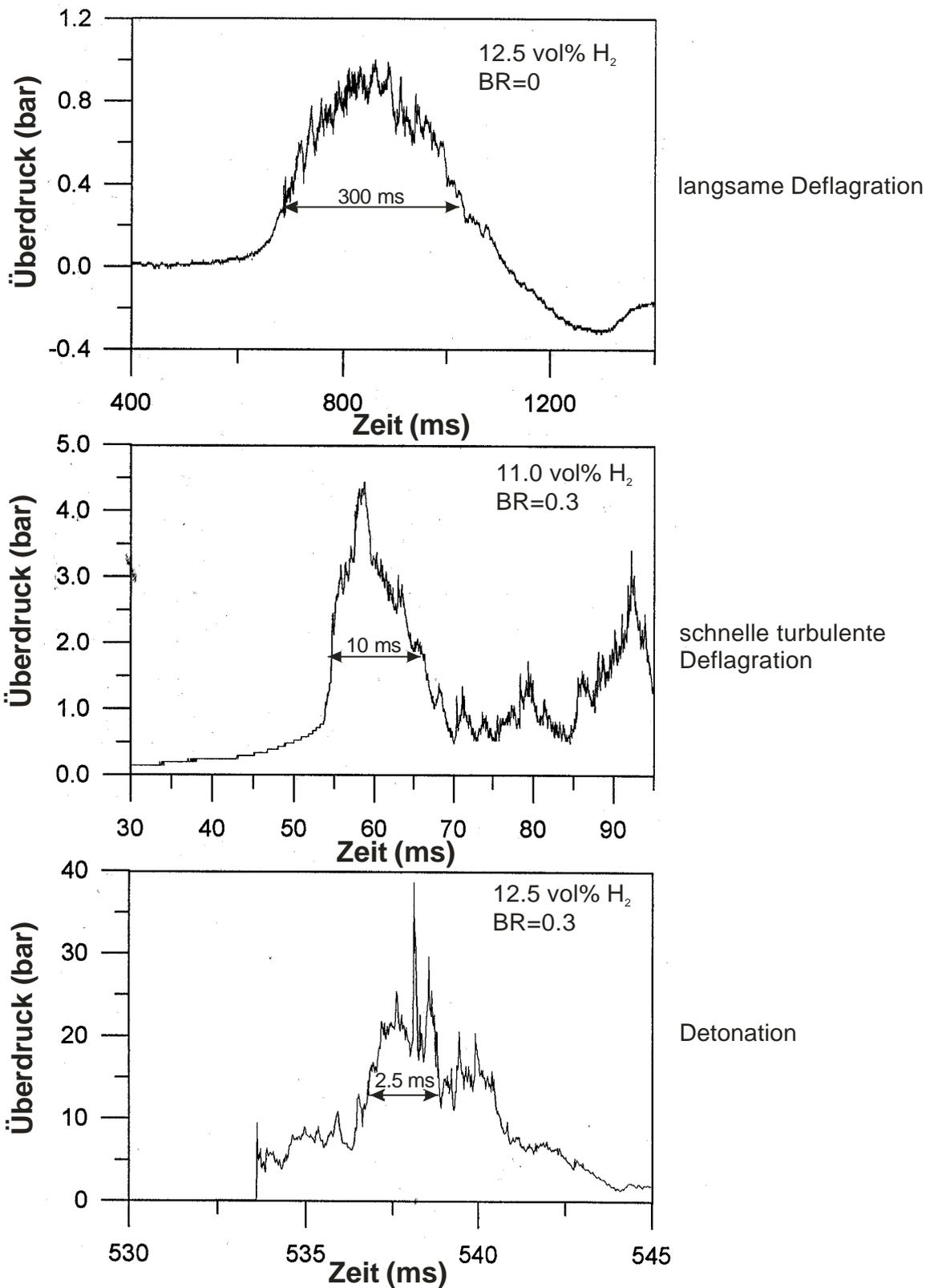


Abb.8.1.3: Gemessene Überdrücke aus RUT- Versuchen mit verschiedenen H<sub>2</sub>-Luft Gemischen und Hinderniskonfigurationen (BR= Versperrungsgrad der Hindernisse im 1. Kanal, eine ausgewählte Messposition in der Kavität). Das Verbrennungsregime bestimmt den Spitzendruck und die Zeitskala der Drucklast.

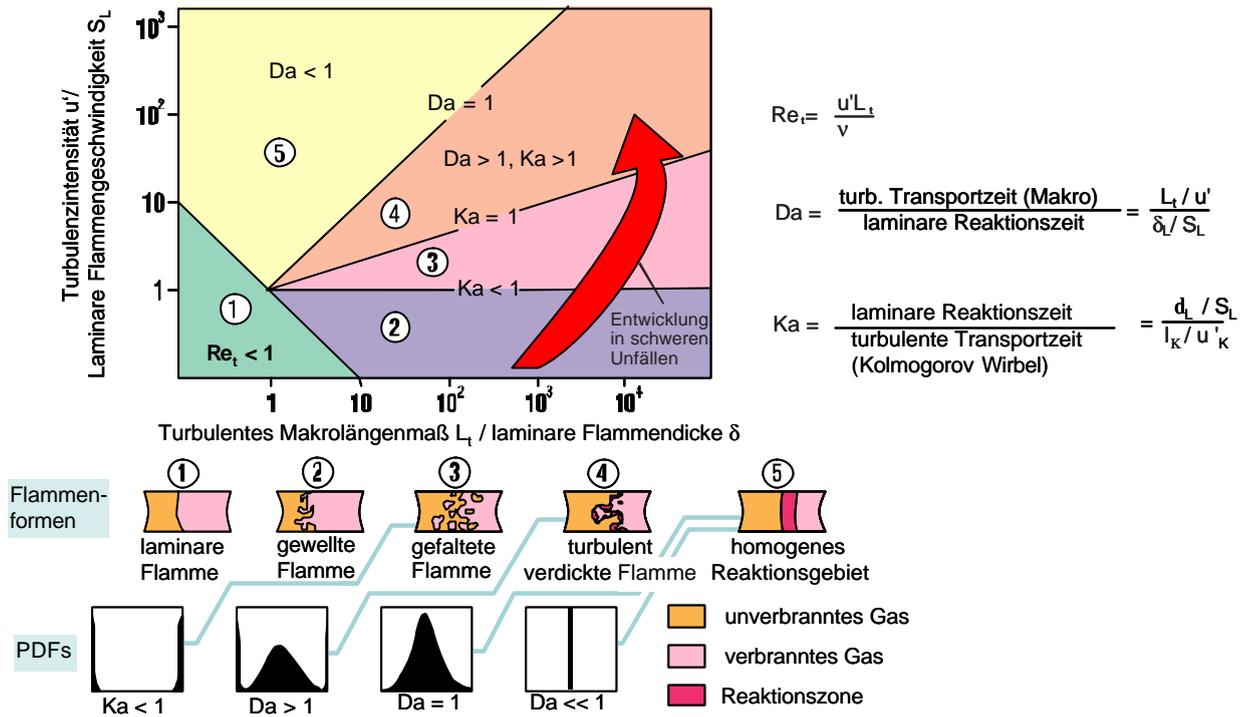


Abb.8.1.4: Klassifikation turbulente Vormischflammen mit Hilfe dimensionsloser Kennzahlen (Borghi- Diagramm). Die Karlovitzzahl  $Ka$  und die Damköhlerzahl  $Da$  vergleichen die charakteristischen Zeitskalen der laminaren Reaktionszeit ( $=\delta_L/S_L$ ) mit der Transportzeit der kleinsten ( $l_k/u'_k$ ) bzw. größten Wirbel ( $L_t/u'$ ) im Strömungsfeld.

Kompressible Navier-Stokes Gleichungen für eine Mischung chemisch reagierender idealer Gase mit  $(k, \varepsilon)$ -Turbulenzmodell:

$$\begin{aligned} \rho_t + (\rho u_j)_{x_j} &= 0, \\ (\rho u_i)_t + (\rho u_i u_j)_{x_j} &= -p_{x_i} + \rho g_i + M_{ij} x_j, \quad i = 1, 2, 3 \\ (\rho \eta)_t + (\rho \eta u_j)_{x_j} &= -p u_{j,x_j} + \left(\frac{\mu}{C_h} (\eta + \frac{p}{\rho})_{x_j}\right)_{x_j} + \rho \varepsilon \\ &\quad + B + (\lambda T_{x_j})_{x_j} + \left(\frac{\mu}{Sc} h^k \alpha_{x_j}^k\right)_{x_j}, \\ (\rho \alpha^k)_t + (\rho \alpha^k u_j)_{x_j} &= S_k + \left(\frac{\mu}{Sc} \alpha_{x_j}^k\right)_{x_j}, \quad k = 1, \dots, N_c - 1 \\ (\rho k)_t + (\rho k u_j)_{x_j} &= \left(\frac{\mu}{C_k} k_{x_j}\right)_{x_j} + u_{i,x_j} M_{ij} - \rho \varepsilon - B, \\ (\rho \varepsilon)_t + (\rho \varepsilon u_j)_{x_j} &= \frac{\varepsilon}{k} (C_1 u_{i,x_j} M_{ij} - C_1 B - C_2 \rho \varepsilon) + \left(\frac{\mu}{C_\varepsilon} \varepsilon_{x_j}\right)_{x_j}. \end{aligned}$$

Mit

$$\begin{aligned} M_{ij} &= -\frac{2}{3} \delta_{ij} (\rho k + \mu u_{r,x_r}) + \mu (u_{i,x_j} + u_{j,x_i}), \\ B &= \frac{\mu}{C_\rho} \frac{1}{\rho^2} \rho_{x_j} \rho_{x_j}, \\ \lambda &= \frac{\mu \cdot c_p}{Pr} \quad \text{with } c_p = \sum_k \alpha^k c_p^k \end{aligned}$$

und

$$\mu = \mu_{tur} = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon}.$$

Die Konstanten

$$C_1, C_2, C_\mu, C_h, C_k, C_\varepsilon, C_\rho, Pr, Sc$$

sind Eingabedaten.

Abb. 8.2.1.1: Modellgleichungen des V3D-Programms (1)

Allgemeines Verbrennungsmodell:

$$\sum_{k=1}^{N_c} \nu_{jk} n_k = 0 \quad \text{mit Reaktionsrate } f_j, \quad j = 1, 2, \dots, N_r,$$

Damit

$$S_k \equiv M_k \cdot \frac{dn_k}{dt} = M_k \cdot \sum_{j=1}^{N_r} \nu_{jk} \cdot f_j \cdot \prod_{r=1, \nu_{jr} < 0}^{N_c} \left( \frac{\rho}{M_r} \right)^{-\nu_{jr}}.$$

Für die Reaktionsrate  $f_j$  wird ein Arrhenius-Ansatz mit der kritischen Temperatur  $T_{crit}$  verwendet:

$$f_j = \begin{cases} F(T) & \text{falls } T > T_{crit} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

mit

$$f_j \equiv f_j(T) := BT^n e^{-\frac{E_{act}}{RT}}.$$

$\nu_{jk}$  ist der stöchiometrische Koeffizient für Spezies  $k$  in der Reaktion  $j$ .

$B$ ,  $n$ ,  $F_{act}$  und  $T_{crit}$  sind benutzerdefinierte Eingaben für jede Reaktion.

Abb. 8.2.1.2: Modellgleichungen des V3D-Programms (2)

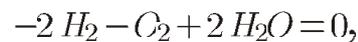
Kompressible Eulergleichungen für eine Mischung idealer Gase:

$$\begin{aligned} \rho_t^k + (\rho^k u_j)_{x_j} &= S_k, & k = 1, \dots, N_c \\ (\rho u_i)_t + (\rho u_i u_j)_{x_j} &= -p_{x_i}, & i = 1, 2, 3 \\ (\rho e)_t + [(\rho e + p) u_j]_{x_j} &= 0 \end{aligned}$$

Verbrennungsmodell:

Global Reaktion für eine Mischung aus 4 Spezies:

$N_c = 4$ , mit  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $H_2O$  (Dampf) und  $N_r = 1$



d.h. der stöchiometrische Vector  $\nu = (-2, -1, 0, +2)$ .

Die Umsatzrate ergibt sich zu

$$S_k = \frac{\nu_k}{|\nu_1|} \frac{K}{\Delta x},$$

mit  $K$  als Eingabewert und  $\Delta x$  als numerischer Gittergröße.

Die Verbrennung in einer Zelle beginnt, sobald der Umsatz in den Nachbarzellen einen benutzerdefinierten Grenzwert überschreitet.

Abb. 8.3.1.1: Modellgleichungen des Flame 3D-Programms

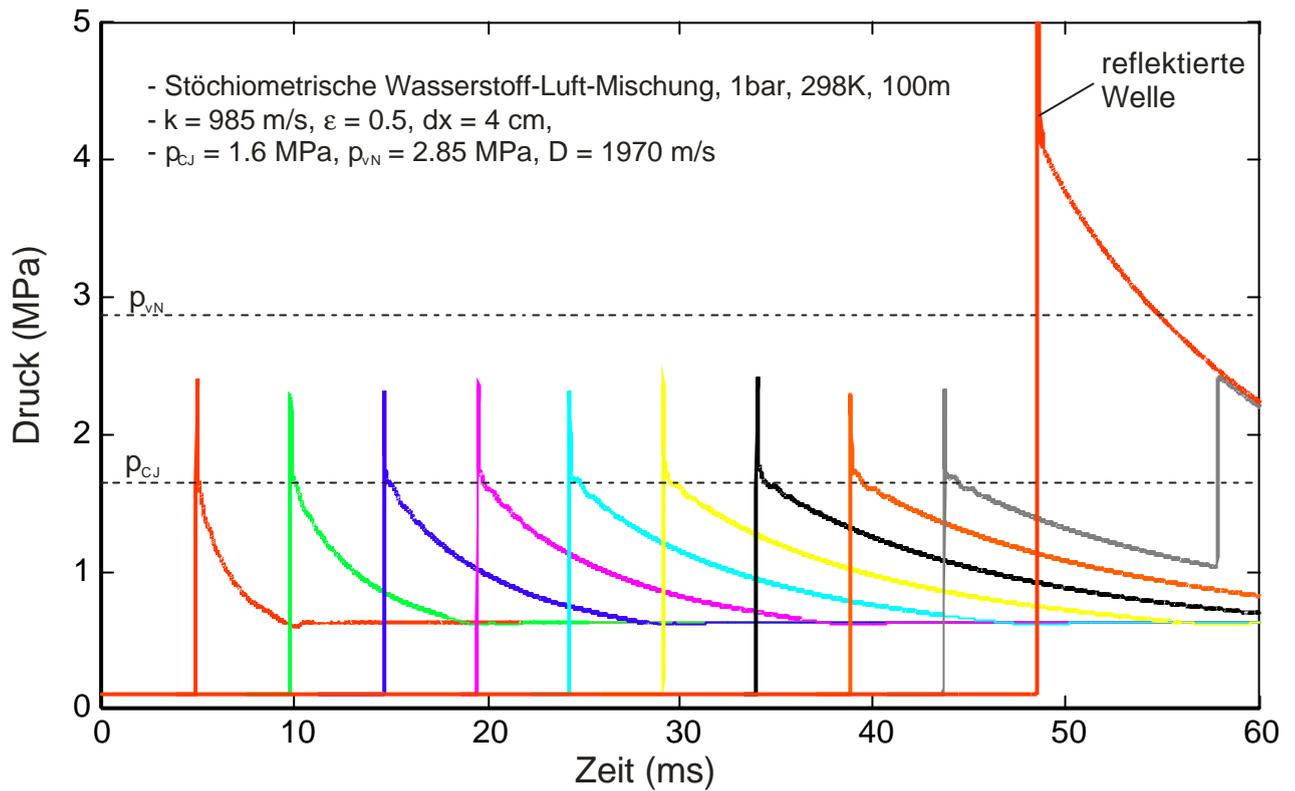


Abb.: 8.3.2.1: Verifikation von FLAME3D für Detonationssimulation an 1-D Testproblem.

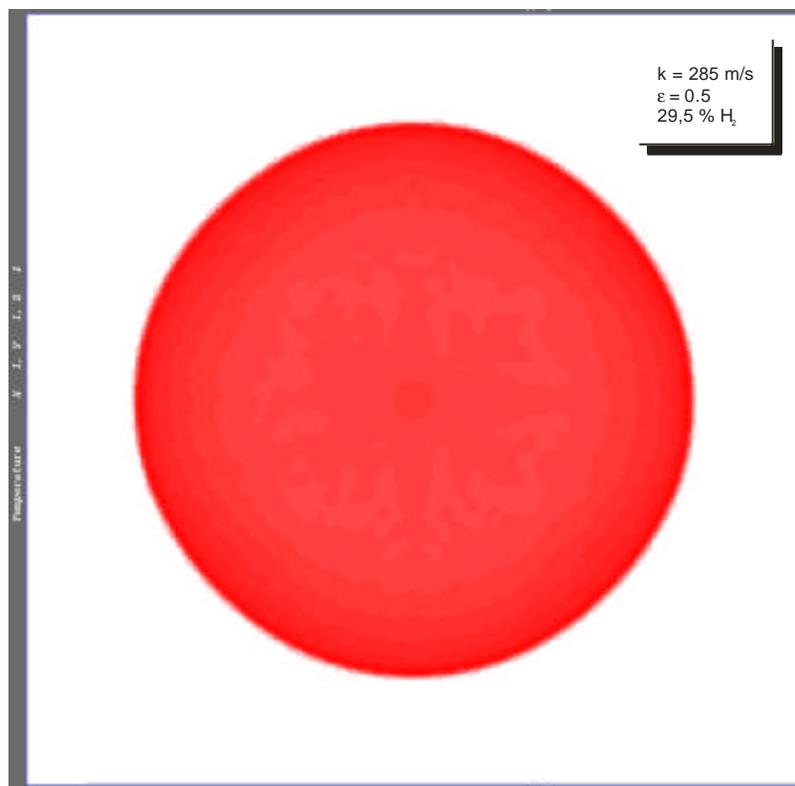


Abb.: 8.3.3.1: Verifikation von FLAME3D an 2D- Detonationsproblem mit zentrischer Zündung. Das (neuentwickelte) numerische Verfahren zeigt keine Vorzugsrichtung im Raum (auch für 3D Fall getestet).

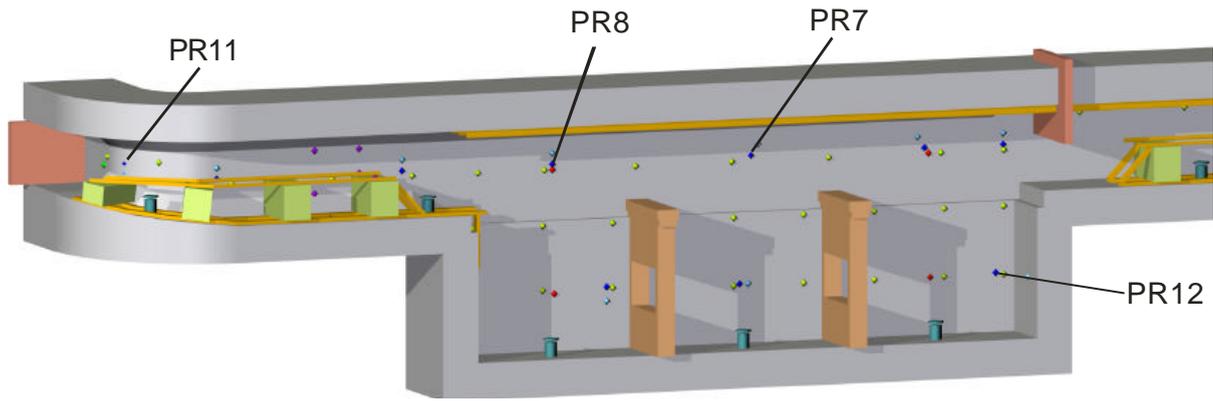


Abb.: 8.3.4.1: Geometrie der RUT-Anlage in den HYC- Verbrennungsversuchen mit einigen ausgewählten Druckaufnehmerpositionen.

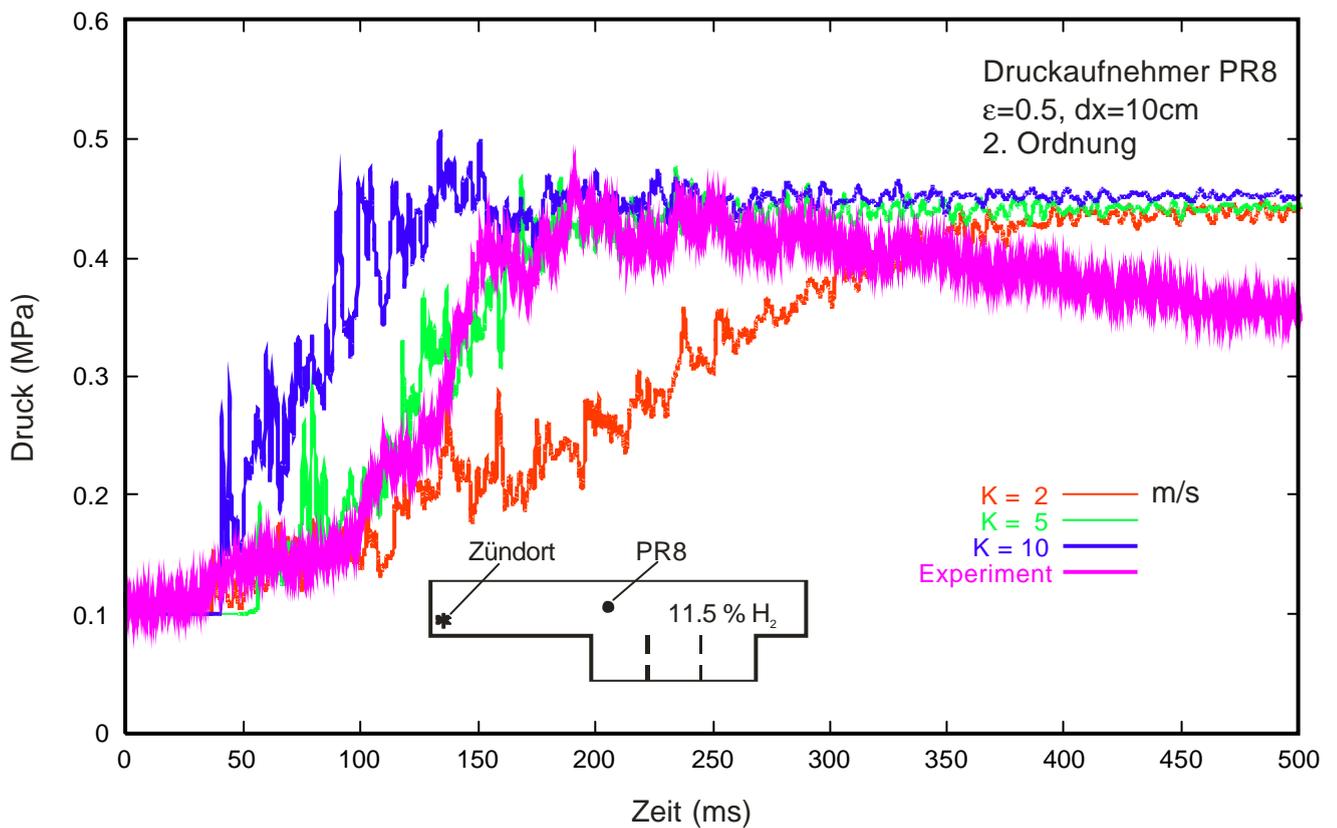


Abb.: 8.3.4.2: FLAME3D Simulation des Experiments HYC02 mit verschiedenen Konstanten für die vorgegebene Brennrage.  $K = 5$  m/s ergibt gute Übereinstimmung für Aufnahme PR8, 11.5 vol%  $\text{H}_2$ , Zündung am linken Kanalende.

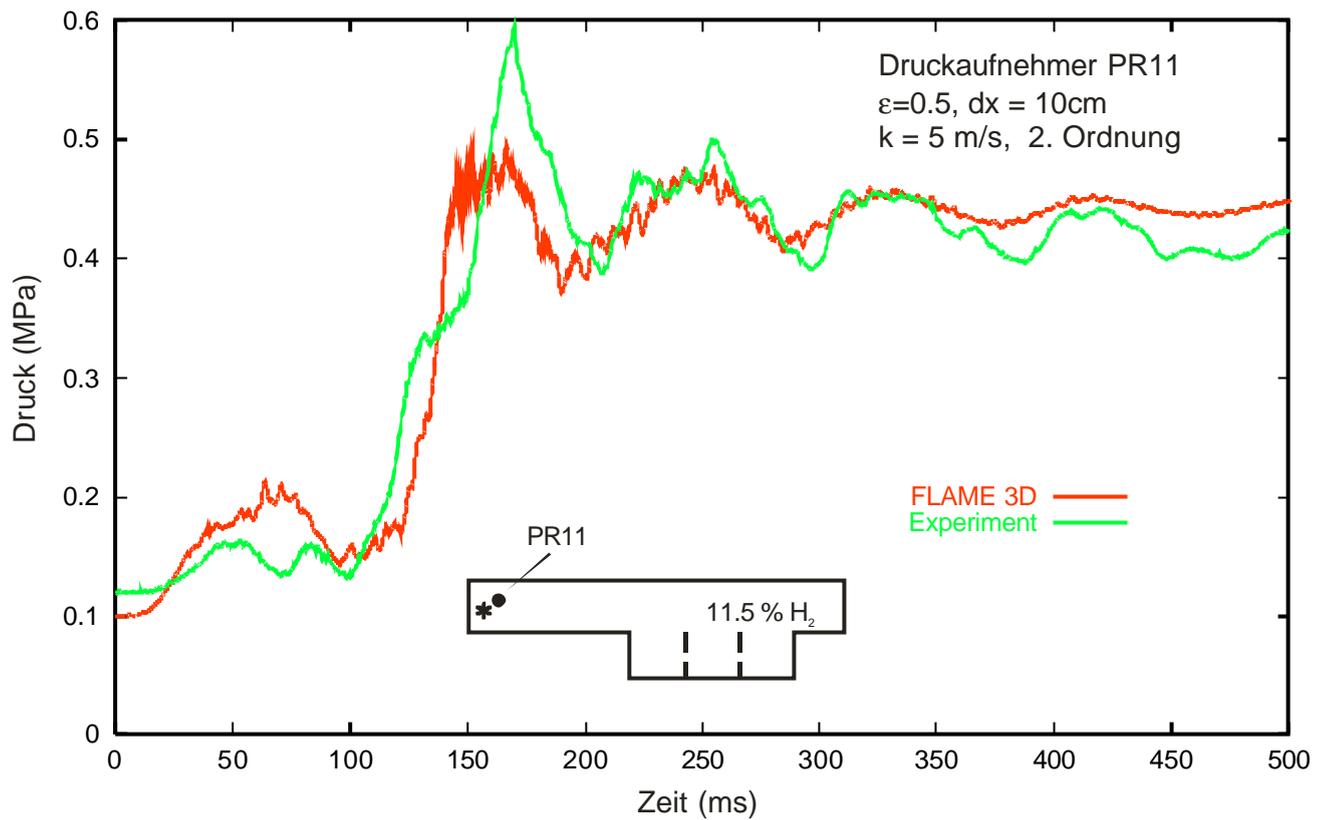


Abb.: 8.3.4.3: FLAME3D Ergebnis für Versuch HYC02 mit  $k = 5 \text{ m/s}$ , Druckaufnehmer nahe Zündort.

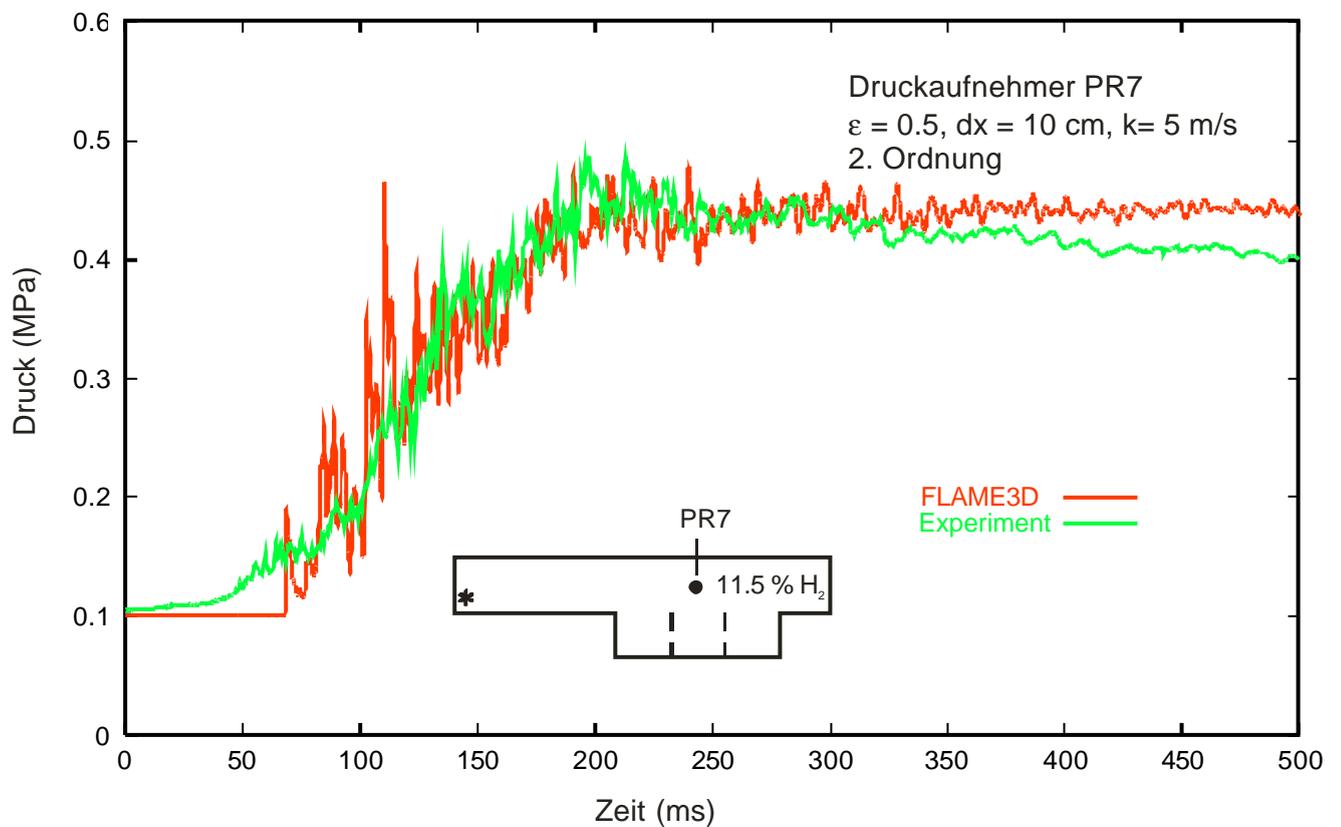


Abb.: 8.3.4.4: FLAME3D Ergebnis für Versuch HYC02 mit  $k = 5 \text{ m/s}$ , Druckaufnehmer in Mitte der Kavität.

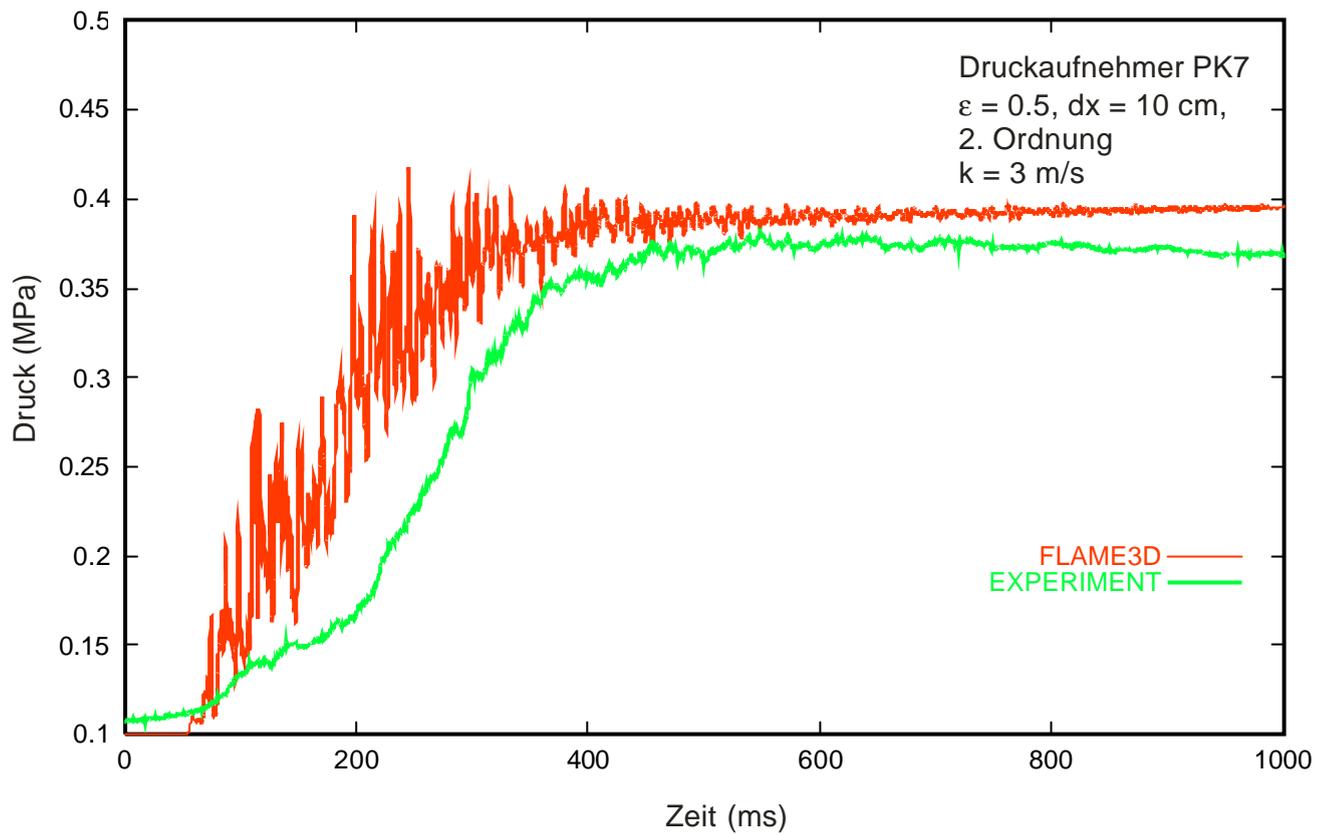


Abb.: 8.3.4.4: FLAME3D Simulation für Versuch HYC01 mit  $k = 3$  m/s, 10%  $H_2$  Zündung am linken Kanalende.

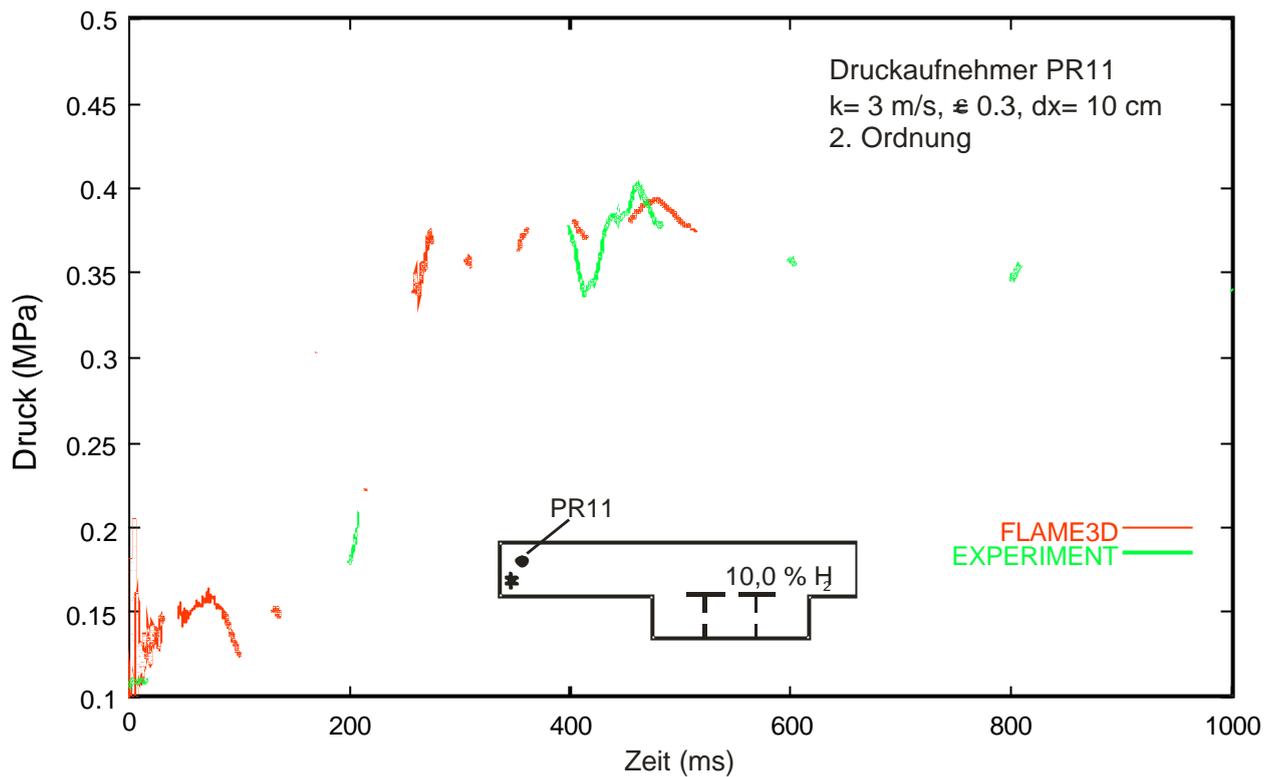


Abb.: 8.3.5.1: Blinde Vorausrechnung mit FLAME3D für RUT- Versuch HYC11, 10% H<sub>2</sub>, Zündung am linken Kanalende, berechneter und gemessener Druckverlauf nahe Zündort insgesamt 1.150.000 Rechenzellen, davon 284.000 Gaszellen.

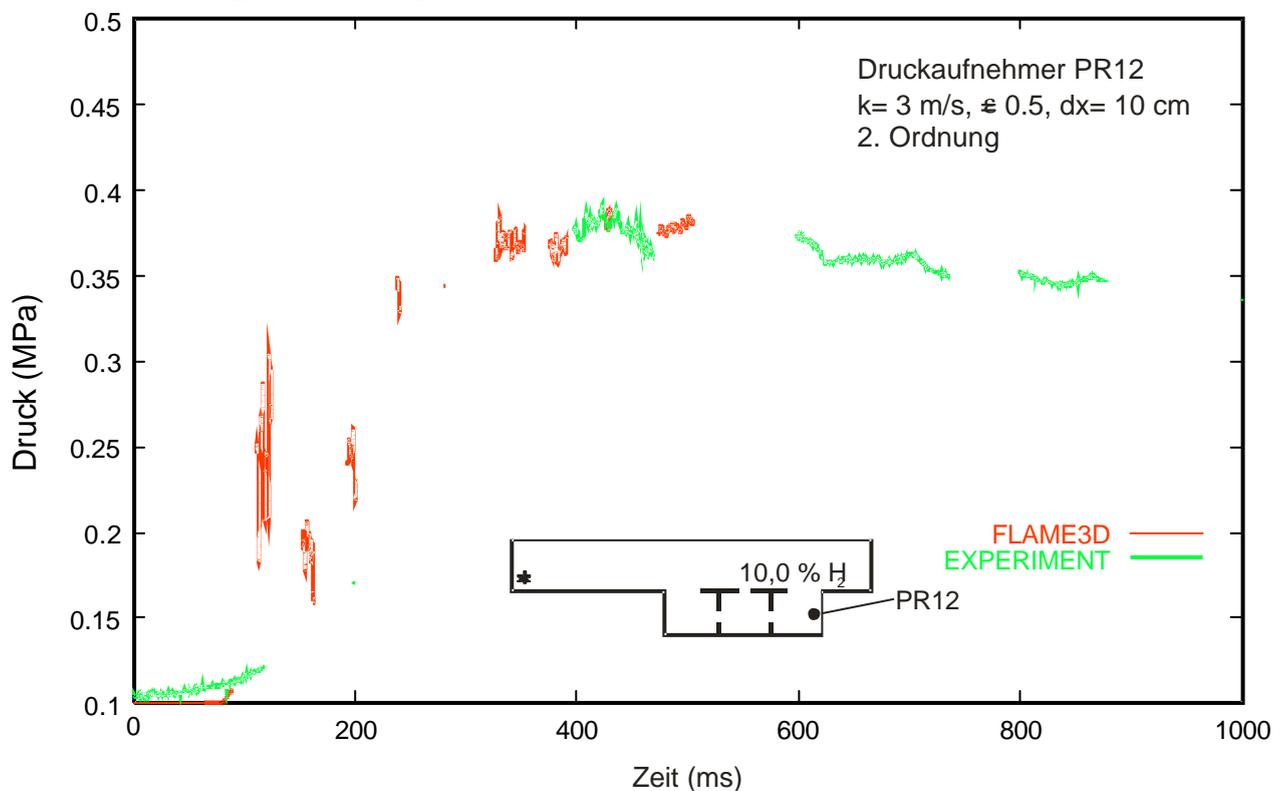


Abb.: 8.3.5.2: Blinde Vorausrechnung mit FLAME3D für RUT- Versuch HYC11, 10% H<sub>2</sub>, Zündung am linken Kanalende, Druckverläufe vom entgegengesetzten Ende der Versuchsanlage.

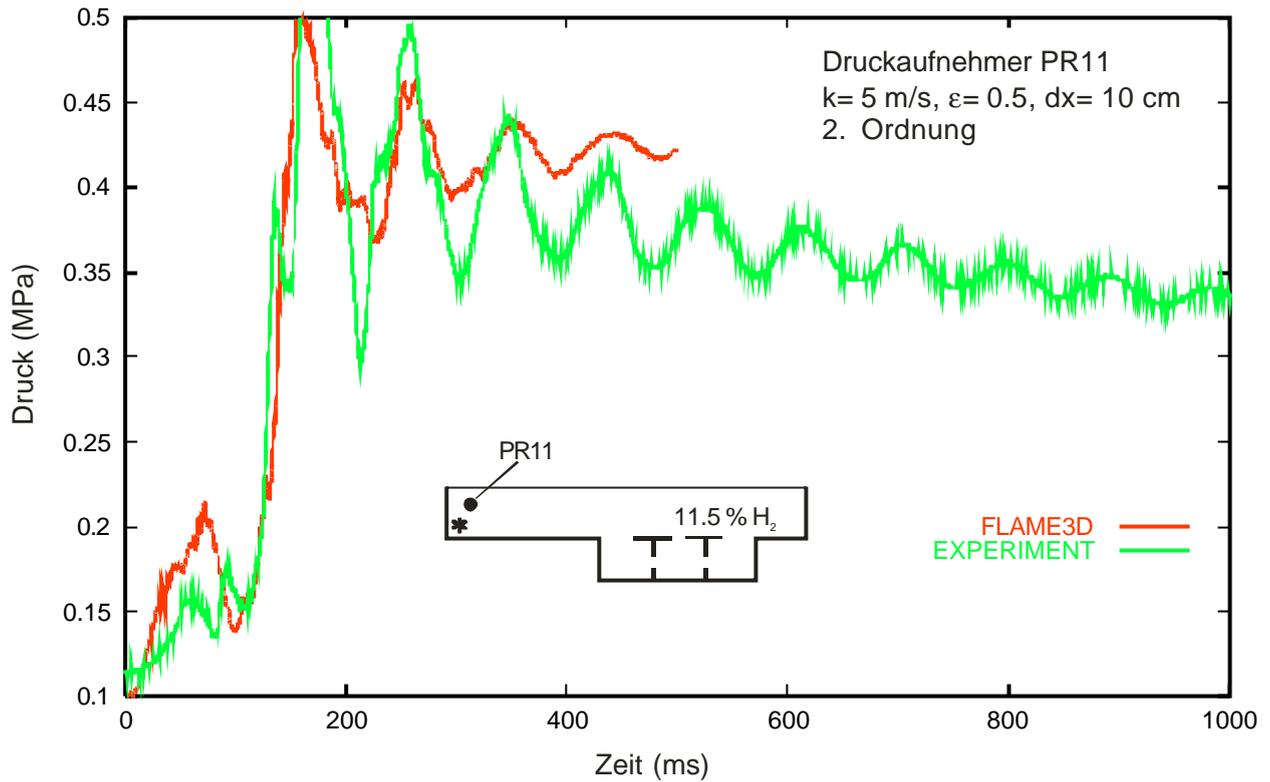


Abb.: 8.3.5.3: Blinde Vorausrechnung mit FLAME3D für RUT- Versuch HYC12, 11.5% H<sub>2</sub> in Luft, Zündung am linken Kanalende, Druckverläufe nahe Zündort.

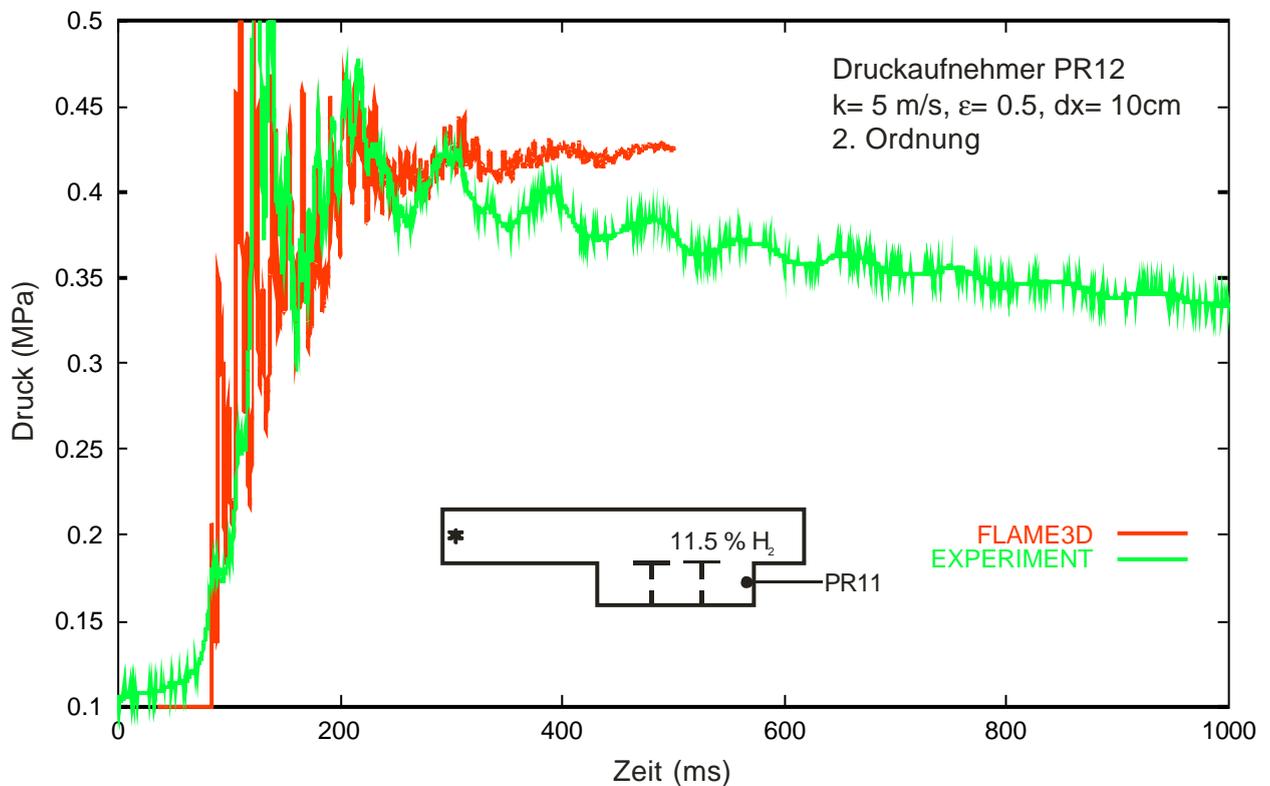


Abb.: 8.3.5.4: Blinde Vorausrechnung mit FLAME3D für RUT- Versuch HYC12, 11.5% H<sub>2</sub> in Luft, Zündung am linken Kanalende, Druckverläufe am gegenüberliegenden Ende.

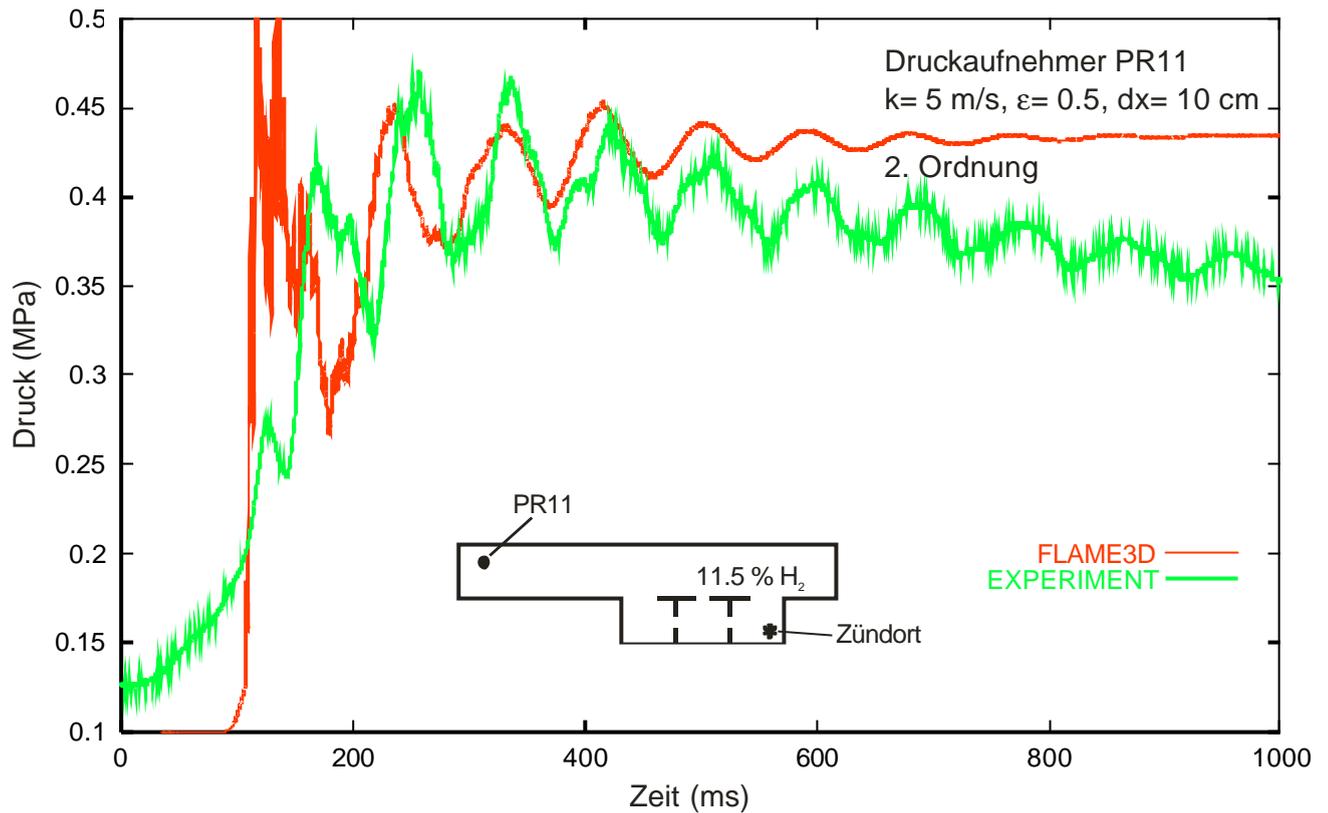


Abb.: 8.3.5.5: Blinde Vorausrechnung mit FLAME3D für RUT- Versuch HYC14, 11.5%  $\text{H}_2$  in Luft, Zündung in der Kavität, Druckverläufe am linken Kanalende.

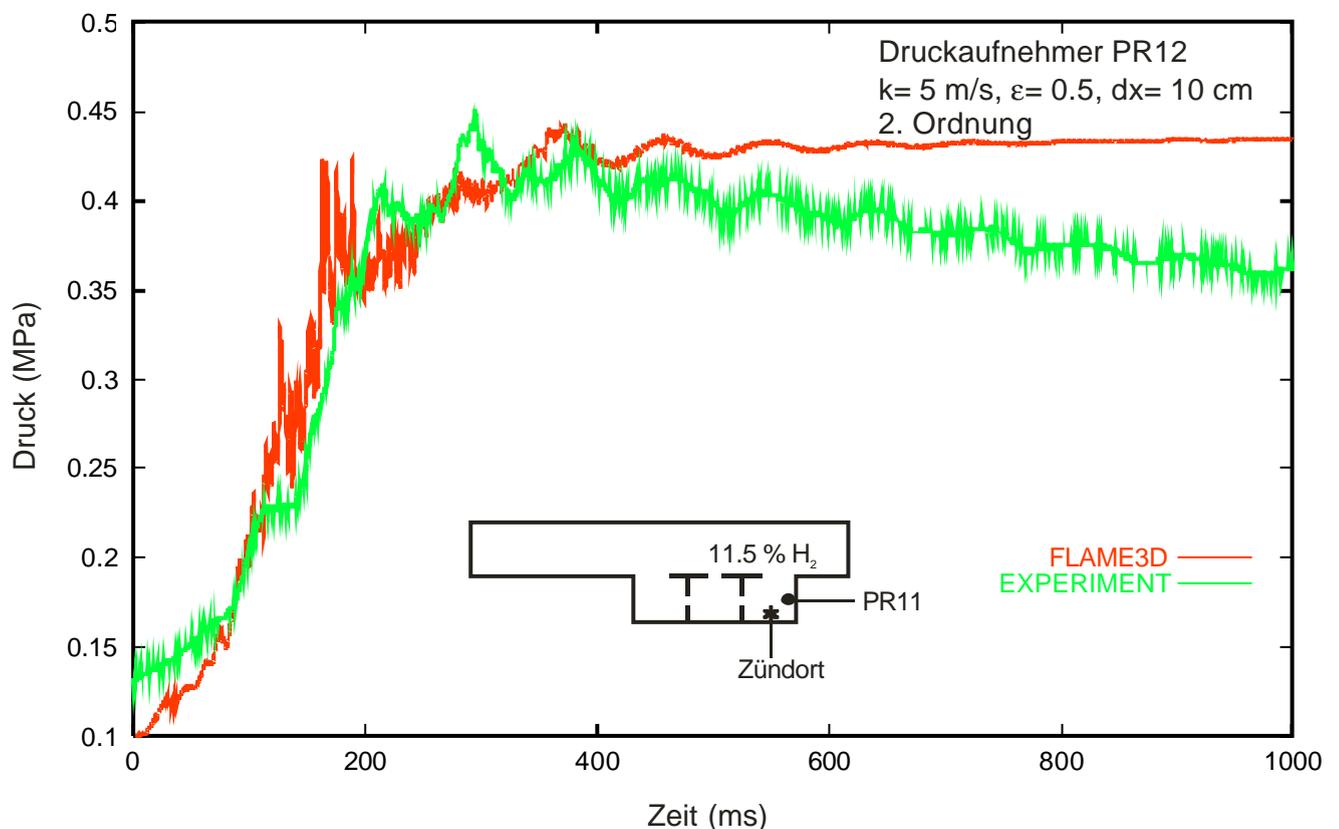


Abb.: 8.3.5.6: Blinde Vorausrechnung mit FLAME3D für RUT- Versuch HYC14, 11.5%  $\text{H}_2$  in Luft, Zündung in der Kavität, Druckverläufe nahe Zündort.

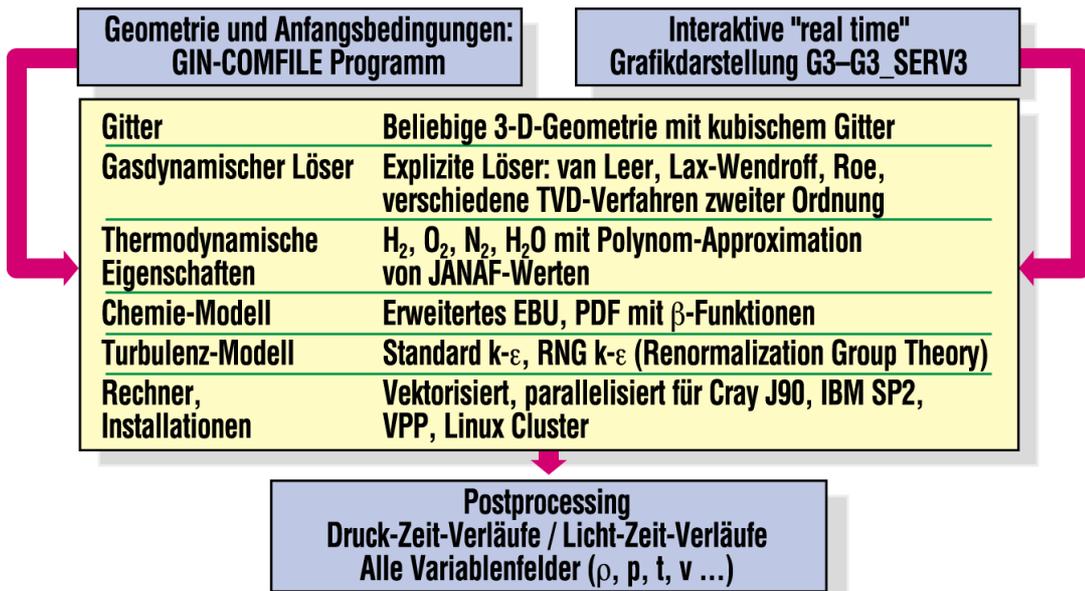


Abb.8.4.1.1: Aufbau des COM3D-Programmpaketes zur Simulation turbulenter Verbrennungen.

## Gasdynamisches Modell

- Massenerhaltung

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

- Impulserhaltung

$$(\rho u_j)_t + (\rho u_i u_j)_{x_j} = \rho g_i - p_{x_i} + M_{ij,x_j}, \quad i = 1, 2, 3$$

- Energieerhaltung

$$(\rho e)_t + ((\rho e + p)u_j)_{x_j} = \rho g_j u_j + u_i M_{ij,x_j} + \left( \frac{\mu_{tur}}{C_h} \left( e - \frac{1}{2} u_i u_i + \frac{p}{\rho} \right)_{x_j} \right)_{x_j} + B + \rho \epsilon,$$

- Massenerhaltung für Gasspezies  $\alpha$

$$(\rho f_\alpha)_t + (\rho f_\alpha u_j)_{x_j} = \bar{w}_\alpha + \left( \frac{\mu_{tur}}{C_{f_\alpha}} f_{\alpha,x_j} \right)_{x_j},$$

mit

$$e = \sum_{\alpha=1}^N \frac{f_\alpha}{\mu_\alpha} \left( h_\alpha + \Delta h_\alpha^0 - RT \right) + \frac{1}{2} u_j u_j, \quad f_\alpha = \frac{\rho_\alpha}{\rho},$$

$$M_{ij} = -\frac{2}{3} \delta_{ij} (\rho k + \mu_{tur} u_{r,x_r}) + \mu_{tur} (u_{i,x_j} + u_{j,x_i}).$$

Abb.8.4.1.2: Modellgleichungen des COM3D- Programms (1), Gasdynamisches Modell mit Favre Mittelung und Tensorschreibweise.

### Standard k-ε Turbulenzmodell

- Turbulente kinetische Energie k

$$(\rho k)_t + (\rho u_j k)_{x_j} = S - \rho \epsilon + \left(\frac{\mu_{tur}}{C_k} k_{x_j}\right)_{x_j},$$

- Dissipationsrate ε

$$(\rho \epsilon)_t + (\rho u_j \epsilon)_{x_j} = \frac{\epsilon}{k} (C_1 S - C_2 \rho \epsilon) + \left(\frac{\mu_{tur}}{C_\epsilon} \epsilon_{x_j}\right)_{x_j},$$

mit

$$S = u_{i,x_i} \left(-\frac{2}{3} \delta_{ij} (\rho k + \mu_{tur} u_{r,x_r})\right) + \mu_{tur} (u_{i,x_j} + u_{j,x_i})$$

und der turbulenten Viskosität  $\mu_{tur}$

$$\mu_{tur} = C_\mu k^2 / \epsilon.$$

	Modellkonstante				
	$C_\mu$	$C_1$	$C_2$	$C_k$	$C_\epsilon$
Standard k-ε	0.09	1.44	1.92	1.0	1.3

Abb.8.4.1.3: Modellgleichungen des COM3D- Programms (2), Standard k-ε Turbulenzmodell

## RNG k-ε Turbulenzmodell

- Turbulente kinetische Energie k

$$(\rho k)_t + (\rho u_j k)_{x_j} = S - \rho \epsilon + \left( \frac{\mu_{tur}}{C_k} k_{x_j} \right)_{x_j},$$

- Dissipationsrate ε

$$\begin{aligned} (\rho \epsilon)_t + (\rho u_j \epsilon)_{x_j} = & \frac{\epsilon}{k} [(C_1 - C_\eta) S - C_2 \rho \epsilon] + \left( \frac{\mu_{tur}}{C_\epsilon} \epsilon_{x_j} \right)_{x_j} + \\ & + [C_3 - \frac{2}{3} C_\eta (C_\mu \frac{k}{\epsilon} u_{j,x_j} + 1)] \rho u_{j,x_j} \epsilon. \end{aligned}$$

mit

$$C_\eta = \frac{\eta(1 - \eta/\eta_0)}{1 + \beta\eta^3}, \quad \eta_0 = 4.38$$

$$\eta = \frac{k}{\epsilon} \left( \frac{1}{2} (u_{i,x_j} + u_{j,x_i}) (u_{i,x_j} + u_{j,x_i}) \right)^{1/2},$$

und

$$C_3 = \frac{-1 + 2C_1 - 3m(\gamma - 1) + (-1)^\delta \sqrt{6} C_\mu C_\eta \eta}{3}.$$

	Modellkonstante					
	$C_\mu$	$C_1$	$C_2$	$C_k$	$C_\epsilon$	$\beta$
RNG k-ε	0.0845	1.42	1.68	0.719	0.719	0.012
Standard k-ε	0.09	1.44	1.92	1.0	1.3	-

Abb.8.4.1.4: Modellgleichungen des COM3D- Programms (3), RNG k-ε Turbulenzmodell

## Erweitertes Eddy- Break- Up Reaktionsmodell

- Reaktionsrate

$$\dot{\omega} = \begin{cases} -C'_f \frac{\epsilon}{k} \omega(1 - \omega); & D_a > 1 \\ -K_{chem} \omega \exp(-E_a/T); & D_a < 1 \end{cases}$$

- Turbulentes Verbrennungsregime

$$D_a = \tau_{turb} / \tau_{chem}:$$

$$\tau_{turb} = \frac{k}{\epsilon}; \quad \tau_{chem} = \frac{1}{K_{chem} \omega \exp(-E_a/T)}$$

- Said- Borghi Erweiterung für geringe Turbulenz

$$C'_f = C_f \left( 1 + \frac{4.4}{1 + 3.2 \frac{k^{1/2}}{S_L}} \right)$$

Abb.8.4.1.5: Modellgleichungen des COM3D- Programms (4), erweitertes EBU - Reaktionsmodell

## PDF- Reaktionsmodell

- Spezies- Massenerhaltung

$$(\bar{\rho} \tilde{f}_\alpha)_t + (\bar{\rho} \tilde{f}_\alpha \tilde{u}_j)_{x_j} = \bar{w}_\alpha + \left( (\mu_\alpha + \frac{\mu_{tur}}{C_{f_\alpha}}) \tilde{f}_{\alpha, x_j} \right)_{x_j}$$

- Mittlere Reaktionsrate der Komponente  $\alpha$

$$\bar{w}_\alpha = \int \int \dots \int \dot{w}_\alpha(f_1, f_2, \dots, f_N) F(f_1, f_2, \dots, f_N) df_1 df_2 \dots df_N.$$

- $\beta$ -PDF für Multikomponenten- Mischung

$$F(f_1, f_2, \dots, f_N) = \frac{\Gamma(\beta_1 + \beta_2 + \dots + \beta_N)}{\Gamma(\beta_1)\Gamma(\beta_2)\dots\Gamma(\beta_N)} f_1^{\beta_1-1} f_2^{\beta_2-1} \dots f_N^{\beta_N-1} \delta(1 - f_1 - f_2 - \dots - f_N) \quad (1)$$

- mit den Definitionen

$$\Gamma(\beta) = \int_0^\infty x^{\beta-1} e^{-x} dx.$$

$$\beta_\alpha = \bar{f}_\alpha \left( \left( 1 - \sum_{\alpha=1}^N \bar{f}_\alpha^2 \right) / Q - 1 \right),$$

$$Q \approx \tilde{q} + \sum_{\alpha=1}^N \left( \int f_\alpha F(\mathbf{f}) d\mathbf{f} - \tilde{f}_\alpha \right)^2$$

- Transportgleichung für turbulente Energie  $q$

$$\begin{aligned} (\bar{\rho} \tilde{q})_t + (\bar{\rho} \tilde{q} \tilde{u}_j)_{x_j} = \\ = 2 \sum_{\alpha=1}^N \frac{\mu_{tur}}{C_{f_\alpha}} \tilde{f}_{\alpha, x_j} \tilde{f}_{\alpha, x_j} + 2 \sum_{\alpha=1}^N \overline{\dot{w}_\alpha f_\alpha''} + \left( (\mu_\alpha + \frac{\mu_{tur}}{C_{f_\alpha}}) \tilde{q}_{x_j} \right)_{x_j} - C_{s2} \rho \tilde{q} \frac{\epsilon}{k} \quad (2) \end{aligned}$$

$$\overline{\dot{w}_\alpha f_\alpha''} = \dot{w}_\alpha (f_\alpha - \tilde{f}_\alpha^j) F^j(\mathbf{f}) d\mathbf{f}$$

Abb.8.4.1.6: Modellgleichungen des COM3D- Programms (5), PDF- Reaktionsmodell

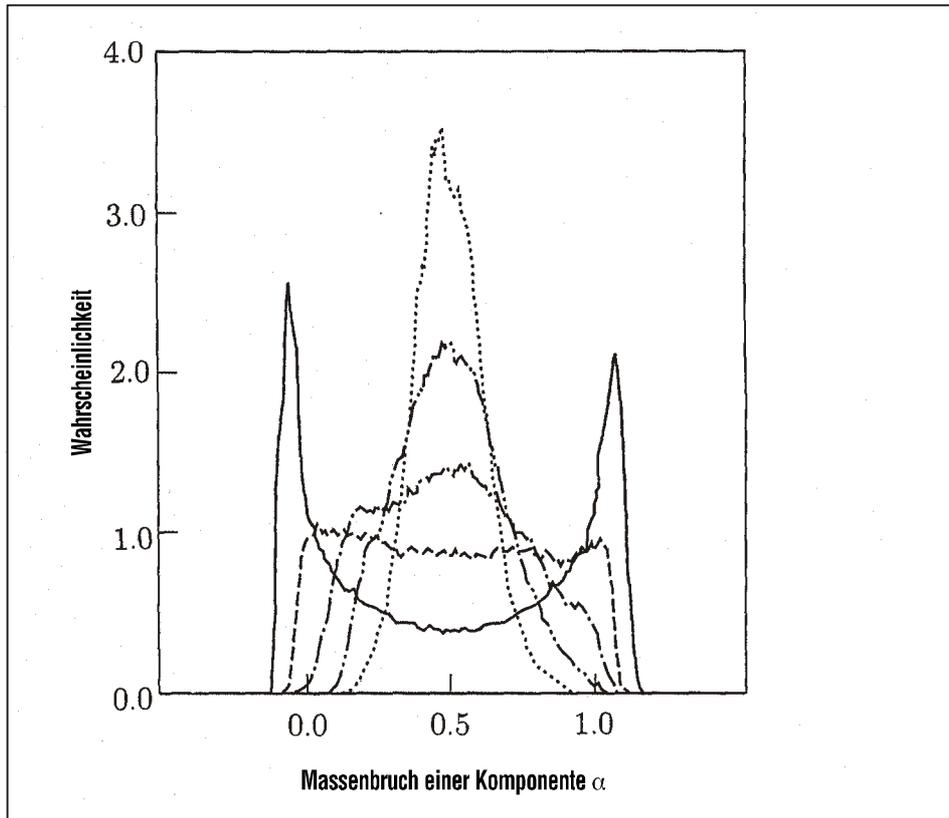


Abb.8.4.1.7: Auswertung der exakten skalaren PDF durch direkte numerische Simulation eines Mischungsproblems mit paralleler  $k_0$ -Strömung

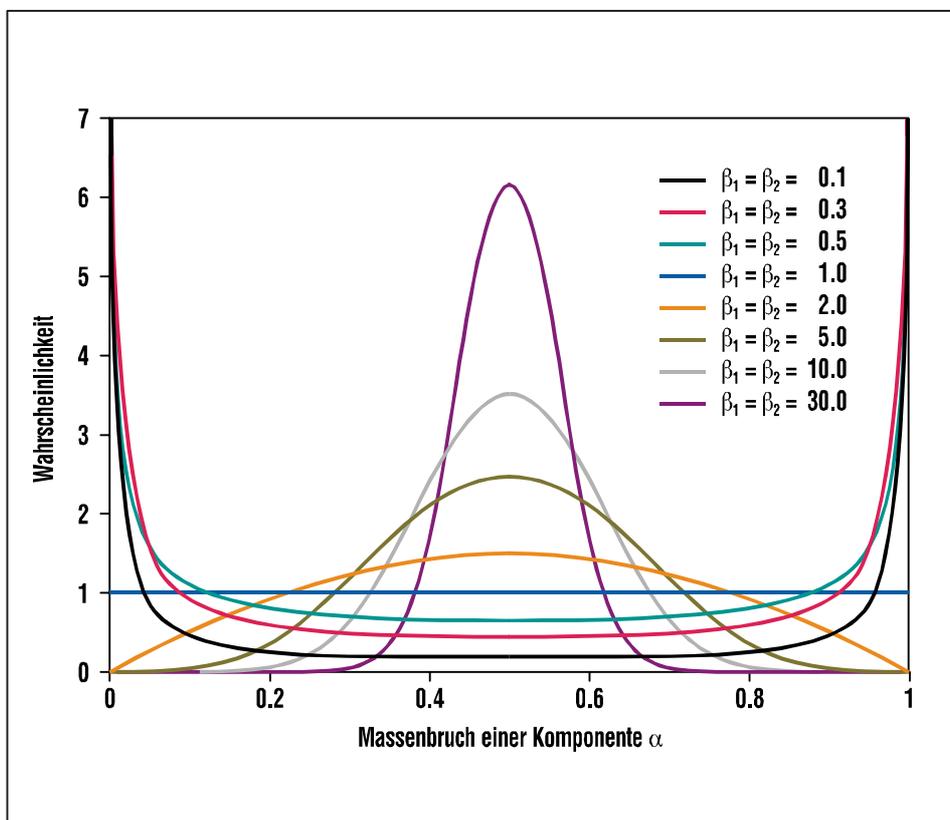
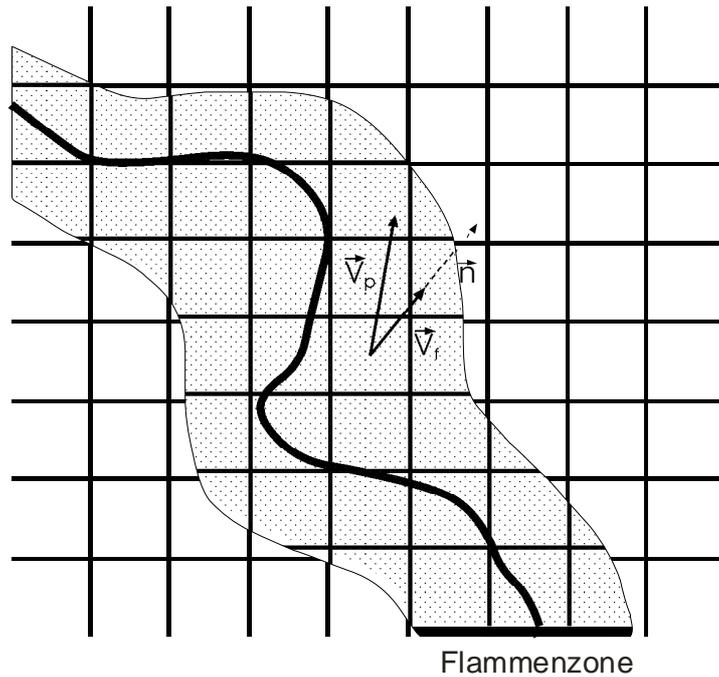


Abb.8.4.1.8: Auswertung der  $\beta$ - PDF Funktion für verschiedene  $\beta_1$  und  $\beta_2$  Werte. Die Modellfunktion kann alle wichtigen Phasen des Übergangs vom ungemischten zum homogen gemischten Zustand beschreiben.



$$\vec{v}_{fl} = \vec{v}_p + \frac{\vec{\nabla} F}{|\nabla F|} \vec{v}_{brenn}$$

$\vec{v}_p$  = im Code berechnete Partikelgeschwindigkeit

F = Variable die die Flammenpropagation definiert, z.B. Brennstoffkonzentration,  $\frac{\vec{\nabla} F}{|\nabla F|} \equiv$  Richtung

$\vec{v}_{brenn}$  = im Code berechnete Brenngeschwindigkeit = Flammenfortschritt in der Chemiephase der Rechnung

Abb.8.4.1.9: COM3D- Modell zur Berechnung der lokalen Flammengeschwindigkeit  $\vec{v}_{fl}$

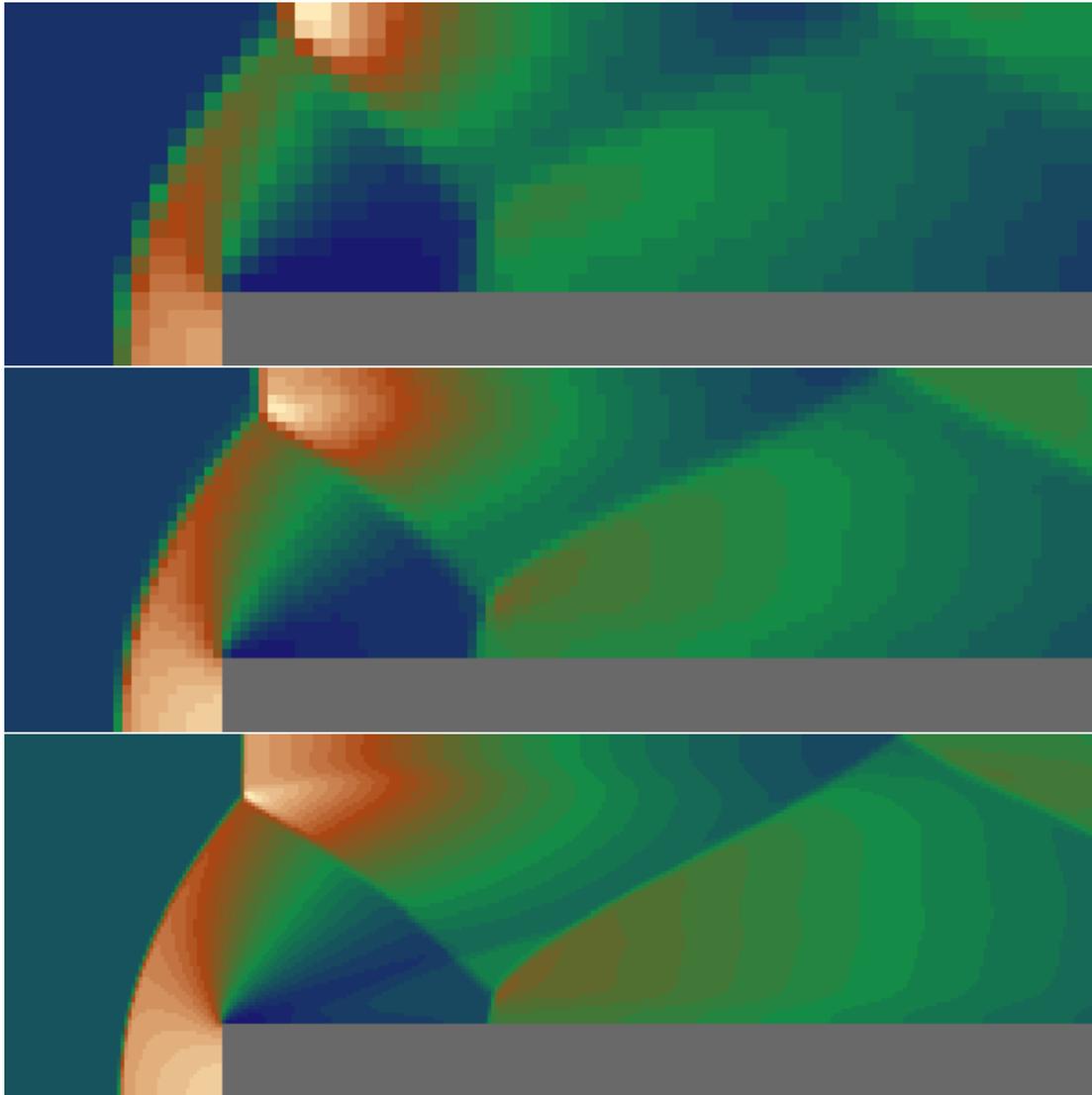
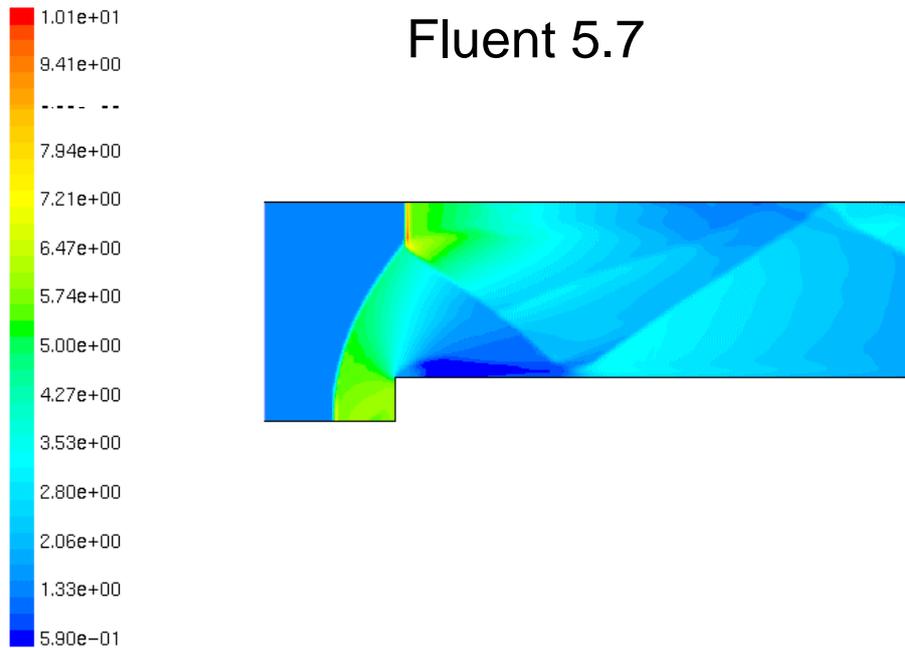


Abb.8.4.2.1: Testproblem zur Verifikation von Fluidodynamik und Numerik des COM3D- Programms:

- stationäre Anströmung einer Stufe von links,
  - 2D Kanal,
  - Stickstoff bei 1 bar, 298 K , Mach 3,
  - Rechengitter von oben nach unten: 20x60, 40x120, 100x300 Zellen.
- Die Ergebnisse stimmen gut mit der bekannten numerischen Lösung überein. Das verwendete TVD- Verfahren liefert auch bei relativ grober Auflösung noch stabile Lösungen

## Fluent 5.7



Contours of Density (kg/m3) (Time=1.1310e-02)

FLUENT 5.7 (2d, dp, coupled exp, lam, unsteady) Oct 31, 2001

## COM3D 1.2.3

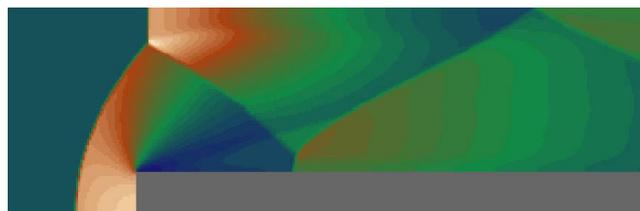


Abb.8.4.2.2: Vergleich der COM3D- Rechnung für Überschallströmung in 2D- Kanal mit Stufe zu FLUENT, Rechengitter in beiden Fällen 100x300 Zellen. Es bestehen gute Übereinstimmungen beim berechneten Staupunktdruck, Winkel des Bogenmaßes, Scherschichten und Stoßwellenmuster. Allerdings sind die Diskontinuitäten in COM3D deutlich besser aufgelöst.

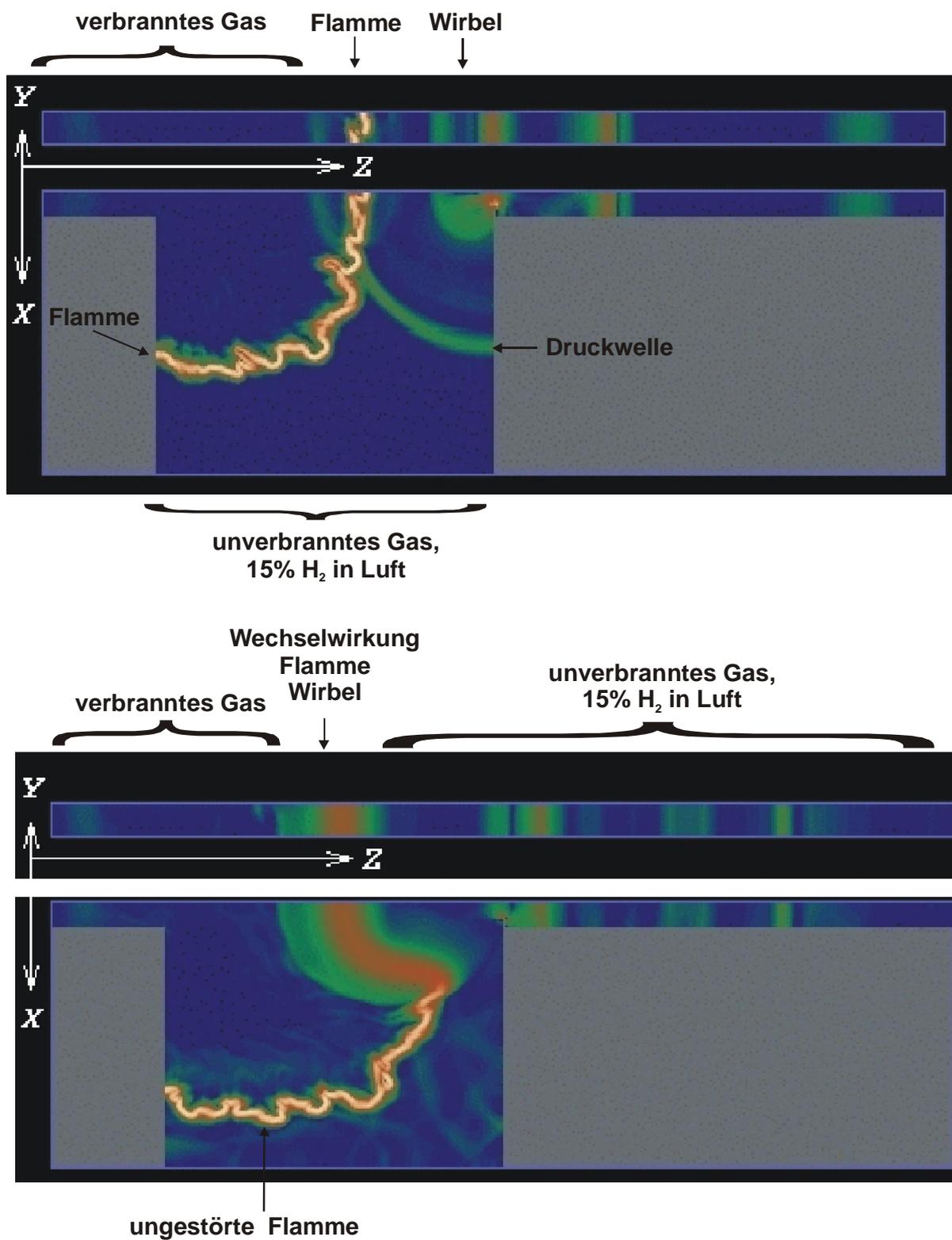


Abb.8.4.3.1: COM3D Simulation zur Wechselwirkung einer Flammenfront mit einem Wirbel. Dichtegradient im Strömungsfeld (numerisches Schlierenbild)

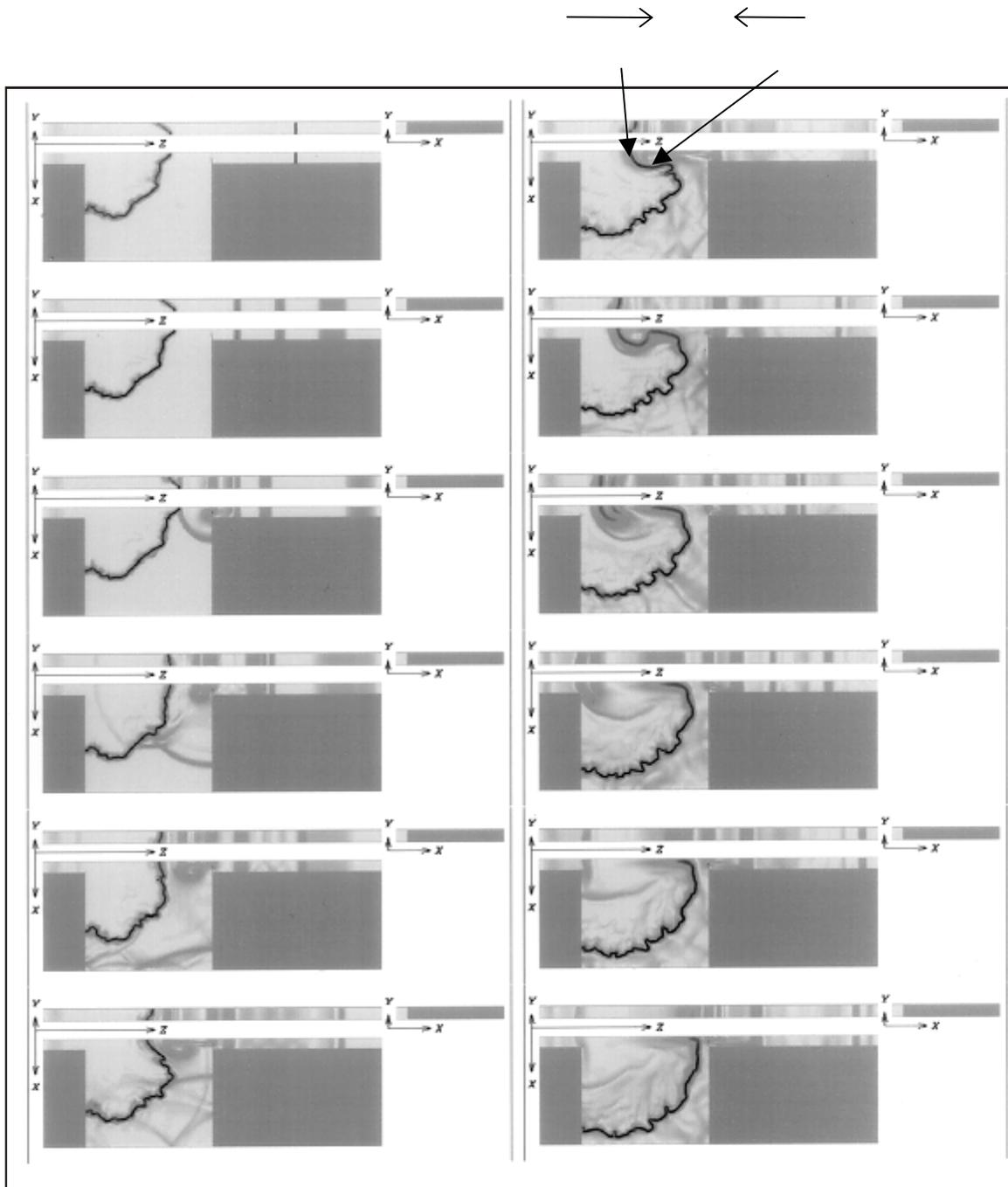


Abb.8.4.3.2: COM3D Simulation zur Wechselwirkung einer Flammenfront mit einem Wirbel. Dichtegradient im Strömungsfeld (numerisches Schlierenbild), zeitlicher Ablauf von links oben nach links unten, dann von rechts oben nach rechts unten.

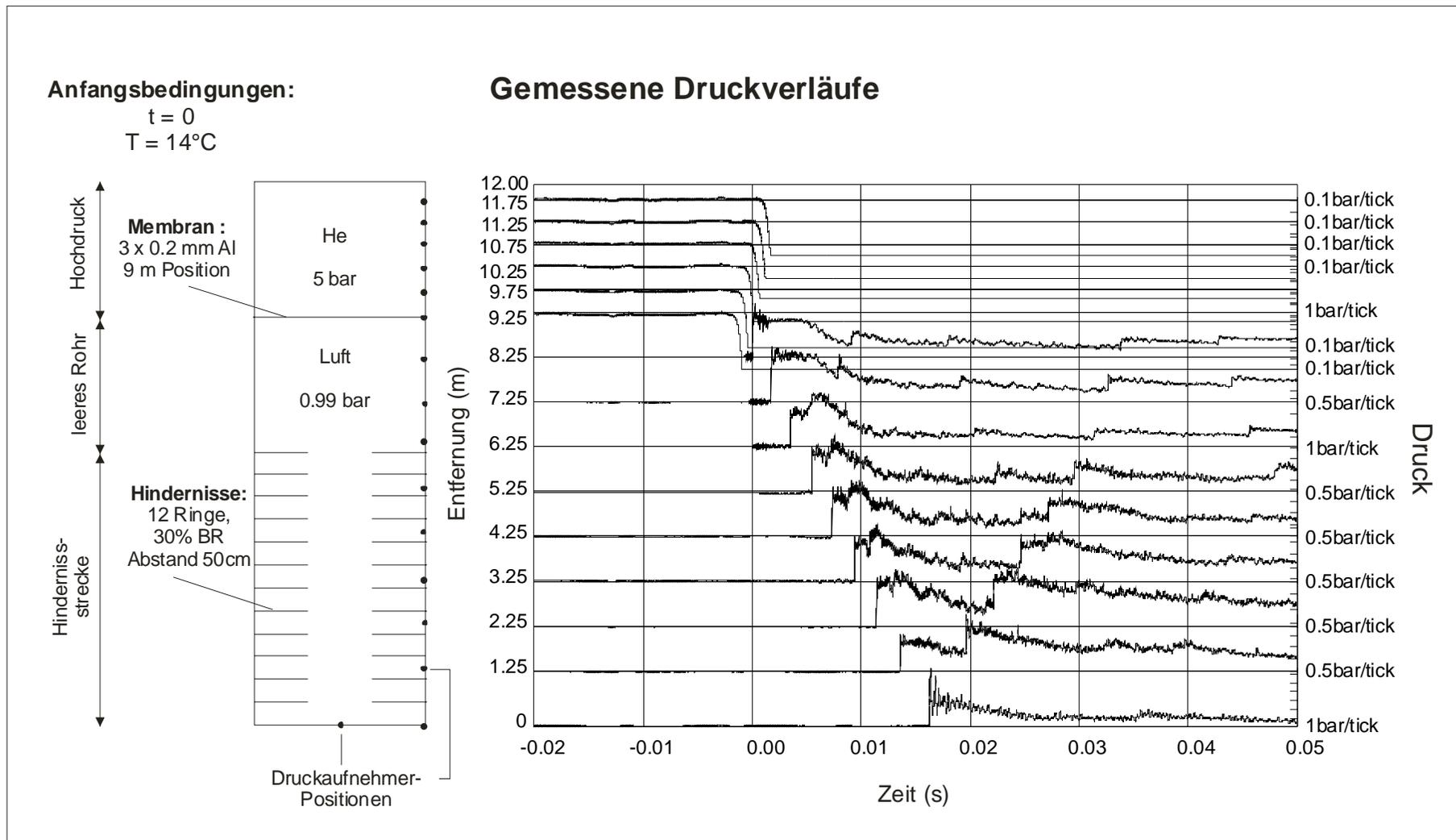


Abb. 8.4.4.1: Anfangsbedingungen und gemessene Druckverläufe in Rohrexperiment R1096\_03 zur Verifikation von Strömungs- und Turbulenzmodellen

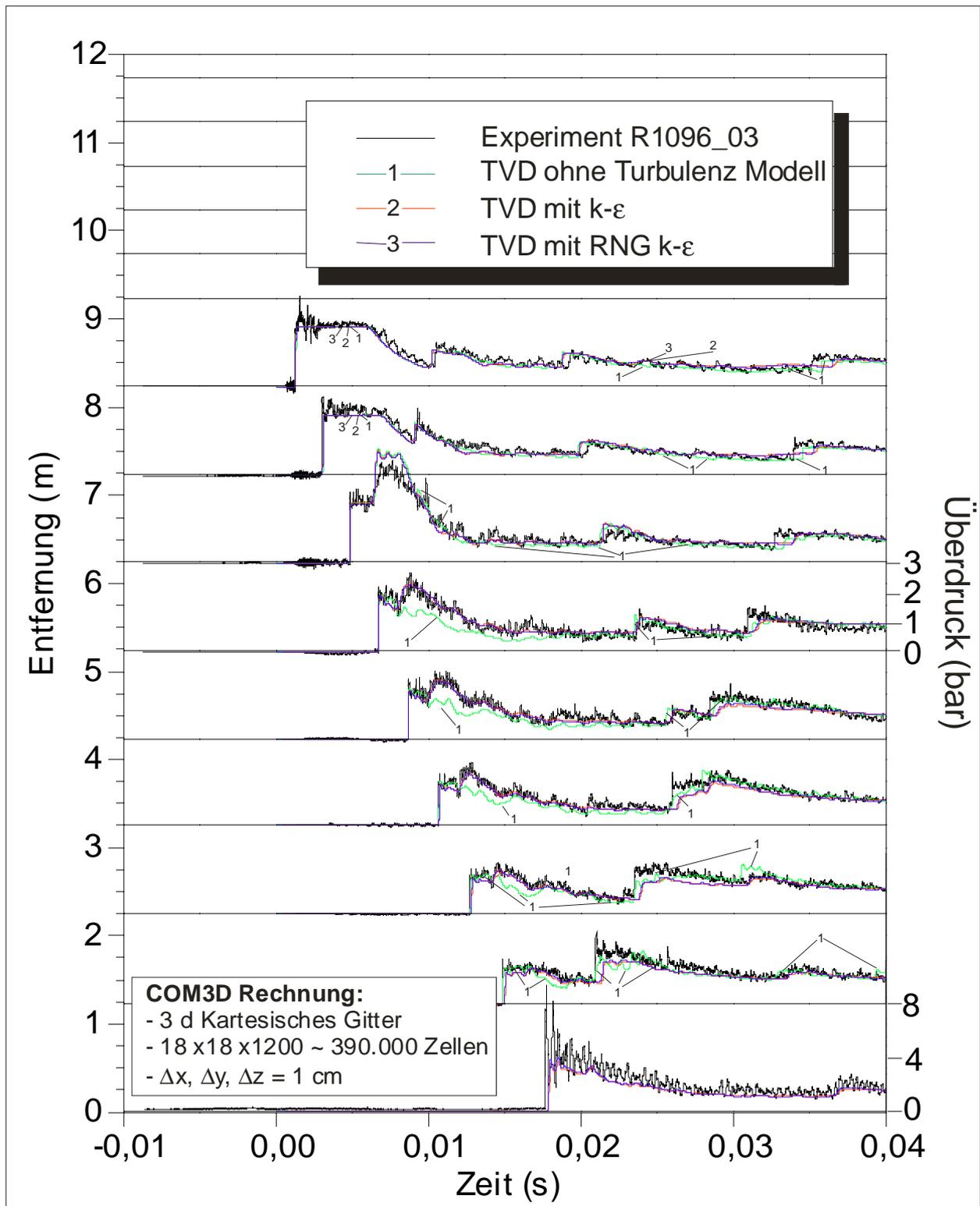


Abb.8.4.4.2: Vergleich des Experiments R1096\_03 mit drei verschiedenen COM3D-Rechnungen. Die Simulation mit Standard  $k-\epsilon$  und RNG  $k-\epsilon$  Turbulenzmodell zeigen gute Übereinstimmungen mit den experimentellen Daten.

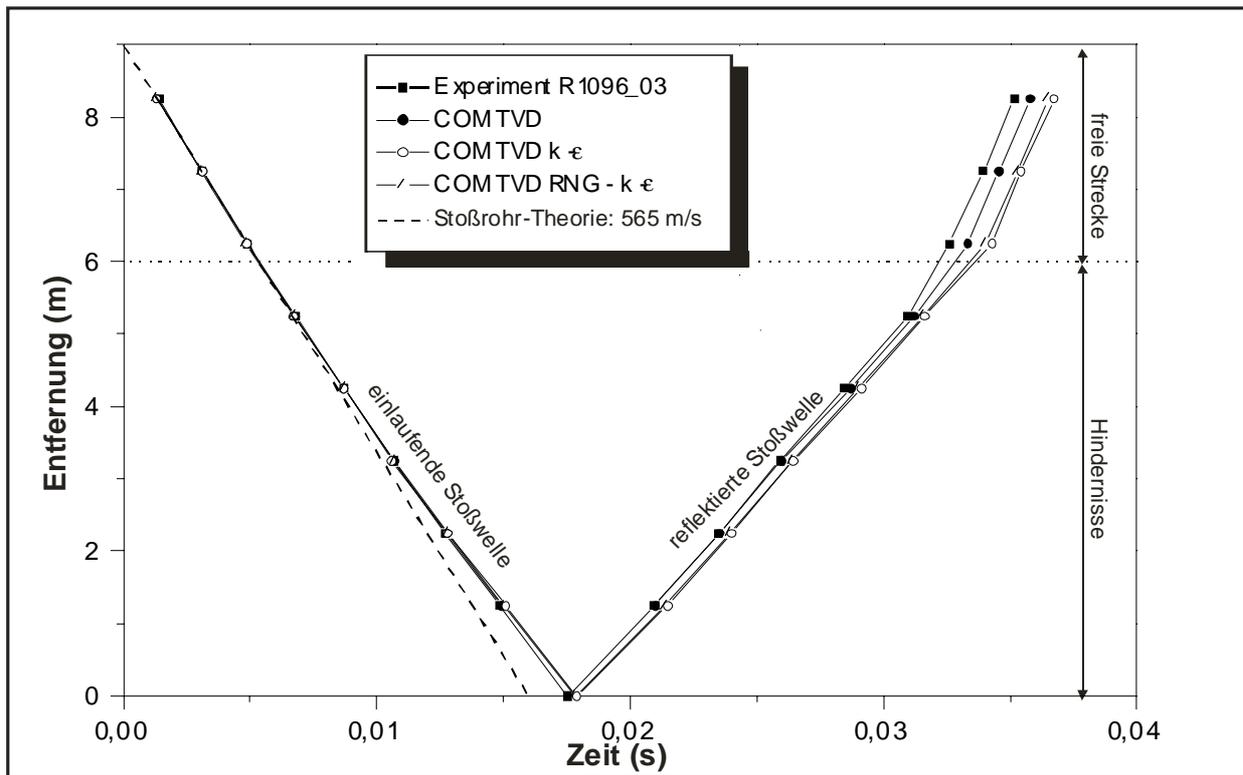


Abb.8.4.4.3: Gemessene und mit COM3D berechnete Weg- Zeit- Diagramme für einlaufende und reflektierte Stoßwelle im Experiment R1096\_03.

Programm	COM3D			GASFLOW				V3D			
Gitter	3-d kartesisch $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1 \text{ cm}$ 18 x 18 x 1200 = 390.000 Zellen			2-d zylindrisch $\Delta r = \Delta z = 1 \text{ cm}$ 18 x 1200 = 21.600 Zellen				3-d kartesisch $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1.75 \text{ cm}$ 10 x 10 x 686 = 68.600 Zellen			
Löser	TVD			Donor	v. Leer		Donor	v. Leer			
Turbulenz- Modell	ohne	k/ε	RNG- k/ε	ohne	k/ε	ohne	k/ε	ohne	k/ε	ohne	k/ε

Abb.8.4.4.4: Am Benchmark beteiligte Programme und Modellparameter für Simulation von Experiment R1096\_03.

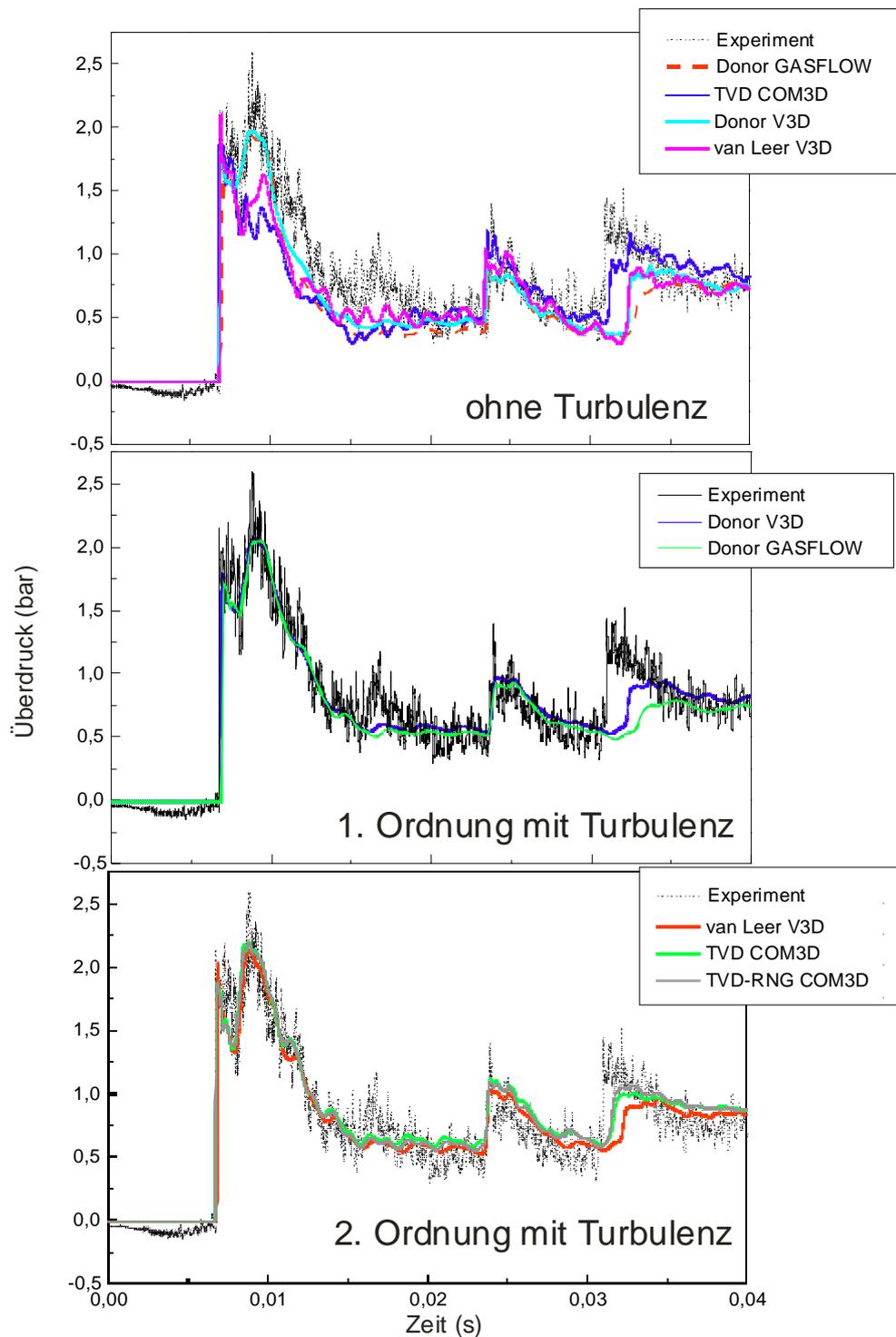


Abb.8.4.4.5: Benchmark für verschiedene Programme, Löser und Turbulenzmodelle, Vergleich berechneter Druckverläufe für Position 5.25 m in Experiment R1096\_03. Löser zweiter Ordnung mit  $k-\epsilon$  oder RNG  $k-\epsilon$  Modell zeigen sehr gute Übereinstimmung mit dem Versuch.

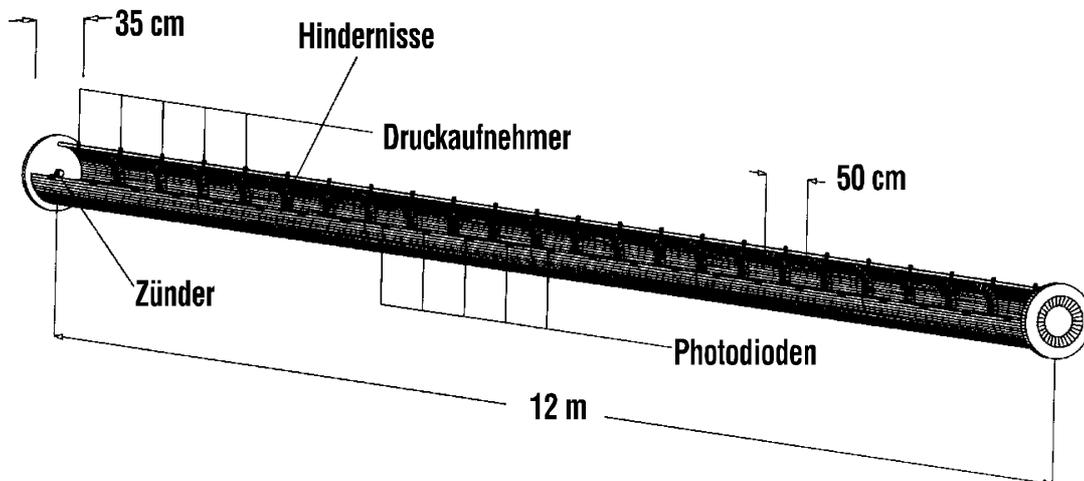


Abb.8.4.5.1: FZK 12m –Rohr zur Untersuchung von turbulenten  $H_2$ -Luft- Verbrennungen auf mittlerer Skala.

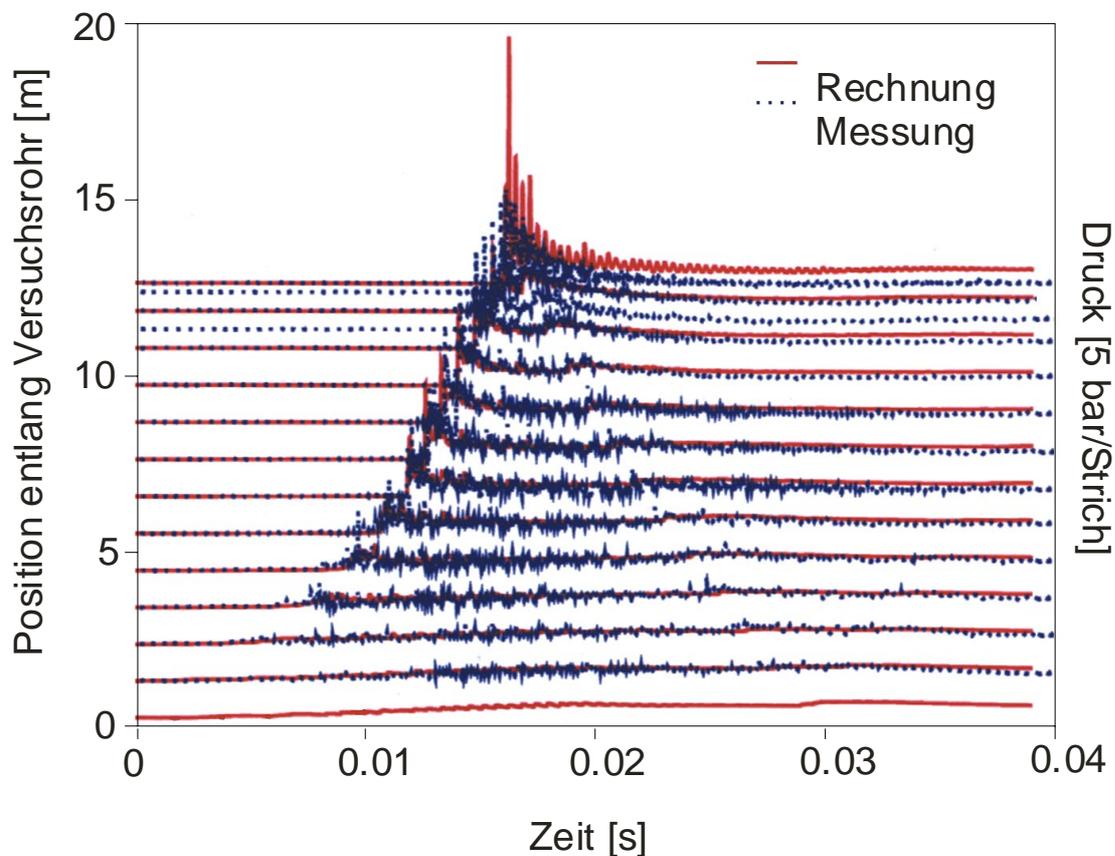


Abb.8.4.5.2: Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Drücken für einen Verbrennungsversuch mit 15 vol %  $H_2$  in Luft im FZK 12m –Rohr , Hindernisse mit 30% Versperungsgrad.

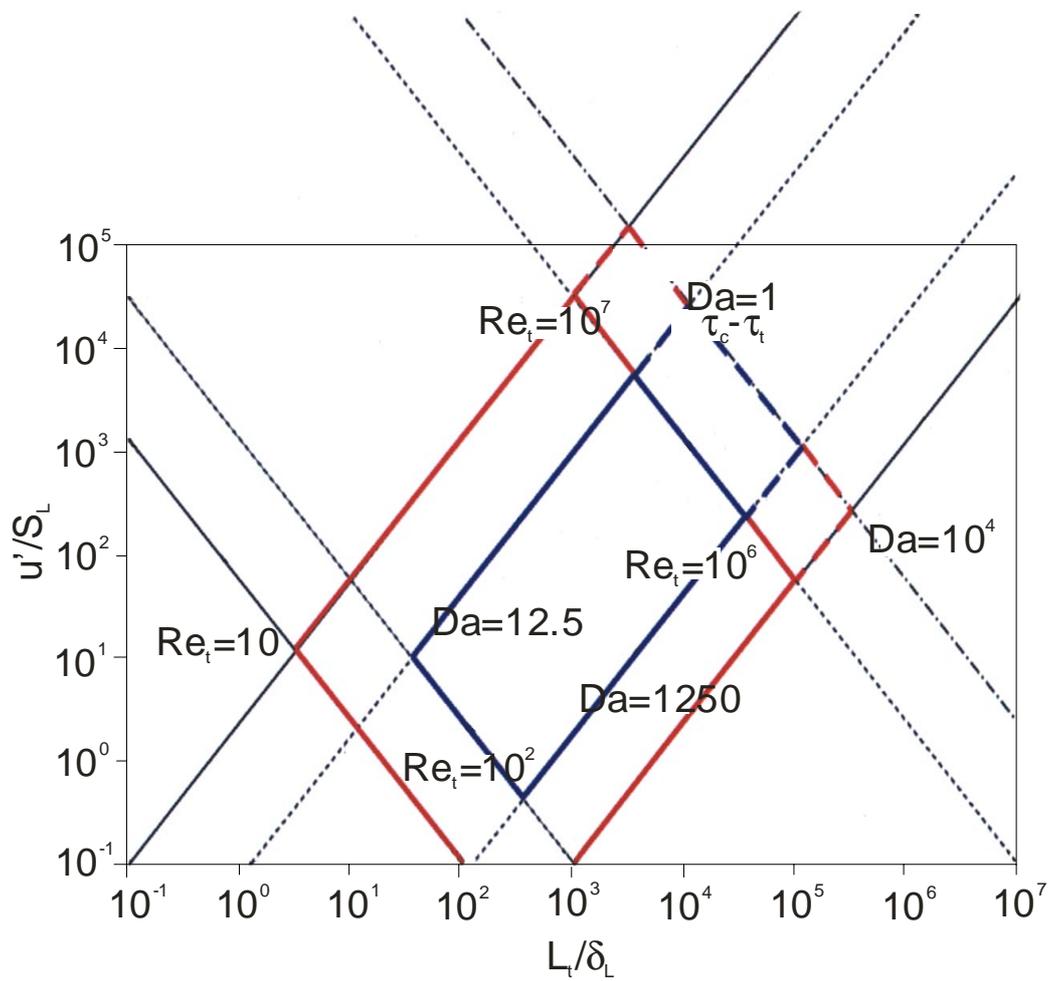


Abb.8.4.5.3: Aus Verifikationsrechnungen mit COM3D abgeleiteter Gültigkeitsbereich des erweiterten EBU- Reaktionsmodells (blau) und der für industrielle Vormischflammen interessierenden Parameterbereich (rot).  $L_t/\delta_L$  = turbulentes Makrolängenmaß / laminare Flammendicke,  $u'/S_L$  = Turbulenzintensität/laminare Flammengeschwindigkeit.

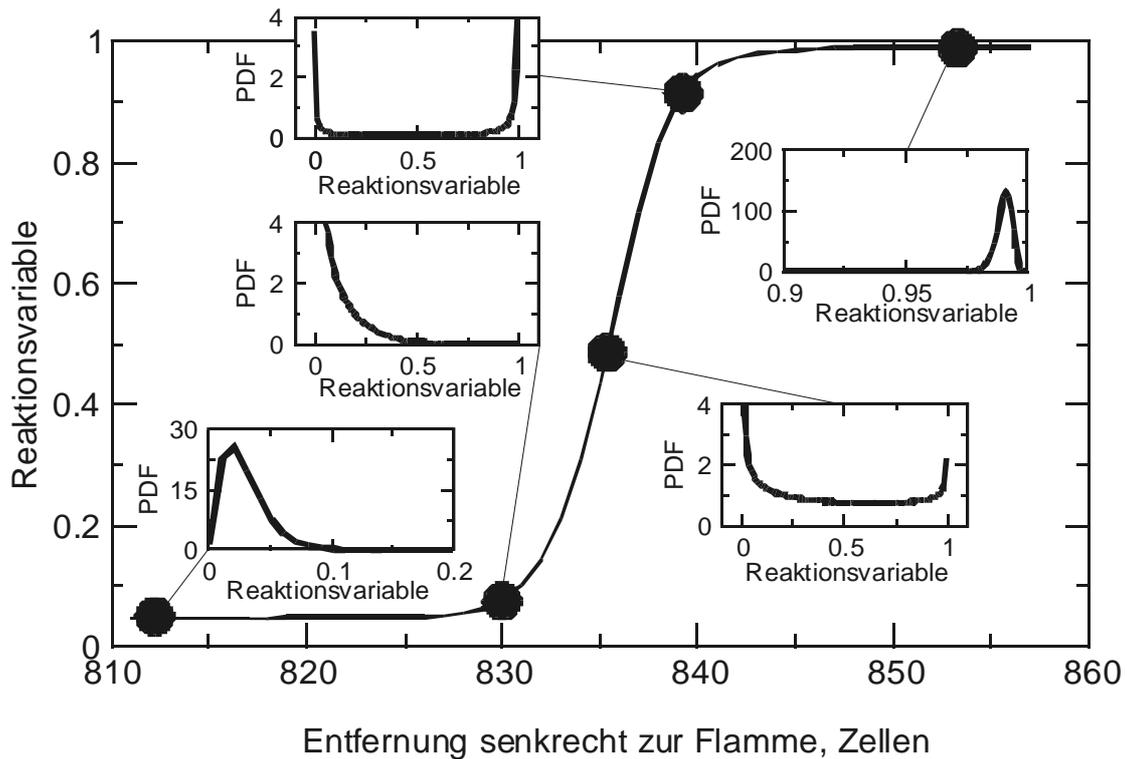


Abb.8.4.5.4: Mit COM3D berechnete Evolution der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF) beim Übergang von unverbranntem Gas (rechts) zum verbranntem Gas (links). Das Modell reproduziert die in der Umgebung einer Flamme erwarteten Gemischzustände sehr gut. Reaktionsvariable ist die Wasserstoffkonzentration.

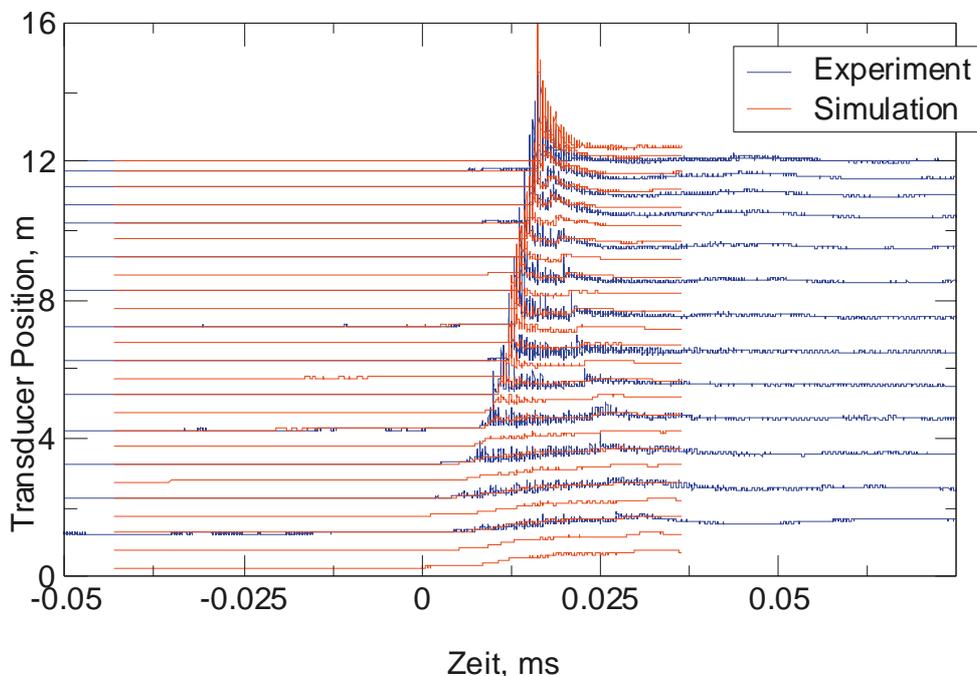
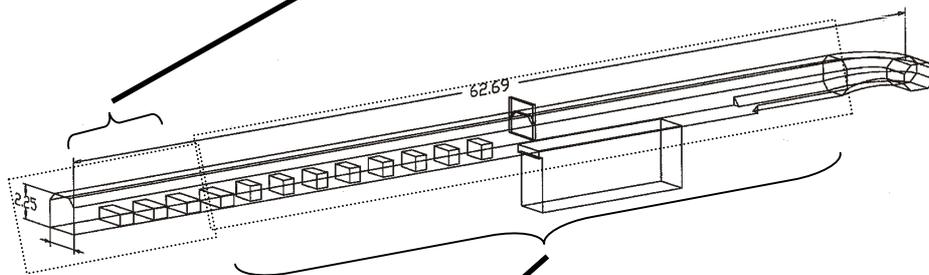
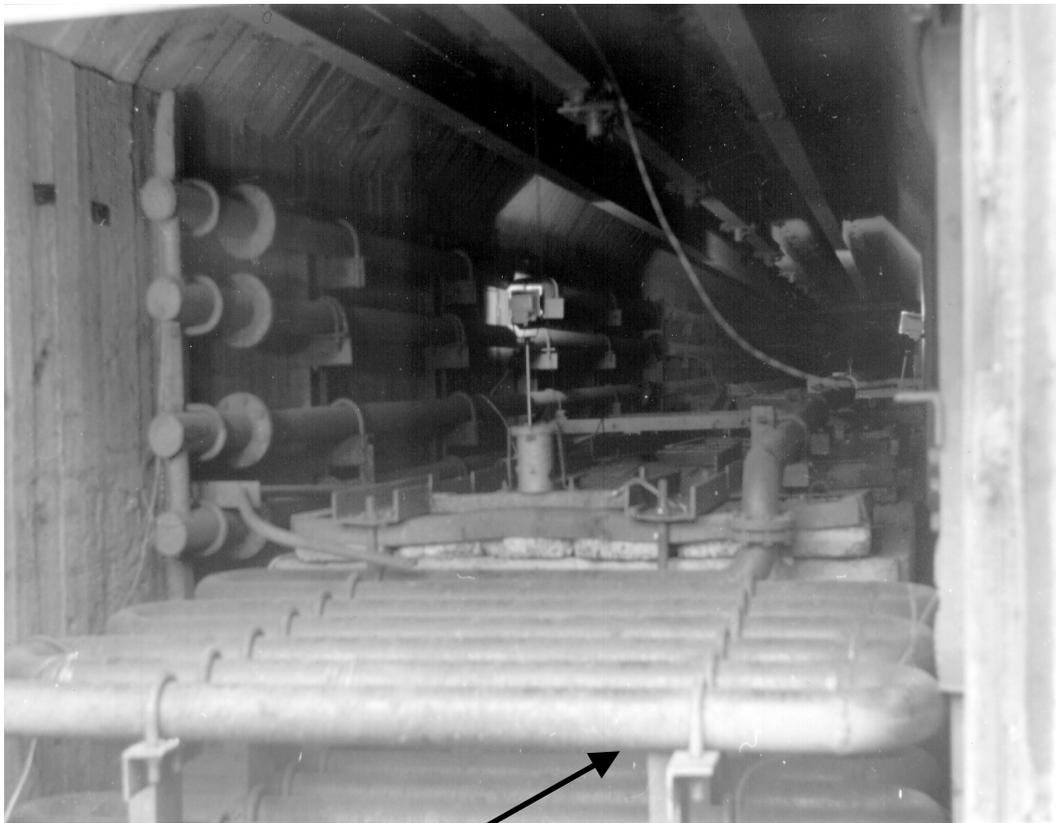


Abb.8.4.5.5: Simulation eines FZK-Rohrversuchs mit der COM3D-PDF Programmversion, 15%  $H_2$  in Luft, Versperrungsgrad 30%,  $p_0 = 1\text{ bar}$ . Durch halb-analytische Auswertung der  $\beta$ -PDF Integrale liegt die Laufzeit nur wenige % über der des EBU-Reaktionsmodells.



#### **RUT-Konfiguration I**

- Gesamtlänge 62 m
- Gesamtvolumen 480 m<sup>3</sup>
- 1. Kanal mit Hindernissen
- leere Kavität
- 2. Kanal ohne Hindernisse

Abb.8.4.6.1: Prinzipskizze der RUT- Anlage für Großexperimente mit Wasserstoff- Luft- Dampfgemischen und Ausrichten des linken Kanals mit Betonhindernissen und Rohrleitungen zum Heizen der Anlage auf ca. 100°C.

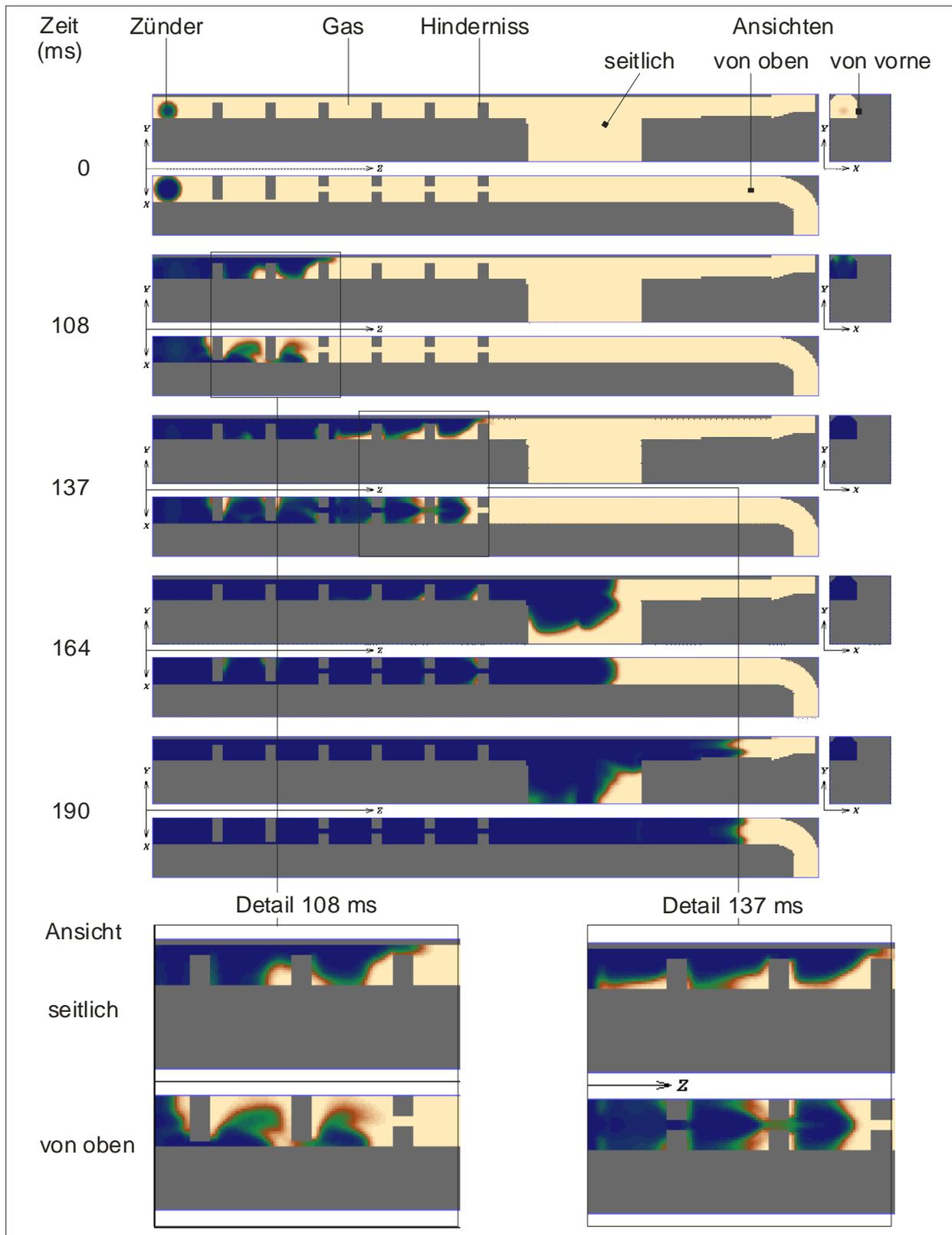


Abb.8.4.6.2: COM3D Simulation von Experiment RUT-21, 12.5% H<sub>2</sub>, Versperrungsgrad der Hindernisse im linken Kanal 60%.

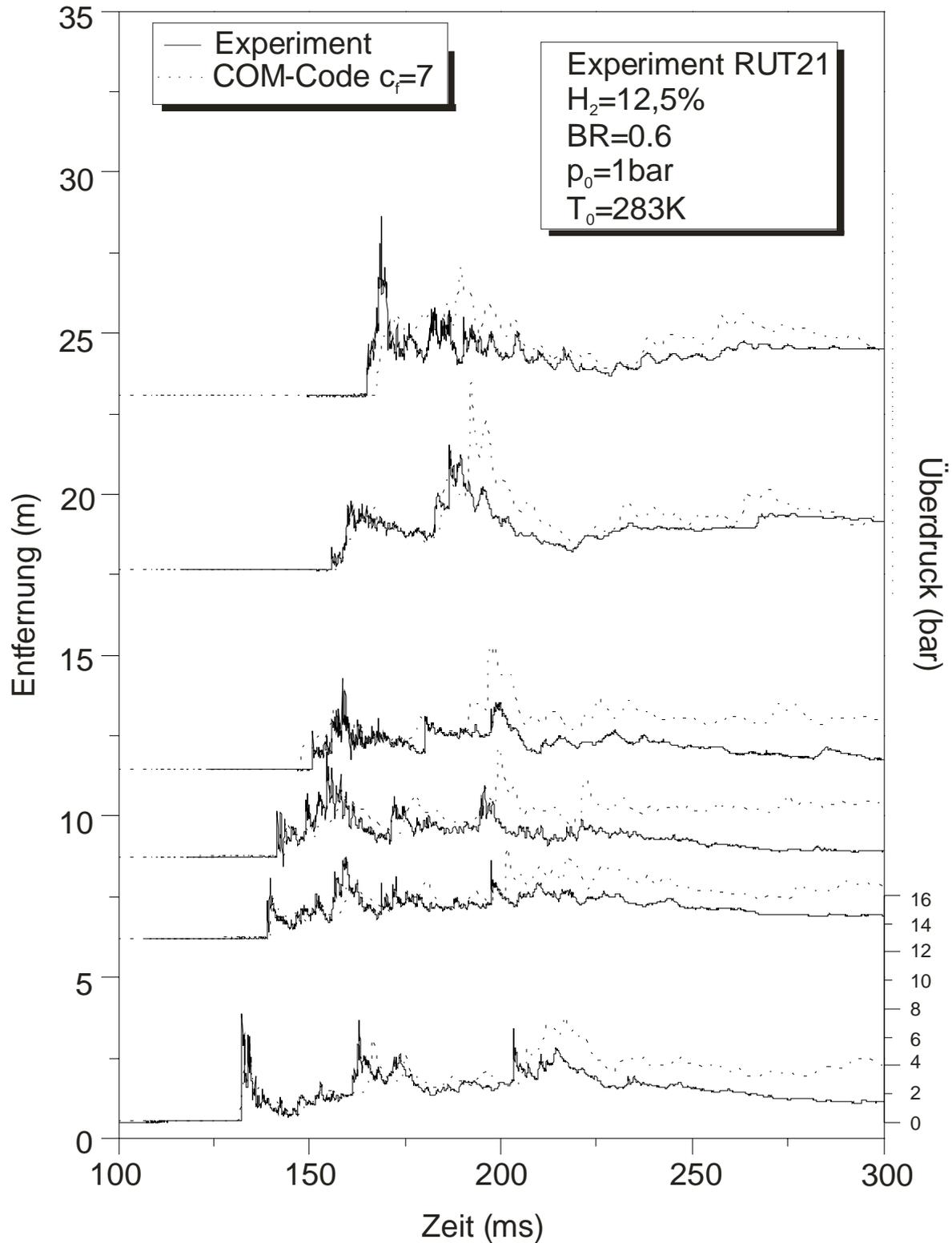


Abb.8.4.6.3: Vergleich von gemessenen und berechneten Druckverläufen in Experiment RUT-21, COM3D, EBU- Reaktionsmodell, Standard  $k-\epsilon$  Modell.

Die Simulation reproduziert alle wesentlichen Druckpeaks, sie liegt bei späten Zeiten deutlich über den Messwerten wegen Vernachlässigung der experimentell bedingten Gasausströmung aus der RUT- Anlage.

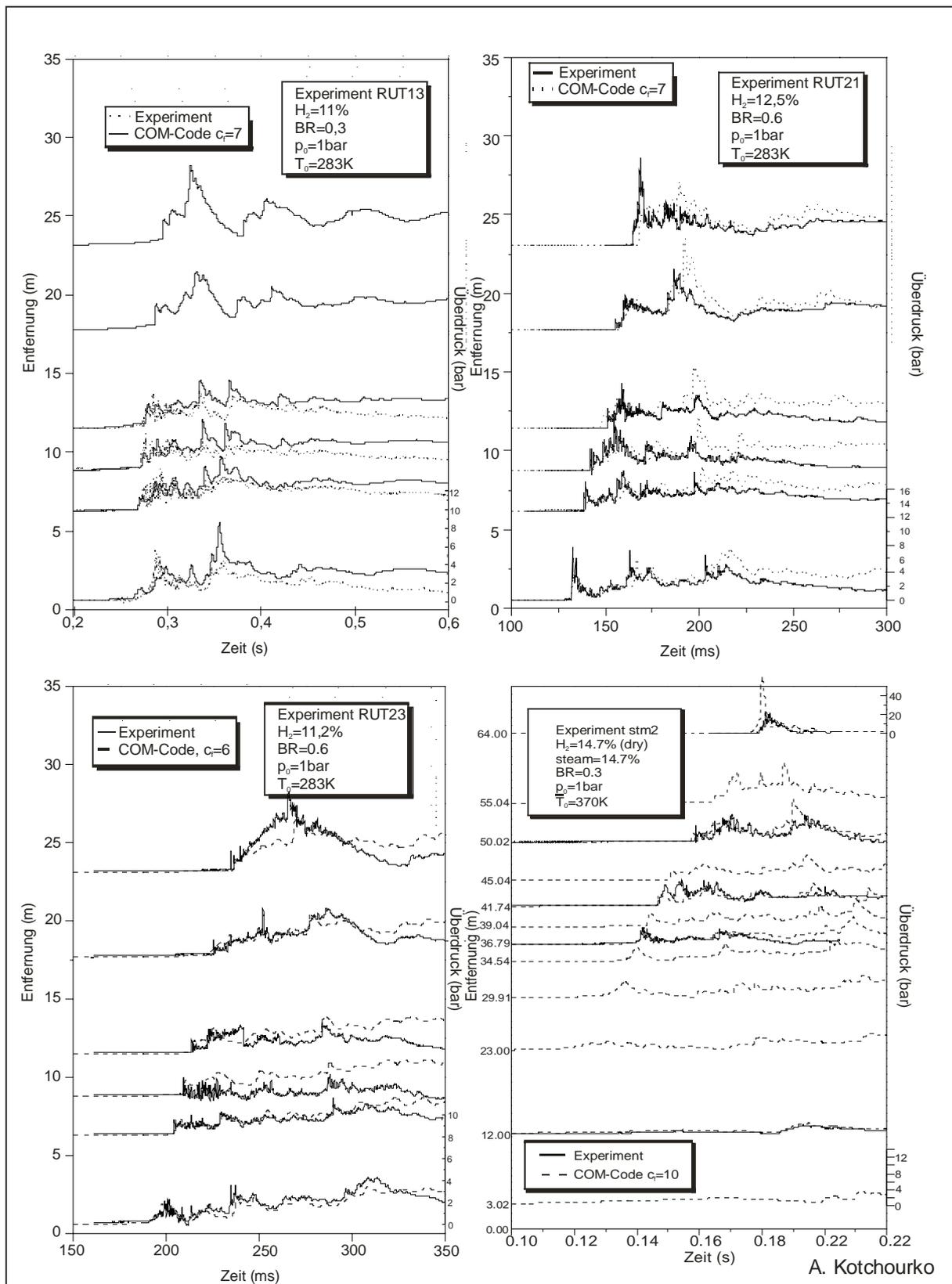


Abb.8.4.6.4: Vergleich von gemessenen und berechneten Druckverläufen in verschiedenen  $H_2$ -Luft und  $H_2$ -Luft-Dampf Versuchen in der RUT-Anlage, COM3D, Standard k- $\epsilon$  Modell Turbulenzmodell, EBU-Reaktionsmodell.

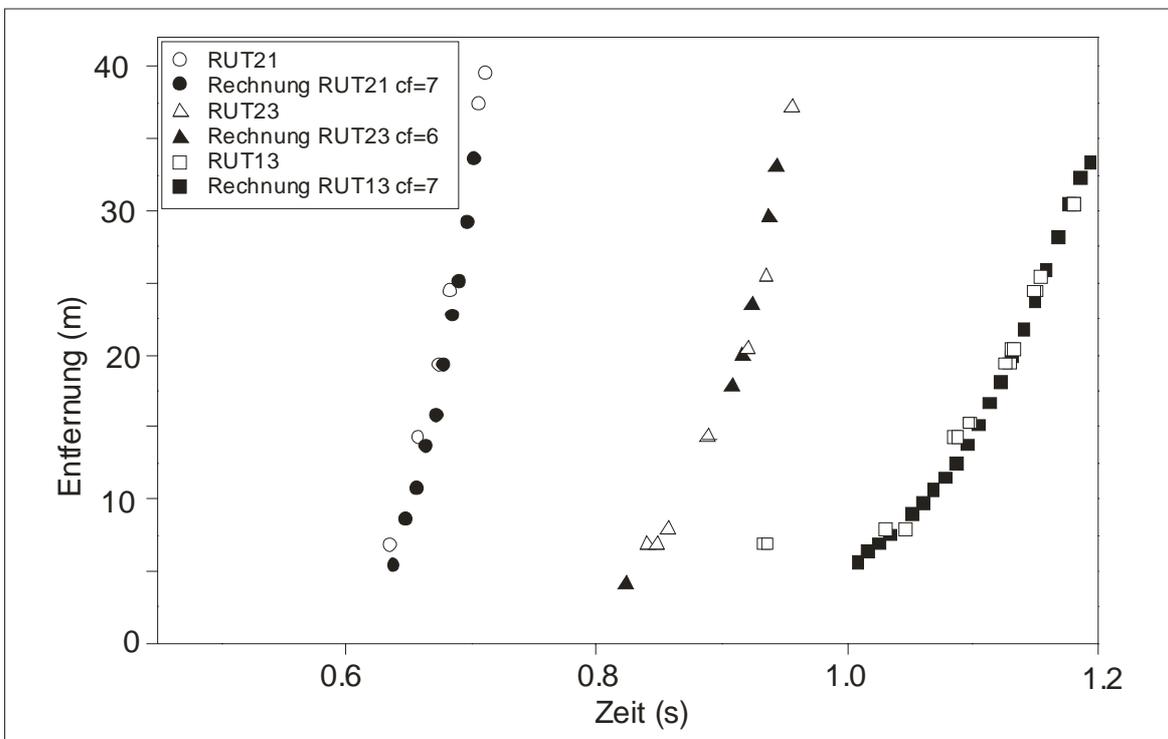
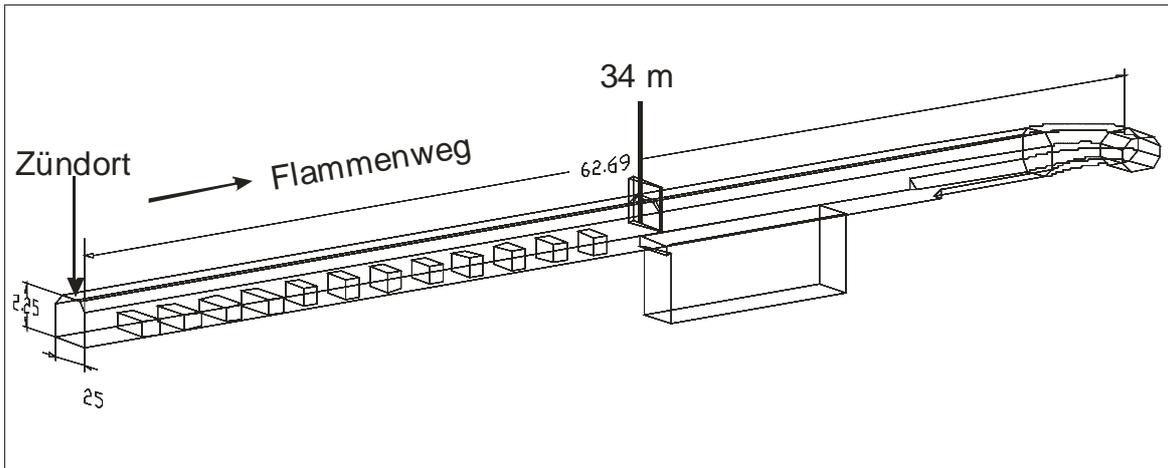


Abb.8.4.6.5: Vergleich von gemessener und berechneter Flammenpropagation im linken Kanal der RUT- Anlage bei verschiedenen Versuchen. Versuchsparameter in Abb. 8.4.6.4.

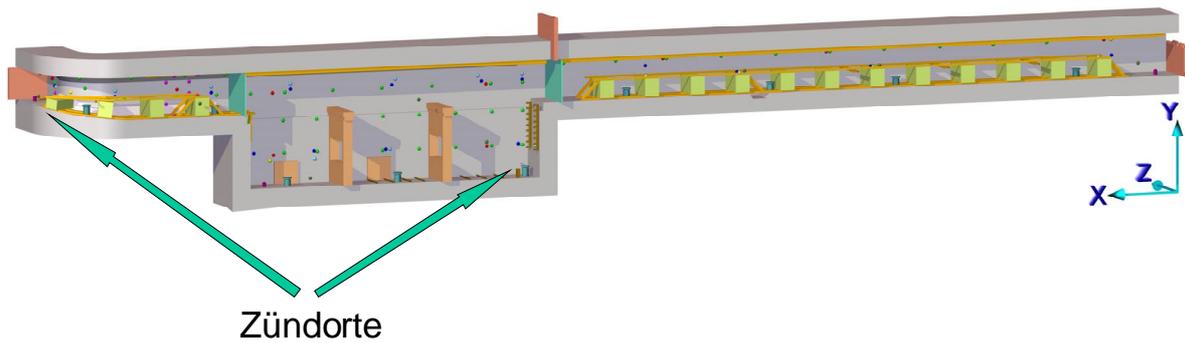


Abb.8.4.7.1: RUT- Konfiguration II mit Strömungshindernissen im 1. Kanal, in der Kavität und um 2. Kanal. Der 1. Kanal (rechts) kann durch eine Metallplatte abgetrennt werden.

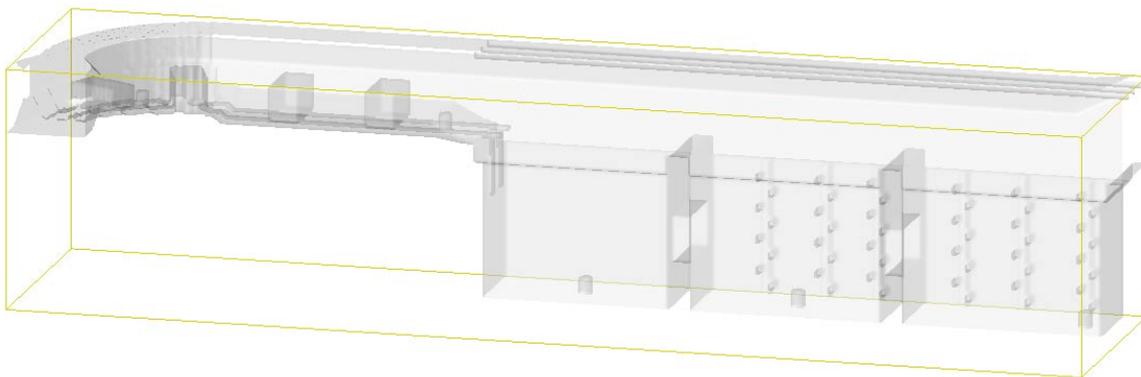


Abb.8.4.7.2: COM3D Geometriemodell für RUT Konfiguration II, Zellengröße 6.7x6.7x6.7 cm, insgesamt 3.800.000 Rechenzellen, parallele Codeversion, T3E Maschine Jülich, 80 CPU's.

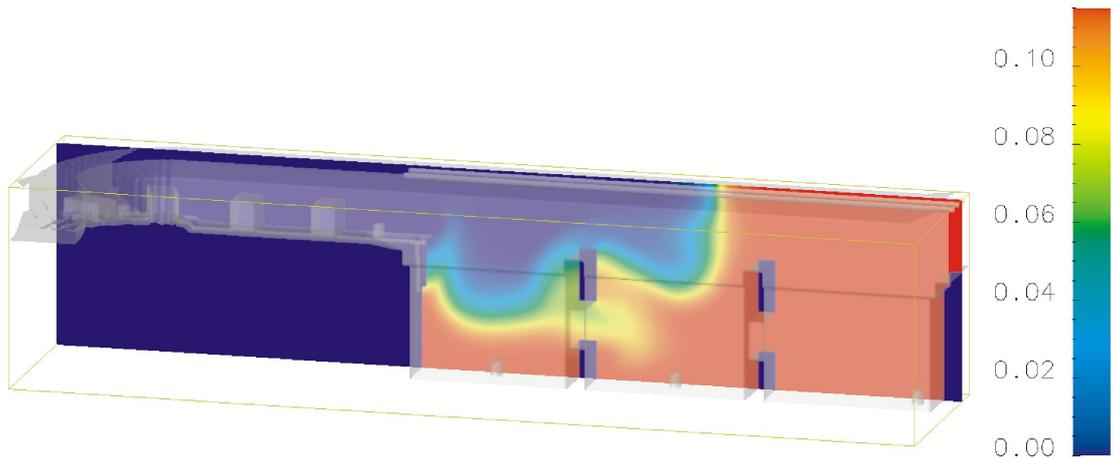


Abb.8.4.7.3: COM3D Simulation der Wasserstoffverbrennung in RUT- Versuch HYC02 berechnetes Feld für H<sub>2</sub>-Konzentration, Ausgangskonzentration .11,5 vol% H<sub>2</sub> in Luft.

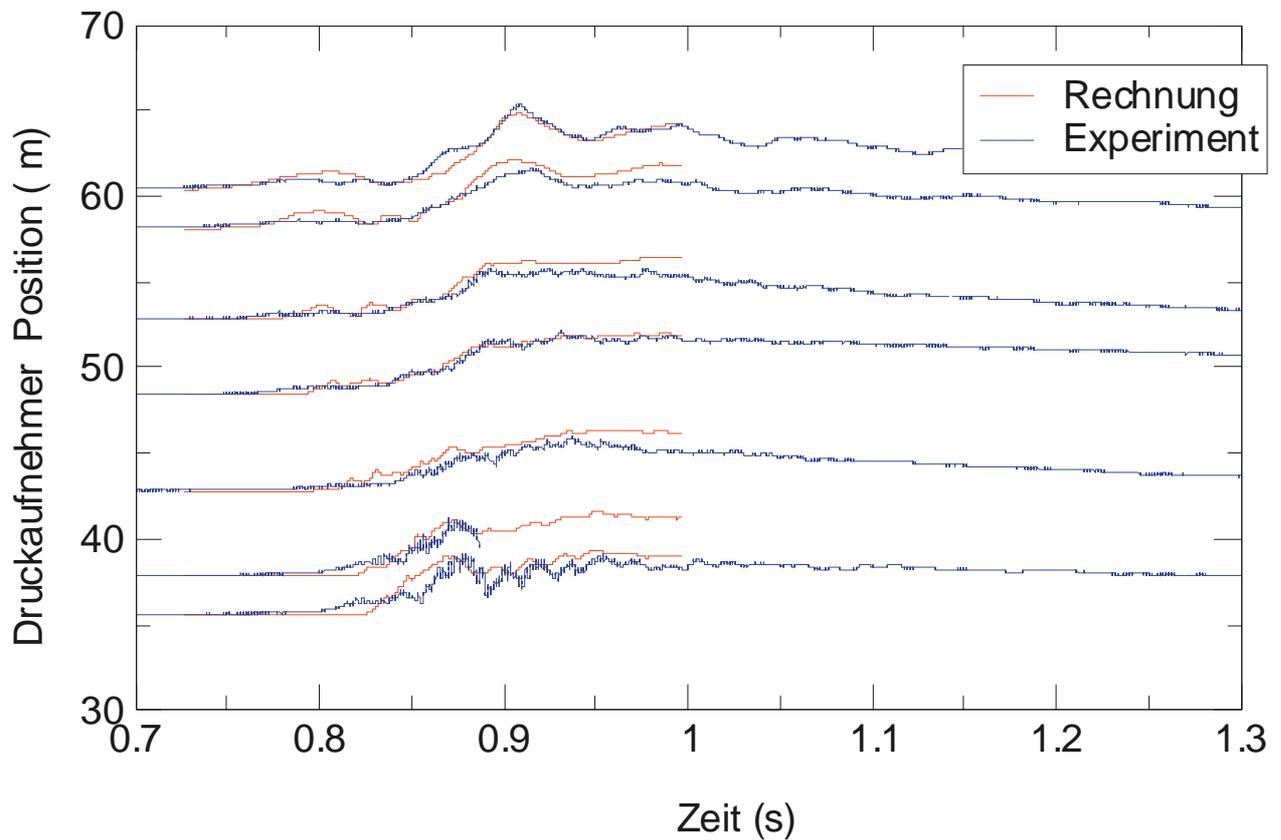


Abb.8.4.7.4: Gemessene und blind berechnete Drücke für RUT- Versuch HYC02, COM3D, Standard k-ε Modell, EBU Reaktionsmodell.

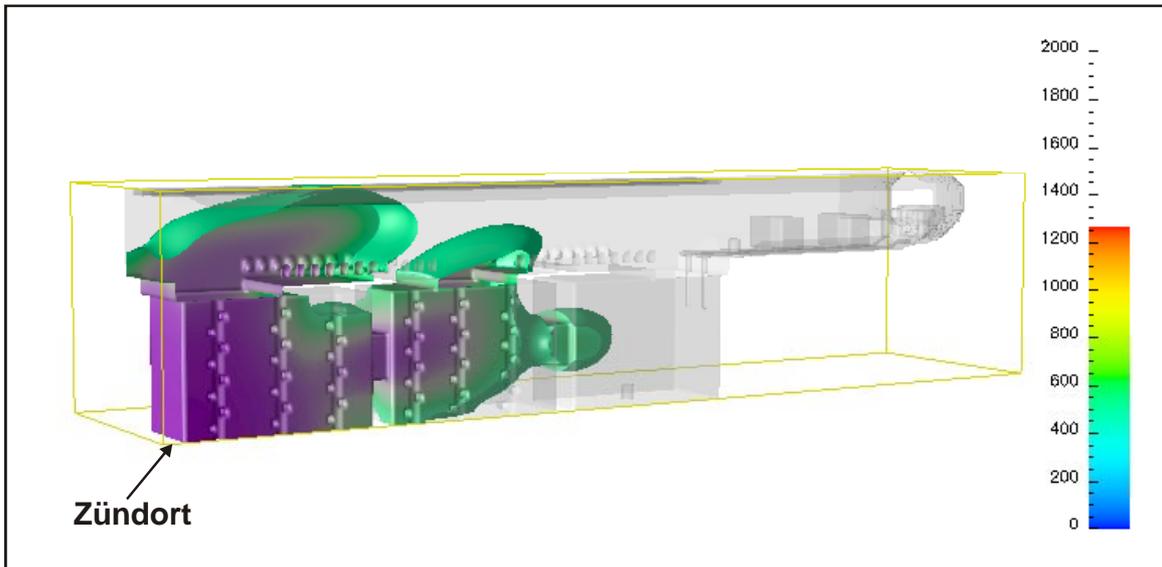


Abb.8.4.7.5: Berechnete momentane Flammenverteilung für RUT- Versuch HYC02, COM3D, Standard k- $\epsilon$  Modell, EBU Reaktionsmodell.

Kompressible Eulergleichungen für eine Mischung idealer Gase:

$$\begin{aligned} \rho_t^k + (\rho^k u_j)_{x_j} &= S_k, & k=1, \dots, N_c \\ (\rho u_i)_t + (\rho u_i u_j)_{x_j} &= -p_{x_i}, & i=1, 2, 3 \\ (\rho e)_t + [(\rho e + p) u_j]_{x_j} &= 0 \end{aligned}$$

Allgemeines Verbrennungsmodell:

$$\sum_{k=1}^{N_c} \nu_{jk} n_k = 0 \quad \text{mit Reaktionsrate } f_j, \quad j=1, 2, \dots, N_r,$$

Damit

$$S_k \equiv M_k \cdot \frac{n_k}{dt} = M_k \cdot \sum_{j=1}^{N_r} \nu_{jk} \cdot f_j \cdot \prod_{r=1}^{N_c} \left(\frac{\rho}{M_r}\right)^{-\nu_{jr}}$$

Für die Reaktionsrate  $f_j$  wird ein Arrhenius-Ansatz mit der kritischen Temperatur  $T_{crit}$  verwendet:

$$f_j = \begin{cases} F(T) & \text{falls } T > T_{crit} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

mit

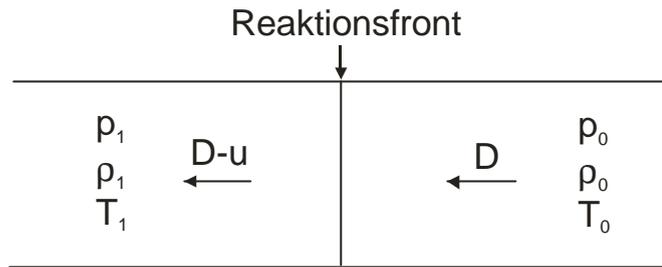
$$f_j \equiv f_j(T) := BT^n e^{-\frac{E_{act}}{RT}}$$

$\nu_{jk}$  ist der stöchiometrische Koeffizient für Spezies  $k$  in der Reaktion  $j$ .

$B$ ,  $n$ ,  $F_{act}$  und  $T_{crit}$  sind benutzerdefinierte Eingaben für jede Reaktion.

Abb. 8.5.1.1: Modellgleichungen des DET3D-Programms

## I. Klassisches Detonationsmodell (Chapman-Jouguet, CJ)



- Massenerhaltung
- Zustandsgleichung ( $p=\rho RT$ )
- Impulserhaltung
- CJ-Bedingung ( $D-u=c$ )
- Energieerhaltung

## II. ZND-Modell einer Detonation (Zeldovic, v. Neumann, Döring)

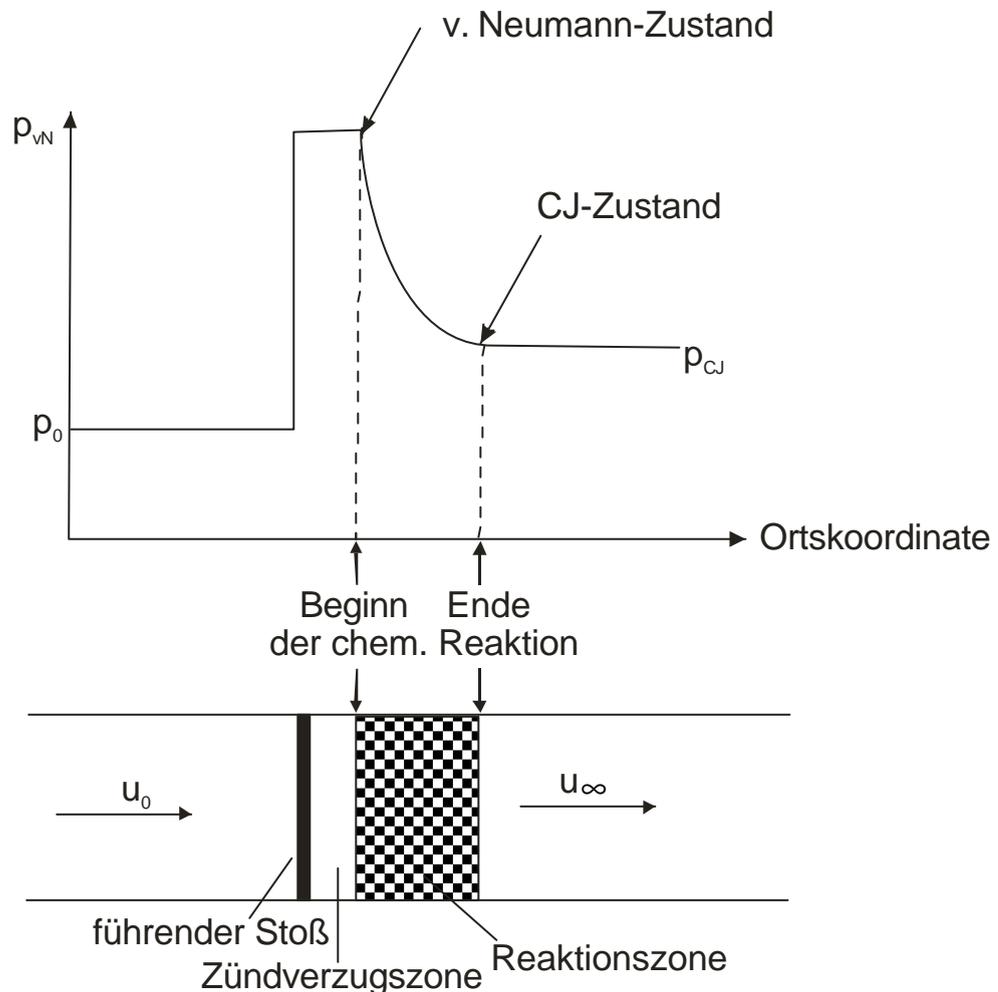
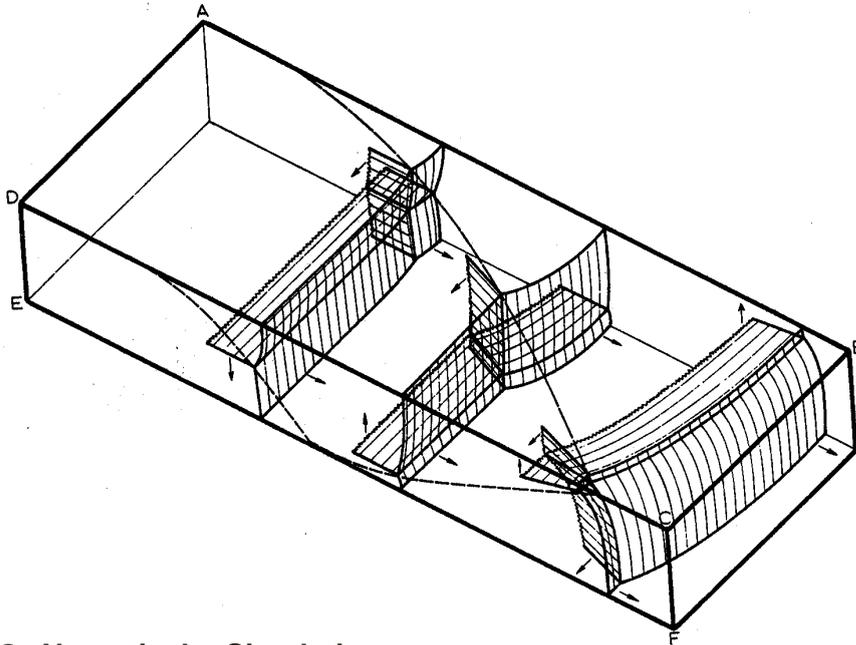


Abb.8.5.1.2: Eindimensionale CJ- und ZND- Modell einer Gasetonation. Im CJ- Modell wird eine momentane Zündung unterstellt, im ZND- Modell dagegen eine verzögerte Zündung und eine endliche Reaktionsdauer.

### III. 3-D Struktur einer realen Gas-Detonation

- Transversalwellen in einem Kanal



- Numerische Simulation  
2D H<sub>2</sub>Luft Detonation zwischen parallelen Platten, abnehmende H<sub>2</sub>-Konzentration, zunehmende Detonationszellengröße im Kanal  
(S. Dorofeev, A. Efimenko)

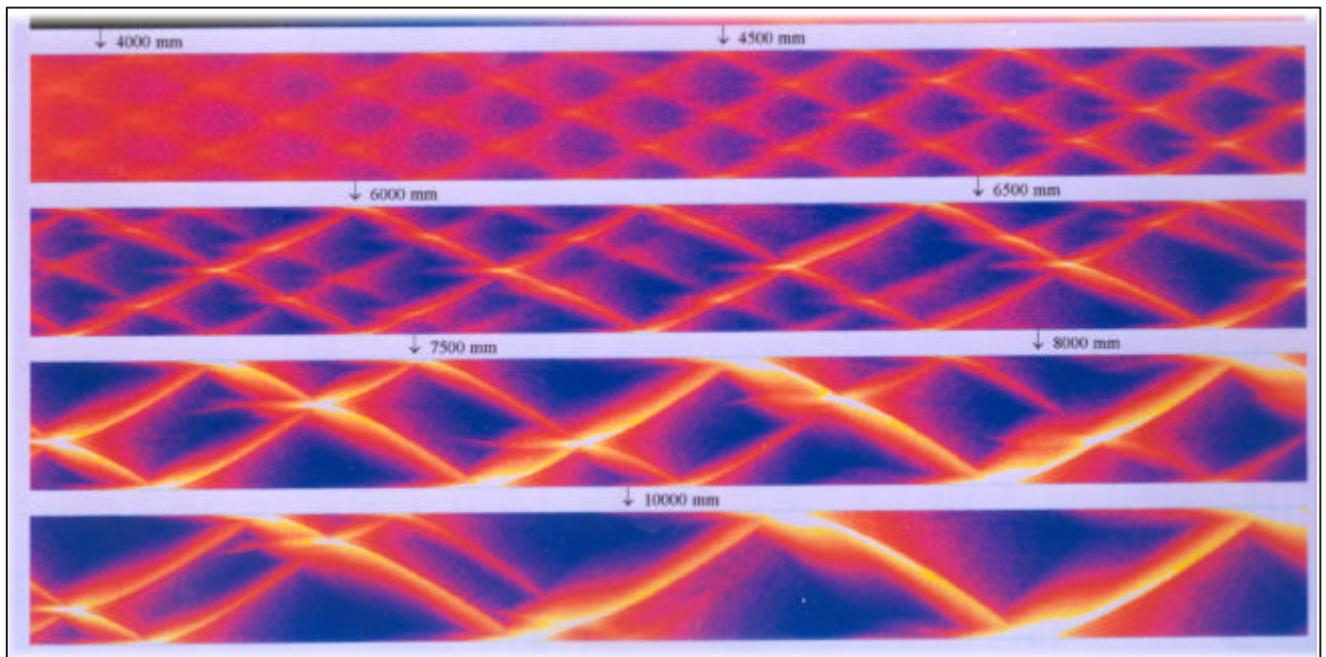


Abb.8.5.1.3: Stabile Gasedetonationen bestehen aus einem System gekoppelter Stoßwellen die in Resonanz mit den Abmessungen der Umschließung stehen.

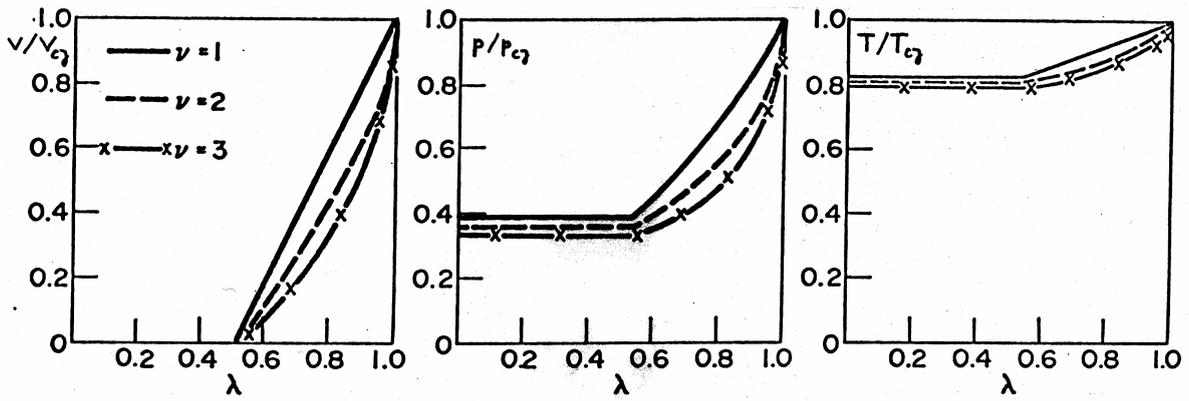


Abb.8.5.1.4: Wesentliche Ergebnisse der CJ-Theorie:  
 Geschwindigkeits-, Druck-, und Temperaturprofile hinter der CJ- Ebene bei Detonation in einem einseitig geschlossenen System, planare Geometrie  $v = 1$ , Zylindergeometrie  $v = 2$ , Kugelgeometrie  $v = 3$ ,  $\lambda =$  dimensionslose Ortskoordinate  $= r/(D \cdot T)$ .

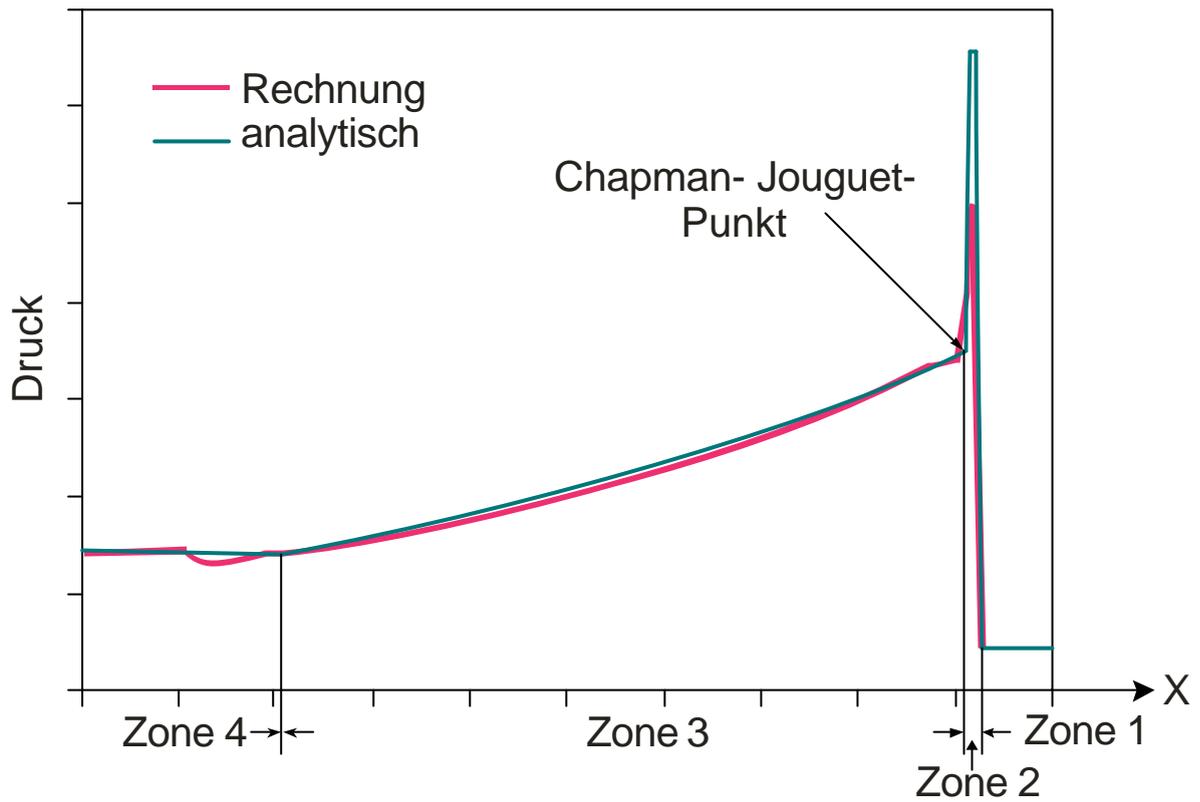


Abb.8.5.2.1: Analytisch und mit DET3D numerisch berechnetes Druckprofil hinter einer nach rechts laufenden  $H_2$ -Luft Detonationswelle, planare Geometrie, Zündung am linken Rand.  
 Zone 1: unverbranntes Gas vor dem führenden Stoß,  
 Zone 2: chemische Reaktionszone  
 Zone 3: Expansionswelle hinter der Reaktionszone,  
 Zone 4: Ruhendes verbranntes Gasgemisch.

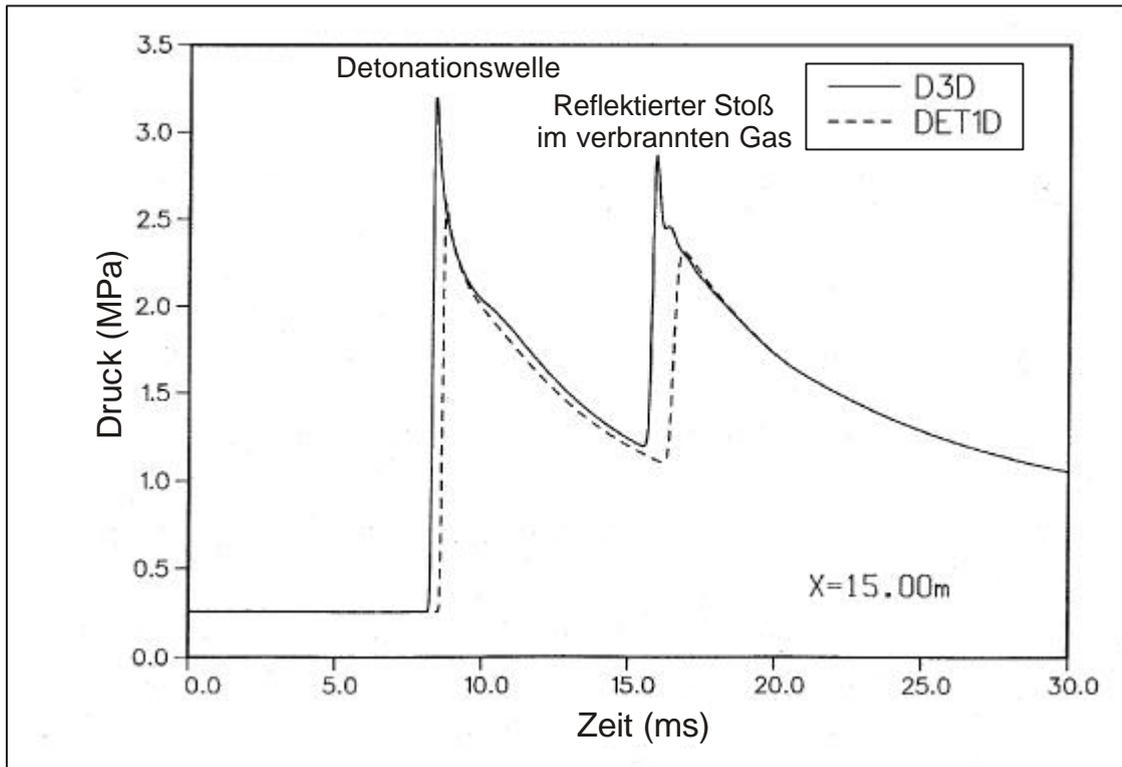


Abb.8.5.2.2: Vergleich der numerischen Drucklösung von D3D (Kurchatov Institut) und DET3D (FZK) für eine planare H<sub>2</sub>-Luft Detonation mit Reflektion.

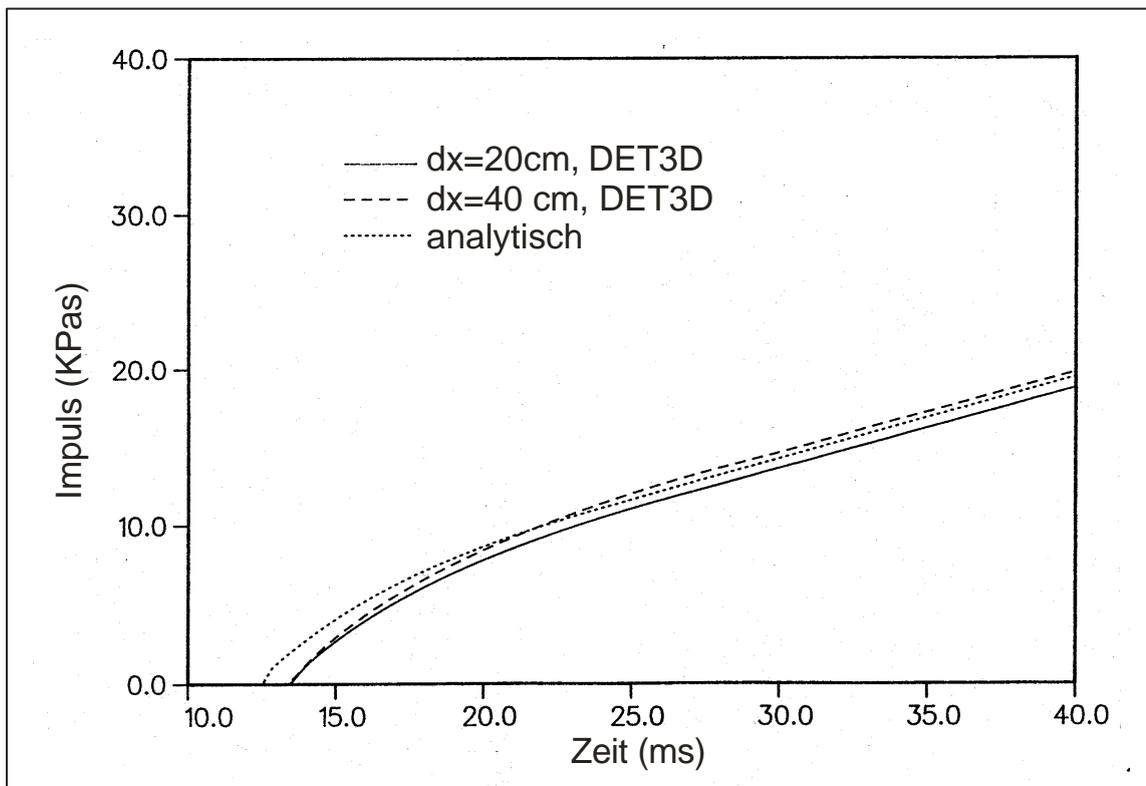


Abb.8.5.2.3: Vergleich von analytisch und numerisch berechneten Impulsen ( $\int (p - p_0) dt$ ) einer planaren H<sub>2</sub>-Luft Detonation. DET3D mit zwei verschiedenen großen Rechenzellen.

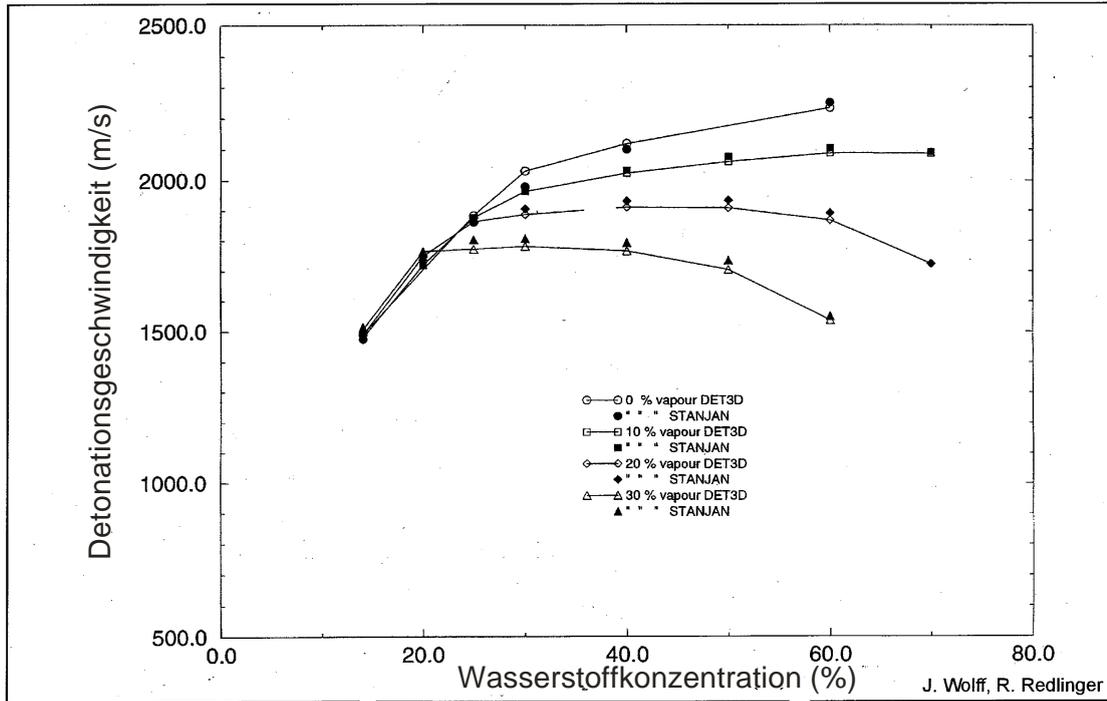


Abb.8.5.2.4: Mit DET3D und STANJAN berechnete Detonationsgeschwindigkeiten von H<sub>2</sub>-Luft-Dampfgemischen. Die DET3D Ergebnisse wurden durch Einführung einer effektiven, gemischabhängigen Reaktionswärme an die STANJAN Daten angepasst. STANJAN verwendet ein vollständiges detailliertes Chemiemodell für die H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> Reaktion.

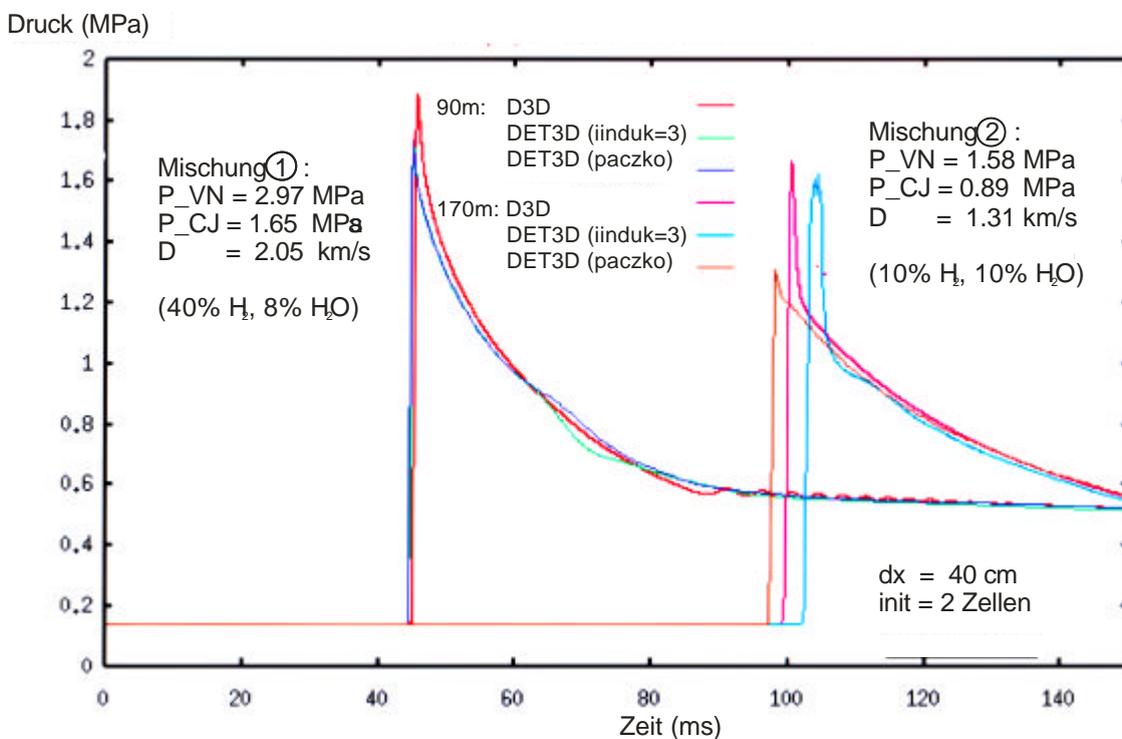
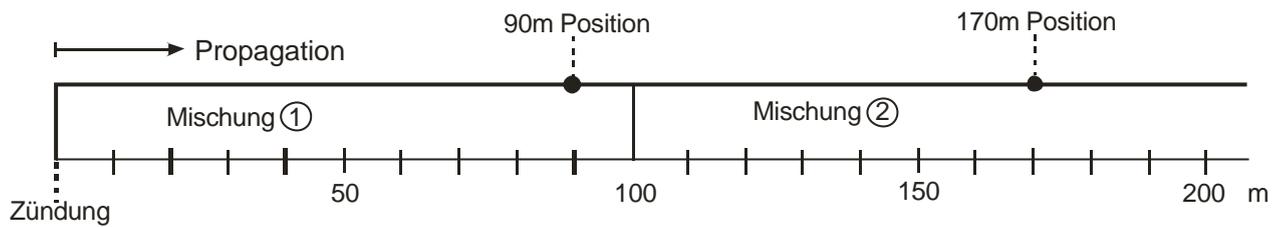


Abb.8.5.2.5: 1D Testproblem zum Vergleich von verschiedenen Detonationsprogrammen und Reaktionsmodellen. Bei der sensitiven Mischung 1 wird die Induktionszone nicht aufgelöst weil sie viel kleiner als die numerische Zellgröße von 40 cm ist. Bei der insensitiven Mischung 2 wird der theoretische vN-Druck und die Induktionslänge von DET3D mit Standard-Reaktionsmodell aufgelöst und korrekt wieder gegeben. Die STANJAN – Werte für den CJ-Druck und die Detonationsgeschwindigkeit werden in beiden Fällen gut reproduziert.

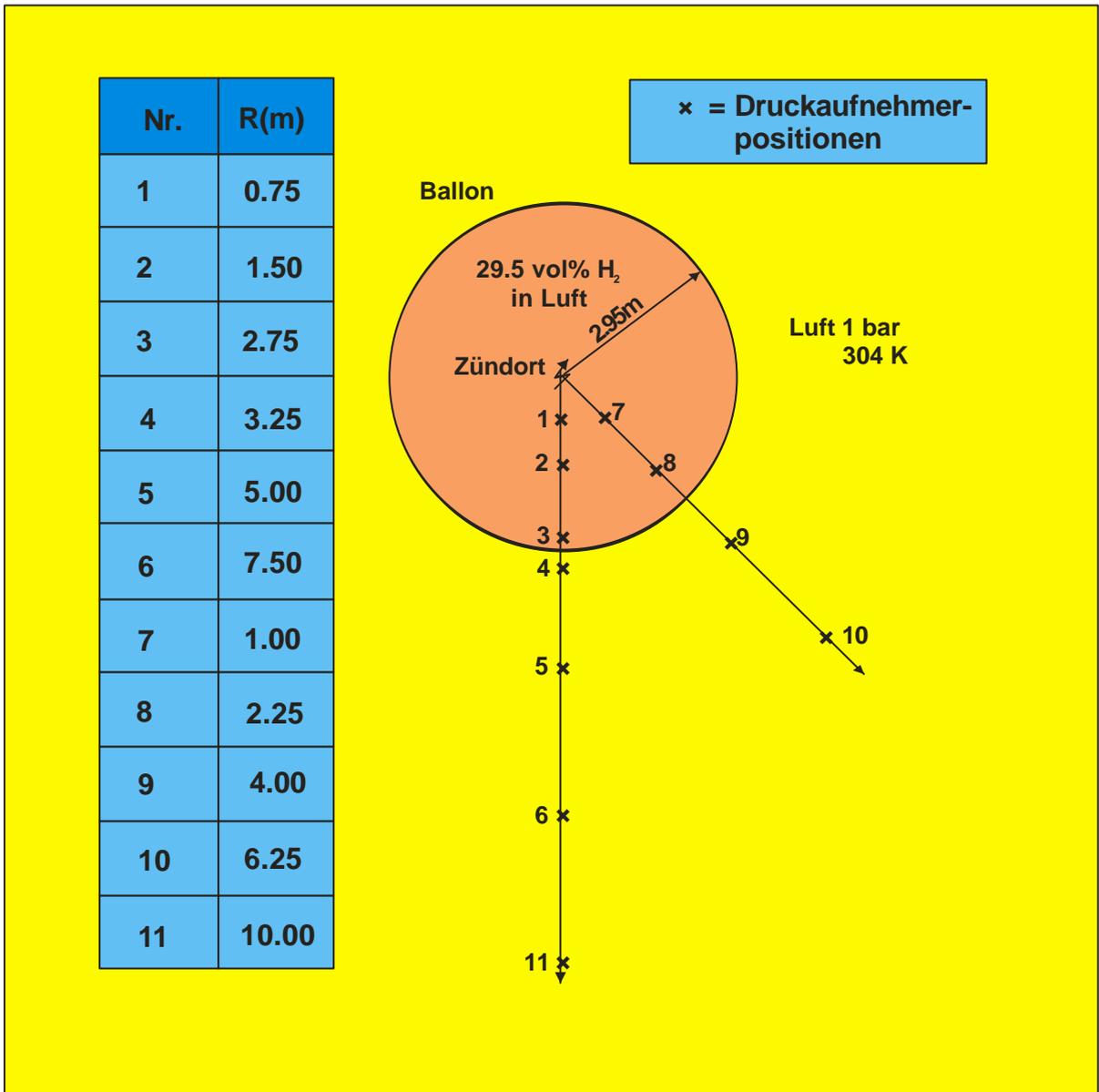


Abb.8.5.3.1: Aufbau von H<sub>2</sub>-Luft Detonationsversuchen mit einem hemispherischen Ballon, Radius 2.95m, Volumen 53m<sup>3</sup>, stöchiometrische H<sub>2</sub>-Luft Mischung, zentrale Zündung mit 1g Sprengstoff. Ansicht der Versuchsanordnung von oben mit Druckaufnehmerpositionen innerhalb und außerhalb des Ballons.

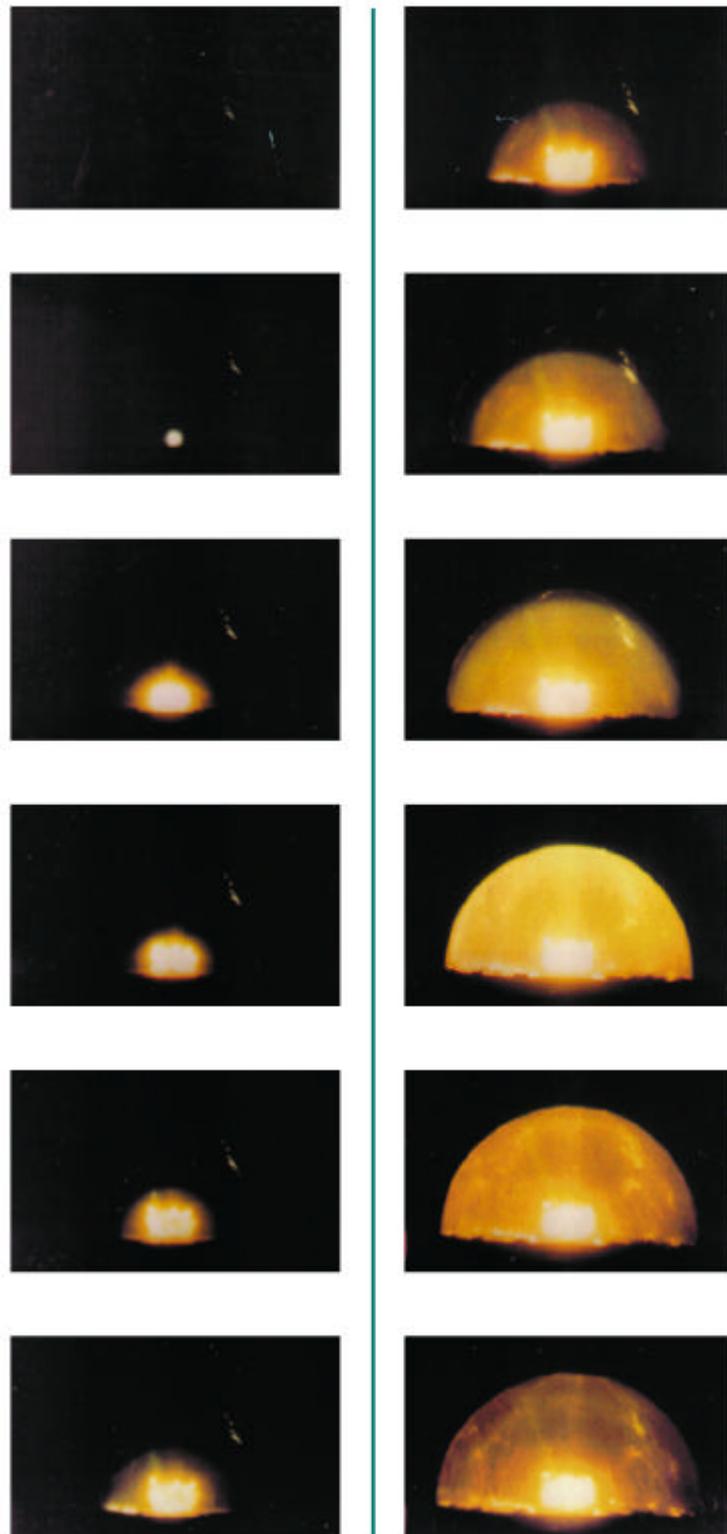


Abb.8.5.3.2: Hochgeschwindigkeitsaufnahme der hemisphärischen H<sub>2</sub>-Luft Detonation aus Abb. 8.5.3.1. Zeitschrittweite der Bilder 0.4 ms, gemessene Geschwindigkeit der Detonationsfront im Balloninneren  $1.940 \pm 20$  m/s, theoretischer Wert 1.955 m/s.

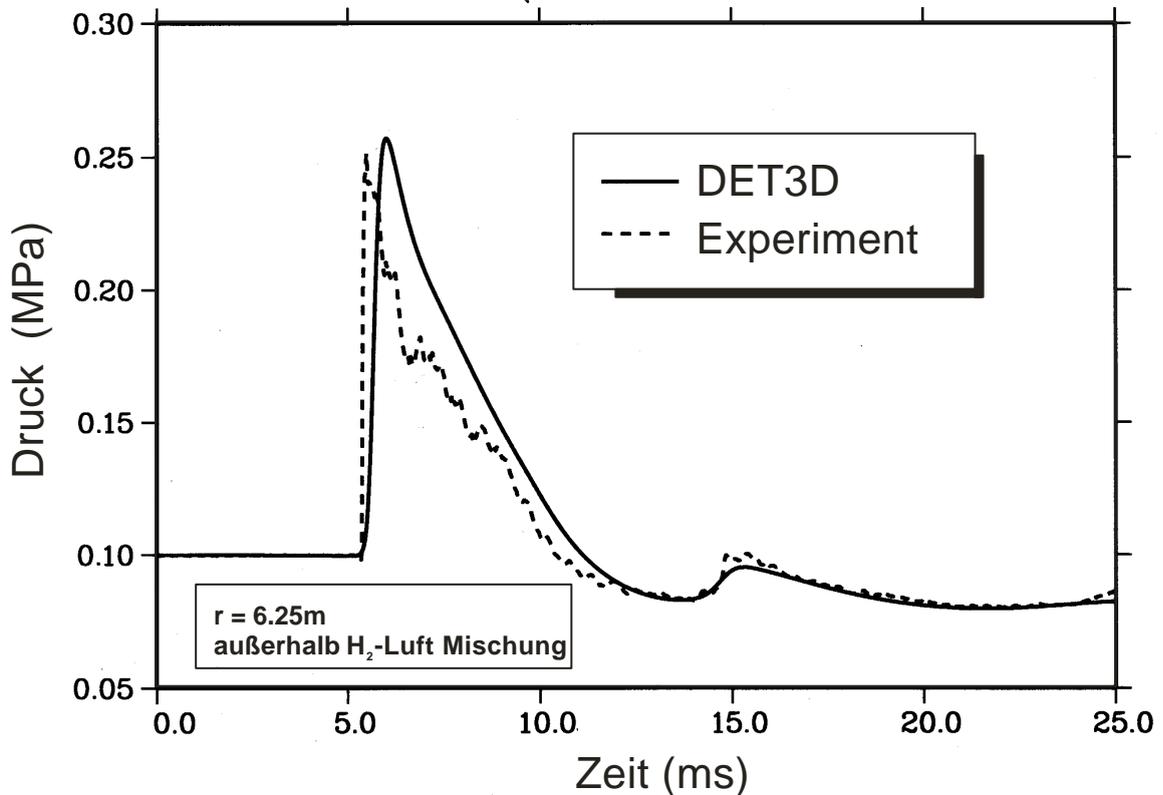
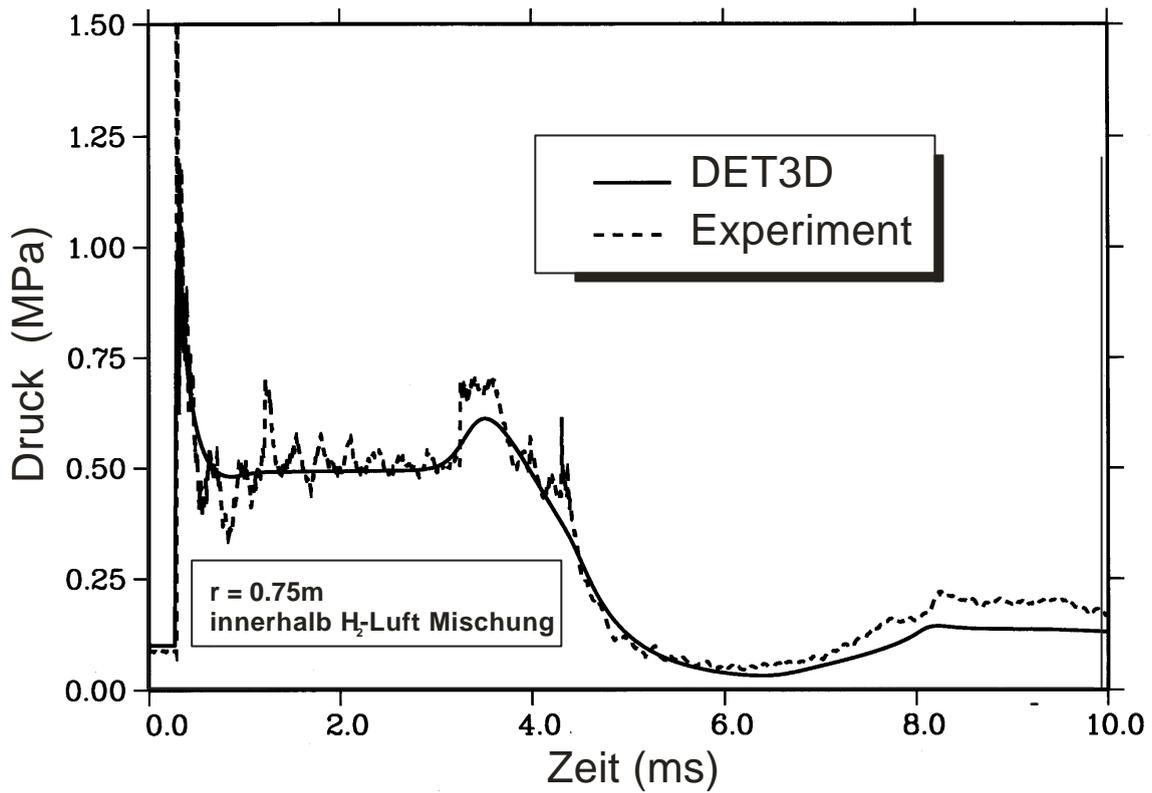


Abb.8.5.3.3: Gemessener und berechneter Druckverlauf an einer Position innerhalb des Ballons (oben) und an einer Position außerhalb des Ballons (unten). DET3D gibt alle wesentlichen Phänomene wie z.B. die primäre Detonationsfront, die Reflektion an der Ballongrenze (Dichtesprung  $\text{H}_2$ /Luft zu Luft) sowie die späte Expansionswelle recht gut wieder.

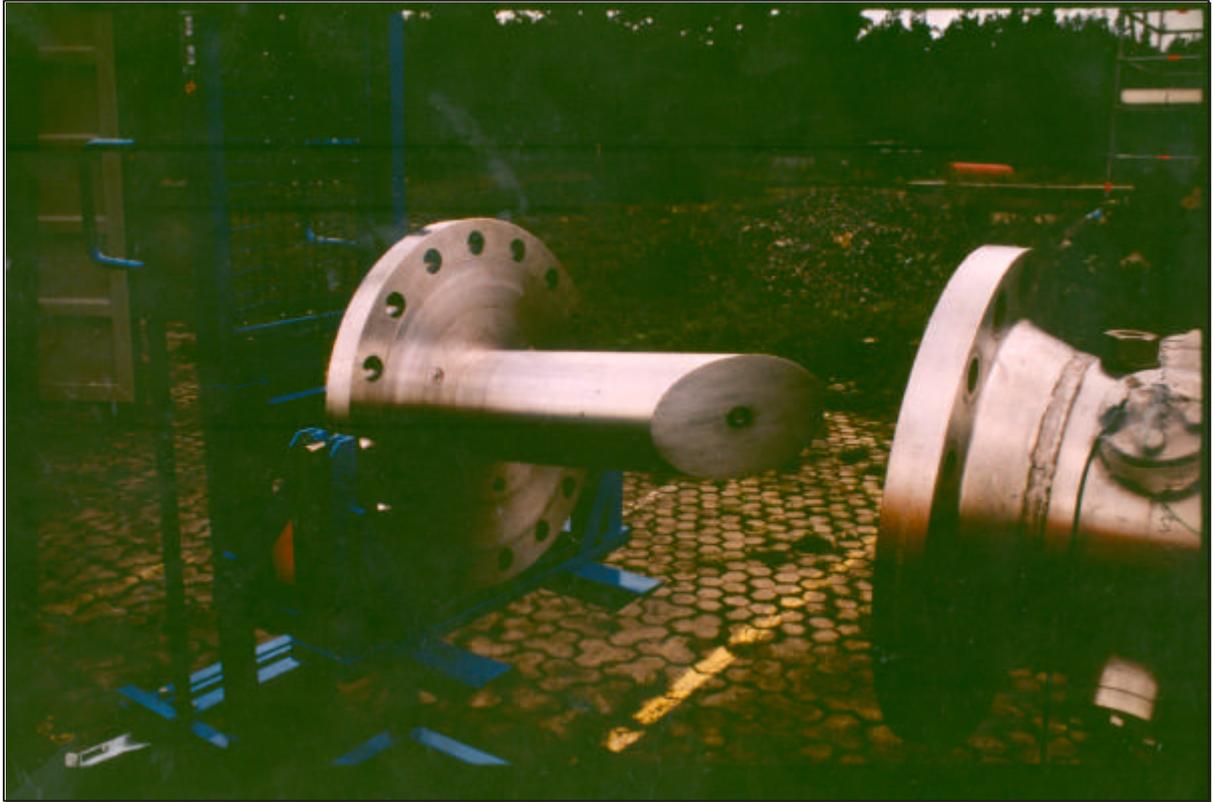


Abb.8.5.4.1: Dreidimensionales Target für Detonationsversuche im FZK-12m- Rohr, bestehend aus einem schräg angeschnittenen Zylinder mit integriertem Druckaufnehmer. Weitere Druckaufnehmer sind in der Rohrwand und der Endplatte installiert. Der Versuchsaufbau dient zur Untersuchung von reflektierten Drücken bei schrägem Einfallswinkel.

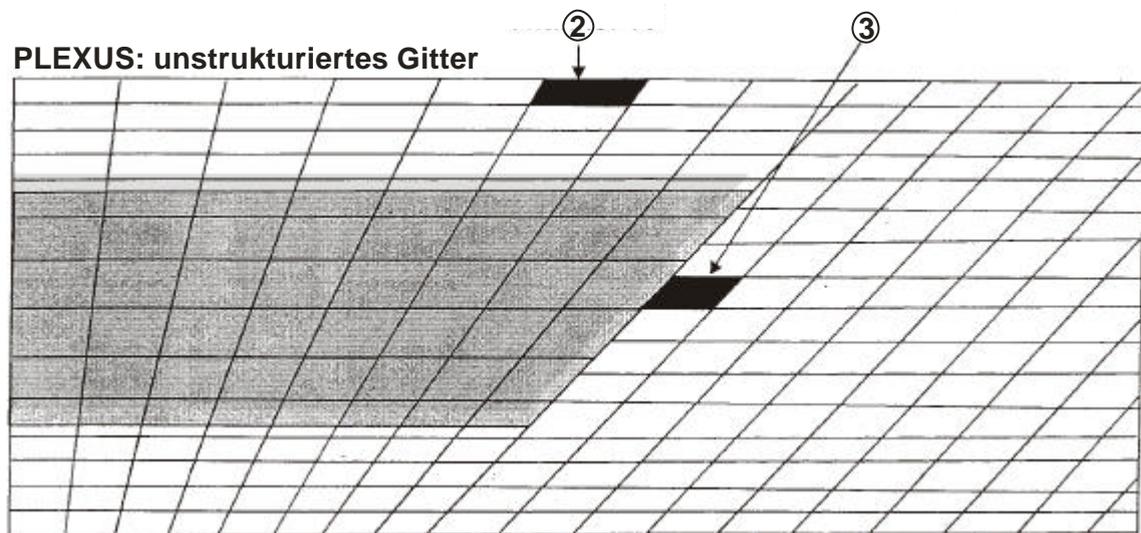
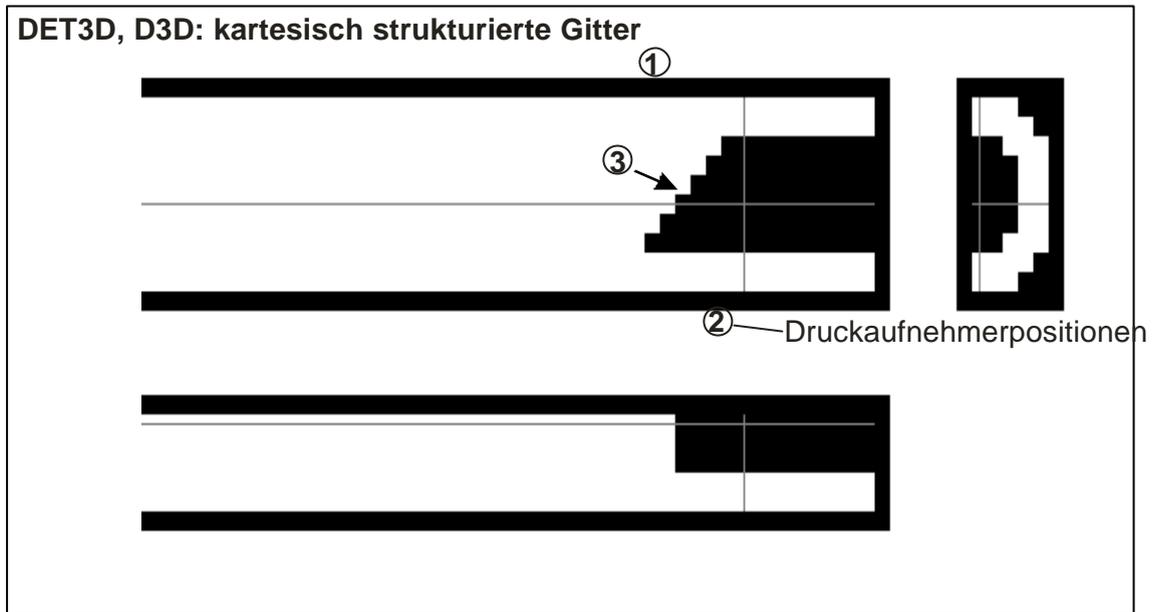


Abb.8.5.4.2: Geometriemodell und Nodalisierung des Versuchsaufbaus von Abb. 8.5.4.1 in den Programmen DET3D, D3D und PLEXUS zur Simulation von Detonationsversuchen.

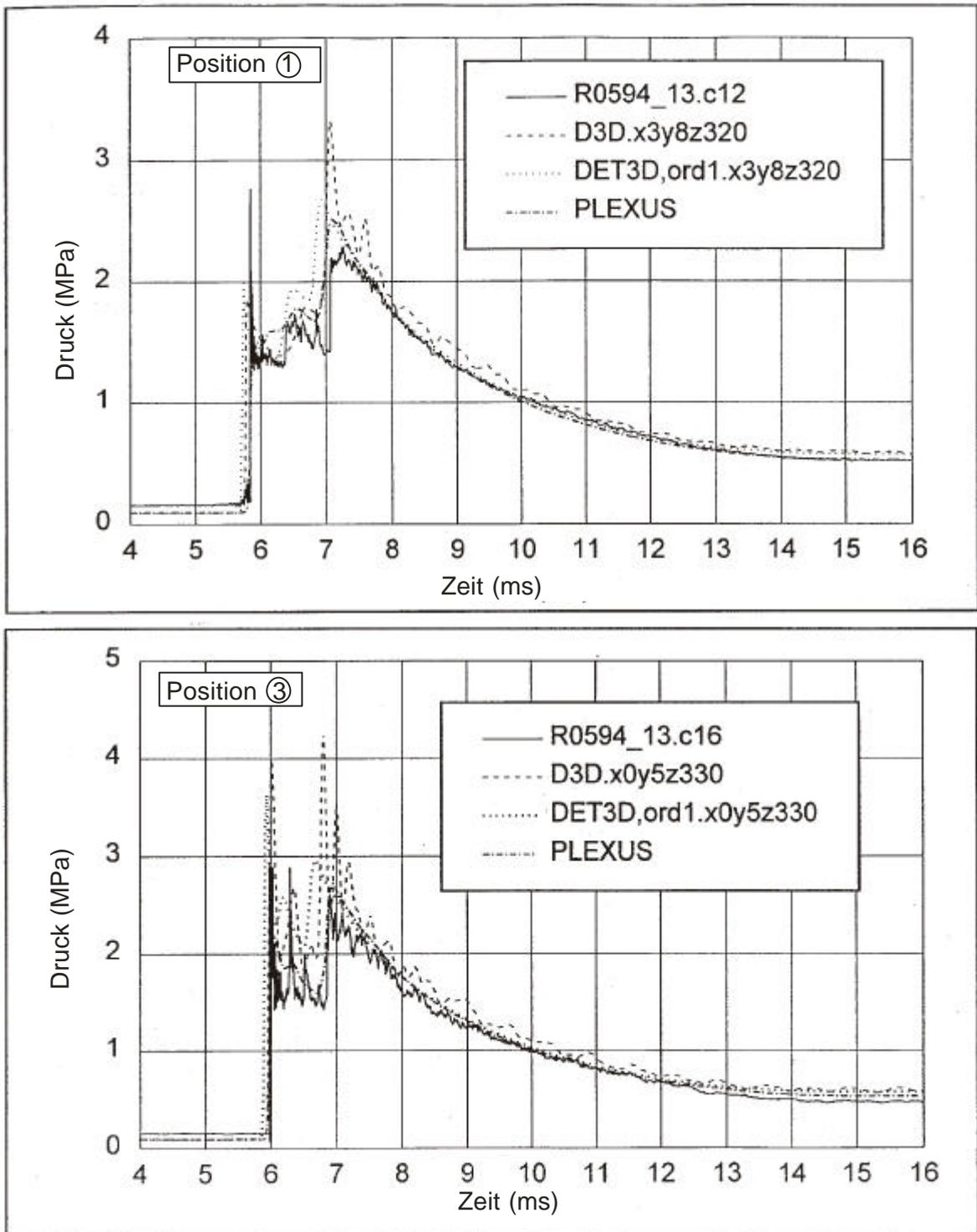


Abb.8.5.4.3: Benchmarkergebnisse für das Zylindertarget und Versuch R0594\_13 mit 30% H<sub>2</sub>, 0.965 bar und 285 K. Alle Programme zeigen gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Die Verwendung einer höheren Auflösung und von randangepassten Koordinaten in PLEXUS führt zu dem genauesten Ergebnissen.

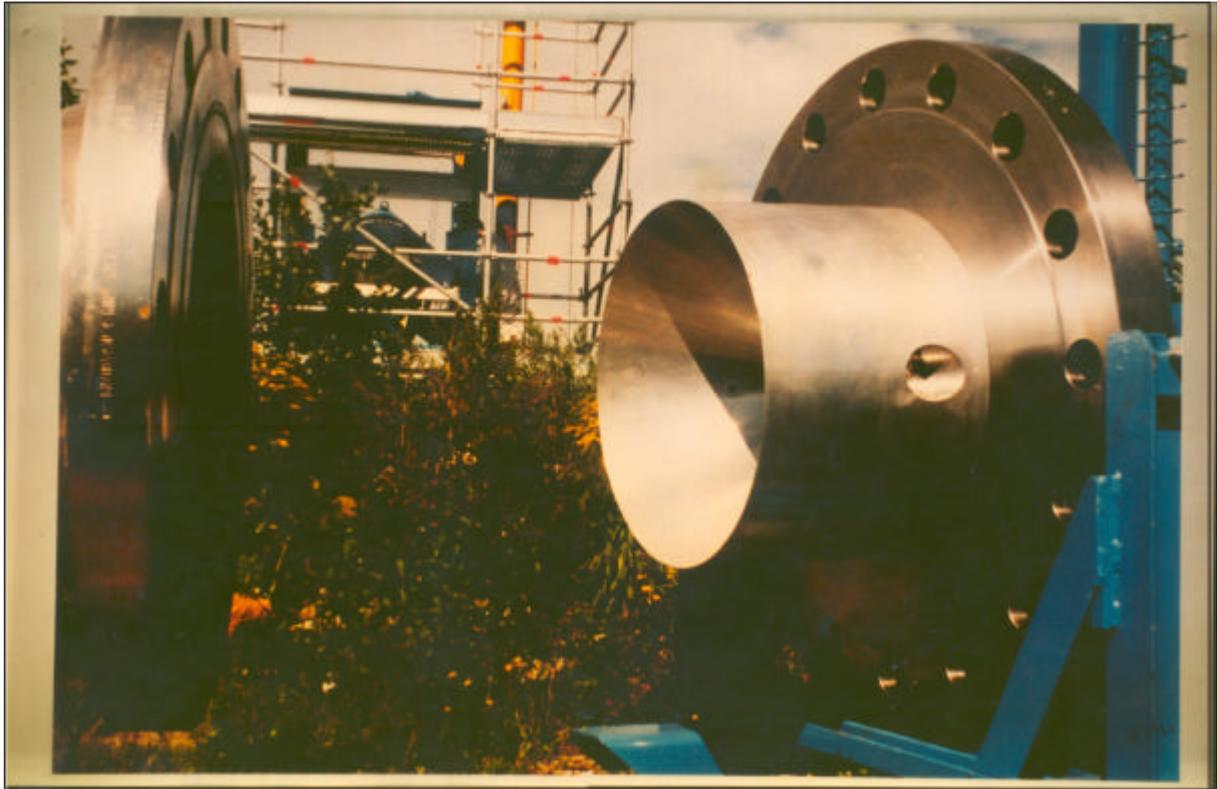


Abb.8.5.4.4: Konisches Target für Detonationsversuche im FZK-12m-Rohr, Untersuchung von Fokussierungseffekten bei 3D-Detonationen.

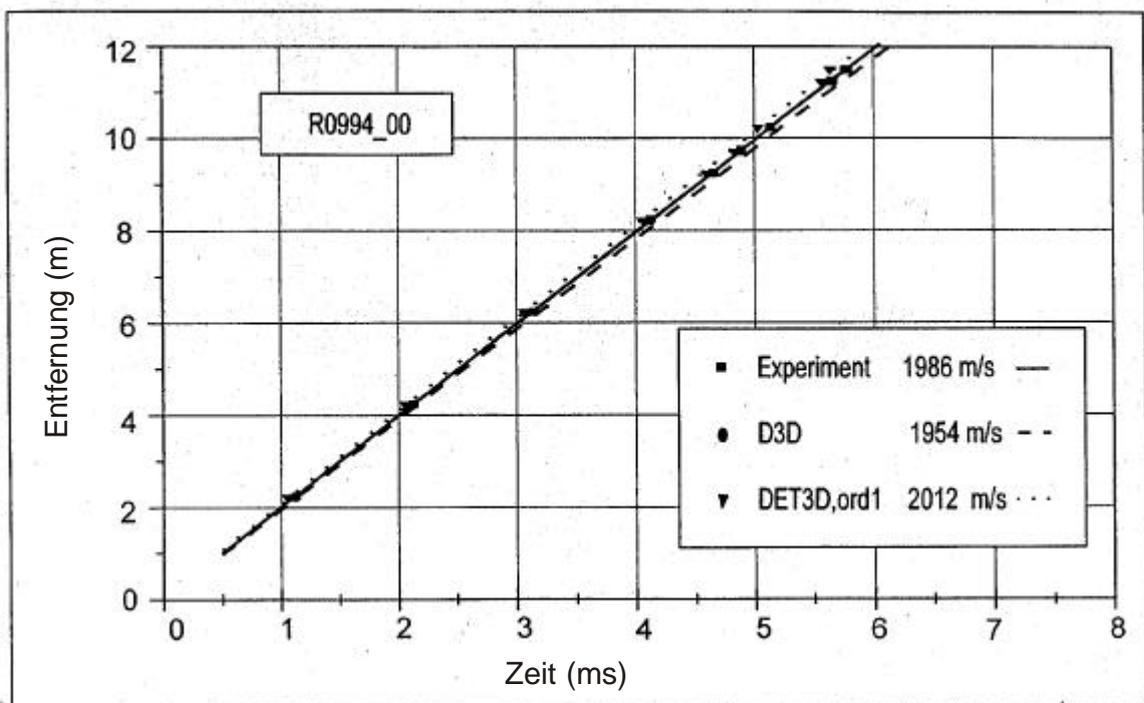
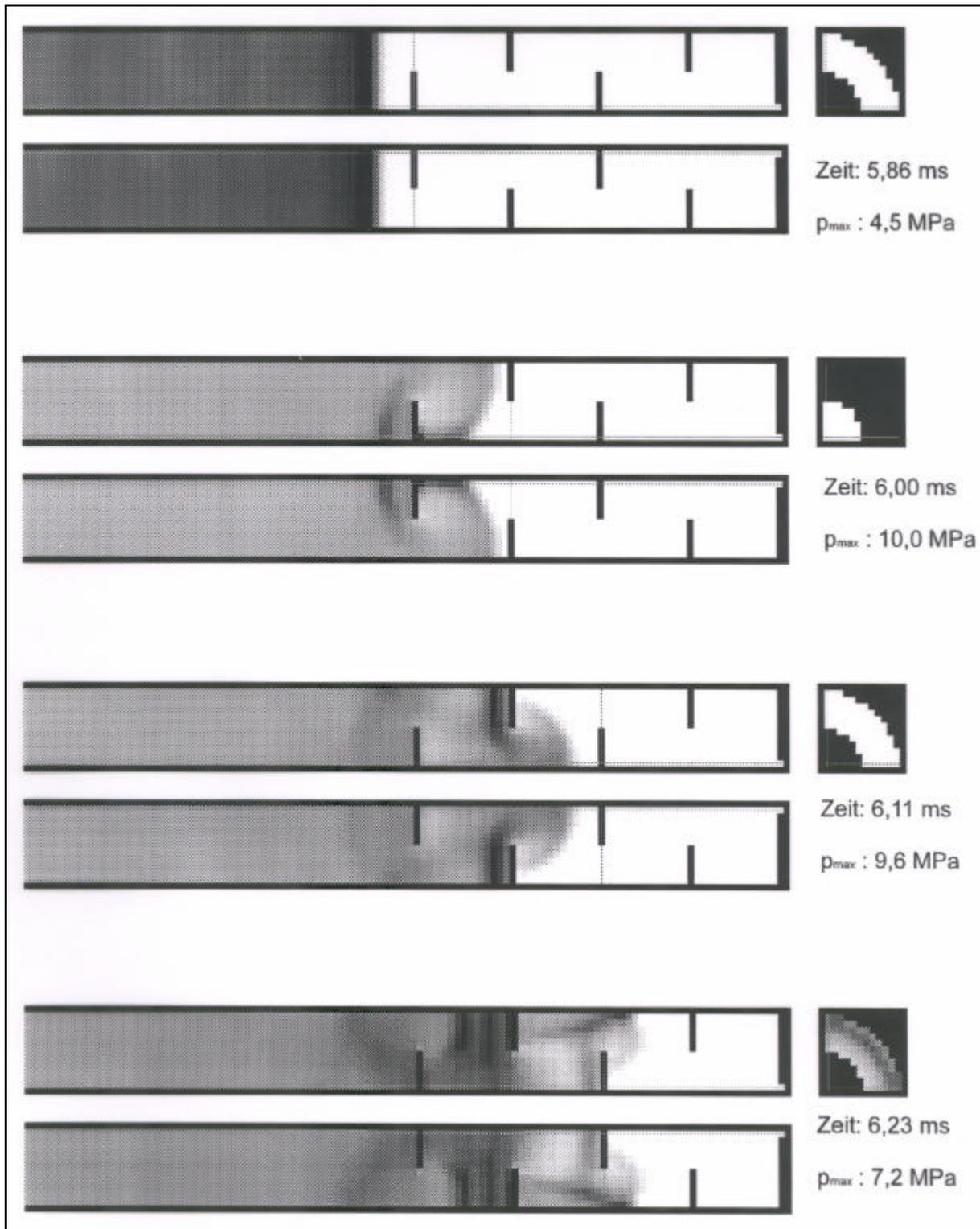


Abb.8.5.4.5: Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Detonationsfrontgeschwindigkeiten für ein Experiment mit 29,5% H<sub>2</sub> in Luft, 1bar, 291 K.



Abb.8.5.4.6: Plattentarget für Detonationsversuche im FZK- 12m-Rohr. Bei diesem Target treten kombinierte Wellenreflektionen und- beugungen auf.



- Rohr 35 cm i.D., 12 m lang
- 26 % H<sub>2</sub> in Luft,  $p_0=2$  bar,  $T_0=10^\circ\text{C}$
- DET3D Rechnung

Abb.8.5.4.7: Numerische Simulation eines Detonationsexperiments mit Plattentarget, Druckfeld zu verschiedenen Zeiten, schwarz entspricht dem jeweiligen angegebenen Maximaldruck  $p_{\max}$ . Der höchste Druck entsteht hinter der ersten Platte durch Beugung und Überlagerung der primären Detonationsfront (10,0 MPa).

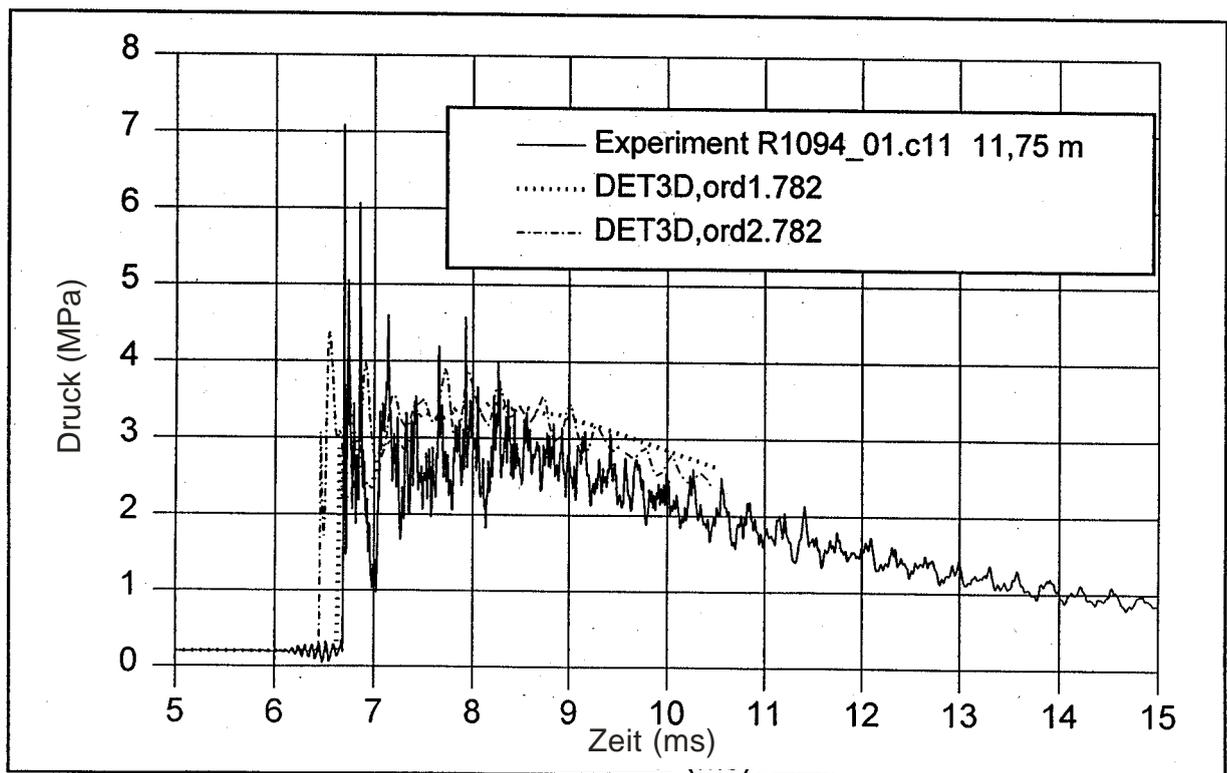
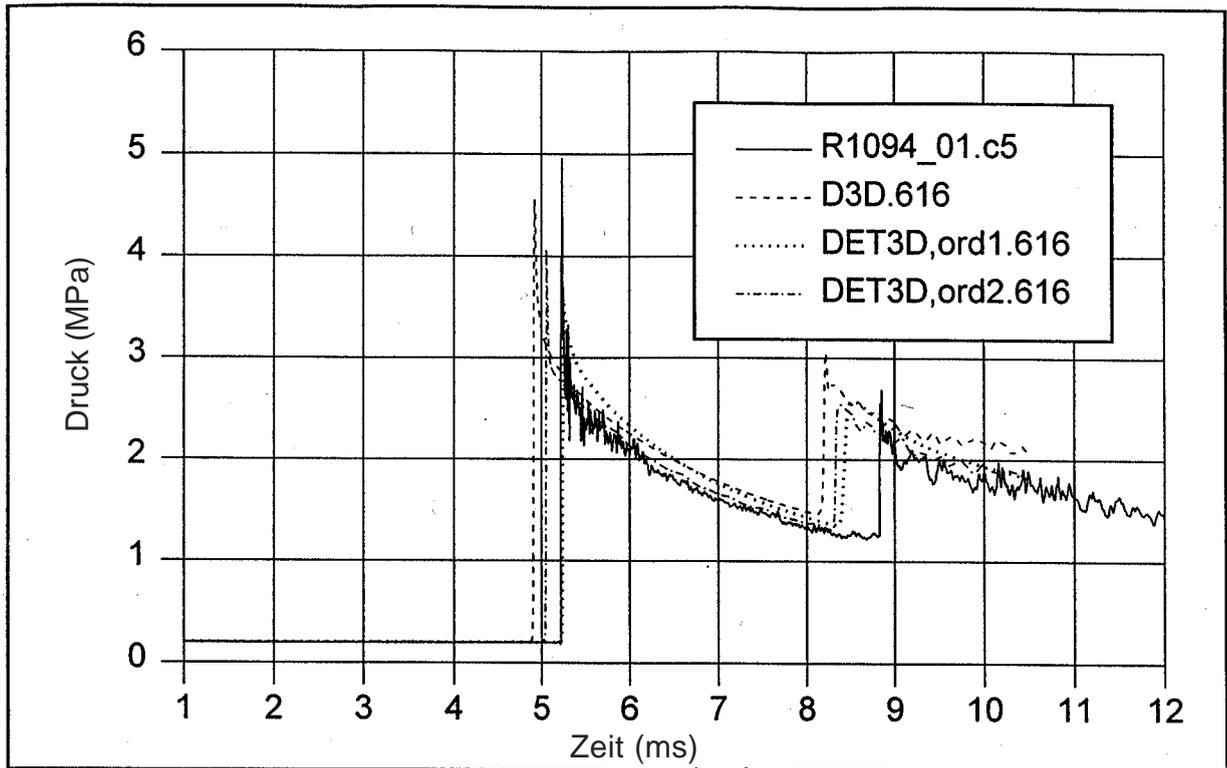


Abb.8.5.4.8: Vergleich von gemessenen und berechneten lokalen Druckverläufen vor (oben) und innerhalb (unten) des Plattentargets aus Abb. 8.5.4.6. Auch das DET3D Lösungsverfahren erster Ordnung liefert hinreichend gute Übereinstimmung.

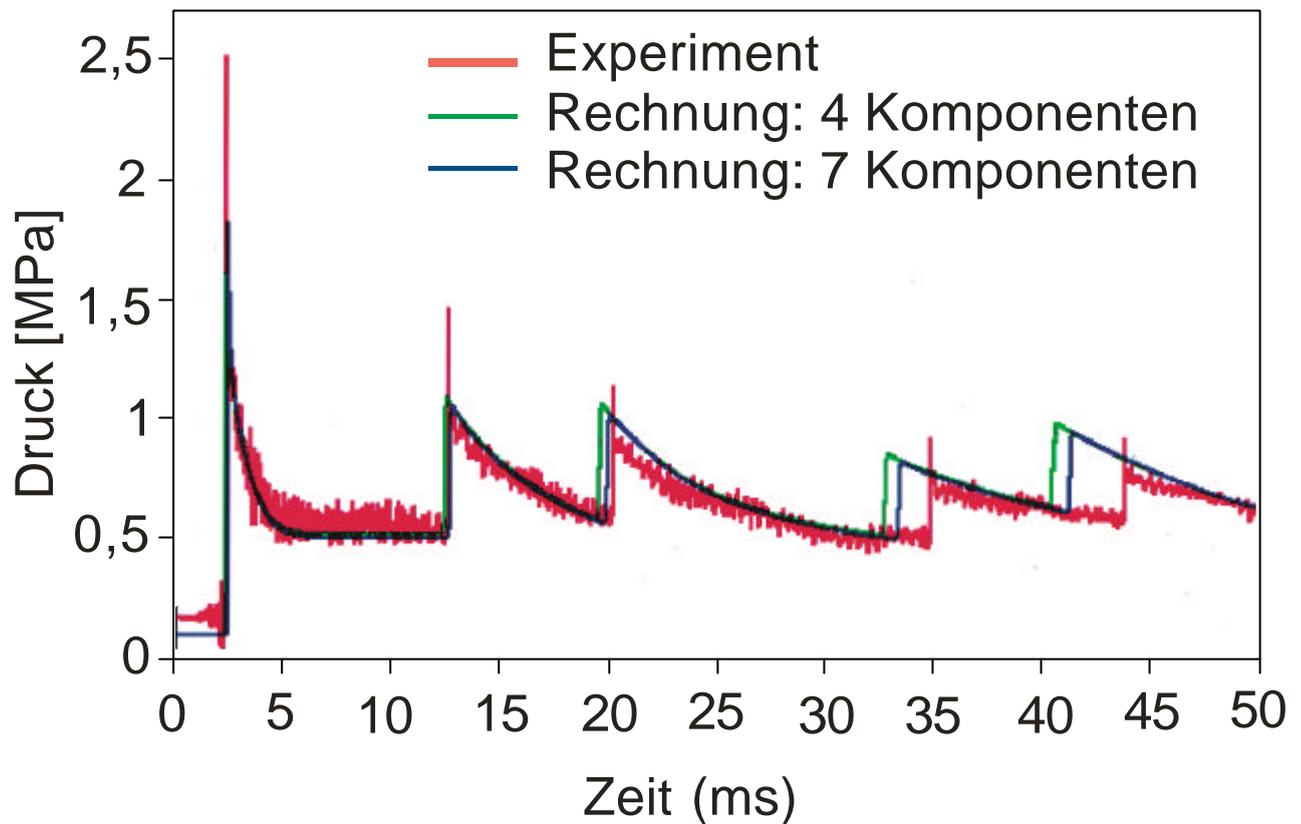


Abb.8.5.4.9: Gemessene und mit DET3D berechnete Druckverläufe eines Detonationsversuchs im leeren FZK-12m-Rohr mit stöchiometrischem H<sub>2</sub>-Luft-Gemisch, Druckaufnehmerposition 4.25 m vom Zündort. Die Rechnung mit einem 7-Komponenten Chemiemodell zeigt nur unwesentliche Verbesserungen gegenüber dem Standardmodell mit 4 Gaskomponenten und einer Globalreaktion ( $\text{H}_2 + 1/2 \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$ ). Die Laufzeitunterschiede zu späten Zeiten liegen an den Wärmeverlusten des verbrannten Gases, die in der Simulation nicht berücksichtigt wurden.

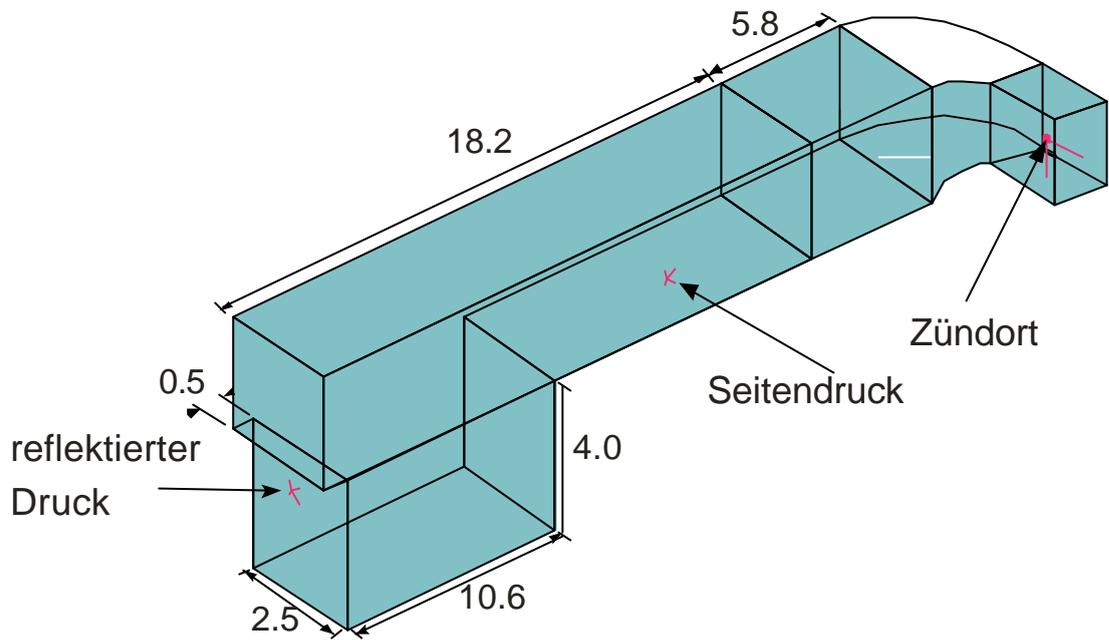
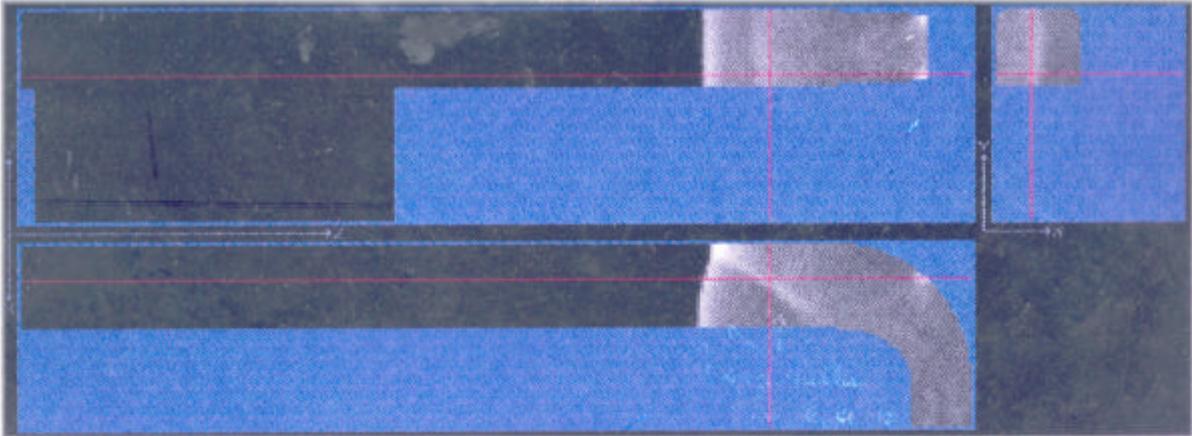
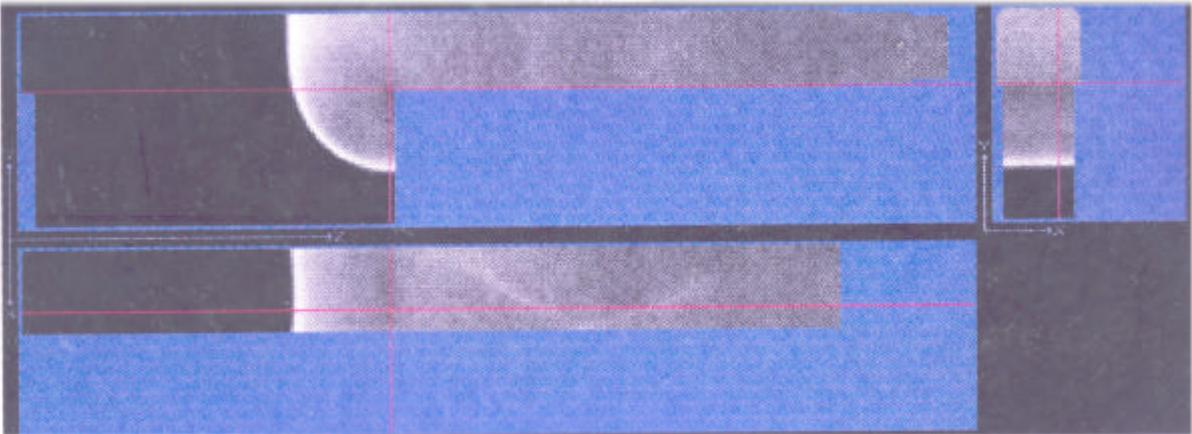


Abb.8.5.5.1: Skizze der RUT- Anlage die für großskalige Wasserstoff-  
 Detonationsversuche in komplexer 3D- Geometrie benutzt wurde.  
 Abmessungen in m, Gesamtvolumen  $263 \text{ m}^3$ .

4.877 ms



11.59 ms



14.86 ms

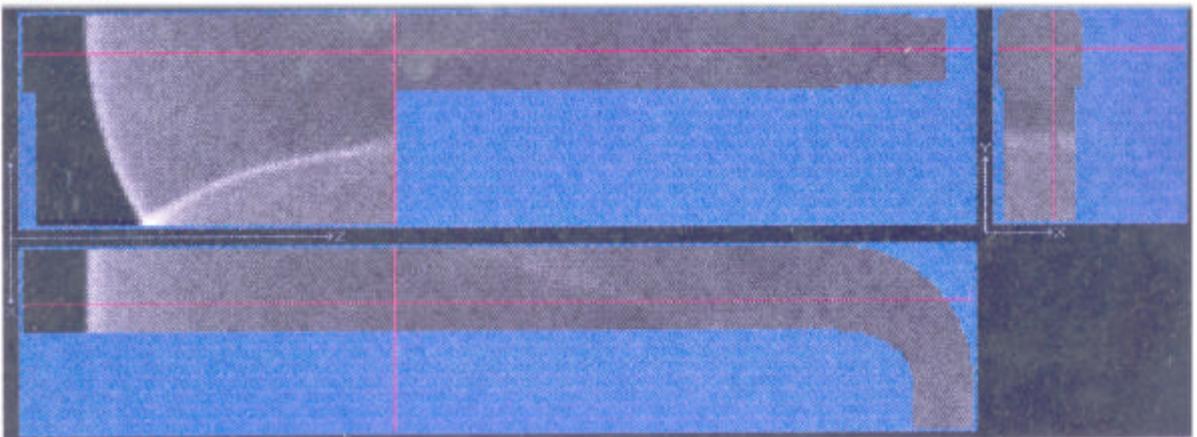


Abb.8.5.5.2: 3D- Simulation eines RUT- Detonationsversuchs mit homogener 25% H<sub>2</sub>-Luft Mischung, berechnetes Druckfeld zu verschiedenen Zeiten nach der Zündung im rechten Kanal.

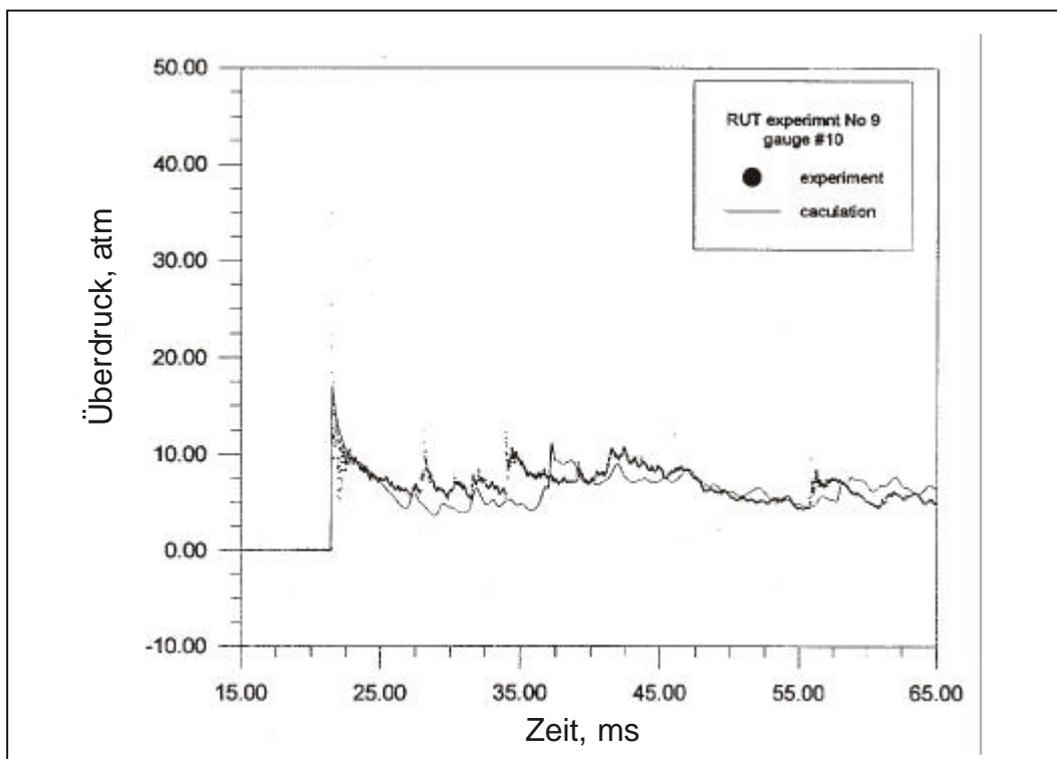
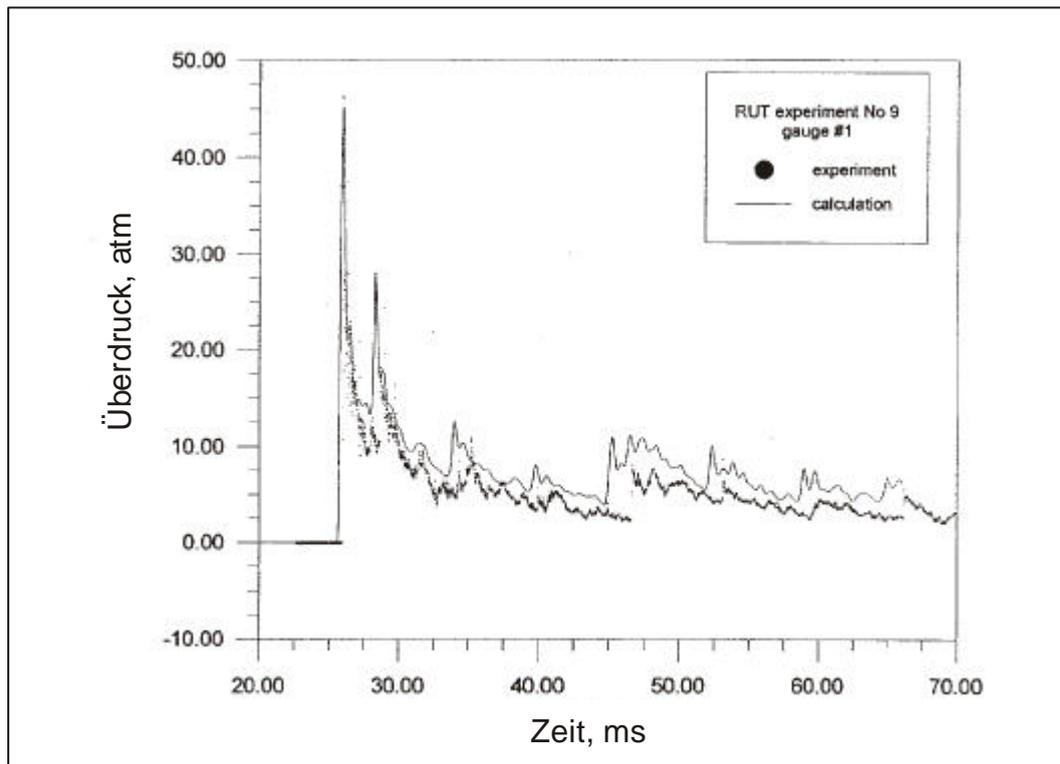


Abb.8.5.5.3: Gemessener und berechneter Druckverlauf an einer reflektierenden Endwand der RUT-Anlage und einer Seitenwand im Kanal (siehe Abb. 8.5.5.1), 25% H<sub>2</sub> in Luft.



## 9. Strukturverhalten

### 9.1 Das Einmassenschwinger Modell

Die bei Bauwerken oder technischen Strukturen auftretenden Schwingungsphänomene lassen sich in vielen Fällen als freie oder fremderregte *lineare* Schwingungen auffassen. Insofern kann der Einmassenschwinger als ein einfaches, konservatives Modell dienen, um das Verhalten von Bauwerken bei zeitabhängig einwirkenden Kräften zu untersuchen. Dieses Modell wurde herangezogen um die schädigende Wirkung von Druckwellen, wie sie z.B. bei explosionsartigen Verbrennungen auftreten, auf Baustrukturen abzuschätzen. Ein Einmassenschwinger, charakterisiert durch seine Eigenfrequenz  $\nu$  [Hz] und dem häufig verwendeten dimensionslosen Lehr'schen Dämpfungsmaß  $D$ , wird beschrieben durch die gewöhnliche Differenzialgleichung

$$\frac{1}{4p^2n^2} \ddot{r}_{n,D}(t) + \frac{D}{pn} \dot{r}_{n,D}(t) + r_{n,D}(t) = \underbrace{\text{int interpolation}([t_1, p_1), \dots, (t_N, p_N)])}_{=: \tilde{p}(t)}$$

Die rechte Seite dieser Gleichung, der Zwangsterm, ist gegeben durch viele hundert oder sogar einige tausend Datenpunkte, die im Kontext dieser Untersuchungen aus CFD-Rechnungen, aus Experimenten oder analytischen Funktionen stammen. Nach einer geeigneten Interpolation dieser Daten werden komplizierte aber genaue semi-analytischen Lösungen  $r_{n,D}(t)$  für beliebige  $\nu$  und  $D$  berechnet. In einem angeregten, schwingenden Feder-Masse-System entspricht  $r_{n,D}(t)$  der Last, mit der die Feder beansprucht wird, wenn auf die Masse die Last  $p(t)$  zur Zeit  $t$  einwirkt.

Das entwickelte Verfahren zum Lösen der DGL ist hinreichend genau, wie eine Fehlerbetrachtung im Falle der Testfunktion

$$\tilde{p}(t) = 1 - e^{-10t}, t \geq 0, \quad (1)$$

als Zwangsterm zeigt (Abb. 9.1.1). Diese Testfunktion wird an 100 Punkten äquidistant abgetastet und zu dem entstehenden Datensatz für verschiedene  $\nu$  (aber  $D=0$ ) die semi-analytischen Lösungen  $r_{\nu,0}(t)$  berechnet. Schließlich vergleicht man diese approximativen Lösungen mit den exakten analytischen  $\tilde{r}_{n,0}(t)$  mittels der Berechnung des Spektrums des absoluten maximalen Fehlers im Intervall  $[0,10]$  (Abb. 9.1.2):

$$e(n) := \max_{0 \leq t < 10} |r_{n,0}(t) - \tilde{r}_{n,0}(t)|. \quad (2)$$

## 9.2 Anwendung auf reale Drucklasten

In der Strukturdynamik sind die folgenden Größen von Bedeutung:

$R_{n,D}^{\max} := \max_{t \in [0, t^*]} r_{n,D}(t)$ ,  $t^* \gg 1$ , die maximale effektive (statische) Last. Und

$R_{n,D}^{\min} := \min_{t \in [0, t^*]} r_{n,D}(t)$ ,  $t^* \gg 1$ , die maximale Zuglast. Die Berechnung dieser Größen als Funktion von  $v$  und  $D$  ist numerisch aufwendig, da die Lösungen der Differenzialgleichungen für variable  $v$  und  $D$  über ein großes Zeitintervall hin bekannt sein müssen.

In einem Anwendungsbeispiel wird ein Druckverlauf aus der CFD-Simulation einer 20%  $H_2$ /Luft-Verbrennung ( $T_0=298K$ ,  $p_0= 10^5$  Pa) untersucht. Abb. 9.2.1 zeigt eine typische transiente Drucklast aus einer CFD-Rechnung, dargestellt zusammen mit der Lösung  $r_{v,D}$  für die Parameterwerte  $v=166$ ,  $D=0.0$  und  $0.07$ . Abb. 9.2.2 zeigt die maximalen effektiven Lasten  $R_{v,D}^{\max}$  und  $R_{v,D}^{\min}$  für die Parameter  $D=0.0$ ,  $0.01$  und  $0.07$  als Funktion der Oszillatorfrequenz.

Das Einmassenschwinger Modell ist sehr sensitiv. Das entwickelte Lösungsverfahren trägt dieser Sensitivität Rechnung. In der Ingenieurspraxis werden oft geglättete, idealisierte Daten verwendet, um dadurch die Lösbarkeit der DGL zu gewährleisten. Die Benutzung geglätteter Daten kann aber zu Fehlinterpretationen führen wie das folgende Beispiel zeigt. Abb. 9.2.3 vergleicht den originalen Druckschrieb aus Abb. 9.2.1 und eine idealisierte Approximation, die eine exakte analytische Lösung der DGL zulässt. In Abb. 9.2.4 werden die entsprechenden Spektren von  $R_{n,0}^{\max}$  jeweils für den originalen Druckschrieb und seine idealisierte Variante verglichen. Es ist klar zu erkennen, dass die Benutzung von approximierten Zwangstermen zu großen Fehlern in den berechneten effektiven Drücken führen können. Das hier entwickelte Verfahren. Es erlaubt die korrekte Anwendung des Einmassenschwinger Modells auch auf Zwangsterme, die zuvor dieser Art des post-processings nur bedingt zugänglich waren.

**Tabelle 9.1: Strukturverhalten**

PROZESS	MODELLIERUNG	VERIFIKATION		
		Analytische Lösung	Einzeleffektversuche	Integralversuche
• Strukturauslenkung unter gasdynamischen Lasten		Abb. 9.1		Abb. 9.2
- 1D Response	- Einmassenschwinger ohne/mit Dämpfung	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Exponentiallast</li> <li>• Blast-Load (Einzelpuls)</li> </ul>		<ul style="list-style-type: none"> <li>• Last aus 3D- Verbrennungsrechnung</li> </ul>
- 3D <b>ABAQUS</b>	- FEM	Programm ABAQUS ist verifiziert		

### 9.3 Testproblem in 3D- Containmentgeometrie

Mit dem dreidimensionalen Programm B0B (eine Entwicklung des Kurchatov Instituts die FLAME3D entspricht) wurde eine schnelle Deflagration in einer realistischen Containmentgeometrie simuliert um typische lokale Druckverläufe für einen schnellen Verbrennungsprozess zu erhalten (Abb. 9.3.1). Als brennbare Atmosphäre wurde eine homogene 12% H<sub>2</sub>-Luft-Mischung unterstellt. Zündort war der Scheitel der Kuppel (Abb.9.3.1 mitte oben).

Abb. 9.3.2 zeigt berechnete lokale Drucklasten für verschiedene Positionen auf der Containmentwand. Zusätzlich zur primären Verbrennungsdruckwelle laufen auch Stoßwellen im verbrannten Gas durch das Gebäude und erzeugen so komplexe Drucklastkurven mit Mehrfachspitzen. Der Abstand zwischen zwei aufeinander folgenden Druckspitzen wird im wesentlichen von der Raumabmessung bestimmt, deshalb sind die Folgezeiten oben im Dom größer als im unteren Containmentbereich mit vielen Einbauten.

Die mit der Schallgeschwindigkeit im verbrannten Gas und dem Gleichgewichtsverbrennungsdruck  $p_{AICC}$  normierten Drucklasten sind in Abb. 9.3.3 dargestellt. Im unteren Containmentbereich klingen die Drucklasten wegen der häufigen Reflektionen schneller ab als im offenen Dom. Im Dom wirken dynamische Druckspitzen für die Dauer von einigen Transversallaufzeiten  $t_{ev}$ . Die lokalen Spitzendrücke erreichen bei dieser schnellen Deflagration generell das 2-3 fache des AICC-Drucks.

Der Einfluß des Zündorts auf lokale Drucklasten ist in Abb.9.3.4 in Form des Überdruckimpulses dargestellt. ( $i = FORMEL$ ). Nach Abklingen der Druckwellen im verbrannten Gas (100-200 ms) steigt der Impuls entsprechend dem konstanten AICC-Druck nahezu linear an. Die früheren Impulse hängen deutlich vom Zündort ab.

Die Anwendung des Einmassenschwingersmodells (Gl. 9.1) auf diese sehr komplexen Drucklasten lässt nun Aussagen über die effektiven statischen Drücke zu. Abb. 9.3.5 zeigt links die berechnete dynamische Drucklast im Scheitel des Doms, und rechts den daraus resultierenden effektiven statischen Druck der dieselbe Auslenkung eines linearen Oszillators bewirken würde wie die dynamische Last. Die Oszillatorfrequenz wurde von 1 bis 500 Hz variiert und für das Lehr'sche Dämpfungsmaß wurden die abdeckenden Werte 0.0, 0.007, 0.07, 0.01 verwendet. Mit abnehmender Dämpfung treten zunehmend Resonanzüberhöhungen im effektiven statischen Druck bei den passenden Frequenzen auf. Für die verwendete Drucklast sind Gebäudefrequenzen zwischen 20 und 40 Hz besonders gefährdet. Mit zunehmender Frequenz und zunehmender Dämpfung nähert sich der effektive statische Druck dem Spitzenwert der aufgeprägten Drucklast (13,5 bar). Für nahezu alle Frequenzen liegen die effektiven statischen Drücke weit über dem AICC-Druck der untersuchten Mischung ( ca. 5 bar).

Abb.9.3.6 zeigt als weiteres Beispiel eine dynamische Drucklast aus dem unteren Containmentbereich (links). In den engen Containment—Strukturen entstehen relativ lang wirkende stehende Wellen, die insbesondere Bauteile mit Frequenzen um 100 Hz stark anregen können. Wie auch im ersten Beispiel liegen die effektiven statischen Drücke weit über dem AICC-Druck, der oft vereinfachend als maximal wirksamer Druck angenommen wird.

Analoge Untersuchungen wurden auch für eine langsam brennende H<sub>2</sub>-Luft-Mischung mit 8 vol% H<sub>2</sub> durchgeführt. Abb. 9.3.7 zeigt die berechneten lokalen Druckverläufe im Containment an denselben Stellen wie zuvor. Zündung war ebenfalls im Domscheitel. Im Containmentdom wird der Enddruck relativ langsam über etwa 0.5 s und ohne ausgeprägte Druckspitzen erreicht. Im unteren eng gebauten Containmentbereich führen dagegen Reflektionen und Fokussierungseffekte zu einem relativ hohen ersten dominanten Peak. Abb.

9.3.8 zeigt analog zu Abb. 9.3.3 die normierten Drucklasten. Nur in den unteren fokussierenden Positionen wurden Drücke oberhalb von  $p_{AICC}$  erreicht.

Für die langsam ansteigende Drucklast im Containmentdom (Abb.9.3.9, links) ergibt das Einmassenschwingermodell effektive statische Drücke die nur bei tiefen Gebäudefrequenzen den AICC-Druck erreichen (Abb.9.3.9, rechts). Für relativ langsame Drucklasten die über ca. 0,5 Sekunden ohne ausgeprägte Mehrfachpeaks auf den AICC-Druck steigen, liegt der dynamische Lastfaktor nahe 1.

In komplexen 3D-Gebäudegeometrien können gerichtete Strömungen und Fokussierungseffekte zu schnelleren Druckanstiegszeiten führen als in mehr offenen Geometrien. Abb. 9.3.10 zeigt links ein Beispiel für eine berechnete Drucklast aus dem untersuchten unteren Containmentbereich. Die Reduktion der Druckanstiegszeit auf etwa 0,2 s führt auf effektive dynamische Drücke die nun bis zu einem Faktor 2 über dem AICC-Druck liegen (Abb. 9.3.10, rechts). Es ist daher selbst für langsame brennende Mischungen wie 8%  $H_2$  in Luft nicht davon auszugehen, daß der AICC-Druck immer die maximale effektive Drucklast darstellt. Mehrdimensionale Strömungseffekte können auch bei langsamen Verbrennungen (100 m/s Flammengeschwindigkeit) dynamische Lasteffekte bewirken.

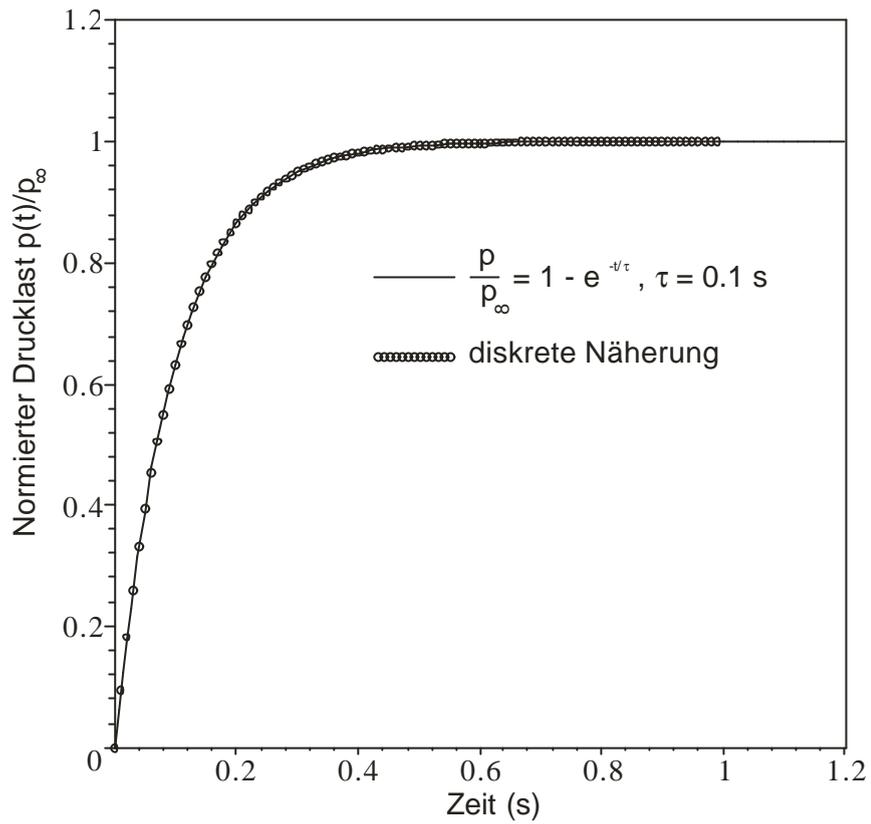


Abb.9.1.1: Testfunktion für die Verifikation des numerischen Einmassenschwinger (EMS)- Modells anhand einer analytischen Drucklast und ihrer Näherung durch 100 diskrete Punkte.

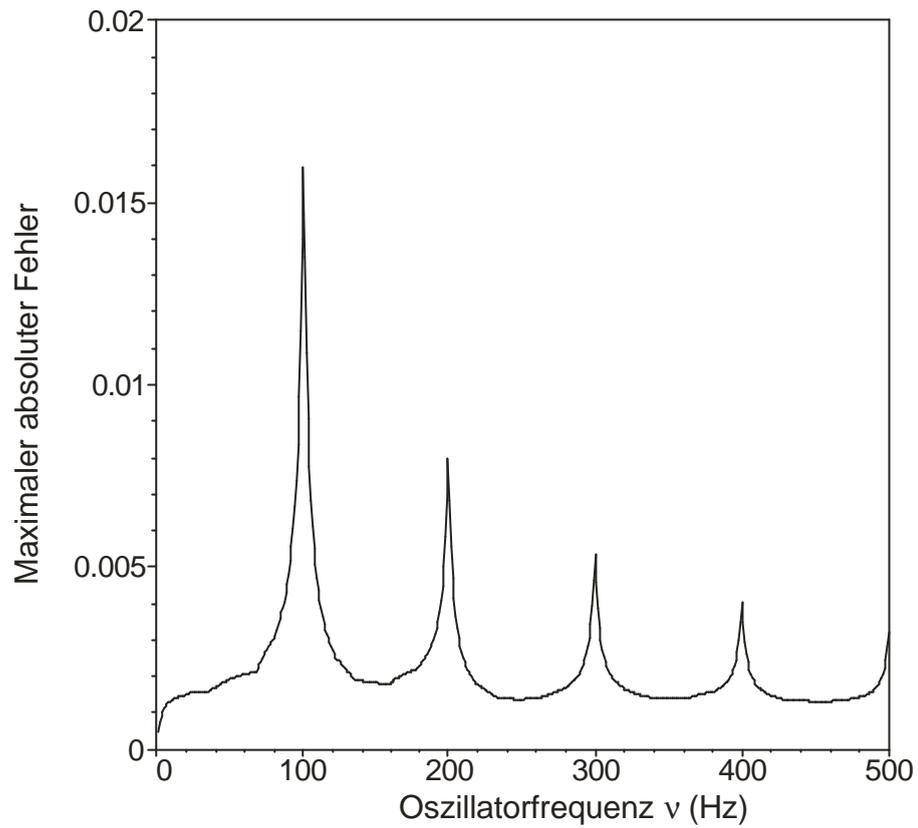


Abb.9.1.2: Vergleich der analytischen und numerischen Lösungen für die Antwort des EMS- Modells auf den exponentiellen Zwangsterm von Abb.9.1.1. Maximaler absoluter Fehler der numerischen Lösung als Funktion der Oszillatorfrequenz  $\nu$ .

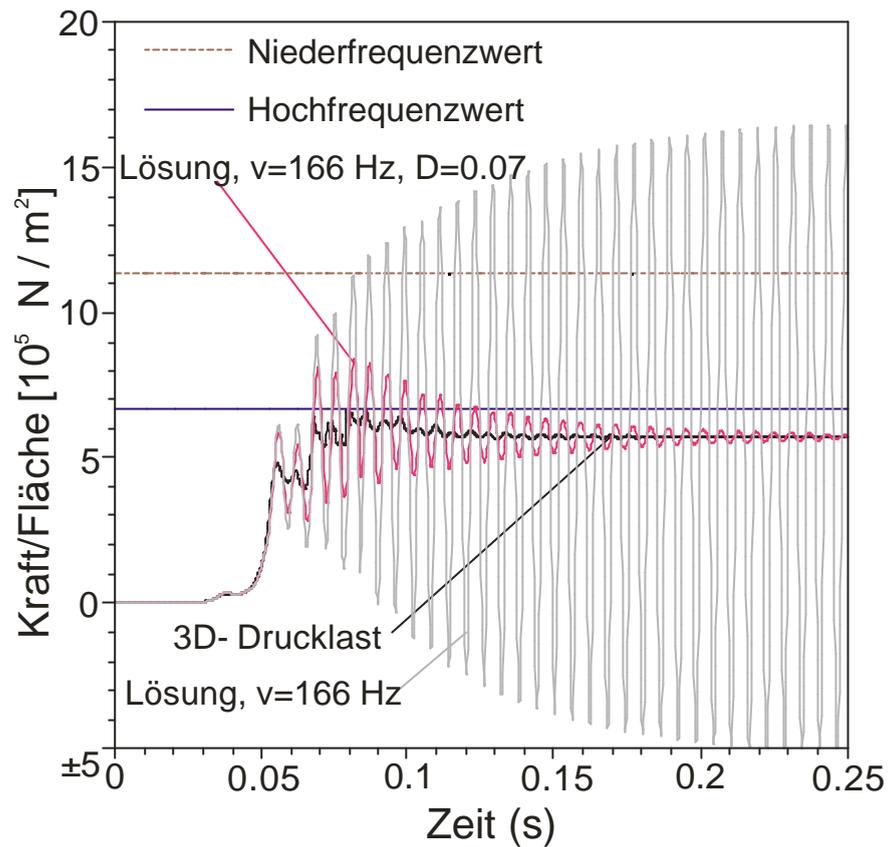


Abb.9.2.1: Beispiel für eine typische transiente Drucklast aus einer 3D-Verbrennungsrechnung in einem Reaktorcontainment (20%  $\text{H}_2$  in Luft, 298 K, 1 bar) und die dazugehörigen flächenbezogenen Federkräfte des EMS- Modells für einen 166 Hz- Oszillator mit und ohne Dämpfung. Auf Grund von Druckwellenreflexionen im verbrannten Gas in dem hier betrachteten Raumbereich des Containments enthält die Drucklast eine regelmäßige Oberschwingung im 166 Hz- Bereich die geeignete Resonanzen anregen kann. Im Fall des ungedämpften 166 Hz- Oszillators erreicht die Lastüberhöhung etwa den Faktor 3.

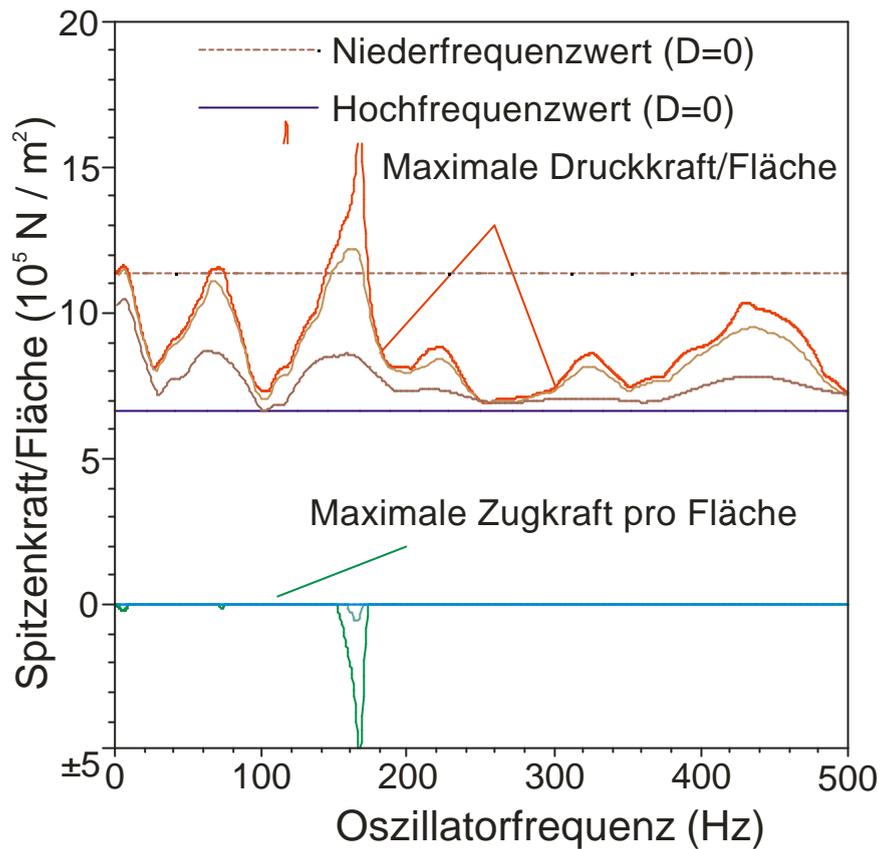


Abb.9.2.2: Mit dem EMS- Modell berechnete maximale Druck- und Zuglasten für die 3D- Last aus Abb. 9.2.1 und verschiedene Dämpfungen als Funktion der Oszillatorfrequenz (  $D=0.0, 0.01$  und  $0.07$ ). Die effektiven Spitzenkräfte pro Fläche liegen für alle hier untersuchten Frequenzen und Dämpfungen deutlich über dem Spitzenwert des aufgeprägten Zwangsterms (= Hochfrequenzwert).

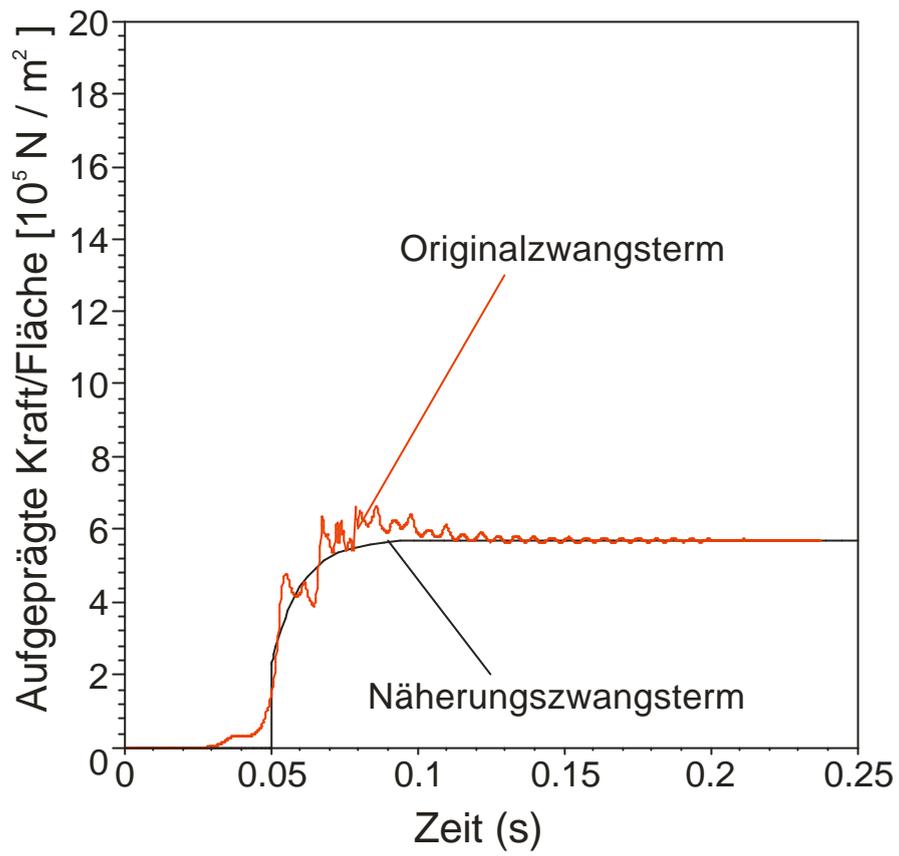


Abb.9.2.3: Originalzwangsterm und analytische Näherung die für Sensitivitätsstudien mit dem EMS- Modell benutzt werden.

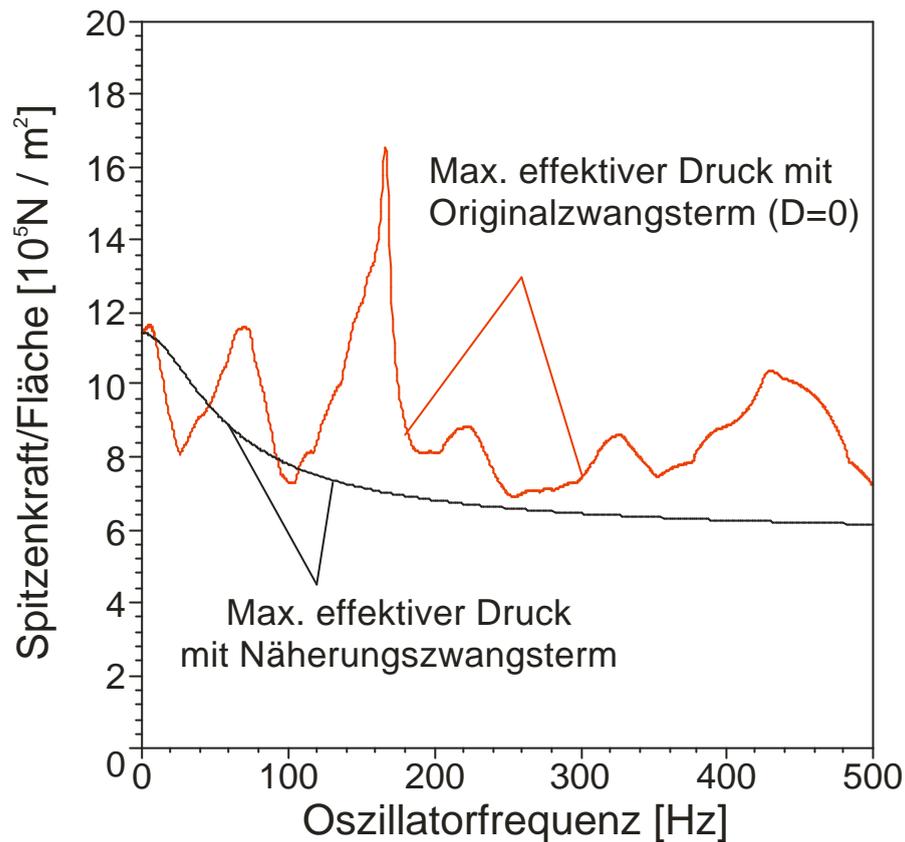


Abb.9.2.4: Vergleich der berechneten Spitzenkräfte/Fläche für den Original- und den Näherungszwangsterm, Rechnung ohne Dämpfung. Die Benutzung von geglätteten oder approximierten Zwangstermen kann beim EMS-Modell zu großen Fehlern in den berechneten effektiven Drücken führen weil das Spektrum der Lastfrequenzen willkürlich verändert wird. Das neue punktweise Approximations- und Lösungsverfahren erlaubt eine hinreichend genaue Darstellung komplexer Zwangsterme, wie sie bei Verbrennungsprozessen in 3D- Geometrien auftreten.

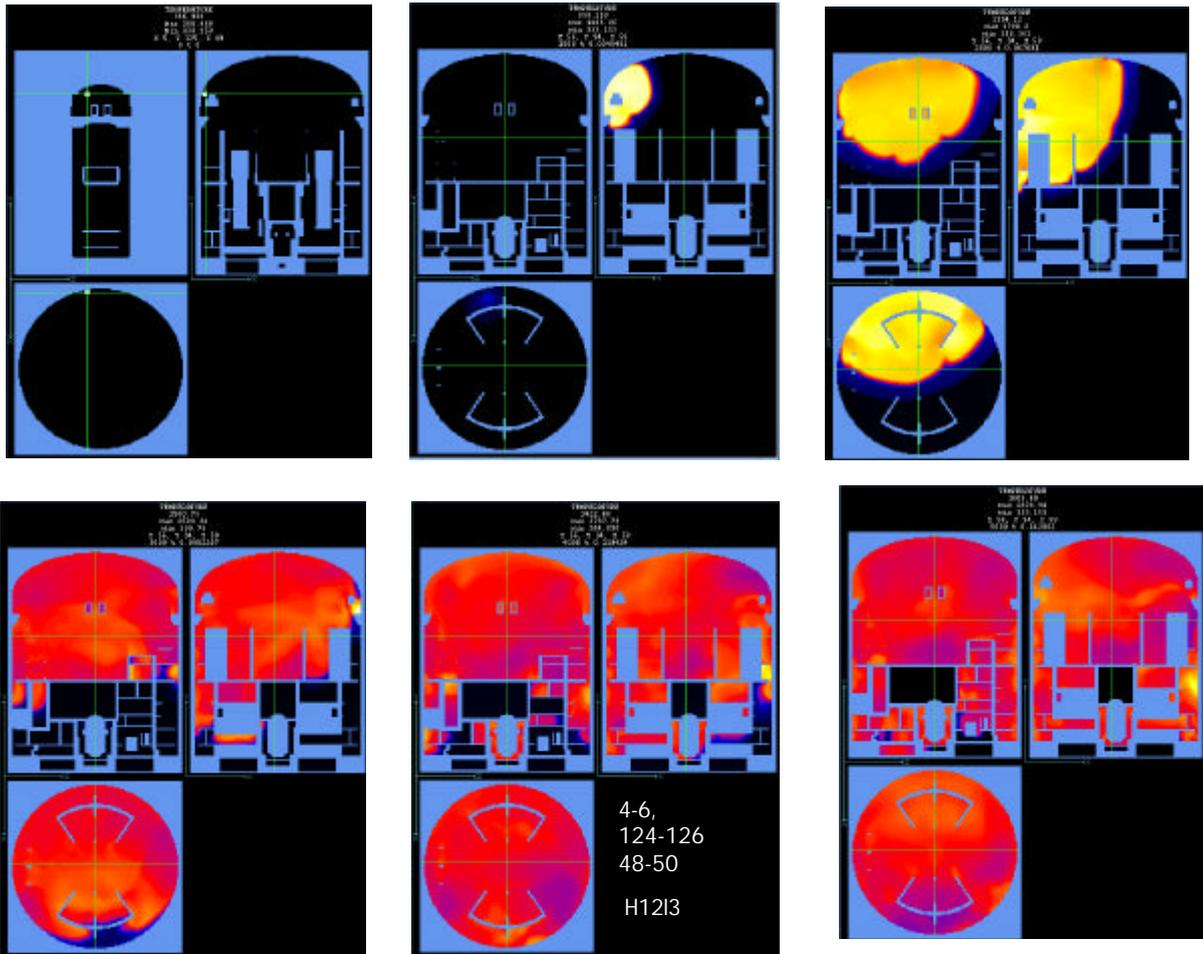


Abb. 9.3.1: Simulation einer turbulenten  $H_2$ -Luftverbrennung in einem dreidimensionalen Reaktorcontainment, dargestellt am Temperaturfeld zu verschiedenen Zeitpunkten. Die homogene 12%  $H_2$ -Luft-Mischung wurde im Dom gezündet (Bild oben mitte) und brennt nach unten mit hoher Geschwindigkeit aus. 12%  $H_2$  in Luft erfüllt das Flammenbeschleunigungskriterium, so dass die Flamme in versperrter Geometrie die Schallgeschwindigkeit im verbrannten Gas erreichen kann (800 m/s).

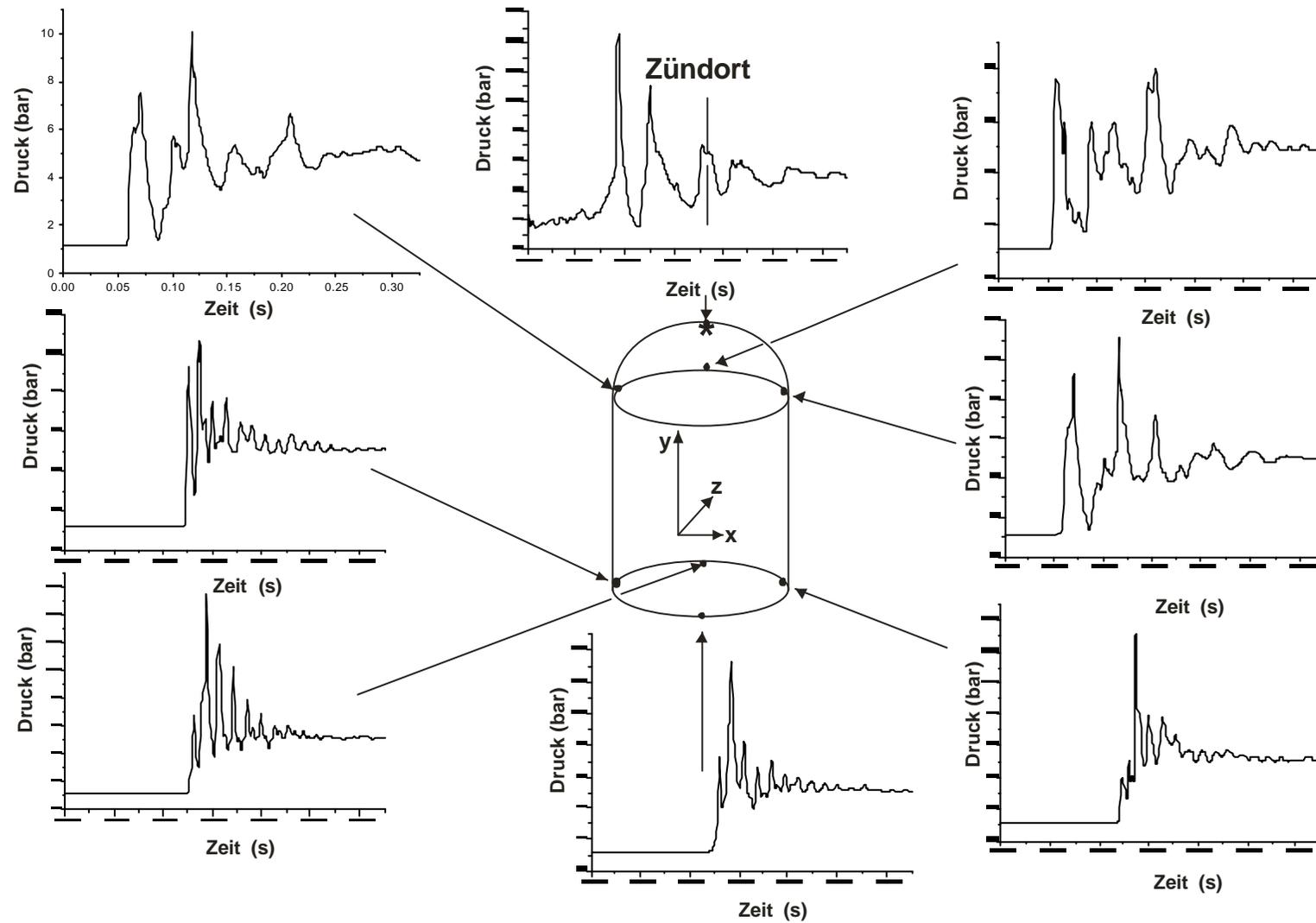


Abb. 9.3.2: Berechnete lokale Drucklasten an Containmentwänden für Verbrennung einer 12 % H<sub>2</sub>-Luft-Mischung, Zündung im Scheitel des Doms. Die Folge der Druckspitzen wird im wesentlichen durch die Raumabmessungen im Containment bestimmt (groß oben, klein unten).

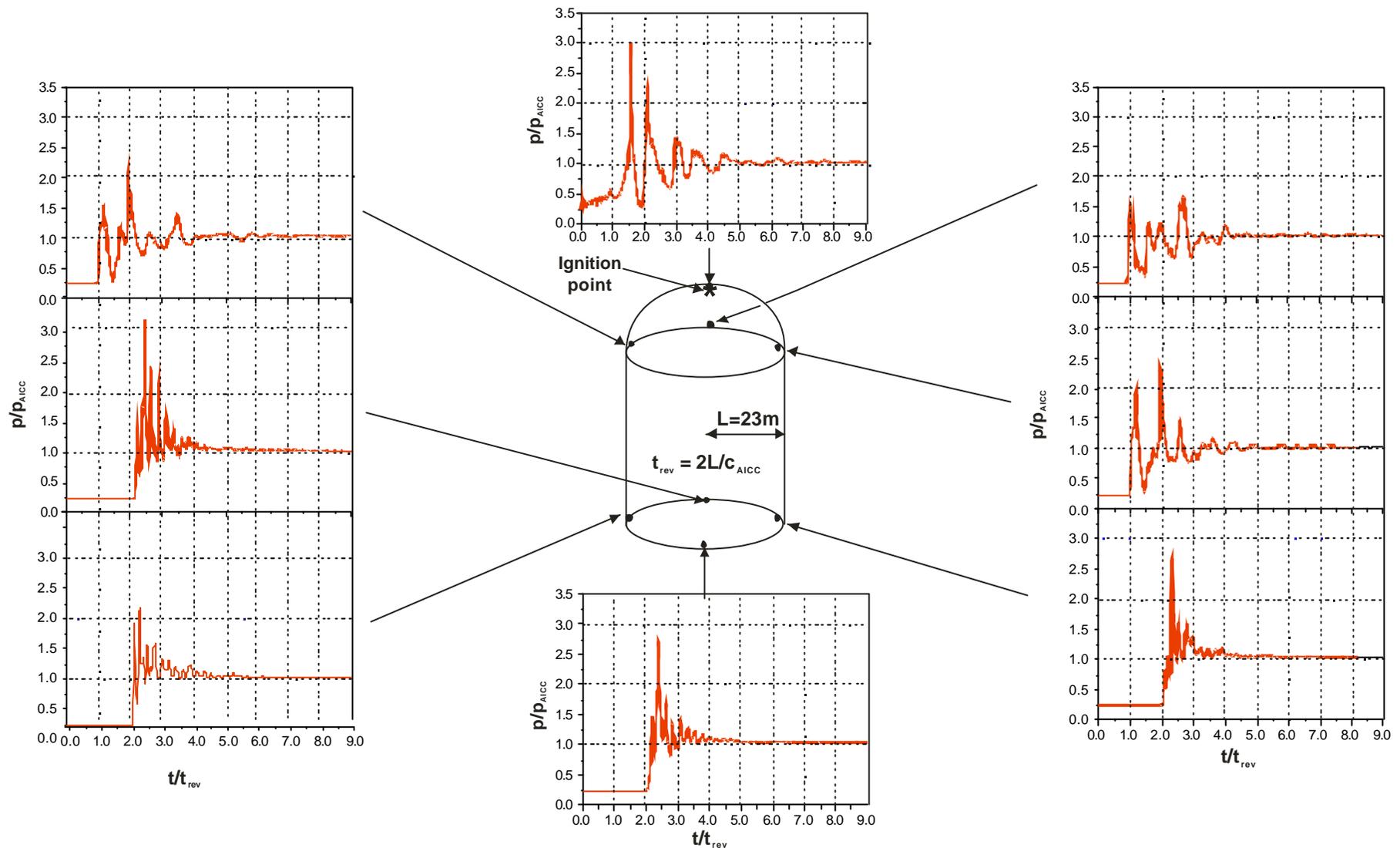


Abb. 9.3.3: Normierte Drucklasten aus Abb.9.3.2.  $P_{\text{AICC}}$  = Gleichgewichtsdruck des verbrannten Gases,  $t_{\text{rev}}$  = Laufzeit einer Druckwelle im verbrannten Gas für einen Containerdurchmesser, 12%  $\text{H}_2$  in Luft, Zündung im Domscheitel.

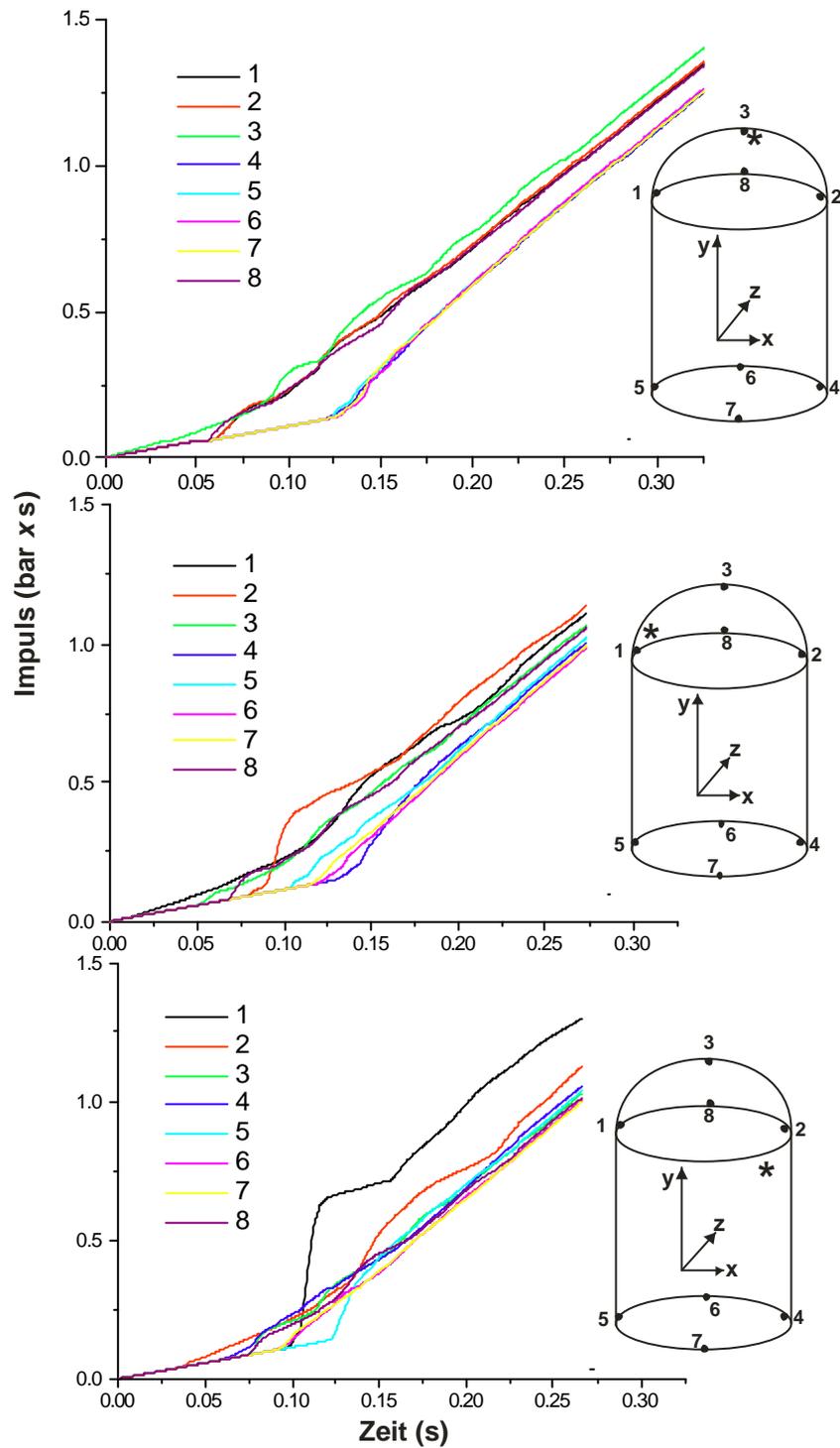


Abb. 9.3.4: Impulse aus der schnellen  $H_2$ -Luft-Verbrennung (12 %  $H_2$ ) an verschiedenen Ortspunkten im Containment bei unterschiedlichen Zündorten.

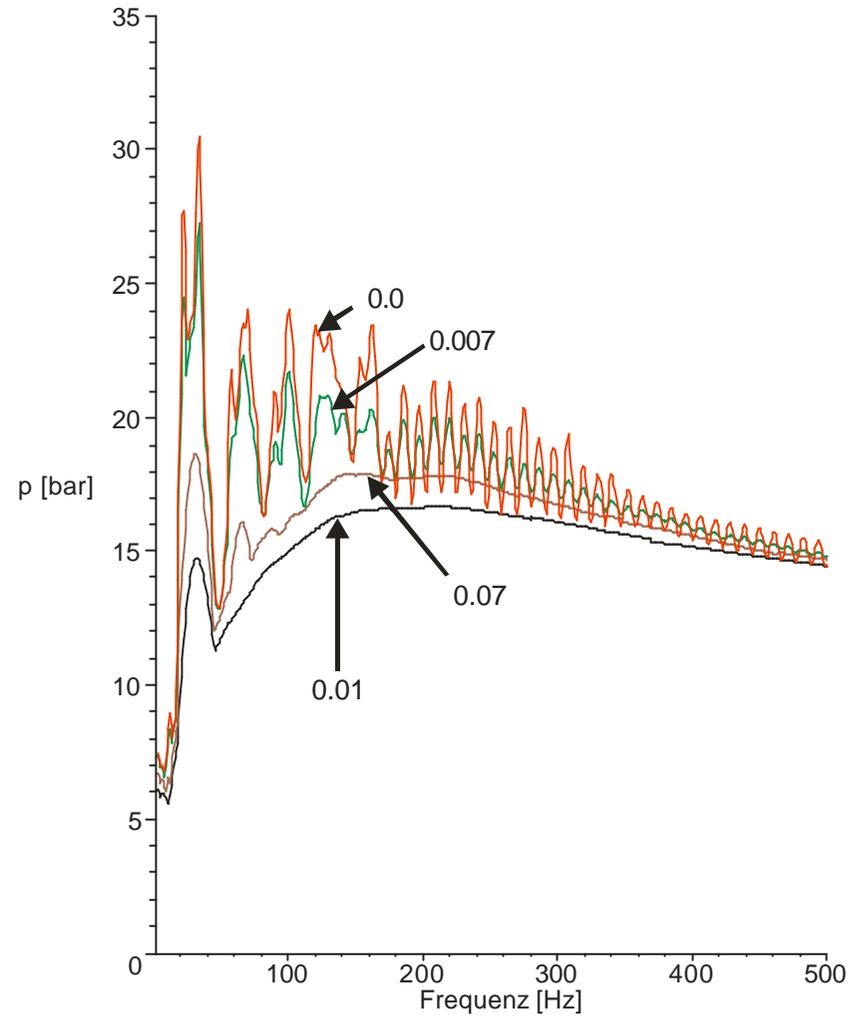
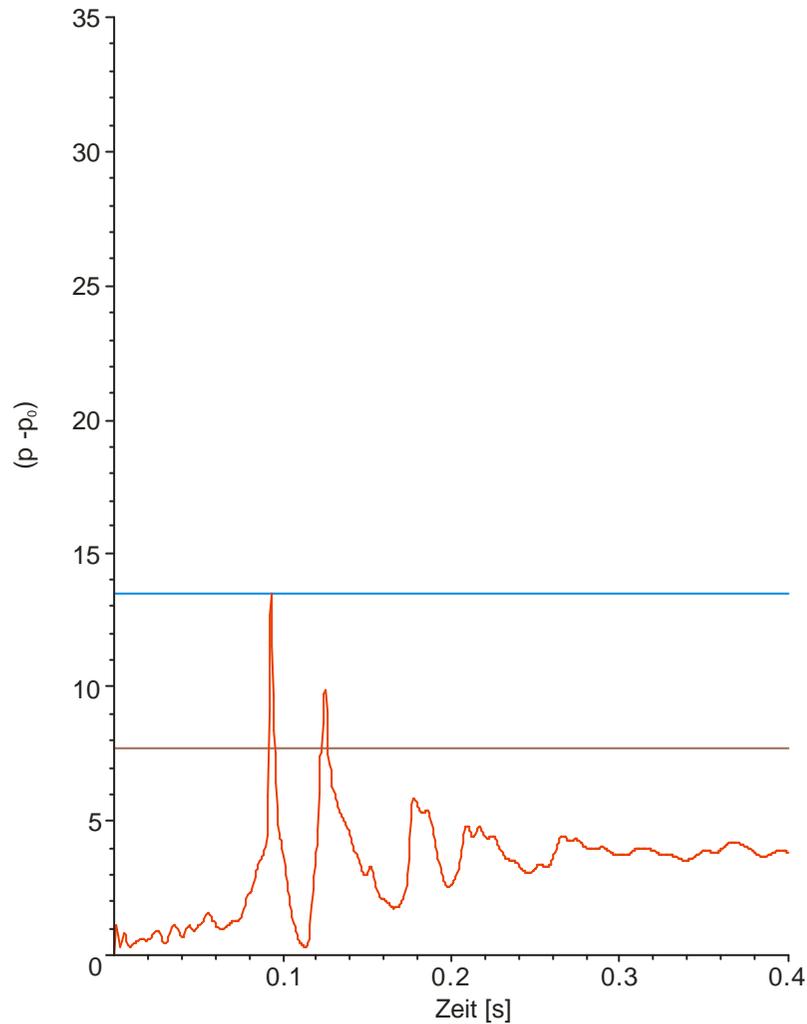


Abb. 9.3.5: Berechnete Differenz-Drucklast ( $p-p_0$ ) im Containmentdom (links) und mit dem Einmassenschwinger-Modell berechnete effektive statische Drücke als Funktion der Oszillatorfrequenz und des Lehr'schen Dämpfungsmaßes (0.0, 0.007, 0.07, 0.01). Drucklasten mit regelmäßigen Mehrfachpeaks können erhebliche Resonanzüberhöhungen bewirken. In diesem Beispiel sind Gebäudefrequenzen zwischen 20 und 40 Hz besonders gefährdet.

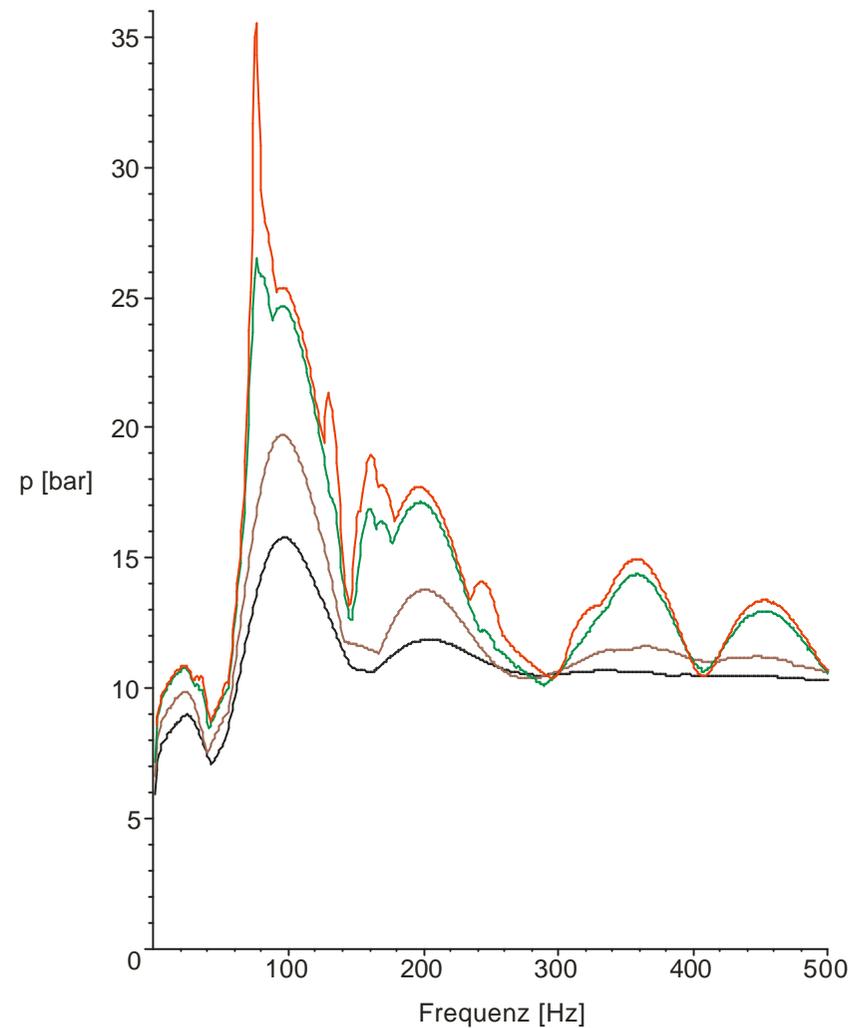
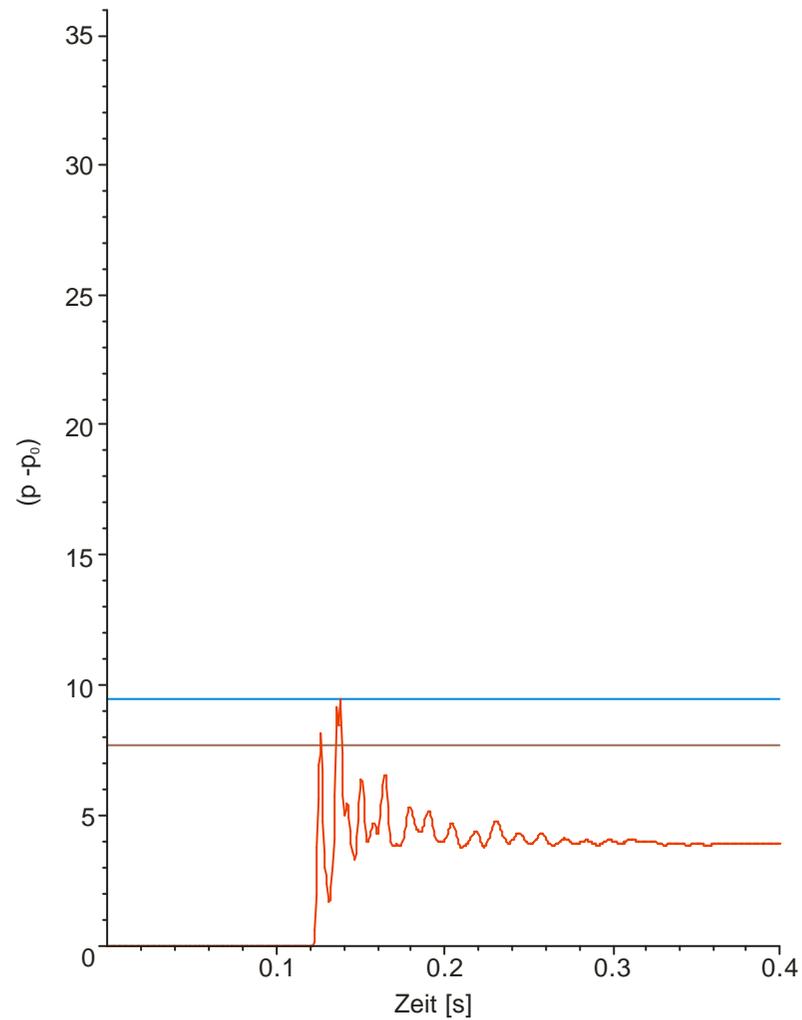


Abb. 9.3.6: Differenz-Drucklast ( $p - p_0$ ) aus dem unteren Containmentbereich bei Verbrennung von 12 %  $H_2$  (Abb.9.3.2 Mitte links). Relativ lang wirkende stehende Wellen in den kleinen Strukturen können insbesondere Bauteile mit Frequenzen um 100 Hz stark anregen. Die effektiven statischen Drücke liegen weit über dem AICC-Druck der Mischung (ca. 4 bar).

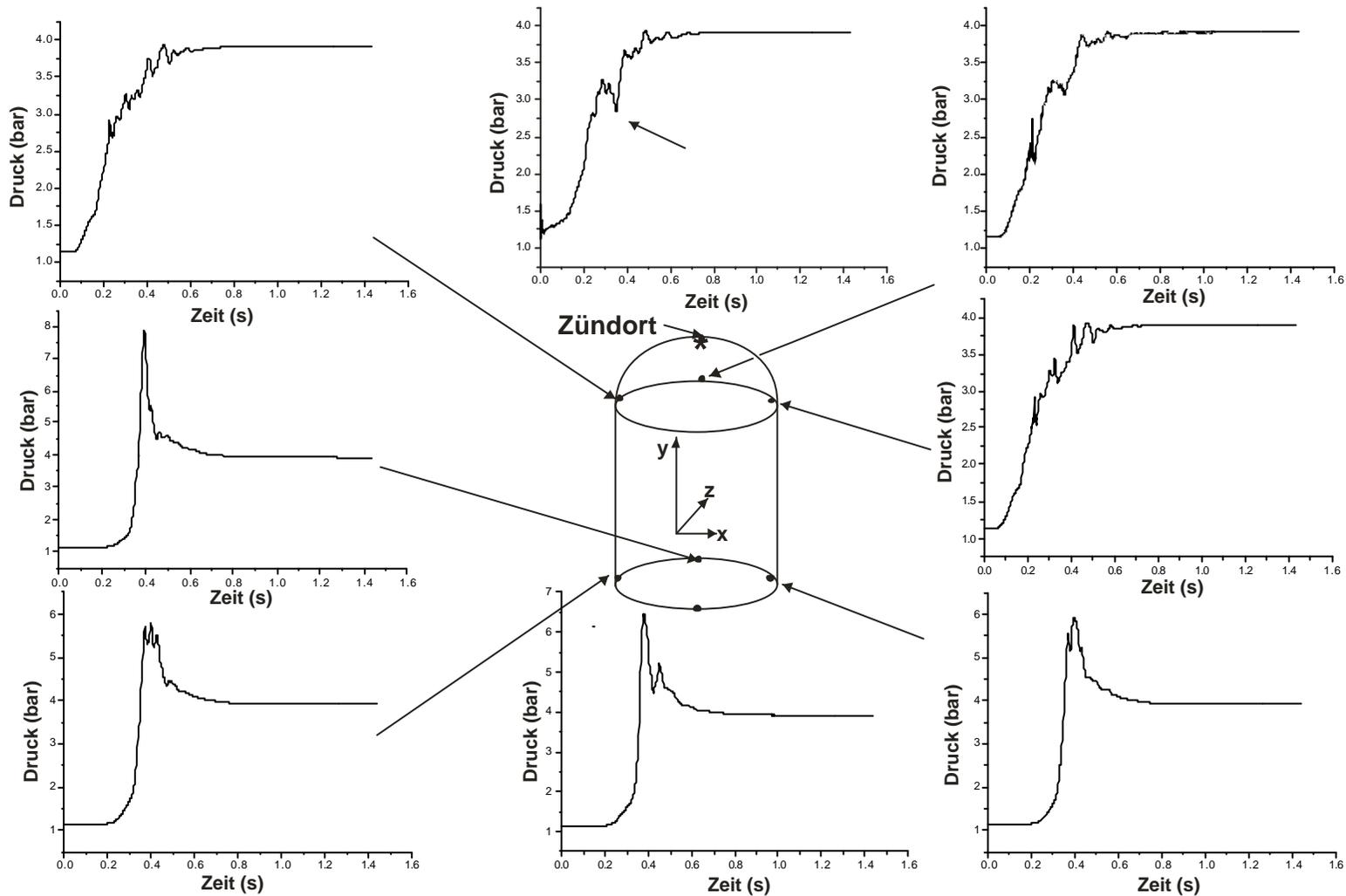


Abb. 9.3.7: Berechnete lokale Druckverläufe bei Verbrennung einer 8% H<sub>2</sub>-Luft Mischung in einem komplexen 3d-Containment-Modell, Zündung im Nordpol des Doms. Im unteren Containmentbereich führen Reflektionen und Fokussierungseffekte zu lokalen Druckspitzen.

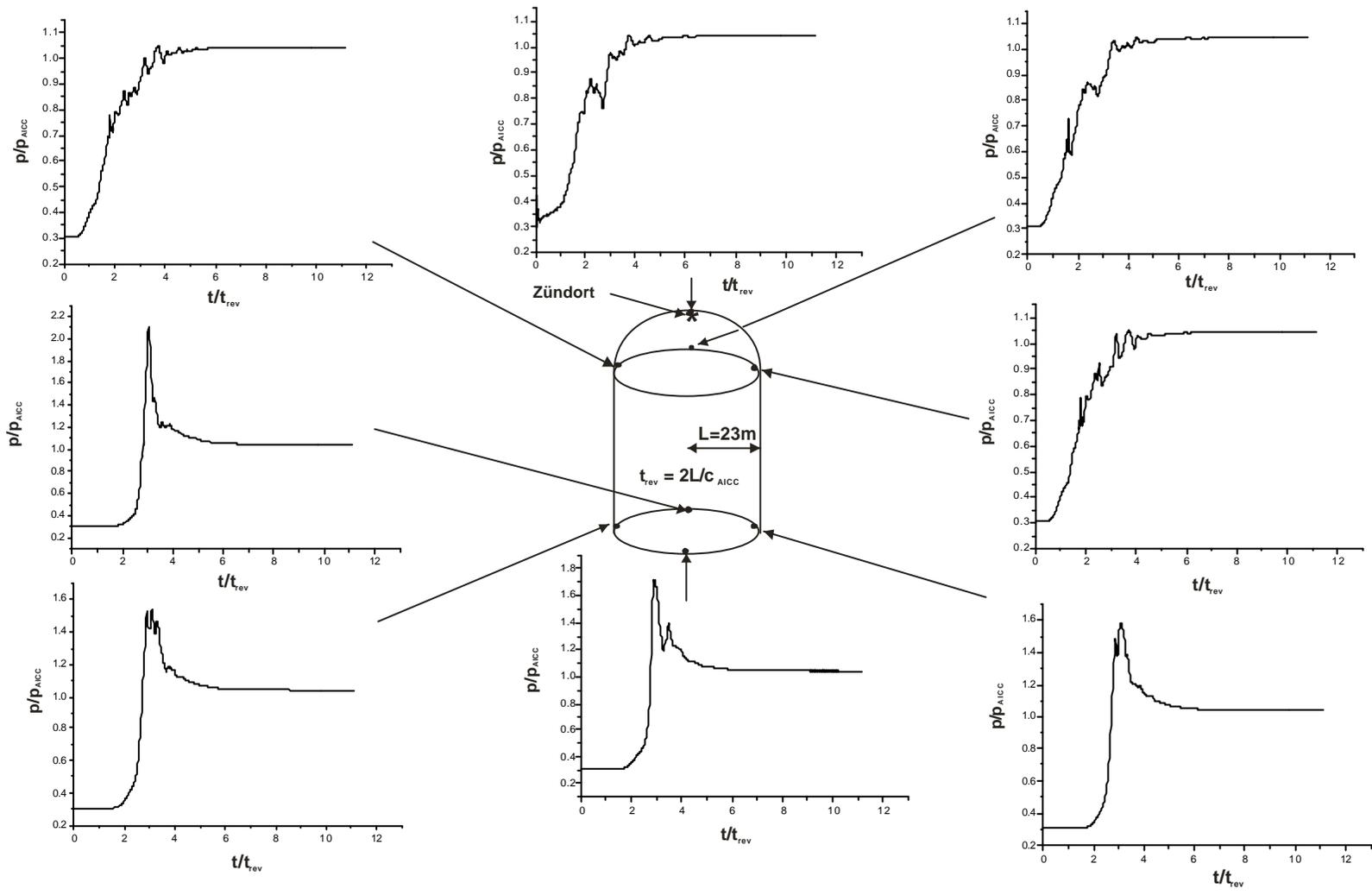


Abb. 9.3.8: Dimensionslose Darstellung der berechneten lokalen Drücke durch Normierung mit dem AICC-Druck der Mischung  $p_{AICC}$  und der Laufzeit von Druckwellen im verbrannten Gas ( $p_{AICC}$ = adiabatic isochoric complete combustion pressure,  $c_{AICC}$ = Schallgeschwindigkeit im verbrannten Gas).

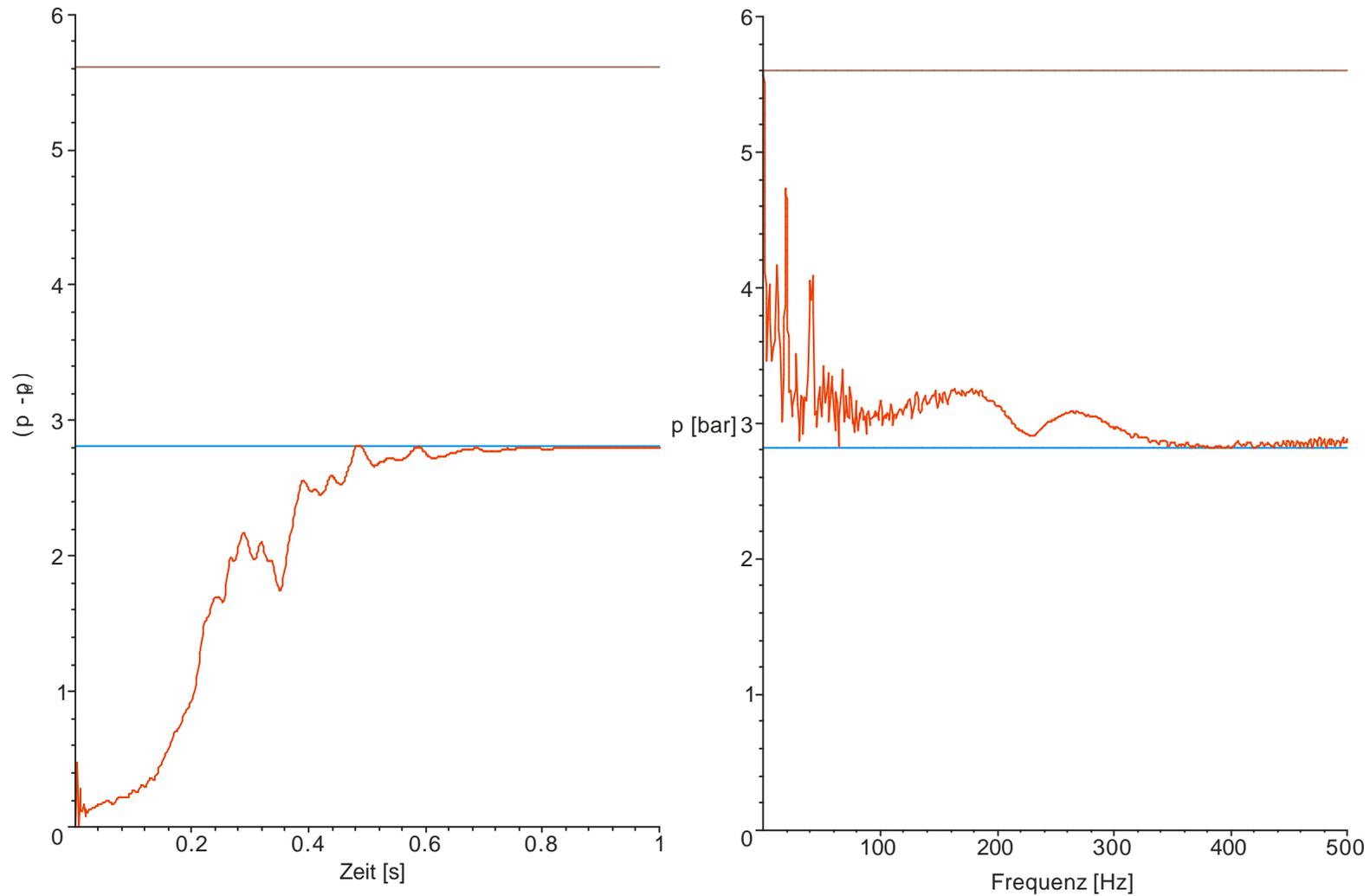


Abb. 9.3.9: Differenzdruck im Dom für eine langsame brennende  $\text{H}_2$ -Luft-Mischung (8 %  $\text{H}_2$ ) und mit dem Einmassenschwingermodell berechneter effektiver statischer Druck (rechts). Der effektive statische Druck erreicht nur für niedrige Frequenzen den AICC-Druck (ca. 3.8 bar).

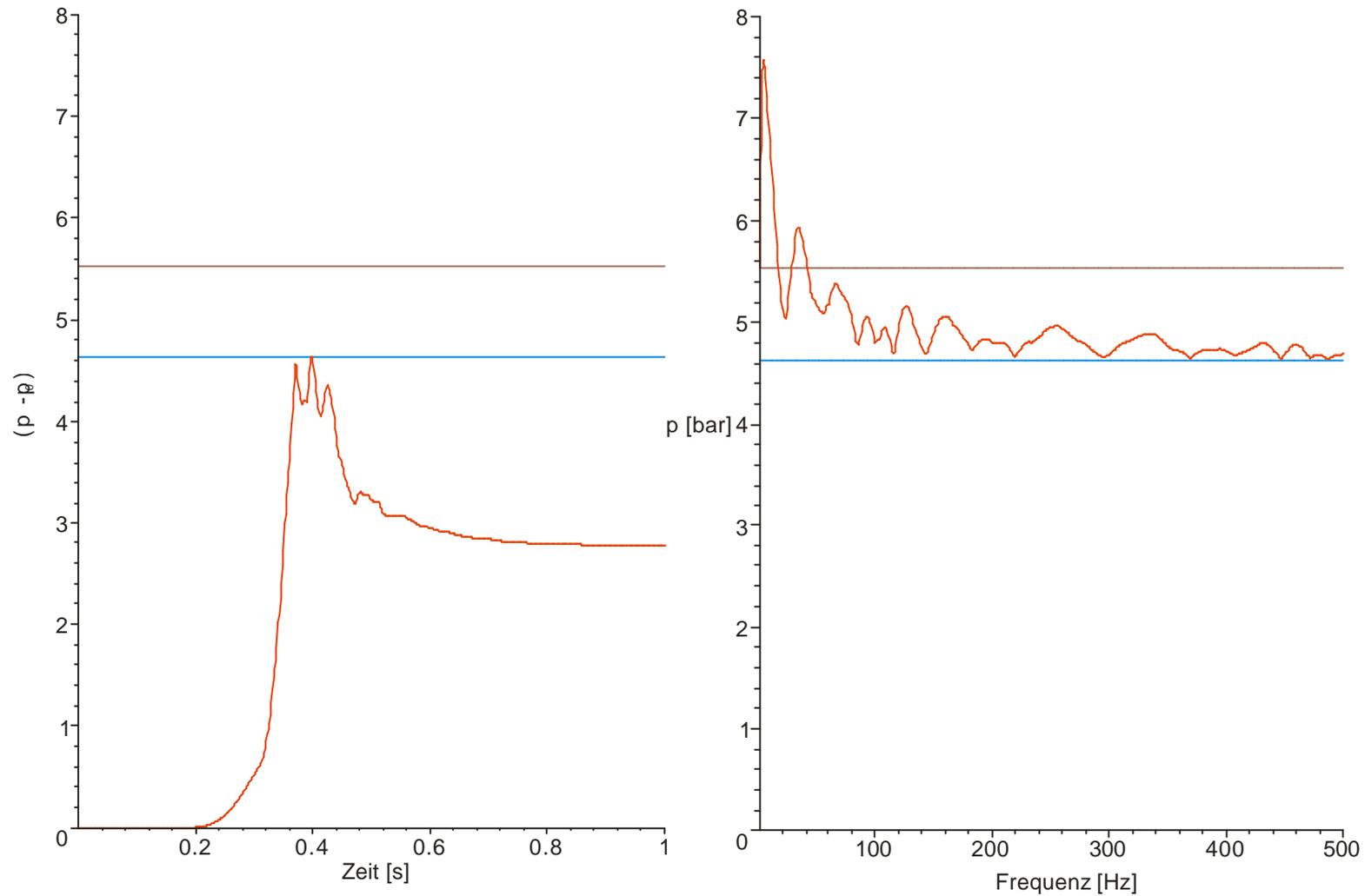


Abb. 9.3.10: Differenzdrucklast bei einer langsam brennenden  $H_2$ -Luft-Mischung (8 %  $H_2$ ) im unteren Teil des untersuchten Containments (links). Dreidimensionale Strömungseffekte können lokale Druckanstiegszeiten verkürzen und Drücke oberhalb von  $p_{AICC}$  erzeugen. Der entsprechende effektive statische Druck kann dadurch auch über den AICC-Druck steigen, in diesem Beispiel bis zu einem Faktor 2 (rechts).



## 10. Reaktoranwendungen: Analyse realer Anlagen

In diesem Abschnitt werden Anwendungen der entwickelten Wasserstoffanalysemethodik auf reale Reaktoranlagen beschrieben. Tabelle 10.1 gibt einen Überblick zu den drei untersuchten Anlagen (HDR, BIBLISA, GKN-2) und den durchgeführten Analyseschritten. Die vertikal aufgeführten Schritte entsprechen dem in Abschnitt 4 ausführlich dargestellten Vorgehen für die Untersuchung des Wasserstoffverhaltens bei schweren DWR-Unfällen. Jede Spalte in Tabelle 10.1 bezieht sich auf eine spezielle Wasserstoffgegenmaßnahme die für die entsprechende Reaktoranlage untersucht wurde. Die wesentlichen Ergebnisse dieser Arbeiten werden in den folgenden Abschnitten kurz beschrieben.

### 10.1 HDR mit CO<sub>2</sub>-Verdünnung

Die Einspeisung von CO<sub>2</sub> im Verlauf eines Kernschmelzunfalls bietet die Möglichkeit drohende Wasserstoffverbrennungsprozesse zu verlangsamen oder ganz zu verhindern. Diese Maßnahme wird als "post-dilution" bzw. "post-inertization" bezeichnet.

Die hier beschriebene Analyse stellt die erste 3D-Rechnung zu diesem Konzept vor. Insgesamt wurden 9 Tonnen CO<sub>2</sub> zu zwei verschiedenen Zeiten und an zwei verschiedenen Orten in den Sicherheitsbehälter eingespeist (Abb. 10.1.1). Die Wasserstoffquelle entsprach mengenmäßig der Leichtgasfreisetzung von HDR-Versuch T31.5, bei dem 168 kg einer (85% He + 15% H<sub>2</sub>)-Mischung in den HDR eingebracht wurden. [10.1] Abb. 10.1.2 zeigt die mit GASFLOW berechnete zeitliche Entwicklung der mittleren Gemischzusammensetzung in der Kuppel des HDR und im Bruchraum. In beiden Fällen würden sich ohne CO<sub>2</sub>-Einspeisung detonationsfähige H<sub>2</sub>-Luft-Dampf Gemische bilden. Am wirkungsvollsten ist die späte CO<sub>2</sub>-Einspeisung (1850-3600 s) am Bruchort, gemeinsam mit der H<sub>2</sub>-Dampfquelle. Bei CO<sub>2</sub>-Zugabe in der Kuppel besteht die Tendenz, dass das schwerere CO<sub>2</sub> einfach in den unteren Containmentbereich absinkt und leichtere H<sub>2</sub>-Dampf-Luft-Atmosphäre nach oben verdrängt. In der gegebenen Geometrie besteht dann wenig Möglichkeit für eine effektive Durchmischung des Quellgases (H<sub>2</sub>+Dampf) mit dem Kohlendioxid und für eine nennenswerte Inertisierung der Unfallatmosphäre.

Die Untersuchungen haben gezeigt, dass CO<sub>2</sub>-Einspeisung in der Nähe von potentiellen bzw. probabilistisch signifikanten Bruchorten eine sinnvolle und wirksame Maßnahme gegen H<sub>2</sub>-Verbrennungsprozesse darstellen kann.

### 10.2 BIBLIS-A mit Sumpfverdampfung

Für die Anlage Biblis-A wurde ein Kühlmittelverluststörfall (KMV) mit GASFLOW simuliert [10.2] (Abb. 10.2.1). Bei diesem Auslegungsstörfall werden 15 kg H<sub>2</sub> in den Sicherheitsbehälter freigesetzt.

Wesentliches Ziel der Analysen war, die zeitliche Entwicklung der Wasserstoffverteilung zu berechnen und den konvektionsgesteuerten Übergang zu einer homogenen Wasserstoffverteilung zu untersuchen.

In der Blow-down-Phase unmittelbar nach Störfalleintritt fließen die Massenströme

Tabelle 10.1:Reaktoranwendungen: Analyse realer Anlagen

ANALYSE-SCHRITT	ANLAGE								
	HDR	BIBLIS-A		GKN-2					
Gegenmaßnahmen	CO <sub>2</sub> -Verdünnung	Sumpfverdampfung	Reko-Schütt. (NIS)	Platten-Reko's (Siemens) und Stahlcontain.	Platten-Reko (Siemens)	Netz-Rekos (Jülich)	Folien (Thincat)	Kat. Oberfl. (FZK)	Platten-Reko (Siemens)
Szenario	T31.5	SBA-LOCA	Surge-Line LOCA	LOOP	Surge-line LOCA				Small Break LOCA (50 cm <sup>2</sup> )
Quellen	T31.5 ? kg H <sub>2</sub>	16 kg H <sub>2</sub>	MELCOR 531 kg H <sub>2</sub>	MAAP 880 kg	MELCOR 531 kg H <sub>2</sub> , 462 to Wasser, 50 to Dampf, Xe				MELCOR 669 kg H <sub>2</sub>
Verteilung	GASFLOW 12300 Nodes	GASFLOW 146.000 Nodes, kart.		GASFLOW 184.000 Nbdes	GASFLOW 144.000 Nodes, kartesisch				GASFLOW 184.000 Nodes
Risiko-Potential									σ,λ-Kriterien
Deflagration									
Detonation				DET3D 2.2 Mio Nodes					
Strukturverhalten				ABAQUS 9000 Finite Elemente					
Abbildungen	10.1	10.2	10.3	10.4	10.5				10.6

von der Quellposition vor allem über die oberen Überströmöffnungen in den Dampferzeugertürmen in den Kuppelbereich des Containments (Abb. 10.2.2 links). Die Temperatur im Kuppelbereich erreicht über 90°C und der Dampfvolumenteil lokal bis 45%. Die anfängliche Dampf- und Temperaturstratifikation führt zu lokalen Wasserstoffanreicherungen in der Kuppel von maximal 0.3%. In den unteren Anlagenräumen ist zu diesem Zeitpunkt die Wasserstoffkonzentration deutlich geringer.

Nach der Blow-down Phase folgt eine klar erkennbare Stratifikations-Phase, in der sich getrennte stabile Konvektionswalzen in der Kuppel und in den unteren Anlagenräumen ausbilden. Die Abb. 10.2.2 Mitte zeigt einen Containmentquerschnitt mit berechneten Gasgeschwindigkeiten. Etwa in halber Containmenthöhe befindet sich eine Gasschicht mit sehr geringen Geschwindigkeiten, die die untere Konvektionszone von der oberen trennt. Diese Schichtung wird jedoch durchbrochen, sobald die Kuppeltemperatur infolge von Wärmeverlusten über die Stahlschale unter die Sumpftemperatur sinkt. Eine lokale Aufkonzentration von Wasserstoff findet an keiner Stelle statt.

In der anschließenden Konvektionsphase bildet sich eine stabile globale Zirkulation im Containment aus. Die Gas-Kühlung und Dampfkondensation an der Stahlschale führt zu einer höheren Gasdichte im äußeren Containmentbereich. Das abgekühlte und dampfärmere Gasgemisch sinkt im Bereich zwischen Trümmerschutzzylinder und Stahlschale ab und strömt dann durch die unteren Überströmöffnungen in die Anlagenräume zurück. An der Sumpfoberfläche nimmt es erneut Wärme und Dampf auf und steigt durch die Dampferzeugertürme zur Kuppel auf. Dort bewirken Kühlung und Kondensation eine erneute Dichteerhöhung und damit stabile Antriebskraft für den weiteren Konvektionstransport (Abb. 10.2.2 rechts). Der Wasserstoff wird dadurch praktisch im gesamten Containment homogenisiert und stabilisiert sich zum Ende der Betrachtungszeit bei ca. 6 h bei einer Konzentration von ca. 0.29 Vol.%.

Die Gasflow-Analysen mit dem neuen, experimentellen verifizierten Sumpfmmodell haben somit folgende Ergebnisse für die Anlage Biblis A und Anlagen mit ähnlichem Containment gezeigt:

- Im Falle eines KMV-Störfalles sammeln sich Dampf und anfangs freigesetzter Wasserstoff im Kuppelbereich an.
- Es kommt zu einer Temperatur-/Dampf-/Wasserstoffstratifikation mit klar getrennten Naturkonvektionsgebieten oben und unten im Containment.
- Sobald die Kuppeltemperaturen unter die Sumpftemperaturen sinken, wird die Stratifikation durch eine globale Naturkonvektion durchbrochen. Es kommt zu einer Homogenisierung des Wasserstoffinventars.
- Zündfähige Gasgemische können sich weder lokal noch global bilden.

### 10.3 BIBLIS-A mit NIS-Rekombinatoren

Für das Kernkraftwerk Biblis-A wurde die mit GASFLOW die Wirksamkeit von 44 NIS-Schüttbett-Rekombinatoren im Falle eines postulierten Surge-Line LOCA's untersucht. Das unterstellte Unfallszenario bestand in einem instantanen Rundumabriss der Surge-Line am Einschweißstutzen der Hauptkühlmittelleitung mit zusätzlichem Ausfall aller redundanten Not- und Nachkühlsysteme. Abb. 10.3.1 zeigt links die mit 146.000 Rechenzellen modellierte Reaktorcontainmentgeometrie und rechts die Anordnung der Rekombinatoren im Raum [10.3]. Für bessere Sichtbarkeit sind die inneren Containmentstrukturen ausser der kugelförmigen Stahlschale mit 28 m Radius weggelassen.

Abbildung 10.3.2 zeigt die verwendeten Wasserstoff- und Dampfquellterme. In den ersten 700 s werden 462 Tonnen Wasser und 39 Tonnen Dampf als Zweiphasengemisch eingespeist. Nach 700 s folgt nur noch überhitzter Dampf (139 Tonnen). Die Wasserstoffeinspeisung beginnt bei diesem großen Bruch schon früh, etwa ab 1400 s nach dem Bruchereignis. Insgesamt gelangen 531 kg H<sub>2</sub> (etwa 6000 Nm<sup>3</sup>) in das Containment. Davon werden allein 120 kg in dem letzten Puls bei 5900 s freigesetzt, der durch den Kernabsturz in das untere RDB-Plenum entsteht. Wasserstoff wird in diesem Szenario immer zusammen mit Dampf eingespeist.

Abb. 10.3.2 vergleicht auch die für Biblis-A und GKN-2 berechneten Containmentdrücke. Die Anlage Biblis-A ist offener gebaut und enthält weniger Betonstrukturen als GKN-2. Die geringeren Wärmekapazitäten von Biblis-A führen zu höheren Drücken und höheren Dampfkonzentrationen in der Unfallatmosphäre (ca. 60% Dampf). Dies zeigt, dass im Prinzip durch geringere Massen im Containment oder durch eine Wärmeisolation der Betonstrukturen das Kondensationspotential verringert und eine passiv wirkende Dampfinertisierung erreicht werden könnte.

Abb. 10.3.3 zeigt die berechnete Wasserstoffverteilung und die Abgaswolken der NIS-Rekombinatoren am Ende der Simulation (7000 s). Entlang der vertikalen Betonwände findet durch Dampf-Kondensation eine partielle Trocknung und Kühlung des H<sub>2</sub>-Luft-Dampfgemischs statt, das schwerer als die umgebende Atmosphäre wird und nach unten absinkt. Auf dem Betriebsdeck sammelt sich somit Wasserstoff an. Eine weitere Wasserstoffwolke mit der gleichen Konzentration (> 4.1 vol% H<sub>2</sub>) ist auch oben um den quellseitigen Dampferzeugerturm herum zu diesem Zeitpunkt noch erkennbar. Andere Daten der Rechnung zeigen, dass diese Wolke kontinuierlich abgebaut wird.

In dem hier modellierten Rekombinatorkonzept sind große Reko-Einheiten oben auf dem Rundlaufkran konzentriert. Ihre Abgase führen zur Ausbildung einer heißen Gasschicht in der Kuppel des Containments (> 650 K) und einer stabilen Stratifikation. Bei einer gleichmäßigeren Verteilung der Rekombinatoren könnten solche Heißstellen vermieden werden.

Die berechneten H<sub>2</sub>-Inventare und die integrale Abbauleistung aller 44 NIS-Rekombinatoren sind in Abb. 10.3.4 dargestellt. Neben den GASFLOW-Ergebnissen sind auch die mit dem Lumped-Parameter Programm WAVCO berechneten Werte dargestellt. Beide Programme zeigen recht ähnliche Resultate. Wegen der großen thermischen Trägheit der NIS-Rekombinatoren (Zeitkonstante von etwa 0.5 h) steigt die integrale H<sub>2</sub>-Abbauleistung nur langsam und erreicht bei 2000 s knapp 40 gH<sub>2</sub>/s.

Insgesamt werden mit dem modellierten Reko-Konzept in der analysierten Zeit etwa 20% des freigesetzten Wasserstoffs abgebaut (110 von 531 kg).

Die blauen Kurven stammen aus einer GKN-Analyse die im Abschnitt 10.5. beschrieben wird. Interessant ist hier der Vergleich der Wirksamkeit der NIS-Rekombinatoren mit den in GKN eingesetzten Siemens-Rekombinatoren. Die Siemens-Rekombinatoren springen schnell an und bauen den Wasserstoff schon früh während der Freisetzung ab, so dass bei 7000 s mit 218 kg doppelt soviel  $H_2$  rekombiniert wurde wie mit den NIS-Rekombinatoren. (In beiden GASFLOW-Rechnungen wurde derselbe  $H_2$ -Quellterm von 531 kg benutzt). Neben der schnelleren Ansprechzeit besitzen die Siemens-Rekombinatoren auch den Vorteil einer merklich höheren Abbauleistung pro Modul als die NIS-Modelle. Andererseits führt die geringe Wärmekapazität des Siemens-Design dazu, dass schon bei relativ geringen  $H_2$ -Konzentrationen ( $> 7\%$   $H_2$  in trockener Luft) eine Selbstzündung ausgelöst werden kann.

#### 10.4 GKN-2 mit Siemens-Rekombinatoren und Stahlschale

Um das Risiko von frühem Containmentversagen durch Wasserstoffverbrennungsprozesse weiter zu senken, wurden in den bestehenden deutschen Anlagen passiv wirkende katalytische Rekombinatoren installiert. Die oben schon diskutierte Abb. 10.3.4 zeigt, dass diese Maßnahme zwar innerhalb von Stunden zu einer deutlichen Reduzierung des  $H_2$ -Inventars in der Anlage führt, dass aber die *frühe*  $H_2$ -Freisetzung nur wenig beeinflusst wird. Rekombinatoren sind wegen ihrer begrenzten Abbauleistung (einige g  $H_2$ /s pro Modul) nicht in der Lage die hohen Freisetzungsraten der frühen Kernzerstörungsphase (bis einige 1000 g  $H_2$ /s) nennenswert zu reduzieren [10.4].

In dieser Analyse wurde deshalb untersucht, ob die in deutschen KONVOI Anlagen bereits vorhandene 38 mm-Stahlschale eine ausreichende Stabilität gegen *frühe* Wasserstoffverbrennungsprozesse besitzen könnte. Falls dies der Fall wäre, könnte die Stahlschale zusammen mit katalytischen Rekombinatoren eine vollständige und passiv wirkende Schutzmaßnahme gegen  $H_2$ -induziertes Containmentversagen darstellen.

Als Unfallszenario wurde ein SB-LOCA mit verzögerter Entlastung des Sekundärkreislaufs gewählt, weil dieser langsam ablaufende Unfall zu großen, abdeckenden Wasserstoffmengen und relativ geringer Dampffreisetzung führt. Die Wasserstoff- und Dampfquellen wurden aus konservativen MAAP-Rechnungen ausgewählt (Abb. 10.4.1). Die Verteilung dieser Gase im GKN-2-Containment wurde mit GASFLOW berechnet. Das 3d Geometriemodell wurde aus horizontalen und vertikalen 2D-Schnitten aufgebaut und nach der Erstellung durch Anlagenpersonal überprüft. Abb. 10.4.2 zeigt das GKN-Geometriemodell und die zum Zeitpunkt der höchsten  $H_2$ -Freisetzungsrate (7950 s) berechnete Wasserstoffverteilung. Innerhalb der 15 vol%  $H_2$ -Isofläche ist die  $H_2$ -Konzentration größer als 15%, außerhalb dieser Isofläche ist sie kleiner als 15%. In diesem Szenario öffnen nur wenige Berstfolien auf den Dampferzeugertürmen, so dass der größte Teil des Wasserstoffs in den Anlagenräumen eingeschlossen bleibt. In der rechten Ansicht von Abb. 10.4.2 sind die Gebäudestrukturen entfernt um die  $H_2$ -Wolke in den Anlageräumen zu zeigen. Die Dampffreisetzung die der  $H_2$ -Einspeisung vorausgeht, hat zu einer recht homogenen stratifizierten Dampf Wolke im Dom geführt. Der hier unterstellte

konservative  $H_2$ -Quellterm führt zu detonationsfähigen  $H_2$ -Dampf-Luftmischungen in Teilen der Anlagenräume.

Als nächste konservative Annahme wurde die detonative Verbrennung dieser Gemischanteile angenommen. Abb. 10.4.3 zeigt die vereinfachte Übertragung der GASFLOW-Verteilungsergebnisse in das Detonationsprogramm DET3D. Der dunkel eingetragene Raumbereich enthält 40% Dampf mit stöchiometrischer  $H_2$ -Luft-Mischung bei 2.25 bar Ausgangsdruck und 403 K Anfangstemperatur. Die zylindrische  $H_2$ -Luft-Dampf-Mischung wurde konservativerweise in der linken unteren Ecke gezündet (Abb. 10.4.3 oben links). Die Detonationswelle erreicht Geschwindigkeiten um 1700 m/s und Spitzendrücke von etwa 18.6 bar (Chapman-Jouguet-Werte). Die resultierenden Drucklasten auf der Stahlschale sind in Abb. 10.4.4 dargestellt. Die typische Lastdauer liegt im 10-20 ms Bereich.

Der nächste Analyseschritt besteht in der Berechnung des Strukturverhaltens der Stahlschale unter dieser kurzzeitigen dynamischen Last. Dazu wurde die Stahlkugel mit einem aus 9000 Finite Elementen bestehenden Geometriemodell abgebildet (Abb. 10.4.5). Die mit ABAQUS berechneten maximalen Deformationen der Stahlschale sind in Abb. 10.4.6 dargestellt. Die größten Deformationen treten gegenüber dem ursprünglichen Zündpunkt der Detonation auf, sie liegen zwischen 20 und 40 cm. Abb. 10.4.7 zeigt die entsprechenden Membrandehnungen in der 38-mm-Stahlschale nach Aufnahme der hier unterstellten Detonationslast. Die maximalen Dehnungen erreichen 4.6% nahe der Einspannebene der Stahlkugel unterhalb der Materialschleuse.

Diese durchgehende Analyse hat insgesamt gezeigt, dass die Stahlschale von deutschen KONVOI-Anlagen erhebliche Sicherheitsreserven besitzt und sehr hohen gasdynamischen Lasten aus  $H_2$ -Verbrennungen standhalten kann. Die Strukturrechnungen für das untersuchte konservative Szenario ergaben zwar deutliche plastische Deformationen, die aber kein Versagen der (ungestörten) Schale erwarten lassen. Für abschließende genauere Aussagen müssen realistischere, d.h. weniger konservative Szenarien und lokale Effekte der Stahlschale untersucht werden.

## 10.5 GKN-2 Surge-Line LOCA

Die 3D GASFLOW Analyse eines Large Break LOCA in der Konvoi Anlage Neckarwestheim-2 berücksichtigt und untersucht die Wirksamkeit von verschiedenen Gegenmaßnahmen. Simuliert wurden zunächst 62 verschiedene Siemens Plattenrekombinatoren. Neue Rekombinatorkonzepte mit sog. Netzrekombinatoren, die vom FZ-Jülich entwickelt wurden, wurden in einer weiteren Studie fiktiv in diese Boxen eingebaut und vom Abbauverhalten bei diesem Unfall verglichen. Bei einem anderen untersuchten Rekombinatorkonzept wurden die thermisch isolierten Hauptkomponenten Pumpen, Dampferzeuger und Druckhalter in den Anlagenräumen mit einer katalytischen Folie beschichtet (THINCAT Konzept [10.5]). Schließlich wurde der gleiche Unfall auch mit einem dritten Mitigationskonzept analysiert, das alle Strukturen im Containment, insbesondere auch die Innenseite der Stahlkugel mit einer katalytischen Schicht gleichen Abbauverhaltens belegt (z.B. Farbe) und welches das großflächige Abbauverhalten bei diesem Unfall untersucht.

### 10.5.1. Siemens Platten- Rekos

Die 3D GASFLOW Analyse eines Large Break LOCA's in der Konvoi Anlage Neckarwestheim-2 berücksichtigt und untersucht die Wirksamkeit von Gegenmaßnahmen in Form von 62 katalytischen Siemens Plattenrekombinatoren, die an verschiedenen Stellen im Containment angebracht wurden. Jeder Rekombinator arbeitet dabei im 3D Feld mit der lokalen Konzentrations- und Temperaturverteilung aus GASFLOW. Abb 10.5.1 zeigt einen zentralen Längsschnitt durch das kartesische 3D GASFLOW Geometriemodell für Neckarwestheim-2 mit jeweils 56 Maschen in x und y Richtung und 40 axialen Maschen in z-Richtung. Die dünnen Linien zeigen das Maschennetz in dieser Ebene. Die äußere Containmentschale wird durch abgestufte Hindernisse (graue Zonen) dargestellt, die ganze Fluidzellen aus dem Maschennetz ausblenden. Einbauten wie Dampferzeuger und Trümmerschutzzylinder werden ebenfalls durch Hindernisse repräsentiert. Dünnere Strukturen werden als Wände simuliert. Wände werden auf den Maschengrenzen definiert, beanspruchen kein Fluidvolumen, blockieren aber die Strömung senkrecht zur Wand. Die Gasströmung wird dann in den freien vernetzten Gaszellen des 3D Modells simuliert. Die Quelle wird als Reservoir durch Wände abgetrennt. Das Reservoir enthält eine zeitabhängige Mischung aus Dampf, Wasser und Wasserstoff und speist diese Mischung axial in die benachbarten Fluidzellen, wobei der Gesamtmassenstrom als Randbedingung zeitlich vorgegeben und aus dem Quellterm bestimmt wird.

Die Rekombinatorboxen sind einzelne Zellen, die im 3D Maschennetz durch Wände abgetrennt werden. Sie sind unten und auf einer Seite offen, saugen Gas von unten entsprechend der lokalen Wasserstoffkonzentration an, rekombinieren den Wasserstoff in der betreffenden Zelle und blasen das heiße rekombinierte Dampf/Luftgemisch mit nur geringen Restmengen an Wasserstoff seitlich in die Containmentatmosphäre ab. Einige solcher Boxen sind in Abb. 10.5.1 nummeriert eingetragen. Die Box 21 liegt z.B. im Quellraum seitlich oberhalb der Quelle.

Die Ergebnisse der 3D GASFLOW Analyse wurden auch mit den Ergebnissen des Volumencodes RALOC [10.6] der GRS für das gleiche Szenario verglichen. Dazu wurden die 106 Kontrollvolumina aus RALOC im 3D Maschennetz von GASFLOW als Räume markiert. GASFLOW mittelt dann die 3D Konzentrations- und Temperaturwerte jedes Raums in festen Zeitintervallen und bestimmt dabei auch zu jedem Zeitpunkt die lokalen Peakwerte in jedem Raum. Die Raummittelwerte sind direkt mit den RALOC Ergebnissen vergleichbar. Die Abweichungen zwischen Peakwert im Raum, der von den Volumenmodellen nicht berechnet werden kann, und dem Raummittelwert sind wichtige Informationen, die die Notwendigkeit für die fein aufgelösten 3D Simulationen in GASFLOW aufzeigen. Die Kontrollvolumina sind in Abb. 10.5.1 mit unterschiedlichen Farben schraffiert und nummeriert. Raum 45 repräsentiert den Dombereich mit der Kuppel, Raum 8 den Quellraum.

Die zeitabhängige Leckrate des LB-LOCA mit Wasser, Dampf, Wasserstoff und gasförmigen Spaltprodukten wurde aus Simulationen der GRS mit dem Integralcode MELCOR übernommen (Abb. 10.5.2 links). In der zehnminütigen Blowdown Phase (oben) werden 462 to Wasser und 39 to Dampf eingespeist. Dampf und Wasser werden dabei schon bei der Einspeisung im thermodynamischen Gleichgewicht unter

Beibehaltung ihrer inneren Energie auf den Umgebungsdruck im Containment vorexpanziert. Bei diesem Flashing Prozess erhöht sich die eingespeiste Dampfmenge schon während der Einspeisung um weitere 50 to gegenüber dem Quellterm. Ab 700 sec wird nur noch überhitzter Dampf eingespeist. Die Wasserstoffeinspeisung beginnt nach 1400 sec, erreicht einen ersten Peak bei 3000 s in einer Phase mit reduzierter Dampfeinspeisung und hoher Quellgastemperatur von 1400 K. Durch den Kernabsturz kurz vor 6000 s kommt sehr viel Wasser mit heißem Corium in Kontakt. Die resultierende starke Zirkaloy Oxidation führt zu Spitzenraten der  $H_2$  Produktion von 2.8 kg/s. Kennzeichnend für den LB-LOCA ist das Auftreten hoher  $H_2$  Freisetzungsraten zusammen mit hohen Dampftraten. Der Wasserstoff im Quellgas ist dadurch stärker inertisiert und zündfähige Mischungen können erst in einiger Entfernung von der Quelle auftreten, wenn genügend Luft mit dem Quellgas vermischt ist. Insgesamt werden 531 kg  $H_2$  bei diesem Unfall freigesetzt. Die Freisetzung gasförmiger Spaltprodukte wird durch eine geringe Menge Xenon simuliert, das sich zusammen mit dem Wasserstoff im Containment ausbreitet und abhängig von der örtlichen Konzentration im Containment eine Spaltproduktwärmeleistung von bis zu 6 MW in der Atmosphäre freisetzt.

Die Massen- und Energiebilanz für diesen Unfall auf der rechten Seite von Abb. 10.5.2 zeigt wie sich der Dampfquellterm im Containment verteilt. Das mit dem Dampf eingebrachte Wasser wird zunächst als Nebel im Fluidfeld zusammen mit dem Dampf transportiert, dann aber rasch ausgerechnet mit einer Zeitkonstante, die ausreicht zum Aufbau von thermodynamischem Gleichgewicht zwischen Dampf und Nebel im verwendeten homogenen 2 Phasenmodell von GASFLOW. Das ausgerechnete Wasser wird bilanziert, wurde aber nicht im mechanistischen Sumpfmmodell von GASFLOW verwendet. Dampfkondensation auf den Strukturen baut insgesamt einen Film von über 100 to auf den Strukturen auf. Der Film wird als statisch simuliert. Er kann bei entsprechenden Druckänderungen auch verdampfen. Die Filmkondensation liefert den größten Energieeintrag in die Strukturen, wobei die meiste Energie von den Betoneinbauten absorbiert wird. Die Stahlschale wird bei dieser Simulation nur durch Konvektion gekühlt und speichert relativ wenig Energie. Analysen mit dem Strahlungstransportmodell von GASFLOW zeigen wesentlich höhere Energieeinträge in den Beton und dadurch etwa 0.5 bar geringere Containmentdrücke am Ende.

Die Druckwelle durch den Blowdown Vorgang zerstört einen großen Teil der Berstfolien, die die Dampferzeugertürme oben verschließen. Durch die kürzeren Laufzeiten der Druckwellen versagen mehr Folien im quellseitigen Dampferzeugerturm (Abb. 10.5.3 oben). Gleichzeitig gehen auch die meisten der Klappen im unteren Teile des Trümmerschutzzylinders auf. Die unterschiedliche Strukturwärmerung in den quellseitigen und quellfernen Dampferzeugertürmen erzeugt einen Kamineffekt, der heiße Gase quellseitig aufsteigen läßt und die Schleife durch kältere Gaseinströmung von oben in die quellfernen Dampferzeugertürme schließt. Weitere Konvektionsströme entstehen durch das kalte Gas, das entlang der Kugelschale nach unten fließt und durch die Klappen unten im sog. Rohrkanal wieder in die Anlagenräume kommt. Dieses Gas hat einen hohen Luftanteil und verringert damit die Dampf inertisierung der Anlagenräume.

Die Wasserstofffreisetzung bildet einen Strahl mit hoher Konzentration, der sich wie ein Finger durch den quellseitigen Dampferzeugerturm bis in die Kuppel erstreckt. Die Wasserstoffkonzentration im Domraum 45 erreicht dabei lokal Spitzenwerte von über 12 Vol% und ist zündfähig (Abb. 10.5.4). Die raumgemittelte Wasserstoffkonzentration im Dom erreicht dagegen nur 6%. Diese Heterogenitäten können mit dem Volumencode RALOC nicht aufgelöst werden und zeigen die Notwendigkeit für 3D Analysen auf. RALOC berechnet zwar nach einiger Zeit ähnliche gemittelte Konzentrationen wie GASFLOW, kann aber die Heterogenitäten, die in der dynamischen Freisetzungsphase von Wasserstoff auftreten, nicht konservativ beschreiben. Am Punkt größter Sensitivität zeigt die RALOC Analyse keine zündfähigen Gemische im Dom.

Der Wasserstoffdurchbruch bis zum Dom im Augenblick der höchsten  $H_2$  Freisetzung zum Zeitpunkt 5932 s ist in Abb. 10.5.5 dargestellt. Der rote Finger mit der Isofläche für 10 Vol%  $H_2$  durchdringt die geöffneten Berstfolien im quellseitigen Dampferzeugerturm und wird entlang der Stahlkugel umgelenkt, wie die Bildsequenz unten andeutet. Eine starke Dampfspülung aus der Quelle nach der Wasserstofffreisetzung bei 6000 s reißt diese Wolke auf und führt danach zu einer raschen Verdünnung der nur temporär sensitiven Wasserstoffwolke.

Von den insgesamt freigesetzten 531 kg Wasserstoff sind am Ende der Analyse bei 7000 s etwa 40% rekombiniert. Die Rekombinatoren bringen in der dynamischen Freisetzungsphase nur einen relativ kleinen Abbau. Das Anordnungskonzept der Rekombinatoren ist ausgewogen und zeigt integral gleiche Abbaumengen in den quellseitigen und quellfernen Anlagenräumen. Das meiste Gas wird langfristig abgebaut, die lokal hohen Belastungen auf der Quellseite sind nur temporär. Sie sind aber wichtig zur Beurteilung des Zündpotentials der Rekos, das fast alle Rekombinatoren nahe der Quelle überschreiten. Die Abbaumengen der verschiedenen Rekombinatoren sind in Abb. 10.5.7 dargestellt. Die großen Boxen FR90-1500 bauen alle etwa 7-8kg Wasserstoff ab. Im Dombereich sind die Abbaumengen durch die Wasserstoffstratifikation im Kranbereich etwas höher. Die mittleren und kleinen Boxen FR90-960 und FR90-320 in den Anlagenräumen bauen weniger ab, sind z.T. aber durch ihre Nähe zur Quelle besonders stark mit Wasserstoff beaufschlagt und haben dann ein höheres Potenzial zur Selbstzündung. Einige Rekombinatoren insbesondere unten im Rohrkanal sehen überhaupt keinen Wasserstoff.

Die Abbauraten des Wasserstoffs aus GASFLOW sind zeitweise höher als die der RALOC Analysen (Abb. 10.5.8). Durch die homogene Wasserstoffverteilung innerhalb der einzelnen Kontrollvolumina von RALOC beginnt die Rekombination zeitlich früher als im GASFLOW Programm, das die Rekombination mit den lokalen Konzentrationen simuliert. Die Boxen springen in der GASFLOW Simulation später an als in RALOC bringen aber durch die z.T. hohen  $H_2$  Konzentrationen gerade während der Freisetzungsphase höhere Rekombinationsraten. Integral ergeben sich aber keine großen Unterschiede im Wasserstoffabbau.

### **10.5.2. Jülich Netz Rekos**

Im FZ-Jülich wurde die Wirksamkeit von katalytisch beschichteten Netzen in durchströmten Boxanordnungen untersucht. Die dafür entwickelte Anlage Reko-3 ist

in Abb. 10.5.9 dargestellt, die auch die gemessenen Kennlinien mit denen der anderen Rekombinatorboxen vergleicht. Die Meßdaten mit den Netzrekombinatoren erstrecken sich über einen Konzentrationsbereich von 5% bis 25% Wasserstoff und zeigen eine katalytische Wirksamkeit ohne Selbstzündung auch bei relativ hohen Wasserstoffkonzentrationen. Die Plattenrekombinatoren von Siemens neigen dagegen auch in dampfhaltigen Atmosphären oberhalb von 10 Vol% H<sub>2</sub> zur Selbstzündung. Die Kennlinie der Netzrekombinatoren zeigt Wasserstoffabbau schon bei geringen Konzentrationen ähnlich wie die NIS Granulat Rekombinatoren, während die Plattenrekombinatoren vom Siemens Typ erst oberhalb eines Schwellwertes von 4% mit dem Wasserstoffabbau beginnen. Die Kennlinie der Plattenrekombinatoren knickt bei 8% Wasserstoff ab. Bei den Netzrekombinatoren wächst die Abbaurate kontinuierlich mit der Wasserstoffkonzentration, aber es kommt auch zu einer Verringerung der Effizienz, dh. ein Teil des angesaugten Wasserstoffs durchläuft das Netz ohne zu rekombinieren. Die Netzrekombinatoren aus Jülich wurden bisher nur unter Zwangskonvektion (1m /s) getestet. Mit der Kennlinie aus Abb. 10.5.9 wurde eine GASFLOW Simulation durchgeführt, in der die Platten der 62 Siemens Boxen durch Netze mit der gemessenen Kennlinie ersetzt werden. Den Boxgrößen entsprechend wurden verschiedene Abbaukapazitäten unterstellt. Die Untersuchung ist rein parametrisch, denn bisher gibt es keine Experimente, mit denen solche Netzrekombinatoren in der Geometrie der Siemens Boxen bei Naturkonvektion getestet wurden. Die Netzrekombinatoren, die Wasserstoff auch oberhalb von 8% weiter abbauen, können bei Peakbelastung mit bis zu 20% höheren Raten abbauen. Integral über den gesamten analysierten Unfallablauf rekombinieren sie aber nur unwesentlich mehr Wasserstoff als die Plattenrekos, wie das etwas niedrigere Wasserstoffinventar in Abb. 10.5.10 zeigt.

### **10.5.3. Thincat Folien**

Das THINCAT Projekt, das im Rahmen des 5. EU Rahmenprogramms gefördert wurde [10.5], betrachtet ein neues Konzept für Maßnahmen zum Wasserstoffabbau. Es untersucht die Abbauwirkung von katalytisch beschichteten Folien, die auf der thermischen Isolation der Hauptkomponenten (Pumpen, Dampferzeuger, Primärleitungen und Druckhalter) in den Anlagenräumen des Containments in Kassettenform angebracht werden. Diese Kassetten lassen sich leicht entfernen und auch in ihrer Langzeitwirkung überprüfen. Sie können anstelle oder zur Ergänzung der bisher eingesetzten Boxrekombinatoren verwendet werden, die sich wegen des begrenzten Raums in den Anlagenräumen oft nur schwer anbringen lassen. Der Einsatz solcher Rekombinatorfolien wurde schon früher im Rahmen des HDR Testprogramms E11.8.1 untersucht [10.7]. GASFLOW wurde um ein Modell zur Simulation von Folienrekombinatoren erweitert [10.8]. Markierte Strukturen werden dabei katalytisch wirksam, entziehen den Wasserstoff und entsprechende Mengen Sauerstoff aus den benachbarten Fluidzellen und rekombinieren ihn zu Wasserdampf. Die Rekombinationsenergie wird in einer dünnen Materialschicht auf der Strukturoberfläche freigesetzt, und der heiße Wasserdampf wird mit der Oberflächentemperatur der Struktur wieder in den Fluidnode eingespeist. Wärmeleitung in die Struktur und konvektive Kühlung, außerdem Kühlung durch Strahlungstransport bestimmen die Oberflächentemperatur dieser katalytisch wirksamen Strukturen. Das Modell konnte ein entsprechendes Folienexperiment, das im HDR Test E11.8.1 durchgeführt wurde, erfolgreich nachrechnen und dabei auch die gemessenen Oberflächentemperaturen gut darstellen [10.7].

Mit diesem Modell wurde die Wirksamkeit solcher katalytischer Beschichtungen der Hauptkomponenten in einem LB-LOCA untersucht und mit der Wirkung der Siemens Boxen verglichen. Beschichtet wurden alle Hauptkomponenten (Gesamtfläche 1734 m<sup>2</sup>). Diese katalytische Beschichtung führt zu einer signifikanten Erhöhung des Wasserstoffabbaus gegenüber den Boxrekombinatoren und reduziert das Wasserstoffinventar um weitere 10% (Abb. 10.5.10). Sie kann aber die temporäre Ansammlung von Wasserstoff im Dom nicht verhindern. Der freigesetzte Wasserstoff steigt im quellseitigen Dampferzeugerturm auf. Er bildet kurzzeitig den roten Finger (Abb. 10.5.11), der sich bis in den Dombereich hinein erstreckt. Ähnlich wie in Abb. 10.5.6 wird der Wasserstoff dort umgelenkt, vermischt sich mit der stratifizierten Atmosphäre in der gelben Wolke und kommt erst längerfristig durch die sich ausbildenden Konvektionspfade bei der Dampfkondensation in die Anlagenräume zurück. Die katalytisch beschichteten Hauptkomponenten sind rechts im Bild dargestellt und nach ihrer Oberflächentemperatur zum Zeitpunkt der Momentaufnahme im Maximum der H<sub>2</sub> Freisetzung bei 5932 s eingefärbt. Die Folien auf dem Isolatormaterial werden nur durch Strahlung und Konvektion gekühlt und erreichen recht hohe Temperaturen nahe der Quelle. Der Hotspot mit 1100K liegt weit über der Selbstentzündungstemperatur. Die Rückströmung des Wasserstoffs in die Anlagenräume wird stark durch den Kamineffekt beeinflusst, der sich in der Blowdown Phase aufgrund der unterschiedlichen Strukturbeheizung und aufgrund des Auftriebs von den heißen katalytischen Oberflächen im quellseitigen Dampferzeugerturm aufbaut. Die Rückströmung in die quellfernen Dampferzeugertürme ist dadurch und durch die Auftriebswirkung an den katalytisch beschichteten Folien behindert, so daß die Folien in den quellfernen Bereichen nur in abgeschwächter Form wirksam werden können. Der katalytische Rekombinationseffekt an den beschichteten Strukturen sollte auch in einer global aufgeprägten Abwärtsströmung genauer untersucht werden.

#### **10.5.4. Katalytische Oberflächen**

Die Anbringung der Folien auf dem Isolationsmaterial der Hauptkomponenten beim THINCAT Konzept führt lokal zu sehr hohen Oberflächentemperaturen. Die katalytische Beschichtung von Strukturen mit hoher Wärmekapazität wie z.B. Beton oder die Stahlkugelschale, die rückseitig durch Strahlung und Konvektion von der äußeren Betonschale gekühlt wird, könnte diese Temperaturen begrenzen. Eine zusätzlich durchgeführte parametrische Untersuchung mit dem katalytischen Folienmodell unterstellt daher die katalytische Beschichtung aller Strukturflächen im Containment. Der Gedanke war dabei das Erzielen einer katalytischen Wirkung durch besondere Farbanstriche, die zur Zeit aber nicht auf dem Markt sind. Eine solche katalytische Plattierung von insgesamt 39,000 m<sup>2</sup> Strukturfläche könnte das Wasserstoffinventar sehr viel rascher verringern bei diesem LB-Loca (Abb. 10.5.10). Ein besonders starker Abbau erfolgt dabei auf der katalytisch beschichteten Stahlkugel (Abb. 10.5.12), wobei die Oberflächentemperatur mit Maximalwerten von 408 K maximal nur 30 Grad höher werden als in den unteren Kugelbereichen. Die Hotspottemperatur der inneren Betoneinbauten nahe der Quelle erreicht in diesem Fall nur noch 670 K und bleibt weit unter der Selbstzündtemperatur von 850 K.

#### **10.6 GKN-2 Small Break Loca mit Siemens Rekombinatoren**

In Ergänzung zum Szenario mit dem großen Leck wurde auch ein Szenario mit kleinem Leck (Small Break LOCA = SBLOCA) für die Konvoi Anlage Neckarwestheim-2 mit dem gleichen GASFLOW Geometriemodell untersucht. Als Gegenmaßnahmen wurden die gleichen 62 Siemensplattenrekombinatoren

einbezogen wie in der LB-LOCA Simulation. Abb. 10.6.1 zeigt das Geometriemodell für die Anlage und gibt rechts auch die Lage der Rekombinatoren im 3D Maschennetz wieder. Die äußere Kühlung der Stahlkugel wird in dieser Analyse mit einem verbesserten Modell beschrieben. Der Luftspalt zwischen der Stahlschale und der Betonschale wird durch 4 zusätzliche Zellen genauer dargestellt. Die äußere Kühlung der Stahlschale erfolgt durch Konvektion und durch Strahlung zur Betonschale. Das neue GASFLOW Strahlungstransportmodell mit einer P1 Approximation für die winkel- und ortsabhängige Strahlungsintensität wird verwendet. Die Einspeisung erfolgt unten im heißen Strang und wurde an der gleichen Stelle wie beim LB-LOCA angenommen. Ihre Position ist rechts in Abb. 10.6.1 eingezeichnet.

Der hypothetische SB-LOCA hat eine wesentlich höhere Eintrittswahrscheinlichkeit als der LB-LOCA. Bei diesem Unfall ist die Zeitachse stark gestreckt. Die untersuchte Problemzeit ist 30.000 sec, die integrale Wasserstoffmenge ist fast 50% höher. Wasserstoff wird mit wesentlich niedrigeren Raten als beim LB-LOCA, dann aber in eine dampfärmere Atmosphäre freigesetzt. Der Quellterm für diese Analyse wurde aus GRS Analysen dieses Unfalls mit dem Integralcode Melcor 1.8.3 übernommen [10.9] und ist in Abb. 10.6.2 dargestellt. Bei dem kleinen Leck (unterstellt wurden  $50 \text{ cm}^2$ ) verlängert sich die Blowdownzeit auf fast 14.000 s und die Dampftraten sind wesentlich niedriger. Eine weitere Verringerung der Dampf freisetzung erfolgt durch den Abkühleffekt im Kern beim zusätzlich pessimistisch unterstellten sekundärseitigen Abfahren der Dampferzeuger. Die Wasserstoff freisetzung beginnt nach 16.000 s, hat verschiedene Pulse mit Spitzenraten bis  $0.4 \text{ kg/s}$  und gegen Ende der Analyse den höchsten Peak durch eine verstärkte Oxidationsrate nach dem Kernabsturz. Der Wasserstoff kommt zusammen mit einem stark überhitzten Dampf und einer Quellgastemperatur von  $1200 \text{ K}$ . Gasförmige Spaltprodukte werden in einem Xenon Quellterm zusammengefaßt, der sich mit dem anderen Gas im Containment verteilt und bis zu  $4 \text{ MW}$  Wärmeleistung in die Atmosphäre einbringt. Betrachtet wurde nur die In-Vessel Phase des Unfalls bis zum Versagen der Kernabstützung.

Bei den niedrigen Einspeiseraten des SB-LOCA steigt der Druck im Containment homogen an. Die drei schwächsten Berstfolien in den beiden Dampferzeugertürmen versagen symmetrisch bei einem Überdruck von  $24 \text{ mbar}$  (Abb.10.6.3). In jedem Turm wurde die gleiche statistische Verteilung der Versagensschwelen der Berstfolien zwischen  $24$  und  $50 \text{ mbar}$  angenommen. Das Versagen dieser wenigen Folien bringt rasch Druckausgleich und verhindert das Versagen weiterer Folien bzw. Berstklappen. Abb. 10.6.3 zeigt die Entlastungsöffnungen in den beiden Dampferzeugertürmen von je  $3.8 \text{ m}^2$ . Alle unteren Entlastungsklappen im Rohrkanal bleiben zu. Die Abtrennung der Anlagenräume mit den Pumpen, Dampferzeugern und dem Druckhalter innerhalb des Trümmerschutzzylinders durch Berstfolien und Bestklappen ermöglicht den freien Zugang zu den Betriebsräumen des äußeren Containments während des Reaktorbetriebs. Die Zweiraum-Aufspaltung des Containments in einen äußeren Bereich und einen davon weitgehend abgetrennten inneren Raumbereich mit der Bruchzone kann beim SB-LOCA zu einer temporären Wasserstoffansammlung führen, wenn bei einem milden Blowdown zu wenig Öffnungen geschaffen werden. Mit den symmetrischen Öffnungen, die sich durch die Anordnung der Berstfolien in beiden Dampferzeugertürmen ergeben, entsteht schon während der milden Blowdownphase eine Konvektionsschleife, die durch den Kamineffekt des quellseitig stärker aufgeheizten Dampferzeugerturms eine klar

definierte Strömungsrichtung hat. Dampf strömt im Uhrzeigersinn nach oben. Die Konvektionsschleife schließt sich durch die Luft, die im quellfernen Dampferzeugerturm nach unten strömt. Die Geschwindigkeitsvektoren in Abb. 10.6.3 verdeutlichen diese Schleife.

Der Konvektionsstrom ist jedoch relativ langsam und kann temporäre Wasserstoffansammlungen in den einzelnen Spitzen der Wasserstofffreisetzung (Abb. 10.6.2) nicht schnell genug abbauen. Unter dem Dach des quellseitigen Dampferzeugerturmes sammeln sich dabei temporär zündfähige Wasserstoffbereiche an. Die grünen Wolken in Abb. 10.6.4 zeigen diese zündfähigen Bereiche im ersten Freisetzungspuls bei 20.458 s. Das Gas ist sehr heiß, und auch wegen der hoch belasteten Rekombinatoren in diesem Bereich kann man von einer frühen Selbstzündung des Gemischs ausgehen, durch die die meisten Folien öffnen werden und weitere Ansammlungen sensitiver Gemische nicht mehr entstehen können. Das wurde bei diesen konservativen Untersuchungen jedoch nicht weiter berücksichtigt. Die Wasserstoffwolke breitet sich während des Freisetzungspulses auch in den quellfernen Turm aus. Die transparente rote Wolke im rechten Teil der Abb. 10.6.4 ohne die Strukturen zeigt jedoch viel niedrigere Konzentrationen in diesem Bereich. Der Wasserstoff fließt vom quellseitigen Turm rasch zum Dom zu ab und bildet den transparenten schmalen roten Finger über den geöffneten Berstfolien. Der relativ hohe Dampfgehalt der Wasserstoffquelle hat auch beim SB-LOCA einen gewissen Intertisierungseffekt im quellseitigen Dampferzeugerturm, die Lufteinbringung durch die Saugstrahlwirkung des aufsteigenden Quellgases wäre bei offenen Klappen unten im Rohrkanal höher und könnte in Verbindung mit einem geringeren Dampfgehalt der Quelle noch sensitivere Mischungen im Bruchraum erzeugen.

Die maximale lokale Wasserstoffkonzentration im Bruchraum (Raum 8) erreicht einen Spitzenwert von 22% im letzten Freisetzungspuls bei 27.000 s. Abb. 10.6.5 zeigt oben den lokalen Spitzenwert dieses Raums (rot) zusammen mit der gemittelten  $H_2$ -Konzentration (schwarz). Die mittlere Raumkonzentration erreicht nur 8% im letzten Freisetzungspuls. Das gleiche Szenario wurde auch mit dem Volumencode RALOC der GRS mit einer etwas feineren Quellraumdefinition simuliert. Auch die Raumkonzentrationen der RALOC Analysen können die lokalen Heterogenitäten im Quellraum nicht konservativ abdecken. Das Kriterium für Flammenbeschleunigung  $s/crit=1$  wird kurzzeitig mit Spitzentemperaturen im Gas oberhalb der Grenze zur Selbstzündung überschritten. Dreidimensionale Untersuchungen sind daher auch beim SB-LOCA für eine konservative Auswertung der Wasserstoffansammlungen erforderlich. Wegen des hohen Dampfgehalts im letzten Freisetzungspuls beim Kernabsturz wird das mechanische Belastungspotenzial der Wasserstoffverbrennung trotz der kurzzeitigen Überschreitung des Kriteriums für Flammenbeschleunigung nicht sehr hoch sein. Das zeigen die Verbrennungsanalysen für ähnlich sensitive Mischungen, die mit dem COM3D Programm für den EPR durchgeführt wurden.

Bei der Wasserstoffverteilung am Ende zeigt die GASFLOW Analyse ein zunächst unerwartetes aber plausibles Ergebnis. Wasserstoff stratifiziert immer nur temporär zusammen mit dem freigesetzten Dampf. Bei der Dampfkondensation an den Strukturen bildet sich lokal ein schwereres Luft-Wasserstoffgemisch, das in einer

Sekundärströmung entlang der kondensierenden Wände nach unten sinkt. Dadurch gelangt Wasserstoff nach unten, wobei sich der Volumenanteil durch die weitere Dampfkondensation auf dem Weg nach unten noch erhöhen kann. Der sog. Kondensations-Sedimentationseffekt, den GASFLOW berechnet, tritt langfristig in gleicher Weise beim LB-LOCA auf. Der Endzustand der Analyse bei 30.000 s, der in Abb. 10.6.6 dargestellt ist, zeigt solche Wasserstoffansammlungen im unteren Containmentbereich und oben im Betriebsraum zwischen den Dampferzeugertürmen. Die Dampfstratifikation im Dombereich bleibt dabei lange Zeit stabil und wird zusätzlich durch die gelb eingetragenen heißen Abgaswolken der Rekombinatoren ( $T > 490\text{K}$ ) aufrechterhalten.

Die Abbauraten der simulierten 62 Plattenrekombinatoren sind beim SB-LOCA und LB-LOCA vergleichbar hoch. Abb. 10.6.7 vergleicht die Abbauraten und die Wasserstoffinventare der beiden analysierten Szenarien. Nur aufgrund des größeren Analysezeitraums von 10.000 s nach der Wasserstofffreisetzung wird integral bei der SB-LOCA Analyse mehr Wasserstoff abgebaut. Am Ende sind 70% des freigesetzten Wasserstoffs von 670 kg rekombiniert. In beiden Analysen wird innerhalb des Analysezeitraums genügend Wasserstoff abgebaut, um die Entstehung von zündfähigen Gemischen durch die fortschreitende Dampfkondensation ausschließen zu können. Der Einbau der Rekombinatoren vermindert also das Risiko durch die Wasserstofffreisetzung beträchtlich. Wegen der Besonderheit des SB-LOCA in den Konvoi Anlagen mit den durch Berstscheiben/Klappen getrennten Anlagen- und Betriebsräumen und dem Potenzial zu lokalen Wasserstoffansammlungen könnten zusätzliche Accident Management Maßnahmen getroffen werden, etwa das aktive Öffnen kritischer Berstscheiben, die ungünstige exzentrische Ansammlungen sensitiver Gemische gänzlich ausschließen würden.

## Referenzen

- [10.1] P. Royl, C. Müller, J. R. Travis, T. Wilson, "Validation of GASFLOW for Analysis of Steam/Hydrogen Transport and Combustion Processes in Nuclear Reactor Containments," Procs 13th Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology, August 13-18, 1995 Porto Alegre, RS, Brazil HDR T31.5, FPT0
- [10.2] W. Breitung, P. Royl, J.R. Travis, H. Wilkening, "Analysen zur Wasserstoff-Verteilung"; Rechenprogramm GASFLOW zur Ermittlung der Wasserstoff-Verteilung in DWR-Anlagen, Jahrestagung Kerntechnik 96, atw 41.Jg. (1996) Heft 6-Juni
- [10.3] P. Royl, H. Rochholz, G. Necker, J.R. Travis; "GASFLOW Analysen zur Wirksamkeit eines Rekombinatorkonzepts bei einem postulierten Surge-line LOCA im Kernkraftwerk Biblis A "; Bericht an die Technische Vereinigung der Großkraftwerksbetreiber e.V. Essen, IRS Bericht 3/99
- [10.4] R. Krieg, B. Dolensky, B. Göller, W. Breitung, R. Redlinger, P. Royl; "Assessment of the Load-Carrying Capacities of a Spherical Pressurized Water Reactor Steel Containment under a Postulated Hydrogen Detonation", Nuclear Technology, Vol. 141, Feb. 2003
- [10.5] Fischer, K., Broeckerhoff, P., Ahlers, G., Gustavsson, V., Herranz, L., Polo, J. Dominguez, T., Royl, P.: "Hydrogen removal from LWR containments by catalytic-coated thermal insulation elements (THINCAT)", Nuclear Engineering and Design 221 (2003), 137-149
- [10.6] GRS Handouts RALOC-MOD4 Rechnungen zum ND-Fall (Abriß der Surge-Line an der Einbindung zur Hauptkühlmittelleitung, In-Vessel Phase 0-7000 s ohne/mit Rekos, Sitzungsunterlagen Diskussion mit GRS am 5. Mai 1998 in Karlsruhe
- [10.7] P. Royl, G. Necker, J. R. Travis: GASFLOW Simulation of Hydrogen Recombination with Radiation Transport from Catalytic Foils in the Recombiner Foil Test HDR E11.8.1, Procs Jahrestagung Kerntechnik, Dresden, May 15-17, 2001, Germany
- [10.8] Royl, P., Travis, J. R., Breitung, W.: "Modeling of Catalytic Foils and Application in 3D Containment Analysis, Procs. of IAEA Technical Committee meeting, Cologne, 18-22 June 2001, Report IAEA-J4-TC-1181
- [10.9] Sonnenkalb: "Unfallanalysen für DWR mit dem Integralcode Melcor 1.8.3", GRS-A-2579, Juni 1998

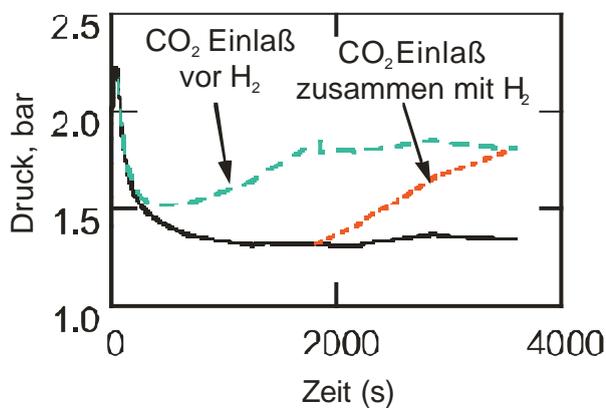
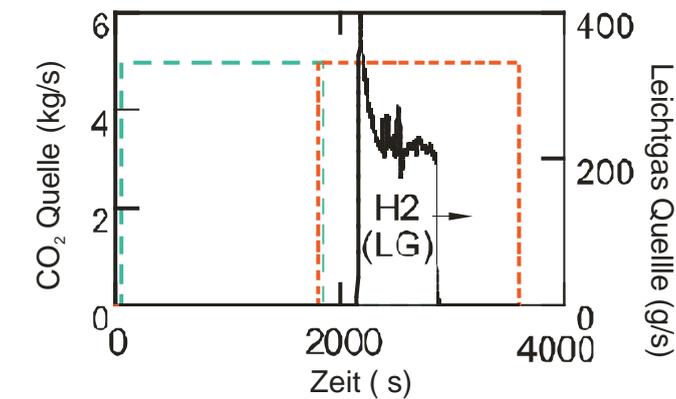
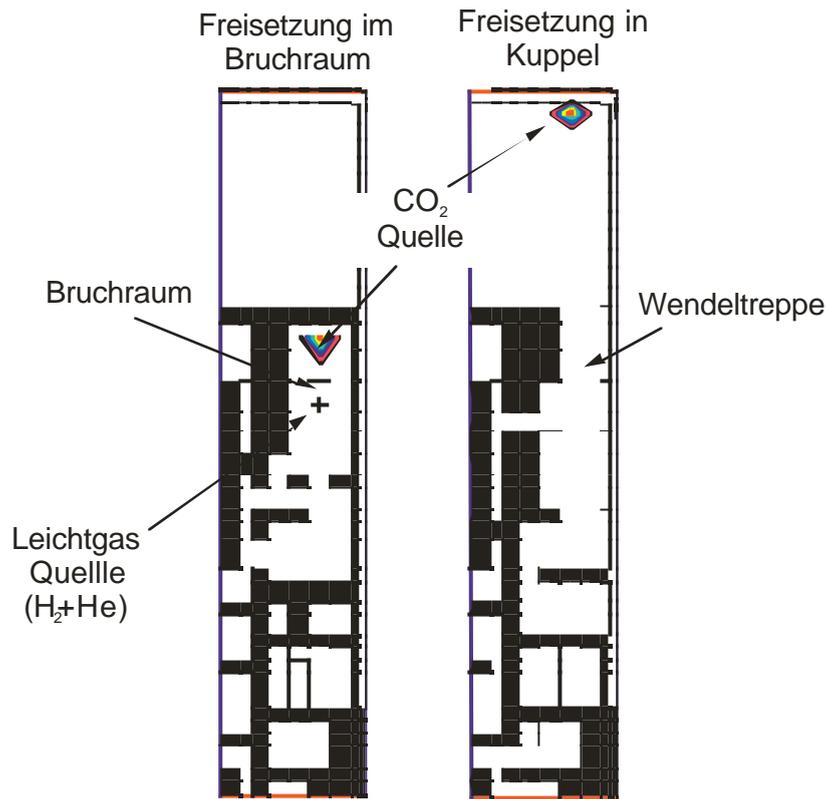
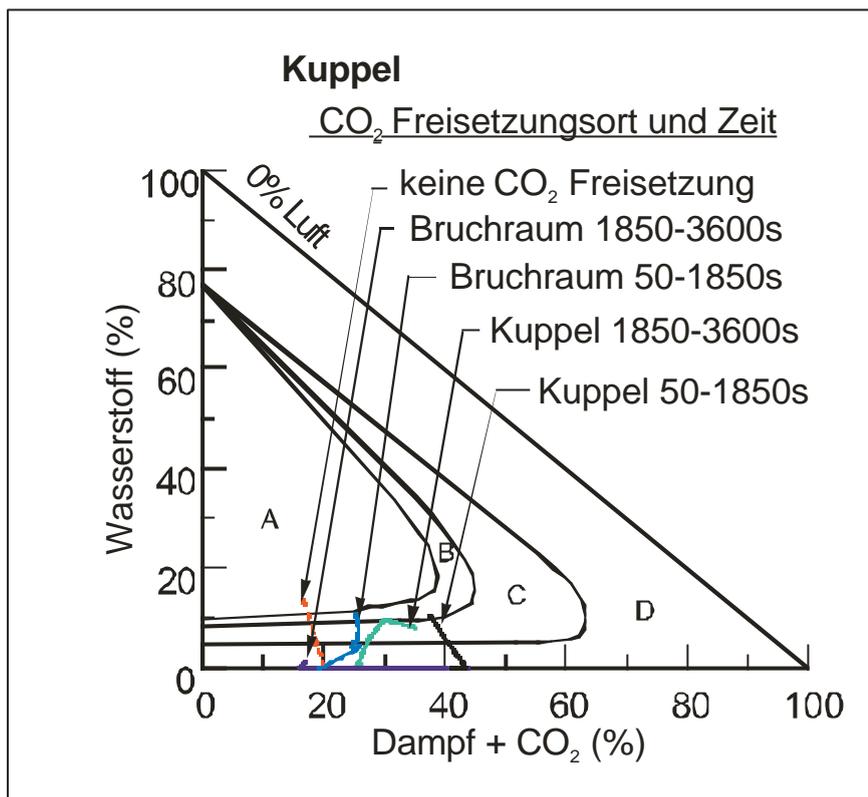


Abb.10.1.1: CO<sub>2</sub>-Einspeisung als Wasserstoff-Gegenmaßnahme für HDR, Bedingungen wie HDR-Versuch T31.5. Das CO<sub>2</sub> wurde in den GASFLOW Simulationen zu zwei verschiedenen Zeiten und an zwei verschiedenen Orten im Sicherheitsbehälter freigesetzt (insgesamt 9 Tonnen).



Bereich:
A: Detonation
B: Schnelle turbulente Flamme
C: Langsame Deflagration
D: Inert

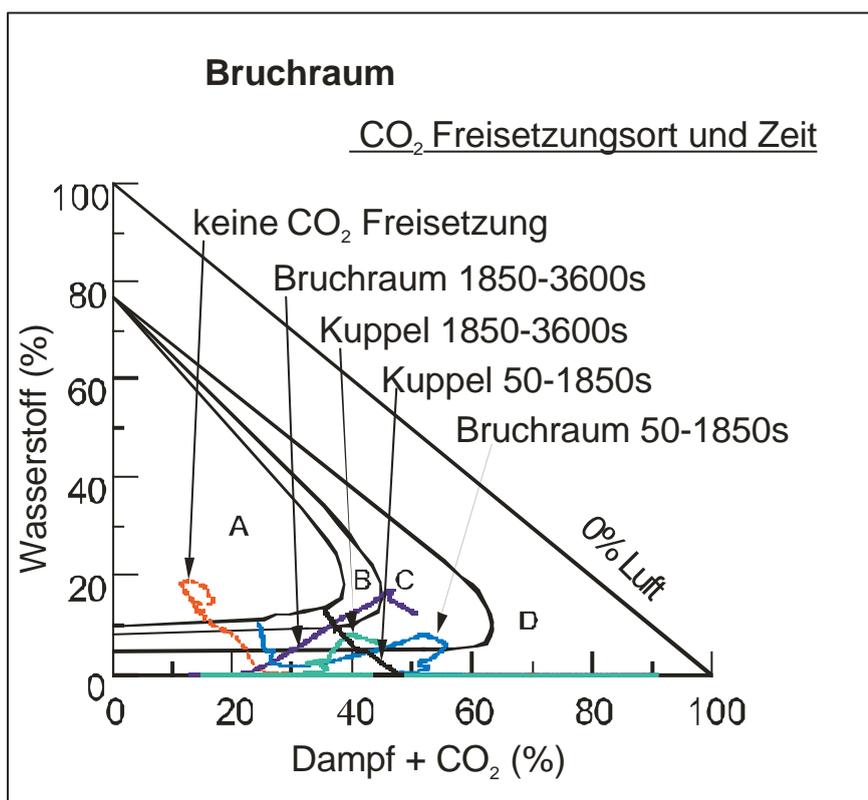


Abb.10.1.2: Entwicklung der mit GASFLOW berechneten mittleren Gemischzusammensetzung in der Kuppel des HDR und im Bruchraum für verschiedene CO<sub>2</sub>- Freisetzungsszenarien. Ohne CO<sub>2</sub> Einspeisung würden sich detonationsfähige Gemische bilden, mit CO<sub>2</sub> werden diese vermieden. Am wirkungsvollsten ist die späte CO<sub>2</sub>- Einspeisung, gemeinsam mit der H<sub>2</sub>- Freisetzung am Bruchort.

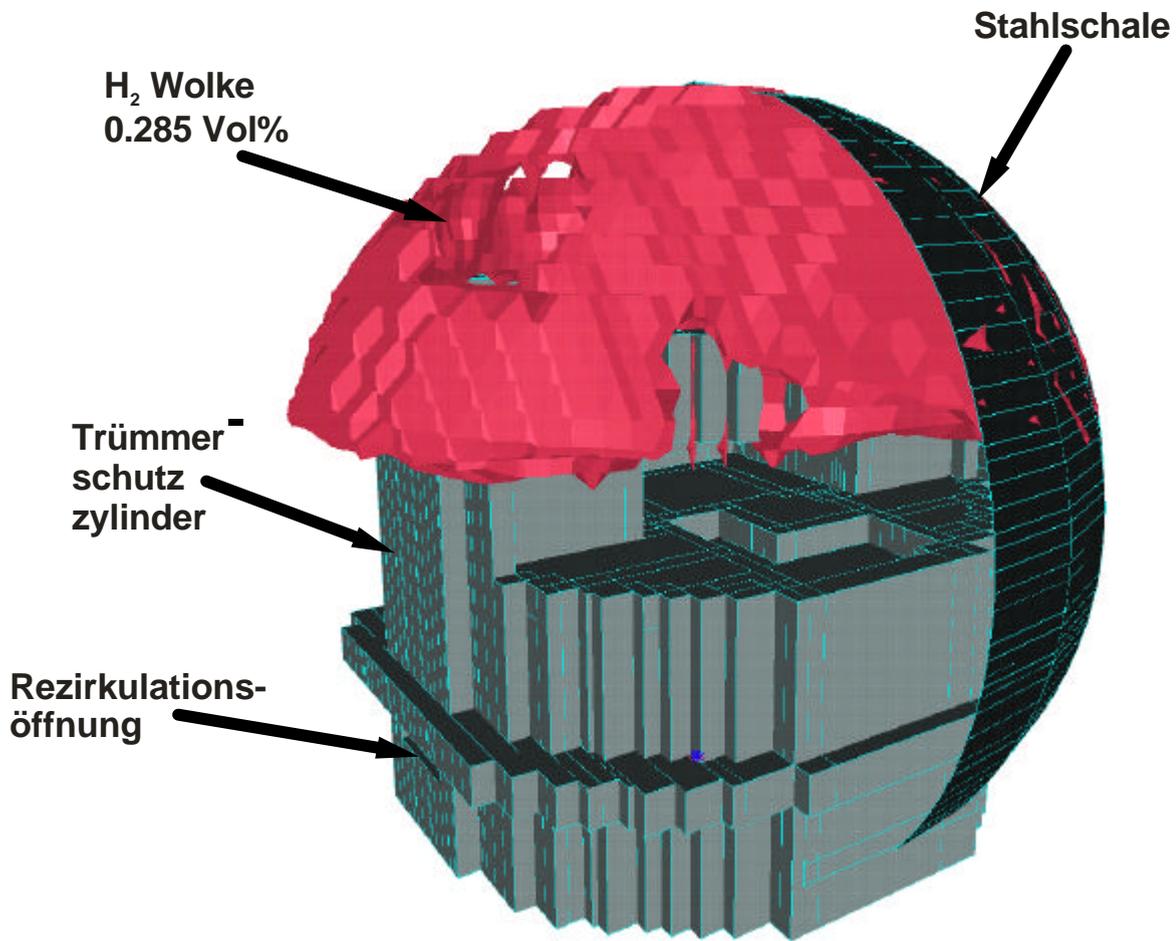


Abb.10.2.1: BIBLIS –A Containmentmodell zur Simulation eines Auslegungsstörfalls mit 15 kg H<sub>2</sub> Freisetzung. Im Dom bildet sich anfangs eine stabile H<sub>2</sub>-Stratifikation.

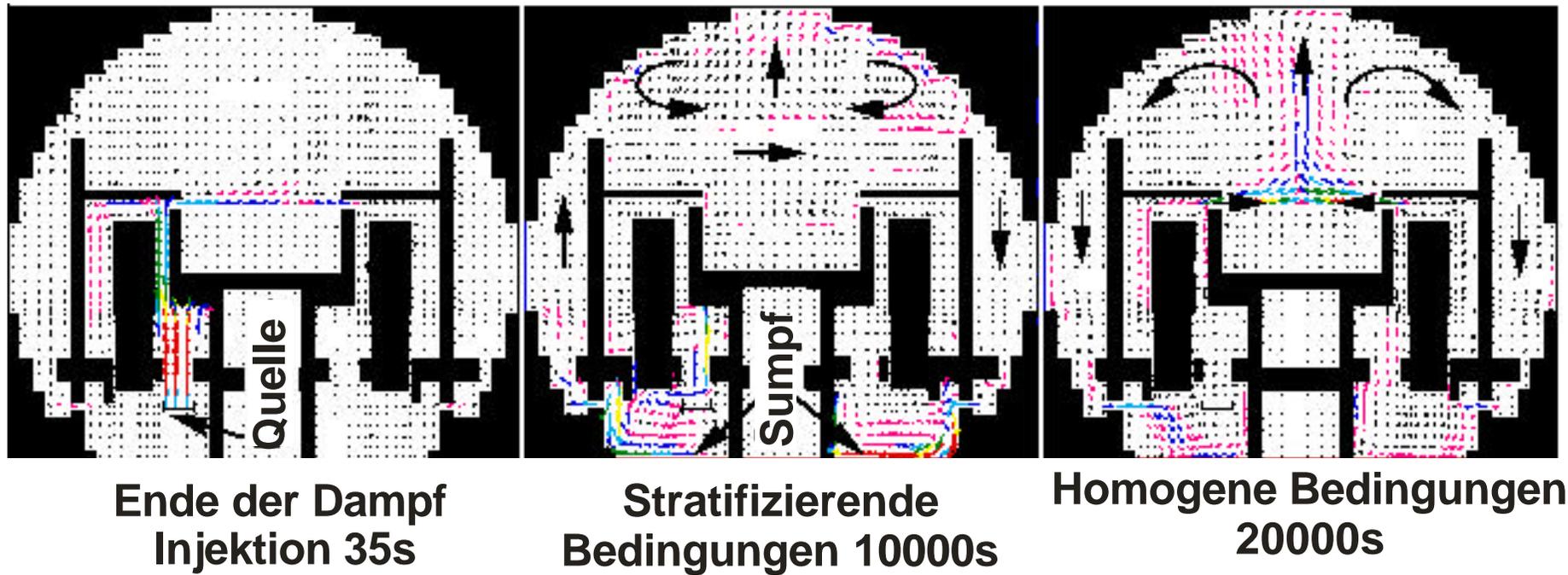


Abb.10.2.2: Mit GASFLOW berechnete Strömungswege im BIBLIS-A KMV- Auslegungsstörfall. Die Gegenmaßnahme " verstärkte Sumpfverdampfung " kann die sich ausbildende stabile Stratifikation im Dom durchbrechen und zu einer homogenen  $H_2$ -Verteilung im Containment führen.

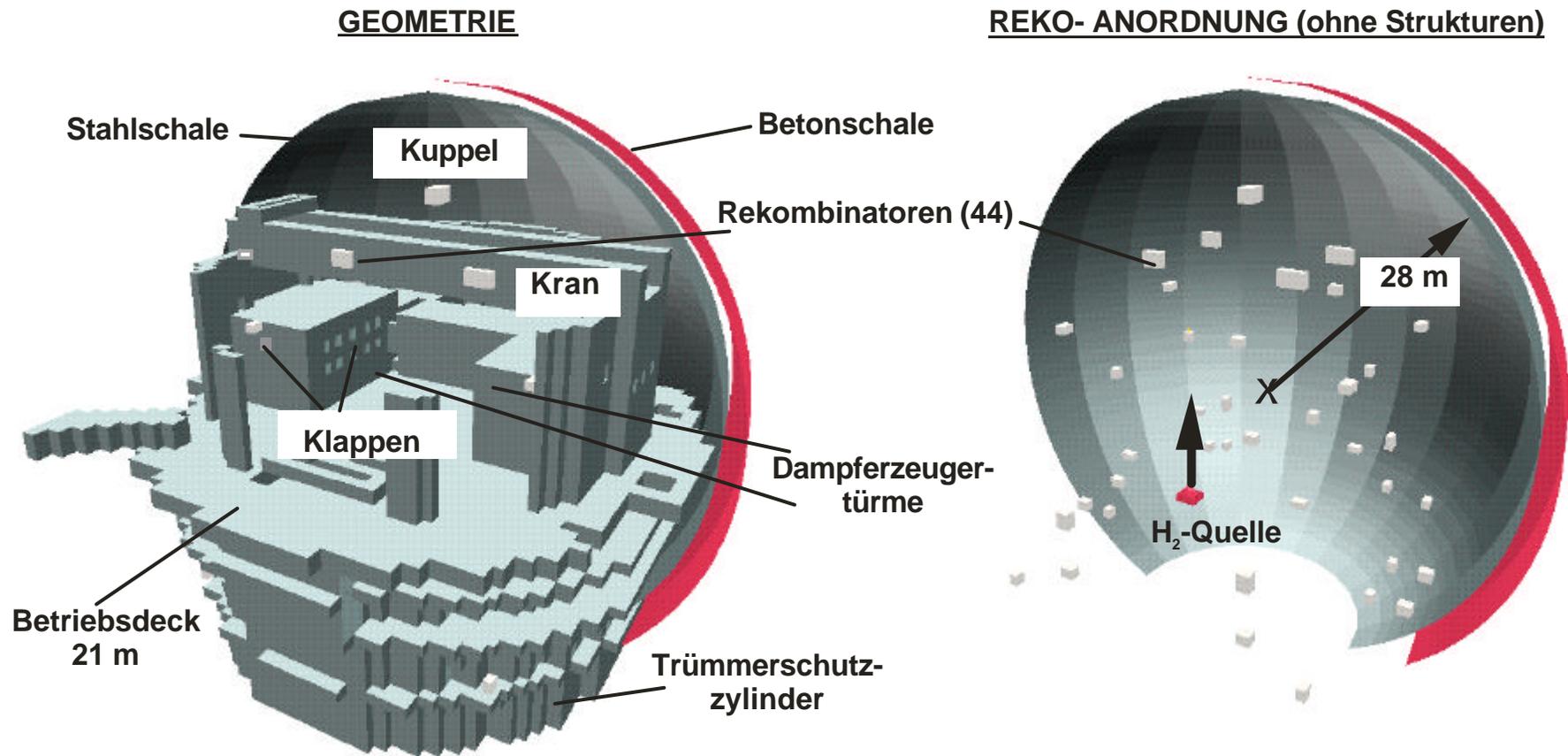


Abb.10.3.1: GASFLOW- Geometriemodell für BIBLIS- A mit 44 NIS Rekombinatoren.

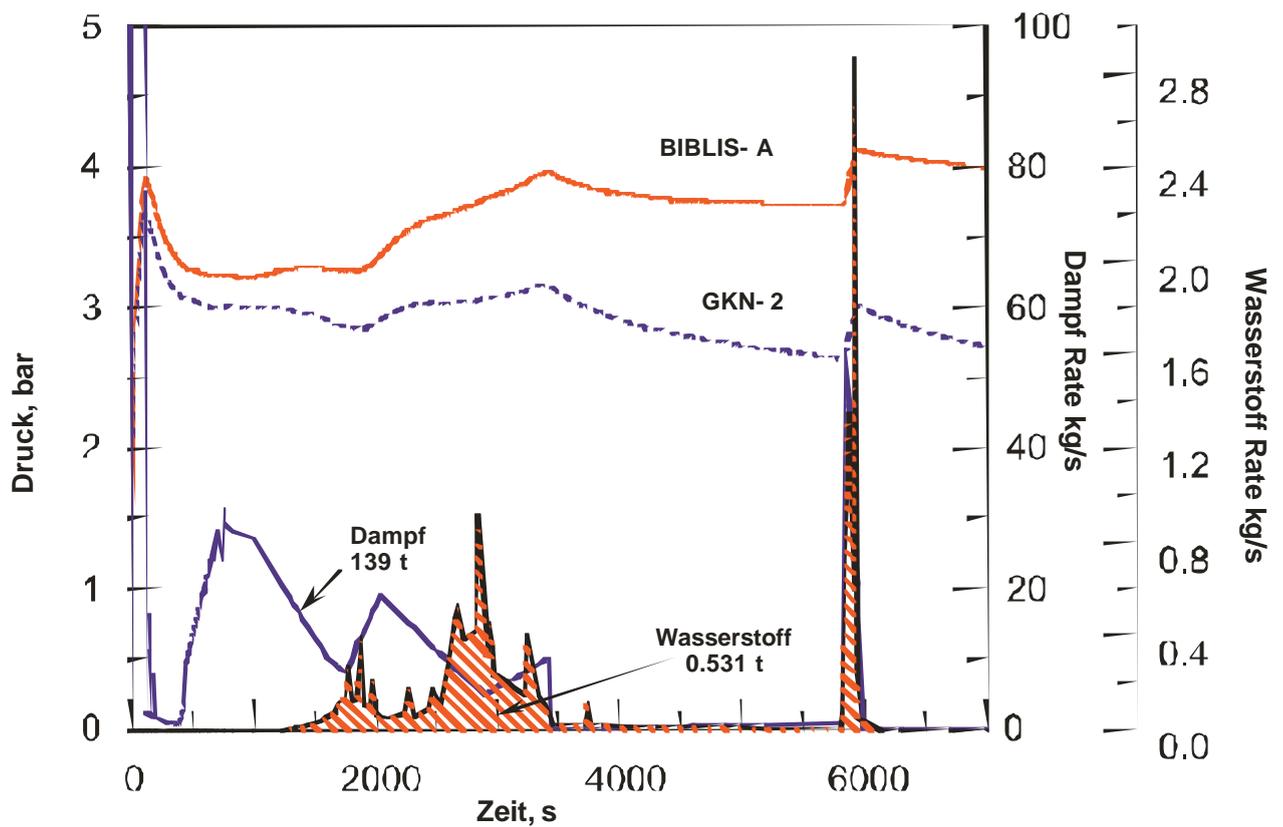


Abb.10.3.2: Dampf- und Wasserstoffquellterme für Surge- Line LOCA in BIBLIS-A. Berechnete Druckentwicklung für BIBLIS-A und GKN- 2 zum Vergleich. Die Vor-Konvoi- Anlage BIBLIS- A ist offener und enthält weniger Wärmesenken (Betonstrukturen) zur Aufnahme der Dampf- kondensationswärme.

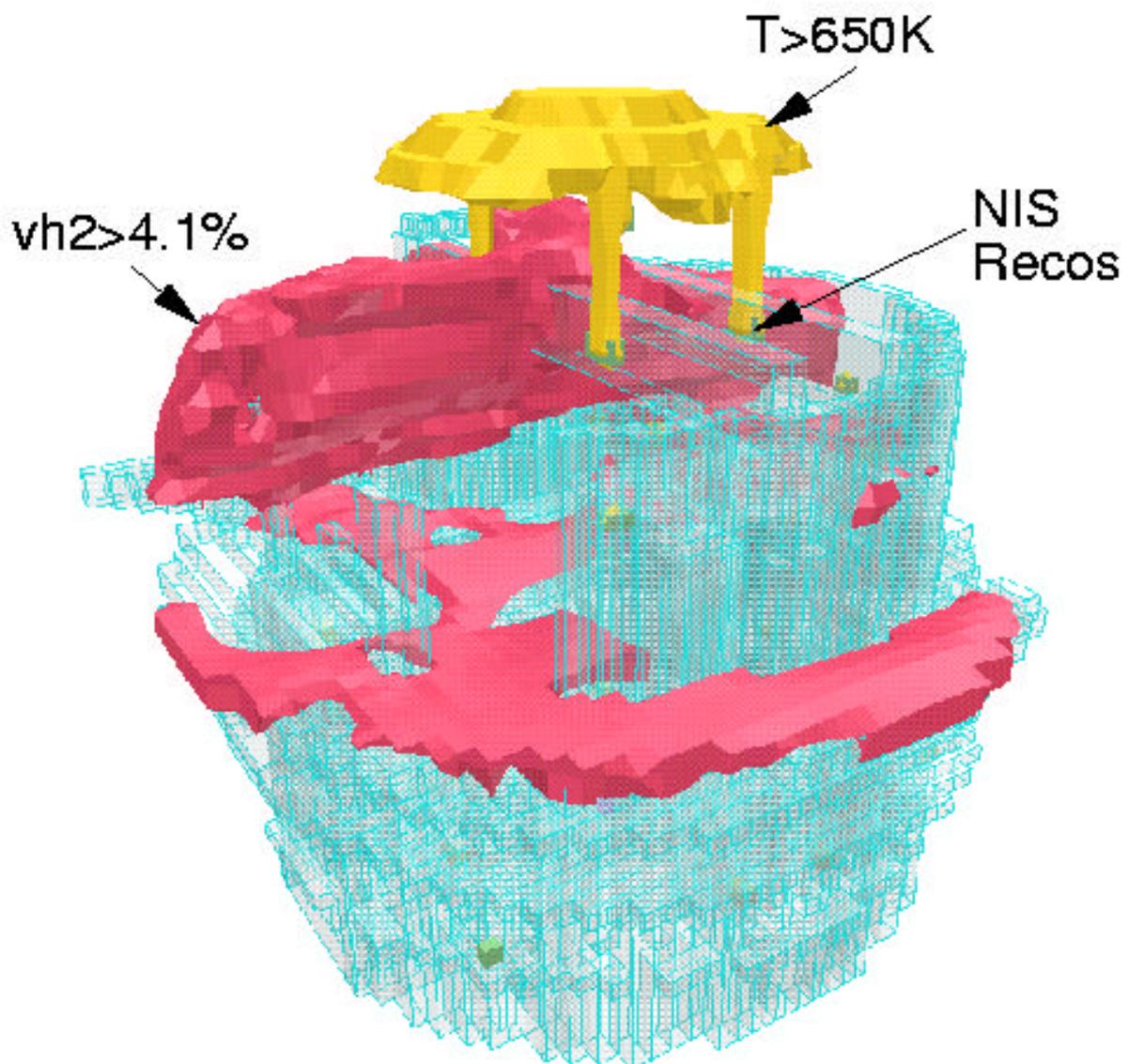


Abb.10.3.3: Beispiel für berechnete Wasserstoff- und Temperaturverteilung in BIBLIS- A im Falle eines Surge- Line LOCA.

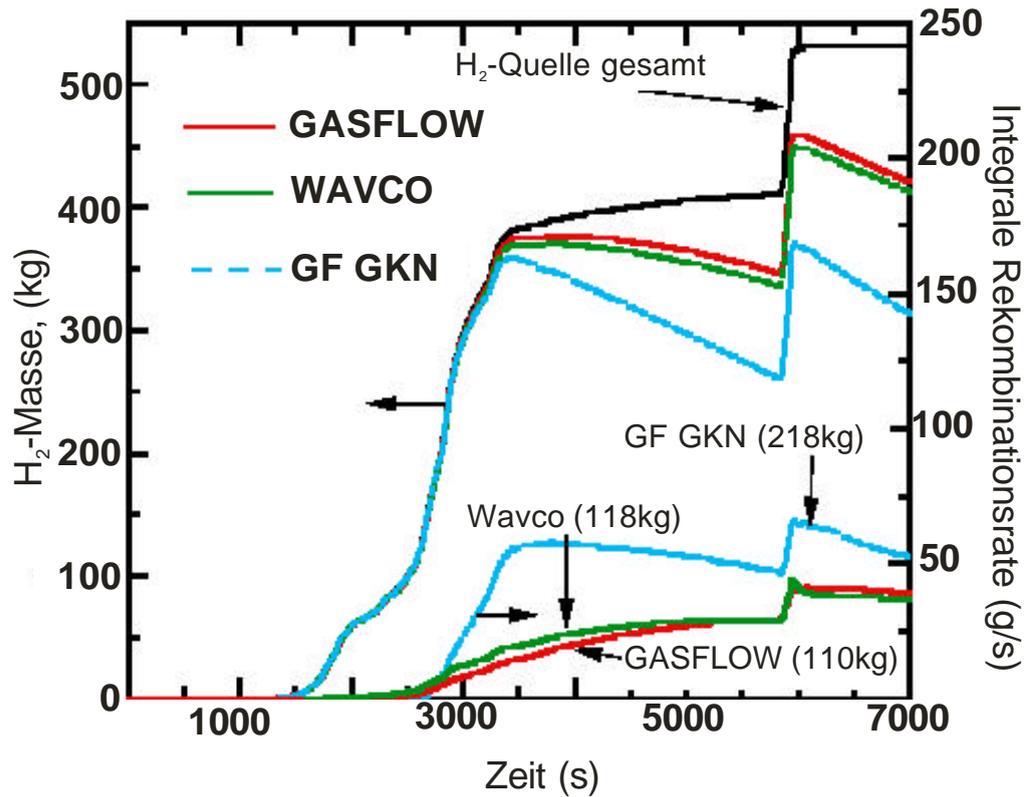


Abb.10.3.4: Gesamte Wasserstoffmenge aus der Quelle, berechnete integrale H<sub>2</sub>-Rekombinationsrate und verbleibendes Wasserstoffinventar beim Surge- Line LOCA in den Anlagen BIBLIS- A (mit NIS Rekombinatoren) und GKN- 2 (mit Siemens- Rekombinatoren).

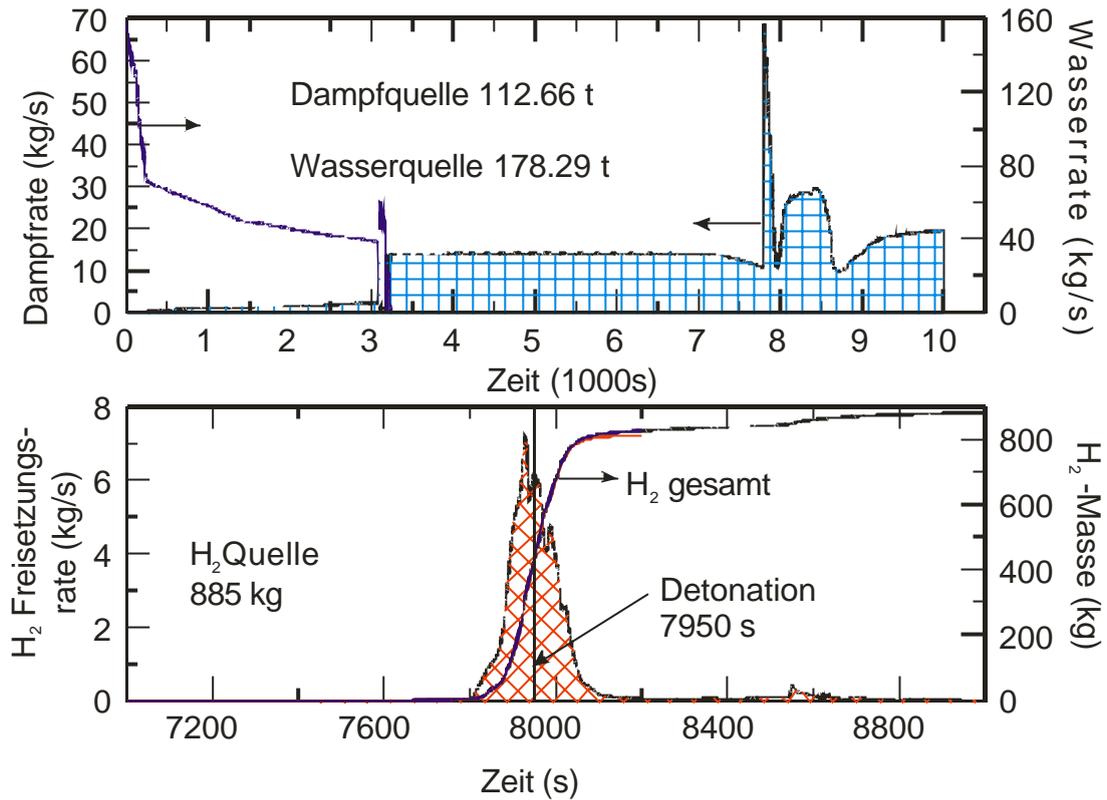


Abb.10.4.1: Dampf-, Wasser- und Wasserstoffquellen für Simulation eines Loss- of-Offsite- Power Störfalls in GKN- 2 mit GASFLOW.

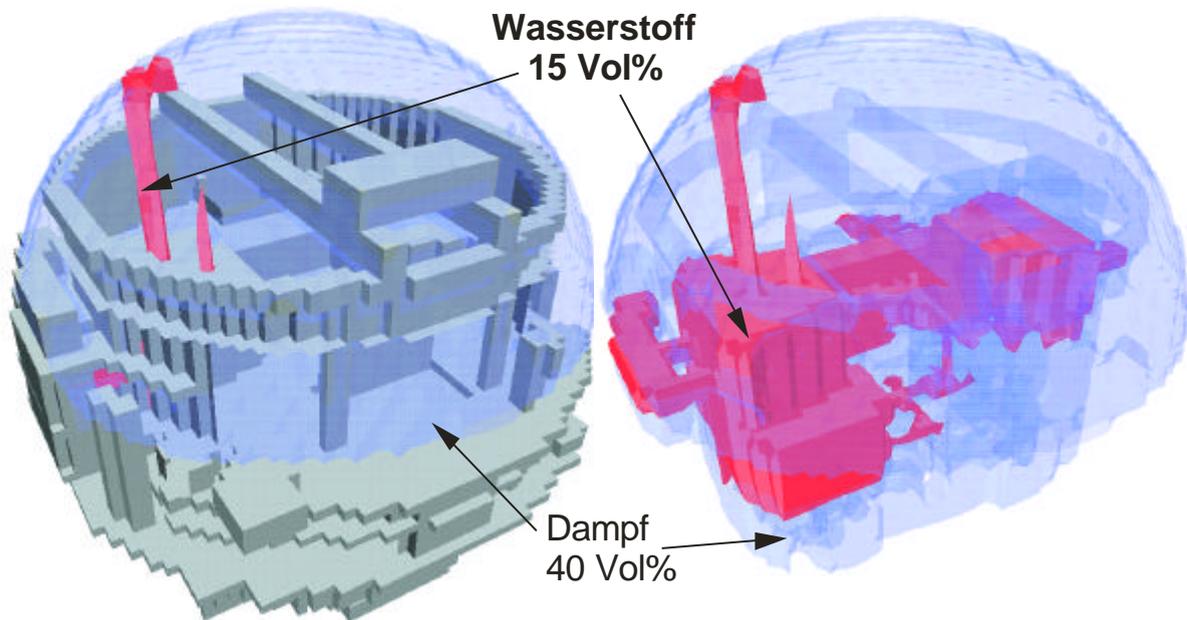


Abb.10.4.2: GKN-2 Geometriemodell (links) und mit GASFLOW berechnete Wasserstoffverteilung bei 7950 s.

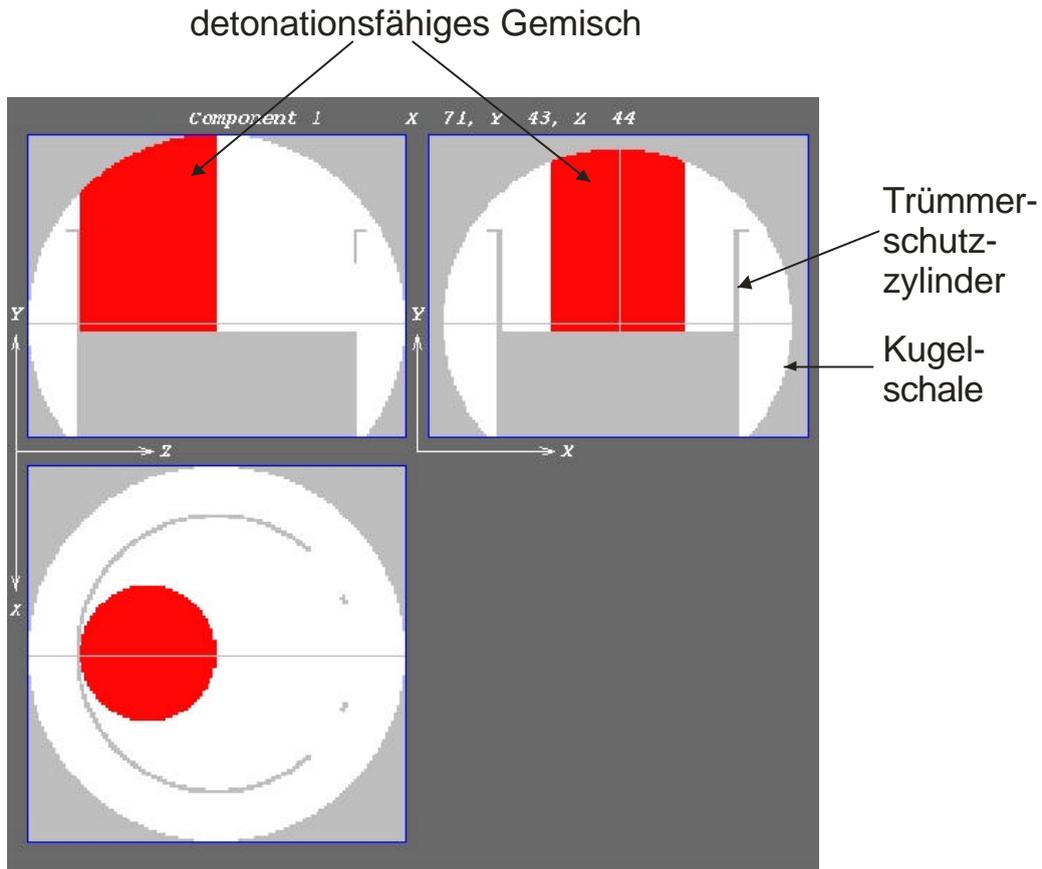


Abb.10.4.3: Vereinfachte Abbildung der GASFLOW – Verteilungsergebnisse in das Detonationsprogramm DET3D. Der dunkel gekennzeichnete Bereich enthält detonationsfähiges Gemisch. Das Bild zeigt drei 2 D- Schnitte die vertikal aufeinander stehen. Das gesamte H<sub>2</sub>-Inventar der detonationsfähigen Mischung beträgt 550 kg.

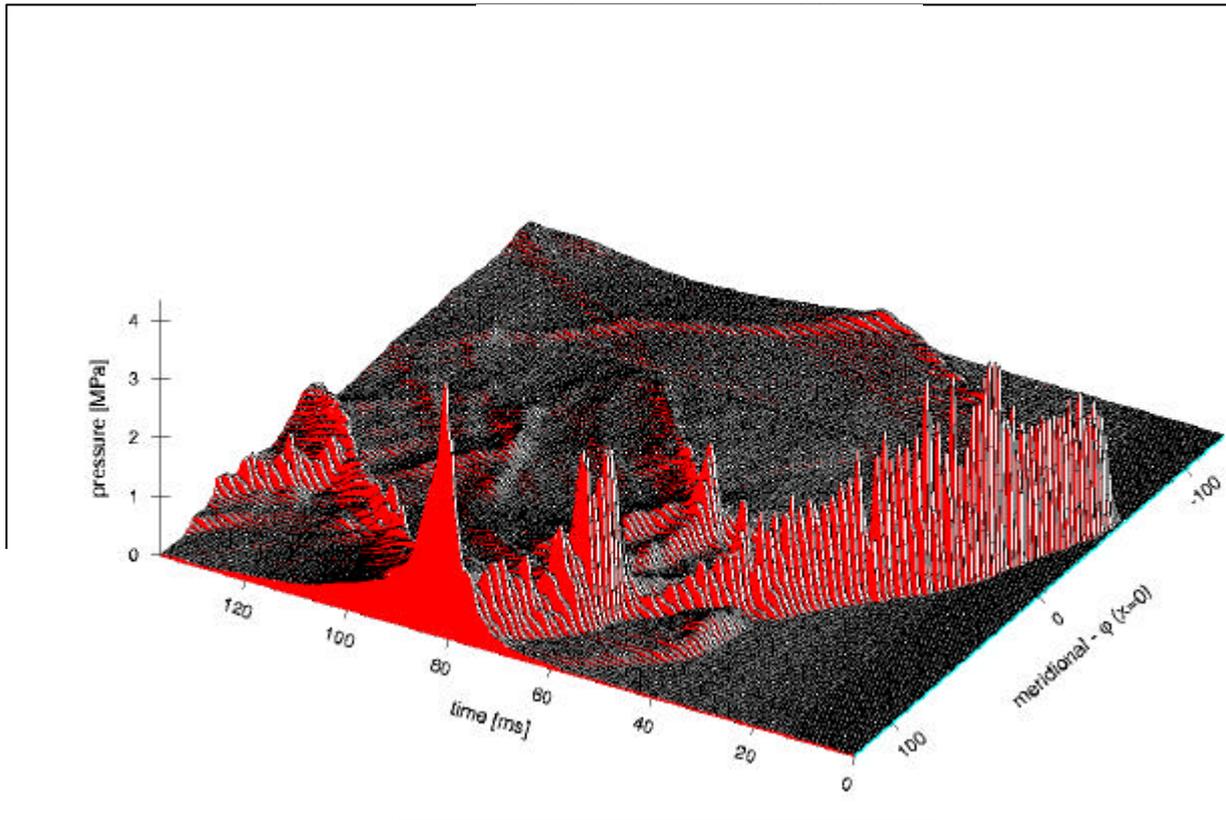


Abb.10.4.4 Mit DET3D berechnete gasdynamische Lasten auf die kugelförmige Stahlschale des GKN-2 Containments.

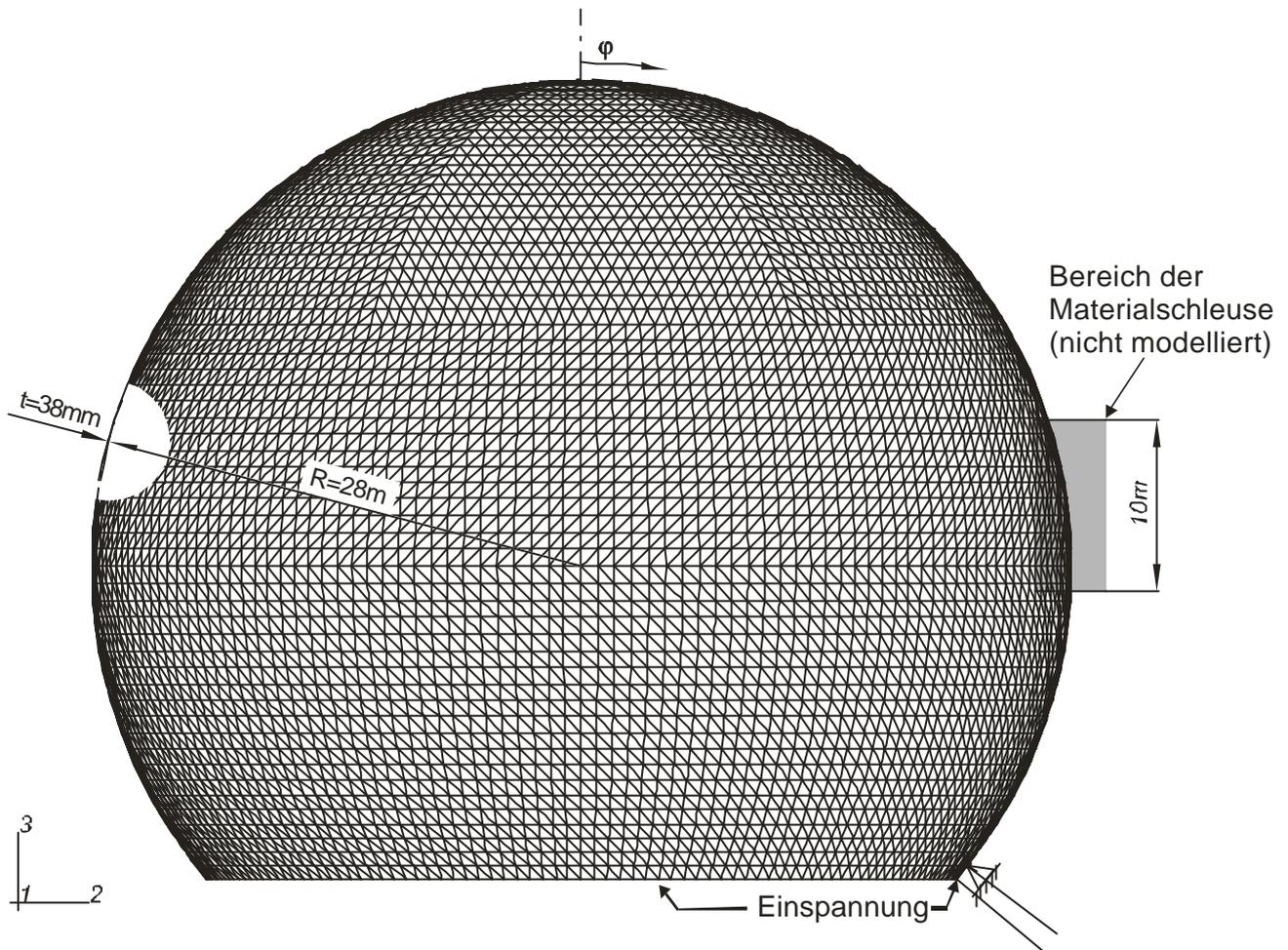
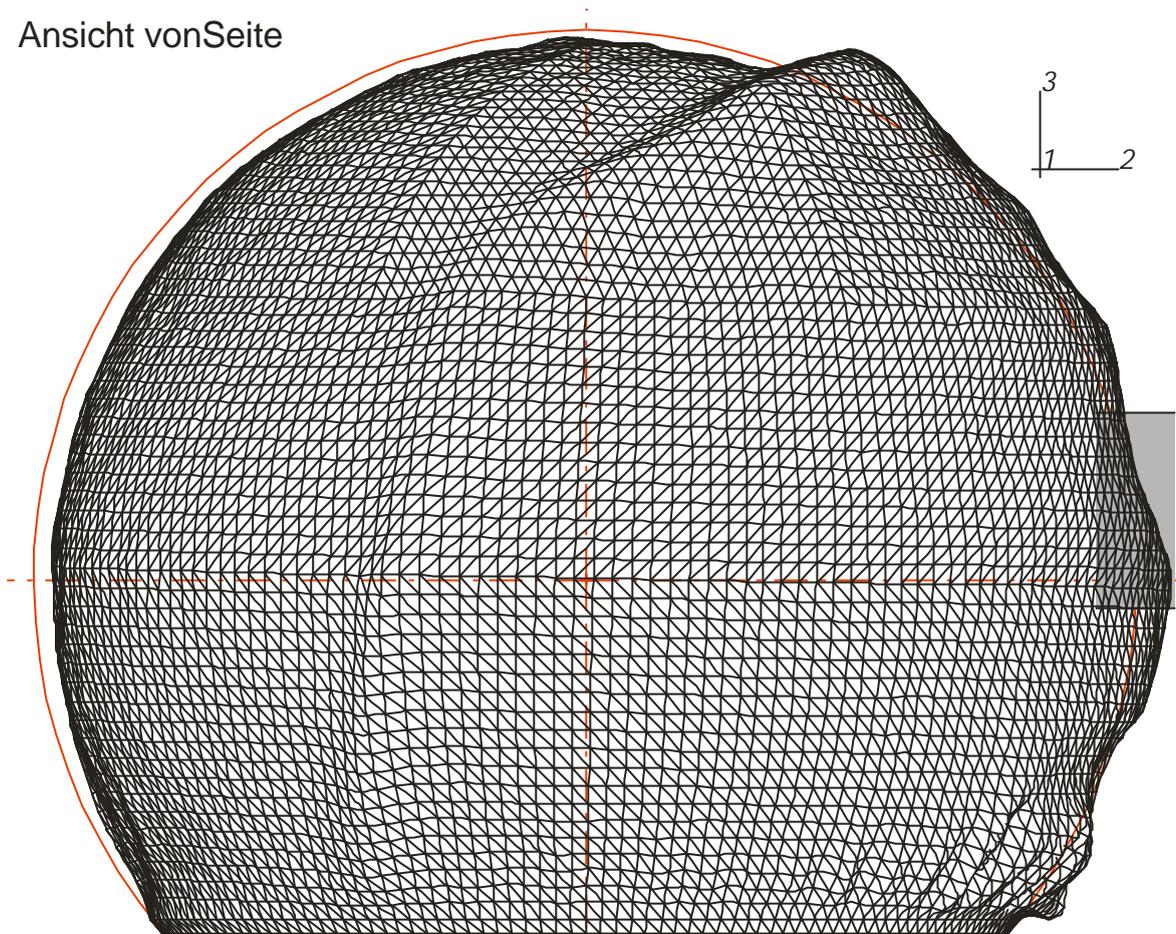


Abb.10.4.5: ABAQUS- Modell der 38 mm dicken Stahlschale des Sicherheitsbehälters, Kugelradius 28 m, 9000 Finite Elemente.

Ansicht von Seite



Ansicht von unten

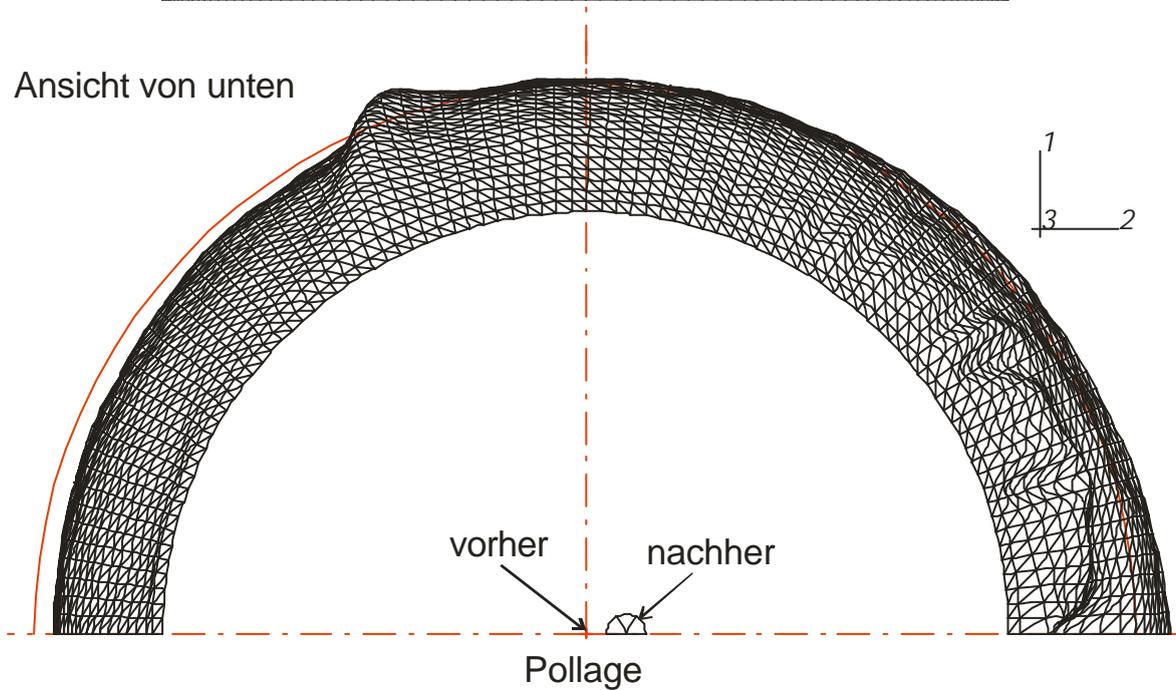


Abb.10.4.6: Mit ABAQUS- berechnete Deformation der Stahlschale nach Aufnahme einer abdeckend konservativen 3D- Detonationslast, Überhöhung der Deformation um Faktor 5.

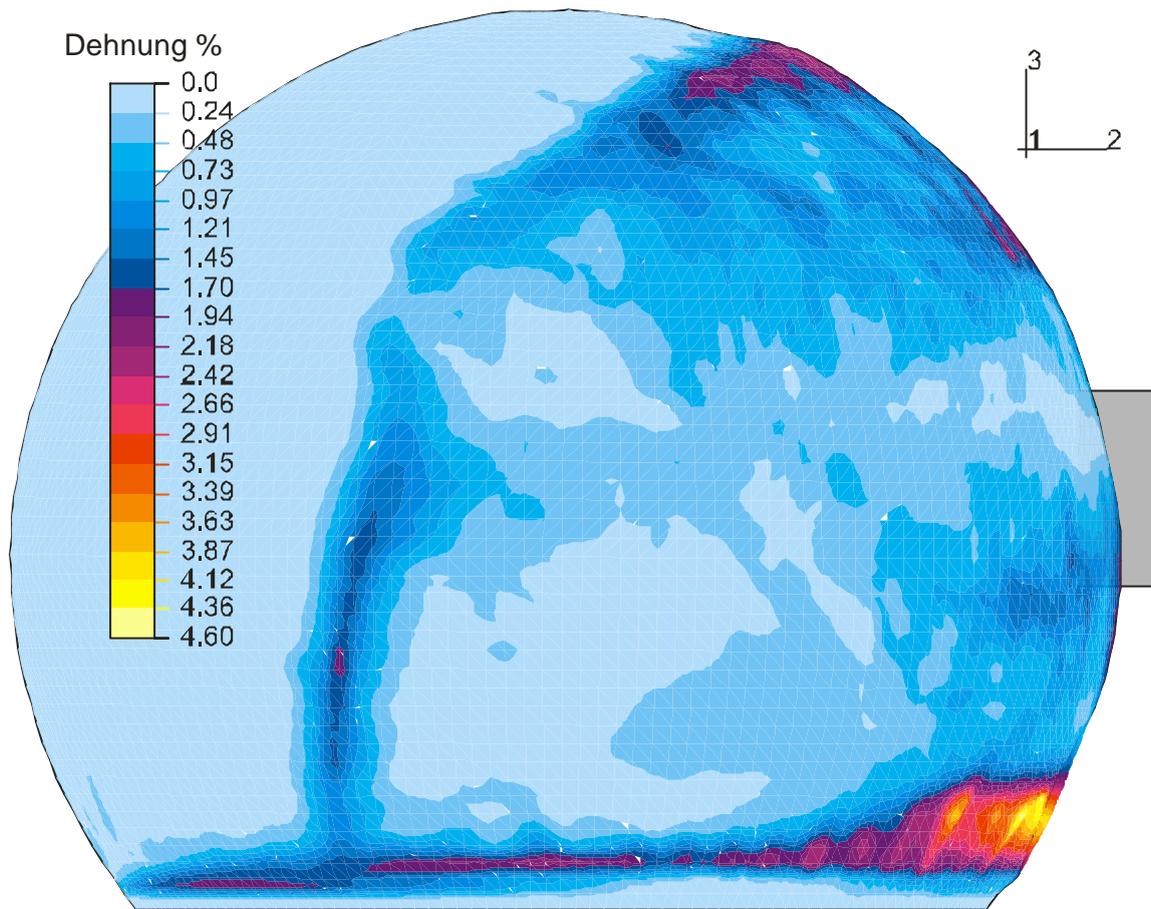


Abb.10.4.7: Berechnete Membrandehnungen der 38 mm- Stahlschale nach Aufnahme einer konservativen Detonationslast. Derartige Dehnungen führen zwar zu plastischen Verformungen aber nicht zum Versagen der (ungestörten) Stahlhülle.

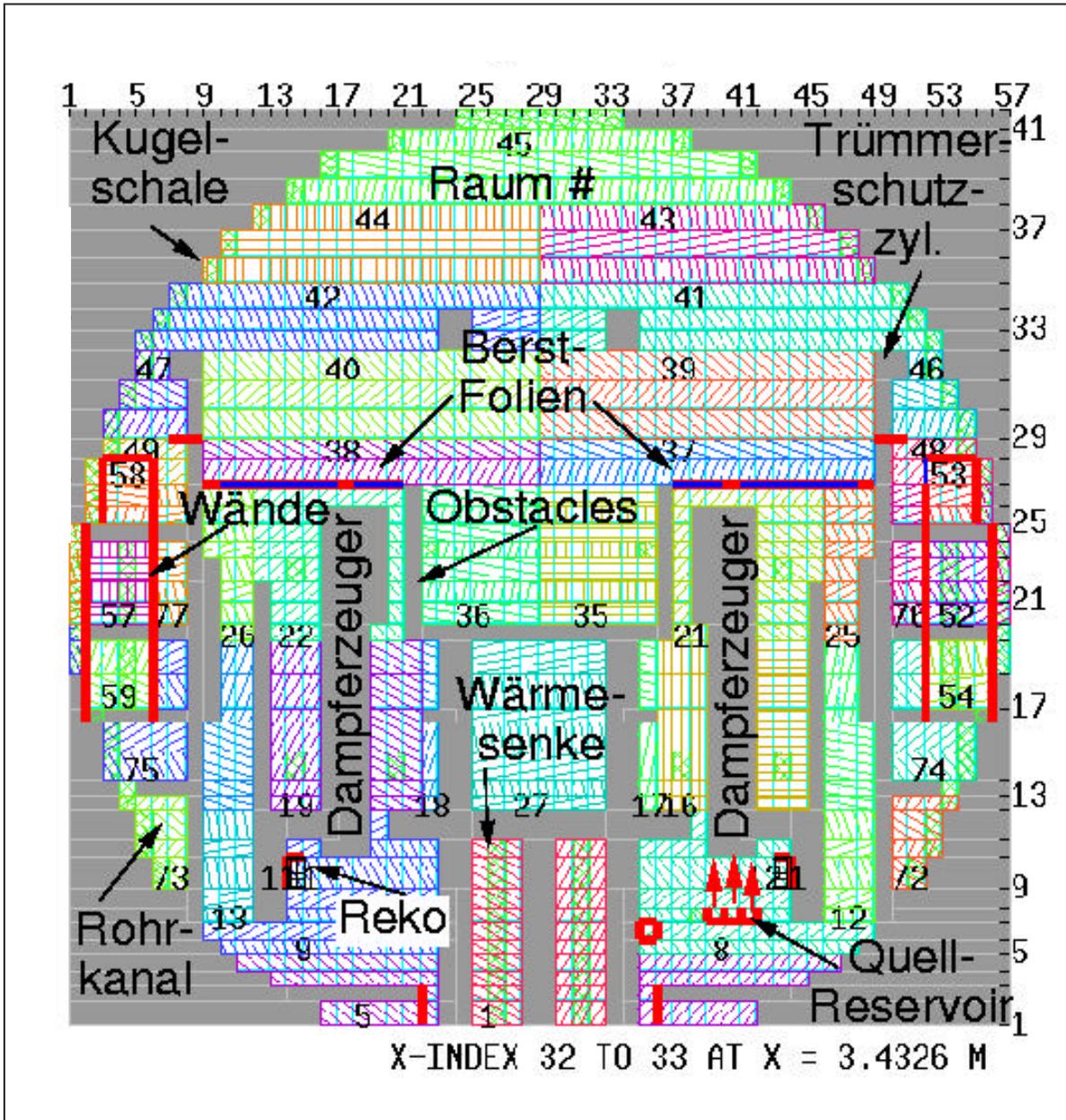
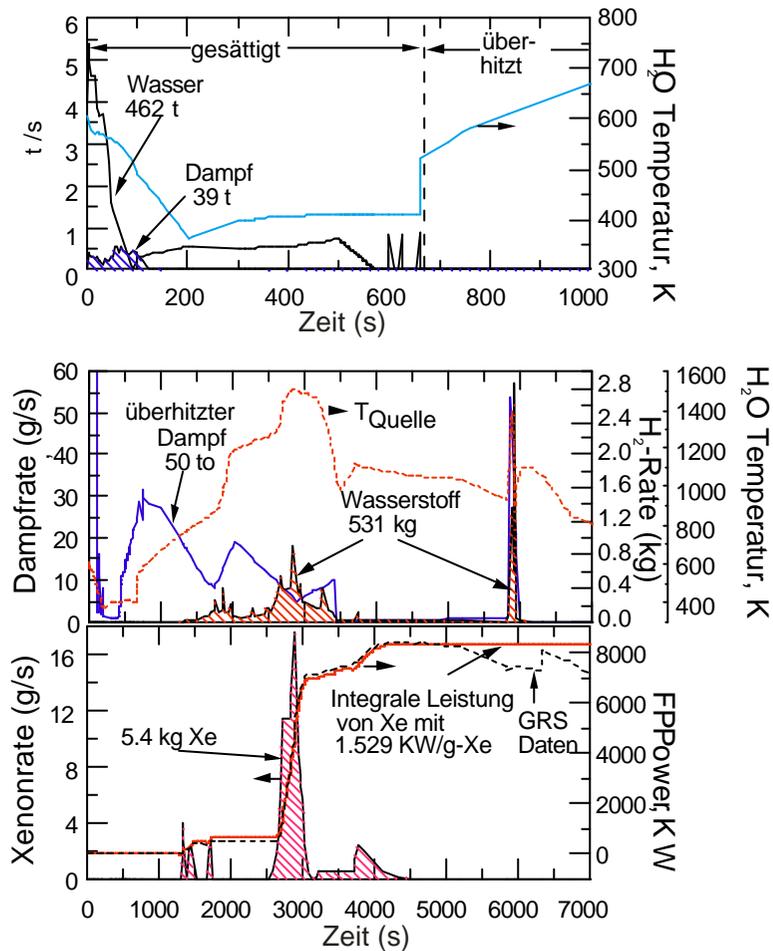


Abb.10.5.1: Zum Vergleich der Ergebnisse wurden die 106 Kontrollvolumen des RALOC Volumencodes im 3D Maschennetz markiert. Sie sind mit unterschiedlichen Farben schraffiert eingetragen und nummeriert. GASFLOW mittelt die Konzentrationen und Temperaturen in jedem Raum in festen Zeitintervallen. Die Mittelwerte für jeden Raum sind direkt mit den RALOC Ergebnissen vergleichbar. Zu jedem Zeitpunkt werden außerdem auch die Peakwerte in jedem Raum ausgewertet. Die Abweichung zwischen Peakwert im Raum und Raummittelwert demonstriert die Notwendigkeit für die fein aufgelösten 3D Simulationen.

### Quellterme



### Massen und Energiebilanz

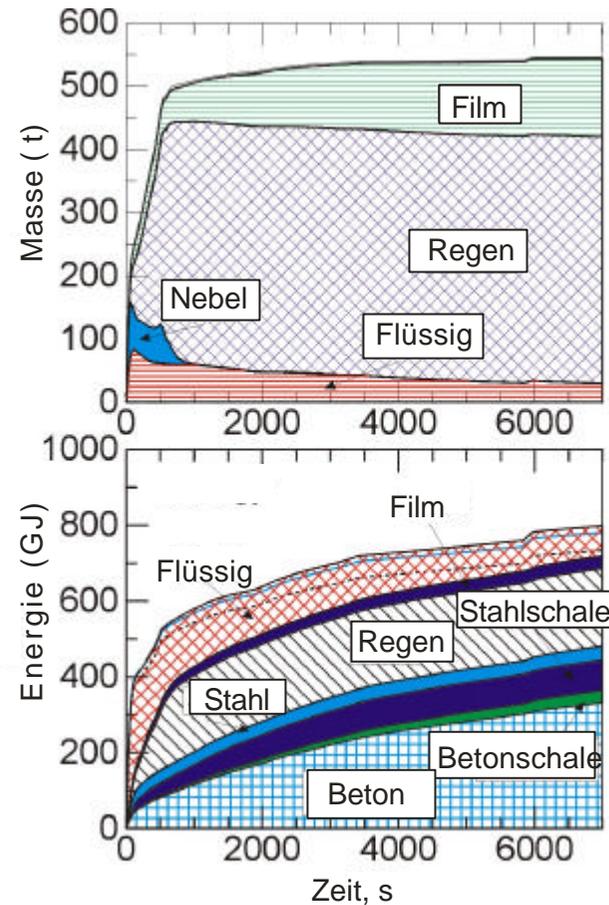


Abb.10.5.2: GASFLOW Analyse eines Surge-Line LOCA in GKN-2, Quellterm für Wasser, Dampf, Wasserstoff und Spaltprodukte (links), sowie Massen- und Energiebilanzen für den Ablauf des Störfalls.

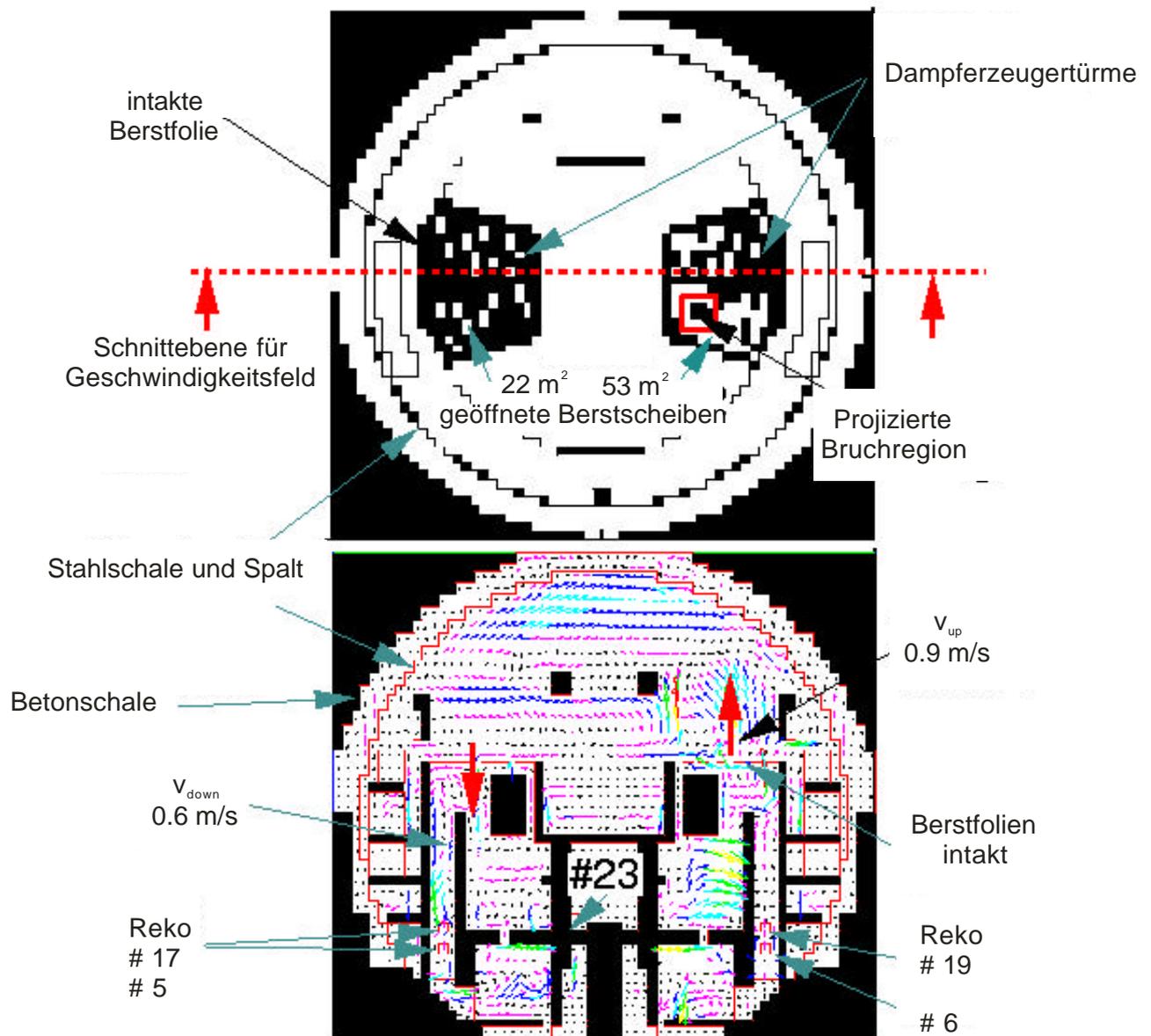


Abb.10.5.3: Horizontalschnitt durch das GKN-2 Containment auf Höhe der Berstfolien (oben) und Vertikalschnitt durch Strukturen und berechnetes Strömungsfeld (unten).

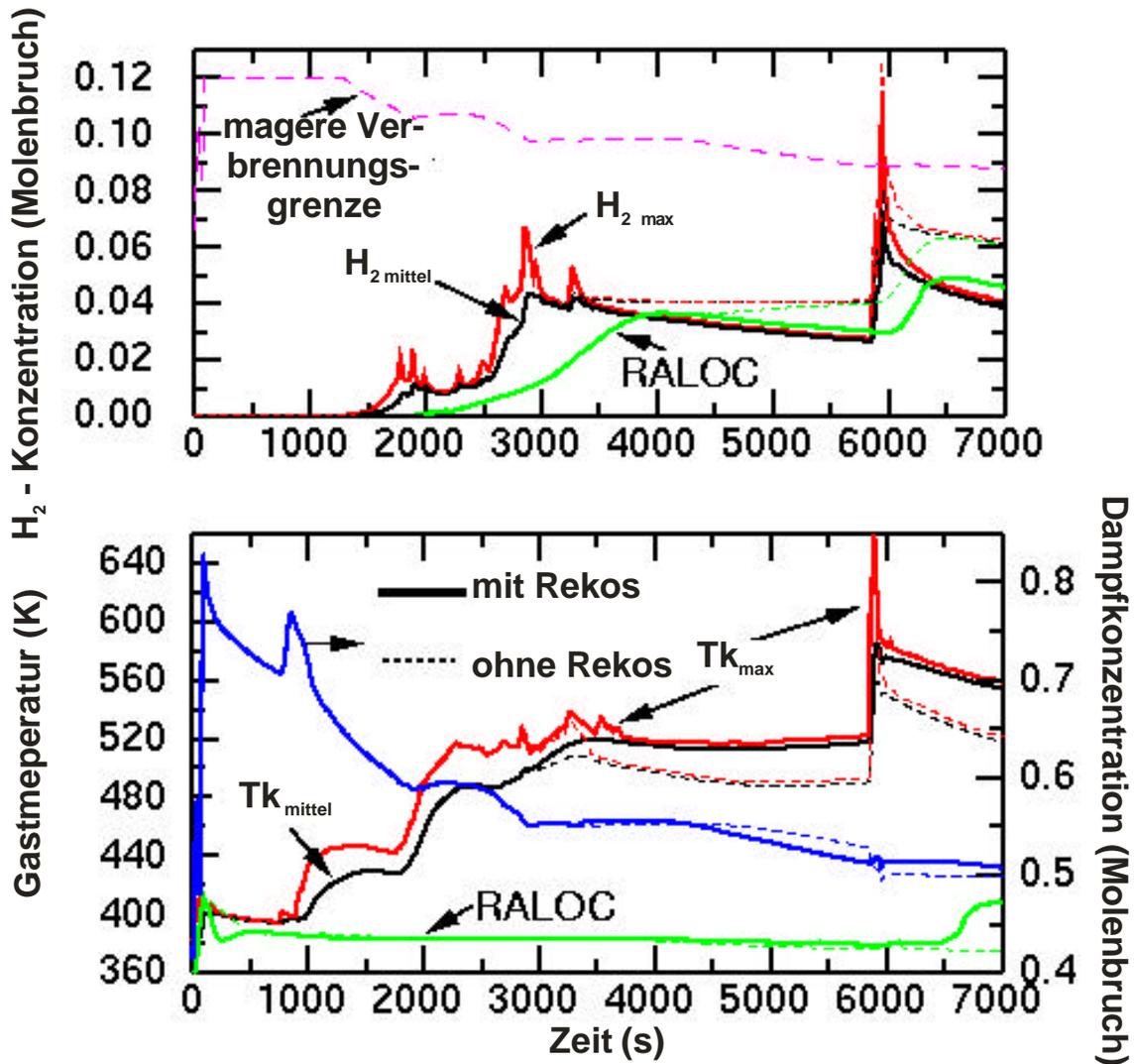


Abb.10.5.4: Mit GASFLOW berechnete Wasserstoff- und Dampfkonzentrationen sowie Gastemperaturen im Dom im Vergleich mit Ergebnissen des Volumencodes RALOC.

(oben):  $H_2$  max ist zeitabhängige maximale  $H_2$ -Konzentration im Domraum 45 des RALOC Modells,  $H_2$  mittel ist zeitabhängige volumengemittelte  $H_2$ -Konzentration im Domraum 45, die direkt vergleichbar ist mit den RALOC Ergebnissen für dieses Raumvolumen. Die eingetragene magere Verbrennungsgrenze ist abhängig vom mittleren Dampfgehalt. Wasserstoffkonzentrationen, die diese Grenze überschreiten (enges Zeitfenster um 6000s) sind bei der gegebenen Dampfkonzentration in diesem Raum zündfähig.

(unten):  $Tk$  max ist zeitabhängige maximale Gastemperatur (Hotspot) im Domraum 45,  $Tk$  mittel ist zeitabhängige volumengemittelte Gastemperatur im Domraum 45, die direkt verglichen werden kann mit den RALOC Ergebnissen für dieses Raumvolumen.

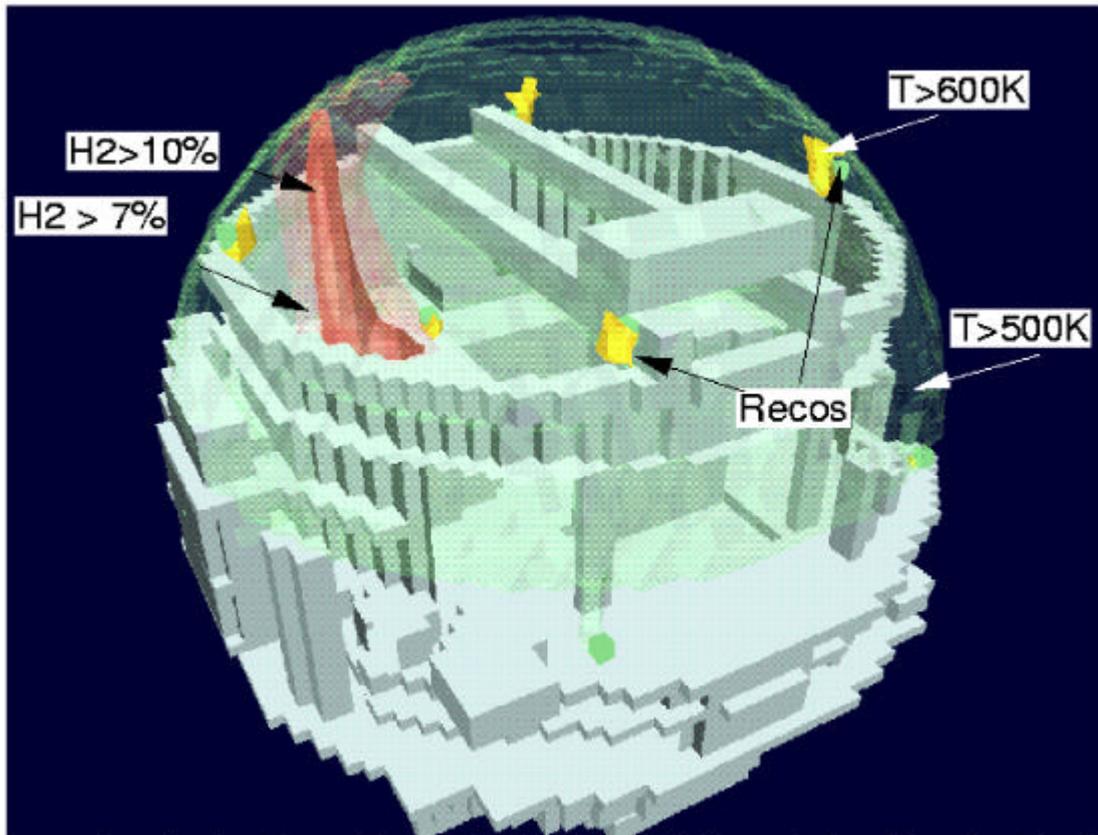


Abb.10.5.5: Wasserstoffdurchbruch in den Dom während der Kernabsturzphase zum Zeitpunkt der maximalen H<sub>2</sub>-Freisetzungsrates von 2.8 kg/s (5932 s).

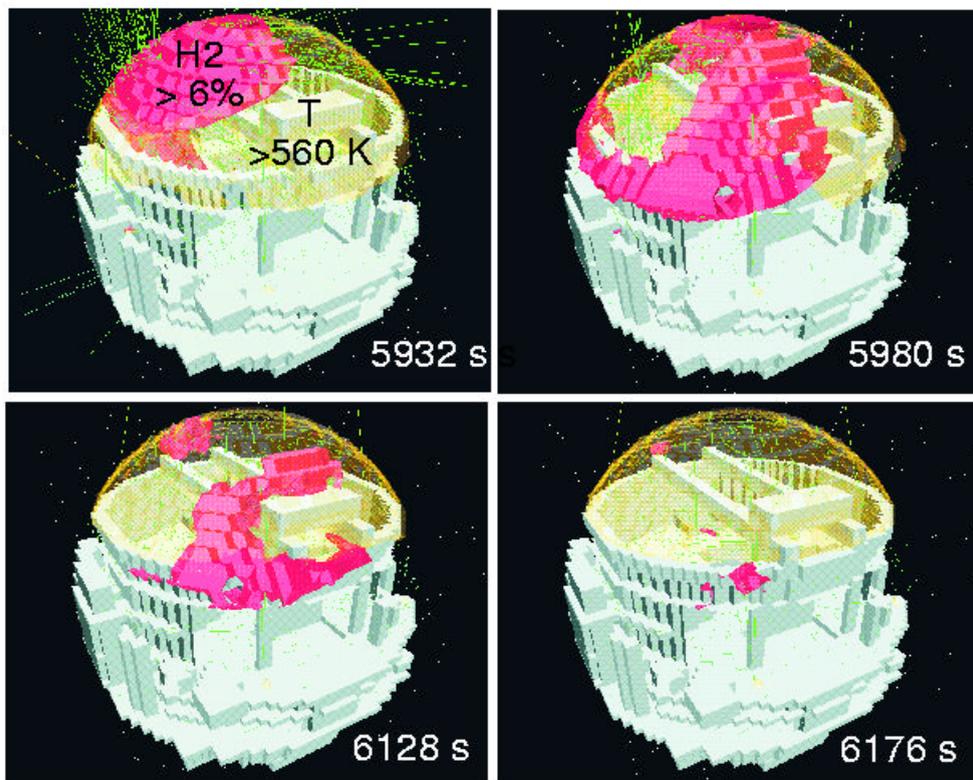


Abb.10.5.6: Wasserstoffverteilung im Containment während der Kernabsturzphase. Die Wasserstoffwolke wird durch die Kern- direkt nachfolgende Dampfquelle rasch verdünnt und verteilt.

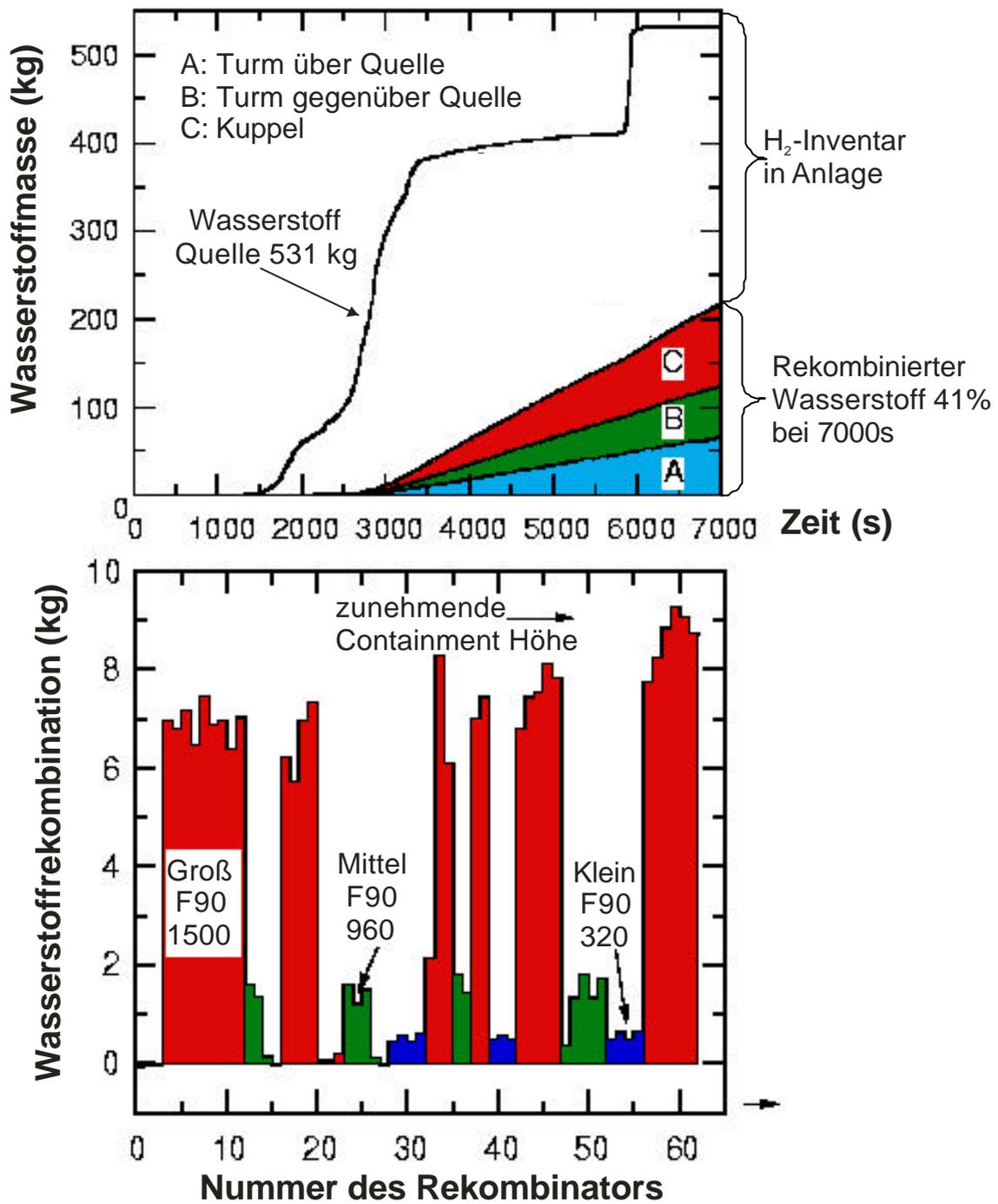


Abb.10.5.7: Gesamter Wasserstoffabbau und aufgeschlüsselter Abbau an den eingesetzten Rekombinatoren.

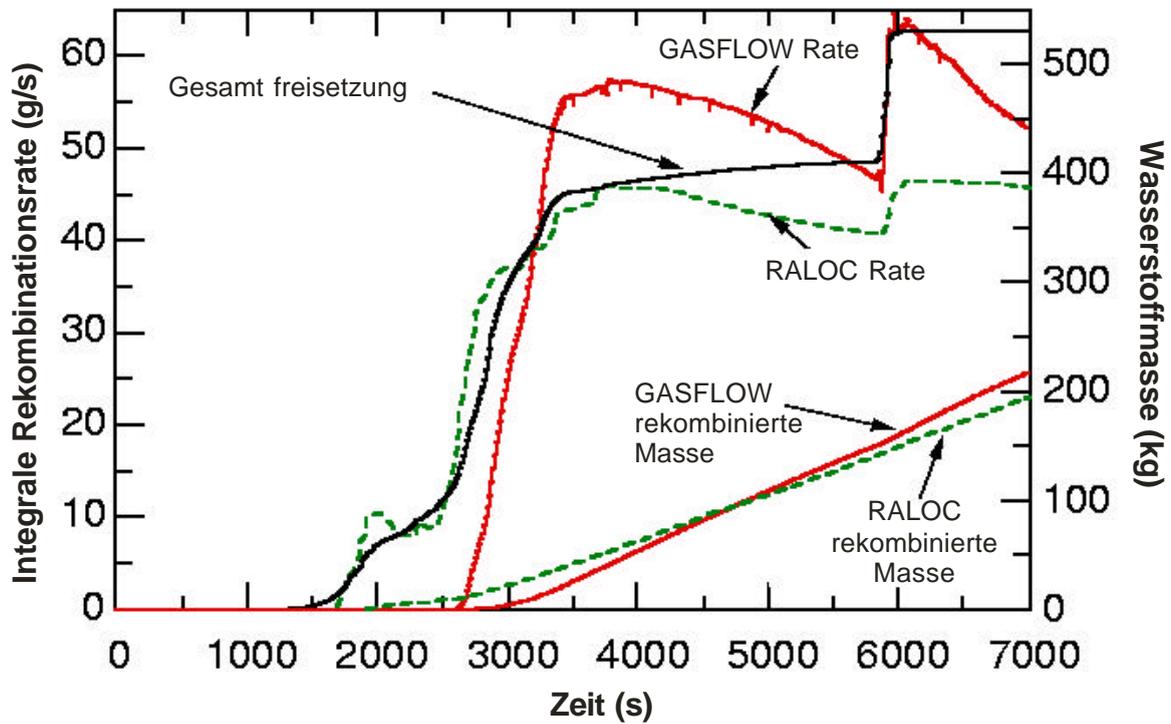
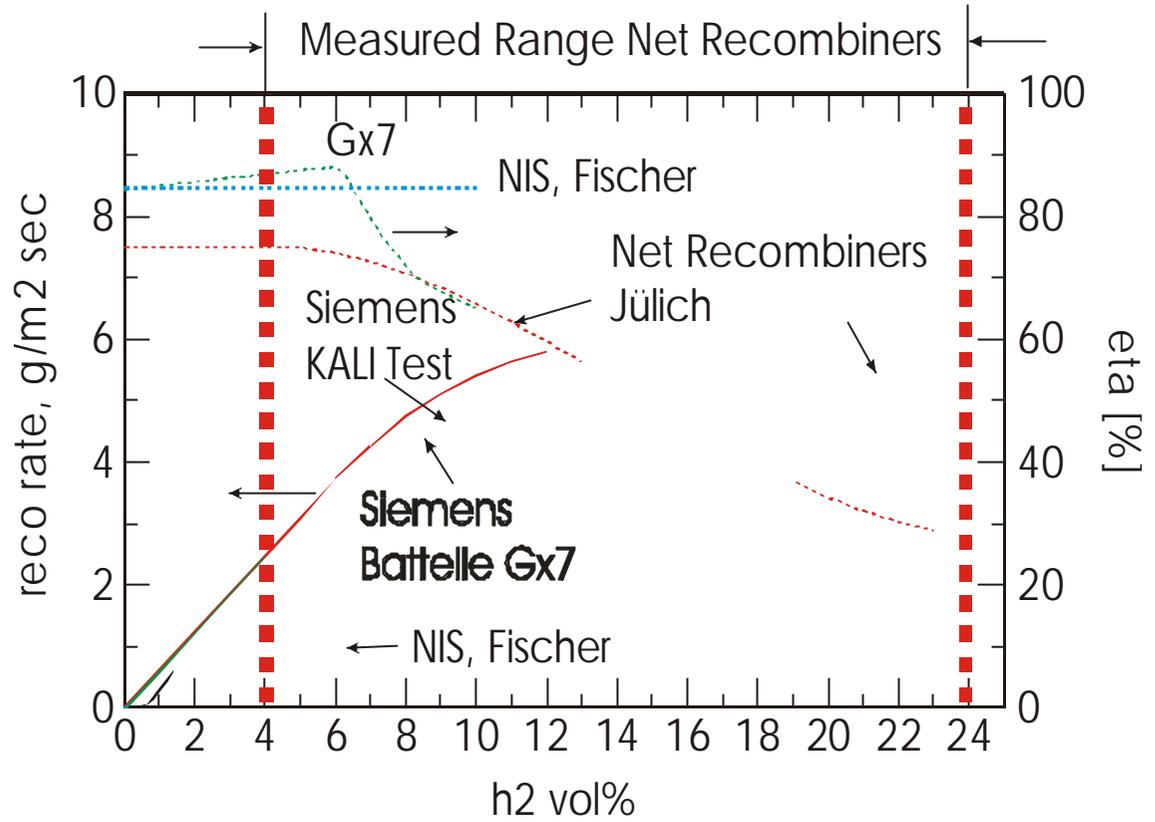


Abb.10.5.8: Vergleich der integralen  $H_2$  Rekombinationsraten und -mengen beim Surge Line LOCA in GKN-2 aus der GASFLOW und der RALOC Simulation.



10.5.9: Reko-3 Testanlage des FZ-Jülich für Netzrekos und Kennlinien des Netzrekombinators im Vergleich mit Siemens Plattenrekos und NIS Granulat Reko Boxen.

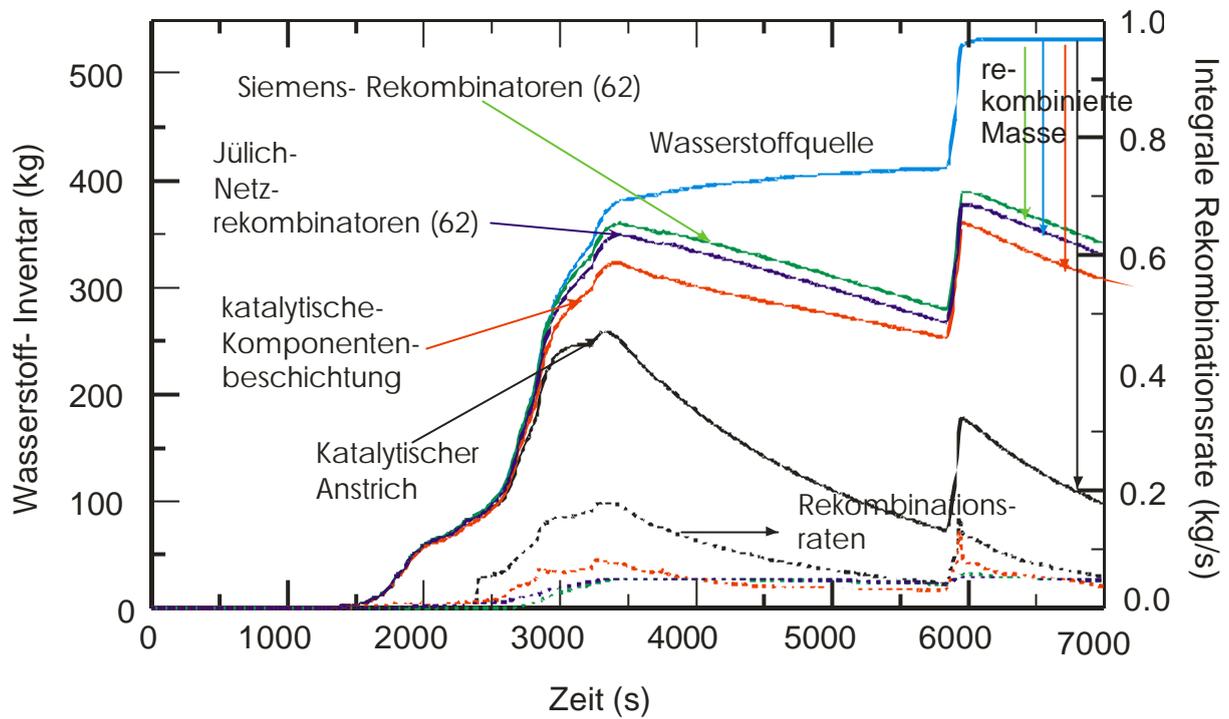
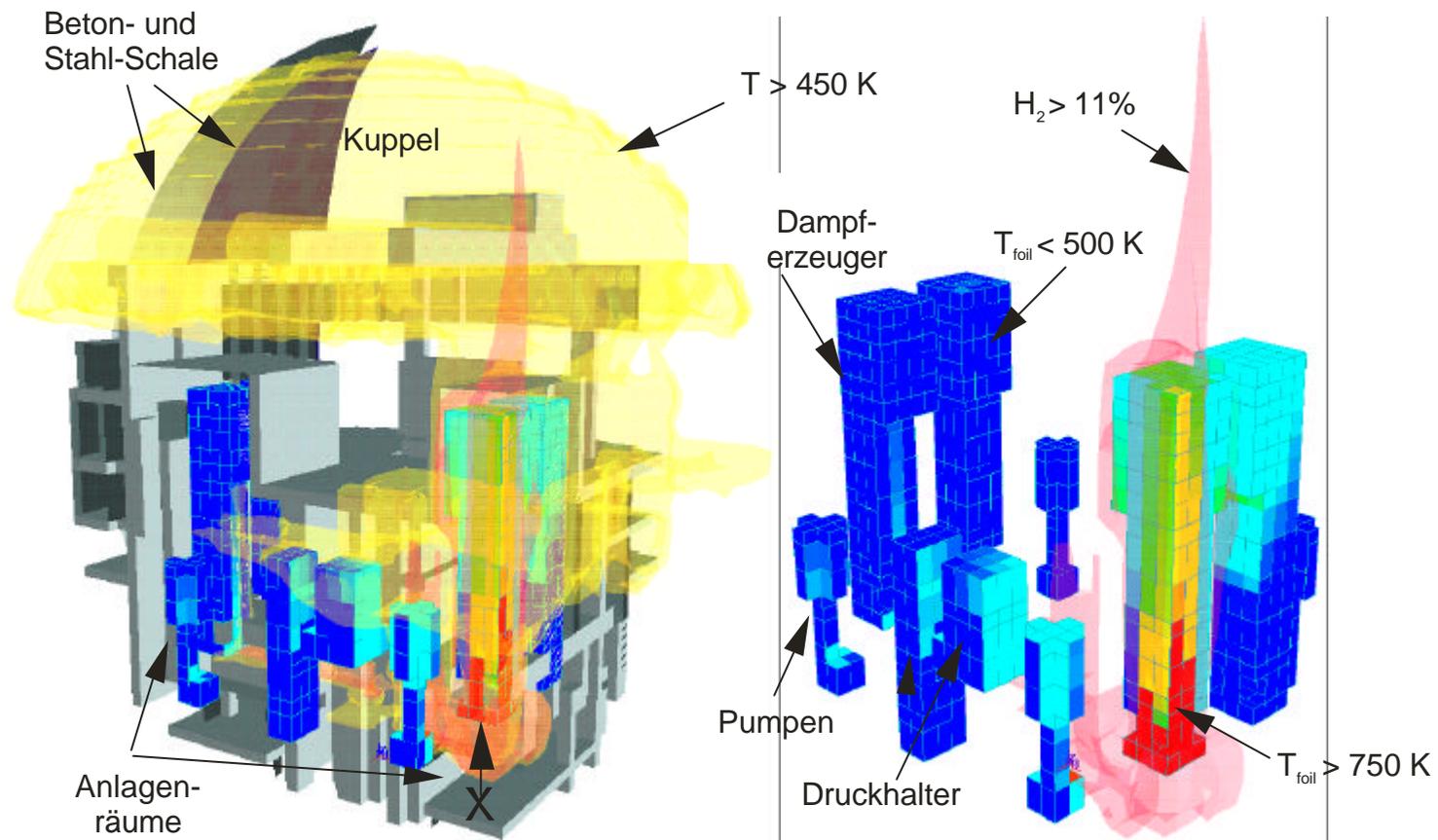


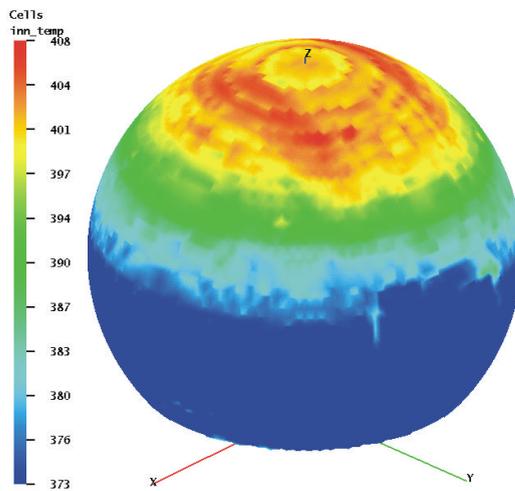
Abb.10.5.10: Wirksamkeitsvergleich verschiedener Katalysator- Konzepte zur Wasserstoffbeherrschung bei einem Surge-Line LOCA. Mit GASFLOW berechnetes Wasserstoffinventar in der Anlage und integrale Rekombinationsrate aller katalytischen Oberflächen / Rekombinatoren für

- a) Siemens Rekombinatoren (62)
- b) Rekombinatoren mit Jülich Netzen (62)
- c) Komponentenbeschichtung mit katalytischen Folien 1734 m<sup>2</sup> (THINCAT-Konzept)
- d) katalytischer Anstrich aller Strukturflächen (39,000 m<sup>2</sup>).

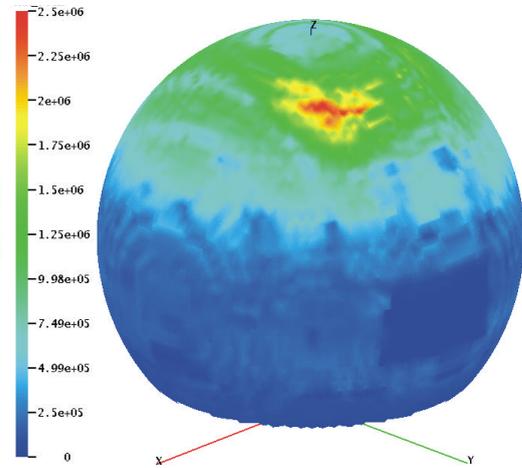


10.5.11 Untersuchung zur Wirksamkeit katalytisch beschichteter Anlagenkomponenten (Pumpen, Druckhalter, Dampferzeuger) als Wasserstoff-Gegenmaßnahme bei schweren Störfällen in KONVOI-Anlagen.

Inner Steel Shell Temperature [K]



Recombination Heat Flux into Steel Shell [ergs/cm2 sec]



10.5.12: Temperaturverteilung und Rekombinationswärmeflüsse beim LB-Loca auf einer unterstellten katalytisch beschichteten Stahlkugelschale von GKN-2 zum Zeitpunkt maximaler Wasserstofffreisetzung.

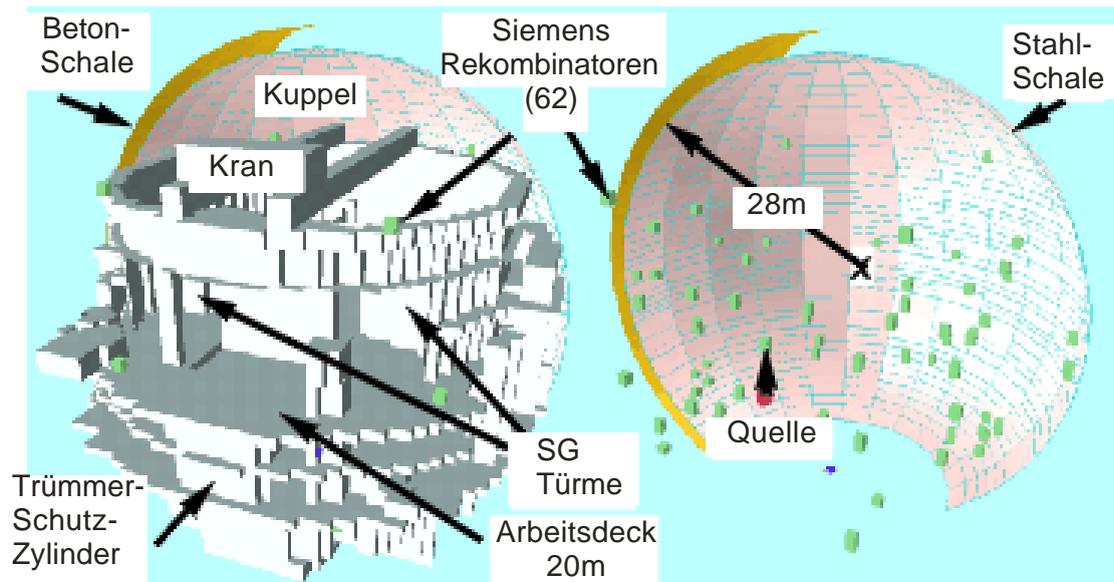


Abb.10.6.1: GASFLOW 3D- Geometriemodell und Position der 62 Siemens Rekombinatoren in der SB-LOCA Analyse für GKN-2.

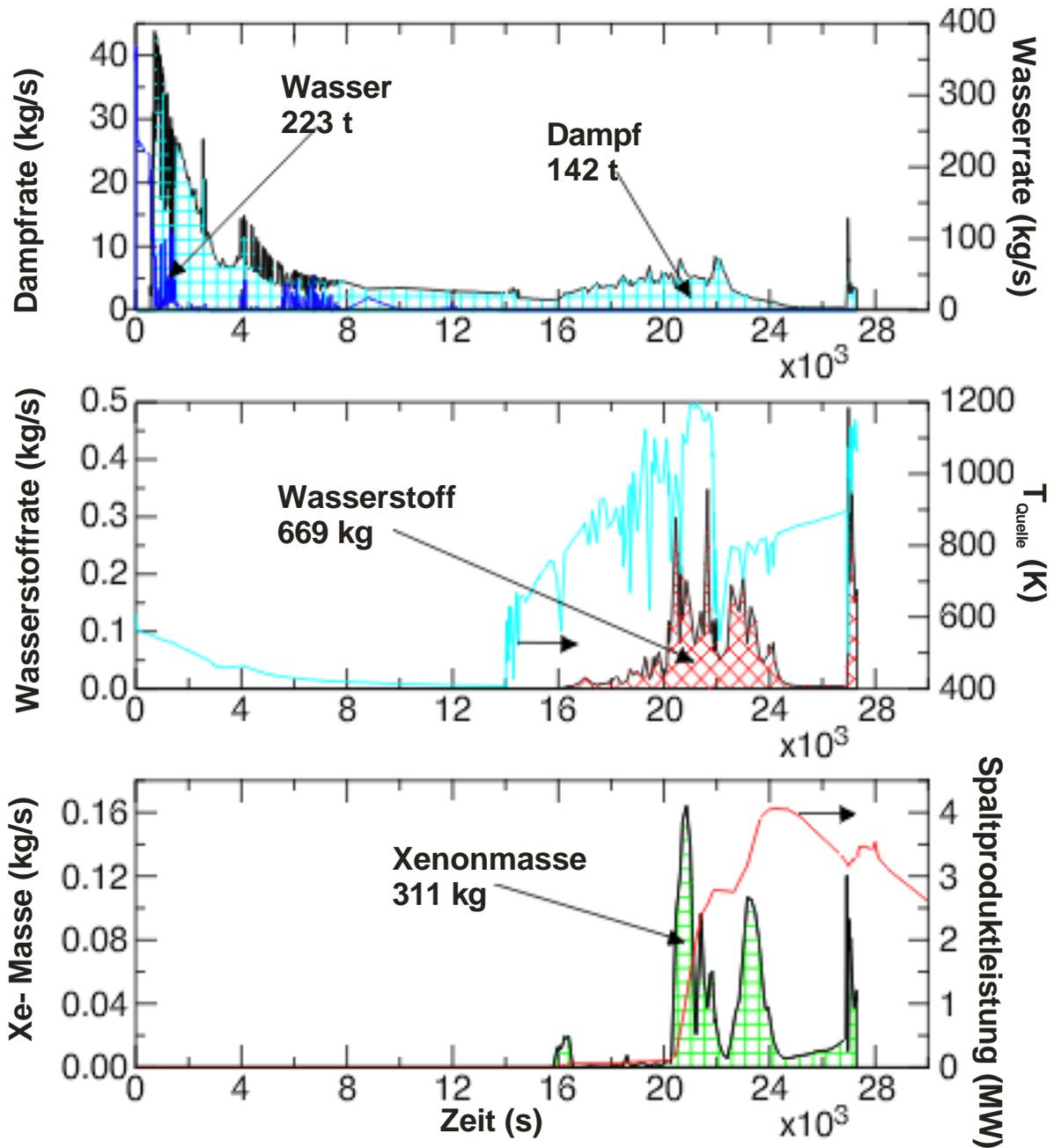


Abb.10.6.2: Quellterme für Analyse eines Small-Break LOCA Unfalls in GKN-2, Ergebnisse einer MELCOR-Rechnung der GRS. Wegen der geringen Dampffreisetzungsratesetzt die Kernzerstörung sehr viel später als beim Surge-Line LOCA ein (vergl. Abb. 10.5.2).

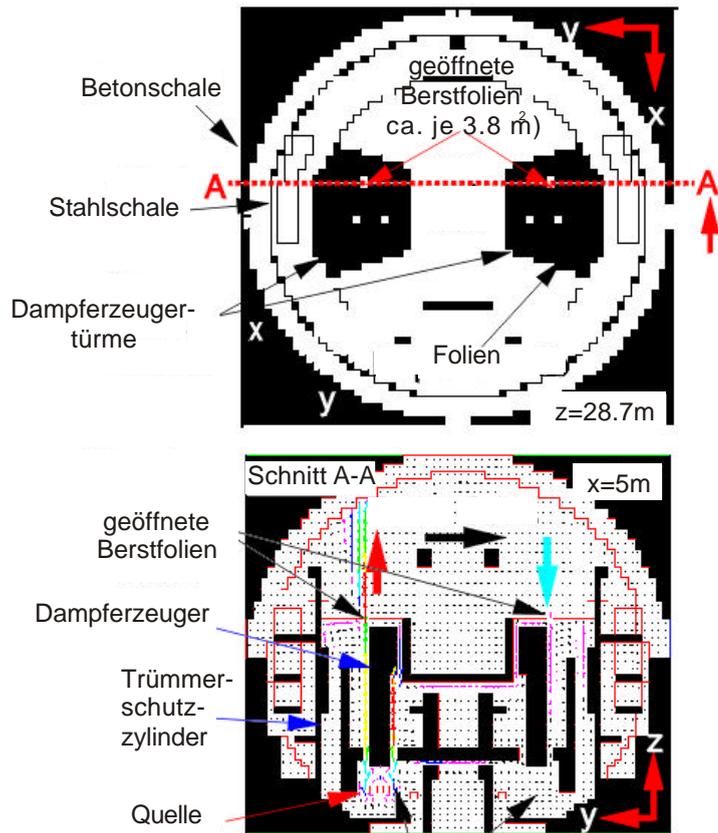


Abb.10.6.3: Horizontaler Containmentschnitt auf Höhe der Berstfolien (oben) und resultierende Konvektionsschleifen (unten). Durch den langsamen Druckaufbau beim SB-LOCA öffnen in beiden Dampferzeugertürmen nur wenige Berstfolien, was zu einem geringen Gasaustausch zwischen Anlagen- und Betriebsräumen führt.

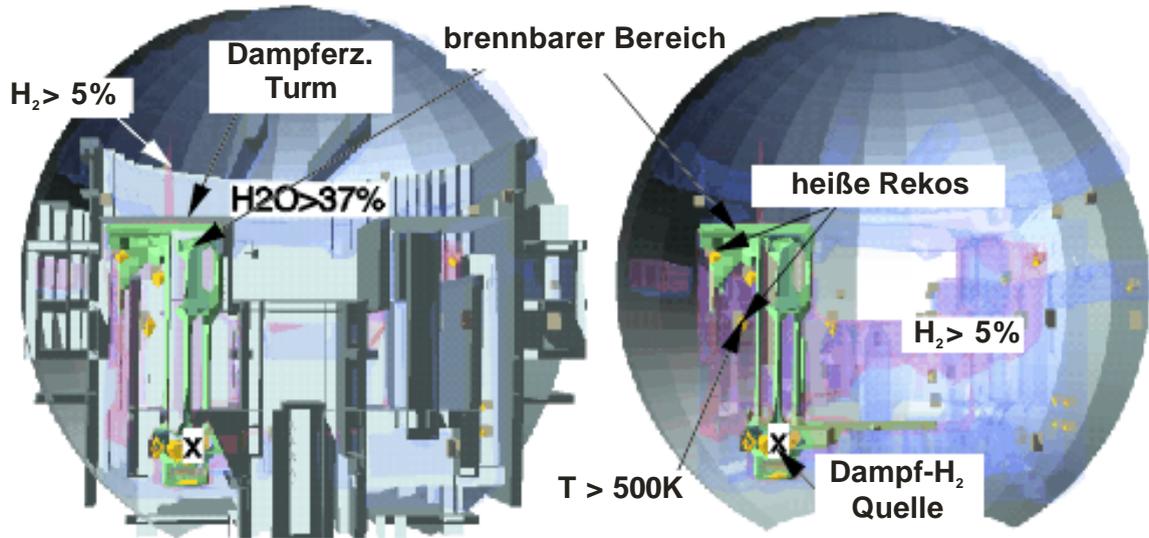


Abb.10.6.4: Berechnete Wasserstoff-, Dampf und Temperaturverteilung im Containment im ersten Peak der H<sub>2</sub>- Freisetzung (20.458 s). Der Raumbereich mit brennbaren H<sub>2</sub>-Luft Dampfmischungen ist grün dargestellt, der größere Bereich mit > 5Vol% H<sub>2</sub> ist transparent als rote Wolke hinterlegt und zeigt die Wasserstoffausbreitung in den Anlagenräumen.

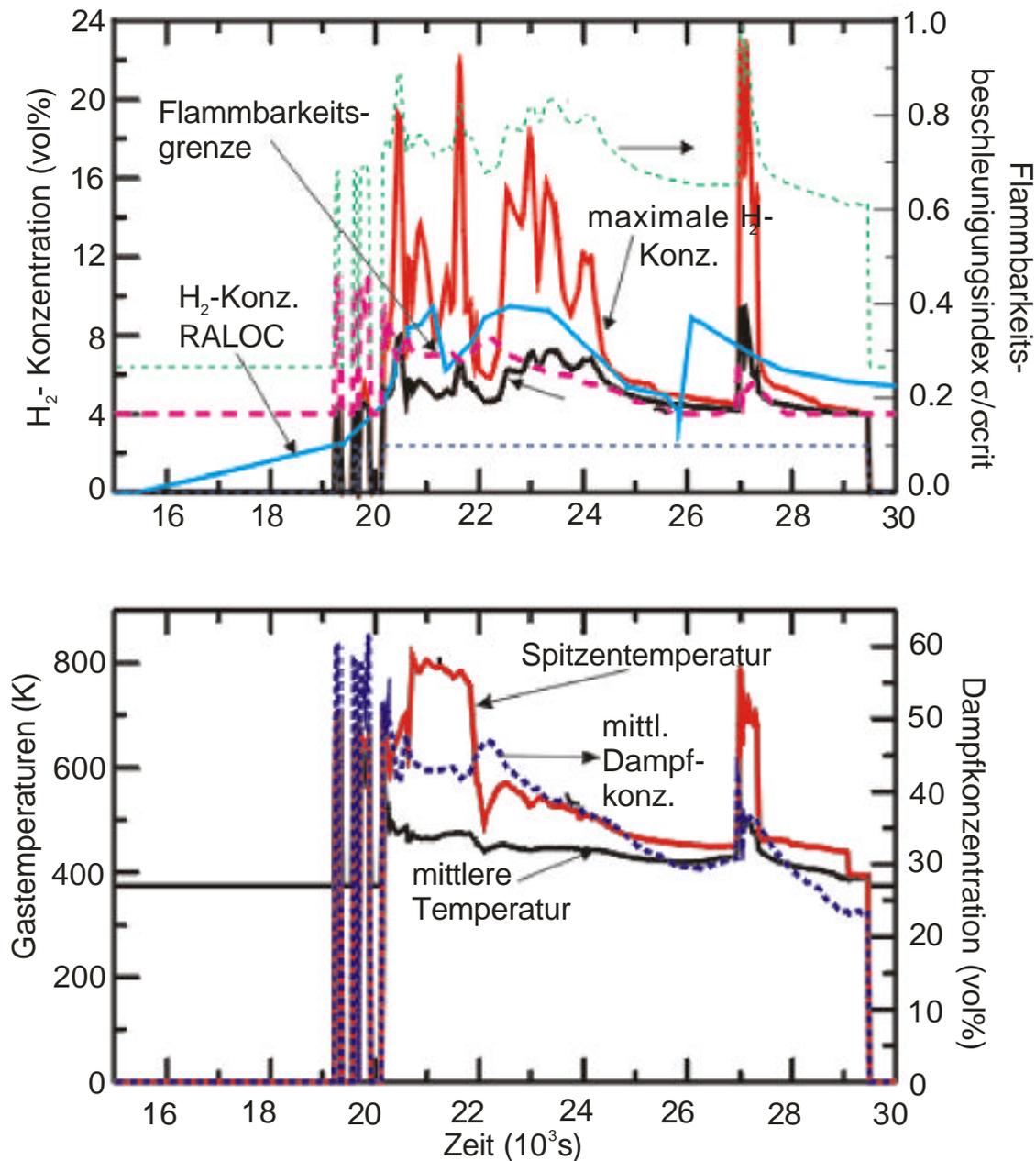


Abb.10.6.5: GASFLOW Ergebnis für den Bruchraum der SB-LOCA Simulation (Raum Nr. 8 in Abbildung 10.5.1,  $711 \text{ m}^3$ )

(oben) maximale  $H_2$  Konzentration (rot), mittlere  $H_2$  Konzentration (schwarz),  $H_2$  Konzentration RALOC (hellblau), magere Zündgrenze (lila), Flammenbeschleunigungs Index (grün)

Die lokale maximale  $H_2$  Konzentration erreicht einen Spitzenwert von 22 % bei 27.000 s, während die mittlere Raumkonzentration nur 8% erreicht. Lokal treten stark sensitive Bereiche im Bruchraum auf, die mit dem Volumencode RALOC nicht aufgelöst werden können. Das Kriterium für Flammenbeschleunigung  $\sigma/\sigma_{crit}=1$  wird im Freisetzungspk durch den Kernabsturz bei 27,000 s kurzzeitig überschritten. Abbildung unten: maximale Gastemperatur (rot), mittlere Gastemperatur (schwarz), mittlere Dampfkonzentration (blau) bestimmt magere Zündgrenze und begrenzt Flammenbeschleunigungsindex.

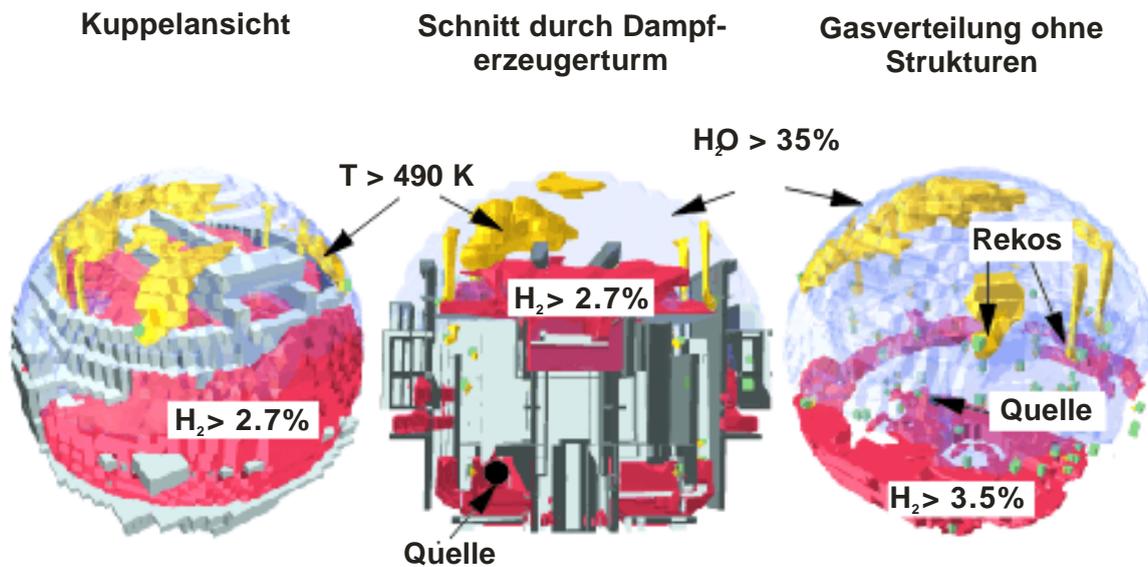


Abb.10.6.6: Berechnete Wasserstoff-, Dampf- und Temperaturverteilung am Ende der GASFLOW Analyse bei 30,000 s. Durch Kondensation von Dampf an kalten Wänden sinkt ein schweres  $H_2$ -Luftgemisch nach unten. Dampfkonzentration und Temperatur zeigen eine stabile Stratifikation mit den höchsten Werten im Dombereich.

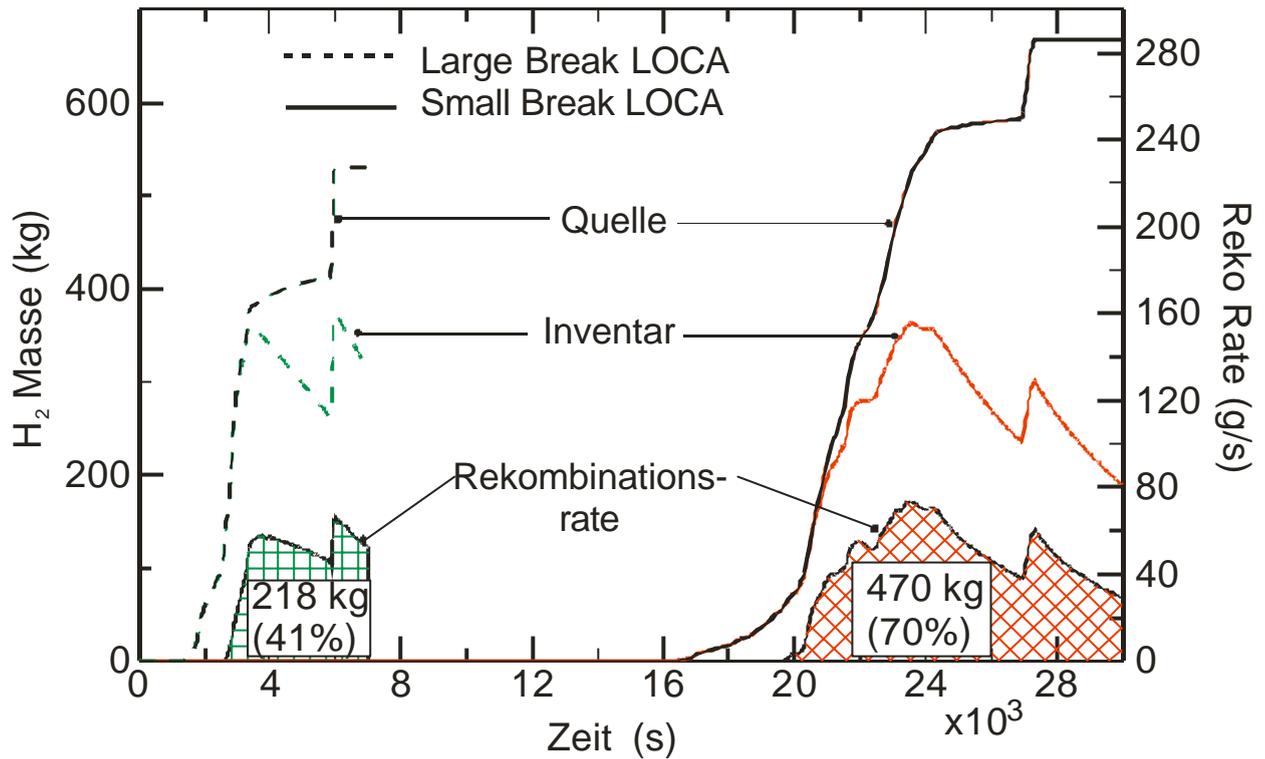


Abb.10.6.7: Vergleich der mit GASFLOW berechneten Wasserstoffmassen und -abbauraten für Surge- Line LOCA und Small-Break LOCA in GKN-2. Die eingesetzten 62 Siemensrekombinatoren ergeben eine wesentliche Wasserstoff- und Risikominderung auf der Stunden Zeitskala. Auch das maximale H<sub>2</sub> Inventar in der Anlage wird deutlich reduziert und auf etwa 350 kg begrenzt.



## 11. Reaktoranwendungen: Studien für zukünftige Konzepte

In diesem Abschnitt werden Anwendungen der entwickelten Analysenmethodik auf zukünftige Reaktorkonzepte beschrieben. Tabelle 11.1 vermittelt einen Überblick zu den untersuchten Fällen, wobei die eingesetzten Wasserstoffgegenmaßnahmen in der ersten Zeile aufgeführt sind. Wie in Tabelle 10.1 sind die aufeinander folgenden Analyseschritte in der ersten Spalte angegeben.

Zentrales Ziel einer deterministischen Wasserstoffanalyse für zukünftige Reaktoranlagen ist die Ableitung tragfähiger Gegenmaßnahmen und der Nachweis, dass damit das maximal mögliche Wasserstoffinventar in der Anlage ohne Verlust der Containmentintegrität beherrscht werden kann.

Im Prinzip gibt es zwei Ansätze für das erfolgreiche Wasserstoffmanagement in zukünftigen Reaktoranlagen. Der erste Ansatz besteht darin das Containment so zu verstärken, dass die maximal mögliche Verbrennungslast abgetragen werden kann. In diesem Fall wird die Struktur der Last angepasst. Der andere Weg besteht darin den heutigen Containmentdesign, der auf große Brüche des Primärkreises ausgelegt ist, beizubehalten und die Lasten bei schweren Störfällen so zu reduzieren, dass die vorgegebenen Grenzen der Containmentbelastbarkeit nicht überschritten werden. In diesem Fall wird die maximale Last durch den Einbau von geeigneten Gegenmaßnahmen an die Struktur angepasst. Dieser zweite Weg entspricht eher einem evolutionären Prozess, während der erste Weg einen radikal neuen störfallfesten Containmentdesign erfordert.

In diesem Abschnitt werden Analysen und Ergebnisse für beide Vorgehensweisen präsentiert. Alle im folgenden beschriebenen Analysen zum Wasserstoffverhalten in EPR wurden in enger Zusammenarbeit mit Framatome ANP durchgeführt.

### 11.1 EPR ohne und mit Zünder

Die erste Analyse des Wasserstoffverhaltens in einem zukünftigen Europäischen Druckwasserreaktor (EPR) untersuchte die Bildung brennbarer Gemische ohne H<sub>2</sub>-Gegenmaßnahmen (Tabelle 11.1, zweite Spalte).

In der frühen EPR-Designphase war vorgesehen alle Gase und Spaltprodukte die bei einem Kernschmelzunfall entstehen zunächst in ein internes Wasserreservoir (IRWST = Internal refueling water storage tank) zu leiten und die nicht kondensierbaren Gase erst von dort in das Containment eintreten zu lassen. Der große Vorteil dieses Ansatzes besteht in der sehr effektiven Filterung der radiologischen wirksamen Spaltprodukte, der Nachteil liegt in der Kondensation des Wasserdampfes und der Entstehung einer trockenen Wasserstoffquelle. Ziel dieser ersten Untersuchungen war eine Abschätzung der Auswirkungen dieses Konzepts auf die gesamte Wasserstoffsituation.

Abb. 11.1.1 zeigt eine Ansicht des relativ einfachen Geometriemodells das für diese Übersichtsstudie entwickelt und eingesetzt wurde. Die konservativ unterstellte Wasserstofffreisetzung ist in Abb. 11.1.2 dargestellt. Sie besteht aus einer in-vessel und einer ex-vessel Phase mit je 600 kg Wasserstoff. Die Freisetzung über den IRWST und die Verteilung des Wasserstoffs im Containment wurde mit GASFLOW

**Tabelle 11.1: Reaktoranwendungen Studien für zukünftige Konzepte**

ANALYSE-SCHRITT	ANLAGE						Verbund-Containment
	EPR						
Gegenmaßnahmen	a) keine b) Zünder	keine	44 Reko's (Siemens)	44 Reko's plus 4 Zünder	44 Reko's (Siemens)	Dampfeinspeisung (Siemens)	Verstärkte Strukturen
Szenario	Trockene H <sub>2</sub> - Freisetzung über IRWST	LOOP mit Reflood	LOOP	LOOP mit Reflood	SB-LOCA	SB-LOCA mit verzög. Druck- entlastung	Abdeckende Szenarien
Quellen	In-vessel 600 kg H <sub>2</sub> Ex-vessel 600 kg H <sub>2</sub>	MAAP (Framatome)					Obergrenze H <sub>2</sub> - Erzeugung 1200 kg H <sub>2</sub>
Verteilung	GASFLOW 12.000 Nodes zylindrisch	GASFLOW 135.000 Nodes (zylindrisches Gitter)					Annahme homogener H <sub>2</sub> -Luft-Mischung
Risiko-Potential	$\sigma$ -Kriterium $\lambda$ - Kriterium	$\lambda$ - Kriterium				$\sigma$ -Kriterium $\lambda$ - Kriterium	
Deflagration			COM3D 1.1 Mio. Nodes			COM3D	
Detonation			DET3D 1.1 Mio. Nodes				DET3D 680.000 Nodes
Struktur-verhalten			Einmassensch wingermodell				ADINA (Uni Karlsruhe)
Abbildungen	11.1	11.2	11.3	11.4	11.5	11.6	11.7

simuliert. In verschiedenen Reaktorräumen wurden die lokalen  $H_2$ -Konzentrationen gemittelt und das zuvor beschriebene Flammenbeschleunigungskriterium ausgewertet. Abb. 11.1.3 zeigt den  $\sigma$ -Index in den angegebenen Containmentbereichen als Funktion der Zeit. Im IRWST sind schnelle Flammen praktisch über die gesamte  $H_2$ -Freisetzungszeit möglich, im Dampferzeugerraum 1 (DE1), im Pumpenraum 1 (Pumpe 1) und in der Kuppel vor allem während der ex-vessel Phase.

Abb. 11.1.4 zeigt die entsprechenden Ergebnisse für die Berechnung des DDT-Index. Im IRWST bilden sich schon früh Gemische die weit im detonationsfähigen Bereich liegen ( $D/7\lambda \gg 1$ ). Ab ca. 3000 s führt die unterstellte trockene  $H_2$ -Freisetzung zu detonationsfähigen Mischungen im gesamten Containment, weil so wohl Flammenbeschleunigung und Detonationsübergang möglich sind. Es ist aufschlussreich, dass die zeitliche Entwicklung des DDT-Index  $D/7\lambda$  im quellnahen Bereich (IRWST) der Freisetzungsrate folgt, während er im quellfernen Bereich eher dem gesamten  $H_2$ -Inventar im Containment entspricht.

Wegen der sich schon frühzeitig ausbildenden Gefährdungssituation im IRWST wurde als nächstes der Effekt von Zündern als Gegenmaßnahme untersucht. Im GASFLOW-Modell wurden dazu Glühkerzen in den IRWST-Öffnungen installiert (Abb. 11.1.5). Die Rechnung zeigt schon während der ersten massiven  $H_2$ -Freisetzung bei ca. 800 s eine Zündung des  $H_2$ -Luftgemischs am IRWST-Ausgang und nachfolgend eine stabile Diffusionsflamme (Abb. 11.1.6). Die  $H_2$ -Inventare im EPR-Containment ohne und mit Zünder sind in Abb. 11.1.7 verglichen. Mit Zündern bleibt das Inventar unter 50 kg  $H_2$ , d.h. hohe dynamische Drucklasten sind ausgeschlossen. Allerdings verursachen die stehenden Diffusionsflammen erhebliche thermische Lasten auf die umgebenden Betonstrukturen. Eine  $H_2$ -Freisetzungs- und Verbrennungsrate von 1 kg/s (siehe Abb. 11.1.7) entspricht einer thermischen Leistung von etwa 120 MW.

Die frühe Zündung einer trockenen  $H_2$ -Freisetzung verschiebt somit das Gefährdungspotential des Containments von kurzzeitigen hohen Drucklasten auf langfristige thermische Lasten.

## 11.2 EPR ohne Gegenmaßnahmen

Zur genaueren Untersuchung der  $H_2$ -Situation im EPR wurde als nächstes in Zusammenarbeit mit Framatome ANP ein verfeinertes EPR-Geometriemodell mit 135.000 Nodes erstellt und aktuelle  $H_2$ -Dampf-Quellterme für den EPR untersucht. Diese Analyse ohne Gegenmaßnahmen diente als Referenz- und Basisfall an dem die Effektivität von  $H_2$ -Kontrollsystemen überprüft werden konnte. Als Unfallszenario wurde ein LOOP (Loss of offsite power) als auslösendes Ereignis unterstellt. Konservative Abschätzungen mit MAAP ergaben ca. 900 kg  $H_2$  Produktion für diesen Unfallablauf. Der dabei ebenfalls entstehende Dampf kondensiert nahezu vollständig in dem unterkühlten IRWST-Wasser (30°C).

Die GASFLOW-Simulation ergab für diese trockene  $H_2$ -Freisetzung eine stabile Stratifikation und  $H_2$ -Ansammlung im Dom des Containments mit 9 bis 13%  $H_2$  in Luft (Abb. 11.2.1). Die schwarzen Bereiche in dieser Abbildung kennzeichnen Schnitte

durch Beton- oder Primärkreisstrukturen. Nach dem  $7\lambda$ -Kriterium kann bei solchen  $H_2$ -Konzentrationen eine Detonation im Dom nicht ausgeschlossen werden. Dieser Befund deckt sich mit den Ergebnissen von Abschnitt 11.1. Die Bildung von  $H_2$ -Ansammlungen im Dom, zusammen mit der großen Zircalloy-Masse des 1500 MWe-Kerns und dem relativ kleinen freien Containmentvolumen von 80.000 m<sup>3</sup> machen Wasserstoffkontroll-Maßnahmen in diesem Anlagendesign unumgänglich.

### 11.3 EPR/LOOP mit Siemens-Rekombinatoren

Der nächste Schritt bestand darin 44 Siemens-Rekombinatoren als Gegenmaßnahme in die Analyse einzubeziehen. Die Reko-Positionen wurden von Siemens-Framatome vorgegeben. Wie im vorausgehenden Fall wurde eine trockene Freisetzung von ca. 900 kg  $H_2$  untersucht. Die GASFLOW-Rechnung ergab nun eine Abnahme des maximalen  $H_2$ -Inventars von vormals 900 kg auf etwa 720 kg. Diese relativ geringe Abnahme des maximalen Inventars beruht darauf, dass die erste massive  $H_2$ -Freisetzung während der frühen Kernzerstörung wesentlich schneller abläuft (in ca. 10 Minuten) als der  $H_2$ -Abbau durch Rekombinatoren (Stunden). Solche schnellen ersten  $H_2$ -Freisetzungsphasen treten in fast allen Kernschmelzszenarien auf weil die Oxidation der anfangs vorhandenen großen Zircalloymengen eine unkontrollierte Temperatureskalation auslöst.

Das untersuchte Rekombinatorik Konzept bewirkt zwar einen erheblichen  $H_2$ -Abbau auf der Stundenskala, erlaubt aber immer noch die Akkumulation von bis zu 720 kg  $H_2$  im gesamten Containment. Als nächstes wurde deshalb die turbulente Deflagration dieser  $H_2$ -Menge mit COM3D modelliert. Als Anfangsverteilung diente die mit GASFLOW berechnete  $H_2$ -Luft-Mischung im Containment. Das sehr detaillierte EPR-Geometriemodell bestand aus 1.1 Millionen kubischer Rechenzellen mit 40 cm Kantenlänge. Die Rechnungen wurden auf einer Cray J90 mit vier Prozessoren durchgeführt.

Abb. 11.3.1 zeigt das  $H_2$ -Konzentrationsfeld 0.4 s nach Zündung der Verbrennung auf der rechten Containmentseite. Die 3d-Geometrie wird hier durch 3 orthogonale 2D-Schnitte dargestellt. Die Ergebnisse sind bemerkenswert und nicht trivial. Die höchste Flammengeschwindigkeit (etwa 150 m/s) tritt nicht im Bereich der höchsten  $H_2$ -Konzentrationen, also im Dom auf, sondern in Regionen die sowohl genügend  $H_2$  als auch Turbulenzerzeugung aufweisen. Dies sind die Bereiche unterhalb der Betriebsebene und die Treppenhäuser.

Die höchsten Drücke entstehen auf der Containmentseite *gegenüber* dem Zündort weil sich hier zwei Verbrennungsfronten und die Drücke überlagern (Abb. 11.3.2. oben). Die rechte Containmentwand wird nahezu gleichförmig mit Drücken bis zu etwa 4 bar belastet. Da die Druckanstiegszeit hier wesentlich länger ist als die Containment-Responsezeit, stellt dies eine quasistatische Last dar. Die gegenüberliegende Containmentwand erfährt dagegen Lasten die mehr im dynamischen Bereich liegen (Lastdauer vergleichbar mit Responsezeit).

Die Anwendung des DDT-Kriteriums auf diesen Fall zeigt, dass ein Detonationsübergang möglich ist. Deshalb wurden die Drucklasten aus einer detonativen Verbrennung mit dem Programm DET3D berechnet. Als Ursprung der Detonation wurde der hochliegende Kranrundlauf angenommen, weil hier turbulenz erzeugende

Strömungshindernisse und hohe  $H_2$ -Konzentrationen vorliegen. Die Anfangstemperatur betrug 320 K und der Druck 1.23 bar. Die  $H_2$ -Konzentration variierte linear von 7 bis 13%.

Abb. 11.3.3. zeigt 2D-Schnitte des berechneten Druckfeldes zu verschiedenen Zeiten während der Detonationsausbreitung von links nach rechts im Containment. Lokale Druck-Zeitverläufe an verschiedenen Positionen am oberen Zylinder sind in Abb. 11.3.4 (oben) zu sehen. Die entsprechenden Impulse sind unten dargestellt.

In Punkt 1 wurde die detonative Zündung eingeleitet. In den Punkten 2, 3 und 4 bewirkt die Detonation eine seitliche Drucklast, während in den Punkten 5, 6 und 7 höhere reflektierte Drücke auftreten. Die berechneten Impulse aus der Detonationswelle variieren entsprechend. Wegen der sehr kurzen Anstiegszeit der Drucklast ist ihr Impuls für die Auslenkung des schweren Betoncontainments entscheidend, nicht der erreichte Spitzendruck. Der Gesamtimpuls den die Containmentwand erfährt, besteht aus dem Impuls der eigentlichen Detonationswelle und dem Impuls des verbrannten Gases, dessen Beitrag wegen der längeren Wirkungszeit überwiegt. Insofern ist die Frage ob eine gegebene  $H_2$ -Luft-Mischung in einer schnellen Deflagration oder in einer Detonation verbrennt für den Containmentresponse nicht entscheidend, in beiden Fällen wird die Auslenkung der Containmentwand von dem lange anstehenden Druck des verbrannten Gases bestimmt.

#### **11.4 EPR/LOOP mit Rekombinatoren und Zündern**

Zusätzlich zu den 44 Rekombinatoren im Gebäude wurde an jeder der vier IRWST-Öffnungen an denen Wasserstoff austreten kann ein Funkenzünder installiert. Wie zuvor in Kapitel 11.3 wurde für das LOOP-Szenario eine Wasserstoffquelle mit insgesamt 900 kg angenommen und in der GASFLOW-Simulation modelliert.

Mit diesen Annahmen zeigte die GASFLOW-Rechnung eine frühe Zündung bei einem  $H_2$ -Inventar von 110 kg im Gebäude. Danach ergab die Simulation eine stehende  $H_2$ -Luft-Diffusionsflamme an jeder der vier IRWST-Öffnungen (Abb. 11.4.1). Die Auswertung des  $\lambda$ -Kriteriums zeigte, dass zu keiner Zeit eine DDT-Möglichkeit bestand und eine sichere Implementierung der Zünder für das untersuchte LOOP-Szenario möglich ist. Die frühe Zündung und der nachfolgende kontinuierliche Abbrand des freigesetzten Wasserstoffs verhindern die Entstehung von nennenswerten Drucklasten.

Experimentelle Untersuchungen zur Stabilität von  $H_2$ -Luft-Dampf-Diffusionsflammen haben gezeigt, dass die Flammenlänge im Bereich des 20 bis 200-fachen des Austrittsdurchmessers liegt, je nach Austrittsgeschwindigkeit des Brenngases. Wegen der großen räumlichen Ausdehnung und der erheblichen thermischen Leistung von  $H_2$ -Diffusionsflammen, die z.B. bei 1 kg  $H_2$ /s etwa 120 MW erreichen, sollten die thermischen Effekte solcher Flammen genauer untersucht werden. Die Ergebnisse können dann dazu genutzt werden Überlastungen von sicherheitsrelevanten Systemen wie Zündern, Rekombinatoren oder Sprüheinrichtungen durch entsprechende Designmaßnahmen zu vermeiden.

## 11.5 EPR/SB-LOCA mit Rekombinatoren

Ein tragfähiges Konzept zur Wasserstoffkontrolle im EPR muss bei verschiedenen Unfallszenarien wirksam sein. Neben dem oben beschriebenen LOOP ist ein SB-LOCA mit sekundärseitiger Kühlung ein wichtiger Testfall für effektive Wasserstoffgegenmaßnahmen weil durch die Nachwärmeübertragung an den Sekundärkreis nur wenig Dampf in das Containment gelangt und relativ reaktive H<sub>2</sub>-Dampf-Luftmischungen entstehen.

MAAP4 Rechnungen bei Framatome ergaben für dieses Szenario eine Wasserstoffquelle von etwa 820 kg mit relativ wenig Dampf. Abb. 11.5.1 zeigt das Geometriemodell und eine Momentaufnahme aus der GASFLOW-Verteilungsrechnung mit der Wasserstoffwolke >10% H<sub>2</sub>, der Dampfanreicherung im Dom und den heißen Reko-Abgasen [ 11.1]. Die räumliche Anordnung der 44 Rekombinatoren im Containment ist aus Abb. 11.5.2 zu ersehen. Nahe an der Quelle zeigen drei Rekombinatoren Abgastemperaturen oberhalb der Selbstzündungstemperatur. Eine Selbstzündung des H<sub>2</sub>/Dampf-Gemischs ist demnach nicht auszuschließen.

Die mit GASFLOW berechnete H<sub>2</sub>-Dampfverteilung diene als Anfangsbedingung für eine Verbrennungssimulation mit COM3D. Abbildung 11.5.3 zeigt drei orthogonale 2D-Schnitte durch die Containmentgeometrie mit den während der gesamten Rechnung maximal erreichten Druckwerten. Der höchste Verbrennungsdruck erreicht 6.2 bar in einem oben geschlossenen Pumpenraum.

In Abb. 11.5.4 sind einige Druckverläufe auf der äußeren Containmentwand dargestellt. Die Spitzendrücke liegen deutlich unter dem statischen Auslegungsdruck des EPR-Containments. Die Verbrennung beginnt zwar recht schnell in den innen Bereichen mit hohen H<sub>2</sub>-Konzentrationen, verlangsamt sich aber in Richtung der Containmentwände wegen der abnehmenden H<sub>2</sub>-Konzentrationen.

## 11.6 EPR/SB-LOCA mit direkter Dampfeinspeisung

Als Ergebnis der vorherigen COM3D-Rechnung, bei der hohe interne Drücke in dem oben geschlossenen Pumpenraum auftraten, wurden Entlastungsöffnungen in benachbarte Dampferzeugerräume geschaffen. Mit diesem verbesserten Design wurde ein SB-LOCA mit direkter Dampfeinspeisung analysiert.

Die direkte Dampfeinspeisung vom Rektordruckbehälter über zwei Sammel tanks in das Containment stellt eine neue Maßnahme von FANP dar um hohe Dampfgehalte im Containment für viele Unfallszenarien zu erreichen. Die Wasserstofffreisetzung erfolgt an drei Stellen: über die beiden Sammel tanks und über das kleine Leck.

Abb.11.6.1 zeigt einen Schnitt durch die EPR-Geometrie und das H<sub>2</sub>-Konzentrationsfeld zu einem festen Zeitpunkt (8000 s nach Unfallbeginn) [11.1]. Wasserstoff sammelt sich bevorzugt an Hochpunkten an, wie z.B. im Dom oder in den oberen Pumpen- und Dampferzeugerräumen. Die höchsten Werte ergeben sich oberhalb des kleinen Lecks. Der Dampfgehalt der Atmosphäre liegt bei etwa 50%.

Aus den berechneten lokalen H<sub>2</sub>- und Dampfkonzentrationen können die entsprechenden lokalen  $\sigma$ -Indizes ( $=\sigma/\sigma^*$ ) berechnet werden. Für Werte größer als 1

besteht ein Potential für schnelle Flammenbeschleunigung. Abb. 11.6.2 zeigt, dass sich insbesondere in den Anlageräumen hinreichend sensitive Mischungen bilden wenn keine freie Konvektion nach oben möglich ist. Aus Sicht der Wasserstoffkontrolle ist es günstiger oben geschlossene Räume zu vermeiden.

Eine entsprechende 3D-Darstellung ist in Abb. 11.6.3 für die Bedingung  $\sigma$ -Index  $>1$  dargestellt. Man erkennt sehr gut die Containmentbereiche die zu dem gewählten Zeitpunkt mit potentiell schnell brennbaren Mischungen versehen sind. Es sind im wesentlichen zwei Zonen oberhalb der Einspeisestellen in das Containment.

Abb. 11.6.4 zeigt diejenigen Raumbereiche, für die sowohl Flammenbeschleunigung möglich erscheint ( $\sigma$ -Index  $>0.9$ ) als auch eine kleine Detonationszellgröße ( $<2$  m) vorliegt. Die Darstellung bezieht sich wieder auf 8000 s, einen Zeitpunkt zu dem hohe  $H_2$ -Freisetzungsraten und sensitive Mischungen im Containment bestehen. Kleine Detonationszellgrößen liegen insbesondere oberhalb der linken Quelle in Raumbereichen mit eingeschränkter Konvektionsmöglichkeit vor. Diese Gefährdungszonen können durch eine offenere Gebäudestruktur vermieden werden.

Die mit GASFLOW berechnete  $H_2$ -Dampf-Luft-Verteilung für den angenommenen Zündzeitpunkt (180 s nach Beginn der  $H_2$ -Freisetzung) wurde im COM3D übertragen und der Verbrennungsablauf simuliert. Abbildung 11.6.5 zeigt ein momentanes Temperaturfeld aus dieser Rechnung. In dem gewählten Zündzeitpunkt befinden sich 680 kg  $H_2$  im Containment. Wegen des relativ hohen Dampfgehalts von etwa 50% entstehen nur Flammengeschwindigkeiten bis etwa 60 m/s. Dadurch kommt es weder auf den inneren Strukturen noch auf den Containmentwänden zu gefährlichen dynamischen Drucklasten.

In enger Zusammenarbeit mit FANP wurden zusätzliche Parametervariationen für diesen Fall untersucht um abdeckende Drucklasten zuverlässig zu bestimmen. Die Ergebnisse zeigen keine Gefährdung des Containments durch schnelle turbulente Deflagrationen.

## 11.7 Verbund-Containment

Die bisher beschriebenen Unfallanalysen in den Abschnitten 11.1 – 11.6 verfolgen den Ansatz die Wasserstoffverbrennungslasten bei Kernschmelzunfällen durch geeignete Kontrollmaßnahmen so zu begrenzen, dass ein herkömmlicher Containmentdesign nicht mehr gefährdet ist. Die Universität Karlsruhe hat in Zusammenarbeit mit FZK in einer Studie die Machbarkeit eines neuen Sicherheitsbehälters untersucht, der von vorneherein auf die Lasten bei Kernschmelzunfällen ausgelegt ist [11.2]. Dieses Sicherheitskonzept soll die Unversehrtheit der äußeren Sicherheitsumschließung selbst bei Kernschmelzunfällen gewährleisten.

Eine wichtige Lastform für ein störfallfestes Containment stellen Wasserstoffverbrennungsprozesse dar. In diesem Abschnitt werden die FZK-Arbeiten zur Definition von Lastobergrenzen beschrieben. Diese Obergrenzen dienen der Uni Karlsruhe für die Auslegung der Containmentstruktur.

Abb. 11.7.1 zeigt den Wandaufbau des neuen Verbundcontainments. Die innere Stahlschale kann sich auf die äußere sehr stabile Betonhülle abstützen und dadurch

sehr hohe dynamische Lasten wie sie z.B. bei H<sub>2</sub>-Detonationen auftreten, sicher aufnehmen [11.3].

Für die Ermittlung von abgrenzenden dynamischen Lasten bei Kernschmelzunfällen wurden zunächst abdeckende Szenarien untersucht und eine Obergrenze für die H<sub>2</sub>-Erzeugung bei Kernschmelzunfällen festgelegt (1200 kg H<sub>2</sub>). Anstelle von GASFLOW-Verteilungsrechnungen wurden in diesem Fall verschiedene homogene H<sub>2</sub>-Luft-Dampf Gemische mit der maximalen H<sub>2</sub>-Menge von 1200 kg postuliert, weil die globale dynamische Last hauptsächlich von der umgesetzten H<sub>2</sub>-Masse und weniger von ihrer räumlichen Verteilung abhängt. Für die verschiedenen Mischungen wurden Detonationsrechnungen durchgeführt.

Abb. 11.7.2 zeigt das verwendete Geometriemodell, das eine Viertelkugel mit einigen vereinfachten Einbauten zeigt. Die Detonation wurde für eine abdeckende Mischung an verschiedenen Orten gezündet und auch für den Fall einer zentralen Zündung mit verschiedenen Mischungen simuliert. In Abb. 11.7.3 sind berechnete Überdrücke am Scheitelpunkt des Containmentdome für verschiedene H<sub>2</sub>-Luft-Dampf Mischungen dargestellt. Für die Containmentbelastung ist nicht der Spitzendruck der ersten Detonationswelle sondern der Impuls der Detonationswelle und der nachfolgenden Druckwellen im verbrannten Gas maßgebend.

Aus den derart berechneten Lastkurven wurde eine einhüllende konservative Drucklast für FEM-Rechnungen mit ADINA definiert (Abb. 11.7.4). Die berechneten Auslenkungen sind in Abb. 11.7.5 für eine lokale Drucklast dargestellt. Es konnte gezeigt werden, dass sowohl lokale als auch globale Wasserstoffdetonationen von dem Verbundcontainment abgetragen werden können. Es ist demnach technisch möglich und auch kostenmässig vertretbar, ein detonationssicheres Reaktorcontainment zu bauen.

## Referenzen

- [11.1] J. Eyink, M. Movahed, K.-G. Petzold, A. Kotchourko, P. Royl, J.R. Travis; "Thermal and Dynamic Loads on the EPR Containment Due to Hydrogen Combustion", Proceedings of ICONE-9, Nice Acropolis, France, April 8-12, 2002
  
- [11.2] H.H. Hennies, G. Kessler, J. Eibl; "Improved Containment Concept for Future PWR's", 5<sup>th</sup> Int. Conf. on Emerging Nuclear Energy Systems, Karlsruhe, Germany, July 3-6, 1989, p. 19
  
- [11.3] J. Eibl; "Zur bautechnischen Machbarkeit eines alternativen Containments für Druckwasserreaktoren -Stufe 3-, KfK 5366, August 1994.

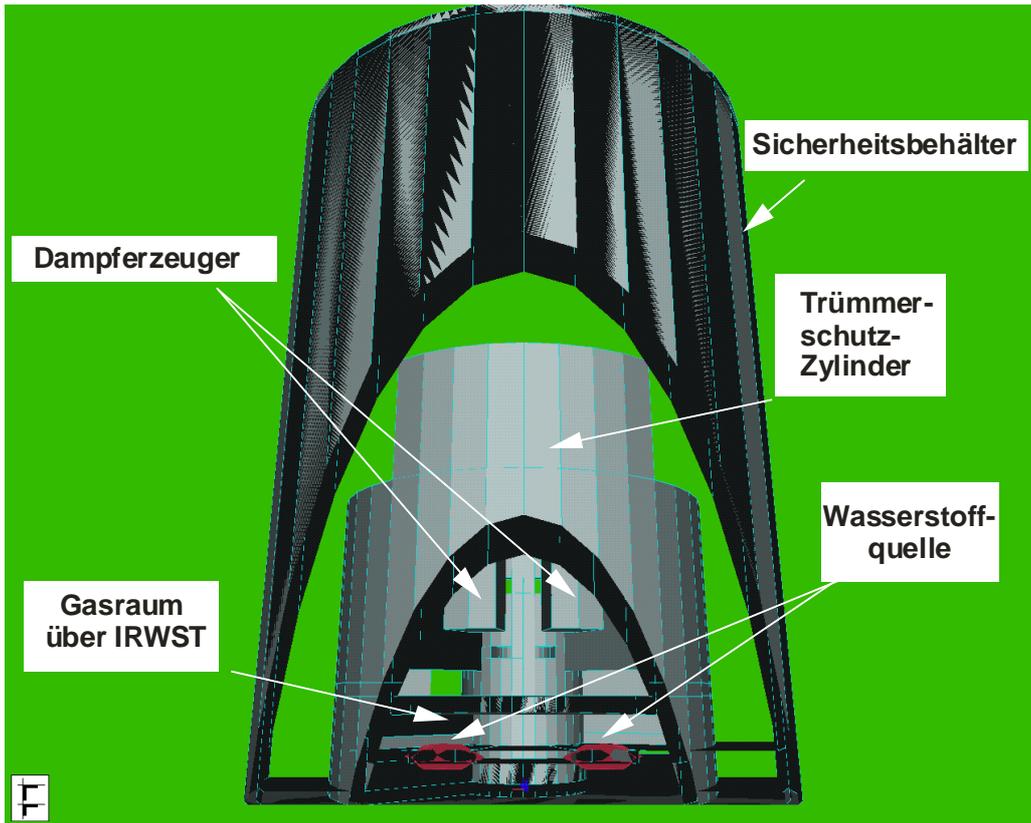


Abb. 11.1.1: EPR-Geometriemodell für GASFLOW Analyse einer  $H_2$ /Dampf-Freisetzung über den internen Wassertank (Internal Refueling Water Storage Tank, IRWST), ca. 12.000 Rechenzellen.

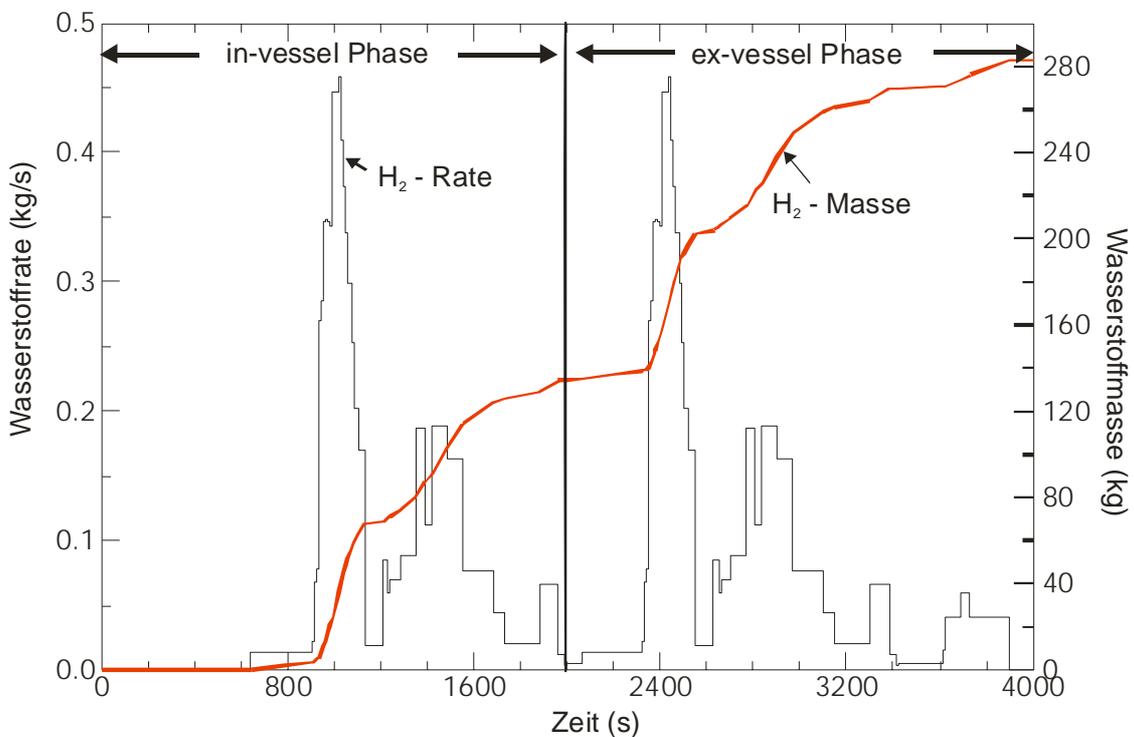


Abb. 11.1.2: Angenommene konservative Wasserstoff-Freisetzungsrates in den EPR mit in-vessel und ex-vessel Phase.

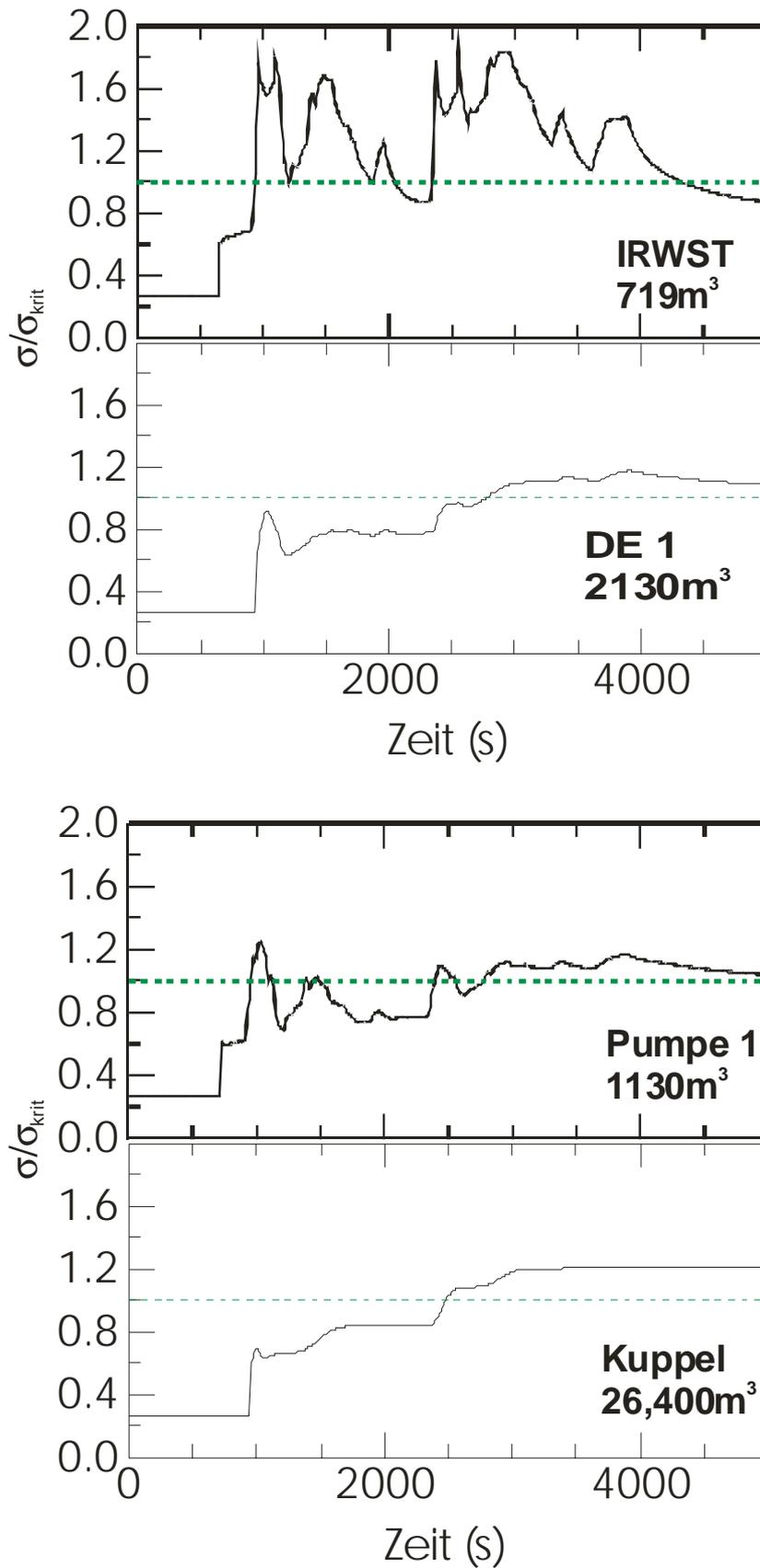


Abb. 11.1.3: Zeitliche Entwicklung des  $\sigma$ -Index in verschiedenen Reaktorräumen für die H<sub>2</sub>-Quelle aus Abb. 11.1.2. Im IRWST sind schnelle turbulente Flammen praktisch über die gesamte H<sub>2</sub>-Freisetzungszeit möglich, in den übrigen Räumen vor allem während der ex-vessel Phase (> 2000 s).

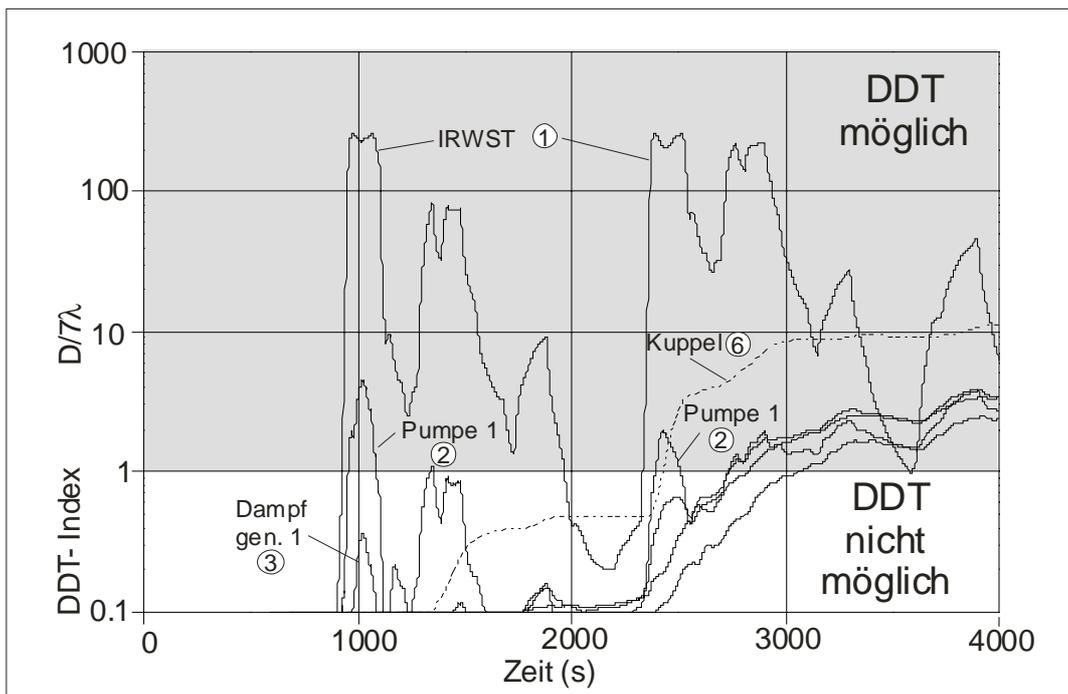
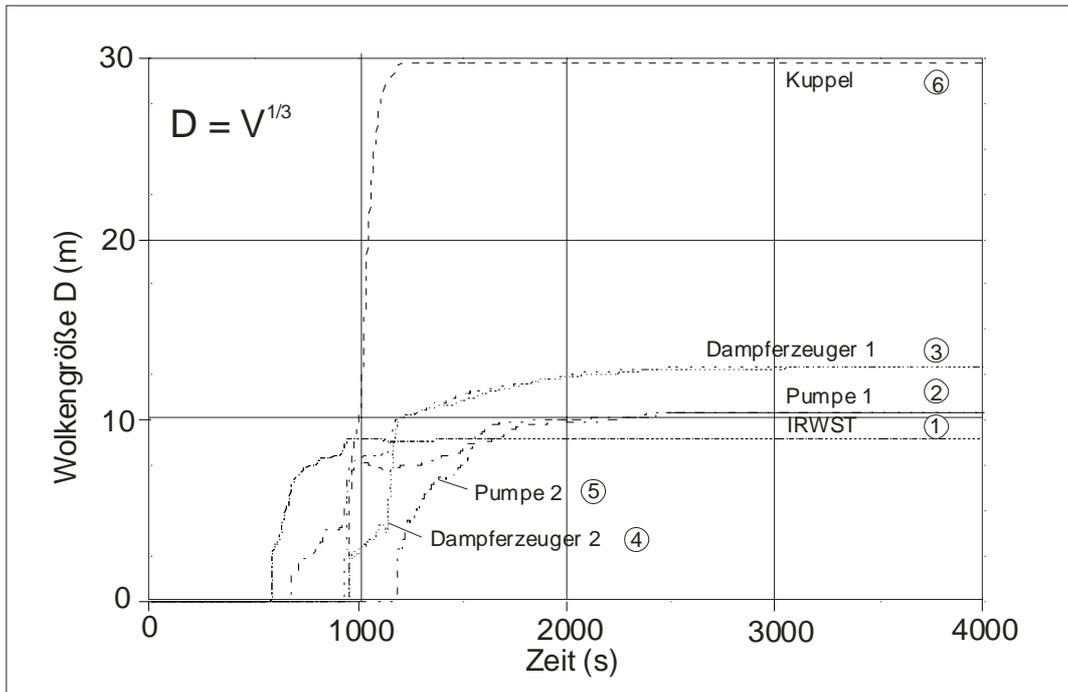


Abb. 11.1.4: GASFLOW-Ergebnisse für die charakteristische Wolkengröße D in den 6 verschiedenen Reaktorräumen (oben) und DDT-Index (unten). Im IRWST bilden sich früh Gemische die weit im detonationsfähigen Bereich liegen. Ab ca. 3000 s führt die unterstellte  $H_2$ -Freisetzung zu detonationsfähigen Mischungen im gesamten Containment, weil sowohl  $\sigma/\sigma_{krit} > 1$  als auch  $D/7\lambda > 1$  erfüllt sind.

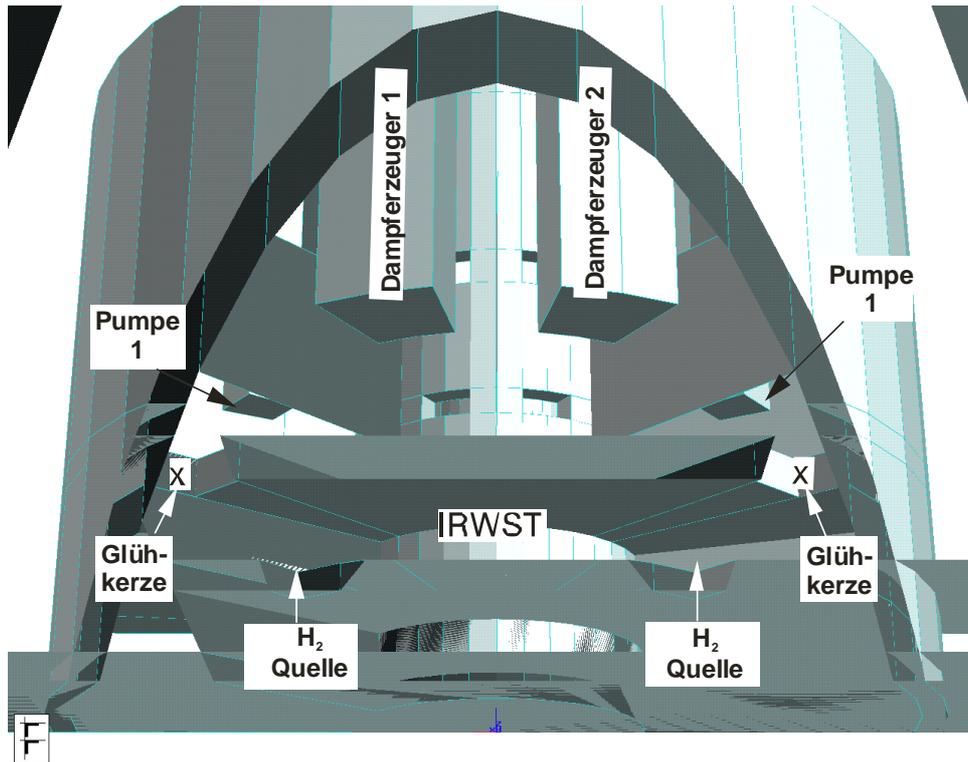


Abb. 11.1.5: Analyse der trockenen H<sub>2</sub>-Freisetzung über den IRWST mit Zündern in den IRWST-Öffnungen.

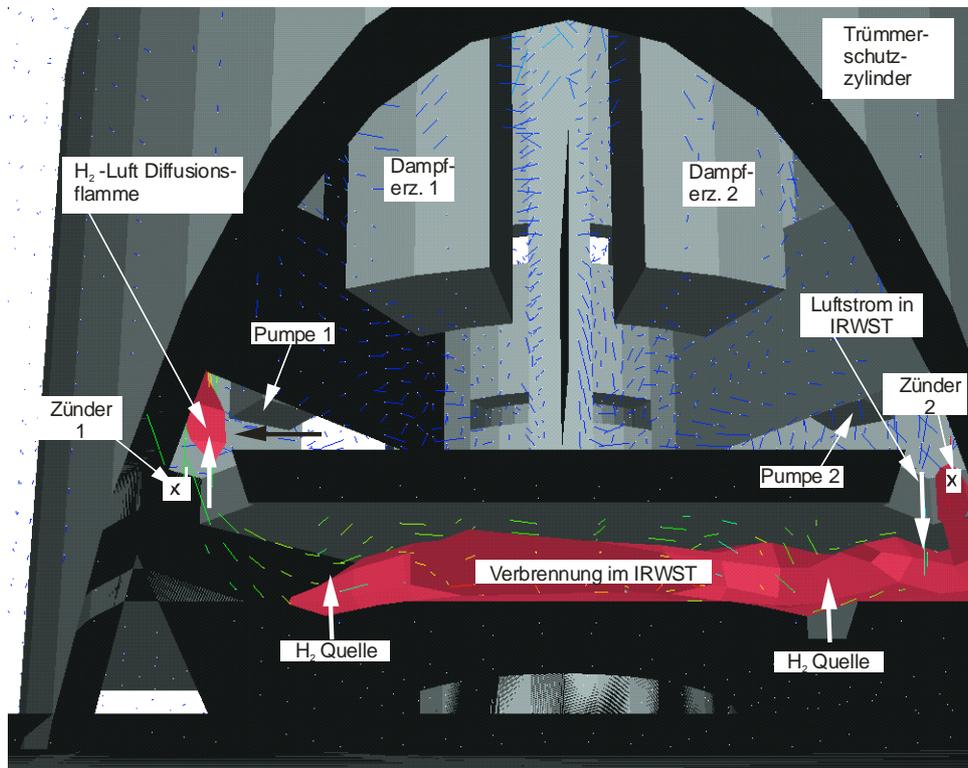


Abb. 11.1.6: Mit Zündern in den IRWST-Öffnungen kommt es frühzeitig zum Ausbrand des IRWST-Gasraums und Ausbildung einer stehenden H<sub>2</sub>-Luft Diffusionsflamme.

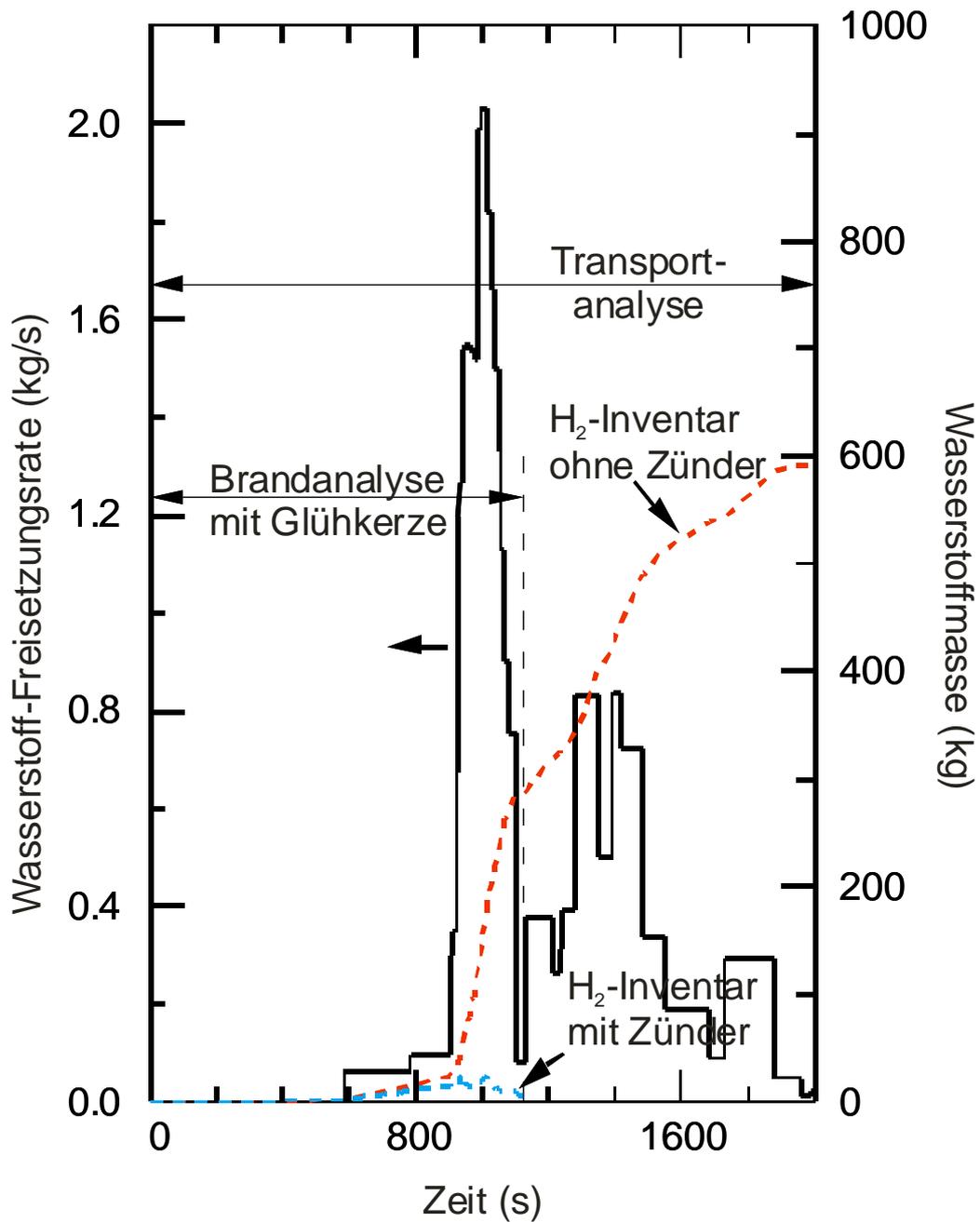


Abb. 11.1.7: Wasserstofffreisetzungsrate und H<sub>2</sub>-Inventar in der Anlage ohne und mit Zünder. Die frühe Zündung der Gase am IRWST-Ausgang verhindert eine Wasserstoffanreicherung im Sicherheitsbehälter. Das Inventar bleibt unter 50 kg H<sub>2</sub>, gegenüber ca. 600 kg im Falle ohne Zünder.

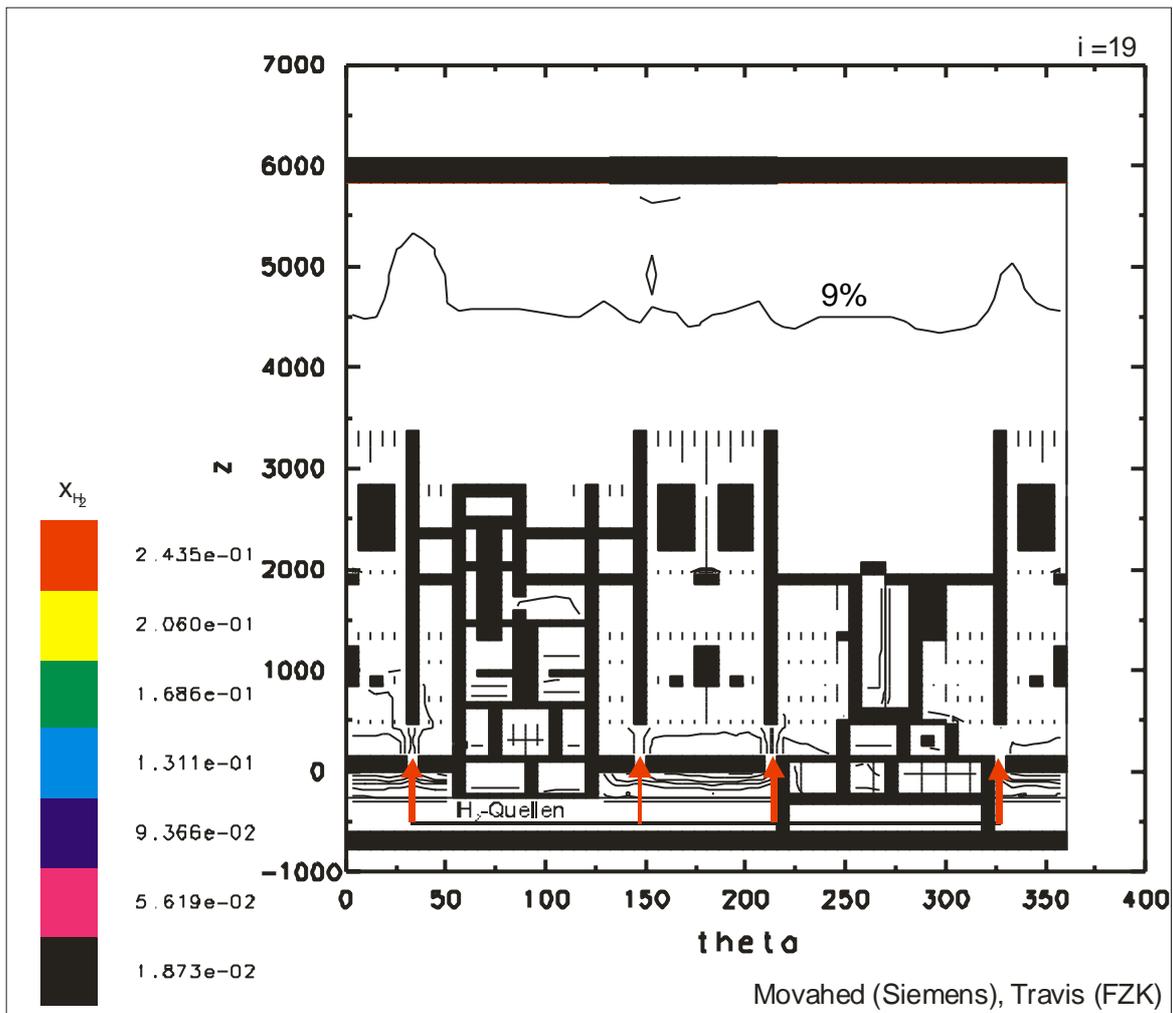


Abb. 11.2.1: Verteilungsrechnung für LOOP-Szenario im EPR mit H<sub>2</sub>-Freisetzung über IRWST. Die Abbildung zeigt eine Abwicklung des zylindrischen Geometriemodells durch die vier IRWST Öffnungen. Die trockene H<sub>2</sub>-Freisetzung ohne Dampf führt zur H<sub>2</sub>-Anreicherung im Dom (Stratifikation).

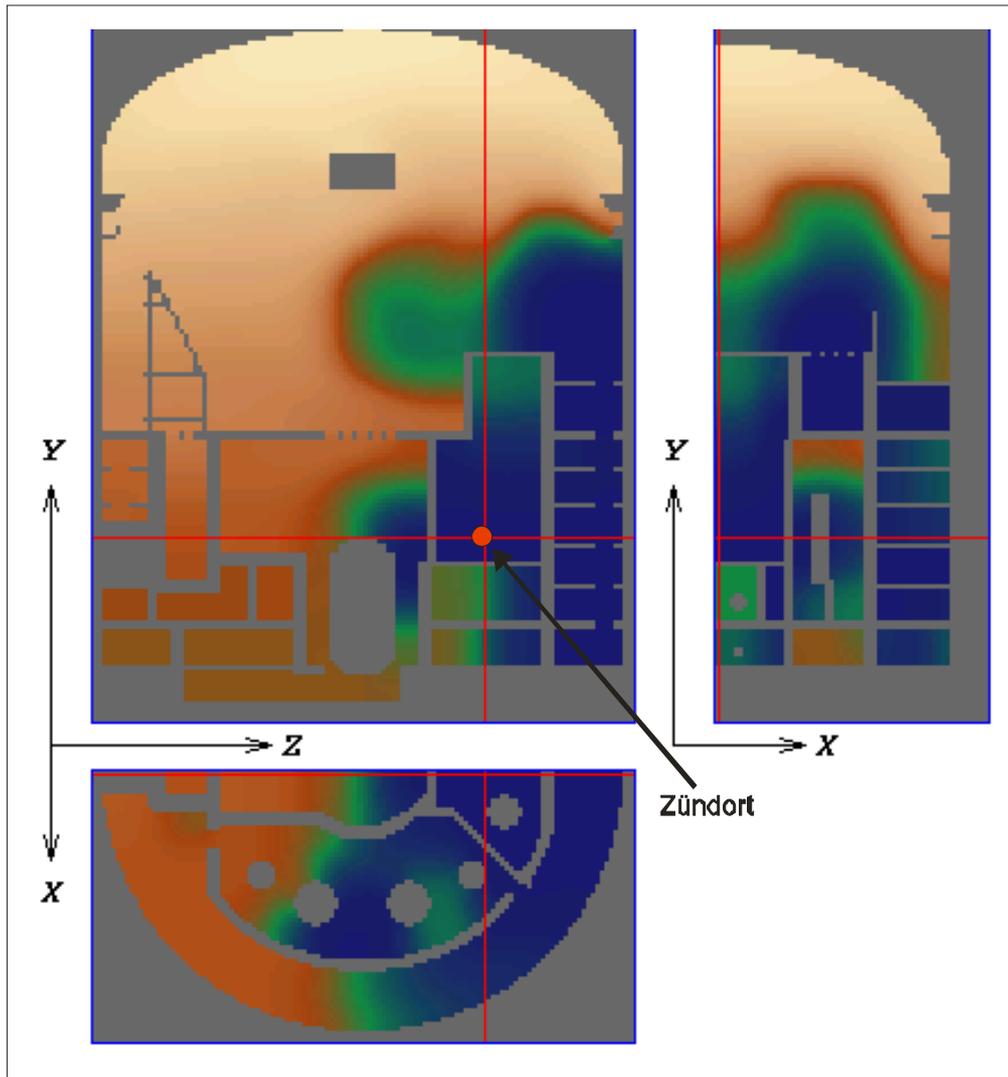


Abb. 11.3.1: COM3D-Simulation der turbulenten Verbrennung im EPR-Containment. Die höchsten Flammgeschwindigkeiten und Drücke treten in Räumen mit hoher Turbulenz und mittleren  $H_2$ -Konzentrationen auf.

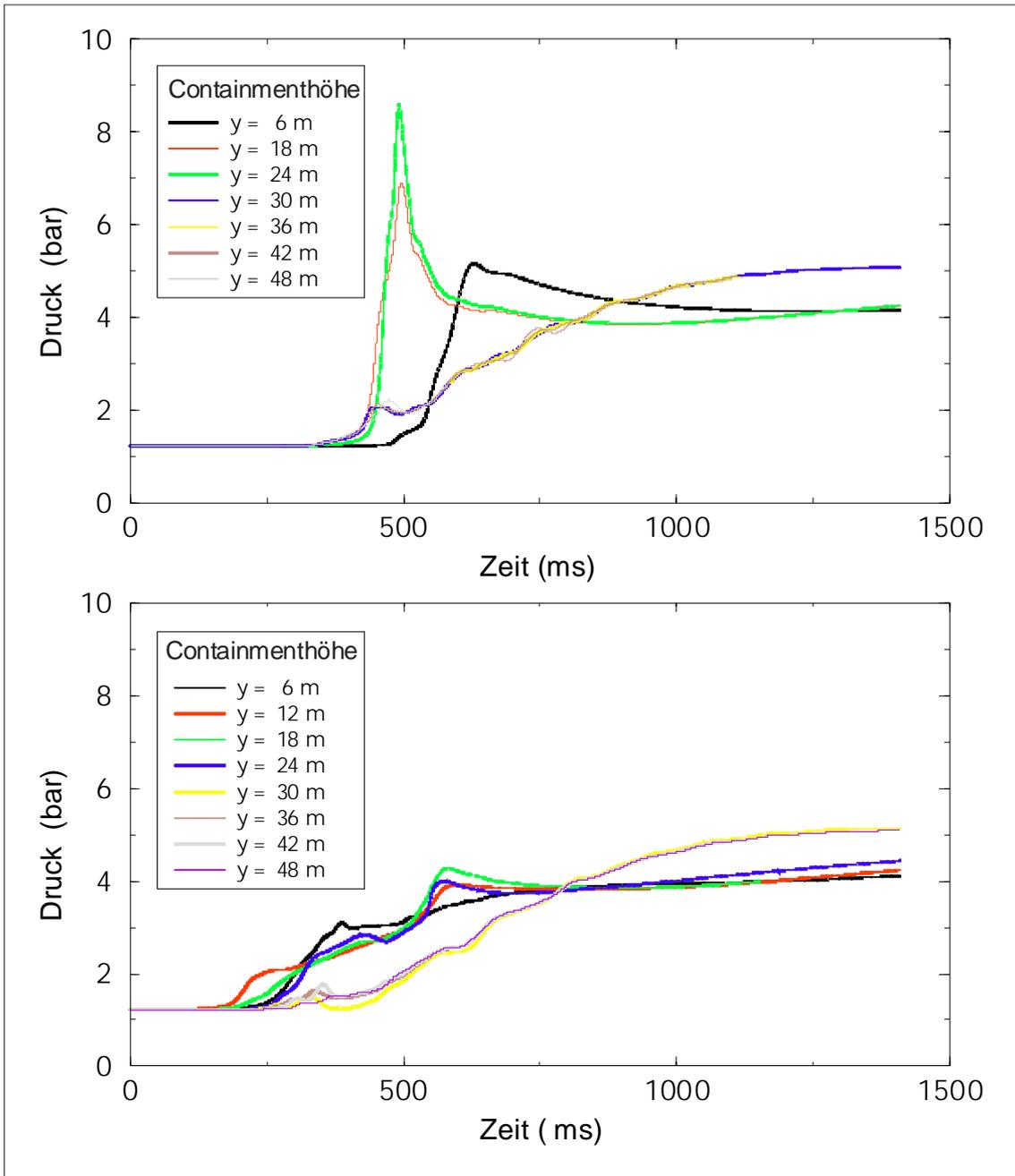


Abb. 11.3.2: COM3D Ergebnisse für lokale Drucklasten (auf die äußeren Containmentwände) im LOOP- Szenario.  
 Oben: linke Containmentseite, gegenüber Zündposition.  
 Unten: rechte Containmentseite, nahe Zündposition.

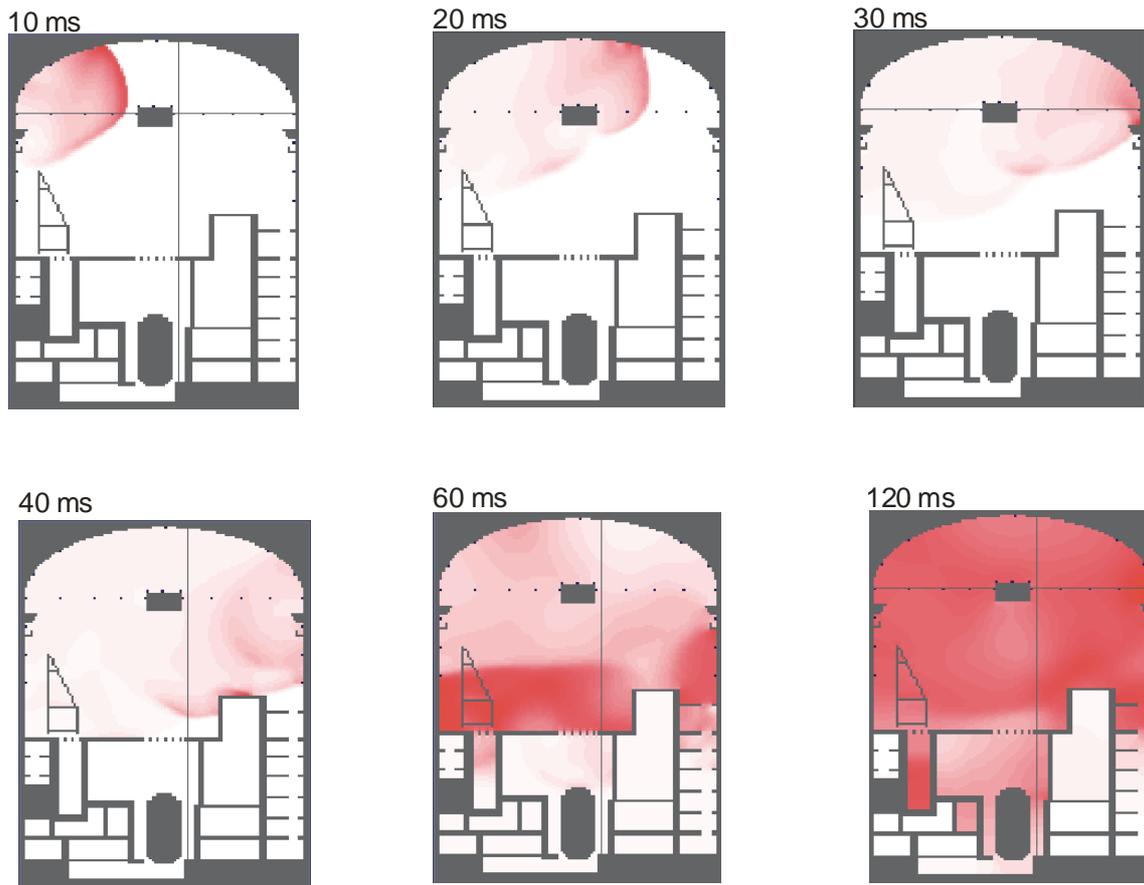


Abb. 11.3.3: DET3D-Simulation einer Detonation im Dom des EPR für LOOP-Szenario mit  $H_2$ -Freisetzung über IRWST. Nach Zündung am linken Rand propagiert die Detonationsfront zum rechten Rand des Doms. Der restliche Wasserstoff in den tieferliegenden Räumen brennt anschließend aus.

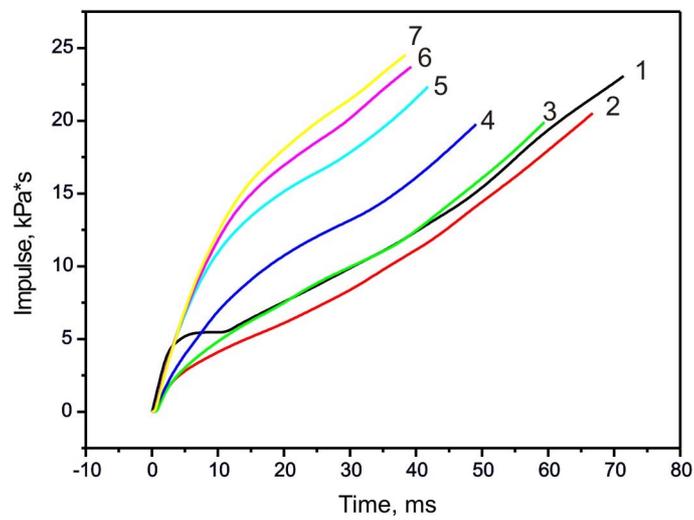
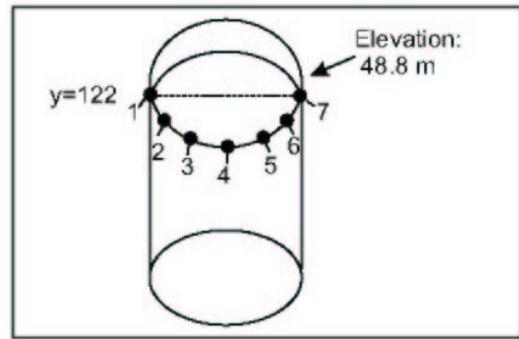
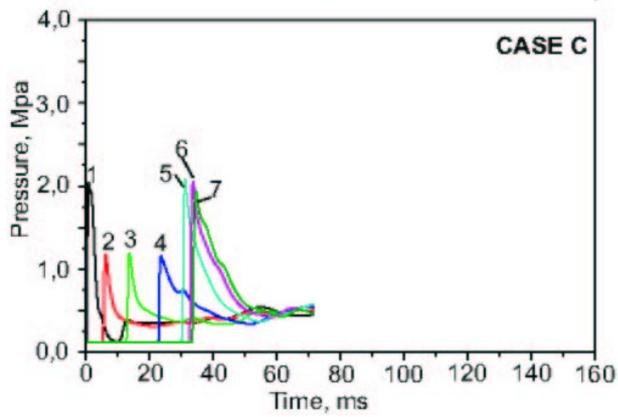


Abb. 11.3.4: Berechnete Druckverläufe bei einer lokalen Detonation im Dom für ausgewählte Punkte am Übergang Dom/Zylinder (oben) und entsprechende Impulse (unten).

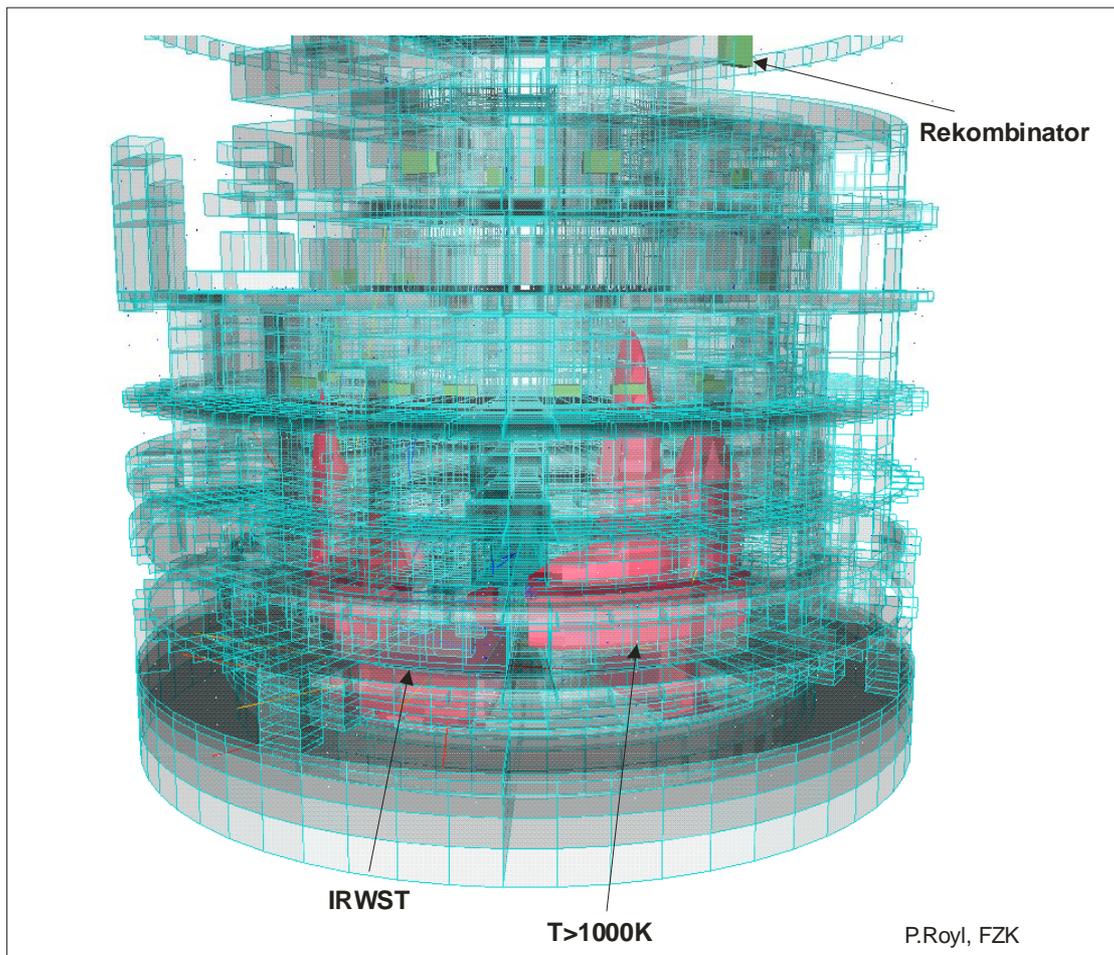


Abb. 11.4.1: Analyse des LOOP-Szenarios mit Zündern an den IRWST-Öffnungen. Das Glasmodell des EPR zeigt die stehenden Diffusionsflammen die sich von den IRWST-Öffnungen in das Gebäude erstrecken. Die frühe Zündung verhindert die Ansammlung von großen Wasserstoffmengen im Gebäude.

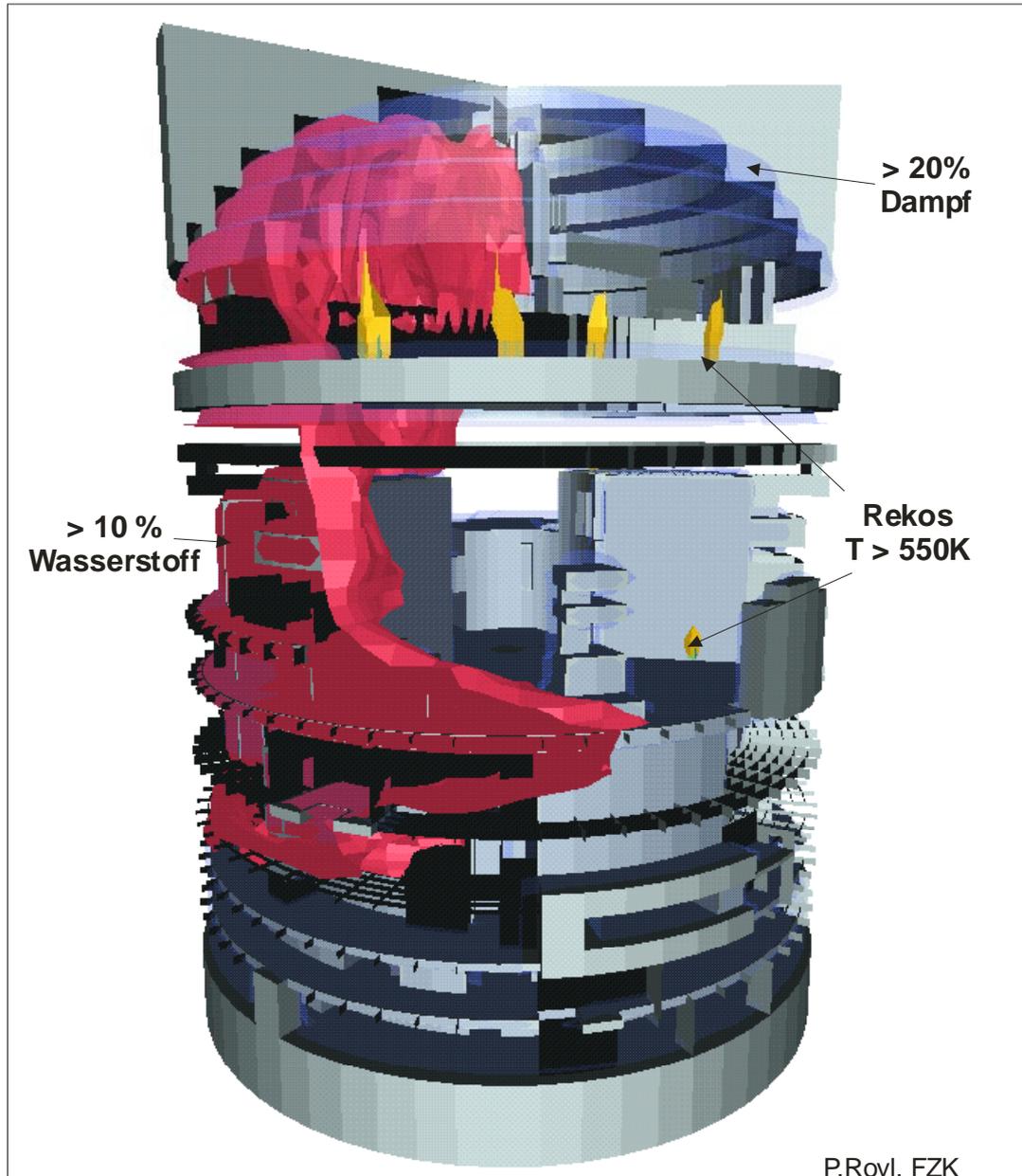


Abb. 11.5.1: Analyse zur Wasserstoffkontrolle im EPR: 44 Siemens Rekombinatoren, SB-LOCA, H<sub>2</sub>-und Dampfquellen aus MAAP-Rechnung von FANP, GASFLOW Verteilungsrechnung.

Gezeigt sind das Geometriemodell ohne äußere Containmentschale , die Isofläche im Raum für 10% H<sub>2</sub>, der vorwiegend im Dom angereicherte Dampf und die heißen Abluffahnen der Rekombinatoren. (Zeitpunkt 3500 s nach Beginn der Simulation).

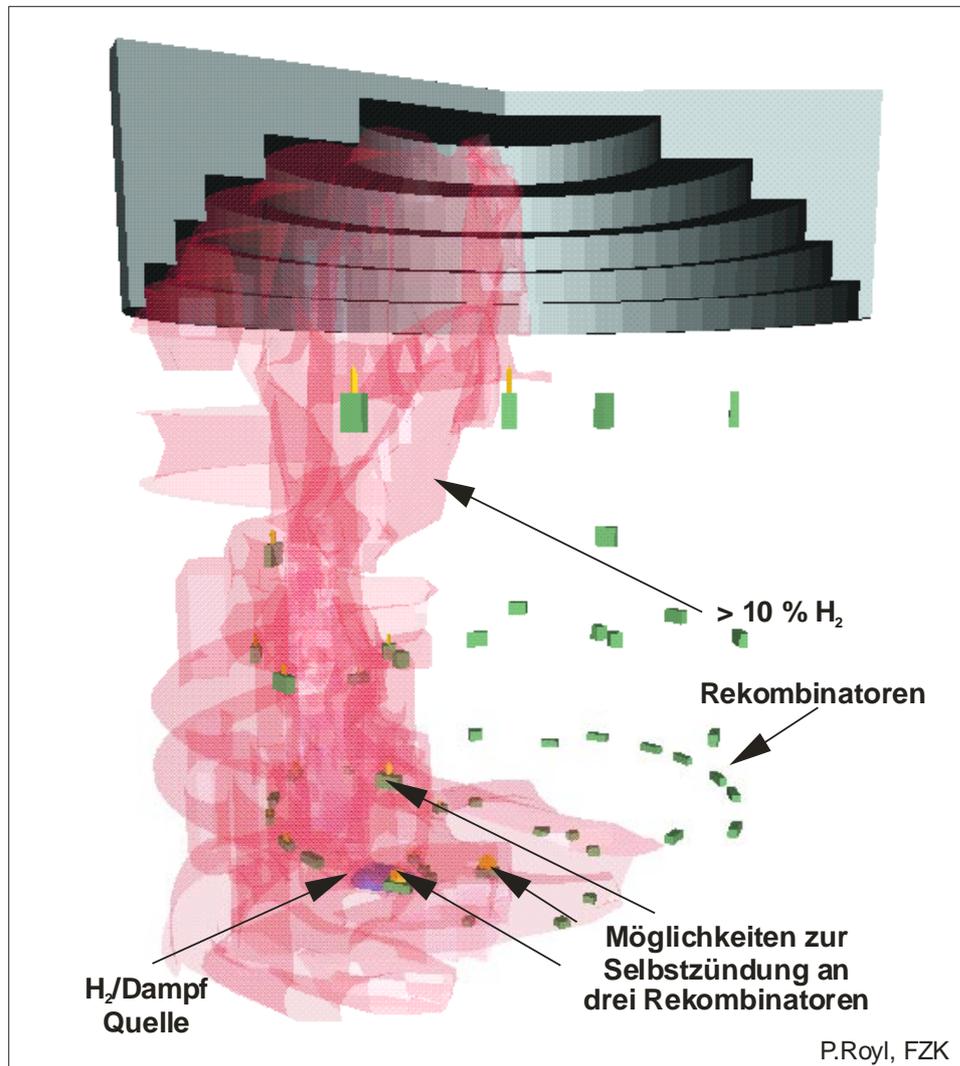
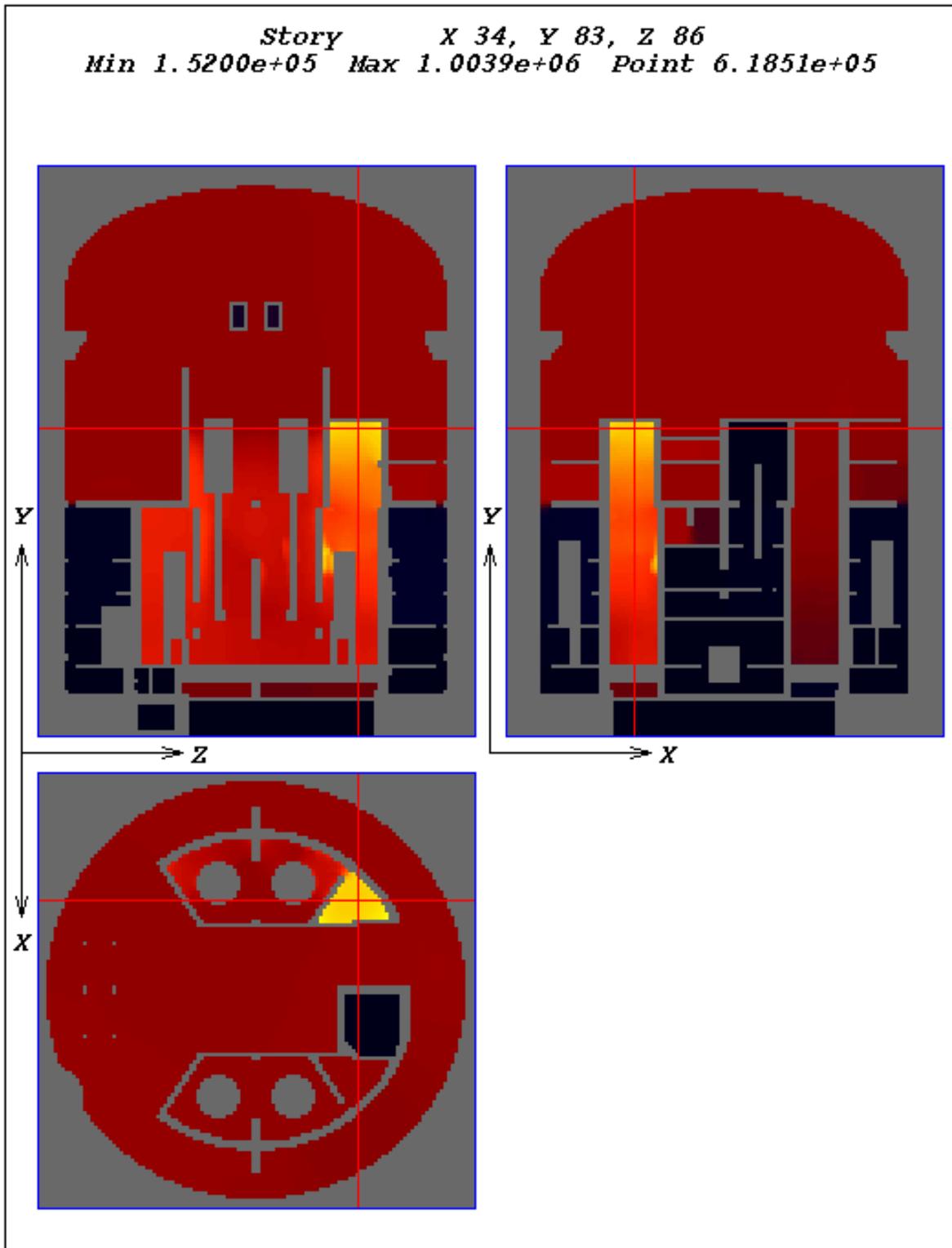


Abb. 11.5.2: Analyse zur Wasserstoffkontrolle im EPR, gleiches Szenario wie in Abb. 11.5.1, Geometrie im unteren Containmentbereich nicht dargestellt. Das Bild zeigt die Anordnung der 44 Rekombinatoren im Raum. Zu diesem Zeitpunkt (3500 s) übersteigen die Abgastemperaturen in der Modellrechnung die Selbstzündungstemperaturen von H<sub>2</sub>-Luft Gemischen.



Abb, 11.5.3: Simulation der turbulenten Verbrennung im EPR mit dem Programm COM3D. Die mit GASFLOW berechnete  $H_2$ /Dampfverteilung diente als Anfangsbedingung für die COM3D Rechnung. Das Bild zeigt die Geometrie des EPR in drei aufeinander senkrecht stehenden 2D Schnitten, wobei die Schnittlänge der beiden anderen Ebenen durch die zwei Linien im Bild gekennzeichnet sind. Dargestellt ist der maximale Druck der in jedem Punkt während der gesamten Rechenzeit aufgetreten ist. Im Schnittpunkt aller Ebenen treten maximal 6.18 bar auf.

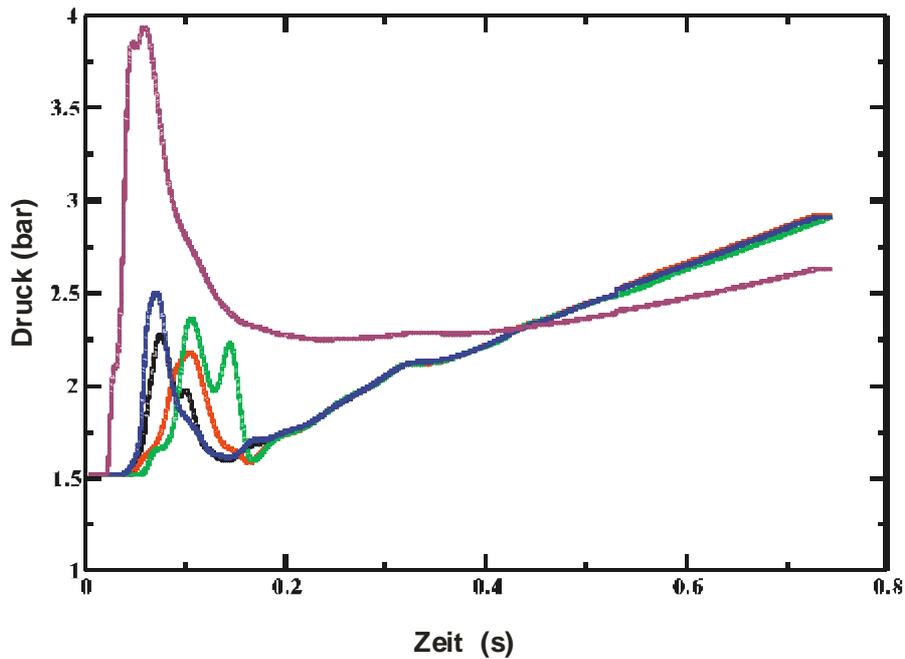


Abb. 11.5.4: Druckzeitverläufe aus der COM3D Rechnung für verschiedene Punkte auf der äußeren Containmentwand. Es treten maximal etwa 4 bar auf, was noch deutlich unter dem Designdruck des EPR-Containments liegt (6.5 bar).

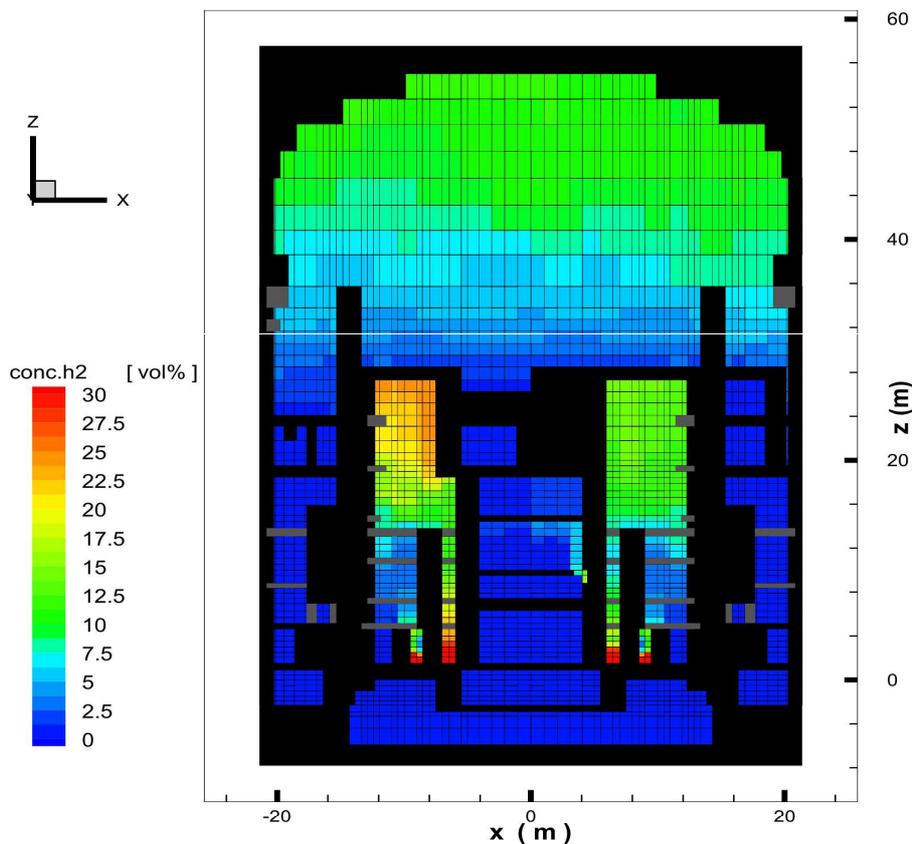


Abb. 11.6.1: GASFLOW Verteilungsrechnung für EPR: SB-LOCA mit verzögerter primärer Druckentlastung, Freisetzung von 820 kg H<sub>2</sub>, mittlere Dampfkonzentration ca. 50 %, Darstellung der lokalen H<sub>2</sub>-Konzentration in z-x-Ebene, Rechnung und Plot von FANP, Zeitpunkt 8000 s nach Unfallbeginn [11.1].

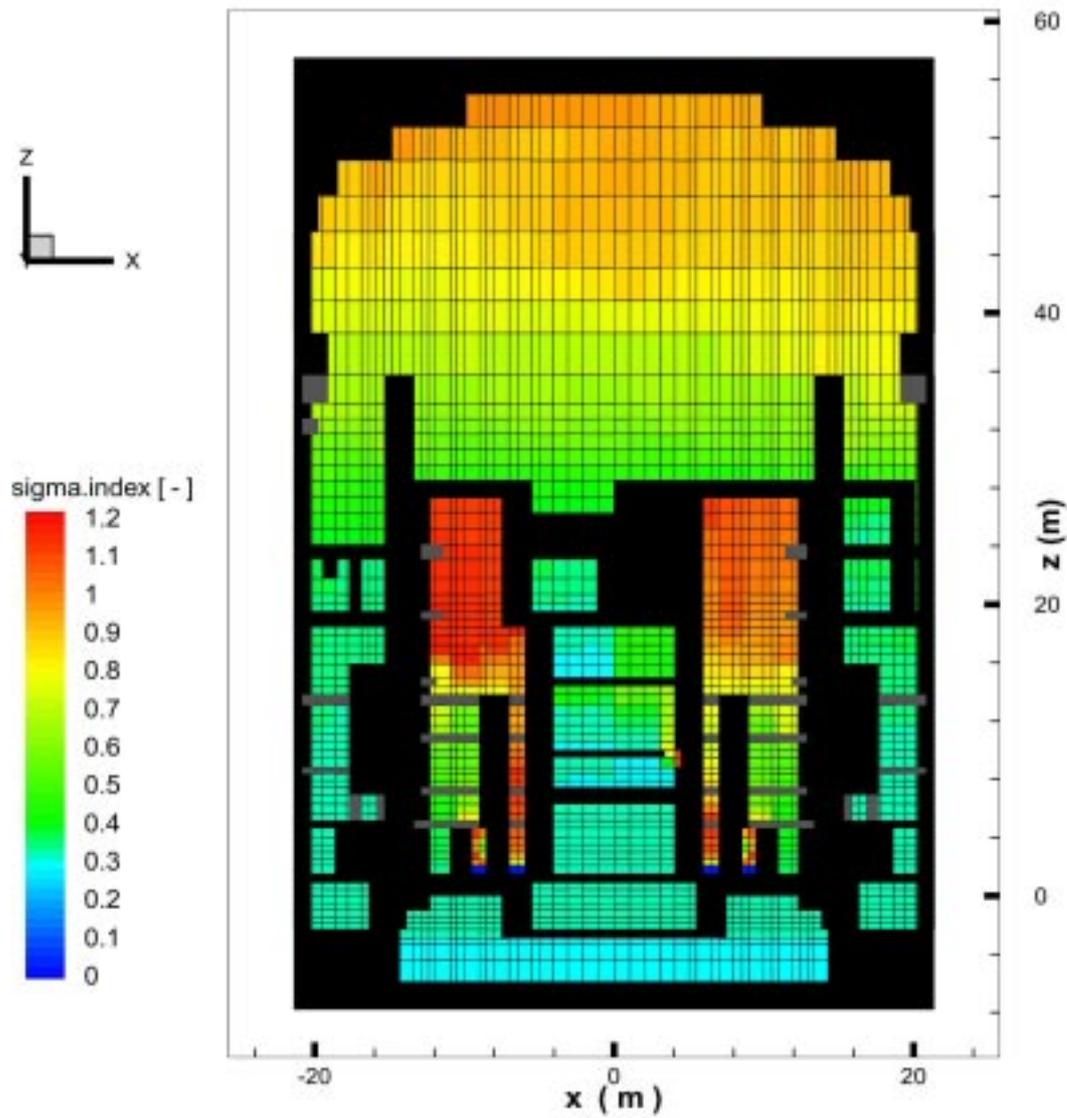


Abb. 11.6.2: Umrechnung der lokalen Wasserstoff- und Dampfkonzentrationen in  $\sigma$ -Index. Bei Werten größer als 1 besteht Potential für spontane Flammenbeschleunigung, d.h. hohe Flammengeschwindigkeiten und Drücke. Plot von FANP, Zeitpunkt 8000 s nach Unfallbeginn [11.1].

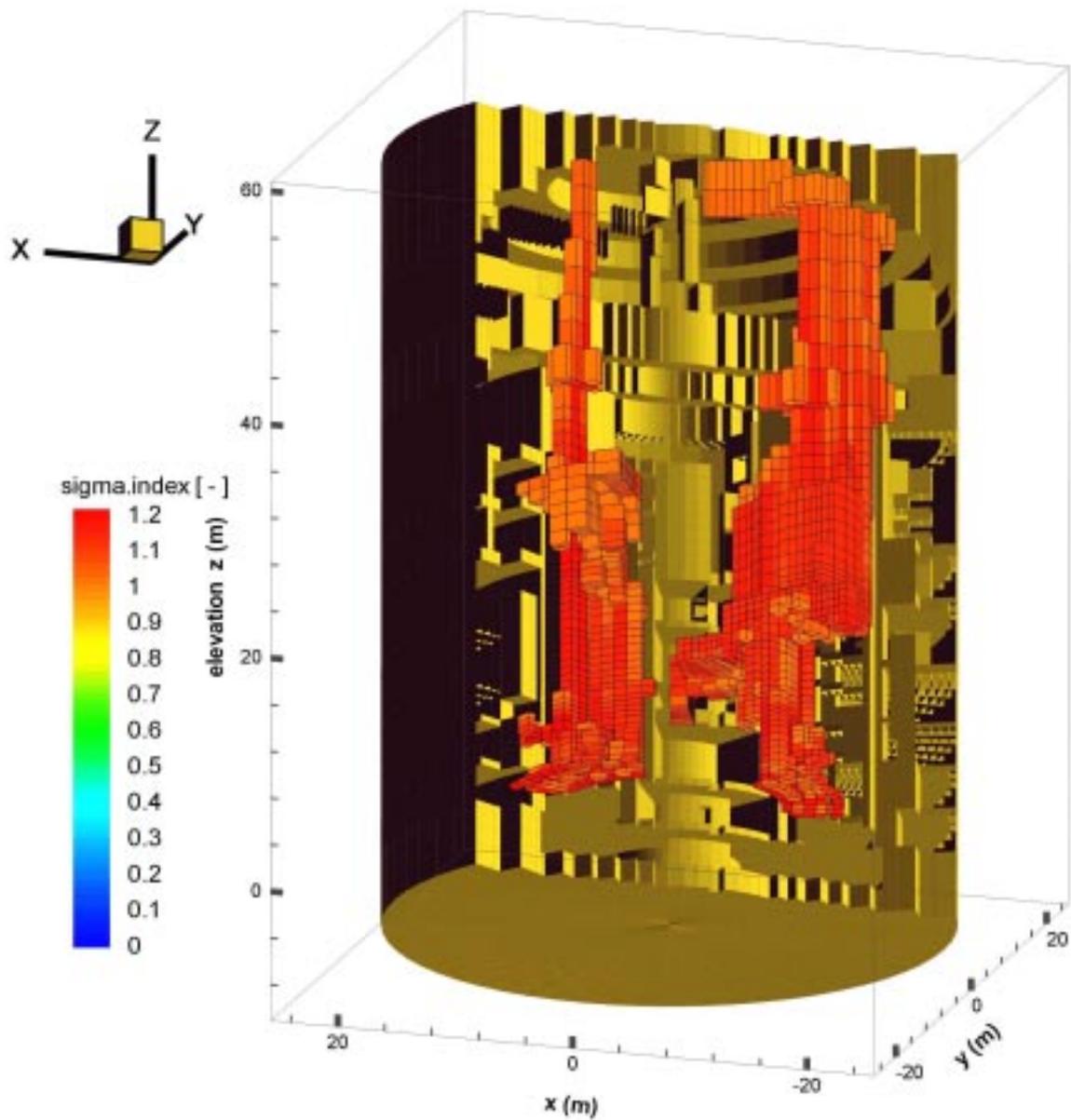


Abb. 11.6.3: 3D Darstellung des mit GASFLOW berechneten  $\sigma$ -Index für ein SB-LOCA mit direkter Dampfeinspeisung. Plot von FANP, Zündpunkt 8000 s nach Unfallbeginn [11.1].

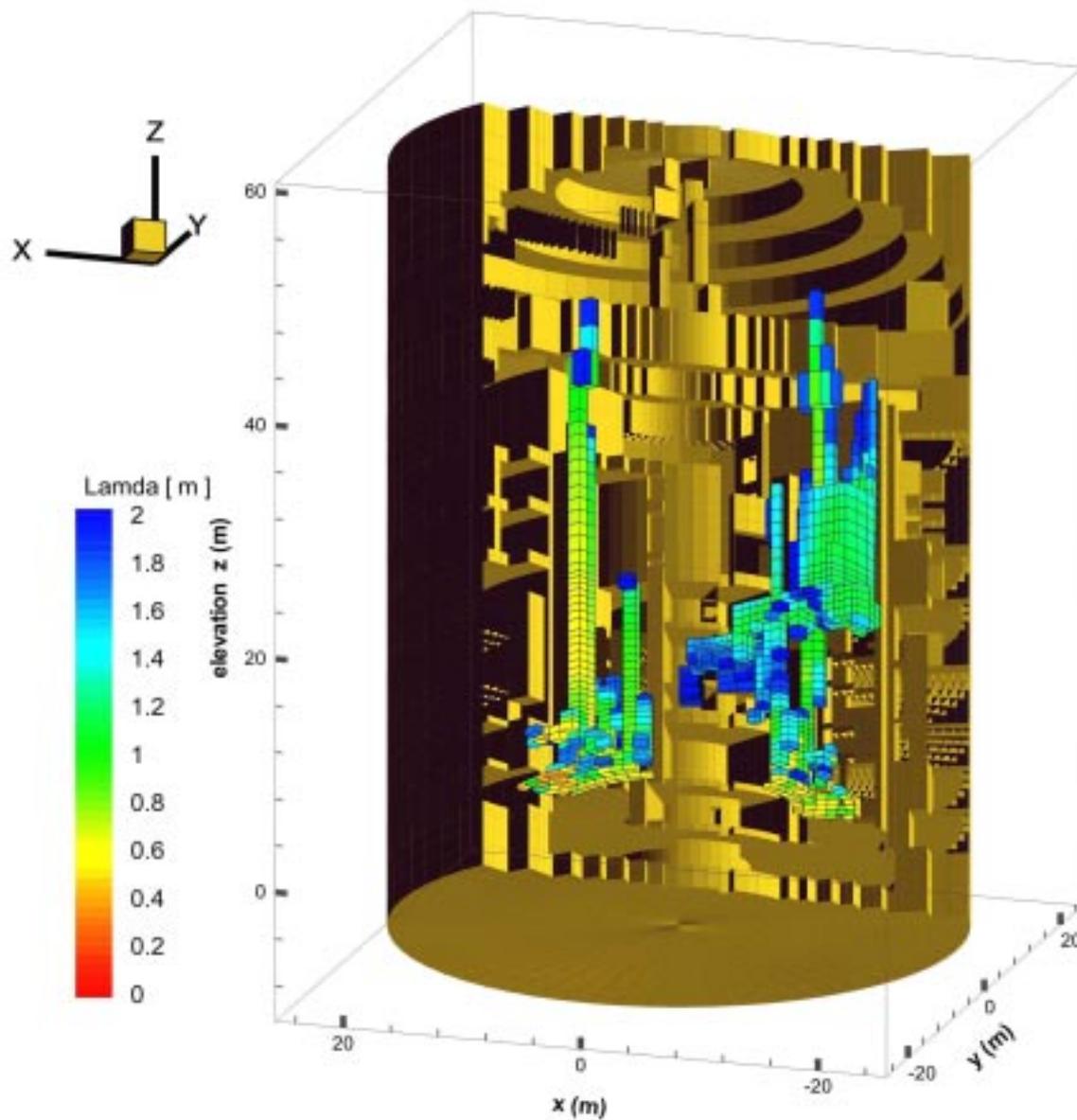


Abb. 11.6.4: 3D Darstellung der Raumbereiche für die sowohl Flammenbeschleunigung möglich erscheint ( $\sigma$ -Index > 0.9) als auch eine geringe Detonationszellgröße (< 2 m) vorliegt. SB-LOCA Szenario mit verzögerter Druckentlastung in das Containment [11.1].

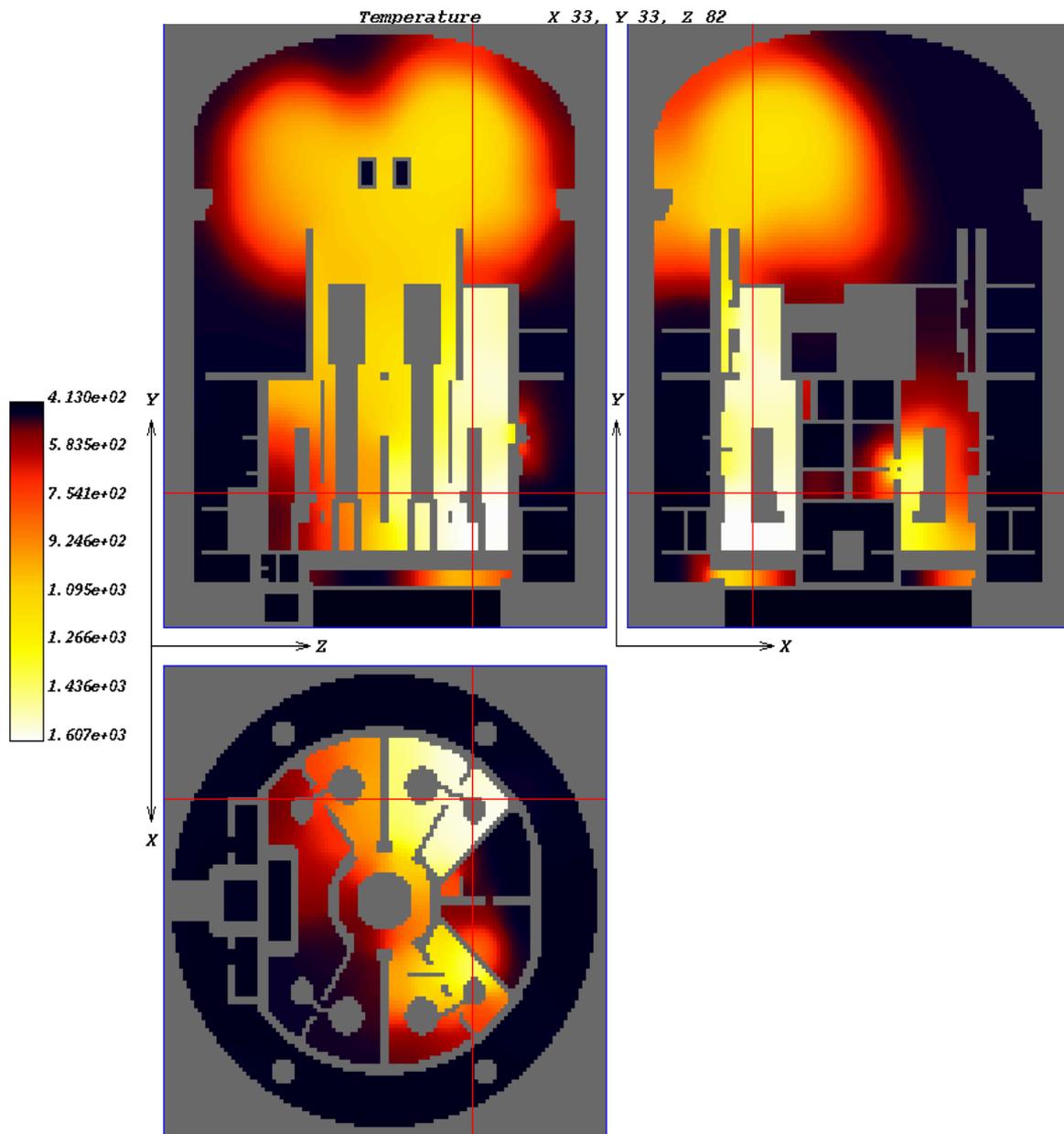


Abb. 11.6.5: COM3D Simulation der turbulenten Verbrennung im EPR nach Freisetzung von 820 kg H<sub>2</sub>, Anfangsbedingungen aus GASFLOW Rechnung [11.1]. Dargestellt ist das Temperaturfeld in drei vertikal aufeinander stehenden Ebenen. Die höchsten Temperaturen werden im Pumpenraum erreicht. Der hohe Dampfgehalt im Dom führt zu geringeren Verbrennungstemperaturen.

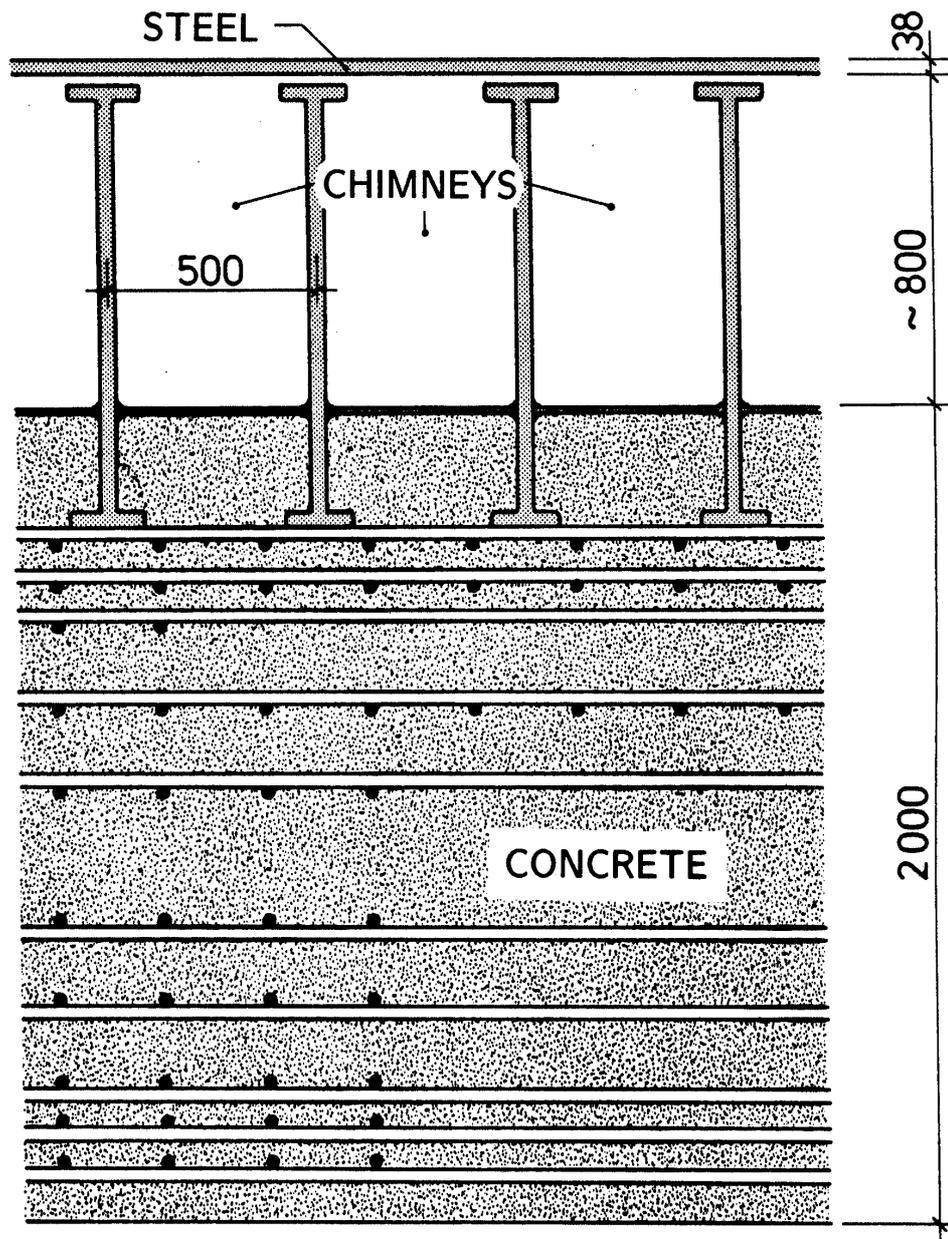


Abb. 11.7.1: Wandaufbau eines störfallfesten Containmententwurfs. Die Betonhülle schützt vor äußeren Einwirkungen, z.B. Flugzeugabsturz. Die innere Stahlschale kann sich bei hohen Lasten (z.B.  $H_2$ -Detonation) auf die sehr stabile äußere Betonstruktur abstützen. Die Kamine ermöglichen eine passive Abfuhr von Nachwärme über Naturkonvektion [11.3].

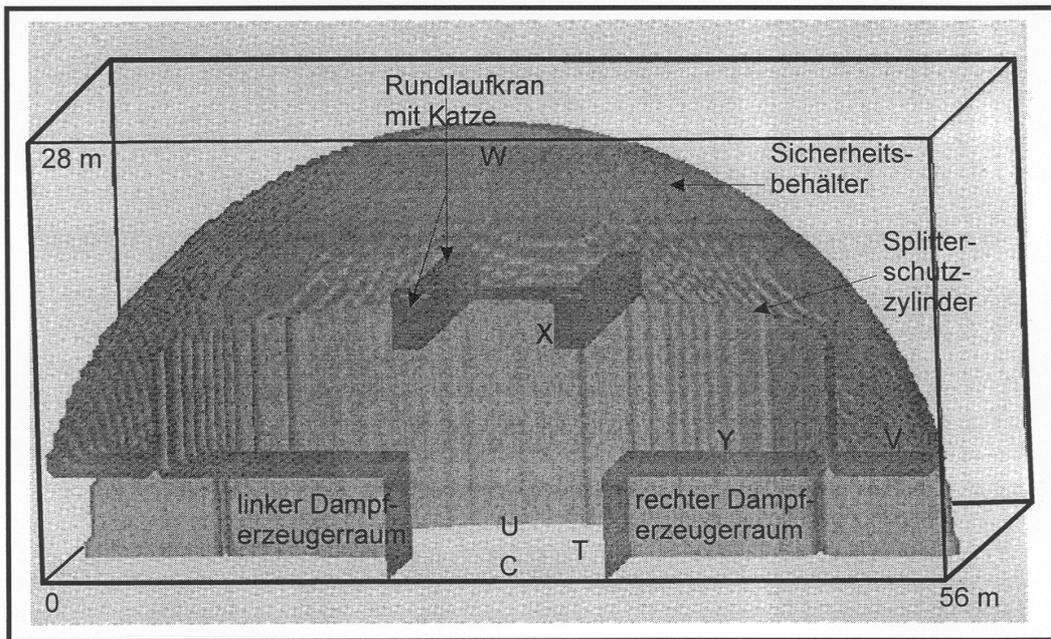


Abb. 11.7.2: Geometriemodell für Ermittlung abgrenzender dynamischer Lasten aus Wasserstoffdetonationen. Die Detonation wurde an verschiedenen Stellen gezündet (Fälle C, T, U, V, W, X, Y).

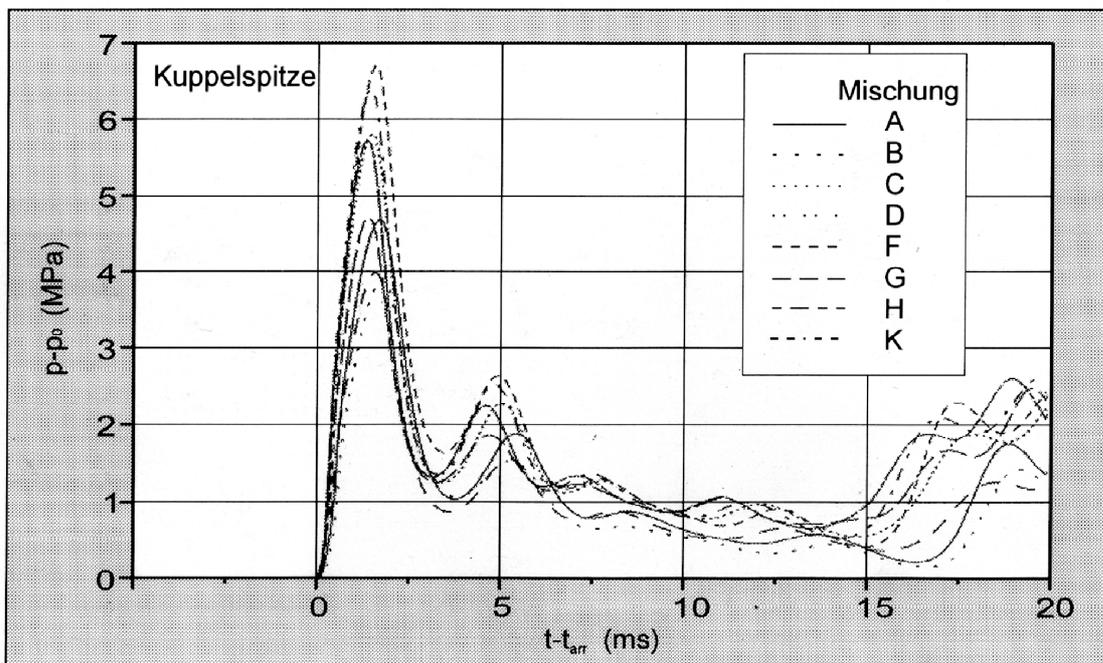


Abb. 11.7.3: Berechnete Überdrücke in der Kuppelspitze des Containmentdoms für verschiedene homogene  $H_2$ -Dampf-Luft Gemische im Gebäude (Mischungen a-k) bei zentraler Zündung (Ort C in Abb. 11.7.2) Die primäre Detonation wirkt über ca. 3 ms ( $t_{arr}$  = Ankunftszeit der Detonationsfront in der Kuppelspitze). Für die Containmentbelastung ist nicht der Spitzendruck sondern der Impuls der Welle maßgebend.

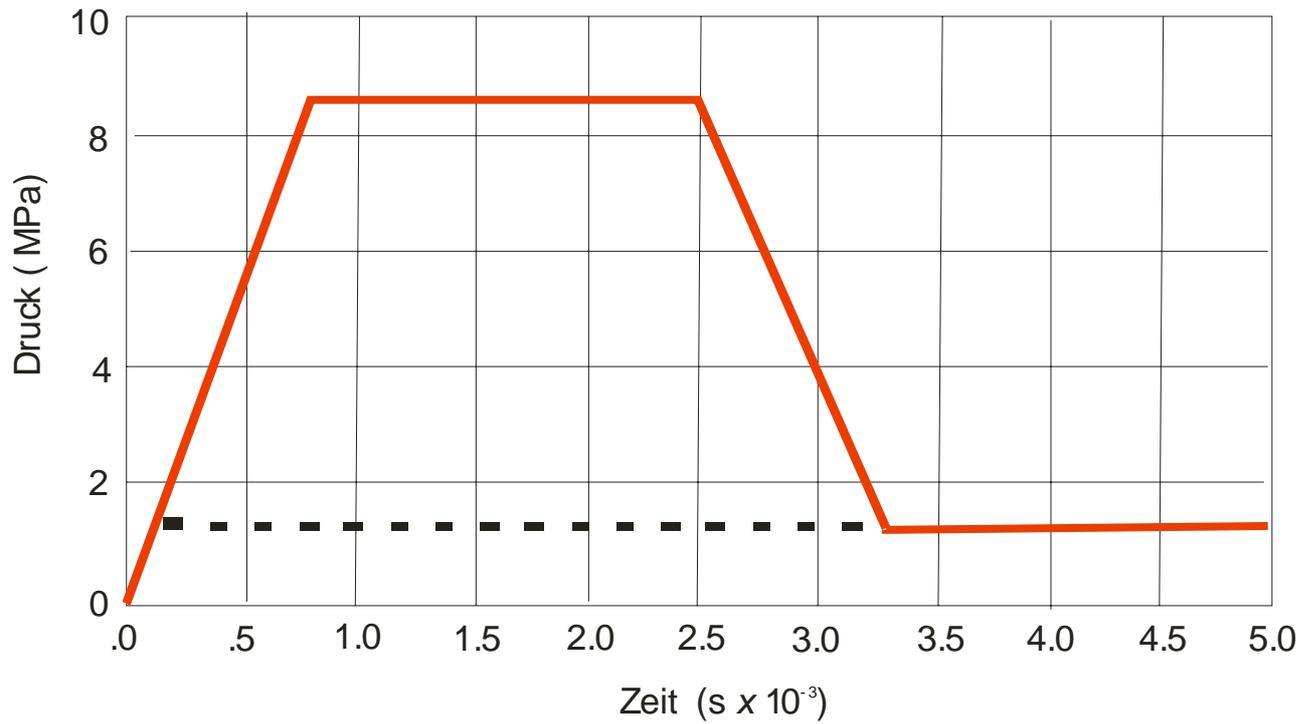
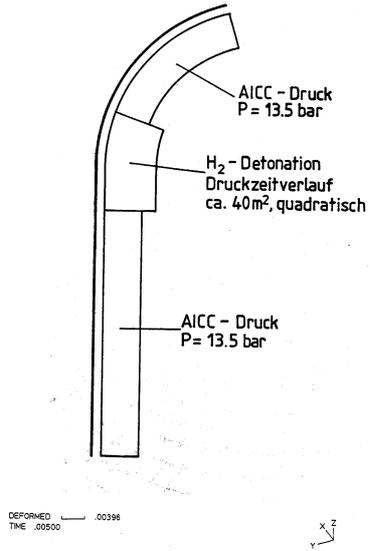
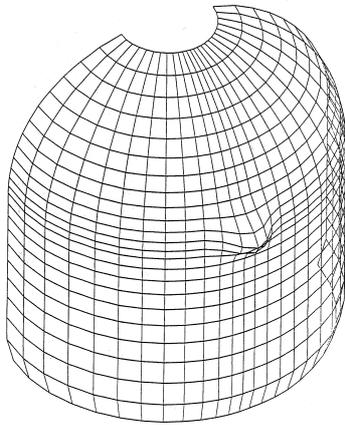


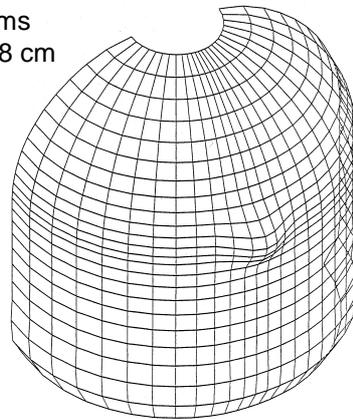
Abb. 11.7.4: Einhüllende konservative Drucklast die aus den berechneten ort- und zeitabhängigen Detonationsdrücken ermittelt wurde. Und als Eingabe für 3D FEM Rechnungen diente.



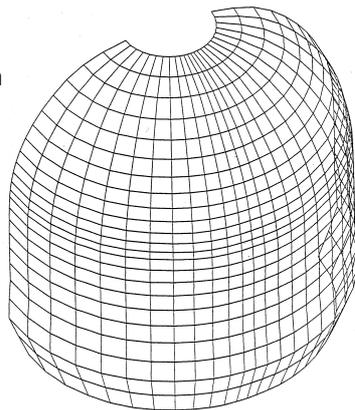
t = 5 ms  
Δr = 0,4 cm



t = 10 ms  
Δr = 0,8 cm



t = 30 ms  
Δr = 5,9 cm



t = 50 ms  
Δr = 14,3 cm

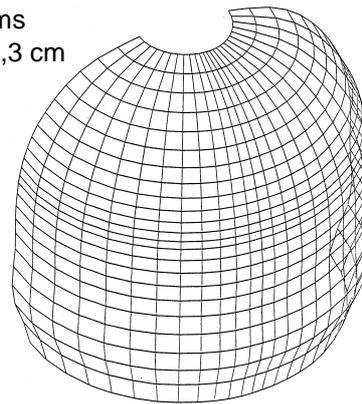


Abb. 11.7.5: Berechnete Auslenkung des störfallfesten Verbundcontainments bei Innenbelastung mit der in Abb. 11.7.4 gezeigten dynamischen Drucklast.

## 12. Zusammenfassung und Ergebnisse von Teilprojekt 1

Übergeordnetes Ziel des Strategiefondsprojekts 98/07 war es, einen Beitrag zu einer zukunftsfähigen Kernenergietechnik in Deutschland zu leisten. Das spezielle Thema des Projekts betraf die Wasserstoffbeherrschung bei Kernschmelzunfällen. Die Arbeiten sollten einerseits zur Risikominderung bei laufenden Reaktoranlagen beitragen und andererseits neue innovative und effektive Kontrollmaßnahmen für zukünftige Kernreaktorkonzepte aufzeigen. Primäres Ziel dieser Untersuchungen ist die Integrität des Sicherheitsbehälters, der die letzte Barriere gegen radiologische Umweltbelastungen darstellt, durch ein geeignetes Wasserstoffmanagement zu gewährleisten.

Die innerhalb von Teilprojekt 1 durchgeführten experimentellen und theoretischen Arbeiten erlauben jetzt eine durchgehende und konsistente Analyse der Vorgänge mit modernen 3D-Rechenprogrammen. Dabei werden die Wasserstoff- und Dampfquellen aus anderen Analysen übernommen, damit die Wasserstoffverteilung im Containment simuliert, die schnellst mögliche Verbrennungsform abgeschätzt, der eigentliche Verbrennungsablauf mit den dabei auftretenden Drucklasten berechnet und schließlich das Strukturverhalten der belasteten Bauteile untersucht.

Der vorliegende Endbericht besteht nach dem Einleitungsteil (Kapitel 1-4) aus zwei weiteren Hauptteilen, in denen zunächst die Verifikationsarbeiten für die neu entwickelte Analysemethodik beschrieben werden (Kapitel 5-9) und dann die durchgeführten Anwendungsrechnungen für laufende und zukünftige Reaktoranlagen vorgestellt werden (Kapitel 10 und 11).

Der Einleitungsteil fasst die Zielsetzung, Motivation und Struktur der neuen Analysemethodik zusammen und begründet die dafür notwendige Entwicklung von eigenen dreidimensionalen Rechenprogrammen. Gegenüber früheren null-dimensionalen Modellansätzen besteht der Fortschritt in der stark verbesserten räumlichen sowie zeitlichen Auflösung und in der vertieften physikalischen Modellierung, wie z.B. Turbulenzbeschreibung. Die numerische Simulation des Wasserstoffverhaltens erfordert eine hohe räumliche Auflösung, sowohl für die Verteilungs- als auch für die Verbrennungsphase eines Kernschmelzunfalls damit die beherrschenden physikalischen Prozesse und die resultierenden Konsequenzen hinreichend genau berechnet werden können.

Der zweite Teil des Berichts (Kapitel 5-9) befasst sich mit den Verifikationsarbeiten die zu den verschiedenen Analyseschritten durchgeführt wurden. Die numerischen CFD-Programme wurden an zunehmend komplexeren Testproblemen überprüft, die von bekannten analytischen Lösungen, über Einzeleffektversuche bis hin zu integralen Versuchen reichen. Eine wichtige Aufgabe der Verifikation bestand auch im Nachweis der Skalierbarkeit der entwickelten numerischen Programme, damit Extrapolationen auf die volle Reaktorskala durchgeführt werden können (Längenskala 50 m, Volumen  $10^5 \text{ m}^3$ ).

Im dritten Teil des Berichts (Kapitel 10 und 11) werden die Anwendungen der entwickelten Analysemethodik auf verschiedene laufende Reaktoranlagen in Deutschland und auf zukünftige Reaktorkonzepte vorgestellt. Die zukünftigen Konzepte beziehen sich auf eine evolutionäre Entwicklung (den EPR) und eine Designstudie für ein völlig neues störfallsicheres Containment.

Die Arbeiten zu laufenden Reaktoren (Biblis-A, Neckarwestheim 2) ergaben wichtige neue Erkenntnisse zu den dominierenden H<sub>2</sub>-Verteilungsprozessen und zur Effizienz von katalytischen Rekombinatoren, die in allen deutschen Kernkraftwerken nachgerüstet werden. Die durchgeführten 3D-Analysen sind wichtiger Bestandteil der laufenden Genehmigungsverfahren.

In den gemeinsam mit Framatome ANP durchgeführten Untersuchungen zur Verteilung und Verbrennung von Wasserstoff im EPR wurden verschiedene Kontrollkonzepte modelliert und in ihrer Wirksamkeit verglichen. Aus den verschiedenen Optionen hat Framatome ANP eine Kombination von katalytischen Rekombinatoren mit direkter Dampfeinspeisung vom Primärkreis in das Containment für die Wasserstoffbeherrschung ausgewählt. Der Nachweis der Containmentintegrität für ein abdeckendes Spektrum von schweren Störfällen wurde unter Verwendung der 3D FZK-Programme GASFLOW und COM3D geführt. Der EPR der voraussichtlich die nächste Reaktorgeneration in Frankreich und Finnland darstellt, ist damit der erste Druckwasserreaktor der von vorne herein auf die Beherrschung von Kernschmelzunfällen und der damit verbundenen Wasserstoffproblematik ausgelegt ist. Die in diesem Projekt durchgeführten Arbeiten haben dazu die wissenschaftliche Basis geschaffen.

Teile des hier neu entwickelten Verfahrens zur Wasserstoffanalyse wurden mittlerweile auch erfolgreich für andere deutsche und ausländische Reaktoranlagen eingesetzt. Insgesamt wurden bisher Beiträge zur Wasserstoffbeherrschung in acht Druckwasserreaktoren und in drei Siedewasserreaktoren geleistet.

Das im nuklearen Bereich erworbene experimentelle und theoretische Know-how wird auch in der nichtnuklearen Sicherheitsforschung, insbesondere im Zusammenhang mit Wasserstoff als zukünftigem Energieträger eingesetzt