



Universität Stuttgart
Institut für Kernenergetik
und Energiesysteme

Simulation tropfenbeladener Strömungen im Sicherheitsbehälter eines Druckwasserreaktors

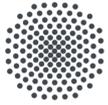
Christian Kaltenbach

ISSN 0173 - 6892

November 2018

IKE 8-129





Universität Stuttgart
Institut für Kernenergetik
und Energiesysteme

Simulation tropfenbeladener Strömungen im Sicherheitsbehälter eines Druckwasserreaktors

von der Fakultät Energie-, Verfahrens- und
Biotechnik der Universität Stuttgart zur Erlangung
der Würde eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

Christian Kaltenbach M.Sc.

geboren in Horb am Neckar.

Hauptberichter: Prof. Dr.-Ing. habil. Eckart Laurien

Mitberichter: Prof. Tekn. Dr. Damian Vogt

Tag der Einreichung: 04.04.2018

Tag der mündlichen Prüfung: 21.09.2018

ISSN 0173 - 6892

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter in den Jahren von 2015 bis 2018 am Institut für Kernenergetik und Energiesysteme (IKE) der Universität Stuttgart. An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die mich während meiner Promotionszeit begleitet und in irgendeiner Form unterstützt haben.

Mein ganz besonderer Dank gilt Prof. Dr.-Ing. habil. Eckart Laurien, dem stellvertretenden Institutsleiter am IKE und dem Leiter der Abteilung Thermofluidodynamik, für die Möglichkeit auf einem sehr interessanten Gebiet der Strömungssimulation zu arbeiten und für die außerordentlich gute wissenschaftliche Betreuung während der Durchführung der Forschungsarbeit. Er stand mir jederzeit für Fragen zur Verfügung und hat durch sein umfangreiches Wissen maßgeblich zum Erfolg dieser Arbeit beigetragen.

Des weiteren möchte ich mich bei Prof. Tekn. Dr. Damian Vogt, dem Leiter des Institut für Thermische Turbomaschinen und Maschinenlaboratorium (ITSM) der Universität Stuttgart, für das Interesse an meiner Arbeit und die Übernahme des Mitberichts bedanken.

Das Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) hat die vorliegende Arbeit gefördert. Die Projektverwaltung erfolgte durch die Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH (GRS) in Person von Dr. Markus Weinriefer und Dr. Heiko Dreier. Alle Simulationen, die dieser Arbeit zugrunde liegen, sind am Höchstleistungsrechenzentrum der Universität Stuttgart (HLRS) durchgeführt worden. Besonders bedanken möchte ich mich bei den Ansprechpartnern des HLRS, Dr.-Ing. Jing Zhang, Dr.-Ing. Martin Bernreuther, Dr.-Ing. Andreas Ruopp und Dr. Heinz Pöhlmann, die mich bei Fragen und Problemen rund um die Nutzung des Höchstleistungsrechners mit Rat und Tat unterstützt haben. Bedanken möchte ich mich außerdem bei Dr.-Ing. Martin Freitag von der Firma Becker Technologies, der mir die Dokumentationen und die experimentellen Daten rund um die verwendeten Thermal-hydraulics, H₂, Aerosols and Iodine (THAI) Versuche zur Verfügung gestellt hat.

Bedanken möchte ich mich bei allen Kollegen und Doktoranden am IKE für die angenehme Arbeitsatmosphäre und der Verwaltung für die Übernahme organisatorischer und verwaltungstechnischer Dinge bei Dienstreisen und deren Abrechnung. Besonderer Dank gebührt meinem Kollegen Abdennaceur Mansour, mit dem ich während meiner Zeit am IKE das Büro geteilt habe, für die zahlreichen Diskussionen rund um meine Arbeit und die vielen kurzweiligen Reisen zu Tagungen und wissenschaftlichen Veranstaltungen. Vielen Dank für die angenehme Zeit!

Ganz besonders bedanken möchte ich mich bei meiner Frau Lisa. Sie hat mich während meiner Zeit als Doktorand und auch bereits davor uneingeschränkt mit voller Kraft unterstützt, sei es durch eine fachliche Diskussion zum Thema oder einfach durch eine kleine Motivationshilfe. Ich habe ihr sehr viel zu verdanken, sie hat eine erfolgreiche Arbeit erst möglich gemacht. Zudem zeigt mir meine Tochter Thea jeden Tag aufs Neue, wie faszinierend auch die scheinbar kleinsten oder einfachsten Dinge des Alltages bzw. des Lebens sein können und dass wir sie jeden Tag aufs Neue schätzen sollten. Hinter jedem erfolgreichen Mann steckt in der Regel eine starke Frau, in meinem Fall sogar Zwei. Euch beiden vielen Dank dafür!

Stuttgart, im November 2018

Christian Kaltenbach

Kurzfassung

Während eines Störfalls mit unkontrolliertem Kühlmittelaustritt (Wasser) durch ein Leck im Primärkreislauf eines Druckwasserreaktors kommt es zur instantanen Verdampfung des Kühlmittels. Die Verdampfung des Kühlmittels geht mit einer Druck- und Temperaturerhöhung im gesamten Sicherheitsbehälter einer kerntechnischen Anlage einher. Zusätzlich zum Kühlmittelaustritt kann radioaktives Kerninventar in Form von Partikeln aus dem Leck austreten, wenn Kernbauteile durch den Störfall beschädigt worden sind. Die Partikel können sich zusammen mit Wasserdampf im Anlagen- und Betriebsraum des Sicherheitsbehälters verteilen. Um die mechanische Belastung des Sicherheitsbehälters durch Druck und Temperatur zu reduzieren, werden im oberen Bereich des Behälters installierte Wasserspraysysteme verwendet, die während eines Störfalls aktiviert werden können. Die Spraysysteme injizieren kaltes Wasser und reduzieren durch Kondensation von Wasserdampf die thermische Belastung des Sicherheitsbehälters. Zudem kann durch das eingebrachte Spray der Anteil an Aerosolpartikeln in der Gasatmosphäre durch Auswaschung reduziert werden. Sprayanwendungen im Sicherheitsbehälter führen im Allgemeinen zu einer Homogenisierung der unterschiedlichen Gasbestandteile im eingeschlossenen Volumen.

Um einen solchen Störfall numerisch simulieren zu können, stehen Simulationswerkzeuge in Form kommerzieller Computational Fluid Dynamics (CFD) Programme zur Verfügung. CFD basiert auf sogenannten 'first principles', darunter versteht man die Beschreibung von Strömungsvorgängen mittels Erhaltungsgleichungen für die Masse, die Energie und den Impuls. Werden kommerzielle CFD Programme im Bereich der Reaktorsicherheitsforschung angewendet, müssen diese Programme um thermohydraulische Modellbeschreibungen ergänzt werden. In der vorliegenden Arbeit werden physikalische Modelle zur Simulation von Spraykühlung und Aerosolpartikelwaschung im Sicherheitsbehälter einer kerntechnischen Anlage beschrieben, die im Rahmen der Untersuchungen entwickelt wurden. Beide Modelle verwenden als Basis zur mathematischen Beschreibung ein Euler-Euler Zwei-Fluid Modell und werden über eine Benutzerschnittstelle in das kommerzielle CFD Programmpaket ANSYS CFX implementiert. Die Validierung erfolgt mit zwei geeigneten Experimenten (HD-31-SE und AW 4), die im deutschen Modellsicherheitsbehälter THAI durchgeführt wurden. In den Validierungssimulationen werden verschiedene Tropfen- und Partikelgrößenverteilungen untersucht, um die Realität so nahe wie möglich abzubilden.

Um die Anwendung der entwickelten Modelle auf einen realen Sicherheitsbehälter einer kerntechnischen Anlage zu untersuchen, wird eine CFD Simulation in einem generischen

Druckwasserreaktor vom deutschen Typ KONVOI durchgeführt. Das generische Modell des KONVOI wird durch ein fiktives Spraysystem ergänzt und berücksichtigt die realen Abmaße des Sicherheitsbehälters mit Betriebs- und Anlagenraum. Es wird gezeigt, dass eine Kombination aus beiden Modellen technisch in ANSYS CFX möglich ist und die Anwendung in einem realen Sicherheitsbehälter plausible physikalische Ergebnisse liefert.

Abstract

During the case of a severe accident with an uncontrolled escape of coolant (water) out of the primary circuit of a Pressurized Water Reactor (PWR), water immediately evaporates. Evaporation of coolant leads to a pressure and temperature increase in the containment of a nuclear facility. In addition to, radioactive particles can be released due to demolition of fuel assemblies and will be distributed in the operating and plant room. To reduce mechanical stress on the containment building because of rising pressure and temperature, spray systems can be activated during the accident scenario injecting cold water. A various number of spray nozzles are distributed in rings in the upper containment part. With the injected spray, also aerosol particles can be washed out and lead to a reduction of particles in the containment gas atmosphere.

To simulate accident scenarios in nuclear reactor safety, tools like commercial CFD packages are used. CFD is based on 'first principles', this means CFD uses conservation equations for mass, momentum and energy. Commercial codes must be extended with thermohydraulic models for use in nuclear reactivity safety. In the present work, models for the physical processes of spray cooling and aerosol particle washout are described. The Euler-Euler two-fluid approach serves as basic mathematical description for both physical models, which will be implemented via user-defined functions in ANSYS CFX. Validation is done with experiments (AW 4 and HD-31-SE) conducted in the German model containment THAI. The simulations consider particle and droplet size distributions to approximate the reality as close as possible.

To investigate the model applicability on a real size containment of a nuclear power plant, a simulation done in the generic containment of a German KONVOI PWR is presented. A fictional spray system is implemented into the generic containment, which is representing real size dimensions of the operating and plant room. Results are physically reasonable and confirm, that a combination of both models in CFD is possible.

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	I
Kurzfassung	III
Abstract	V
Abkürzungsverzeichnis	IX
Nomenklatur	XI
1 Einleitung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Stand der Wissenschaft und Technik	2
1.2.1 Aufbau von Leichtwasserreaktoren und lokaler Kühlmittelverlust	2
1.2.2 Experimente in Modellsicherheitsbehältern	5
1.2.3 Numerische Arbeiten in Modellsicherheitsbehältern	10
1.3 Ziel der Arbeit	15
2 Grundlagen und Modellentwicklung	19
2.1 Zwei-Fluid Modell	19
2.2 Tropfenmodellierung	21
2.3 Modellierung der Spraykühlung	23
2.3.1 Phänomenologische Beschreibung	23
2.3.2 Mathematische Beschreibung	27
2.4 Modellierung des Partikelauswaschvorgangs	29
2.4.1 Phänomenologische Beschreibung	29
2.4.2 Mathematische Beschreibung	30
3 Numerische Methode und Verifikation der Modelle	37
3.1 Netzgenerierung im THAI Behälter	37
3.2 Modellierung der Randbedingungen	39
3.2.1 Sprayeintritt an der Düse	39
3.2.2 Modellierung verschiedener Tropfendurchmesser	42
3.2.3 Modellierung verschiedener Partikeldurchmesser	43
3.2.4 Behandlung von Wasseransammlungen	45

3.3	Verifikation der entwickelten Modelle an einfachen Kanalströmungen . . .	47
3.3.1	Kondensation im Mischkanal	47
3.3.2	Auswaschen von Partikeln in einem Kanal	54
4	Validierung	61
4.1	Validierung des Spraykühlungsmodells	61
4.1.1	Validierungsexperiment THAI HD-31-SE	61
4.1.2	Numerisches Setup in ANSYS CFX	62
4.1.3	Ergebnisse	64
4.1.4	Rechenzeit	74
4.2	Validierung des PartikelAuswaschmodells	74
4.2.1	Validierungsexperiment THAI AW4	74
4.2.2	Numerisches Setup in ANSYS CFX	76
4.2.3	Ergebnisse	78
4.2.4	Rechenzeit	87
5	Simulation eines KONVOI Sicherheitsbehälters	89
5.1	Zweck der Kombination	89
5.2	Geometrisches Modell und Netz des KONVOI Sicherheitsbehälters	90
5.3	Angenommenes Störfallszenario	92
5.4	Numerisches Setup in ANSYS CFX	94
5.5	Ergebnisse	95
6	Zusammenfassung und Ausblick	101
	Literaturverzeichnis	104

Abkürzungsverzeichnis

ASTEC	Accident Source Term Evaluation Code
BMWi	Bundesministerium für Wirtschaft und Energie
CALIST	Characterization and Application of Large Industrial Spray Transfer
CANDU	Canada Deuterium Uranium
CFD	Computational Fluid Dynamics
CEA	Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives
COCOSYS	Containment Code System
CONAN	Condensation with Aerosols and Noncondensable Gases
CsI	Caesiumiodid
DWR	Druckwasserreaktor
ESBWR	Economic Simplified Boiling Water Reactor
EPR	European Pressurized Water Reactor
GAU	Größter anzunehmender Unfall
GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH
HLRS	Höchstleistungsrechenzentrum der Universität Stuttgart
IEA	International Energy Agency
IKE	Institut für Kernenergetik und Energiesysteme
IRSN	Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire
ITSM	Institut für Thermische Turbomaschinen und Maschinenlaboratorium
KAEVER	Kernschmelz-Aerosol-Verhalten
KONVOI	Druckwasserreaktor nach deutscher Bauart

LOCA	Loss Of Coolant Accident
LP Code	Lumped Parameter Code
LWR	Leichtwasserreaktor
MISTRA	Mitigation and Stratification Facility
PANDA	Passive Nachwärmeabfuhr und Druckabbau
PSI	Paul Scherer Institut
PWR	Pressurized Water Reactor
RDB	Reaktordruckbehälter
RBMK	Druckröhrenreaktor nach sowjetischer Bauart
SST	Shear Stress Transport
SWR	Siedewasserreaktor
THAI	Thermal-hydraulics, H ₂ , Aerosols and Iodine
TMI	Three-Mile Island
TOSQAN	Test Station for Simulation and Qualification in Airborne Conditions

Nomenklatur

Lateinische Buchstaben:

a	m^2/s	Temperaturleitfähigkeit
A	m^2/m^3	Phasengrenzfläche
c	-	Massenanteil
c_D	-	Widerstandskoeffizient
c_{TD}	-	Modellparameter
D	m^2/s	Diffusionskoeffizient
d	m	Durchmesser
E	W/m^3	Senken-/Quellterm der Energie
g	m/s^2	Erdbeschleunigung
h	J/kg	Spezifische Enthalpie
Δh	J/kg	Latente Wärme
J	-	Korrekturfaktor
K	-	Korrekturfaktor
M	N/m^3	Senken-/Quellterm des Impulses
M	kg/mol	Molare Masse
\dot{m}	kg/s	Massenstrom
n	$1/\text{m}^3$	Anzahldichte
Nu	-	Nusseltzahl
p	N/m^2	Druck
Pe	-	Pecletzahl
Pr	-	Prandtlzahl
q	W/m^2	Wärmestromdichte
r	m	Radius
R	m	Tropfenradius bis zur Phasengrenzfläche
R	-	Durchmesser Verhältnis von Tropfen und Partikel
Re	-	Reynoldszahl
s	m	Tropfenfallhöhe
S^*	-	Korrekturfaktor
Sh	-	Sherwoodzahl
St	-	Stokeszahl
T	K	Absolute Temperatur
t	s	Zeit

Nomenklatur

u	m/s	Geschwindigkeit
V	m^3	Volumen
\dot{V}	m^3/s	Volumenstrom
x	m	Dreidimensionale Koordinatenrichtungen x, y, z
y	-	Molenbruch

Griechische Buchstaben:

α	-	Volumetrischer Phasengehalt
α	$W/m^2 K$	Wärmeübergangskoeffizient
β	m/s	Massentransferkoeffizient
Γ	$kg/m^3 s$	Senken-/Quellterm der Masse
η	-	Auswascheffizienz
ϑ	$^{\circ}C$	Temperatur
λ	$W/m K$	Wärmeleitfähigkeit
μ	$Pa s$	Dynamische Viskosität
μ_T	$Pa s$	Turbulente Viskosität (Wirbelviskosität)
ρ	kg/m^3	Dichte
σ	-	Viskositätsverhältnis
τ	N/m^2	Schubspannung
τ	s	Antwortzeit
ϕ	$^{\circ}$	Spraywinkel

Indizes:

Air	Luft (nichkondensierbar)
all	Gesamtauswascheffizienz
con	Sicherheitsbehälter
cond	Kondensation
diff	Diffusionsabscheidung
dyn	dynamisch
k	Phasenindex
G	Gas
Ges	Gesamt
HT	Wärmeübergang zwischen Tropfen- und Gasphase
imp	Impaktionsabscheidung
int	Interzeptionsabscheidung
L	Wasser (in Tropfenform)

L,G	Zwischen Tropfen- und Gasphase
m	Dreidimensionale Koordinatenrichtungen x, y, z
P	Partikel
sat	Sättigungszustand
T	Turbulent
T V	Absetzvorgang
Vapor	Wasserdampf (kondensierbar)

Exponenten:

D	Widerstandskraft
G	Gas
k	Phasenindex
L	Wasser (in Tropfenform)
Re	Reynolds
TD	Turbulente Diffusion

1 Einleitung

1.1 Motivation

Mit Beginn der zivilen Nutzung der Kernenergie im Jahre 1957 durch die Inbetriebnahme des Kernkraftwerks in Shippingport (USA) [2] hat sich die Kerntechnik zu einer weltweit genutzten grundlastfähigen Energiequelle entwickelt. Zur Zeit werden weltweit 448 Kernkraftwerke zivil zur Energieerzeugung genutzt, davon acht in Deutschland [7] (Stand 31.12.2016). Bei den meisten in Betrieb befindlichen Kraftwerken handelt es sich um sogenannte Leichtwasserreaktoren, die entweder als Druckwasserreaktor (DWR) [88] oder als Siedewasserreaktor (SWR) ausgeführt sind [46]. Darüber hinaus gibt es Kraftwerke, welche nach dem Prinzip eines Schwerwasserreaktors (z.B. Canada Deuterium Uranium (CANDU)) oder eines graphit moderierten Druckröhrenreaktors (z.B. Druckröhrenreaktor nach sowjetischer Bauart (RBMK)) arbeiten. Der zunehmende weltweite Energieverbrauch, nach Schätzungen der International Energy Agency (IEA) um bis zu 30 % bis zum Jahre 2040 [5], führt dazu, dass die Nutzung der Kerntechnik steigen wird. Viele Länder werden daher ihr bereits bestehendes kerntechnisches Potential ausbauen oder neu in die Technik einsteigen [6]. In vielen Ländern überwiegt die Überzeugung, dass die Kernenergie Teil des zukünftigen Energiemixes sein muss, um den Ausstoß klimaschädlicher Gase wie CO_2 zu reduzieren und die Energieerzeugung unabhängig von den fossilen Energieträgern Kohle, Öl und Gas zu gewährleisten. Derzeit befinden sich 80 Kernkraftwerke in Planung [7], die in Zukunft zur Befriedigung des weltweit steigenden Energiebedarfs eingesetzt werden sollen.

In einigen Ländern, darunter auch in der Bundesrepublik Deutschland, wird die Kerntechnik zunehmend kritisch gesehen, da sie als unsicher eingestuft wird oder das Problem der Endlagerung kontrovers diskutiert wird. Deshalb hat der Deutsche Bundestag im Jahre 2011 nach der Reaktorkatastrophe von Fukushima Daichii eine Änderung des Atomgesetzes mit dem Ausstieg aus der Kernenergie bis 2022 beschlossen [67]. Dass die Kerntechnik mit nicht zu vernachlässigenden Risiken verbunden ist, zeigen die drei bisher größten Unfälle in zivil zur Energieerzeugung genutzten Anlagen. Der erste große Zwischenfall ereignete sich im Jahre 1979 im Kernkraftwerk Three-Mile Island (TMI) in der Nähe von Pittsburgh (Pennsylvania) in den USA [47]. Hier kam es in Block 2 aufgrund fälschlicherweise geschlossener Ventile im Notspeisewassersystem des Sekundärkreislaufs zu einer partiellen Kernschmelze im Reaktordruckbehälter, da die Nachzerfallswärme nicht abgeführt werden konnte. Im Jahre 1986 ereignete sich in der ehemaligen Sowjetunion auf dem Gebiet der heutigen Ukraine der wohl bisher größte anzunehmende

Unfall (GAU) in Block 4 des Kernkraftwerks Tschernobyl in unmittelbarer Nähe der Stadt Prybjat [47]. Bei einem Experiment, in welchem getestet werden sollte, ob die aus der Rotationsenergie der auslaufenden Turbinen gewonnene elektrische Energie die Zeit bis zum vollständigen Start der Notstromgeneratoren überbrücken kann, kam es aufgrund von Bedienungsfehler und der Abschaltung von Sicherheitseinrichtungen zu einer nicht mehr kontrollierbaren Reaktivitätssteigerung des Reaktors mit anschließender totaler Zerstörung. Die Zerstörung des Reaktors nach sowjetischer Bauart RBMK (Graphit moderierter und Wasser gekühlter Kernreaktor mit positivem Dampfblasenkoeffizient) führte zu einer enormen Freisetzung radioaktiver Partikel aus dem Reaktorgebäude mit der späteren großflächigen Verteilung bis nach Westeuropa. Ein solcher Unfall ist in den in der Bundesrepublik Deutschland betriebenen Kraftwerken unter Verwendung eines negativen Dampfblasenkoeffizienten nicht möglich. In Kraftwerken mit negativem Dampfblasenkoeffizienten kann es ebenso zu schweren Unfällen kommen. Dies hat sich im Jahre 2011 in Japan gezeigt. Hier wurde aufgrund eines Erdbebens vor der Küste Japans ein Tsunami ausgelöst, der beim Auftreffen auf die japanischen Inseln die Wärmesenke der Siedewasserreaktoren im Kraftwerk Fukushima Daichii zerstörte. Daraufhin kam es zu einer Kernschmelze in mehreren Reaktoren des Kraftwerks und durch die Zerstörung der Reaktorgebäude zu einer Freisetzung von Radioaktivität in die Umgebung [47].

Durch den weltweiten Ausbau der Kerntechnik, aber auch aus den in Störfällen gewonnenen Erfahrungen in den vergangenen Jahrzehnten, ist es wichtig, dass Kernkraftwerke zukünftig weiterhin wissenschaftlich untersucht werden. Nur genaue Kenntnisse über die Technik und ein fundiertes Wissen über die physikalischen Phänomene garantieren ausgereifte Kraftwerke und deren sicheren Betrieb. Die vorliegende Arbeit soll dazu beitragen, das thermohydraulische Verständnis in kerntechnischen Anlagen hinsichtlich Kühlung und Auswaschpotential von Partikel durch Spray zu erweitern. Durch das Einbringen von Spraytropfen mittels eines Düsensystems in eine vorhandene Gasatmosphäre wird diese mit Tropfen beladen.

1.2 Stand der Wissenschaft und Technik

In diesem Abschnitt wird der Grundsatz von Leichtwasserreaktoren nach dem Druckwasserprinzip erklärt, zudem wird der lokale Kühlmittelverluststörfall vorgestellt. Im Anschluss wird die Übertragung realer Störfälle auf experimentell handhabbare Modellsicherheitsbehälter diskutiert und durch die Vorstellung experimenteller und numerischer Arbeiten aus der Literatur abgeschlossen.

1.2.1 Aufbau von Leichtwasserreaktoren und lokaler Kühlmittelverlust

Weltweit werden in der Kerntechnik vorwiegend Leichtwasserreaktoren zur Erzeugung von elektrischer Energie verwendet [7]. Leichtwasserreaktoren können nach zwei verschiedenen Prinzipien, als DWR [88] und als SWR [46], ausgeführt sein. Der DWR ist der

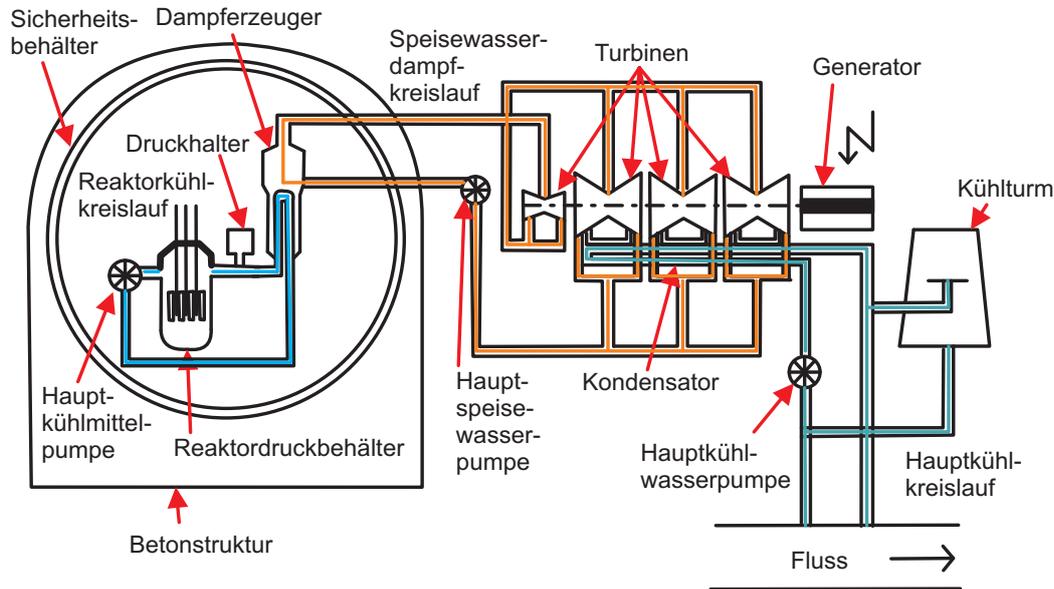


Abbildung 1.1: Technische Arbeitskreisläufe in einem Druckwasserreaktor nach [53], [47]

weltweit meistgenutzte Reaktortyp. Moderne Kraftwerksanlagen nach dem DWR Prinzip, welche zur Zeit in Europa im französischen Flamanville oder im finnischen Olkiluoto z.B. mit dem European Pressurized Water Reactor (EPR) gebaut werden, basieren auf diesem Funktionsprinzip. Im Folgenden werden die technischen Arbeitskreisläufe eines DWRs vom Typ KONVOI auf Grundlage von [53], [47] und [88] beschrieben. Bei diesem Kraftwerkstyp handelt es sich um die modernste Entwicklungsstufe eines deutschen DWRs, welche gegen Ende der 1980er gebaut wurden. Abb. 1.1 zeigt das Anlagenschema eines DWRs.

Auf der linken Seite ist der Primärkreislauf dargestellt. Der Primärkreislauf besteht aus einer Hauptkühlmittelpumpe, dem Reaktordruckbehälter (RDB), dem Druckhalter und dem Dampferzeuger. Im RDB befinden sich die Brennelemente, welche den nuklearen Brennstoff enthalten. Insgesamt sind 125 Tonnen Brennstoff (niedrig angereicherter Uran 235 bis 4,5 %) auf 193 Brennelemente verteilt. Das Wasser tritt mit einem Druck von ca. 155 bar und 292°C in den RDB ein, wird durch die entstehende Wärme bei der Kernspaltung isobar erhitzt und tritt mit einer Temperatur von 326°C wieder aus. Das Wasser wird hierbei nur erwärmt und nicht verdampft. Der Primärkreislauf ist bis auf eine Dampfblase zur Druckerhaltung im Druckhalter im Regelbetrieb blasenfrei. Das Wasser gibt im Dampferzeuger die aufgenommene Wärme an den sekundären Kreislauf ab. Hier wird der Druck des Wassers auf 68 bar erhöht, bei 285°C verdampft und im Anschluss über die verschiedenen Turbinenstufen geleitet. Die Turbinen treiben einen Generator zur Stromerzeugung an. Der entspannte Dampf der Turbinenstufen wird im

Anschluss im Kondensator verflüssigt und über die Hauptspeisewasserpumpe zurück in den Dampferzeuger geführt. Primär- und Sekundärkreislauf sind bei diesem Reaktortyp räumlich getrennt und übertragen die Wärme über Wärmeübertragerrohre im Dampferzeuger. Es wird somit gewährleistet, dass radioaktiv aktiviertes Wasser des Primärkreislaufs nicht aus dem Sicherheitsbehälter des Reaktors gelangt. Insgesamt ist der Primärkreislauf vierfach redundant ausgeführt, um bei einem Ausfall einer oder mehrerer Kühlkreisläufe die Abfuhr der Wärme aus dem Primärkreislauf zu gewährleisten und so einer unzulässigen Überhitzung des Kerninventars vorzubeugen. Der Sicherheitsbehälter des Primärkreislaufs besteht aus 28 mm starkem Stahl, der die komplette Gasatmosphäre zur Umwelt abschließt und im Störfall Radioaktivität und Spaltprodukte zurückhält. Der Sicherheitsbehälter ist von einer Betonstruktur umgeben, welche die Anlage gegen äußere Einwirkungen wie z.B. Stürme oder einem Flugzeugeinschlag schützt.

Da Unfälle mit Freisetzung von Radioaktivität erheblichen Einfluss auf Mensch und Umwelt haben, wird bereits bei der Auslegung eines Kraftwerks auf die Eindämmung der Einflüsse geachtet. Für die Beurteilung von Kraftwerken gibt es international standardisierte Störfälle, die eine Anlage bewältigen können muss. Einer dieser Störfälle ist der Kühlmittelverlust im Primärkreislauf eines DWRs [1], [11]. Er wird als sogenannter Loss Of Coolant Accident (LOCA) bezeichnet. Bei diesem Szenario wird ein Bruch in einer der vier Primärleitungen angenommen. Beim Bruch der Primärleitung kommt es zu einer augenblicklichen Verdampfung einer großen Menge Kühlmittel aus dem Reaktor, da im Regelbetrieb eines Kraftwerks im Sicherheitsbehälter im Vergleich zur Umweltumgebung ein Unterdruck herrscht. Der stetige Austritt von Kühlmittel und die instantane Verdampfung führt zu einer Druck- und Temperaturerhöhung im Sicherheitsbehälter. Zusätzlich können durch einen unkontrollierten Austritt von Kühlmittel radioaktive Partikel in den Sicherheitsbehälter freigesetzt werden. Die Partikel vermischen sich mit der Gasatmosphäre zu einem Aerosol und können so im gesamten Behälter verteilt werden. Um die thermische und mechanische Belastung des Sicherheitsbehälters und die Verteilung von Partikeln einzuschränken, müssen für diesen Fall geeignete Sicherheitsmechanismen vorgehalten werden. Zu diesen Mechanismen gehört z.B. die Implementierung eines Spraysystems mit einer Vielzahl von Düsen im Deckenbereich des Sicherheitsbehälters [19]. Die Anordnung der Düsen erfolgt in Ringstrukturen auf verschiedenen Höhenniveaus. Solche Spraysysteme sind z.B. Teil des Sicherheitssystems im von der Firma AREVA entwickelten EPR [13].

Das Spraysystem belädt die Gasatmosphäre mit Tropfen, was zu einer Temperatur- und Druckreduzierung im Sicherheitsbehälter führt. Ebenso werden Partikel aus der Atmosphäre ausgewaschen und so deren weitere Verteilung verhindert. Wird kaltes Wasser in eine Gasatmosphäre aus Luft und Wasserdampf eingesprüht, kommt es nicht nur zu einer Reduzierung der Temperatur durch einen konvektiven Wärmeübergang zum Tropfen, sondern auch zu Kondensation an den kalten Tropfenoberflächen. Eingesprühete Tropfen haben zudem die Möglichkeit, Partikel mitzureißen und so deren Verbleib in der Gasatmosphäre zu verhindern. Beide Vorgänge wurden getrennt voneinander in

experimentell maßvollem Umfang in Modellsicherheitsbehältern und mit numerischen Methoden untersucht.

Die folgenden beiden Abschnitte gliedern sich in experimentelle und numerische Untersuchungen, welche in der Literatur dokumentiert sind. Alle erwähnten experimentellen Arbeiten in der Literatur (Abschnitt 1.2.2) werden durch numerische Arbeiten, welche in Abschnitt 1.2.3 beschrieben sind, nachgerechnet. Abschnitt 1.2.3 geht dabei im speziellen auf die Annahmen und Vereinfachungen der Simulationen ein. Der Abschnitt der experimentellen Untersuchungen soll zum besseren Verständnis den allgemeinen Ablauf der einzelnen Versuche beschreiben.

1.2.2 Experimente in Modellsicherheitsbehältern

Um thermohydraulische Phänomene im Sicherheitsbehälter einer kerntechnischen Anlage untersuchen zu können, werden Sicherheitsbehälter im experimentellen Maßstab verwendet. Sicherheitsbehälter im Modellmaßstab haben den Vorteil, dass sich physikalische Vorgänge in wesentlich kleinerem Umfang im Vergleich zur realen Kraftwerksgröße untersuchen lassen. Zur Untersuchung thermohydraulischer Phänomene sind weltweit unterschiedliche Anlagen in Betrieb. Die Modellanlagen dienen dazu, für die Reaktorsicherheitsforschung relevante thermohydraulische Effekte zu untersuchen und Validierungsdaten für die Nachrechnung unter anderem mit CFD Methoden zur Verfügung zu stellen [10], [11]. Nachfolgend werden die mit dieser Arbeit in Zusammenhang stehenden Modellsicherheitsbehälter kurz erläutert, um die geometrischen Unterschiede der verschiedenen Anlagen zu zeigen.

Die Test Station for Simulation and Qualification in Airborne Conditions (TOSQAN) ist eine französische Modellversuchsanlage und wird vom Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) betrieben [73]. Die Anlage in Abb. 1.2 a) besteht aus einem abgesetzten Zylinder mit einem Durchmesser von 1,5 m und einer Höhe von 4 m. Der Behälter hat ein Volumen von insgesamt 7 m^3 und ist so gestaltet, dass er maximal 7 bar bei 160°C standhält. Die Wände sind auf maximal 160°C beheizbar. Um berührungslose Messsysteme einbringen zu können, befinden sich in der Außenwand insgesamt 14 optische Zugangsstellen, die dem Betriebsdruck standhalten. In TOSQAN können Mehrphasenströmungen mit Spraytropfen und Aerosolgemischen sowie das Mischverhalten verschiedener Gase (z.B. Wasserstoff, Luft, Wasserdampf) und Kondensationseffekte untersucht werden.

Bei der MISTRA Anlage handelt es sich ebenfalls um eine französische Anlage, welche vom Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA) betrieben wird und in Abb. 1.2 b) dargestellt ist [82]. Der zylindrische Behälter hat einen Durchmesser von 4,25 m, eine Höhe von insgesamt 7,3 m und verfügt über ein Volumen von $99,5 \text{ m}^3$. Die Form der Anlage ähnelt durch den zylindrischen Behälter sehr stark dem Sicherheitsbehälter einer kerntechnischen Anlage französischer Bauart. Die angegebenen Längen repräsentieren 10 % der originalen Abmessung in Höhe und Durchmesser.

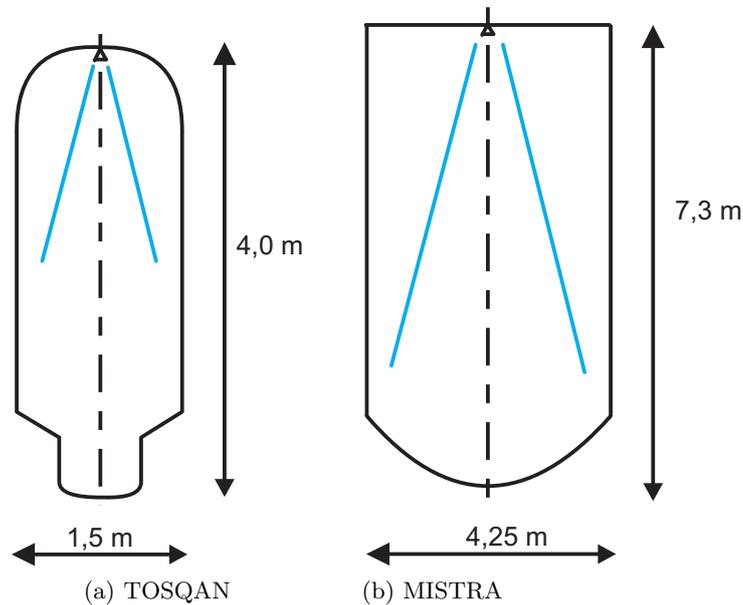


Abbildung 1.2: Schematische Darstellung des TOSQAN und MISTRA Modellsicherheitsbehälters

MISTRA beinhaltet insgesamt drei verschiedene Kondensatorflächen, die unter Berücksichtigung eines kleinen Abstandes zur Außenwand angebracht sind und die entstandenes Kondensat aufnehmen sollen. Dies gewährleistet, dass die Randbedingungen der Außenwand während der Durchführung von Experimenten konstant gehalten werden können. Mit MISTRA ist es möglich, ebenso wie bei TOSQAN, Gasschichtungen unter Verwendung eines Wassersprays, allerdings in einem wesentlich größeren Volumen, zu untersuchen.

Beim Modellsicherheitsbehälter Passive Nachwärmeabfuhr und Druckabbau (PANDA) handelt es sich um eine Anlage, welche vom Paul Scherer Institut (PSI) in der Schweiz betrieben wird. PANDA besteht aus insgesamt sechs Behältern, die über Verrohrungen miteinander verbunden sind und die den von General Electric produzierten Economic Simplified Boiling Water Reactor (ESBWR) vereinfacht als System darstellen [69], [3]. Die verschiedenen Behälter repräsentieren dabei unterschiedliche Anlagenbereiche wie den RDB, die Kondensationskammern, das geschlossene trockene Luftvolumen um den RDB etc. Die Anlage ermöglicht weitere Untersuchungen, die nicht mit dem genannten Reaktordesign in Verbindung stehen, da sich die einzelnen Behälter beliebig miteinander verbinden lassen. Es sind auch Experimente in Konfigurationen möglich, in denen nicht alle Behälter berücksichtigt sind. Dazu gehören z.B. Vermischungsvorgänge von verschiedenen Leichtgaskomponenten (Helium, Luft) oder das Mischungsverhalten von

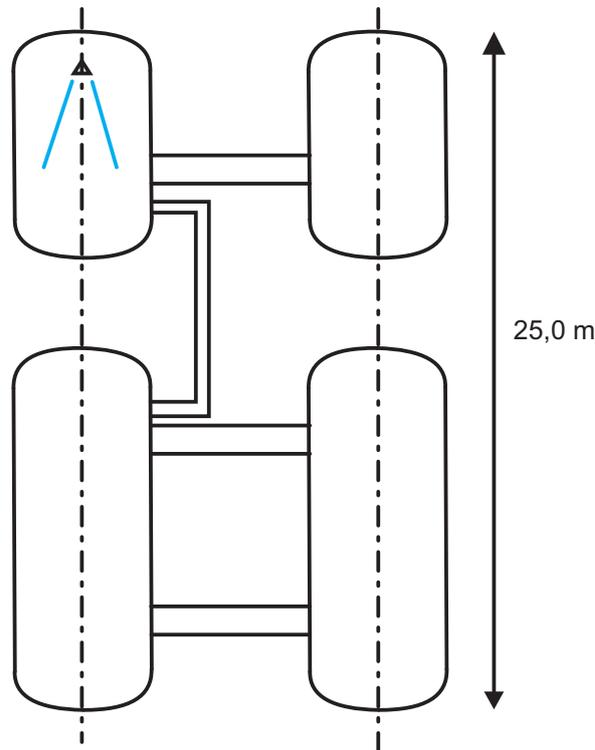


Abbildung 1.3: Schematische Darstellung des PANDA Modellsicherheitsbehälters

Leichtgasen unter Sprayaktivierung. Diese Untersuchungen werden in einer vereinfachten Anlagenkonfiguration mit lediglich vier Behältern durchgeführt, siehe Abb. 1.3. Das Gesamtvolumen der kompletten Anlage beträgt 515 m^3 bei einer Höhe von 25 m. Die Anlage kann bei 200°C bis 10 bar betrieben werden. Für experimentelle Untersuchungen können zudem nur einzelne Behälter berücksichtigt werden, sodass sich das Volumen reduzieren lässt. Verschiedene Messtechniken ermöglichen die Bestimmung zweidimensionaler Geschwindigkeitsfelder sowie die Messung von Konzentrationen verschiedener Gasbestandteile in der PANDA Atmosphäre.

In Deutschland wird für die Untersuchung thermohydraulischer Effekte in der Kerntechnik der Modellsicherheitsbehälter THAI betrieben [29], siehe Abb. 1.4. Der zylindrische Behälter mit halbkugelförmigem Dom und zylindrischem Sumpf hat eine Höhe von 9,2 m, einen Durchmesser von 3,2 m und ein Gesamtvolumen von 60 m^3 . Die maximale Belastung stellt sich bei 14 bar und 180°C ein. THAI ist von einem Thermoölsystem umgeben, welches geheizt und gekühlt werden kann, um die gewünschten thermischen Randbedingungen einzustellen. Obwohl es sich bei THAI um eine Einraumgeometrie handelt, können durch verschiedene Einbauten wie Innenzylinder, Kondensatwannen,

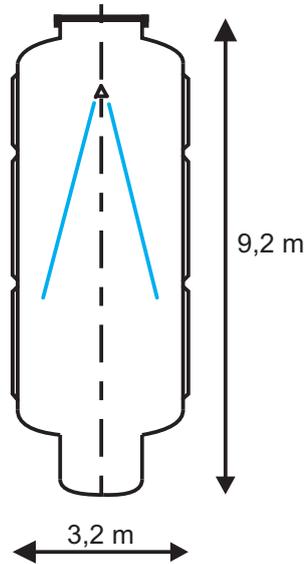


Abbildung 1.4: Schematische Darstellung des THAI Modellsicherheitsbehälters

Spraysysteme usw., Strömungen mit Hindernissen und Zirkulation untersucht werden.

Neben THAI wird in Deutschland der Kernschmelz-Aerosol-Verhalten (KAEVER) Versuchsstand [76], [24] betrieben, siehe Abb.1.5. Der Versuchsstand besteht aus einem Zylinder mit einem Durchmesser von 2,5 m und einem Volumen von 10 m^3 . An den beiden Stirnseiten befindet sich je eine Tür, ähnlich einer Personenschleuse im Sicherheitsbehälter eines Kernkraftwerks. In KAEVER werden Absetzvorgänge und die Verbindung einzelner Aerosolpartikel zu größeren Partikeln unter Kondensation untersucht. Ein Spray ist in der Anlage nicht berücksichtigt.

In den vorgestellten Modellsicherheitsbehältern werden Experimente durchgeführt, in denen Tropfenströmungen mit Wärme- und Stoffübertrag als auch das Absetzverhalten

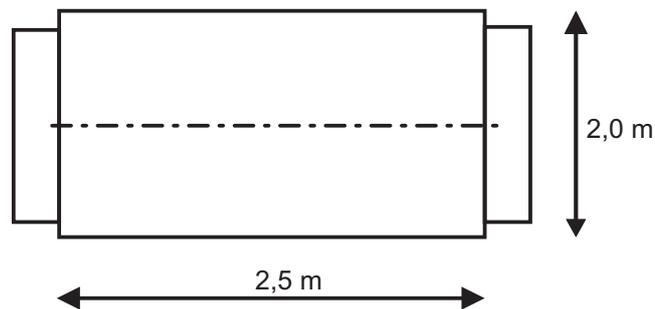


Abbildung 1.5: Schematische Darstellung des KAEVER Modellsicherheitsbehälters

von Aerosolpartikeln aus einer Gasatmosphäre und das Auswaschen von Partikeln mit Spray untersucht wird. Die folgenden Abschnitte beschreiben relevante Experimente und fassen diese kurz zusammen.

Der Versuch K100A, welcher im Modellsicherheitsbehälter KAEVER durchgeführt wurde, untersucht das Absetzverhalten von Aerosolpartikel in einer in Ruhe befindlichen Gasatmosphäre [80]. Hierzu werden Caesiumiodid (CsI) Partikel in eine Gasatmosphäre eingebracht und gleichmäßig verteilt. Nachdem das Strömungsfeld beruhigt ist und sich die Partikel verteilt haben, wird die CsI Konzentration an verschiedenen Stellen im Behälter gemessen. Der Abfall der Konzentration ist durch Anlagerung von Partikeln an Wänden zu erklären, ebenso wie durch die höhere Dichte der Partikel gegenüber Gas und die damit verbundenen Absetzbewegungen zum Bodenbereich.

Beim Versuch TOSQAN 101 [59], [66] wird der geöffnete Sicherheitsbehälter auf 120°C erwärmt. Die einströmende Umgebungsluft besitzt den Absolutdruck von 1 bar. Nachdem TOSQAN geschlossen ist, wird über eine Düse Wasserdampf mit einer Temperatur von 120°C in den Behälter eingebracht, bis ein Absolutdruck von 2,5 bar erreicht ist. Im Anschluss an die Druckerhöhung wird kaltes Wasser mit 20°C eingesprüht, bis sich eine konstant kühlere Gastemperatur einstellt. Das Experiment untersucht das Potential der Spraykühlung mit Kondensation.

TOSQAN 113 [61], [66] untersucht die Auflösung einer Gasschichtung unter Verwendung eines Wassersprays. Es handelt sich dabei um eine Abwandlung des Versuchs TOSQAN 101. Vor Beginn der Sprayaktivierung wird eine Gasschichtung aus Helium und Luft erzeugt. Aufgrund der geringeren Dichte von Helium setzt sich dieses im Dombereich von TOSQAN ab und es stellt sich eine Stratifizierung von Luft und Helium ein. Wasser wird unter einem Spraywinkel von 55° und einem Massenstrom von 30 g/s bei 25°C in die Schichtung eingesprüht. Durch den Einsprühvorgang mischt sich die Stratifizierung nach einer Zeit von ca. 250 s aus.

Die Versuchsreihe MASPn [57], [74], welche in MISTRA durchgeführt wurde, besteht aus insgesamt drei unterschiedlichen Transienten und untersucht thermische Effekte im Sicherheitsbehälter. Die Transienten MASP1 und MASP2 untersuchen dabei das Auflösen einer thermischen Schichtung aus Wasserdampf und Luft mithilfe eines Sprays. Die mittlere Gastemperatur in MISTRA beträgt 124°C bei 2,4 bar Absolutdruck. Die beiden Versuche unterscheiden sich in der Wasserspraytemperatur von 40°C bzw. 60°C am Düseneintritt.

In einer zusätzlichen MISTRA Versuchsreihe MARC2b [57], [49] werden dynamische Fähigkeiten wie das Ausmischen einzelner Gaskomponenten untersucht. Hierzu wird Helium und Luft geschichtet in MISTRA eingebracht. Um im Vergleich zur Versuchsreihe MASPn hauptsächlich die dynamischen Effekte zu untersuchen und den Wärme- und Stofftransport zwischen Atmosphäre und Tropfen vernachlässigen zu können, wird der Versuch in einer kalten Gasatmosphäre von 25°C und einer Wasserspraytemperatur von 40°C bei einem Massenstrom von 0,91 kg/s durchgeführt.

Bei den Experimenten PE1 und PE2 [65], [68], welche in PANDA durchgeführt wur-

den, handelt es sich um eine Abfolge verschiedener Versuchsphasen, die dem Wassersprayeintrag vorgeschaltet sind. Zuerst wird der verschlossene Sicherheitsbehälter mit Wasserdampf gefüllt, um ein Gemisch aus Luft und Wasserdampf mit 2,5 bar und einer Temperatur von 140°C zu erzeugen. Anschließend wird Helium mit einer Temperatur von 125°C in den Behälter eingeführt. Dadurch entsteht ein Gemisch aus einem kondensierbaren und zwei nicht kondensierbaren Gasen. Das Gemisch wird in PE1 mit einer Vollkegeldüse und in PE2 mit einer Hohlkegeldüse besprüht. Die Aneinanderreihung der verschiedenen Versuchsphasen soll die systematische Abfolge eines realen Störfalles berücksichtigen. Aus den Experimenten zeigt sich, dass das Spray eine große Wirkung auf den Abkühlungsprozess der Atmosphäre hat. Die verschiedenen Düsenformen unterscheiden sich in ihrem Abkühlvermögen nur marginal, die Vollkegeldüse zeigt eine geringfügig höhere Effizienz.

Der Versuch TH2 [42] ist einer der Inbetriebnahmeversuche des THAI Modellsicherheitsbehälters. Während des ersten Abschnitts des Experiments wird heißer Wasserdampf mit einer Temperatur von 100°C über eine Ringdüse, welche sich in der Rotationsachse der Modellanlage befindet, eingedüst. Die Ringdüse befindet sich in einer Höhe von 6,7 m oberhalb des Sumpfs und entlässt einen Wasserdampfmassenstrom von 35 g/s. Aufgrund der geringeren Dichte des Dampfs gegenüber der 20°C kalten Luft, die sich bereits im THAI befindet, stellt sich eine Schichtenströmung von Wasserdampf und Luft ein. Durch die stetige Einspeisung von Dampf steigt die Temperatur und der Druck im Behälter an. Zudem breitet sich die Schichtung zum Sumpf hin aus. Durch die kontinuierliche Zuführung von Wasserdampf kondensiert dieser an kalten Flächen und im Volumen von THAI zu Wasser aus.

TH13 [43], ebenfalls in THAI durchgeführt, gliedert sich in vier Versuchsabschnitte, dabei sind die ersten beiden Versuchsabschnitte zur Modellvalidierung von Bedeutung. Im ersten Versuchsabschnitt wird in einen mit Luft (30°C, Absolutdruck 1 bar) gefüllten THAI ein Heliummassenstrom von 0,6 g/s eingedüst. Dies führt zu einer stabilen Schichtung der beiden nichtkondensierbaren Leichtgase. Im zweiten Abschnitt wird kondensierbarer Wasserdampf mit einem Massenstrom von 36 g/s in THAI eingebracht. Durch den Eintritt von Wasserdampf wird die Leichtgasschichtung aufgebrochen und Wasserdampf kondensiert aus.

Gupta et al. [30], [31] geben einen ausführlichen Überblick über die in THAI durchgeführten experimentellen Untersuchungen zum Thema Spray und zur Untersuchung des Absetzverhaltens bzw. der Auswaschung von Aerosolpartikeln aus einer Gasatmosphäre.

1.2.3 Numerische Arbeiten in Modellsicherheitsbehältern

Experimente, welche in Modellsicherheitsbehältern durchgeführt werden, dienen als Validierungsgrundlage für CFD oder Lumped Parameter Code (LP Code) Simulationen. Beide Simulationsansätze sind im Bereich der Kerntechnik gleichermaßen akzeptiert, unterscheiden sich jedoch grundlegend in ihren Ansätzen [34] und dadurch in ihrer De-

tailtreue. LP Codes wie z.B. COCOSYS [8] und ASTEC [9] basieren auf eindimensionalen Erhaltungsgleichungen und physikalischen Modellen für die Masse und Energie der beteiligten Gase, Partikel, Tropfen. Die Berechnungsgebiete werden in einzelne Zellen aufgeteilt (nodalisiert), welche einzelne Räume in einem Sicherheitsbehälters eines Kernkraftwerks darstellen. Der Vorteil dieser Methode ist, dass sie sehr schnell Ergebnisse auch für physikalisch und geometrisch anspruchsvolle Simulationen liefert. Nachteilig ist, dass die Ergebnisse sehr modell- und nutzerabhängig sind und eine detaillierte Betrachtung des Fluidströmungsfelds durch die fehlende Betrachtung der Impulsgleichung nicht möglich ist [90]. CFD Methoden berücksichtigen ein dreidimensionales Strömungsfeld und lösen die Navier-Stokes Gleichungen für Masse, Impuls und Energie auf einem hoch aufgelösten Rechennetz. Der detaillierten Auflösung des Strömungsfelds steht jedoch eine enorme Steigerung der Rechenzeit im Vergleich zu LP Codes gegenüber.

Babić et al. [14] haben Wand- und Volumen Kondensation mit einem einphasigen numerischen Ansatz unter Verwendung von CFD simuliert. Wandkondensation beschreibt den Massentransfer von Wasserdampf zur Flüssigkeit an einer kalten Wand, wohingegen Volumen Kondensation das Auskondensieren von Tropfen aus einer mit Wasserdampf übersättigten Gasatmosphäre beschreibt. Tropfen und Gas sind als eine Phase modelliert worden und teilen sich so dasselbe Geschwindigkeitsfeld (mechanisches Gleichgewicht). Das Modell für den Massen- und Wärmeaustausch, welches über eine Benutzerschnittstelle in den kommerziellen CFD Code CFX4 implementiert wurde, basiert auf empirischen Korrelationen und nicht auf physikalischen Erhaltungsgleichungen. Die Validierung des Modells erfolgte mit dem Experiment THAI TH13.

Dass ein Ansatz für ein mechanisches Gleichgewicht bei Berücksichtigung einer Gas- und Tropfenphase sehr vereinfacht und oft nicht gültig ist, zeigen Ding et al. [21] mit ihrer Arbeit. In dieser Arbeit wird das Experiment TOSQAN 113 unter Verwendung von CFD Methoden nachgerechnet. Die Simulationen berücksichtigen zum einen einen mechanischen Gleichgewichtsansatz für die Tropfen- und Gasphase und zum anderen werden Tropfen (Lagrange Ansatz) und Gas (Euler Ansatz) mit je einem separaten Geschwindigkeitsfeld berücksichtigt. Die Ergebnisse zeigen, dass eine Modellierung mit einem eigenen Geschwindigkeitsfeld für die Tropfenphase zwingend notwendig ist.

Wärme- und Stoffübertragung unter Verwendung verschiedener Geschwindigkeitsfelder für Tropfen und Gas haben Babić et al. [15] in ihrer Arbeit untersucht. Für die Tropfenphase wird ein Lagrange Ansatz und für die Gasphase ein Euler Ansatz gewählt. Die Simulation wird unter Verwendung des kommerziellen CFD Codes CFX 4.4 durchgeführt. Mit dem Ansatz wird in einem quasi zweidimensionalen Rechennetz des TOSQAN Sicherheitsbehälters der Versuch 101 nachgerechnet. Das berücksichtigte Netz stellt dabei ein Art Kuchenstück aus dem rotationssymmetrischen TOSQAN Behälter dar. Trotz eines vereinfachten Integrationsgebiets mit periodischen Randbedingungen und einer geringen Gitterauflösung kann die Versuchstransiente zufriedenstellend abgebildet werden.

Filippov et al. [23] untersuchen numerisch mit Mithilfe des CFD Codes FLUENT das Aufbrechen einer Heliumschichtung und die anschließende Vermischung mit ande-

ren Gasbestandteilen mithilfe von Spray. Die Tropfen werden dabei mit einem Lagrange Ansatz modelliert, die Gasphase als kontinuierliche Euler Phase. Die Gasphase ist dabei als Gemisch aus Wasserdampf, Helium und Luft berücksichtigt. Da kalte Tropfen in eine heiße Gasatmosphäre eingedüst werden, ist in den Simulationen Verdampfung und Kondensation über ein implementiertes physikalisches Modell berücksichtigt. Die Simulationen werden mit konstanten Tropfendurchmessern von $260\ \mu\text{m}$ und $550\ \mu\text{m}$ durchgeführt. Zur Validierung sind die experimentelle Daten aus PANDA (PE1 und PE2) verwendet worden.

Zur Modellierung von Volumen Kondensation aus einer mit Wasserdampf gesättigten Gasatmosphäre verwenden Zhang und Laurien [85], [87] einen Euler-Euler Ansatz im kommerziellen CFD Programmpaket ANSYS CFX. Die Tropfen sind bei der Validierung des entwickelten Volumen Kondensationsmodells in THAI (TH2 und TH13) mit einem konstanten Durchmesser von $100\ \mu\text{m}$ berücksichtigt. Das Modell lässt durch die kontinuierliche Modellierung beider Phasen mit je einem separaten Geschwindigkeits- und Temperaturfeld die Betrachtung ohne mechanisches und thermodynamisches Gleichgewicht zu.

Zschaeck et al. [91], [92] haben ein Modell entwickelt, welches Wandkondensation für kerntechnische Anwendungen abbilden kann. Das Modell ist mit dem kommerziellen CFD Programmpaket ANSYS CFX an Wandkondensationsexperimenten, welche mithilfe der Condensation with Aerosols and Noncondensable Gases (CONAN) [12] und Kuhn [51],[52] Versuchsanlagen durchgeführt wurden, validiert worden. In den Untersuchungen wird die Gasphase als eine Mischung aus kondensierbarem Wasserdampf und nicht kondensierbarer Luft betrachtet. Entstandenes Kondensat an der Wand wird sofort über eine Massensenke entfernt, sodass unter Vernachlässigung eines Wasserfilms an der Wand die Tropfenphase nicht als eigenständige Phase in den Simulationen berücksichtigt wird. Dieses Modell ist kombiniert mit dem Volumen Kondensationsmodell von Zhang und Laurien in THAI [85], [87] angewandt worden.

Visser et al. [83] untersuchen die Kondensation an der Wand und im Volumen mit einem eigenen entwickelten physikalischen Modell bei der Eindüsung von Wasserdampf in eine Wasserstoff-Wasserdampf Atmosphäre in THAI. Verwendet wird dazu der Versuch HM-2 [28]. Das physikalische Modell ist von den Autoren in den kommerziellen CFD Strömungscode FLUENT implementiert worden. Durch die Eindüsung von Wasserdampf übersättigt die Atmosphäre und Wasser kondensiert aus. Das entwickelte physikalische Modell [34] entfernt Kondensat an der Wand über eine Massensenke, die Bewegung des Kondensats im Volumen wird vereinfacht über das sogenannte Algebraic Slip Modell [62] berücksichtigt, bei dem über einen algebraischen Ansatz der Schlupf zwischen Tropfen und Gas berechnet wird. Ein eigenes unabhängiges Geschwindigkeitsfeld für Tropfen ist nicht vorhanden. Die Simulationen verwenden ein Netz, welches die geometrische Symmetrie von THAI ausnutzt, d.h. es sind 180° des Sicherheitsbehälters in der Simulation berücksichtigt. Für die gezeigten Validierungspunkte ist die Übereinstimmung von Experiment und Simulation akzeptabel.

Mimouni et al. [66] untersuchen den Einfluss von Spray auf die Bewegung und das Mischungsverhalten einer Gasatmosphäre sowie den Wärme- und Stofftransport zwischen Tropfen und Wasserdampf in einer Mischung aus kondensierbaren und nicht kondensierbaren Gasen. Das dafür entwickelte Modell für den Phasenaustausch wird in das dreidimensionale französische CFD Simulationspaket Neptune CFD [27] implementiert und mit den Experimenten 101 und 113 aus TOSQAN validiert. Die Simulationen verwenden eine monodisperse Tropfengröße von $200\ \mu\text{m}$. Die Experimente lassen sich mit den Simulationen akzeptabel wiedergeben, jedoch schlägt der Autor vor, auch Tropfengrößenspektren zu untersuchen.

Malet und Huang [58] untersuchen numerisch den Einfluss von verschiedenen Spraykonfigurationen in einem namentlich nicht genannten TOSQAN Experiment mit dem CFD Programmpaket FLUENT. Der Schwerpunkt liegt hierbei auf der Untersuchung, wie sich die Spraymodellierung auf das Aufbrechen einer Helium-Luft Schichtung auswirkt. Dazu werden verschiedene monodisperse als auch polydisperse Spraykonfigurationen mit einer verschiedenen Anzahl an Tropfengrößenklassen berücksichtigt. Die Untersuchungen zeigen, dass sich eine vereinfacht angenommene monodisperse Tropfenkonfiguration negativ auf die Simulationsergebnisse auswirkt. Die Rechenzeit lässt sich durch die monodisperse Annahme reduzieren, allerdings leidet darunter die physikalische Genauigkeit. Die Autoren empfehlen einen polydispersen Ansatz, allerdings muss dieser immer für den vorliegenden Fall mit einer zufriedenstellenden Anzahl an Tropfengrößenklassen angepasst werden.

Malet et al. [60] untersuchen den Einfluss der Spraymodellierung in verschiedenen CFD Programmen in einem Benchmark. Untersucht wird das Aussprühen eines Wassersprays in eine Atmosphäre mit Umgebungsdruck 1 bar und 20°C . Den Benchmarkteilnehmern wurden Messdaten für die Tropfengrößenverteilung und die Tropfengeschwindigkeiten am Austritt der experimentell untersuchten Spraydüse zur numerischen Untersuchung mit verschiedenen CFD Programmpaketen zur Verfügung gestellt. Ein Vergleich der Ergebnisse der teilnehmenden Institutionen und CFD Codes zeigt, dass es wichtig ist, die reale Tropfengrößenverteilung zu kennen und zu verwenden. Eine vereinfachte Darstellung mit monodispersen Tropfen zeigt im Vergleich dazu Geschwindigkeitsunterschiede von bis zu 25 % bei der mitgerissenen Gasphase. Werden anstatt der realen Geschwindigkeitsverteilung am Düsenaustritt vereinfachte konstante Profile verwendet, ergibt sich eine fehlerhafte Geschwindigkeitsverteilung im Spraygebiet. Zudem wird der Spraykegel inkorrekt wiedergegeben.

Zirkel [89] hat in seiner Arbeit ein Turbulenzmodell entwickelt, welches dazu verwendet werden kann, die Turbulenz beim Aufbrechen einer Gasschichtung zu simulieren. Das entwickelte Turbulent-Scalar-Flux Turbulenzmodell gehört im Vergleich zu den in der Arbeitsgruppe üblichen isotropischen Turbulenzmodellen zu den nicht isotropischen, d.h. die Turbulenz wird im entwickelten Modell in die einzelnen Raumrichtungen unterschiedlich modelliert. Die Validierung erfolgt mit dem Experiment TH 20 anhand der Heliumkonzentration in der Gasphase. Das nicht isotrope Turbulent-Scalar-Flux Modell

zeigt deutliche Verbesserungen im Vergleich zu den isotropischen Turbulenzmodellen.

Kelm et al. [45], [44] untersuchen numerisch mit ANSYS CFX die Mischung von Helium und Luft in einem namentlich nicht näher genannten Experiment im Mini PANDA und PANDA Behälter. Dazu wird in den Sicherheitsbehältern experimentell eine Schichtung aus Helium und Luft erzeugt. Die Schichtung wird durch das Eindüsen von Luft über ein vertikal angeordnetes Rohr aufgebrochen. Als Validierungsdaten liegen Heliumkonzentrationen und die Temperatur des Gemischs an verschiedenen Messstellen im Strömungsvolumen vor. Die Simulationen werden transient unter Verwendung verschiedener Turbulenzmodelle durchgeführt und zeigen für das isotrope Shear Stress Transport (SST) Modell [64] eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Weitere untersuchte Turbulenzmodelle zeigen dabei keine nennenswerten Unterschiede im Mischungsverhalten.

Die bisherige Beschreibung der Literatur zu numerischen Arbeiten ist beschränkt auf die Betrachtung von Spray, dem Massen- und Wärmeaustausch während der Verdampfung bzw. Kondensation von Tropfen sowie weiteren Untersuchungen bezüglich der Auflösung von Leichtgasschichtungen und dem Turbulenzverhalten. Zur Auswaschung von Aerosolpartikeln mithilfe von Spray aus einer Gasatmosphäre ist in der kerntechnisch relevanten Literatur, speziell im Bereich der CFD Simulationsmethoden, sehr wenig veröffentlicht. Marchand et al. [63] haben ein numerisches Modell entwickelt, dass verschiedene Auswaschmechanismen wie Interzeptions-, Impaktions- und Diffusionsabscheidung eines Sprays berücksichtigt. Die genannten Mechanismen sind über empirische Korrelationen in den Accident Source Term Evaluation Code (ASTEC) implementiert. Die Validierung erfolgt mit einem TOSQAN Experiment, bei dem ein Spray in eine Aerosolatmosphäre eingebracht wird und sich der Anteil an Partikeln in der Atmosphäre durch Auswaschung reduziert. Die Partikel, die im Experiment verwendet werden, bestehen aus Siliziumcarbid mit einem Durchmesser von ungefähr $1\ \mu\text{m}$. Trotz der Modellierung von verschiedenen Auswaschmechanismen ist es mit LP Codes nicht möglich, das Strömungsfeld von Partikeln und Tropfen zu verfolgen, da diese Bereiche mit dem verwendeten Ansatz nicht aufgelöst werden können.

In einer Arbeit von Stewering et al. [80] wird mithilfe des kommerziellen CFD Programms ANSYS CFX das Absetzverhalten von Aerosolpartikeln in einer Gasatmosphäre untersucht. Beim verwendeten Experiment KAEVER 100A setzen sich Partikel aus CsI aus der Atmosphäre ab. Diesen Absetzvorgang untersuchen die Autoren numerisch mit dem Algebraic Slip Modell [62], welches in ANSYS CFX implementiert ist. Die Ergebnisse zeigen eine gute Übereinstimmung von Experiment und Simulation. Desweiteren untersuchen die Autoren in der Arbeit die Anwendbarkeit des Algebraic Slip Modells auf starke Umlenkungen eines partikelbeladenen Gasstroms in einem Impaktor. Hier zeigt sich, dass bei starken Umlenkungen die Partikel über eine eigene Phase und damit verbunden mit einem eigenen Geschwindigkeitsfeld beschrieben werden müssen, um eine gute Übereinstimmung zu erreichen.

Die vorgestellten numerischen Arbeiten untersuchen wichtige thermohydraulische Fra-

gestellungen in Modellsicherheitsbehältern. Die Anwendung von CFD Methoden mit ihrer detaillierten Auflösung auf einen vollständigen Sicherheitsbehälter einer realen kerntechnischen Anlage ist sehr komplex und sehr rechenintensiv. Kim et al. [48] untersuchen mit dem CFD Code GASFLOW den Einfluss eines Spraysystems auf die Zündfähigkeit eines Wasserstoff-Luft Gemischs im APR-1400 südkoreanischer Bauart. Zur Modellierung des Spray-Gasgemischs verwenden sie ein vereinfachtes mechanisches Gleichgewichtsmodell, welches dasselbe Geschwindigkeitsfeld für Tropfen und Gas annimmt. Trotz sehr starker Vereinfachungen lassen sich mit dem numerischen Modell kritische Bereiche mit einer erhöhten Zündfähigkeit lokalisieren.

Ding et al. [20] untersuchen in ihrer Arbeit den Einfluss einer Kombination aus einem Spraysystem und einem passiven Nachwärmeabfuhrsystem (Zwangskonvektion an der Außenseite des Sicherheitsbehälters) auf das Abkühlverhalten der Gasatmosphäre in einem realen Sicherheitsbehälter eines Kernkraftwerks. Die Simulation ist mit dem CFD Code GASFLOW unter Verwendung eines Euler-Lagrange Ansatzes und der Implementierung von Massen-, Impuls- und Energieaustausch zwischen den Phasen durchgeführt worden. Um den Simulationsaufwand zu reduzieren, ist das Integrationsgebiet auf ein rotationssymmetrisches 30° Stück beschränkt und über periodische Randbedingungen auf den ganzen Sicherheitsbehälter skaliert. Mit den durchgeführten Simulationen können die Autoren die Wirksamkeit von Spray und passiver Nachwärmeabfuhr für jeden Einzelmechanismus und in einer kombinierten Studie zeigen.

1.3 Ziel der Arbeit

Genauere Kenntnisse über thermohydraulische Vorgänge sind essentiell für die Beurteilung und die Entwicklung von geeigneten Sicherheitsmechanismen in kerntechnischen Anlagen. Zur numerischen Beurteilung werden neben LP Codes auch zunehmend CFD Methoden verwendet. Der Vorteil der CFD Methoden liegt dabei in einer wesentlich detaillierteren Auflösung der Strömungsphänomene. Neben spezialisierten CFD Codes stehen dabei auch kommerzielle Codes wie ANSYS CFX zur Verfügung, sogenannte Mehrzweckcodes. Diese sind technisch sehr breit anwendbar und haben für technisch gängige Strömungsprobleme (z.B. Rohrströmungen, Turbulenzmodellierung) geeignete physikalische Modelle standardmäßig implementiert. Um physikalische Effekte einer Spezialanwendung in einem kommerziellen CFD Code zu betrachten, bedarf es der Entwicklung geeigneter Modelle und deren Implementierung in den Code. Solche physikalischen Modelle werden im Rahmen dieser Arbeit für die Spraykühlung und das Auswaschen von Aerosolpartikeln aus einer Gasatmosphäre entwickelt, um ein vertieftes Verständnis für den Einfluss von Sprayanwendungen auf das thermohydraulische Verhalten in Kernkraftwerken zu bekommen.

Ziel der Arbeit ist es, die komplexen Vorgänge bei der Gaskühlung und der Aerosolpartikelwaschung durch ein Spray zu untersuchen und dafür geeignete physikalische Mo-

delle zur Verfügung zu stellen. Die Modelle werden im Rahmen dieser Arbeit in das kommerzielle CFD Programmpaket ANSYS CFX 16.1 implementiert. Der Schwerpunkt der Modellierung liegt dabei zum einen auf dem Wärme- und Stoffaustausch zwischen Tropfen und Gas während der Kühlung durch Spray und zum anderen auf dem mechanischen Auswaschprozess von Partikeln aus einem Aerosol durch Wassertropfen. Im Einzelnen wird das entwickelte Spraykühlungsmodell, welches auf einem Euler-Euler Zwei-Fluid Ansatz beruht, in einer einfachen Kanalströmung auf seine physikalische Richtigkeit untersucht. Dazu werden zwei genau definierte Luftmassenströme mit und ohne Flüssigkeitsanteil gemischt und der Phasenaustausch anhand des Mollier-Diagramms beurteilt. Das verifizierte Modell wird anschließend in Simulationen mit dem Sprayexperiment HD-31-SE, welches in THAI durchgeführt wurde, verglichen. Im Experiment wird dazu ein kaltes Wasserspray in eine heiße Gasatmosphäre eingesprüht. Die Gasatmosphäre besteht dabei aus einem Gemisch aus einem kondensierbaren Gas in Form von Wasserdampf und nicht kondensierbarer Umgebungsluft. Der Sprühvorgang führt zu einer Reduzierung der Gastemperatur und des Behälterdrucks und geht mit einem Kondensationsprozess von Wasserdampf auf kalten Tropfen einher. Die im Stand der Wissenschaft und Technik vorgestellten Arbeiten berücksichtigen bei der Modellierung von Spray vereinfacht immer einen monodispersen Tropfendurchmesser für alle beteiligten Tropfen, was gegenüber der Realität eine starke Vereinfachung darstellt. Das vorliegende Modell ist so gewählt, dass auch verschiedene Tropfengrößen in einer einzelnen Simulation über einen polydispersen Ansatz berücksichtigt werden können. Die Erweiterung des Modells ermöglicht eine genaue Untersuchung von einzelnen Tropfengrößen bezüglich ihres Strömungsverhaltens, der Wärmeaufnahme und damit Temperaturänderung und die verschiedenen groß ausgeprägten Kondensationsgebiete, die mit unterschiedlichen Tropfengrößen einhergehen.

Das Modell zur Auswaschung von Partikeln durch Spray basiert, wie das bereits erwähnte Spraykühlungsmodell, auf einem Euler-Euler Zwei-Fluid Ansatz. Um das Modell auf seine Plausibilität hin zu überprüfen, wird zuerst eine einfache Kanalströmung simuliert. Im zugrunde liegenden Experiment wird ein partikelbeladener Gasstrom durch ein im Gegenstrom angeordnetes Wasserspray ausgewaschen. Ein Vergleich von Simulation und Experiment zeigt, dass das Modell für den angewendeten Bereich physikalisch arbeitet. Anschließend folgt ein Vergleich von Experiment und Simulation für AW 4. Dieses Experiment wurde in THAI durchgeführt. In AW 4 wird ein Wasserspray in eine partikelbeladene THAI Gasatmosphäre eingesprüht und der abnehmende Partikelgehalt im Modellbehälter gemessen. Die partikelbeladene Atmosphäre besteht aus CsI Partikeln und Umgebungsluft. Im Vergleich zu den im Stand der Wissenschaft und Technik vorgestellten Arbeiten ist die vorliegende Arbeit die Erste, die das Auswaschverhalten von Partikeln durch Spray mit CFD untersucht. Das Auswaschmodell wird zuerst in einer Simulation von AW 4 angewendet, in der alle Tropfen und Partikel jeweils monodispers berücksichtigt sind. In Erweiterungen wird der Einfluss der monodispersen Annahme durch die Implementierung von Tropfen- sowie Partikelspektren auf die Übereinstimmung mit AW 4 untersucht. Das Modell ist in der Lage, die Partikelaufnahme und den

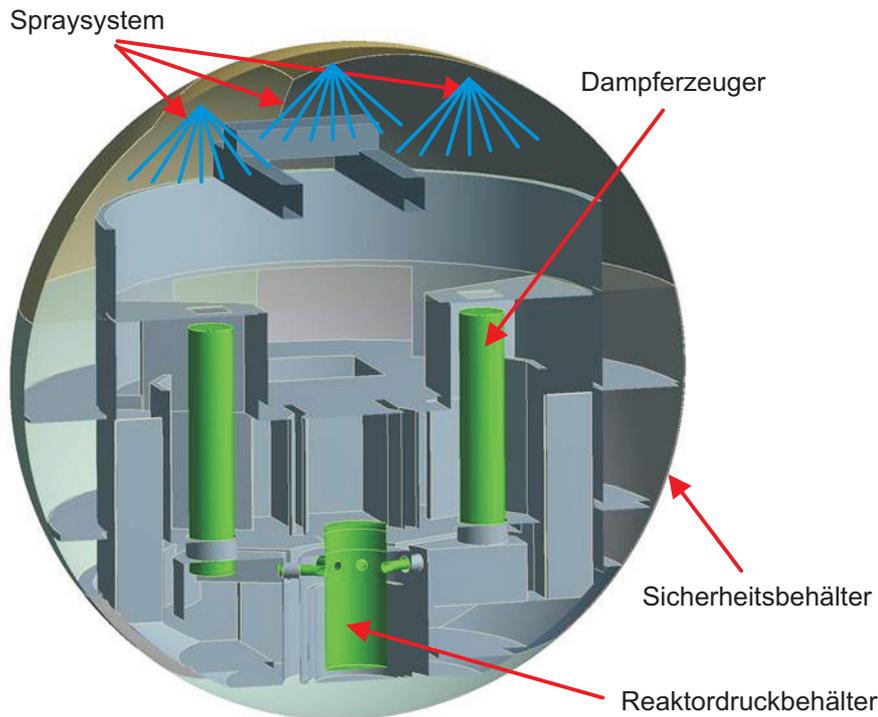


Abbildung 1.6: Generisches Modell einer KONVOI Anlage mit schematischem Spraysystem

Transport mit dem Tropfen zu beschreiben, was zukünftig die Vorhersage von Ablagerungspositionen der Partikel im Sicherheitsbehälter ermöglicht.

In einer abschließenden Simulation werden beide Modelle in einer Simulation kombiniert. Dazu wird ein generisches Geometriemodell einer KONVOI Anlage verwendet, siehe Abb. 1.6. Dieses Modell besitzt die realen Kraftwerksabmessungen und wird um ein fiktives Spraysystem mit mehreren Düsen in Ringanordnung im oberen Sicherheitsbehälterbereich ergänzt. In der Simulation wird die Anwendung von Spraykühlung und Partikelauswaschung in einer realen Geometrieabmessung unter Verwendung von CFD Methoden für einen fiktiven Störfall gezeigt. Im Vergleich zu bisherigen Arbeiten in der Literatur berücksichtigt die Kombination mehrere Geschwindigkeitsfelder von Tropfen, Gas und Partikel. Durch die Kombination beider Modelle in einer Simulation ist es möglich, durch das Spray bedingte Vermischungsvorgänge in der Gasatmosphäre und das Auswaschpotential samt Gaskühlung in einer realen Dimension zu untersuchen.

Um den Einfluss von periodischen Randbedingungen ausschließen zu können, werden die Vergleichsrechnungen von Experiment und Simulation in einem kompletten dreidimensionalen Strömungsvolumen des THAI durchgeführt. Die sehr detaillierte Auflösung

des Strömungsfelds mit mehreren Millionen Volumenelementen und die Berücksichtigung von zahlreichen Geschwindigkeitsfeldern der unterschiedlichen Phasen (Gas, Tropfen und Partikel) in den Simulationen, benötigten ein sehr leistungsstarkes Rechnersystem. Dies gilt ebenso für die Simulation des KONVOI Kraftwerksmodells. Zur Durchführung der ressourcenintensiven Simulationen wird der Supercomputer CRAY XC40 (Hazel Hen) des HLRS verwendet.

2 Grundlagen und Modellentwicklung

In diesem Kapitel werden die Grundlagen der durchgeführten CFD Simulationen beschrieben. Ausgehend vom Zwei-Fluid Ansatz, welcher mit seinen grundlegenden Gleichungen und Annahmen beschrieben wird, wird auf die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Modelle eingegangen. Dazu gehört die Modellierung der Wasserspraytropfen, sowie die Modelle für Spraykühlung und das Auswaschen von Aerosolpartikeln aus einer Gasatmosphäre.

2.1 Zwei-Fluid Modell

Der grundlegende Ansatz der vorliegenden Simulationen basiert auf dem Euler-Euler Zwei-Fluid Modell, welches erstmals von Ishii [36], [35] beschrieben wurde. Das Zwei-Fluid Modell berücksichtigt jeden Aggregatzustand in einer eigenen Phase. Als Phase wird im konkreten Fall Wasser in Tropfenform und das Gas einer Behälteratmosphäre bezeichnet. Beide Phasen durchdringen sich vollständig im Strömungsvolumen. Um den Anteil einer Phase k in einer Gesamtströmung zu bestimmen, wird der volumetrische Phasengehalt α definiert. α lässt sich durch

$$\alpha_k = \frac{V_k}{V_{ges}} \quad (2.1)$$

berechnen. V_k ist dabei das Volumen der Phase k . k ist der Phasenindex und unterscheidet in dieser Arbeit zwischen L (Engl.: Liquid, für Tropfen) und G (Engl.: Gas, für Gasatmosphäre). V_{ges} ist dabei das Gesamtvolumen des Strömungsraums, das durch V_L und V_G ausgefüllt ist. Das Zwei-Fluid Modell berechnet im kompletten Strömungsgebiet für jede Phase einen volumetrischen Phasengehalt. In der Theorie liegt der volumetrische Phasengehalt zwischen dem Minimum mit dem Wert 0 (betrachtete Phase ist nicht vorhanden) und dem Maximum mit Wert 1 (nur die betrachtete Phase ist vorhanden). In der Numerik ist ein Wert 0 jedoch nicht praktikabel, da unter anderem durch den Phasengehalt dividiert wird. Im verwendeten Strömungslöser ANSYS CFX bewegt sich der Wert des Phasengehalts zwischen 1 und 10^{-15} , um eine Division durch 0 zu vermeiden. Der volumetrische minimale Phasengehalt in der Numerik ist für das jeweilige Strömungsproblem zwingend zu evaluieren. Die kontinuierliche Gasatmosphäre ist als Mischung aus nichtkondensierbarer Luft und kondensierbarem Wasserdampf berücksichtigt. Diese Mischung wird als feuchte Luft bezeichnet. Die Luft wird mit einer vereinfachten Zu-

sammensetzung aus 79 % Stickstoff und 21 % Sauerstoff angenommen. Tropfen werden, wenn nicht weiter spezifiziert, als reines Wasser modelliert.

Im Folgenden werden die Grundgleichungen des Zwei-Fluid Modells für Massen-, Impuls- und Energieerhaltung erläutert. Jede berücksichtigte Phase besitzt einen kompletten Satz der genannten Erhaltungsgleichungen. Die Massenerhaltung für eine beliebige Phase k kann durch

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \left(\alpha_k \rho_k \vec{u}^k \right) = \Gamma_k \quad (2.2)$$

beschrieben werden. In Gl. (2.2) steht ρ_k für die phasengemittelte Dichte, \vec{u}^k für den phasengemittelten Geschwindigkeitsvektor und Γ_k für den Quell- bzw. Senkterme der Masse in Phase k . t repräsentiert die Zeit. Da die Gasphase als eine Mischung betrachtet wird, müssen Erhaltungsgleichungen für die Massenanteile der jeweiligen Phase am Gesamtgasstrom berechnet werden. Dies wird mit folgenden Gleichungen erreicht

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\alpha_G \rho_G c_{Air}^G \right) + \nabla \left(\alpha_G \rho_G c_{Air}^G \vec{u}^G \right) + \nabla \left(\alpha_G \rho_G (D_{Air} + D_T) \nabla c_{Air}^G \right) = 0 \quad , \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\alpha_G \rho_G c_{Vapor}^G \right) \\ & + \nabla \left(\alpha_G \rho_G c_{Vapor}^G \vec{u}^G \right) + \nabla \left(\alpha_G \rho_G (D_{Vapor} + D_T) \nabla c_{Vapor}^G \right) = \Gamma_G \quad . \quad (2.4) \end{aligned}$$

In Gl. (2.3) und Gl. (2.4) repräsentieren c_{Air}^G und c_{Vapor}^G den Massenanteil von Luft und Wasserdampf im Gemisch, D_{Air} und D_{Vapor} die binären molekularen Diffusionskoeffizienten der beiden Gaskomponenten und D_T stellt die turbulente Diffusion dar. Durch die sehr starke Verwirbelung der Gasphase aufgrund des Sprayeintrags nimmt D_T gegenüber den binären molekularen Diffusionskoeffizienten eine dominierende Stellung ein. Der Quell- bzw. Senkterme Γ_G wird hier der Erhaltungsgleichung für das kondensierbare Gas zugeschlagen, da Kondensation und Verdampfung berücksichtigt werden.

Die Erhaltung des Impulses wird über folgende Gleichung berechnet

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \left(\alpha_k \rho_k \vec{u}_m^k \right)}{\partial t} + \nabla \left(\alpha_k \rho_k \vec{u}^k \vec{u}_m^k \right) \\ & = -\alpha_k \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_m} + \nabla \left[\alpha_k \left(\underline{\tau}^k + \underline{\tau}^{Re,k} \right) \right]_m \\ & \quad + \vec{u}_m^k \Gamma_k + \alpha_k \rho_k g_m + M_{k,m} \quad . \quad (2.5) \end{aligned}$$

In Gl. (2.5) ist \bar{p} der Absolutdruck. Er wird für beide Phasen vereinfacht gleich angenommen, deshalb gibt es keine Unterscheidung des Drucks für die einzelnen Phasen.

Durch diese Annahme werden Effekte vernachlässigt, welche an der Phasengrenzfläche durch Druckgradienten auftreten können. $\underline{\underline{\tau}}^k$ und $\underline{\underline{\tau}}^{Re,k}$ repräsentieren die phasengemittelten molekularen Scherspannungen und die turbulenten Reynoldsspannungen der Strömung für die Phase k . g_m steht für die Erdbeschleunigung und $M_{k,m}$ beschreibt den Quell- und Senkenterm des Impulses. m steht für die dreidimensionalen Raumrichtungen in x, y und z-Richtung. Die Energieerhaltung in den Phasen wird über die Gleichung

$$\frac{\partial (\alpha_k \rho_k \bar{h}^k)}{\partial t} + \nabla (\alpha_k \rho_k \bar{u}^k \bar{h}^k) = \nabla [\alpha_k (\bar{q}^k + \bar{q}^{Re,k})] + \bar{h}^k \Gamma_k + E_k \quad (2.6)$$

berücksichtigt. In Gl. (2.6) beschreibt \bar{h}^k die phasengemittelte Enthalpie, \bar{q}^k und $\bar{q}^{Re,k}$ die phasengemittelten molekularen und turbulenten Wärmeströme und E_k den Quell- bzw. Senkenterm der Energie.

Beim Zwei-Fluid Modell werden Interaktionen zweier verschiedener Phasen aufgelöst, daher müssen bestimmte Nebenbedingungen während der Gleichungslösung eingehalten werden. Dazu gehört, dass die Summe aller volumetrischen Phasengehalte α_k gleich eins ist

$$\alpha_L + \alpha_G = 1 \quad . \quad (2.7)$$

Außerdem muss gewährleistet sein, dass sich die Summe aller Quell- und Senkenterme in den Erhaltungsgleichungen zu null ausgleichen

$$\Gamma_L + \Gamma_G = 0 \quad (2.8)$$

$$E_G + E_L = 0 \quad (2.9)$$

$$M_{G,m} + M_{L,m} = 0 \quad . \quad (2.10)$$

Die turbulenten Terme der Gasphase, $\underline{\underline{\tau}}^{Re,G}$ und $\bar{q}^{Re,G}$, werden durch das Shear Stress Turbulenzmodell (SST) nach Menter [64] modelliert.

2.2 Tropfenmodellierung

Die Flüssigkeitsphase wird in Form von Tropfenkugeln modelliert. Die Modellierung sieht vor, dass die Phasengrenzfläche A_{LG} , welche die Flüssigkeit vom Gas abgrenzt, in Kugelform beschrieben wird. Sie kann mit folgender Gleichung definiert werden

$$A_{LG} = n \cdot \pi \cdot d_L^2 \quad . \quad (2.11)$$

A_{LG} in Gl. (2.11) ist abhängig von der Anzahldichte n der Tropfen und dem Tropfendurchmesser d_L . n beschreibt die Anzahl der Tropfen je Kubikmeter der Strömung und kann wiederum aus α_L und d_L berechnet werden

$$n = \frac{6 \cdot \alpha_k}{\pi \cdot d_L} \quad . \quad (2.12)$$

Um Gl. (2.12) zu lösen, muss d_L bestimmt werden. In der vorliegenden Arbeit wird angenommen, dass sich bereits Tropfen mit einem konstanten Durchmesser im Strömungsfeld gebildet haben, da Nukleationsvorgänge vernachlässigt werden und auch der Zerfall bzw. die Zusammenlagerung von mehreren kleinen Tropfen zu einem großen Tropfen nicht berücksichtigt wird. Diese Annahmen sind im Bereich der Sicherheitsforschung in der Kernenergie allgemein üblich, siehe [87], [66]. Da sich z.B. bei Kondensation von Wasserdampf aus der Gasatmosphäre zusätzliche Wassermassen in die flüssige Phase bewegen, d_L der Wassertropfen aber konstant bleibt, wird die Erhöhung der Wassermasse durch eine Steigerung von n berücksichtigt. Kurz gefasst bedeutet dies, dass ein Kondensationsvorgang in der vorliegenden Modellierung nicht zu einem Tropfenwachstum führt, sondern die Anzahl der Tropfen mit konstantem Durchmesser ansteigt. Da die Tropfenphase in der Regel im Integrationsgebiet einen sehr kleinen volumetrischen Phasengehalt besitzt und eine Tropfen-Tropfen Interaktion vernachlässigt wird, kann sich auch keine Turbulenz zwischen den einzelnen Tropfen ausbilden. Die Strömung der Tropfen wird laminar angenommen.

Bei der Interaktion von Tropfen und Gas werden zwei physikalische Effekte berücksichtigt, zum einen die Widerstandskraft $M_{k,m}^D$ und zum anderen die turbulente Dispersionskraft $M_{k,m}^{TD}$. Der Quell- bzw. Senkenterm der Phasen in der Impulsgleichung setzt sich aus beiden Kräften zusammen

$$M_{G,m} = M_{G,m}^D + M_{G,m}^{TD} = -M_{L,m} \quad . \quad (2.13)$$

Die Widerstandskraft kann unter Berücksichtigung der Korrelation für den Widerstandskoeffizienten c_D für eine umströmte Kugel nach Schiller und Naumann [18] beschrieben werden

$$M_{G,m}^D = -M_{L,m}^D = \alpha_L \cdot \frac{3\rho_G}{4d_L} \cdot c_D \cdot |\vec{u}^L - \vec{u}^G| \left(\vec{u}^L - \vec{u}^G \right) \quad (2.14)$$

mit

$$c_D = \frac{24}{Re} \cdot \left(1 + 0,15 \cdot Re^{0,687} \right) \quad . \quad (2.15)$$

Die Definition der Reynoldszahl Re berücksichtigt die Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen- und Gasphase und ist folgendermaßen definiert

$$Re = \frac{\rho_G \cdot |\vec{u}^L - \vec{u}^G| \cdot d_L}{\mu_G} \quad . \quad (2.16)$$

μ_G beschreibt die dynamische Viskosität der Gasphase. Die in Gl. (2.15) eingeführte Definition des Widerstandskoeffizienten c_D ist bis zu einer relativen Reynoldszahl Re von 800 realistisch. Zusätzlich zur Widerstandskraft können Tropfen durch turbulente Wirbel der Gasphase beeinflusst werden. Die Ablenkung wird durch die turbulente Dispersionskraft beschrieben. Burns et al. [16] modellieren die Dispersionskraft durch einen Favre gemittelten Ansatz

$$M_{G,m}^{TD} = -M_{L,m}^{TD} = C_{TD} \cdot c_D \cdot \frac{\mu_T}{Pr_T} \cdot \left(\frac{\nabla \alpha_L}{\alpha_L} - \frac{\nabla \alpha_G}{\alpha_G} \right) \quad . \quad (2.17)$$

C_{TD} ist ein Modellparameter, mit dem der Einfluss der Kraft auf die Strömung eingestellt werden kann. In vorliegender Arbeit wird er für alle Simulationen zu eins gesetzt. Die turbulente Viskosität wird durch μ_T beschrieben und durch das SST Turbulenzmodell berechnet. Die turbulente Prandtlzahl Pr_T geht mit einem konstanten Wert von 0,9 ein.

2.3 Modellierung der Spraykühlung

Basis für das im Folgenden vorgestellte Spraykühlungsmodell sind die Veröffentlichungen von Kaltenbach und Laurien [38], [37] und [41]. Das in diesem Abschnitt beschriebene Spraykühlungsmodell ist eine Zusammenfassung der angegebenen Literatur.

2.3.1 Phänomenologische Beschreibung

Beim Wärme- und Stofftransport zwischen Tropfen und feuchter Luft handelt es sich um einen komplexen physikalischen Vorgang. Abhängig von den Atmosphärenbedingungen und der Einspritztemperatur des Wassersprays in diese Atmosphäre, stellt sich Kondensation von Wasserdampf auf kalten Tropfen ein oder Tropfen verdampfen. Im entwickelten Modell wird angenommen, dass es innerhalb der Tropfen von der Oberfläche zum Zentrum keine Temperaturgradienten gibt, da die größten Tropfen einen Durchmesser von ungefähr 1 mm haben. In einer Gasatmosphäre aus reinem Wasserdampf kann der Sättigungsdruck p_{sat} und die Sättigungstemperatur T_{sat} mithilfe der Antoine-Gleichung [72] bestimmt werden

$$p_{sat} = 10^{5,116 - \frac{1687,537}{T_{sat} + 230,17}} \quad . \quad (2.18)$$

Bei Gl. (2.18) handelt es sich um eine Zahlenwertgleichung, die neben p_{sat} und T_{sat} verschiedene Koeffizienten für die Anwendung bei Wasserdampf enthält. Die Gleichung ist nur gültig, wenn T_{sat} in °C und p_{sat} in bar eingesetzt werden. Gl. (2.18) kann durch eine Modifikation zudem in feuchter Luft angewendet werden. Dazu muss der absolute Sättigungsdruck aus einem Reinstoffsystem durch den Partialdruck des kondensierbaren Wasserdampfs in feuchter Luft $p_{Vapor,sat}$ ersetzt werden. $p_{Vapor,sat}$ ist definiert durch

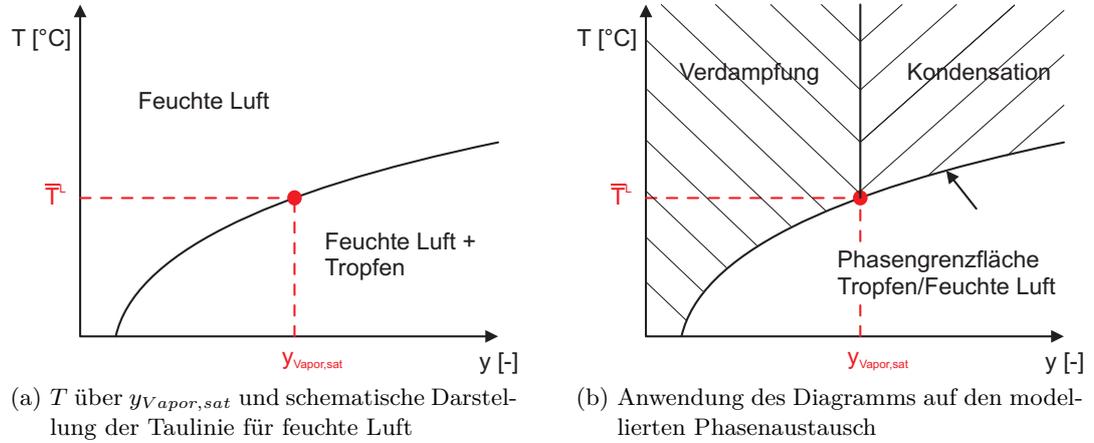


Abbildung 2.1: Tauliniendiagramm a) und dessen Anwendung im Spraykühlungsmodell b)

$$p y_{\text{Vapor,sat}} = y_{\text{Vapor,sat}} \cdot \bar{p} \quad , \quad (2.19)$$

wobei $y_{\text{Vapor,sat}}$ den Molenbruch des Wasserdampfs und \bar{p} den Gesamtdruck der feuchten Luft beschreiben. Wenn Gl. (2.19) in Gl. (2.18) eingesetzt wird, ergibt sich umgeformt nach $y_{\text{Vapor,sat}}$ folgende Gleichung

$$y_{\text{Vapor,sat}} = \frac{10^{5,116 - \frac{1687,537}{\bar{T}^L + 230,17}}}{\bar{p}} \quad . \quad (2.20)$$

Gl. (2.20) beschreibt den Sättigungszustand zu jeder Tropfentemperatur \bar{T}^L . An der Phasengrenzfläche, der Berührstelle von feuchter Luft und Wassertropfen, wird ein thermisches Gleichgewicht zwischen der Gastemperatur \bar{T}^G und der Tropfentemperatur \bar{T}^L angenommen. Durch diese Annahme ist es möglich, die Tropfentemperatur \bar{T}^L in Gl. (2.20) zu verwenden. Mithilfe von Gl. (2.20) kann die Taulinie der feuchten Luft bei gegebenem Absolutdruck berechnet werden. Die Taulinie beschreibt genau den Sättigungszustand von Wasserdampf in feuchter Luft und trennt somit das einphasige (feuchte Luft) vom zweiphasigen Gebiet (feuchte Luft + Tropfen), siehe Abb. 2.1 a). Abb. 2.1 b) zeigt die Anwendung des Tauliniendiagramms im Spraykühlungsmodell. Der Bereich oberhalb der Taulinie beschreibt feuchte Luft ohne Tropfen, die Taulinie hingegen beschreibt die Phasengrenzfläche, an der sich feuchte Luft und Tropfen berühren. Gl. (2.20) wird benutzt, um den $y_{\text{Vapor,sat}}$ des Wasserdampfs an der Phasengrenzfläche zu berechnen. Der Bereich unterhalb der Taulinie wird im Folgenden im Modell nicht weiter berücksichtigt.

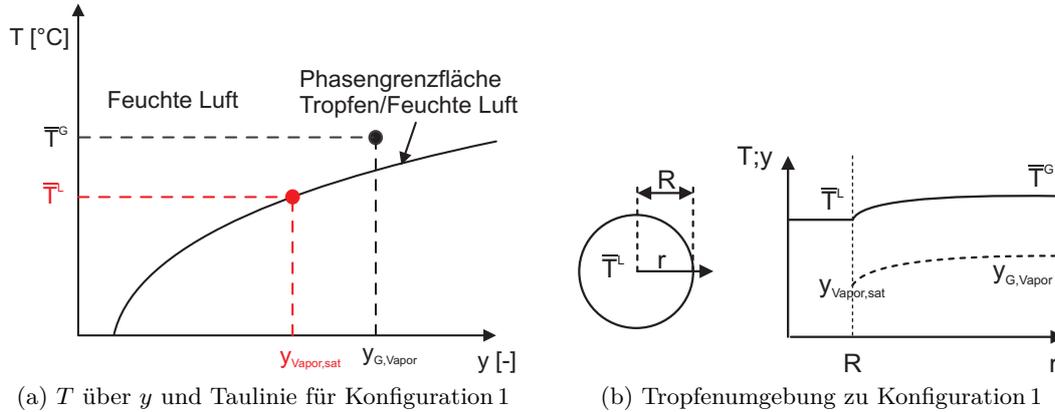


Abbildung 2.2: Grafische Darstellung von Konfiguration 1 im Tauliniendiagramm und in der Tropfenumgebung

Ausgehend vom betrachteten Punkt mit \bar{T}^L und $y_{Vapor,sat}$ auf der Taulinie in Abb. 2.1 b) (roter Punkt), kann die Fläche oberhalb der Taulinie (schraffierter Bereich) in zwei Bereiche aufgeteilt werden. Im Bereich links des Bezugspunkts kommt es zur Verdampfung der Tropfen, im Bereich rechts davon kommt es zur Kondensation von Wasserdampf. Nimmt man eine Konfiguration von feuchter Luft an, welche links vom Bezugspunkt liegt, dann ist dort der molare Anteil von Wasserdampf in feuchter Luft $y_{G,Vapor}$ weit entfernt von der Phasengrenzfläche geringer als der Anteil direkt auf der Phasengrenzfläche $y_{Vapor,sat}$. Das führt dazu, dass sich ein Ungleichgewicht zwischen den Wasserdampfanteilen einstellt und ein Wasserdampftransport vom Tropfen zur feuchten Luft durch Verdampfung verursacht wird. Tritt Kondensation ein, ist $y_{G,Vapor}$ in der feuchten Luft höher als an der Phasengrenzfläche $y_{Vapor,sat}$. Es stellt sich ein Transport von Wasserdampf aus übersättigter feuchter Luft zum Tropfen hin ein. Dies führt zu einem Kondensatniederschlag auf der Phasengrenzfläche. Um das Modell mit Wärme- und Stofftransport näher zu erläutern, werden drei verschiedene Tropfen/Gas Konfigurationen unterschieden und im Folgenden erklärt.

Konfiguration 1 (Kondensation)

Kondensation durch Spray tritt ein, wenn $y_{Vapor,sat}$ kleiner ist als $y_{G,Vapor}$. Abb. 2.2 a) zeigt das dazugehörige Tauliniendiagramm während Abb. 2.2 b) den Kondensationsfall in der Nähe eines Einzeltropfens darstellt. Die Variable r hat ihren Ursprung im Zentrum des Tropfens und beschreibt den Abstand zur Tropfenmitte. Ist $r = R$, so handelt es sich um die Phasengrenzfläche zwischen Tropfen und feuchter Luft. Bei $r > R$ wird der Bereich außerhalb des Tropfens dargestellt.

Die Temperatur des Tropfens \bar{T}^L ist geringer als die Temperatur in feuchter Luft \bar{T}^G ,

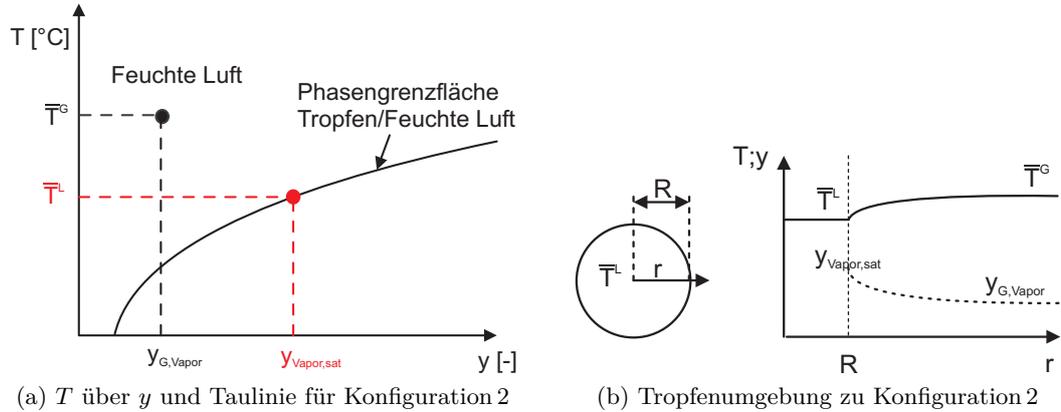


Abbildung 2.3: Grafische Darstellung von Konfiguration 2 im Tauliniendiagramm und in der Tropfenumgebung

$y_{G,Vapor}$ ist durch die Zusammensetzung der feuchten Gasatmosphäre bekannt. Feuchte Luft wird an der Phasengrenzfläche bis auf die Tropfentemperatur abgekühlt, sodass vereinfacht an der Phasengrenzfläche $\bar{T}^L = \bar{T}^G$ angenommen werden kann. Aufgrund der immer geringeren Wasserdampfaufnahmefähigkeit der feuchten Luft durch Verringerung von \bar{T}^G beginnt Wasserdampf an den Spraytropfen auszukondensieren. Tropfen werden zum einen durch einen konvektiven Wärmestrom aus der feuchten Luft erwärmt und zum anderen wird während des Kondensationsvorgangs latente Wärme frei, die den kälteren Tropfen zusätzlich erwärmt. Nach einer ausreichend langen Zeit strebt das Gesamtsystem einer Sättigung entgegen, sodass $y_{Vapor,sat}$ und $y_{G,Vapor}$ im Gleichgewicht stehen und der Massenaustausch beendet wird.

Konfiguration 2 (Verdampfung)

Weit entfernt vom Tropfen ist bei dieser Konfiguration $y_{G,Vapor}$ geringer als $y_{Vapor,sat}$ und $\bar{T}^G > \bar{T}^L$, siehe Abb.2.3 a) und b). In diesem Fall verdampfen Tropfen, da die feuchte Luft nicht gesättigt ist und Wasserdampf aufnehmen kann. Während des Verdampfungsprozesses liefert ein konvektiver Wärmestrom von der wärmeren feuchten Luft die Energie, die für den Phasenaustausch benötigt wird. Die Verdampfung der Tropfen verbraucht Energie, dadurch kühlt die Gasatmosphäre ab.

Konfiguration 3 (Verdampfung)

Verdampfung kann zudem stattfinden, wenn eingesprühte Tropfen wärmer sind als die sie umgebende feuchte Luft $\bar{T}^L > \bar{T}^G$. Grundsätzliche Voraussetzung für die Verdampfung von Tropfen ist eine geringere Wasserdampfkonzentration in feuchter Luft $y_{G,Vapor}$

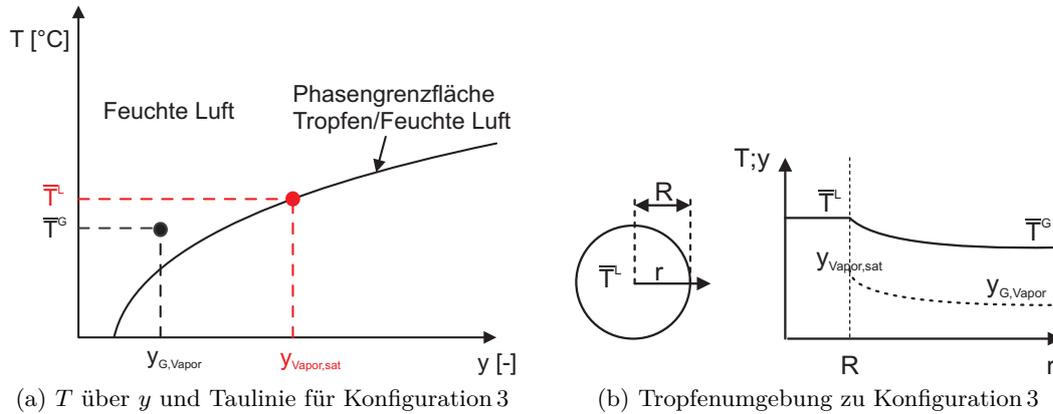


Abbildung 2.4: Grafische Darstellung von Konfiguration 3 im Tauliniendiagramm und in der Tropfenumgebung

als an der Phasengrenzfläche $y_{Vapor,sat}$. Abb. 2.4 a) und b) zeigen die Konfiguration im Tauliniendiagramm und in Tropfennähe. Heiße Tropfen geben während des Verdampfungsvorgangs Wärme ab und treiben ihn somit an. Durch Abgabe von Wärme kühlen Tropfen ab, während sich die Gasphase erwärmt.

Die Ausführungen in diesem Abschnitt vernachlässigen eine Konfiguration, in der bereits kleine Tropfen als Nebel in der feuchten Luft vorhanden sind bevor Wasser eingesprüht wird. Kondensation aus übersättigter feuchter Luft wird Volumen Kondensation genannt und wurde von Zhang und Laurien [87] unter Anwendung des Zwei-Fluid Modells modelliert. Im vorliegenden Spraykühlungsmodell wird neben dem Molenbruch des Wasserdampfs auch die Temperatur um den Tropfen berücksichtigt. Durch die Verwendung mehrerer Parameter lässt sich genau differenzieren, welcher Mechanismus beim Phasenaustausch vorliegt. Wird z.B. Konfiguration 1 mit 2 verglichen, stellt sich trotz gleichem Temperaturgradienten zwischen Tropfen und feuchter Luft einmal Kondensation und einmal Verdampfung ein.

2.3.2 Mathematische Beschreibung

Um den von Spray ausgelösten Kühlungsprozess in ANSYS CFX simulieren zu können, muss der Phasenaustausch über Quellterme für Γ_k und E_k modelliert werden. Im Folgenden werden die phänomenologischen Erklärungen aus Abschnitt 2.3.1 in mathematische Beziehungen gefasst. Γ_k basiert auf einem Ungleichgewicht des Dampfmassenanteils an der Phasengrenzfläche $c_{Vapor,sat}$ und des Dampfmassenanteils in der feuchten Luft $c_{G,Vapor}$. Die Berechnung von $c_{G,Vapor}$ erfolgt mit Gl. (2.4), $c_{Vapor,sat}$ wird aus dem Molenbruch des Wasserdampfs an der Phasengrenzfläche $y_{Vapor,sat}$ bestimmt. Dazu muss $y_{Vapor,sat}$ mit dem Verhältnis der molaren Massen von Wasserdampf (M_{Vapor}) und feuch-

ter Luft (M_G) multipliziert werden. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} c_{Vapor,sat} &= y_{Vapor,sat} \cdot \frac{M_{Vapor}}{M_G} \\ &= y_{Vapor,sat} \cdot \frac{M_{Vapor}}{y_{Vapor,sat} \cdot M_{Vapor} + (1 - y_{Vapor,sat}) \cdot M_{Air}} \quad . \quad (2.21) \end{aligned}$$

M_G besteht aus M_{Vapor} und Luft (M_{Air}) und den dazugehörigen Molenbrüchen. Der Massenquell- bzw. Senkenterm für die Tropfenphase Γ_L und die Gasphase Γ_G ist definiert durch [50]

$$\Gamma_L = \rho_G \cdot \beta \cdot A_{LG} \cdot (c_{G,Vapor} - c_{Vapor,sat}) = -\Gamma_G \quad . \quad (2.22)$$

In Gl. (2.22) steht β für den Massentransferkoeffizient. Der Massentransferkoeffizient β wird anhand der dimensionslosen Sherwoodzahl Sh unter Verwendung der Ranz-Marshall Korrelation [75] für die Umströmung eines kugelförmigen Tropfens berechnet

$$\beta = \frac{D_{G,Vapor}}{d_L} \cdot Sh \quad \text{mit} \quad (2.23)$$

$$Sh = \left(2 + 0,6 \cdot Re^{\frac{1}{2}} \cdot Sc^{\frac{1}{3}} \right) \quad . \quad (2.24)$$

Die Schmidtzahl Sc ist folgendermaßen definiert

$$Sc = \frac{\mu_G}{\rho_G \cdot D_{G,Vapor}} \quad . \quad (2.25)$$

Tritt Kondensation am Tropfen wie in Abb. 2.2 auf, wird latente Wärme frei, welche aufgrund der niedrigeren Temperatur von der Tropfenphase aufgenommen wird. Der Energiequellterm für die Tropfenphase $E_{L,cond}$ und der Senkenterm für die Gasphase $E_{G,cond}$ sind folgendermaßen definiert

$$E_{L,cond} = \Gamma_L \cdot \Delta h_{LG} \quad , \quad (2.26)$$

$$E_{G,cond} = 0 \quad . \quad (2.27)$$

Δh_{LG} steht für die latente Wärme. Neben dem Austausch latenter Wärme kommt es durch eine hohe Temperaturdifferenz zu einem konvektiven Wärmeübergang zwischen Tropfen und Gas. Der konvektive Wärmestrom für beide Phasen lässt sich beschreiben mit

$$E_{L,HT} = -E_{G,HT} = \alpha_{HT} \cdot \frac{6 \cdot \alpha_L}{d_L} \cdot (\bar{T}^G - \bar{T}^L) \quad . \quad (2.28)$$

In Gl. (2.28) steht α_{HT} für den konvektiven Wärmeübergangskoeffizienten und kann mithilfe der dimensionslosen Wärmeübergangskennzahl Nusselt Nu und der Ranz-Marshall Korrelation [75] beschrieben werden

$$\alpha_{HT} = \frac{\lambda_G}{d_L} \cdot Nu \quad , \quad (2.29)$$

$$Nu = \left(2 + 0,6 \cdot Re^{\frac{1}{2}} \cdot Pr^{\frac{1}{3}} \right) \quad . \quad (2.30)$$

In Gl. (2.29) ist λ_G die Wärmeleitfähigkeit der Gasphase. Anstatt der dimensionslosen Schmidtzahl Sc , wird für die Berechnung des Wärmeübergangs die Prandtlzahl Pr verwendet, a_G repräsentiert dabei die Temperaturleitfähigkeit der Gasphase

$$Pr = \frac{\mu_G}{a_G \cdot \rho_G} \quad . \quad (2.31)$$

Die Quell- und Senkenterme der beiden Phasen setzen sich aus der Summe von konvektivem und latentem Wärmeübergang zusammen

$$E_L = E_{L,cond} + E_{L,HT} \quad , \quad (2.32)$$

$$E_G = E_{G,cond} + E_{G,HT} \quad . \quad (2.33)$$

2.4 Modellierung des PartikelAuswaschvorgangs

Basis für das im Folgenden vorgestellte Modell zur Auswaschung von Aerosolpartikeln sind die Veröffentlichungen von Kaltenbach und Laurien [39], [40]. Das in diesem Abschnitt beschriebene Auswaschmodell ist eine Zusammenfassung der angegebenen Literatur und wird als eigenständiges Modell zum bereits im vorherigen Abschnitt 2.3 eingeführten Spraykühlungsmodell betrachtet.

2.4.1 Phänomenologische Beschreibung

Ein Aerosol ist eine Mischung aus einem gasförmigen Trägerfluid und kleinen, fein verteilten Partikeln. Das physikalische Verhalten eines Aerosolgemischs ist stark abhängig davon, wie Partikel des Aerosols auf Richtungsänderungen des Trägerfluids reagieren, z.B. bei der Umströmung eines Tropfens. Die Folgefähigkeit der Partikel hängt stark vom Dichteverhältnis zwischen Trägergas ρ_G und Partikel ρ_P und dem Verhältnis des Aerosolpartikeldurchmessers d_P und des Durchmessers des umströmten Gegenstands ab, hier z.B. eines Tropfens d_L . Abb. 2.5 a) zeigt Stromlinien eines Trägergases (durchgezogene Linie) und kleinen Partikeln (gestrichelte Linie) um einen Tropfen. Bei der Verwendung kleiner Partikel weisen beide Stromlinien annähernd ein gleiches Verhalten auf, während

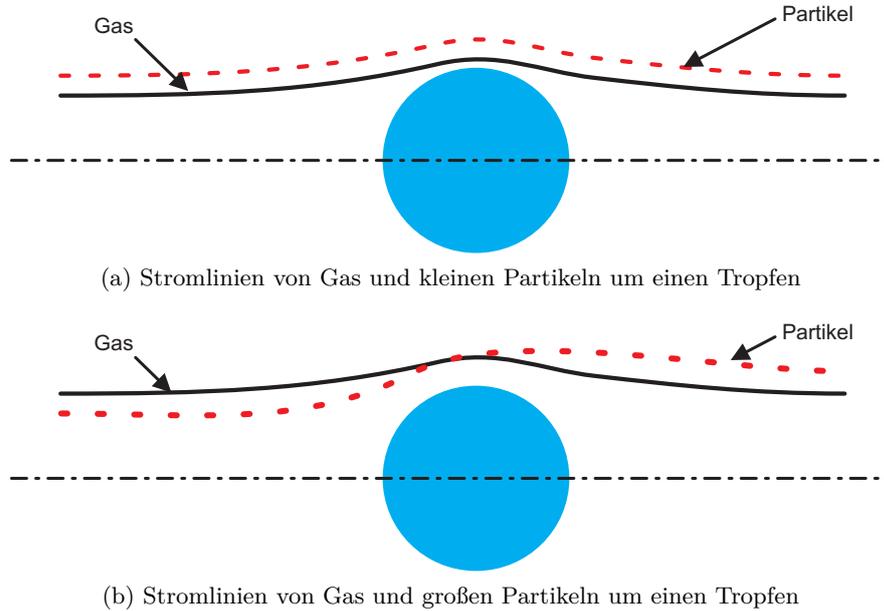


Abbildung 2.5: Stromlinien um einen Tropfen für verschieden große Partikeldurchmesser

bei großen Partikeln eine starke Eigendynamik zu erkennen ist, siehe Abb. 2.5 b). Partikel und Gas bewegen sich auf komplett unterschiedlichen Trajektorien.

Zur Abschätzung, ob ein Partikel annähernd die gleiche Stromlinie verfolgt wie das Trägerfluid, wird die Stokeszahl St verwendet. St ist das Verhältnis der dynamischen Antwortzeit τ_{dyn} von Partikeln auf eine Strömungsänderung des Trägerfluids und einer charakteristischen Zeit τ_G des Trägerfluids. Meist ist dies die Zeit, die das Trägerfluid zur Umströmung des Hindernisses braucht. St kann folgendermaßen beschrieben werden [18]

$$St = \frac{\tau_{dyn}}{\tau_G} = \frac{\rho_P \cdot d_P^2 \cdot \bar{u}^G}{18 \cdot \mu_G \cdot d_L} \quad (2.34)$$

Ist St viel kleiner als Eins, liegt eine sehr gute Übereinstimmung der Stromlinien von Partikel und Trägerfluid vor. Ist St ungefähr Eins, gibt es eine starke Interaktion zwischen Partikeln und Gas. Bei St viel größer als Eins, sind beide Strömungslinien komplett unabhängig voneinander.

2.4.2 Mathematische Beschreibung

Es können unterschiedliche Phänomene beschrieben werden, welche für das Auswaschen von Partikeln aus einer Gasatmosphäre verantwortlich sind. In der Literatur [71], [63] werden Auswaschmechanismen in drei verschiedene Kategorien aufgeteilt:

- Vernachlässigbar kleine Strömungsgeschwindigkeit des Trägerfluids (z.B. Absetzvorgänge)
- Mechanische Effekte zwischen Tropfen und Partikel (z.B. Impaktionsabscheidung, Interzeptionsabscheidung, Diffusionsabscheidung)
- Gradientenprozesse im Trägerfluid (z.B. Thermophorese, Diffusiophorese)

Im Folgenden werden die Auswaschmechanismen phänomenologisch und mathematisch beschrieben. Das vorliegende Modell berücksichtigt keine Gradientenprozesse, da die Strömung im Trägerfluid während der Sprayinjektion in ein geschlossenes Gasvolumen sehr turbulent ist und sie somit gegenüber den mechanischen Effekten zu vernachlässigen sind. Um die einzelnen Mechanismen mathematisch beschreiben zu können, wird als Maß für die Effektivität des Auswaschvorgangs die Auswascheffizienz η definiert. Die Auswascheffizienz ist per Definition auf einen Tropfen bezogen und ist dimensionslos [71]. Abb. 2.6 zeigt einen Tropfen, welcher sich durch eine Einhüllende bewegt, die er durch seine Strömungsrichtung in angegebener Richtung erzeugt. Im abgeschlossenen Volumen der Einhüllenden befinden sich Partikel, die bereits vom Tropfen aufgenommen worden sind und Partikel im noch auszuwaschenden Volumen. η beschreibt das Verhältnis zwischen der Partikelmasse im Tropfen und der Masse an Partikeln, welche sich im einhüllenden Strömungsvolumen befinden und die potentiell ausgewaschen werden können.

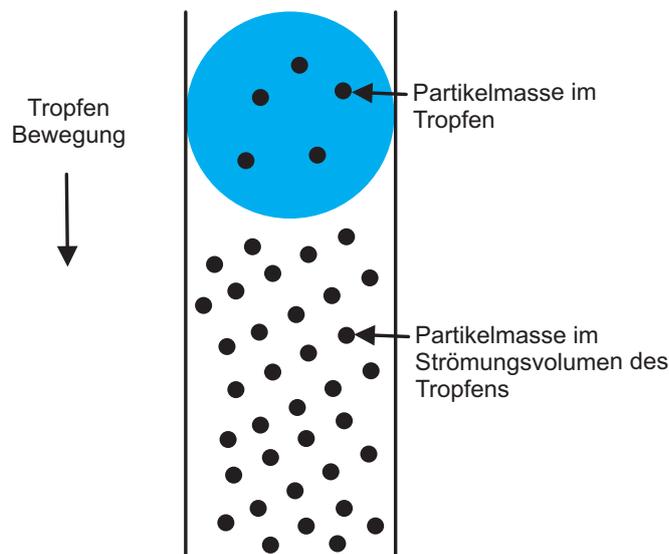


Abbildung 2.6: Darstellung von Partikeln im Tropfen und im Volumen (Einhüllende), welches der Tropfen durch seine weitere Fallbewegung auswaschen kann

η wird folgendermaßen angegeben

$$\eta = \frac{\text{Partikelmasse im Tropfen}}{\text{Partikelmasse im einhüllenden Strömungsvolumen}} \quad . \quad (2.35)$$

Die Auswascheffizienz bezieht sich auf einen Einzeltropfen und ist zudem für jeden einzelnen Auswaschmechanismus definiert. Da ein Tropfen Partikel auf verschiedene Weise auswaschen kann, bedarf es einer geeigneten Korrelation, die Einzelauswascheffizienzen zu einer Gesamteffizienz η_{all} zusammenfasst. Es muss dabei berücksichtigt werden, dass η_{all} einen Wert zwischen null und eins annehmen kann. Werden einzelne Auswascheffizienzen einfach miteinander addiert, kann es vorkommen, dass die maximale Auswascheffizienz den Maximalwert von eins übersteigt. Um eine Effizienz außerhalb des gültigen Bereichs zu vermeiden, wird für die Überlagerung mehrerer Mechanismen folgende Beziehung verwendet [81]

$$\eta_{all} = 1 - (1 - \eta_{imp}) \cdot (1 - \eta_{int}) \cdot (1 - \eta_{Diff}) \quad . \quad (2.36)$$

In Gl. (2.36) werden die Auswascheffizienzen eines Einzeltropfens für Impaktionsabscheidung η_{imp} , Interzeptionsabscheidung η_{int} und Diffusionsabscheidung η_{Diff} verwendet. η_{all} beinhaltet alle relevanten Auswaschmechanismen eines Einzeltropfens. Für die Schließung der Massenerhaltung in Gl. (2.2) wird ein dimensionsbehafteter Quell- und Senkenterm in der Einheit $\text{kg/m}^3\text{s}$ benötigt, der nicht nur einen Einzeltropfen berücksichtigt, sondern ein komplettes Spray mit Millionen von kleinen Wassertröpfchen. Dazu muss die Auswascheffizienz eines Einzeltropfens auf ein komplettes Spray hochskaliert werden. Parsly [71] schlägt dazu folgende Beziehung vor

$$\Gamma_L = -\Gamma_G = \frac{3 \cdot \dot{V} \cdot s \cdot \rho_L}{2 \cdot d_L \cdot V_{con}} \cdot \eta_{all} \quad . \quad (2.37)$$

In Gl. (2.37) repräsentiert \dot{V} den Düsenvolumenstrom, s die Tropfenfallhöhe und V_{con} das Volumen des Sicherheitsbehälters in das eingesprüht wird. Parsly [71] leitet die Gleichung aus der Annahme her, dass ein Einzeltropfen während seiner Fallhöhe s ein bestimmtes Volumen durchströmt, ähnlich einer Einhüllenden. Aus dem Volumenstrom der Düse und der Annahme einer Kugelform für die Tropfen lässt sich eine Tropfenanzahl bestimmen, die sich während des Einsprühvorgangs von Düse zum Sammelpunkt aller Tropfen am Ende des Fallvorgangs bewegt. Wird die errechnete Tropfenanzahl mit dem durchströmten Einzelvolumen eines Tropfens multipliziert, ergibt sich ein Gesamtvolumen des Sprays. Wird dieses Volumen mit der Auswascheffizienz η_{all} multipliziert, ergibt sich Gl. (2.37).

Absetzvorgänge

Absetzvorgänge kommen vor, wenn sich Aerosolpartikel in einem in Ruhe befindlichen Trägerfluid befinden. Verbleibt das Trägerfluid in Ruhe in einem Volumen in dem die

Erdanziehungskraft g wirkt, so werden die Partikel durch ihre größere Dichte ρ_P im Vergleich zum Trägerfluid ρ_G durch g beschleunigt und es folgt eine Entmischung der partikelbeladenen Gasatmosphäre. Die Entmischung führt zur Ablagerung von Partikeln an Wänden und anderen Strömungshindernissen. Die maximale Absetzgeschwindigkeit der Partikel ist erreicht, wenn die Erdanziehungskraft mit der Widerstandskraft, die ein bewegter Partikel mit seiner Umgebung erzeugt, im Gleichgewicht steht, siehe [33]. Da es sich bei der Partikelbewegung um eine sehr geringe Geschwindigkeit handelt, kann sie vereinfacht mit dem Stokes'schen Reibungsgesetz beschrieben werden. Durch Umformung ergibt sich die maximale Absetzgeschwindigkeit (Engl.: Terminal Velocity) für den Partikel u_{TV} [26]

$$u_{TV} = \tau_{dyn} \cdot g = \frac{\rho_P \cdot d_P^2}{18 \cdot \mu_G} \cdot g \quad . \quad (2.38)$$

u_{TV} ist maßgeblich von der Beschaffenheit des Aerosolpartikels abhängig (ρ_P und d_P).

Impaktionsabscheidung

Findet der Auswaschvorgang durch Kollisionen zwischen Partikeln und Tropfen statt, spricht man von Impaktionsabscheidung. Abb. 2.7 zeigt einen Tropfen, der sich auf seiner Trajektorie einem Partikel nähert. Wenn der Tropfen mit dem Partikel kollidiert, verbleibt dieser im Tropfen und wird so aus der Atmosphäre ausgewaschen. Seinfeld und Pandis [78] definieren die Auswascheffizienz für die Impaktionsabscheidung eines Einzeltropfens η_{imp} durch eine empirische Korrelation mit

$$\eta_{imp} = \left[\frac{St - S^*}{St - S^* + 0,66} \right]^{\frac{3}{2}} \quad (2.39)$$

$$\text{mit} \quad S^* = \frac{1,2 + \frac{1}{12} \cdot \ln(1 + Re_{imp})}{1 + \ln(1 + Re_{imp})} \quad (2.40)$$

$$\text{und} \quad Re_{imp} = \frac{d_L \cdot \bar{u}^L \cdot \rho_G}{\mu_G} \quad . \quad (2.41)$$

In Gl. (2.39) ist S^* ein Korrekturfaktor und Re_{imp} beschreibt die Reynoldszahl für die Gasphase.

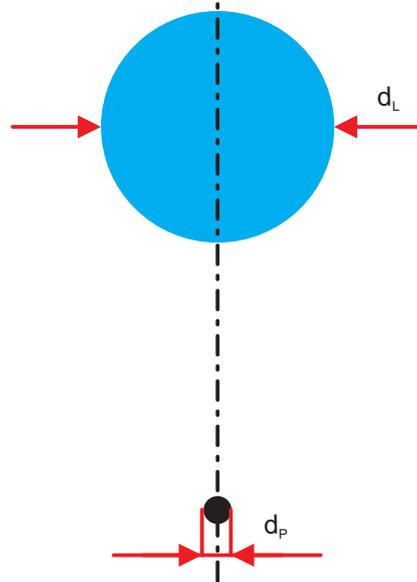


Abbildung 2.7: Tropfen und Partikel während der Impaktionsabscheidung

Interzeptionsabscheidung

Ähnlich wie die Impaktionsabscheidung betrachtet die Interzeptionsabscheidung einen direkten Kontakt von Tropfen und Partikel. Er entsteht, wenn Partikel den Tropfen umströmen und die Tropfenoberfläche berühren. Durch die Berührung verbleiben Partikel an der Tropfenoberfläche und werden ausgewaschen. Abb. 2.8 zeigt die Stromlinie (gestrichelt) eines Partikels um einen Tropfen. Die Auswascheffizienz für Interzeption η_{int} für einen Einzeltropfen kann für den vorliegenden Anwendungsfall durch eine empirische Korrelation nach Park et al. [70] beschrieben werden

$$\eta_{int} = \frac{1 - \alpha_L}{J + \sigma \cdot K} \cdot \left\{ \left(\frac{R}{1 + R} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{R}{1 + R} \right)^2 \cdot (3\sigma + 4) \right\} \quad (2.42)$$

$$\text{mit } J = 1 - \frac{6}{5} \cdot \alpha_L^{\frac{1}{3}} + \frac{1}{5} \cdot \alpha_L^2 \quad , \quad (2.43)$$

$$\text{mit } K = 1 - \frac{9}{5} \cdot \alpha_L^{\frac{1}{3}} + \frac{1}{5} \cdot \alpha_L^2 \quad , \quad (2.44)$$

$$\text{mit } \sigma = \frac{\mu_L}{\mu_G} \quad , \quad (2.45)$$

$$\text{und } R = \frac{d_P}{d_L} \quad . \quad (2.46)$$

J und K sind empirische Faktoren, welche vom volumetrischen Phasengehalt α_L ab-

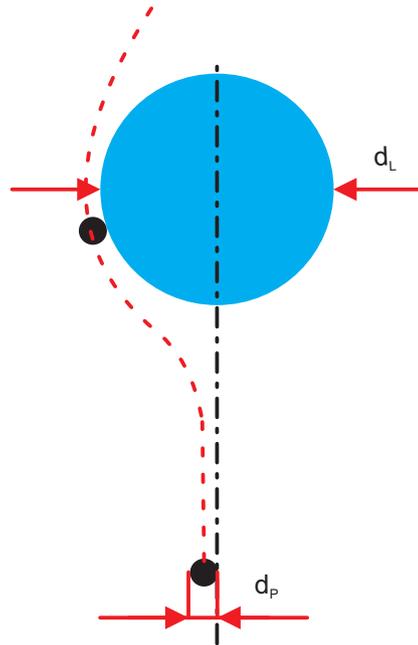


Abbildung 2.8: Tropfen und Partikel während der Interzeptionsabscheidung

hängig sind. σ ist das Verhältnis der dynamischen Viskosität eines Wassertropfens μ_L und der Gasviskosität μ_G . R ist das Verhältnis des Partikeldurchmessers d_P und des Tropfendurchmessers d_L .

Diffusionsabscheidung

Für sehr kleine Aerosolpartikel muss zusätzlich die Diffusionsabscheidung berücksichtigt werden. Während der Diffusionsabscheidung bewegen sich Gasmoleküle aufgrund ihrer thermischen Energie und den damit verbundenen Oszillationen auf Partikel zu und stoßen an diese an. Während der Berührung wird ein Impuls übertragen, der dazu führt, dass sich Partikel zu den Wassertropfen bewegen. Abb. 2.9 zeigt einen Tropfen (blau) und mehrere Gasmoleküle (rot) bzw. Partikel (schwarz). Licht [55] gibt an, dass dieser Mechanismus für alle Partikeldurchmesser kleiner $1 \mu m$ zu berücksichtigen ist. Die Auswascheffizienz aufgrund von Diffusion η_{Diff} kann nach einer empirischen Korrelation nach Johnstone und Roberts [55] modelliert werden

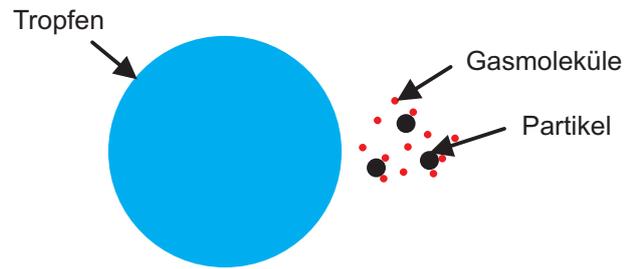


Abbildung 2.9: Tropfen, Partikel und Gasmoleküle während der Diffusionsabscheidung

$$\eta_{Diff} = \frac{4}{Pe} \cdot \left(2 + 0,557 \cdot Re_{imp}^{\frac{1}{2}} \cdot Sc^{\frac{3}{8}} \right) \quad (2.47)$$

$$\text{mit } Pe = Sc \cdot Re_{imp} \quad (2.48)$$

$$\text{und } Sc = \frac{\mu_G}{\rho_G \cdot D} \quad (2.49)$$

Die Korrelation ist abhängig von der Pecletzahl Pe , der Reynoldszahl für die Gasphase Re_{imp} und der Schmidtzahl Sc .

3 Numerische Methode und Verifikation der Modelle

In diesem Kapitel ist der technische Aufbau der Simulationen in ANSYS CFX erläutert. Als erstes wird hierzu auf die Generierung und die Beschaffenheit des verwendeten dreidimensionalen Netzes des THAI Behälters eingegangen. Im Anschluss folgen Einblicke in die Modellierung des Sprayeintritts in THAI sowie die Erläuterung zur Berücksichtigung verschiedener Tropfen- und Partikeldurchmesser in den Simulationen. Da es sich bei THAI um einen geschlossenen Behälter handelt und das eingesprühte Wasser während der Durchführung des Experiments nicht entfernt wird, wird auf die Berücksichtigung von Wasseransammlungen in den Simulationen eingegangen. Abgeschlossen wird das Kapitel durch eine Verifikation des Spraykühlungs- sowie des Partikelauswaschmodells. Hierzu werden einfache Kanalströmungen untersucht, deren Ergebnisse eine funktionale Anwendung der beiden Modelle zeigen.

3.1 Netzgenerierung im THAI Behälter

Die Generierung des Rechnetzes ist ein sehr wichtiger Bestandteil einer erfolgreichen Simulation. Eine gute Qualität des Rechnetzes und eine ausreichend genaue Auflösung der unterschiedlichen Strömungsbereiche ist bei der Simulation von Zweiphasenströmungen essentiell. Im Rahmen dieser Arbeit werden für die Simulationen in THAI ausschließlich Netze verwendet, die unstrukturiert mit Volumenelementen in Tetraederform generiert sind. Unstrukturierte Netze bieten im Vergleich zu blockstrukturierten Netzen mit hexaedrischen Volumenelementen den Vorteil, dass keine vorgegebenen Strukturen durch definierte Blöcke vorhanden sind und so eine flexiblere Vernetzung möglich ist. Insbesondere bei Netzen mit gleichzeitiger Auflösung von Strukturen im Meter bzw. Millimeter Bereich ist dies ein wesentlicher Vorteil (Multiskalenproblem). Einen ausführlichen Einblick in die Klassifizierung von Netzarten geben Laurien und Oertel jr. in [54]. In Abb. 3.1 a) ist ein unstrukturiertes Netz von THAI durch einen Schnitt in der Symmetrieachse dargestellt. Es besteht aus einzelnen Volumenelementen in Tetraederform. Die Netzauflösung in der Abbildung ist schematisch dargestellt, zeigt lediglich die Struktur von THAI und entspricht nicht der deutlich feineren Auflösung in den Simulationen. Zur Einsprühdüse hin, welche in der Rotationsachse im oberen Drittel von THAI installiert ist, ist das Netz stark verfeinert. Eine starke Verfeinerung ist in diesem Gebiet notwendig, damit die Düse mit einem Austrittsdurchmesser von 8 mm berücksichtigt werden kann.

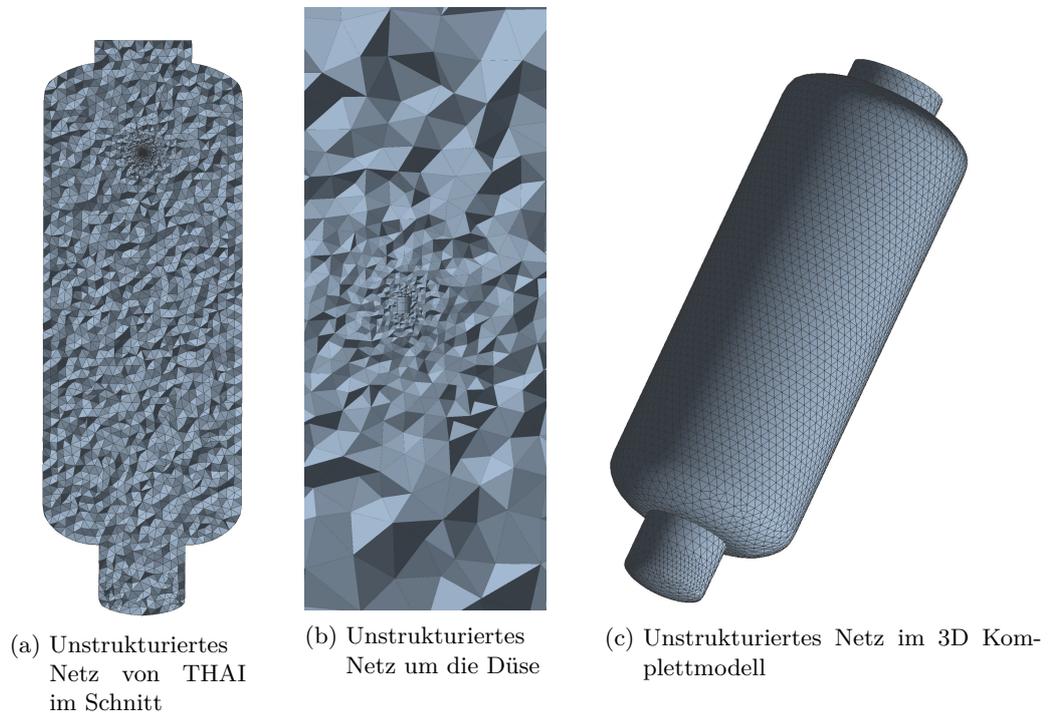


Abbildung 3.1: Unstrukturiertes Netz mit Volumenelementen in Tetraederform

Die Auflösung des Düsengebiets ist in Abb. 3.1 b) dargestellt. Das Netz ist als dreidimensionales Kompletmodell ausgeführt und umfasst das gesamte Strömungsgebiet in THAI, siehe Abb. 3.1 c). Durch die Rotationssymmetrie des THAI Behälters wäre auch ein quasi zweidimensionales Strömungsvolumen in Form eines 'Tortenstücks' möglich gewesen. Die Annahme periodischer Randbedingungen ermöglicht in einem solchen Fall die Berechnung eines Strömungsvolumens mit wesentlich reduziertem numerischen Aufwand. Es hat sich jedoch während der Durchführung der Simulationen gezeigt, dass sich trotz Rotationssymmetrie keine reine rotationssymmetrische Strömung einstellt. Auf eine genaue Beschreibung des Strömungsfelds wird an dieser Stelle mit dem Verweis auf die Diskussion der Ergebnisse in Kapitel 4 verzichtet. Das THAI Strömungsfeld ist in Form eines kompletten Einzelnetzes berücksichtigt, d.h. eine Verbindung verschiedener Netze und Netzarten durch Schnittstellen wird nicht benötigt. Eine Verwendung von Schnittstellen ist in CFD Simulationen weitestgehend zu vermeiden, da eine Kopplung verschiedener Netzarten und Auflösungen durch Mittelung über die Schnittstellenfläche zum Verlust detaillierter Strömungsinformationen führt. Das vorliegende Netz verzichtet auf die Modellierung der Wandstruktur in THAI, ein Fluid-Struktureinfluss wird nicht berücksichtigt. Die Vernachlässigung der Wand führt zu einer Verringerung des Rechen-

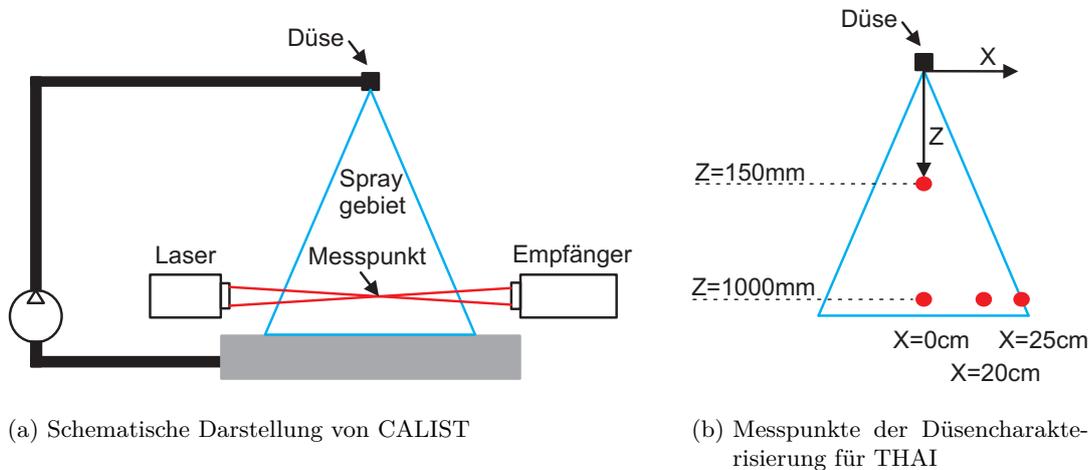


Abbildung 3.2: Düsencharakterisierung mit dem CALIST Versuchstand

aufwands, da keine Erhaltungsgleichungen für die Wandstruktur gelöst werden müssen. Eine solche Vereinfachung ist sinnvoll, da in den verwendeten Validierungsexperimenten konstante Wandrandbedingungen verwendet werden (z. B. eine konstante Wandtemperatur) und die Struktur keinen Einfluss auf das Strömungsfeld hat. Eine stärkere Auflösung des Netzes zur Wand hin ist nicht berücksichtigt, stattdessen werden in ANSYS CFX implementierte Wandfunktionen verwendet. Die Eignung der Netzauflösung wird für die einzelnen Validierungsfälle in Kapitel 4 untersucht.

3.2 Modellierung der Randbedingungen

In diesem Abschnitt wird die Modellierung der Randbedingungen für die Validierungssimulationen erläutert, welche so bei der Spraykühlung als auch bei der Partikelaustrahlung in THAI verwendet werden.

3.2.1 Sprayeintritt an der Düse

Bei der Simulation von Sprayströmungen in der Kerntechnik ist es üblich, den physikalischen Zerfallsprozess eines kontinuierlichen Wasserstrahls in einzelne Wassertropfen bei der Modellierung nicht zu berücksichtigen. Es wird stattdessen angenommen, dass sich bereits am Düsenaustritt Tropfen gebildet haben und diese mit einem Geschwindigkeitsprofil in das Strömungsvolumen eintreten, vgl. [66] und [58]. In THAI ist eine Vollkegeldüse mit einem Austrittsdurchmesser von 8 mm verbaut, mit welcher beide Validierungsexperimente durchgeführt wurden. Die strömungsmechanische Charakterisierung der Düse wurde auf dem CALIST Versuchsstand des IRSN durchgeführt [60]. Dieser

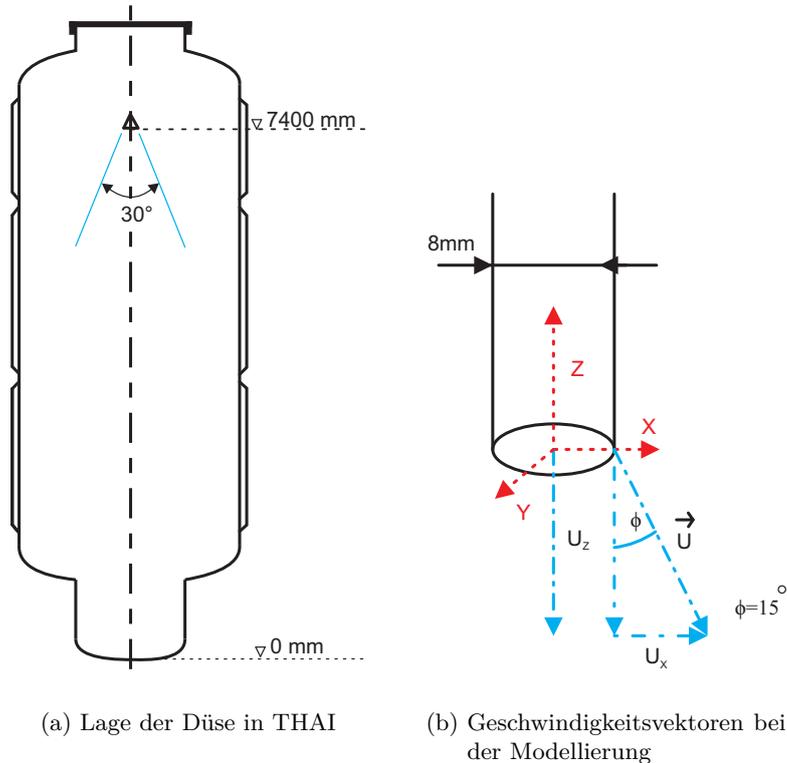


Abbildung 3.3: Modellierung des Geschwindigkeitsfeldes am Düseneintritt

Versuchsstand ist in der Lage, Tropfengeschwindigkeiten und Tropfengrößen durch einen Laser an verschiedenen Stellen des Strömungsfeldes zu bestimmen. Eine schematische Darstellung von CALIST ist in Abb. 3.2 a) zu finden. Während der Düsencharakterisierung wird fortlaufend Wasser aus einem Auffangbehälter mithilfe einer Wasserpumpe zur Spraydüse gefördert. Die Düse sprüht das Wasser entsprechend ihrer Bauart in die Umgebungsatmosphäre ein. Die Umgebungsatmosphäre ist dabei der Raum, in dem dieser Versuchsstand steht. Er ist zur Umgebung nicht abgeschlossen. Das fortlaufend eingedüste Spray wird mit einem beweglichen Laser punktuell untersucht. Der Laser ist in der Lage das komplette Strömungsfeld zu vermessen.

Gemäß der Versuchsdokumentation für den THAI Spraykühlungsversuch HD-31-SE [29] ist die verwendete Vollkegeldüse an insgesamt vier verschiedenen Positionen im Strömungsfeld hinsichtlich der Tropfengeschwindigkeit und Tropfengröße charakterisiert worden. Dabei wurden zwei Messebenen berücksichtigt, einmal 150 mm stromabwärts der Düse und einmal bei 1000 mm. Die erste Messebene berücksichtigt einen Punkt in der Rotationsachse der Düse, die zweite Ebene zusätzlich zur Rotationsachse auch zwei Punkte am Sprayrand. Die beschriebenen Messstellen sind in Abb. 3.2 b) ersichtlich. Um

eine Geschwindigkeitsverteilung aus den experimentellen Daten zu bestimmen, bedarf es mehrerer Messstellen so nahe wie möglich am Düsenaustritt. Da bei der durchgeführten Charakterisierung nur eine Stelle mit 150 mm Abstand zum Düsenaustritt vermessen wurde, ist eine Modellierung des Eintrittsgeschwindigkeitsfelds unumgänglich. Die vorgenommene Modellierung berücksichtigt Geschwindigkeitsvektoren in jeder Koordinatenrichtung x , y , z . Abb. 3.3 b) zeigt die Aufteilung der Geschwindigkeitsvektoren in die einzelnen Koordinatenrichtungen. Rot gepunktet dargestellt sind die Koordinatenachsen in x -, y - und z -Richtung. Die blau strichpunktiert dargestellten Vektoren repräsentieren exemplarisch die Geschwindigkeit in x - und z -Richtung.

Für die in Abb. 3.3 a) dargestellte Vollkegeldüse in THAI wird angenommen, dass die Geschwindigkeitskomponente u_Z über den kompletten Düsenquerschnitt einen konstanten Wert aufweist. Aus den experimentellen Daten der Charakterisierung wird u_Z mit 23 m/s angenommen. Die Geschwindigkeitskomponenten u_X und u_Y , welche die Aufweitung des Wasserstrahls erzeugen, werden mithilfe einer quadratischen Funktion bestimmt. Die Düse hat einen maximalen Spraywinkel von 30° , d.h. der Vektor \vec{u} hat am positiven Düsenrand bei 4 mm in x - und y -Richtung einen Maximalwinkel von 15° , am negativen Düsenrand bei -4 mm einen Wert von -15° . Der Winkel variiert vom Düsenzentrum zum Düsenrand von 0° bis 15° und in negativer Achsenrichtung von 0° bis -15° . Im Folgenden wird die Modellierung für die Geschwindigkeitskomponente u_X beschrieben. Die Modellierung gilt analog auch für u_Y , da beide Vektoren in horizontaler Richtung wirken. Es muss bei den Gleichungen lediglich x durch y ersetzt werden. Die Winkelvariation wird mit einer quadratischen Funktion in Abhängigkeit der Koordinate x erzeugt. Der Ursprung von x befindet sich genau in der Düsenmitte. Es wird eine quadratische Funktion mit folgenden Grenzen bestimmt:

- 0° bei $x = 0,000$ m
- 15° bei $x = 0,004$ m

bzw.

- 0° bei $x = 0,000$ m
- -15° bei $x = -0,004$ m

Mit diesen Grenzen lässt sich eine quadratische Abhängigkeit des Winkels ϕ von der Koordinate x bestimmen, die wie folgt definiert werden kann

$$\phi = 937500 \cdot x^2 \quad \text{für } x \in \mathbb{R}_0^+ \quad (3.1)$$

$$\phi = -937500 \cdot x^2 \quad \text{für } x \in \mathbb{R}^- \quad (3.2)$$

Die Modellierung der Winkelzunahme abseits des Ursprungs wurde gewählt, um eine gleichmäßigere Verteilung des Sprays zum Düsenrand hin zu gewährleisten. Eine lineare Verteilung für ϕ führt dazu, dass der Winkel nur langsam ansteigt und es so zu einer Ansammlung des Sprays im Zentrum kommt. Die Vektorkomponente u_X kann über die trigonometrische Funktion

$$u_X = \tan(\phi) \cdot u_Z \quad (3.3)$$

berechnet werden. In den Bereichen, in denen x und y ungleich null sind, überlagern sich beide Funktionen. So ergibt sich ein gleichmäßiger Spraykegel.

3.2.2 Modellierung verschiedener Tropfendurchmesser

In der Realität entstehen während des Einsprühvorgangs und der Zerstäubung von Wasser eine Vielzahl von Tropfen mit unterschiedlich großen Durchmessern. Die unterschiedlichen Durchmesser können mit Messeinrichtungen wie z.B. CALIST experimentell bestimmt werden. Standardmäßig wird bei CFD Simulationen eine monodisperse Tropfengröße angenommen. Diese Vereinfachung führt dazu, dass der Simulationsaufwand stark reduziert werden kann, da nur eine Tropfenphase vorhanden ist und so nur ein Satz an Erhaltungsgleichungen gelöst werden muss. Durch die Vereinfachung werden Einflüsse kleiner und großer Tropfen in den Untersuchungen nicht berücksichtigt. Um die Auswirkung verschiedener Tropfengrößen im Rahmen dieser Arbeit zu untersuchen, wird der monodispersen Annahme in den Validierungsrechnungen der Spraykühlung und der Aerosolpartikelabwaschung eine polydisperse Tropfenkonfiguration gegenübergestellt. Abb. 3.4 zeigt die Aufteilung der Geschwindigkeitsfelder in den Simulationen. Im Euler-Euler Zwei-Fluid Modell wird jede Phase durch ein eigenes Geschwindigkeitsfeld beschrieben. Bei der monodispersen Tropfenkonfiguration gibt es zwei Geschwindigkeitsfelder, eines für die Tropfenphase und eines für die Gasphase. Beim polydispersen Sprayansatz wird die Tropfenphase in unterschiedliche Tropfengrößenklassen unterteilt. Durch die Unterteilung werden verschiedene Durchmesser durch je ein separates Geschwindigkeitsfeld in den Simulationen berücksichtigt. Beim polydispersen Sprayansatz wird das Tropfenfeld realitätsnah abgebildet, allerdings steigt auch der Simulationsaufwand durch die Verwendung mehrerer Geschwindigkeitsfelder für die Tropfen. In den vorliegenden Simulationen ist die Tropfengrößenverteilung des Messpunkts im Zentrum 150 mm unterhalb der Spraydüse verwendet worden (vgl. Abb. 3.2 b). Um eine polydisperse Spraycharakteristik zu untersuchen, den numerischen Aufwand jedoch im akzeptablen Bereich zu halten, wurde die Tropfengrößenverteilung auf fünf Tropfengrößenklassen beschränkt. Die Aufteilung der Tropfengrößenklassen auf den Gesamtmassenstrom der Düse erfolgt analog zum volumetrischen Anteil der einzelnen Tropfenklassen am Gesamtvolumenstrom der Düse, vgl. Tab. 3.1. Für die monodisperse Tropfenkonfiguration wird der Sauterdurchmesser d_{32} verwendet. Dieser Wert kann für die verwendete Düse mit 0,83 mm angegeben werden. Die Daten für den gewählten d_{32} bzw. für die Tropfengrößenverteilung in Tab. 3.1

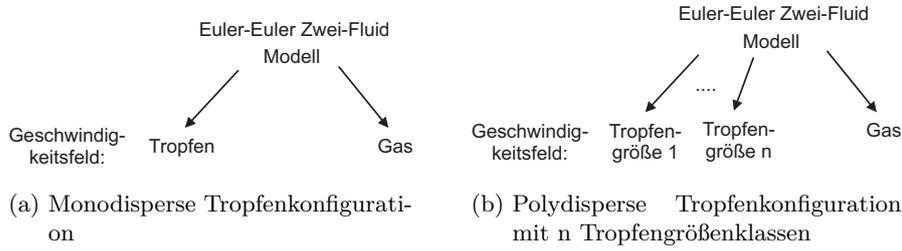


Abbildung 3.4: Aufteilung der Spraykonfiguration in den CFD Simulationen

sind experimentellen Daten der in den Validierungsversuchen verwendeten Vollkegeldüse entnommen [29].

Tabelle 3.1: Aufteilung der Tropfengrößenklassen an der THAI Spraydüse

Tropfengrößenklasse [mm]	Anteil am Eintrittsvolumenstrom [-]
0,139	0,20
0,415	0,27
0,691	0,22
0,967	0,17
1,243	0,14

3.2.3 Modellierung verschiedener Partikeldurchmesser

Bei der Modellierung der Partikel im Validierungsexperiment THAI AW 4 werden zwei grundlegend verschiedene Ansätze verfolgt. Abb. 3.5 a) zeigt die Berücksichtigung von Partikel auf Basis eines Zwei-Fluid Ansatzes. Bei der Interaktion von Spray, Partikel und Gas in Form von Umgebungsluft handelt es sich um drei verschiedene Phasen, es stehen mit der Tropfen- bzw. Gasphase aber nur zwei Geschwindigkeitsfelder zur Verfügung. Für sehr kleine Partikel kann vereinfachend angenommen werden, dass Luft und sehr kleine Partikel ein homogenes Gemisch bilden und sich so ein gemeinsames Geschwindigkeitsfeld teilen. Dies ist möglich, wenn gilt $St \ll 1$. Bei diesem Ansatz ist zusätzlich zu beachten, dass für die Partikel und die Tropfen nur eine monodisperse Größe angenommen werden kann. Die Tropfenphase wird, wie die Gasphase, als Mischung aus reinem Wasser und Partikel berücksichtigt. Dieser Mischungsansatz wird verwendet, um eine Partikelinkorporation während des Auswaschvorgangs in den Tropfen zu ermöglichen. So können sich Tropfen mit Partikeln anreichern und das Aufnahmevermögen kann an

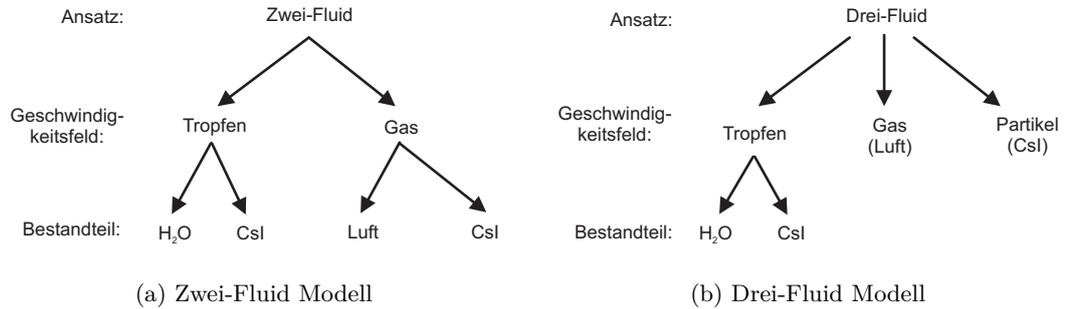


Abbildung 3.5: Aufteilung der Phasen in den CFD Auswaschsimulationen

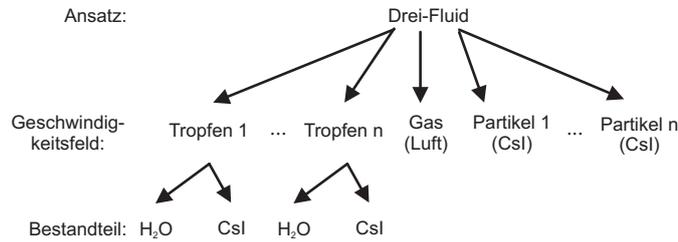


Abbildung 3.6: Aufteilung der Partikel- und Tropfenphase in verschiedene Größenklassen

experimentelle Daten angepasst werden. Für größere Partikel trifft die Annahme, dass sich Umgebungsluft und Partikel ein Geschwindigkeitsfeld teilen, nicht mehr zu und der Zwei-Fluid Ansatz muss auf einen Drei-Fluid Ansatz erweitert werden. Hierzu werden Partikel in einer separaten Phase mit einem eigenen Geschwindigkeitsfeld berücksichtigt. Die Erweiterung ist in Abb. 3.5 b) dargestellt. Durch die Aufteilung wird die Gasphase nur noch durch Umgebungsluft repräsentiert. Mit der Erweiterung ist es möglich, Absatzvorgänge von Partikeln ($\rho_P \gg \rho_G$) zu berücksichtigen. Ebenso wie beim Zwei-Fluid Ansatz berücksichtigt diese Erweiterung lediglich monodisperse Tropfen und Partikel. Um eine Partikelgrößenverteilung zu simulieren, muss die neu eingeführte Partikelphase analog zur Tropfenphase in Abb. 3.4 b) in verschiedene Größenklassen eingeteilt werden. Jede Partikelgrößenklasse besitzt ein eigenes Geschwindigkeitsfeld, siehe Abb. 3.6.

Die Anzahl der Größenklassen für die Partikel ist abhängig von den zur Verfügung stehenden experimentellen Daten aus dem Validierungsversuch. In AW 4 wurden insgesamt sechs Größenklassen bestimmt. Die Bestimmung der einzelnen Größenklassen wird mit Kaskadenimpaktoren durchgeführt, bei denen das Messprinzip die Trägheit der Partikel ausnutzt [25]. AW 4 ist in zwei verschiedene Spraysequenzen (Spray 1 und Spray 2) aufgeteilt (siehe Abb. 4.12), deren Partikelgrößenverteilungen den folgenden Tabellen (Tab. 3.2 und 3.3) entnommen werden können. Eine ausführliche Beschreibung des

Experimentenablaufs ist in Abschnitt 4.2 zu finden.

Tabelle 3.2: Größenklassen der Partikelverteilung in Spray 1

Partikelklasse	Partikeldurchmesser [μm]	Massenanteil [%]
CsI 1	0,18	1
CsI 2	0,42	2
CsI 3	0,85	5
CsI 4	1,75	23
CsI 5	3,30	41
CsI 6	6,80	28

Tabelle 3.3: Größenklassen der Partikelverteilung in Spray 2

Partikelklasse	Partikeldurchmesser [μm]	Massenanteil [%]
CsI 1	0,18	3
CsI 2	0,42	5
CsI 3	0,85	20
CsI 4	1,75	38
CsI 5	3,30	22
CsI 6	6,80	12

3.2.4 Behandlung von Wasseransammlungen

Bei THAI handelt es sich um einen geschlossenen Behälter. Durch Sprühwassereintrag in den Validierungsexperimenten sammelt sich die Flüssigkeit im tiefsten Punkt des Behälters an und bildet einen Wassersumpf. In der vorliegenden Arbeit wird die Interaktion zwischen Tropfen und Gas bzw. Tropfen und Aerosolpartikeln untersucht, dabei spielen Wasseransammlungen eine untergeordnete Rolle und werden zur Reduktion des numerischen Modellierungsaufwandes vernachlässigt. Die vorgestellten Modelle nehmen an, dass Tropfen in disperser Form vorhanden sind und berücksichtigen den Phasenaustausch auf dem Weg des Tropfens von der Düse bis zum niedrigsten Punkt in THAI. In ANSYS CFX bietet sich die Möglichkeit, eine Phase über eine Wandsenke zu entfernen. In den durchgeführten Simulationen wird dazu die sogenannte 'Degassing' Kondition [4] als Randbedingung verwendet. Die Senke ist dabei so definiert, dass die Gasphase

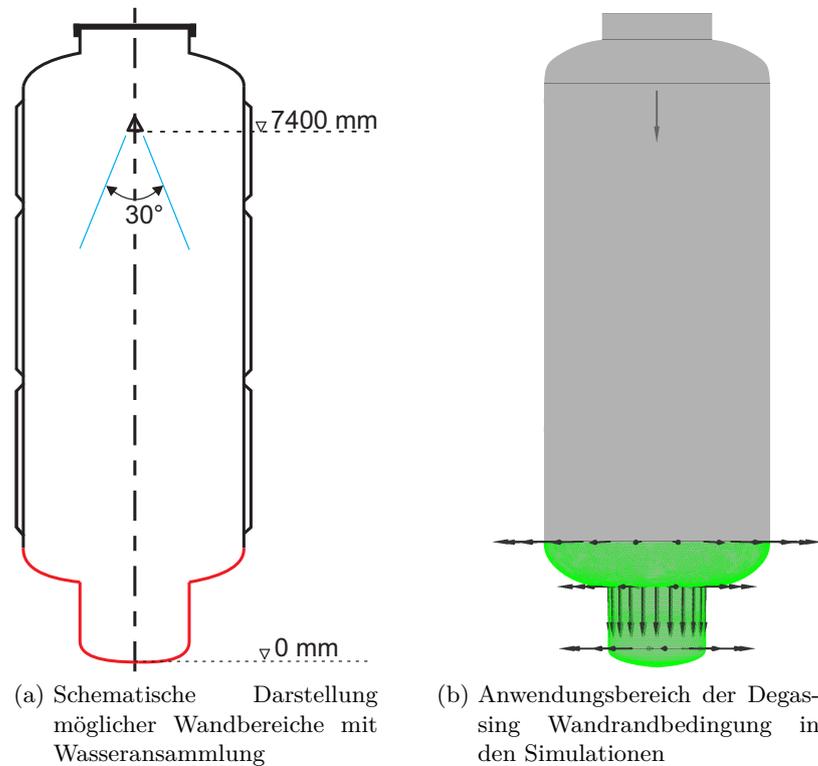


Abbildung 3.7: Darstellung der Degassing Wandrandbedingung

im Wandbereich eine Wand vorfindet, die dispers modellierte Tropfenphase einen Auslass aus dem Strömungsgebiet. So wird gewährleistet, dass Tropfen entfernt werden und die Gasphase, die maßgeblich für den Druck im Behälter verantwortlich ist, vorhanden bleibt. Die 'Degassing' Kondition entfernt mit der Tropfenmasse den damit verbundenen Impuls und die Energie der Tropfenphase. Die Anwendung der beschriebenen Wandsenke benötigt die Kenntnis, an welchen Stellen sich die disperse Phase in THAI ansammeln kann. Die Gebiete sind in Abb. 3.7 a) dargestellt. Eine entsprechende Verwendung der 'Degassing' Kondition im THAI Strömungsgebiet der Simulation ist in Abb. 3.7 b) dargestellt. Die Anwendung der 'Degassing' Randbedingung erfordert genaue Kenntnisse über die Simulation, da der Randbedingung einige physikalische Vereinfachungen zugrunde liegen. Die ausgewählte Fläche wird für die kontinuierliche Phase als Wand modelliert, allerdings als Wand ohne Haftbedingung. Des weiteren wird die Wand als adiabatisch betrachtet, d.h. ein Wärmeübergang zwischen Wand und Fluid wird nicht berücksichtigt. Es ist daher ratsam, die 'Degassing' Funktion nur nach genauer Kenntnis des Strömungsproblems und auf einem kleinstmöglichen Gebiet einzusetzen.

3.3 Verifikation der entwickelten Modelle an einfachen Kanalströmungen

Im Folgenden werden zwei einfache Kanalströmungen gezeigt, welche die Anwendbarkeit des Spraykühlungs- und Auswaschmodells zeigen sollen. Das Spraykühlungsmodell wird mithilfe eines zweidimensionalen Kanals getestet, in welchem sich feuchte Luftströme unter Ausbildung von Kondensat vermischen. Der Wassergehalt und die Temperatur der Mischung aus der Simulation wird mit der Theorie in Form des Mollier-Diagramms für feuchte Luft verglichen. Im zweiten Testfall wird ein Wasserspray aus einer im Zentrum eines Rohrs befindlichen Düse eingesprüht. Das Spraywasser wird dabei entgegen eines partikelbeladenen Gasstroms eingebracht. Der Sprayeintrag reduziert die Konzentration der Partikel am Austritt aus dem Rohr. Bei beiden Simulationen handelt es sich um stationäre Strömungen.

3.3.1 Kondensation im Mischkanal

Mischkanal

Der in dieser Arbeit verwendete Mischkanal zur Verifikation des Spraykühlungsmodells ist aus einer Untersuchung von Zhang und Laurien [85], [86] abgeleitet. In Abb. 3.8 ist der Kanal mit drei Eintritten und einem Austritt gezeigt. Der Kanal ist insgesamt 100 m lang und hat eine Breite von 0,4 m. Die Abmessungen der Eintritte und des Austritts sind in Tab. 3.4 dargestellt. Die Höhe des Kanals beträgt konstant 0,2 m. Der Kanal besitzt ein durchströmtes Volumen von 8 m^3 .

Tabelle 3.4: Abmessungen der drei Eintritte und des Austritts

	Breite x Höhe [m]	Fläche [m^2]
Eintritt 1	0,2 x 0,2	0,04
Eintritt 2	0,2 x 0,2	0,04
Eintritt 3	0,1 x 0,2	0,02
Austritt	0,3 x 0,2	0,06

Der quasi zweidimensionale Testfall wird verwendet, um das entwickelte Phasenaustauschmodell für die Spraykühlung in ANSYS CFX zu implementieren und auf seine physikalische Richtigkeit zu überprüfen. Dazu werden in der Simulation drei Fluidströme durch die Eintritte 1-3 in den Mischkanal mit genau definierten Parametern für den Gesamtmassenstrom \dot{m}_{Ges} , den Luftmassenstrom \dot{m}_{Air} , den Wasserdampfmassenstrom \dot{m}_{Vapor} , den Wassermassenstrom \dot{m}_L , den Wassergehalt x und die Temperatur ϑ ein-

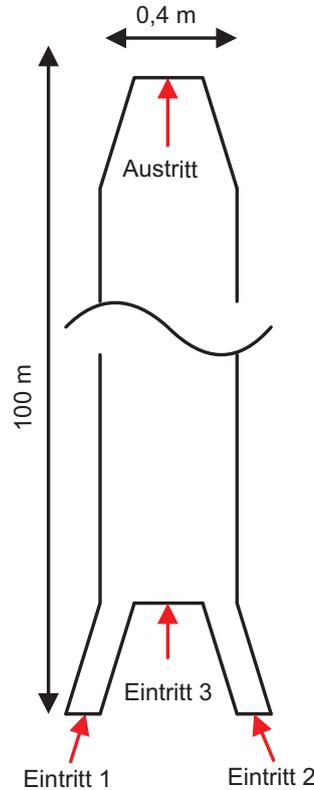


Abbildung 3.8: Schematische Darstellung des Mischkanals [37]

geleitet und über die Kanallänge komplett vermischt. Bei den Fluidströmen handelt es sich um ein Wasserdampf-Luft Gemisch (feuchte Luft), das zudem Wasser in Tropfenform mitführen kann. Die einzelnen Massenströme für \dot{m}_{Air} , \dot{m}_{Vapor} und \dot{m}_L lassen sich zu \dot{m}_{Ges} addieren. Je nach Beschaffenheit der Eintrittsströme kommt es im Kanal durch die Vermischung zu Verdampfung oder Kondensation. Die Vermischung während der Simulation wird mithilfe des Mollier-Diagramms [79] für feuchte Luft theoretisch beurteilt. Sehr bedeutsam für die Simulationsergebnisse ist eine vollständige Vermischung der Eintrittsströme, was im vorliegenden Fall einer Kanallänge von 100 m bedarf.

Mollier-Diagramm

Das Mollier-Diagramm in Abb. 3.9 beschreibt den Zustand von feuchter Luft bei verschiedenen Temperaturen und ermöglicht die Bestimmung des gasförmigen und flüssigen Wasseranteils im Luftgemisch. Auf der x-Achse ist der Wassergehalt x in g_{Wasser} pro $\text{kg}_{trockener Luft}$ aufgetragen. Auf der y-Achse steigen die Isothermen in der Einheit $^{\circ}\text{C}$ von links nach rechts leicht an. An der Sättigungsgrenze, welche kreisförmig von links unten

3.3 Verifikation der entwickelten Modelle an einfachen Kanalströmungen

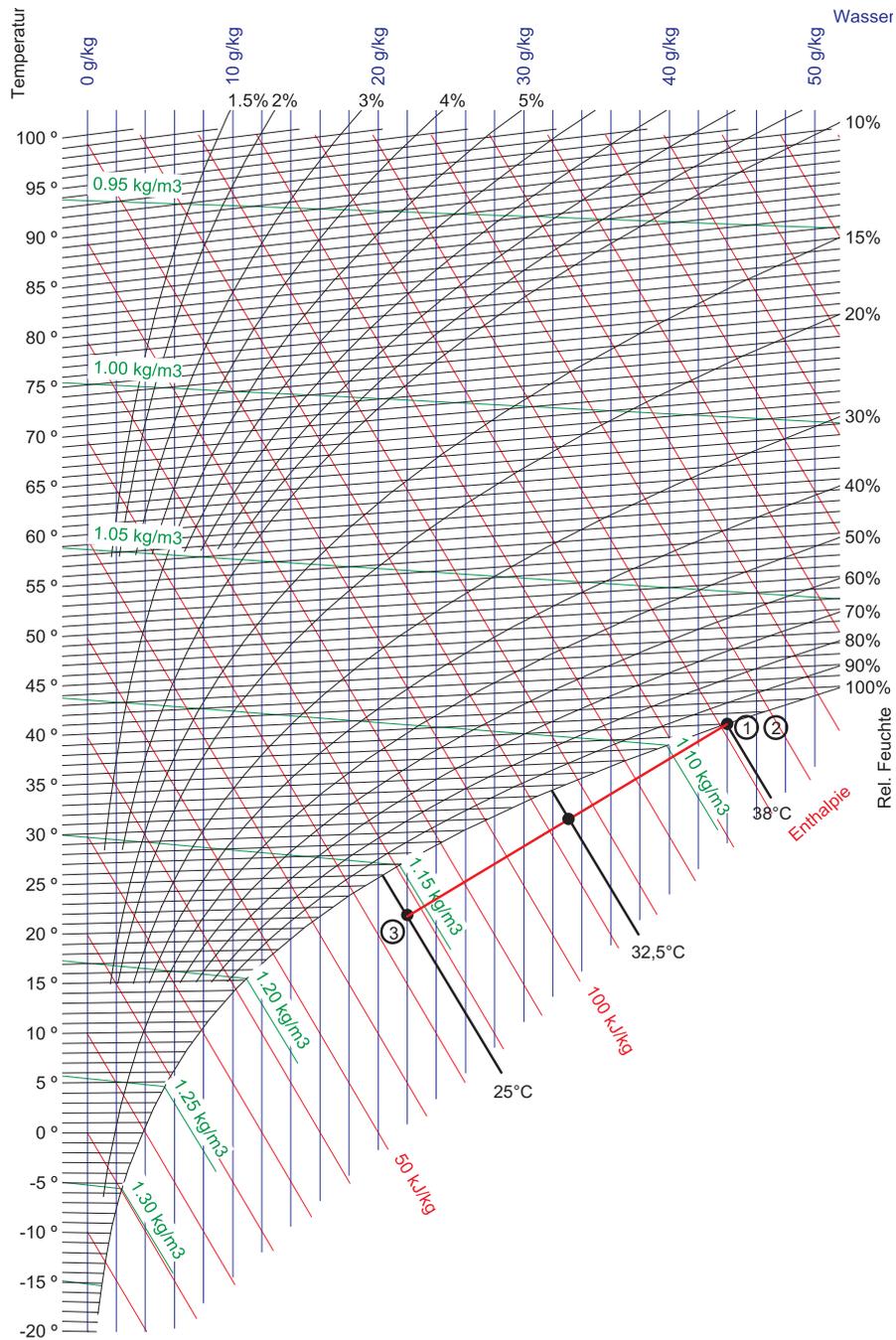


Abbildung 3.9: Mollier-Diagramm für einen Absolutdruck von 1 bar nach [79], [22]

nach rechts oben durch das Diagramm verläuft, knicken die Isothermen ab und verlaufen dort parallel zu den Isenthalpen. Isenthalpen verlaufen im Diagramm von links oben nach rechts unten und nehmen nach rechts im Betrag zu. Die Sättigungsgrenze gibt an, bis zu welcher Temperatur der Wasseranteil in feuchter Luft gasförmig vorliegt und ab wann Flüssigkeit ausgeschieden wird. Das Mollier-Diagramm macht keine Aussage bezüglich der Beschaffenheit des vorhandenen Kondensats. In den Simulationen werden für den gezeigten Mischungsfall drei verschiedene monodisperse Tropfengrößen untersucht, welche in Tab. 3.5 ersichtlich sind. Die Tropfen sind im Größenbereich gewählt worden, wie sie im Verdampfungsabschnitt in den experimentellen Untersuchungen im THAI bestimmt wurden (vgl. Tab. 3.1).

Tabelle 3.5: Durchmesser der Tropfen im Mischkanal

	Tropfendurchmesser d_L [μm]
Simulation 1	100
Simulation 2	300
Simulation 3	500

Für die Untersuchung des Spraykühlungsmodells wird der in Abb. 3.9 dargestellte Fall verwendet. Im gezeigten Testfall wird ein gerade gesättigter Luftstrom (1),(2) mit einem Luftstrom, welcher bereits Tropfen mit sich führt (3), vermischt. Die Mischung kann im Mollier-Diagramm über eine Mischungsgerade zwischen den Ausgangspunkten (1), (2) und (3) bestimmt werden. Die Randbedingungen der Ausgangspunkte sind in Tab. 3.6 zu finden.

Da die trockenen (1), (2) und feuchten Eintrittsströme (3) dieselbe trockene Luftmenge enthalten, liegt der Mischungspunkt auf der Mischungsgeraden genau in der Mitte. Aus dem Mollier-Diagramm wird für den Mischpunkt die Temperatur $\vartheta_{\text{Austritt}} = 32,5^\circ\text{C}$ bestimmt. Der Wassergehalt am Austritt kann analytisch aus folgender Bilanz in Gl. (3.4) errechnet werden

$$x_{\text{Austritt}} = \frac{x_1 \cdot \dot{m}_{\text{Air}1} + x_2 \cdot \dot{m}_{\text{Air}2} + x_3 \cdot \dot{m}_{\text{Air}3}}{\dot{m}_{\text{Air}1} + \dot{m}_{\text{Air}2} + \dot{m}_{\text{Air}3}} \quad (3.4)$$

und beträgt $x_{\text{Austritt}} = 33,00 \text{ g/kg}_{\text{trockene Luft}}$.

Numerisches Setup

Die stationären Simulationen werden mit einem quasi zweidimensionalen Netz des Kanals durchgeführt. Darunter wird die Annahme verstanden, dass das Strömungsfeld in einer der drei Raumrichtungen nur eine Zelle dick ist. Mit dieser Annahme ist es möglich, in

Tabelle 3.6: Randbedingungen für die Eintrittsströme in den Mischkanal

Variable	Wert	
ϑ_1, ϑ_2	38	[°C]
ϑ_3	25	[°C]
$\dot{m}_{Ges1}, \dot{m}_{Ges2}$	5,22	[g/s]
\dot{m}_{Ges3}	10,22	[g/s]
$\dot{m}_{Air1}, \dot{m}_{Air2}$	5,00	[g/s]
\dot{m}_{Air3}	10,00	[g/s]
$\dot{m}_{Vapor1}, \dot{m}_{Vapor2}$	0,22	[g/s]
\dot{m}_{Vapor3}	0,20	[g/s]
$\dot{m}_{L1}, \dot{m}_{L2}$	0,00	[g/s]
\dot{m}_{L3}	0,02	[g/s]
x_1, x_2	44,00	[g/kg _{trockene Luft}]
x_3	22,00	[g/kg _{trockene Luft}]

Finite-Volumen Gleichungslösern wie ANSYS CFX, Strömungen durch den vernachlässigbaren Einfluss der dritten Raumkoordinate in quasi zweidimensionalen Integrationsgebieten zu berechnen. Im vorliegenden Fall ist die Kanalzelle 0,2 m dick. Das vorliegende Strömungsfeld ist mit 106.000 hexaedrischen Volumenelementen blockstrukturiert aufgelöst. Es ist nur das Strömungsgebiet des Fluids aufgelöst, Wandstrukturen sind nicht berücksichtigt. Die seitlichen Wände des Kanals sind reibungsfrei, um den Einfluss einer Grenzschichtausbildung zu vernachlässigen. Flächen, die das Strömungsgebiet in der Höhenkoordinate abgrenzen, sind als symmetrische Randbedingung berücksichtigt. Die Simulation wird stationär mit dem sogenannten 'High Resolution Scheme' für advective und turbulente Terme diskretisiert. Dieses Diskretisierungsschema schaltet automatisch zwischen erster und zweiter Genauigkeitsordnung um, je nach Stabilität der Simulation in den Strömungsbereichen. Zur Überprüfung der Konvergenz der Simulation ist das 'Imbalance' Kriterium verwendet worden. Dieses summiert alle Zu- und Abflüsse inklusive der Flüsse beim Phasenaustausch über das Strömungsvolumen auf. Der Absolutdruck im Strömungsvolumen beträgt 1 bar. Als Randbedingungen an den Einritten wurden Massenströme normal zur Eintrittsfläche und die Gemischtemperatur vorgegeben. Das Gemisch besteht aus Luft und Wasserdampf an den Einritten 1 und 2 sowie zusätzlich zum Luft/ Wasserdampfgemisch aus einer flüssigen Tropfenphase an Eintritt 3, vgl. Tab. 3.6. Tropfen sind monodispers mit einem konstanten Durchmesser berücksichtigt. Das getestete Phasenaustauschmodell für die Spraykühlung wird mithilfe selbsterstellter Benutzerfunktionen in den Code implementiert. Die Simulation ist auf dem Höchstleistungsrechner CRAY XC40 'Hazel Hen' unter Verwendung von 240 Kernen am HLRS

durchgeführt worden.

Ergebnisse

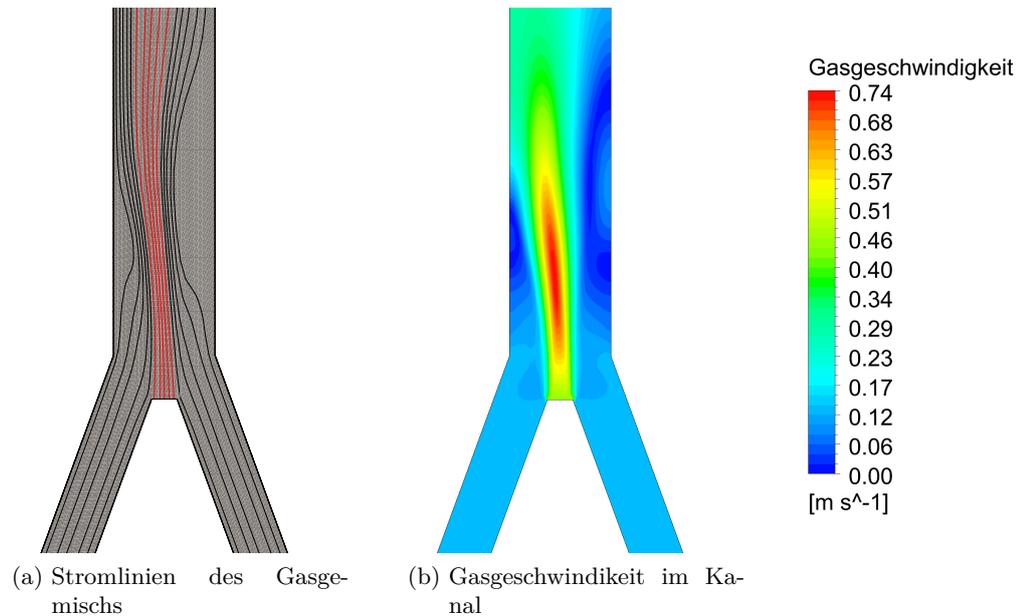


Abbildung 3.10: Darstellung der Gasstromlinien und der Gasgeschwindigkeit im Mischkanal

Das Strömungsfeld des Kanals zeichnet sich durch einen Mischvorgang aller eingeführter Ströme direkt nach deren Zusammenkunft am Beginn des Strömungsvolumens aus. Abb. 3.10 a) zeigt die Interaktion der Gasgemische aus den Einritten 1 und 2 (schwarze Stromlinien) sowie Eintritt 3 (rote Stromlinien). Während der Mischung werden alle Ströme in den gemeinsamen Kanal umgelenkt, was zu einer Einschnürung der Strömung führt. An der Einschnürungsstelle kommt es durch den Zusammenfluss der Massenströme zu einer Beschleunigung der Strömung. Die Geschwindigkeitserhöhung ist in Abb. 3.10 b) ersichtlich. Im Bereich der Strömungseinschnürung und der Geschwindigkeitserhöhung unter Ausmischung von Geschwindigkeitsunterschieden und Wasserdampfkonzentrationen kommt es zur Kondensation von Wasserdampf aus der Gasphase zu kleinen Tropfen. Die Kondensationsrate der Mischung ist in Abb. 3.11 dargestellt. Die Kondensationsrate ist zu Beginn des Ausmischvorgangs höher und nimmt dann mit zunehmender Kanallänge bis zum Ende des Kondensationsvorgangs ab. Ebenfalls mischen sich die Temperaturunterschiede der Massenströme im Einschnürungsbereich aus, siehe Abb. 3.12. Die beiden seitlichen Luftströme treten mit 38°C in den Kanal ein und

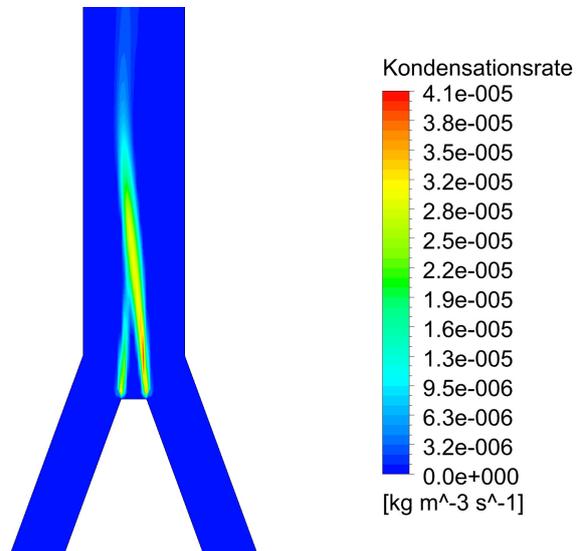


Abbildung 3.11: Darstellung der Kondensationsrate im Mischkanal

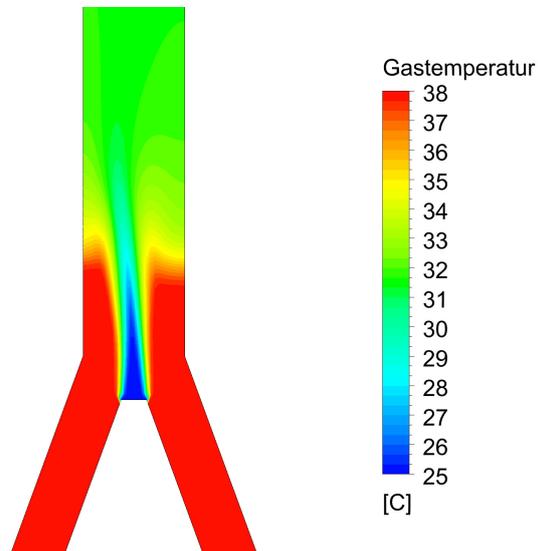


Abbildung 3.12: Darstellung der Gastemperatur im Mischkanal

mischen sich mit dem kühleren feuchten Luftstrom mit 25°C. Es kommt zu einer sehr schnellen Ausmischung und einer theoretischen Mischungstemperatur von 32,5°C. Die Mischungstemperatur kann aus dem Mollier-Diagramm abgelesen werden. In der nachfolgenden Tab. 3.7 sind die aus der Simulation bestimmten Werte für $\vartheta_{\text{Austritt}}$ und x_{Austritt} ersichtlich. Die gezeigten Ergebnisse berücksichtigen verschiedene Tropfendurchmesser.

Tabelle 3.7: $\vartheta_{\text{Austritt}}$ und x_{Austritt} für verschiedene Tropfendurchmesser d_L

	$d_L = 100 \text{ } [\mu\text{m}]$	$d_L = 300 \text{ } [\mu\text{m}]$	$d_L = 500 \text{ } [\mu\text{m}]$
$x_{\text{Austritt}} \text{ } [\text{g}/\text{kg}_{\text{trockene Luft}}]$	32,6	32,3	32,2
$\vartheta_{\text{Austritt}} \text{ } [^\circ\text{C}]$	32,64	32,34	31,94

Verglichen mit den analytischen Ergebnissen $\vartheta_{\text{Austritt}}$ und x_{Austritt} aus dem Mollier-Diagramm zeigen die Simulationen eine sehr gute Übereinstimmung. Der Wassergehalt kann für alle Tropfendurchmesser in den Simulationen sehr gut nachgerechnet werden. Die Simulationswerte weichen nur vernachlässigbar gering vom analytischen Wert ab. Wird die Mischungstemperatur am Austritt des Kanals $\vartheta_{\text{Austritt}}$ für die Simulation mit dem theoretischen Wert aus dem Mollier-Diagramm verglichen, ergibt sich wie beim Wassergehalt eine gute Übereinstimmung. Die Temperaturen weichen nur sehr gering ab. Der Einfluss der Tropfengröße ist im untersuchten Testfall vernachlässigbar.

Alles in allem zeigt das entwickelte Modell eine gute Übereinstimmung mit der Theorie und kann in den Validierungsrechnungen angewandt werden.

3.3.2 Auswaschen von Partikeln in einem Kanal

Auswaschkanal

Der in Abb. 3.13 schematisch dargestellte Kanal dient dazu, dass vorgestellte Auswaschmodell für Partikel in einer einfachen Kanalströmung auf seine physikalische Arbeitsweise zu untersuchen. Eine physikalische Beurteilung des Auswaschmodells ist aufgrund der verwendeten empirischen Beschreibung der berücksichtigten Auswaschmechanismen unumgänglich, da getestet werden muss, ob die Korrelationen für die Anwendung in kerntechnischen Sicherheitsrechnungen verlässlich arbeiten. Die Grundlage für die Untersuchung bildet das von Lim et al. [56] und Cheng [17] verwendete Kanalexperiment. Der zylindrische Kanal hat einen Rohrdurchmesser von 0,45 m, eine Länge von 11 m und schließt ein Volumen von ca. 1,8 m³ ein. In der Rotationsachse des Rohrs befindet sich eine Düse, welche ein Wasserspray in den Kanal injiziert. Die Düse hat einen Austrittsdurchmesser von 1,18 mm. In den Kanal wird gemäß Abb. 3.13 von rechts nach links ein Aerosol eingeleitet, welches dann auf ein Wasserspray trifft, dass entgegen des

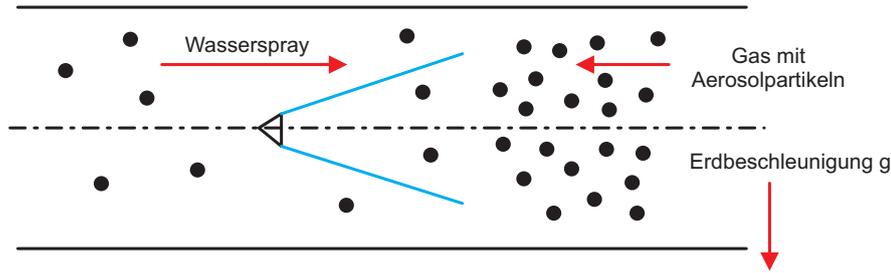


Abbildung 3.13: Schematische Darstellung des Auswaschkanals mit im Zentrum befindlicher Auswaschdüse

Aerosols in den Kanal eingebracht wird. Beim Kontakt von Aerosol und Spray werden Partikel von einzelnen Wassertropfen aufgenommen und aus dem Aerosol entfernt. Das Aerosol verlässt den Kanal mit einer niedrigeren Partikelkonzentration bedingt durch den Auswaschvorgang. Um die Güte des Auswaschvorgangs zu beurteilen, wird ein Auswaschwirkungsgrad $\eta_{Auswasch}$ definiert. Er beschreibt das Verhältnis von noch im Gas befindlichen Aerosolpartikeln zu den ursprünglich am Kanaleintritt vorhandenen Partikeln. Ein Vergleich mit experimentellen Daten soll die Wirksamkeit des entwickelten Auswaschmodells zeigen.

Randbedingungen des Experiments

Insgesamt werden vier verschiedene Varianten des Auswaschexperiments nachgerechnet, siehe Tab. 3.8. Die einzelnen Varianten unterscheiden sich in der Aufweitung des Wasserspraywinkels durch verschiedene Düsen volumenströme und in den ausgestoßenen Tropfendurchmessern. Als Aerosolpartikel werden kleine Kohlepartikel verwendet, welche über alle Versuchsvarianten einen konstanten monodispersen Durchmesser von $1,65 \mu\text{m}$ haben. Der partikelbeladene Gasmassenstrom hat einen ebenfalls über alle Versuchsvarianten konstanten Massenstrom von $0,1 \text{ kg/s}$. Der Gasstrom führt am Kanaleintritt einen Aerosolpartikelmassenstrom von 2 g/s mit sich.

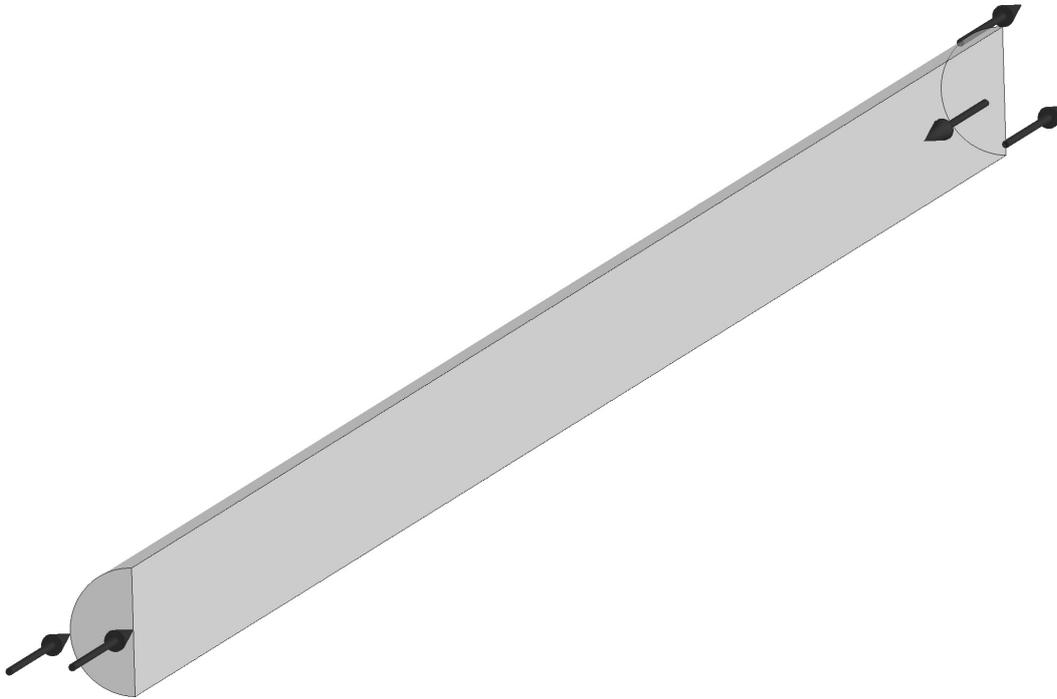
Tabelle 3.8: Eintrittsrandbedingungen des Sprays für den Auswaschkanal

Versuch	Spraywinkel [°]	Tropfendurchmesser [μm]	Volumenstrom [m^3/s]
1	28	600	0,031
2	30	470	0,040
3	32	450	0,049
4	32	440	0,057

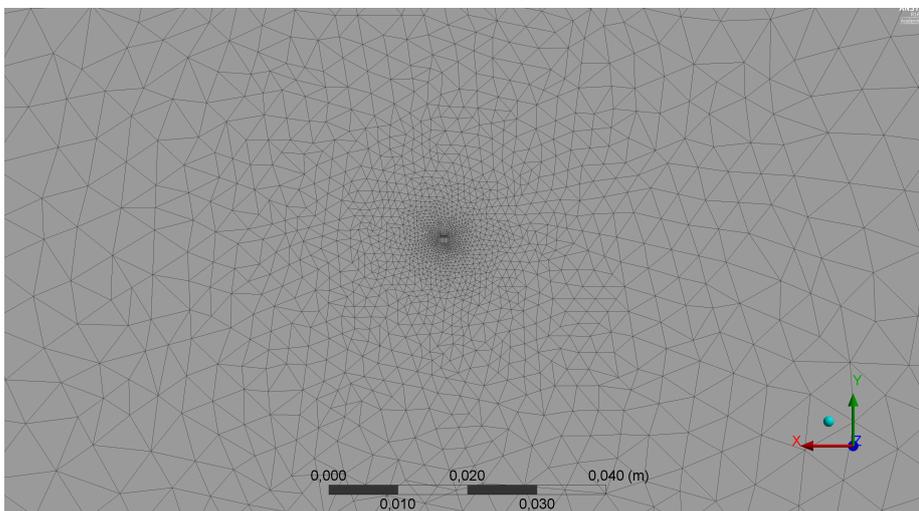
Numerisches Setup

Der vorliegende Auswaschkanal wird in den stationären Simulation zur Hälfte (180°) modelliert. Die andere Hälfte wird über die Annahme symmetrischer Randbedingungen berücksichtigt, siehe Abb. 3.14 a). Die Symmetriebedingung in der Simulation läuft genau durch die Rotationsachse und durch die dort angebrachte Spraydüse. Das berücksichtigte Strömungsfeld ist dreidimensional und in jede Raumrichtung ausreichend aufgelöst. Insgesamt tragen 7,9 Millionen tetraedrische Volumenelemente zur Auflösung bei. Besonders zu berücksichtigen ist die Auflösung der Düse, da sie mit ihrem Durchmesser von 1,18 mm im Vergleich zum Rohr sehr klein ist. Der Düsenbereich ist deshalb in den Simulationen besonders aufgelöst, siehe Abb. 3.14 b).

Der Auswaschkanal ist so modelliert, dass Strukturregionen wie die Rohrwand oder die Düsenwand vernachlässigt werden, es ist nur das Strömungsvolumen vernetzt. Die Simulation wird stationär mit dem sogenannten 'High Resolution Scheme' für advective und turbulente Terme diskretisiert. Dieses Diskretisierungsschema schaltet automatisch zwischen erster und zweiter Genauigkeitsordnung um, je nach Stabilität der Simulation in den Strömungsbereichen. Zur Überprüfung der Konvergenz der Simulation ist das 'Imbalance' Kriterium verwendet worden. Dieses summiert alle Zu- und Abflüsse inklusive der Flüsse beim Phasenaustausch für Masse und Impuls über das Strömungsvolumen auf. Der Absolutdruck im Strömungsvolumen beträgt 1 bar. Der Eintritt am Ende des Rohrquerschnitts führt ein Gemisch aus Luft und Partikel in den Kanal ein. Als Randbedingung hierfür wird eine Normalgeschwindigkeit von 0,5 m/s über alle Simulationen berücksichtigt. Aufgrund der sehr kleinen Partikeldurchmesser von $1,65 \mu\text{m}$ im Aerosol werden diese als Teil des Gases betrachtet und vernachlässigen eine Relativgeschwindigkeit zwischen Gas und Partikel. Beide Bestandteile nutzen das gleiche Geschwindigkeitsfeld. Tropfen werden mit einem eigenständigen Geschwindigkeitsfeld beschrieben. Die Tropfenphase ist monodispers mit konstantem Durchmesser modelliert. Die Ansammlung an Wasser im Kanal wird nicht berücksichtigt, weshalb eine Massensenke für die flüssige Phase an der Kanalwand berücksichtigt ist. Die Simulation berücksichtigt das in Abschnitt 2.4 beschriebene Auswaschmodell. Die Simulation wird unter Vernachlässigung von Temperaturunterschieden isotherm durchgeführt.



(a) Symmetriebedingung des Strömungskanals



(b) Auflösung des Düsenbereichs im Kanal

Abbildung 3.14: Darstellung des in der Simulation verwendeten Strömungskanals

Ergebnisse

Abb. 3.15 zeigt schematisch die Ausbildung des Sprays im Auswaschkanal für die Spraykonfiguration von Versuch 1, vgl. Tab. 3.8. Zur Visualisierung wird der volumetrische Phasengehalt des Wassers α_L verwendet. Das Wasserspray tritt mit dem vorgegeben Aufweitungswinkel entgegen der partikelbeladenen Gasströmung in den Kanal ein. Aufgrund der Schwerkraft senkrecht zum Sprayauswurf wird dieser mit zunehmendem Abstand zur Düse im Kanal nach unten abgelenkt, bis er am Kanalgrund auf die Rohrwand trifft. Im Randbereich des Sprays sinkt der volumetrische Phasengehalt des Wassers ab, da sich in diesem Bereich nur noch wenige Tropfen befinden.

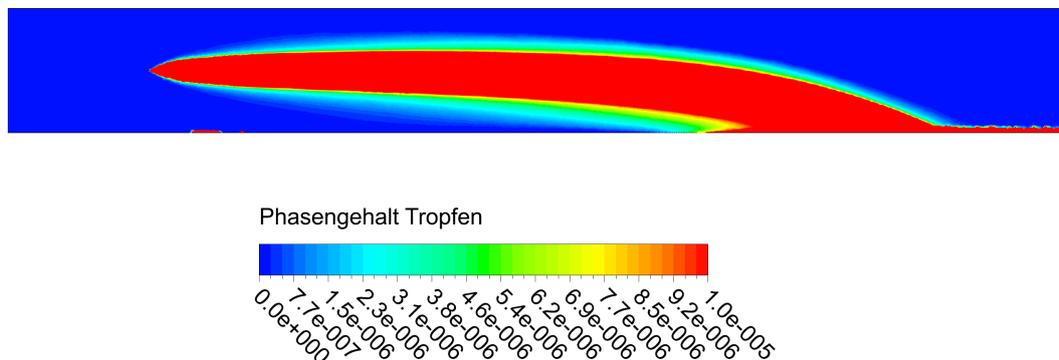


Abbildung 3.15: Darstellung des Sprays mithilfe des flüssigen Phasengehalts (Spray strömt von links nach rechts, das Aerosol von rechts nach links)

In Abb. 3.16 sind neben der Visualisierung des Spraykegels durch α_L die Stromlinien des Aerosols dargestellt. Durch die Sprayausbreitung wird ein Teil des Aerosols in den oberen Kanalbereich umgelenkt, während der andere Teil durch das Spray hindurchströmt und aufgrund der entgegengesetzten Geschwindigkeit des Sprays stark verwirbelt wird. Unterhalb des Sprays bildet sich eine Rezirkulationsströmung aus. Der Bereich mit starker Turbulenz geht einher mit dem Bereich der höchsten Auswaschraten.

Abb. 3.17 zeigt den Partikelmassenstrom in der Einheit kg/s. Die Strömung tritt mit einem konstanten Partikelanteil über den Strömungsquerschnitt in den Kanal ein und reduziert sich aufgrund des Auswaschvorgangs im Verlauf der Durchströmung. Die höchste Reduzierung der Partikel ergibt sich im stark turbulenten Bereich. In diesem Bereich ist eine lokale Reduzierung von bis zu 50 % gegenüber der ursprünglichen Partikelbeladung möglich. Im Bereich nach der Düse vermischen sich die verschiedenen Partikelkonzentrationen der unterschiedlich stark ausgewaschenen Bereiche wieder. Das beschriebene Strömungsverhalten ist in sämtlichen durchgeführten Simulationen unter Verwendung der beschriebenen Variation der Randbedingungen aus Tab. 3.8 ersichtlich.

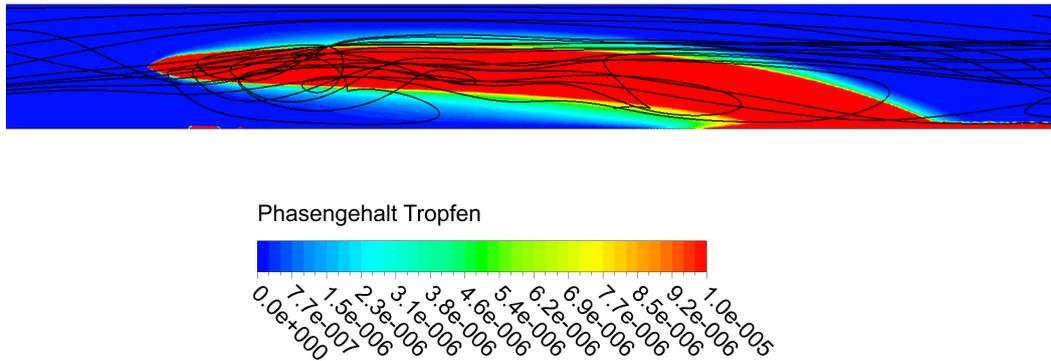


Abbildung 3.16: Darstellung des Sprays mithilfe des volumetrischen Phasengehalts der Tropfen und Stromlinien der Gasphase (inklusive Aerosolpartikel)

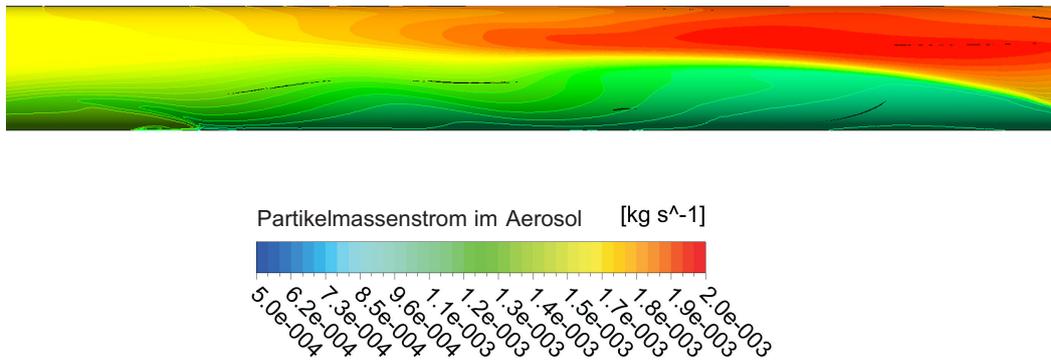


Abbildung 3.17: Darstellung des Partikelmassenstroms im Auswaschkanal

Der bisher qualitativ beschriebene Auswaschvorgang wird in Abb. 3.18 quantitativ mit experimentellen Daten für den Auswaschwirkungsgrad $\eta_{Auswasch}$ verglichen. Auf der x-Achse ist dabei der Volumenstrom der Spraydüse aufgetragen. Die y-Achse ist durch $\eta_{Auswasch}$ repräsentiert. Insgesamt gibt es zu jedem Volumenstrom drei experimentelle Werte (o) und einen Wert aus der Simulation (x). Der Vergleich zeigt, dass das entwickelte Modell den Auswaschprozess sehr gut nachrechnen kann. Die Konfiguration mit dem niedrigsten Düsenvolumenstrom überschätzt das Auswaschverhalten etwas, während für die drei weiteren untersuchten Randbedingungen eine sehr gute Übereinstimmung erzielt werden kann. Die Ergebnisse der Simulationen liegen innerhalb der Streuung der experimentellen Werte. Der erfolgreiche Test des Auswaschmodells zeigt dessen Verwendbarkeit zur numerischen Beschreibung des PartikelAuswaschvorgangs in THAI.

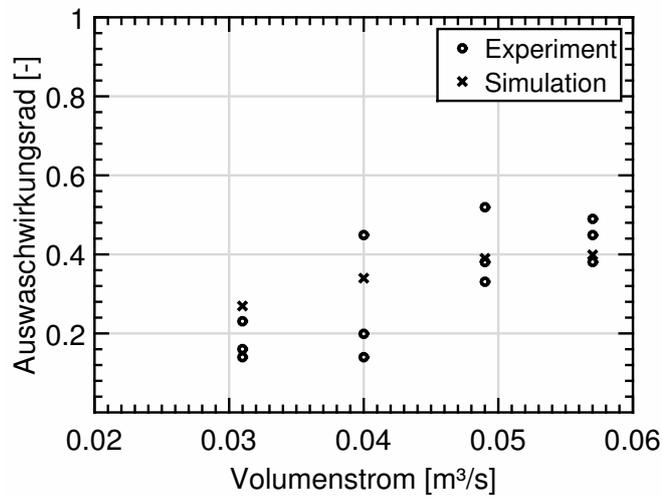


Abbildung 3.18: Vergleich des Auswaschwirkungsgrads in Experiment und Simulation

4 Validierung

Die Validierung der Modelle zur Spraykühlung und zur Auswaschung von Aerosolpartikeln wird mithilfe von Experimenten aus dem THAI Programm durchgeführt. Die Simulation mit Spraykühlungsmodell wird mit dem Versuch HD-31-SE [29] validiert, während das Partikel auswaschmodell mit Versuch AW 4 [77] überprüft wird. Die folgenden Abschnitte beschreiben beide Experimente mit den relevanten Rand- und Initialbedingungen, die Umsetzung im Setup der ANSYS CFX Simulationen und die erzielten Ergebnisse. Der Übersichtlichkeit halber wird zuerst die Spraykühlung abgehandelt, danach erfolgt die Diskussion der Aerosolpartikel auswaschung.

4.1 Validierung des Spraykühlungsmodells

4.1.1 Validierungsexperiment THAI HD-31-SE

Während der Spraykühlung [29] wird über eine Vollkegeldüse ein konstanter Wassermassenstrom von 1 kg/s und 20°C in den THAI Behälter eingedüst. Die Vollkegeldüse ermöglicht eine gleichmäßige Tropfenverteilung über die Sprayfläche und befindet sich in der Rotationsachse des Behälters in einer Höhe von 7,4 m ausgehend vom THAI Sumpf, (siehe Abb. 4.1 a). Die Erläuterung der Bestimmung der Spraytropfengröße der verwendeten Vollkegeldüse ist bereits in Abschnitt 3.2.2 erfolgt. Außer der Spraydüse befinden sich keine weiteren Einbauten in THAI. Während der Versuchsdurchführung verbleibt das eingesprühete Wasser aufgrund der geschlossenen Konfiguration in THAI und bildet einen Sumpf. Vor Beginn des Experiments wird der THAI Behälter mit feuchter Luft gefüllt, sodass sich ein Gemisch aus 75 vol.% Luft und 25 vol.% Wasserdampf ergibt. Die feuchte Luft wird zu Beginn des Experiments im kompletten Strömungsvolumen auf 90°C erhitzt. Dazu ist THAI mit einem geschlossenen Thermoölssystem ausgestattet, welches sich an den Außenwänden des Behälters befindet und zum Kühlen bzw. zum Erhitzen der Gasatmosphäre und der Wände verwendet wird. Die Außenwände werden während der Dauer des Experiments konstant auf einer Temperatur von 90°C gehalten. Um die Wärmeverluste in THAI so gering wie möglich zu halten, ist dieser von einer Isolierung aus Steinwolle umgeben. Die Gasatmosphäre wird auf einen Absolutdruck von 1,5 bar verdichtet. Die Versuchstransiente beginnt mit der Sprayaktivierung für insgesamt 160 s. Durch den Einsprühvorgang verringern sich die Gastemperatur und der Druck in THAI stetig. Die Reduzierung der Gastemperatur wird über Thermolemente erfasst, deren Positionen in Abb. 4.1 ersichtlich sind. Die Thermolemente sind in THAI auf verschie-

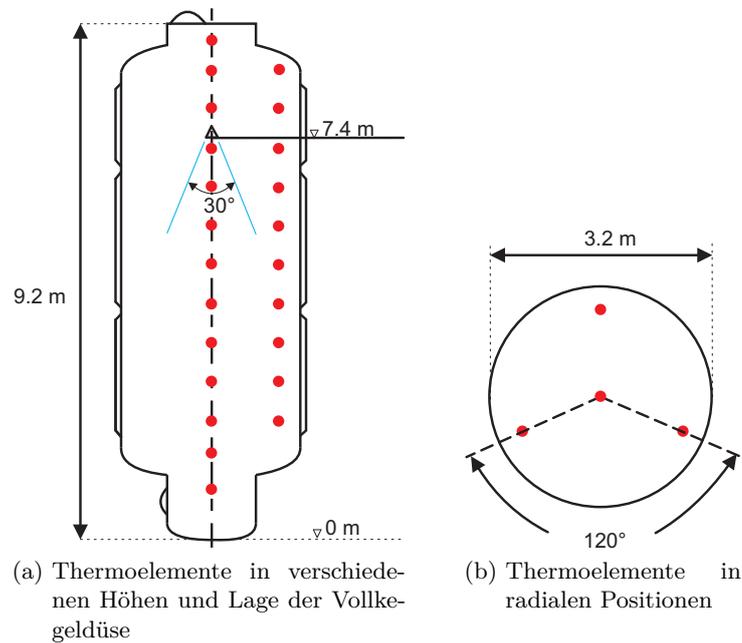


Abbildung 4.1: Anordnung von Thermoelementen in THAI

denen Höhen mit einem Abstand von 0,7 m angebracht. Auf jeder Höhe befinden sich insgesamt drei im Abstand von 120° . Jedes einzelne Thermoelement hat einen Abstand von 0,4 m zur Behälterwand. Zudem befindet sich auf jeder Höhe in der Rotationsachse ein Thermoelement, sodass auf jeder Höhe insgesamt vier Messstellen vorhanden sind. Die Thermoelemente haben eine Messgenauigkeit von $\pm 0,3$ K, Messelemente für den Druck schwanken um $\pm 0,0075$ bar. Da es sich beim Abkühlungsprozess um einen schwach kompressiblen Vorgang handelt, ist es ausreichend, den Absolutdruck an einer Messstelle zu messen. Zur Validierung der Simulation werden Gastemperaturen verschiedener Messpunkte und der Absolutdruck verwendet. Insgesamt wurde der Versuch von den Experimentatoren einmal durchgeführt, weshalb an dieser Stelle keine Aussage zur Reproduzierbarkeit gemacht werden kann. Ebenso ist der Einfluss von Messungenauigkeiten in der Versuchsdokumentation nicht aufgeführt.

4.1.2 Numerisches Setup in ANSYS CFX

Die Validierungsrechnungen verwenden ein dreidimensionales Netz des THAI Behälters. Eine ausführliche Beschreibung des Netzes ist in Abschnitt 3.1 erfolgt. Das Netz wird mit drei verschiedenen Auflösungen getestet, um den Einfluss der Gitterauflösung auf die Ergebnisse der Simulation zu untersuchen. Tab. 4.1 zeigt die untersuchten Abstufungen. Eine ausreichende Auflösung des Strömungsvolumens ist mit Netz 2 gewährleistet.

Tabelle 4.1: In einer Studie untersuchte Netzauflösungen von THAI

Netz	Anzahl Volumenelemente (Tetraeder)
Netz 1	3.083.065
Netz 2	8.480.461
Netz 3	16.278.647

Aufgrund der komplexen Strömung in THAI werden die Ergebnisse der Gitterstudie am Ende des Ergebnisabschnitts 4.1.3 beschrieben.

Die transienten Simulationen werden mit einem gleichbleibenden Zeitschritt von 0,01 s durchgeführt. Advektive Terme der Erhaltungsgleichungen werden durch das 'High resolution scheme' diskretisiert. Dieses Schema berücksichtigt eine Mischung aus den Genauigkeiten erster und zweiter Ordnung. An Stellen im Netz, an denen eine Genauigkeit zweiter Ordnung zu Instabilitäten führt, wird die Genauigkeit von ANSYS CFX automatisch auf die erste Ordnung reduziert. Zeitliche Terme werden mit einem rückwärtsgewandten Euler Schema mit einer Genauigkeit von zweiter Ordnung diskretisiert. Die Simulationen berücksichtigen insgesamt zwei Phasen, eine Tropfen- und eine Gasphase. Die Gasphase ist ein Gemisch aus Luft und Wasserdampf. Die Mischung ist variabel gewählt, sodass sich das Mischungsverhältnis durch den Phasenaustausch bei Kondensation bzw. Verdampfung ändern kann. Dies ist notwendig, da sich der Anteil des Wasserdampfs mit dem Phasenaustausch ändert. Die initiale Verteilung der beiden Gasbestandteile zu Beginn der Simulation ist an das Experiment mit 75 vol.% Luft und 25 vol.% Wasserdampf angelehnt. Die Temperatur des Gases beträgt dabei ebenso wie die der Wand konstant 90°C. Die Tropfenphase ist als reines Wasser und in zwei verschiedenen Konfigurationen modelliert. Beide Konfigurationen sind in Abschnitt 3.2.2 beschrieben worden. Die erste Konfiguration berücksichtigt eine monodisperse Tropfengröße. Die Tropfengröße wird dabei mit dem Sauterdurchmesser $d_{32} = 830 \mu\text{m}$ angenommen. Die zweite Konfiguration wird durch eine Tropfengrößenverteilung repräsentiert, bei der insgesamt fünf verschiedene Tropfendurchmesser mit je einem eigenen Geschwindigkeitsfeld berücksichtigt sind, siehe Tab. 3.1. Sauterdurchmesser und polydisperse Tropfenverteilung sind den experimentellen Daten der Versuchsdokumentation entnommen. Eingedüst wird die Tropfenphase mit einer konstanten Temperatur von 20°C. Um den numerischen Aufwand zu reduzieren, ist die Modellierung von Wasseransammlungen in THAI vernachlässigt. Der Wandbereich, an dem sich im THAI Sumpf Wasser ansammeln würde, wird als 'Degassing' modelliert. Es entsteht so eine Massen-, Impuls- und Energiesenke für die Tropfenphase. Die Funktion dieser Randbedingung ist in Abschnitt 3.2.4 näher erläutert. Die simulierte Transiente hat eine Dauer von 160 s.

4.1.3 Ergebnisse

Qualitative Darstellung des Strömungsfelds

Startet der Einsprühvorgang von Wasser in den THAI Behälter, entsteht durch die verwendete Düse ein Spraykegel mit einem Spraywinkel von 30° . Aufgrund der Einsprühgeschwindigkeit und der Erdbeschleunigung bewegen sich die Tropfen in den Sumpfbereich des THAI Behälters. Der Spraykegel ist in Abb. 4.2 für die Tropfengrößenklassen 0,139 mm, 0,691 mm und 1,243 mm mittels des volumetrischen Phasengehalts der Tropfenphase α_L dargestellt.

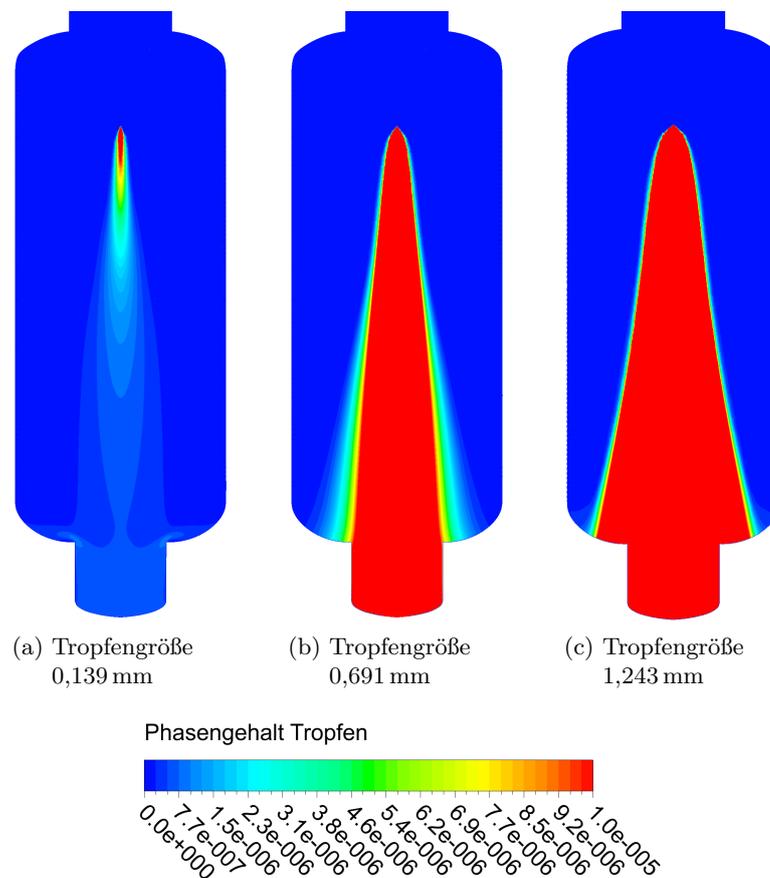


Abbildung 4.2: Darstellung des Spraykegels durch den volumetrischen Phasengehalt für die Tropfengrößenklassen 0,139 mm, 0,691 mm und 1,243 mm

Aus der Darstellung ist ersichtlich, dass der gebildete Spraykegel mit zunehmendem Tropfendurchmesser größer ausgebildet wird. Grund dafür ist die Massenträgheit der

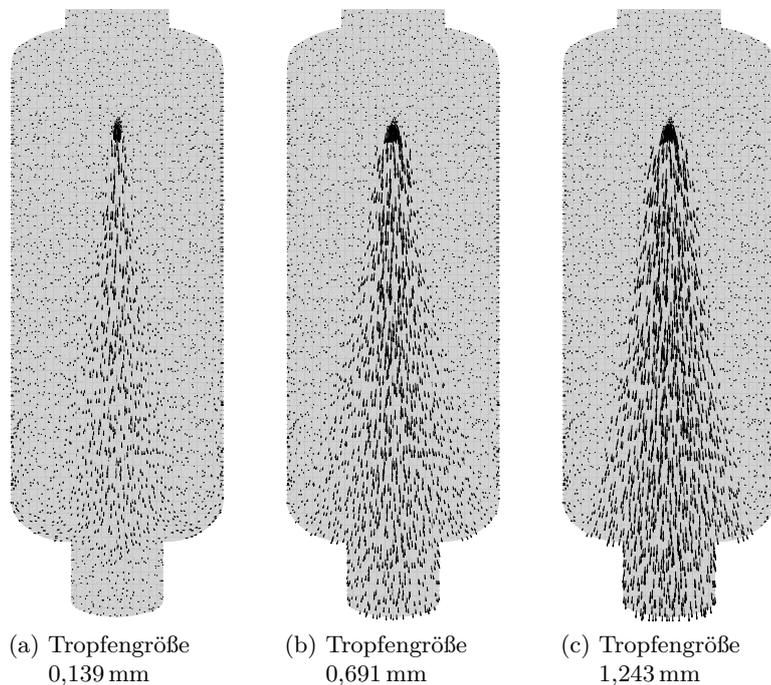


Abbildung 4.3: Darstellung der Geschwindigkeitsvektoren für Tropfengrößenklassen 0,139 mm, 0,691 mm und 1,243 mm

Tropfen, die mit größerem Durchmesser und der damit verbundenen größeren Masse ansteigt. Größere Tropfen werden im Vergleich zu kleineren durch die Erdbeschleunigung wesentlich später zum Sumpf hin umgelenkt. Dies bewirkt eine länger anhaltende Ausbildung des Spraykegels durch den von der Düse aufgeprägten Spraywinkel. Abb. 4.3 zeigt für die bereits eingeführten Tropfengrößenklassen die Ausbildung des jeweiligen Tropfengeschwindigkeitsfelds.

Abb. 4.4 a) zeigt zweidimensional die Geschwindigkeitsvektoren der Gasphase. Durch die Widerstandskraft, die zwischen eingedüsten Tropfen und dem Gas wirkt, wird das Gas in THAI in Bewegung versetzt. In der Spraykernströmung zeigen die Geschwindigkeitsvektoren des Gases in dieselbe Richtung wie die der Tropfen. Trifft die Gasströmung im Sumpfbereich auf die Behälterwand, wird diese umgelenkt. Die Umlenkung findet im Sumpf entlang der Behälterwand oder bereits oberhalb der Sumpfverjüngung statt. Dies ist in der zweidimensionalen Darstellung durch einen Wirbel links bzw. rechts der Sprayströmung zu erkennen. Ist die Gasströmung umgelenkt, so bewegt sich das Gas an der Wand entlang in den oberen Bereich von THAI bis auf die Höhe, in der die Vollkegeldüse angebracht ist. Im Bereich der Vollkegeldüse wird das Gas, welches an der Wand entlangströmt, wieder in die Kernströmung der Düse eingesogen und bewegt sich

ein weiteres Mal mit der Tropfenströmung nach unten. Die Gasströmung mit moderaten Strömungsgeschwindigkeiten bis 18 m/s ist auf den Bereich unterhalb der Düse begrenzt. Oberhalb der Düse treten vernachlässigbar kleine Strömungsgeschwindigkeiten auf. Auf Basis der Analyse des Strömungsgebiets kann dieses in drei Regionen eingeteilt werden, siehe Abb. 4.4 b).

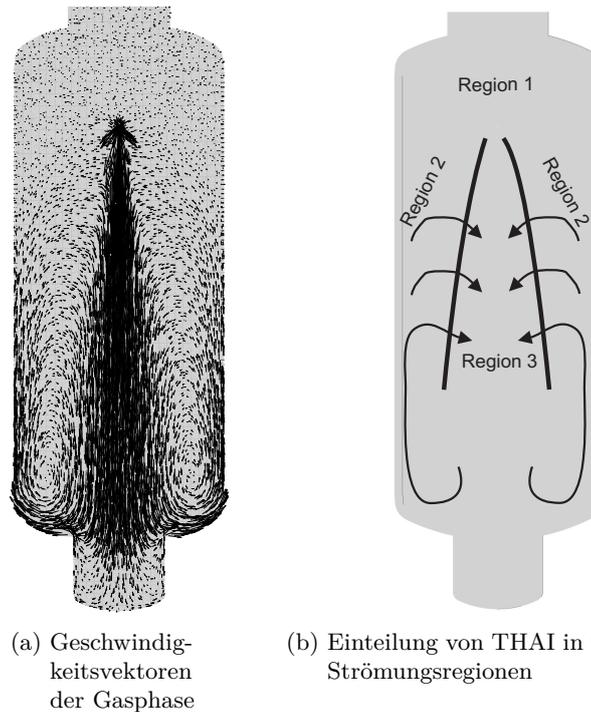


Abbildung 4.4: Darstellung des Geschwindigkeitsfelds in der Gasphase und Einteilung in Strömungsregionen

- Region 1: Dieser Bereich stellt den Strömungsbereich oberhalb der Spraydüse dar. Diese Region ist gekennzeichnet durch eine sehr geringe Strömungsgeschwindigkeit und damit verbunden einem sehr geringen Mischungsverhalten. Es gibt keine direkte Berührung von Gas und Spraytropfen.
- Region 2: Dieser Bereich ist gekennzeichnet durch die Umlenkung der Strömung aus dem Sumpf. Es gibt keinen direkten Kontakt zwischen Spraytropfen und Gas, die Strömung ist jedoch gekennzeichnet durch eine starke turbulente Vermischung.
- Region 3: Dieser Bereich beinhaltet den direkten Kontakt zwischen Spraytropfen und Gas. Hier ergeben sich die stärksten Turbulenzen und auch die höchsten Gasgeschwindigkeiten.

Ergebnisse unter Verwendung des Zwei-Fluid Modells

In diesem Abschnitt wird der Verlauf der Gasabkühlung in THAI beschrieben. In Abb. 4.5 ist die Verteilung der Gastemperatur zu verschiedenen Zeitschritten dargestellt. Die Temperaturverteilung zu Beginn der Simulation bei $t = 0$ s zeigt Abb. 4.5 b). Die Temperaturverteilung zu Beginn der Simulation bei $t = 0$ s zeigt Abb. 4.5 b). Die Temperatur bei $t = 0$ s beträgt gemäß den Initialbedingungen 90°C im kompletten THAI Behälter. Nach Beginn der Sprayeindüsung ergibt sich zuerst eine Abkühlung des Gases im Kern des Spraykegels, siehe Abb. 4.5 c) und d). Durch die Umlenkung des Gasstroms im Sumpfbereich breitet sich die Abkühlung weiter in den Bereich ohne direkte Tropfeneinwirkung aus. Die Gasumlenkung im Sumpf und die Strömung an der Wand sorgen dafür, dass abgekühlte Gasmassen überall unterhalb der Düse verteilt werden und sich so das Temperaturniveau absenkt, siehe Abb. 4.5 e), f) und g). Ab einer Sprayzeit von ca. 60 s ergibt sich eine stabile Temperaturschichtung. Oberhalb der Düse befindet sich kaum abgekühltes Gas, unterhalb der Düse kühlt sich das Gas kontinuierlich ab. Stabil ist die Schichtung deshalb, weil die Dichte des Gases im oberen Bereich durch eine höhere Temperatur geringer ist als unterhalb der Düse. Diese Schichtung entsteht dadurch, dass abgekühltes Gas an der Wand durch die Düse in den Spraykegel eingesogen wird, bevor es über die Düse in die Region 1 strömen kann. In Abb. 4.5 a) sind neun Messpunkte dargestellt, die die Gastemperatur (MP806, MP817, MP826, MP827, MP831, MP832, MP836, MP837) und den Absolutdruck (MP071) messen. Bei den dargestellten Messpunkten handelt es sich um eine Auswahl, die die einzelnen Sprayregionen wiedergeben sollen. Abb. 4.6, Abb. 4.7 und Abb. 4.8 zeigen den Vergleich von insgesamt vier Datenreihen für jeden der genannten Messpunkte. Die Datenreihen stehen für die experimentell ermittelten Daten (Exp), eine Simulation mit monodisperser Tropfenkonfiguration (Mono), eine Simulation mit polydisperser Tropfenkonfiguration (Poly) und einer Simulation, die ohne das entwickelte Spraykühlungsmodell durchgeführt wird. In diesem Fall sind die Quellen- und Senkenterme für Masse, Impuls und Energie für das entwickelte Spraykühlungsmodell nicht berücksichtigt. Die Temperaturreduktion der Gasphase wird in diesem Fall lediglich durch einen konvektiven Wärmeübergang zwischen Tropfen und Gas ermöglicht. Das Spraygebiet mit Kontakt zwischen Tropfen und Gas (Region 3) ist durch die Messpunkte MP826, MP831 und MP836 gekennzeichnet. Zu Beginn der Transienten zeigen alle drei Messpunkte ein nahezu gleiches Verhalten für die mono- als auch die polydisperse Spraykonfiguration, siehe Abb. 4.6. Alle Simulationen überschätzen das Abkühlvermögen des Sprays. Ab einer Zeit von ca. 15 s kühlt die monodisperse Simulation mit einem konstanten Abstand zu den experimentellen Daten ab. Die polydisperse Simulation dagegen nähert sich den Messdaten an und kann die Gastemperatur besser wiedergeben. Die bessere Übereinstimmung mit dem Experiment kann dadurch erklärt werden, dass in der polydispersen Spraykonfiguration die Realität durch die Modellierung mehrerer Tropfendurchmesser in einem Spray im Vergleich zu einer monodispersen Größenverteilung besser abgebildet wird.

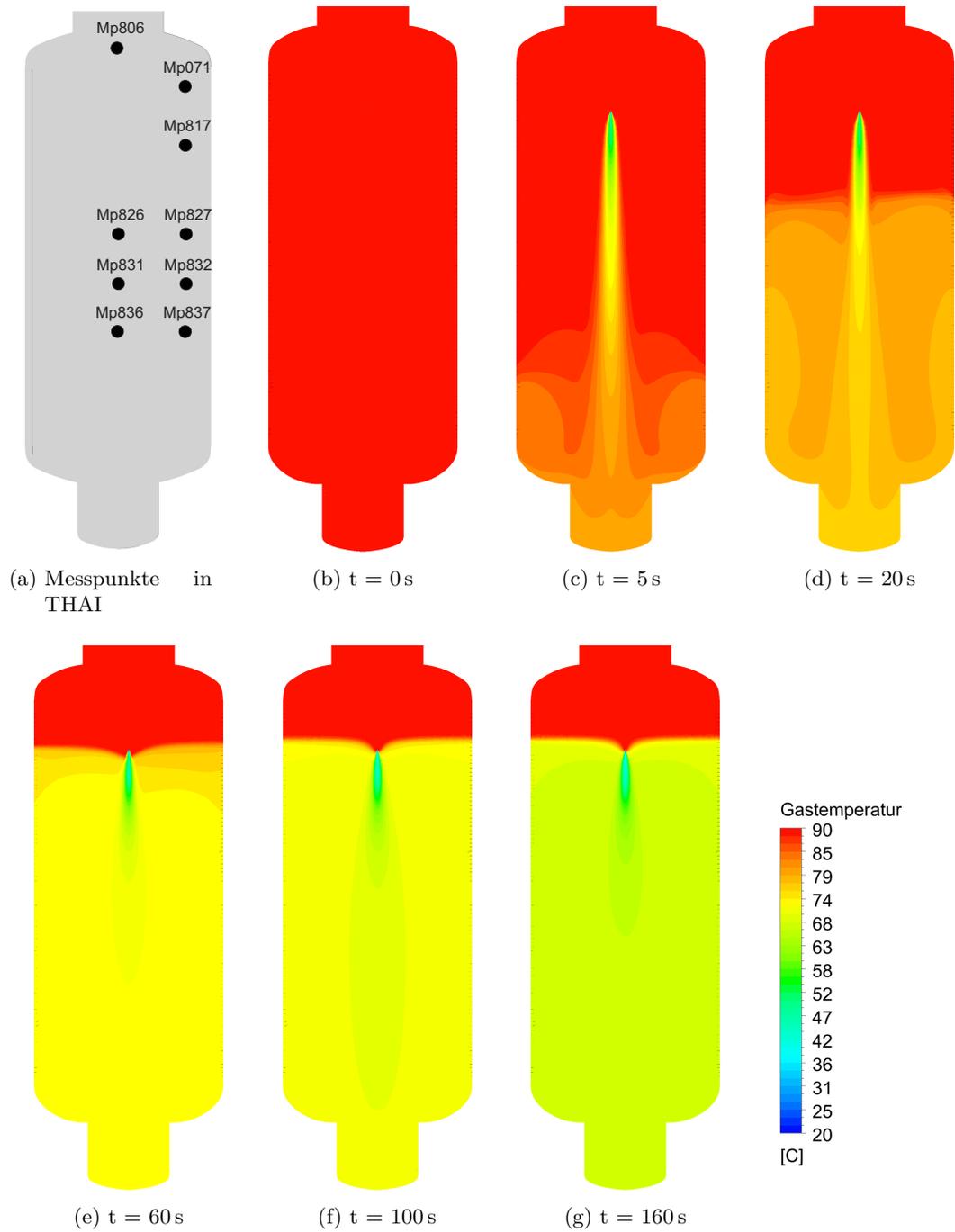


Abbildung 4.5: Darstellung der Gasabkühlung im THAI Behälter

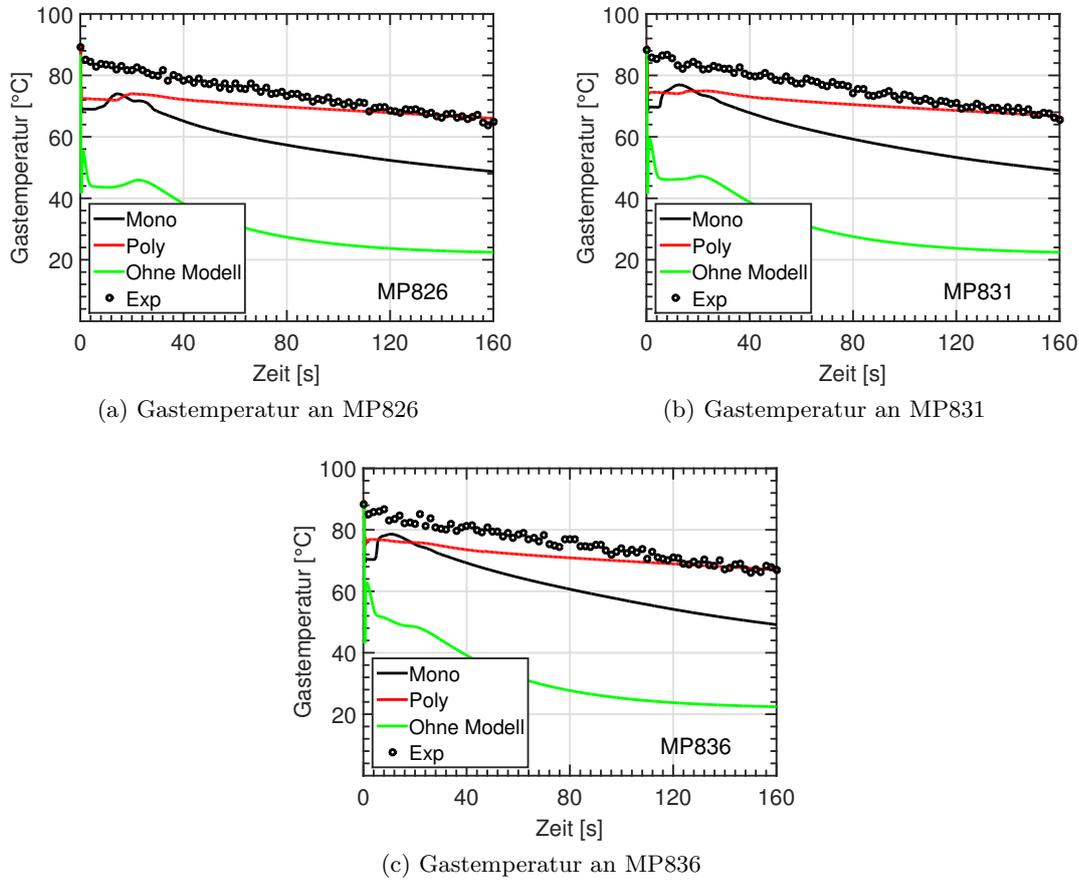
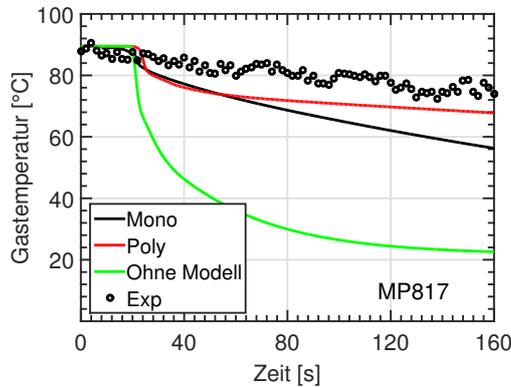


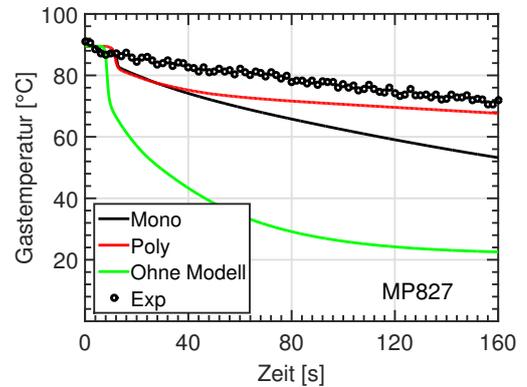
Abbildung 4.6: Vergleich von experimentellen und berechneten Daten in Region 3

Es sind verschiedene Tropfengrößen im Sprayfeld vorhanden, die durch ihre unterschiedlichen Größen ein vielfältigeres Wärmeaufnahmeverhalten aufweisen.

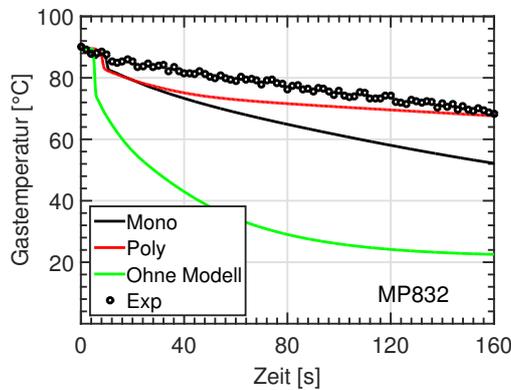
Die Messpunkte MP817, MP827, MP832 und MP837 stehen für die Region 2, die von der Zirkulationsströmung beeinflusst ist, siehe Abb. 4.7. Bis zu einer Simulationszeit von ca. 50 s verhalten sich die mono- und polydisperse Simulation annähernd gleich. Ab diesem Punkt überschätzt die monodisperse Simulation das Abkühlungspotential des Sprays mit einem konstanten Abstand zu den experimentellen Daten. Die polydisperse Tropfenkonfiguration zeigt hier eine wesentlich bessere Übereinstimmung. Alle Plots berücksichtigen neben der mono- und polydispersen Simulation mit Spraykühlungsmodell (Mono, Poly) eine monodisperse Simulation ohne Spraykühlungsmodell (ohne Modell). In dieser Simulation werden der Wärme- und Massenaustausch aufgrund von Kondensation/Verdampfung vernachlässigt. Eine Reduzierung der Gastemperatur und des Absolutdrucks ist hier nur durch einen konvektiven Wärmeübergang zwischen Tropfen/Gas



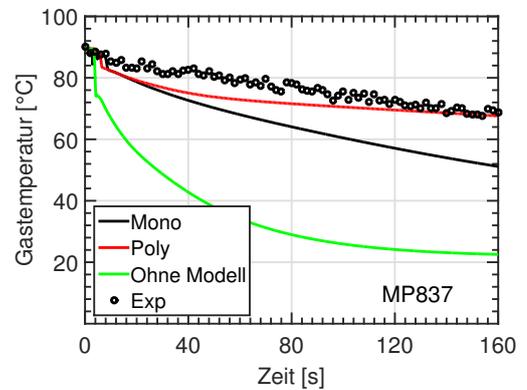
(a) Gastemperatur an MP817



(b) Gastemperatur an MP827



(c) Gastemperatur an MP832



(d) Gastemperatur an MP837

Abbildung 4.7: Vergleich von experimentellen und berechneten Daten in Region 2

möglich. Die Simulation zeigt für keinen der Punkte eine Übereinstimmung mit dem Experiment. Die Gastemperatur wird viel zu niedrig berechnet, da die Kondensation und die dabei freiwerdende latente Wärme nicht berücksichtigt ist. Dieser Wärmestrom, der während der Kondensation frei wird, erwärmt die Tropfenphase zusätzlich zum konvektiven Wärmeübergang. Die wärmer werdenden Tropfen sorgen dafür, dass das konvektive Wärmesenkenpotential reduziert wird und so die Gasphase mit einer Dämpfung abkühlt. Die monodisperse Simulation ohne Implementierung des Spraykühlungsmodells zeigt, dass es zwingend notwendig ist, den Phasenaustausch zu modellieren.

Abb. 4.8 zeigt den Temperaturverlauf der Gasphase an MP806 und den Messpunkt MP071 für den Absolutdruck. Region 1 ist charakterisiert durch eine sehr geringe Strömungsgeschwindigkeit, wodurch die Vermischung kalter und warmer Gasschichten sehr eingeschränkt ist. Die experimentellen Daten zeigen eine geringe Reduktion der Tem-

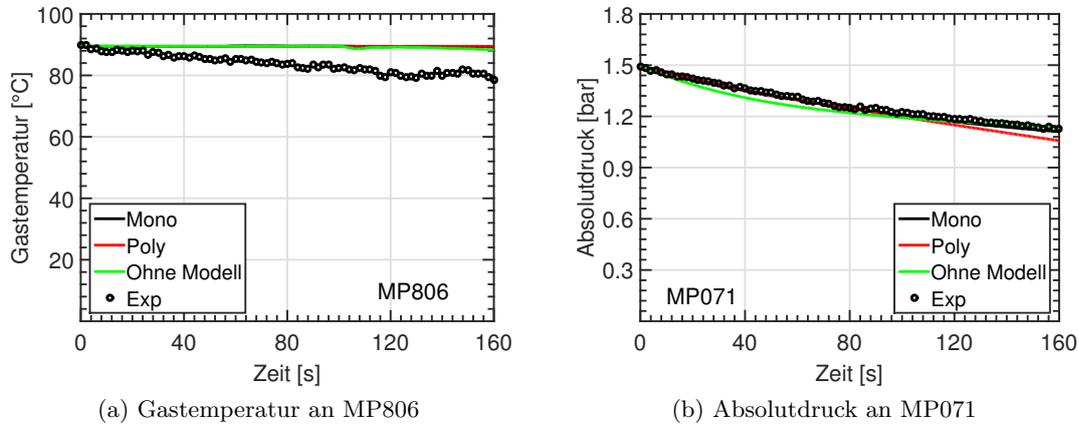


Abbildung 4.8: Vergleich von experimentellen und berechneten Daten in Region 1

peratur, während alle durchgeführten Simulationen diese Abnahme nicht wiedergeben. Eine mögliche Ursache für den Unterschied zwischen Simulation und Experiment kann eine Überschätzung des Rezirkulationsstroms in den Simulationen sein. In der Simulation wird nahezu der komplette Gasstrom aus dem Sumpf in den Düsenbereich eingesogen. Ist dies in Realität nicht so, kann in Region 1 durchaus eine Vermischung von kalten und warmen Gasschichten stattfinden, was zu einer Temperaturreduzierung führt. Eine andere Möglichkeit sind die Wärmeverluste von THAI. Trotz einer Isolationsschicht gehen die Experimentatoren von Wärmeverlusten aus, sodass ein komplett adiabates Verhalten der Wände nicht gegeben ist und dadurch die Gastemperatur abfällt. Abb. 4.8 b) zeigt den Vergleich des Absolutdrucks in THAI zwischen Simulation und Experiment. Die Übereinstimmung mit dem Experiment ist sehr gut. Für diese physikalische Messgröße ist dabei vernachlässigbar, mit welcher Tropfenkonfiguration simuliert wird bzw. ob das Phasenaustauschmodell implementiert ist.

Einen großen Einfluss auf die Kondensation und das Gebiet, in dem Kondensation stattfindet, hat die Tropfentemperatur. Abb. 4.9 zeigt die Tropfentemperatur für die Tropfenklassen 0,139 mm, 0,691 mm und 1,243 mm und das jeweils dazugehörige Kondensationsgebiet. Aus Abb. 4.9 a) bis c) ist erkennbar, dass mit zunehmender Tropfengröße die einzelnen Spraytropfen nicht so schnell erwärmt werden. Dies kann damit erklärt werden, dass größere Tropfen eine größere Masse und damit eine wesentlich größere Wärmekapazität besitzen. Das Potential Wärme aufzunehmen ist maßgeblich für die Tropfenerwärmung. Tropfen können im vorliegenden Fall zum einen durch einen konvektiven Wärmestrom von der deutlich wärmeren Gasphase erwärmt werden, zum anderen durch die freiwerdende latente Wärme bei Kondensation, welche ebenfalls in den Tropfen übergeht. Die Geschwindigkeit der Tropfenerwärmung beeinflusst das Kondensationsgebiet. Kondensation findet auf kalten Flächen statt.

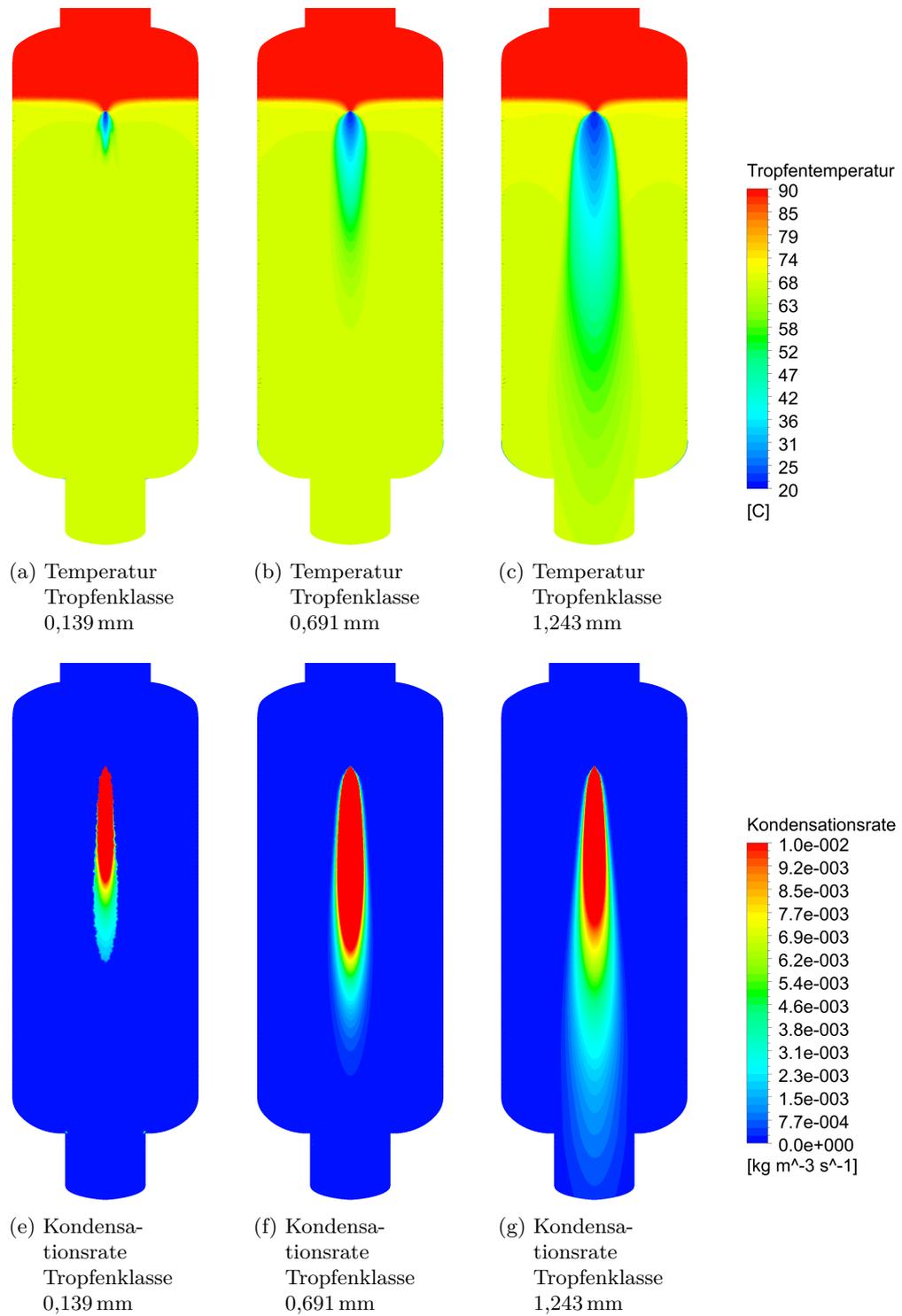


Abbildung 4.9: Tropfenerwärmung und Auswirkung auf das Kondensationsgebiet

Die einzig kalte Fläche im verwendeten Experiment ist die Tropfenoberfläche, da die Wände des THAIs konstant beheizt werden. Je schneller sich die Tropfentemperatur der Temperatur der Gasatmosphäre angleicht, desto schneller reduziert sich das Kondensationsgebiet, da kühlere Flächen zum Auskondensieren fehlen. Je größer die Tropfen und je langsamer die Temperaturangleichung zwischen Tropfen und Gas vonstatten geht, desto größer ist das Kondensationsgebiet, vgl. Abb. 4.9 e) - g).

Untersuchung des Netzeinflusses

Um den Einfluss der Gitterauflösung auf die Simulationen zu überprüfen, wird ein Setup mit einer polydispersen Tropfenkonfiguration und verschiedenen Netzauflösungen simuliert und die Ergebnisse für die Gastemperatur miteinander verglichen. Tab. 4.1 zeigt die Gitterauflösung der untersuchten Netze. In Abb. 4.10 ist ein Vergleich der drei Netze für die Messpunkte MP826 und MP827 dargestellt. Wird die Gastemperatur an MP826 für die verschiedenen Netzauflösungen verglichen, ergibt sich bis zu einer Simulationszeit von 15 s ein kleiner Unterschied zwischen den Temperaturverläufen. Das Netz mit der größten Auflösung bestimmt die Gastemperaturen, die am nächsten am Experiment liegen. Das mittlere und feinste Netz berechnen eine geringere Gastemperatur. Die Unterschiede zwischen den Netzen liegen für die Zeit bis 15 s bei ca. 3 K. Ab einer Simulationszeit von 15 s ergeben sich keinerlei Unterschiede bei der Gastemperatur und auch die Temperatur am Ende der Transienten ist bei allen drei Netzen identisch. MP827 zeigt für alle Netze dieselben Verläufe für die Gastemperatur, unabhängig davon welches Netz in der Simulation verwendet wird. Der Unterschied der Simulationsergebnisse an MP826 am Anfang der Simulationen kann durch die Ausbildung des Sprays erklärt werden. Das Spray tritt mit einer Geschwindigkeit von ca. 23 m/s in eine ruhige Gasatmosphäre ein.

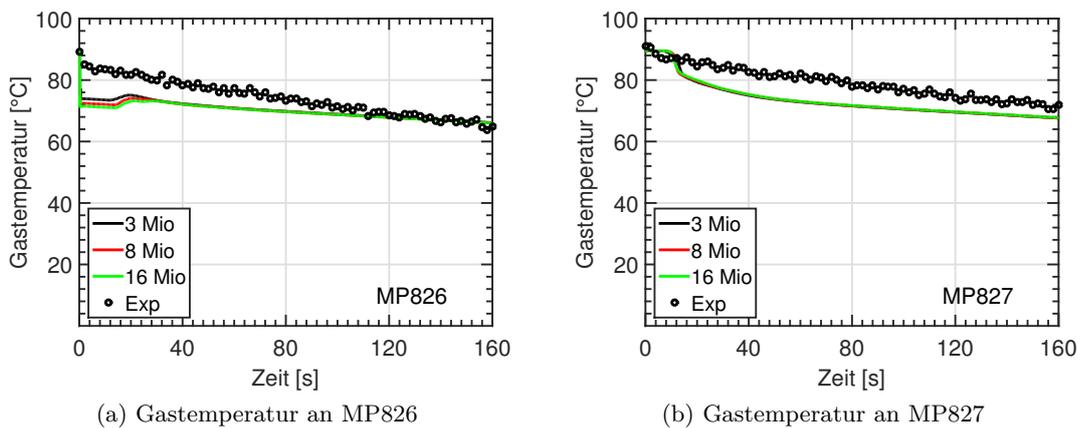


Abbildung 4.10: Sensitivitätsstudie zur Untersuchung verschiedener Netzauflösungen bei polydisperser Tropfenkonfiguration

Der Einsprühvorgang ist am Anfang sehr turbulent und führt zu starken Vermischungsvorgängen der kalten und warmen Gasschichten. Die Vermischungsvorgänge können mit einem feinen Netz besser aufgelöst werden. Zwischen Netz 2 und Netz 3 ergibt sich nur noch ein sehr kleiner Unterschied in der Gastemperatur. Für die Validierungsrechnungen wird Netz 2 gewählt, da es den besten Kompromiss aus numerischem Aufwand und Genauigkeit liefert.

4.1.4 Rechenzeit

In Tab. 4.2 sind die Rechenzeiten für die beiden untersuchten Tropfenkonfigurationen miteinander verglichen. Die Rechenzeit wird in Stunden (h) angegeben und bezieht sich auf die Verwendung von 1176 Kernen auf dem Supercomputer CRAY XC40 'Hazel Hen' am HLRS. Die angegebenen Simulationszeiten gelten für die simulierte physikalische Zeit von 160 s. Auf Basis der monodispersen Simulation liegt die Rechenzeit der polydispersen Tropfenkonfiguration um ca. 330 % höher.

Tabelle 4.2: Benötigte Rechenzeit für mono- und polydisperse Tropfenkonfiguration

Tropfenkonfiguration	Rechenzeit [h]
monodispers	24
polydispers	80

4.2 Validierung des Partikelwaschmodells

4.2.1 Validierungsexperiment THAI AW 4

Abb. 4.11 zeigt die experimentelle Anordnung von AW 4 [77] in THAI zur Validierung des Partikelwaschmodells. Während der Durchführung des Experiments befinden sich mit Ausnahme einer Einsprühdüse für Wasser auf einer Höhe von 7,4 m keinerlei Einbauten in THAI. Die verwendete Düse ist äquivalent zur Düse in Versuch HD-31-SE.

In THAI wird der Anteil an Aerosolpartikeln während der kompletten Durchführung des Versuchs mit einem optischen Lasermessverfahren gemessen. Das verwendete Laserverfahren, auch Photometermessung genannt, basiert auf einem berührungslosen Messprinzip und beeinflusst das Experiment während der Messung nicht. Während des Messvorgangs wird von außen ein Laserstrahl in THAI eingebracht, dessen Lichtintensität beim Durchtritt durch das partikelbeladene Gas verringert wird. Der abgeschwächte Laserstrahl wird auf seiner Austrittsseite aus dem Gas über eine Diode detektiert. Anhand von Kalibrierkurven für die Lichtintensität kann auf den tatsächlichen Partikelgehalt in

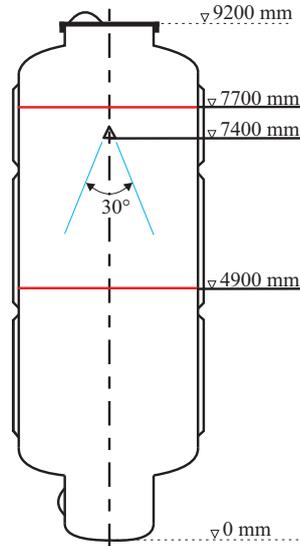


Abbildung 4.11: Schematischer experimenteller Aufbau von THAI AW 4

der Gasatmosphäre geschlossen werden [32]. Dieses Verfahren wird auf zwei Messebenen angewendet. Diese liegen auf einer Höhe von 7,7 m und 4,9 m bezogen auf den Behältersumpf, siehe Abb. 4.11. Die verwendeten Partikel bestehen im Versuch aus radioaktivem CsI. Zuerst werden insgesamt 200 g CsI in THAI eingebracht und im Volumen gleichmäßig verteilt. Nach etwa 40 min wird der erste Spraystoß (Spray 1) für 40 s aktiviert. Der Anteil von CsI reduziert sich merklich. Der zweite Spraystoß (Spray 2) erfolgt nach 85 min, ebenfalls für 40 s. Der zeitliche Ablauf ist in Abb. 4.12 a) dargestellt. Während der Spraystöße wird ein Wassermassenstrom von 1 kg/s eingedüst. Die Gasatmosphäre besitzt zu Beginn des Experiments einen Druck von 1,5 bar und eine Temperatur von 90°C. Während der Durchführung des Experiments wird fortlaufend erwärmt, sodass trotz der Sprayeindüsung die Temperatur in THAI annähernd auf 90°C gehalten werden kann. Während des ersten Spraystoßes haben die Aerosolpartikel einen Durchmesser d_P von 1,76 μm , während des Zweiten einen Durchmesser d_P von 1,19 μm . Diese Werte sind experimentell bestimmt worden und repräsentieren den arithmetischen Mittelwert der Partikelverteilungen. Das vorgestellte Modell beschreibt den Auswaschvorgang von Partikeln durch Spray, deshalb werden beide 40 sekundigen Spraysequenzen (Spray 1, Spray 2) mit Vor- und Nachlauf simuliert, siehe Abb. 4.12 b). Die Simulation berücksichtigt eine physikalische Zeit von 480 s je Sprayaktivierung. Aufgrund der abschnittswisen Simulation des Versuchs mit den Sequenzen Spray 1 und Spray 2 bedarf es einer exakten Verteilungsfunktion der CsI Partikel vor der jeweiligen Simulation. Da der erste Spraystoß 40 min nach der Befüllung des THAI mit Partikel aktiviert wird, setzen sich die Partikel in dieser Zeit bereits ab und es kommt zu einer ungleichen Verteilung über der

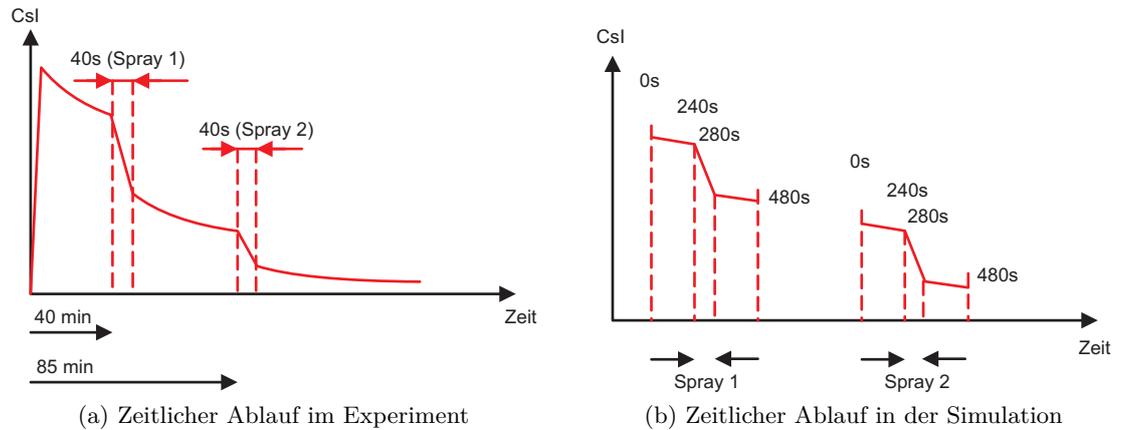


Abbildung 4.12: Zeitliche Abläufe von AW 4 in Experiment und Versuch

Höhe von THAI. Zu Beginn der Simulationen werden folgende lineare Funktionen verwendet, die aus den experimentellen CsI-Verteilungen vor der Aktivierung des Sprays bestimmt werden

$$\text{Spray 1: } \text{CsI} = -5,36 \cdot 10^{-5} \cdot z + 9,62 \cdot 10^{-4} \quad (4.1)$$

$$\text{Spray 2: } \text{CsI} = -1,07 \cdot 10^{-5} \cdot z + 3,32 \cdot 10^{-4} \quad (4.2)$$

Die Gleichungen sind abhängig von der Höhenkoordinate z in THAI. $z = 0$ m befindet sich in der Rotationsachse des THAI am tiefsten Punkt im Sumpf. Da es sich bei den angegebenen Beziehungen um Zahlenwertgleichungen handelt, ist es zwingend notwendig den z -Wert in der Einheit Meter einzusetzen. Der CsI-Anteil der Gleichungen wird in kg/m^3 ausgegeben.

4.2.2 Numerisches Setup in ANSYS CFX

Alle CFD Simulationen, die zur Validierung des entwickelten Auswaschmodells durchgeführt werden, verwenden ein dreidimensionales Netz von THAI, siehe Abschnitt 3.1. Zur Untersuchung des Einflusses der Gitterauflösung auf die Simulationsergebnisse werden insgesamt drei Netze mit unterschiedlicher Anzahl an Volumenelementen getestet. Tab. 4.3 zeigt die untersuchten Netze. Die Untersuchungen der verschiedenen Gitterauflösungen sind in Abschnitt 4.2.3 dargestellt. Die Simulationen werden transient mit einem konstanten Zeitschritt von 0,25 s durchgeführt. Advektive Terme der Erhaltungsgleichungen werden durch das 'High resolution scheme' diskretisiert. Dieses Schema berücksichtigt eine Mischung aus den Genauigkeiten erster und zweiter Ordnung. An Stellen in THAI, an denen eine Genauigkeit zweiter Ordnung zu Instabilitäten führt, wird die Genauigkeit von ANSYS CFX automatisch auf die erster Ordnung reduziert.

Tabelle 4.3: In einer Studie untersuchte Netzauflösungen von THAI

Netz	Anzahl Volumenelemente (Tetraeder)
Netz 1	3.174.210
Netz 2	8.163.746
Netz 3	19.317.801

Zeitliche Terme werden mit einem rückwärtsgewandten Euler Schema mit einer Genauigkeit von zweiter Ordnung diskretisiert. Alle Simulationen werden isotherm bei einer konstanten Temperatur von 90°C durchgeführt. Die initiale Verteilung der CsI Partikel vor den Simulationen sind den Gl. (4.1) und Gl. (4.2) zu entnehmen. Treffen Tropfen im Sumpfbereich auf die Wand von THAI, werden sie durch die 'Degassing' Randbedingung aus der Simulation über eine Senke entfernt, siehe Abschnitt 3.2.4. Die im Ergebnisteil dargestellten Simulationsergebnisse berücksichtigen die relevanten Phasen wie Tropfen, Partikel und Gas durch verschiedene Ansätze, die bereits in Abschnitt 3.2.3 eingeführt worden sind. Für die Simulationen wird zum einen ein Zwei-Fluid Modell angewandt. Dieser Ansatz basiert auf einem sehr guten Folgevermögen der Partikel mit dem Trägergas. Werden die arithmetischen Mittelwerte der experimentell bestimmten Partikeldurchmesser für Spray 1 und Spray 2 mit $d_P = 1,76 \mu\text{m}$ respektive $d_P = 1,19 \mu\text{m}$ verwendet, trifft diese Annahme zu. Eine Übersicht über den Ansatz bietet Abb. 3.5 a). Diese Annahme wird unter Verwendung eines Drei-Fluid Modells und der Modellierung eines separaten Geschwindigkeitsfelds bestätigt, siehe Abb. 3.5 b). Ergänzt werden die beiden Ansätze durch eine Simulation, in der die Größe der Tropfen als auch der Partikel polydispers simuliert werden, vgl. Abb. 3.6. Um die verschiedenen Ansätze im Ergebnisteil übersichtlich darstellen zu können, werden die folgenden Abkürzungen verwendet.

- Monodisperse Tropfen und monodisperse Aerosolpartikel (Mono Mono 2Fl)
- Polydisperse Tropfen und monodisperse Aerosolpartikel (Poly Mono 2Fl)
- Monodisperse Tropfen und monodisperse Aerosolpartikel (Mono Mono 3Fl)
- Monodisperse Tropfen und polydisperse Aerosolpartikel (Mono Poly 3Fl)
- Polydisperse Tropfen und polydisperse Aerosolpartikel (Poly Poly 3Fl)

Dabei bezieht sich die erste Abkürzung auf die Tropfenkonfiguration und die Zweite auf die Partikel. 'Fl' gibt an, ob es sich um einen Zwei-Fluid (2Fl) oder Drei-Fluid Ansatz (3Fl) handelt.

4.2.3 Ergebnisse

Qualitative Darstellung des Auswaschprozesses

Die verwendeten Validierungssequenzen von Spray 1 und Spray 2 lassen sich in drei zeitliche Abschnitte aufteilen. Abschnitt 1 bis zu 240 s zeigt das Strömungsfeld und die Partikelverteilung vor der Sprayaktivierung. Abschnitt 2 von 240 s bis 280 s zeigt den Auswaschprozess durch das Spray. Im Anschluss an den Auswaschprozess homogenisiert sich das Strömungsfeld aufgrund abklingender Strömungsgeschwindigkeiten. Partikelkonzentrationsunterschiede in THAI werden dadurch ausgeglichen. Abb. 4.13 zeigt den qualitativen Verlauf des Auswaschprozesses für Spray 1. Auf den qualitativen Verlauf des Auswaschvorgangs von Spray 2 wird an dieser Stelle aufgrund der Übersichtlichkeit nicht eingegangen, da es sich um den selben Prozess handelt. Zu Beginn der Simulation der Sequenz Spray 1 ist die Aerosolpartikelkonzentration initial linear in THAI verteilt, siehe Abb. 4.13 a). Die CsI Konzentration, welche in der Einheit kg/m^3 bestimmt wird, ist im Sumpf des THAI Behälters höher als im oberen Bereich. Wird das Spray ab 240 s für 40 s aktiviert, führt dies zu einer deutlichen Reduzierung des CsI Anteils in der Gasatmosphäre. Der Auswaschvorgang ist in Abb. 4.13 b) - e) im Detail gezeigt. Bei 245 s startet der Auswaschprozess mit einer starken Reduzierung von CsI Partikeln im Sprayzentrum. Im Sumpfbereich wird das Aerosol, welches aufgrund der Widerstandskraft zwischen Tropfen und Aerosol mitgerissen wird, an der Wand verwirbelt und umgelenkt. Es stellt sich eine Strömung entlang der Wand entgegen der Sprayströmung in den Düsenbereich von THAI ein. Die Zeitschritte 260 s, 270 s und 280 s zeigen eine Fortführung des Auswaschprozesses. Der Anteil an CsI im Aerosol sinkt stetig, wohingegen sich der Anteil an CsI in den Tropfen erhöht, siehe Abb. 4.14 a) und b).

Die Zirkulation des Aerosols im Sumpfbereich von THAI führt zu einer konstanten Zuführung an partikelbeladenem Gas mit einem hohen Partikelanteil in das Auswaschgebiet unterhalb der Düse. Das Aerosol ändert auf Höhe der installierten Spraydüse seine Strömungsrichtung und wird in den Auswaschbereich unterhalb der Düse gesogen. Die qualitative Darstellung des Auswaschvorgangs zeigt ein stark asymmetrisches Strömungsverhalten. Dies bestätigt die Vermutung, dass Simulationen von Sprayvorgängen trotz einer geometrischen Symmetrie strömungsmechanisch nicht symmetrisch sein müssen. Es ist daher zwingend notwendig, das komplette Strömungsgebiet zu berücksichtigen und auf die Nutzung periodischer Randbedingungen zu verzichten. Abb. 4.15 zeigt die CsI Verteilung nachdem das Spray gestoppt wird. Die Strömung ist stark dreidimensional. Die unterschiedlichen CsI Konzentrationen im Strömungsgebiet mischen sich mit abnehmenden Strömungsgeschwindigkeiten aus. Obwohl das Spray zum Zeitpunkt 280 s abrupt ausgeschaltet wird, verbleibt das Aerosol in Bewegung. Durch Reibung an den Behälterwänden und durch Reibung zwischen den Gasmolekülen reduziert sich die Strömungsgeschwindigkeit stetig und damit auch das Homogenisierungspotential. In Abb. 4.15 c) sind die Geschwindigkeitsvektoren der Gasphase zur Zeit $t = 300$ s darge-

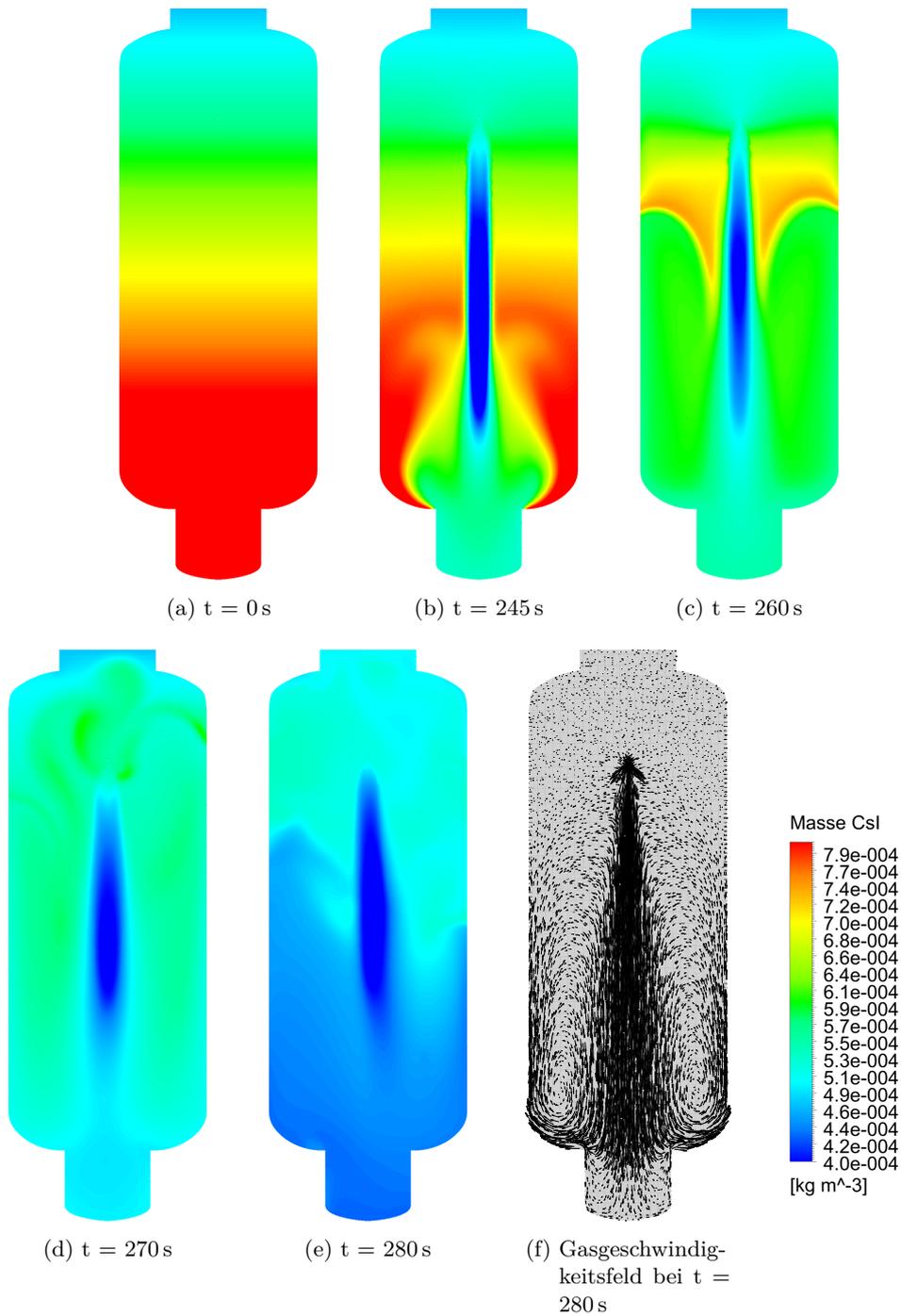


Abbildung 4.13: CsI Verteilung während des Auswaschvorgangs zu verschiedenen Zeitschritten

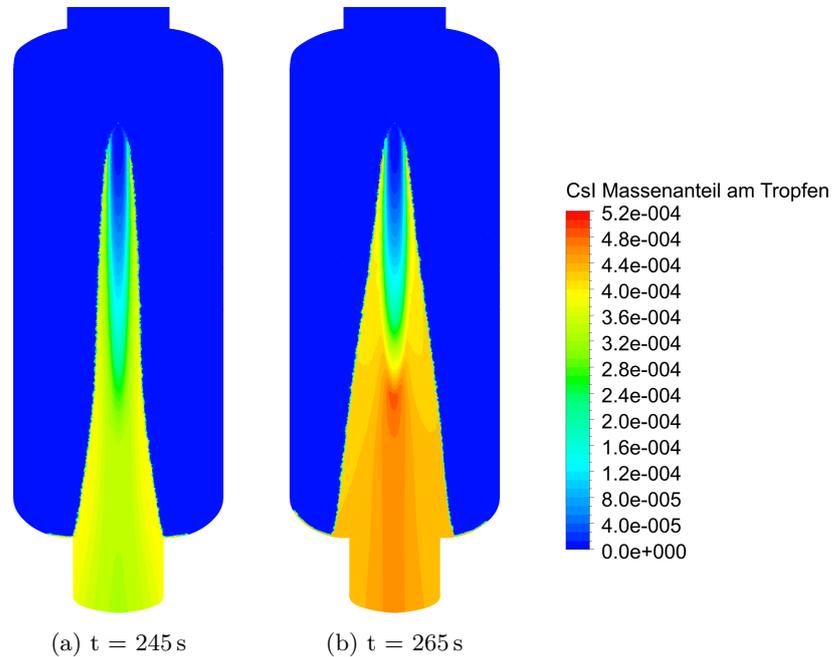


Abbildung 4.14: CsI Verteilung im Tropfen zu verschiedenen Zeitschritten

stellt.

Ergebnisse unter Verwendung des Zwei-Fluid Modells

In Abb. 4.16 werden experimentelle Daten für die CsI Konzentration (y -Achse) an den Messebenen 4,9 m und 7,7 m mit Ergebnissen aus den Simulationen verglichen. Die dargestellten Simulationen verwenden ein Euler-Euler Zwei-Fluid Modell und eine mono- bzw. polydisperse Tropfengrößenverteilung. Die Aerosolpartikel sind ausschließlich monodispers berücksichtigt. Die x -Achse zeigt die physikalische Zeit bis 480 s, zwischen 240 s und 280 s wird das Spray aktiviert. Die Graphen zeigen jeweils drei verschiedene Datensätze, experimentelle Daten (Exp), Daten unter Verwendung einer monodispersen Tropfenkonfiguration (Mono Mono 2F1) und Daten einer polydispersen Tropfengrößenverteilung (Poly Mono 2F1).

Abb. 4.16 c) und d) zeigen eine akzeptable Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation für Spray 2. Besonders die polydisperse Tropfenkonfiguration stimmt gut mit dem Experiment überein. Werden dagegen die Simulationsergebnisse für Spray 1 mit dem Experiment verglichen, ist ein anderes Verhalten ersichtlich. Hier stimmt die monodisperse Spraykonfiguration im Vergleich zur polydispersen besser mit den experimentellen Daten überein. Ein Grund für die reduzierte Auswascheffizienz der polydi-

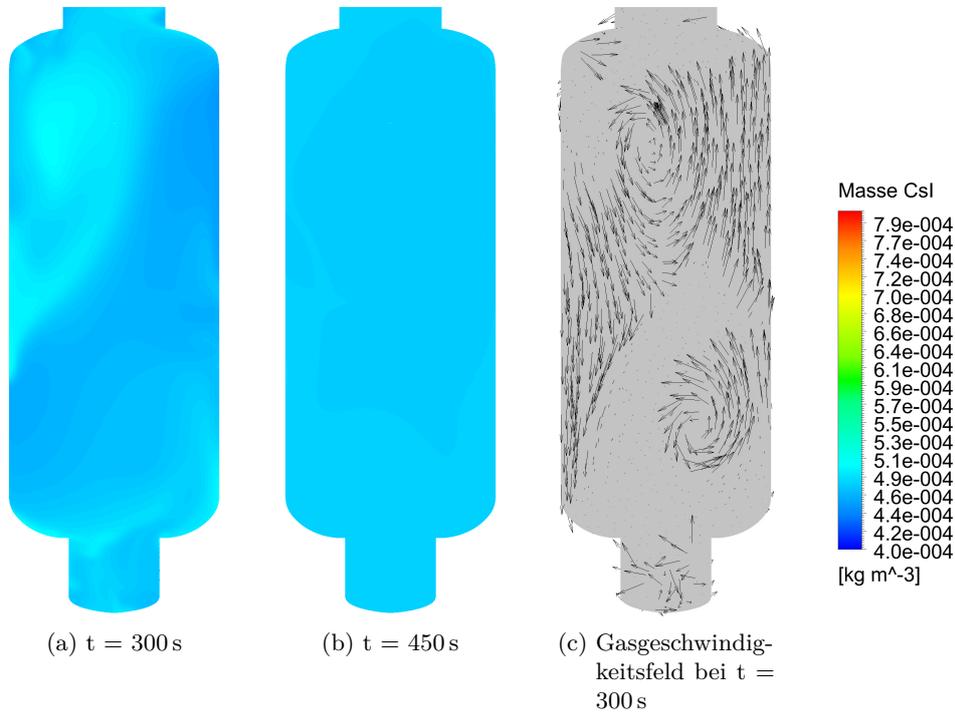


Abbildung 4.15: CsI Verteilung nach dem Auswaschvorgang zu verschiedenen Zeitschritten

spersen Tropfenverteilung kann die reduzierte Anzahl großer Tropfen sein. Wenn die Tropfenverteilung für das Spray (Tab. 3.1) mit dem Sauterdurchmesser $d_{32} = 830\ \mu\text{m}$ der monodispersen Simulation verglichen wird, zeigt sich, dass ein Großteil der Tropfendurchmesser kleiner ist als d_{32} . Ungefähr 69% aller Tropfen sind kleiner als d_{32} . In Abb. 4.16 e) und f) zeigt ein Vergleich von Simulationsergebnissen unter Verwendung von d_{32} und $d_L = 200\ \mu\text{m}$, dass kleinere monodisperse Tropfen nur einen geringeren Anteil an CsI auswaschen können. Der Durchmesser der Aerosolpartikel ist in beiden Spraysequenzen monodispers (Spray 1: $d_P = 1,76\ \mu\text{m}$ und Spray 2: $d_P = 1,19\ \mu\text{m}$). Der Einfluss einer verringerten Anzahl an großen Tropfen auf den Auswaschprozess nimmt bei kleineren Partikeldurchmessern ab. Daher zeigt Spray 2 für eine polydisperse Spraykonfiguration eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment. Wird der Zeitbereich der Sprayaktivierung zwischen 240 s und 280 s für einen Vergleich des Experiments und der Simulation herangezogen, ergeben sich Unstimmigkeiten bei den Verläufen der CsI Graphen. Besonders an der Messebene 4,9 m, welche direkt im Spraygebiet liegt, gibt es keinerlei Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment. Der experimentelle Wert für die CsI Konzentration steigt an, während die Konzentration in der Simulation ab-

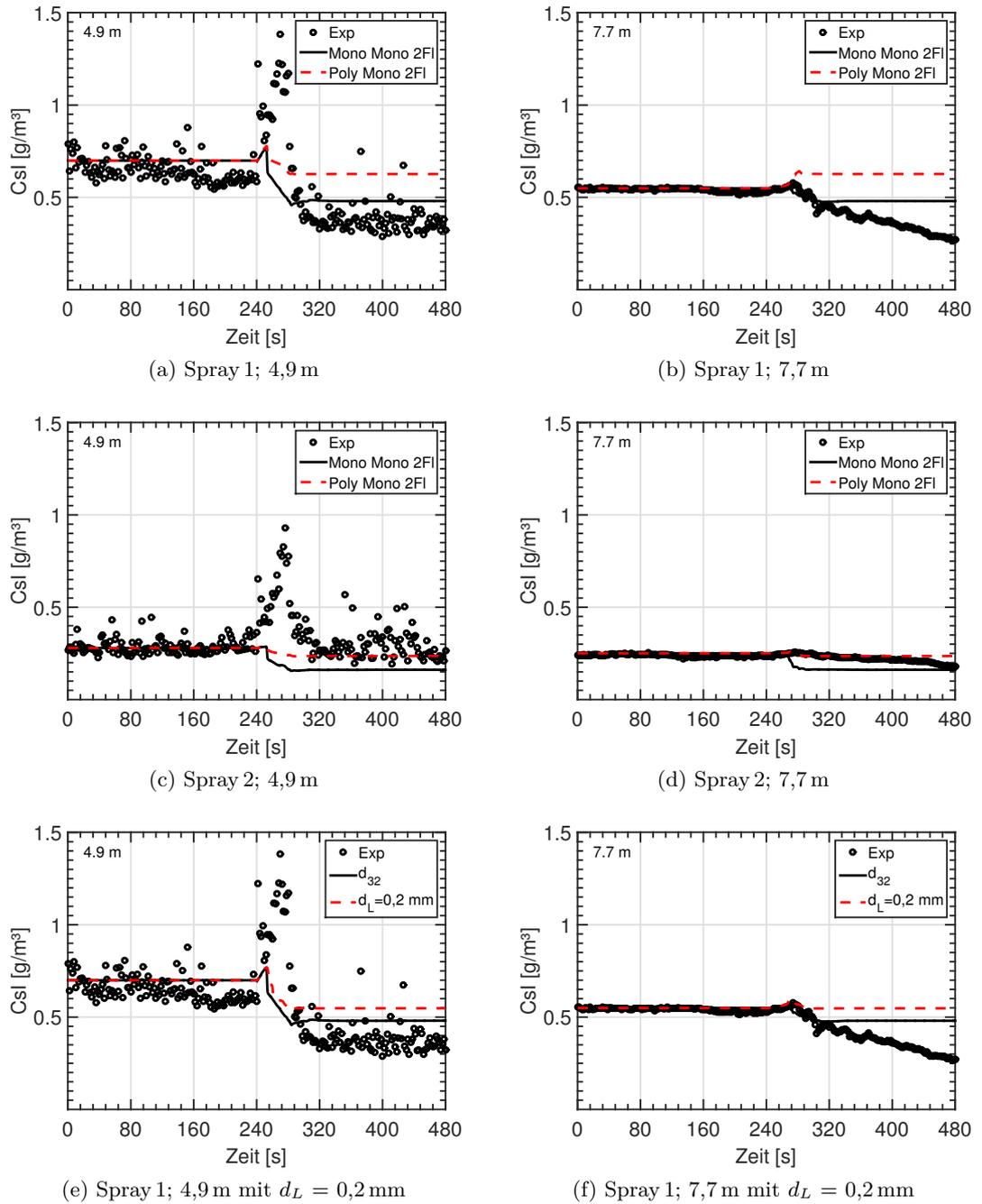


Abbildung 4.16: Vergleich von experimentellen und simulierten CsI Konzentrationen an den Messebenen 4,9 m und 7,7 m für Spray 1 und Spray 2 unter Verwendung eines Euler-Euler Zwei-Fluid Ansatzes

nimmt wird. Dieses konträre Verhalten kann anhand des verwendeten Messprinzips zur Bestimmung der Partikelkonzentration erklärt werden. Der in THAI eingebrachte Laserstrahl wird nach Durchlaufen der mit Partikeln beladenen Gasatmosphäre an einer Diode detektiert. Durch die sich in der Gasatmosphäre befindlichen CsI Partikel wird der Laserstrahl in seiner Stärke abgeschwächt. Während das Spray aktiviert ist, schwächen zusätzlich zu den Partikeln auch Spraytropfen die Laserintensität ab, da für den Laser keine Unterscheidung zwischen Partikel und Tropfen möglich ist. Anhand der Kalibrierkurven wird durch die sehr starke Laserabschattung eine zu hohe CsI Konzentration bestimmt. Aus diesem Grund sind die Simulationen so aufgebaut, dass nicht nur der zeitliche Bereich der Sprayaktivierung für die Validierung verwendet wird, sondern auch der zeitliche Bereich davor und danach. Würden diese Bereiche beim Vergleich nicht verwendet, wäre eine Validierung des Modells mit AW 4 nicht möglich. An der Messebene 7,7 m in Spray 1 zeigt sich für keine der Tropfenkonfigurationen eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment nach Ende der Sprayaktivierung. Die Verringerung der CsI Konzentration im Anschluss an die Sprayaktivierung ist nicht nur durch Homogenisierungsvorgänge, sondern auch durch Wandablagerungen und Setzvorgänge zu erklären. Das vorliegende Modell beschränkt sich auf die Reduktion der Partikel durch Spray. Setzvorgänge sind im verwendeten Euler-Euler Zwei-Fluid Ansatz nicht berücksichtigt.

Vergleich von Zwei-Fluid und Drei-Fluid Modell

Kleine Aerosolpartikel mit sehr gutem Folgevermögen ($St \ll 1$) können in den Simulationen wie bereits im vorherigen Abschnitt beschrieben vereinfacht auch als Gemisch mit Luft modelliert werden. Dieser Ansatz reduziert den numerischen Aufwand erheblich, da sich Partikel und Luft ein Geschwindigkeitsfeld teilen. Dass diese Annahme im vorliegenden Fall für sehr kleine Partikeldurchmesser zulässig ist, soll der in Abb. 4.17 gezeigte Vergleich der CsI Konzentration unter Verwendung eines Zwei-Fluid (2F1) bzw. Drei-Fluid (3F1) Ansatzes in Spray 1 bestätigen. Beide Simulationen nutzen einen monodispersen Tropfen- (d_{32}) sowie Partikeldurchmesser ($d_P = 1,76 \mu\text{m}$). Unterschiedlich ist jedoch die Behandlung der Partikel. In der Zwei-Fluid Simulation sind sie als Gemisch mit Luft modelliert, in der Drei-Fluid Simulation besitzen sie ein eigenes Geschwindigkeitsfeld. Der Vergleich beider Simulationen zeigt keine nennenswerten Unterschiede in den CsI Konzentrationen. Dies gilt für die im Spray befindliche Messebene 4,9 m sowie für die Messebene oberhalb der Düse bei 7,7 m. Der Vergleich bestätigt die zuvor durchgeführte theoretische Beurteilung anhand der Stokeszahl. Für kleine monodisperse Partikel mit $St \ll 1$ ist es zulässig, Partikel und Luft unter Verwendung eines gemeinsamen Geschwindigkeitsfelds zu berücksichtigen.

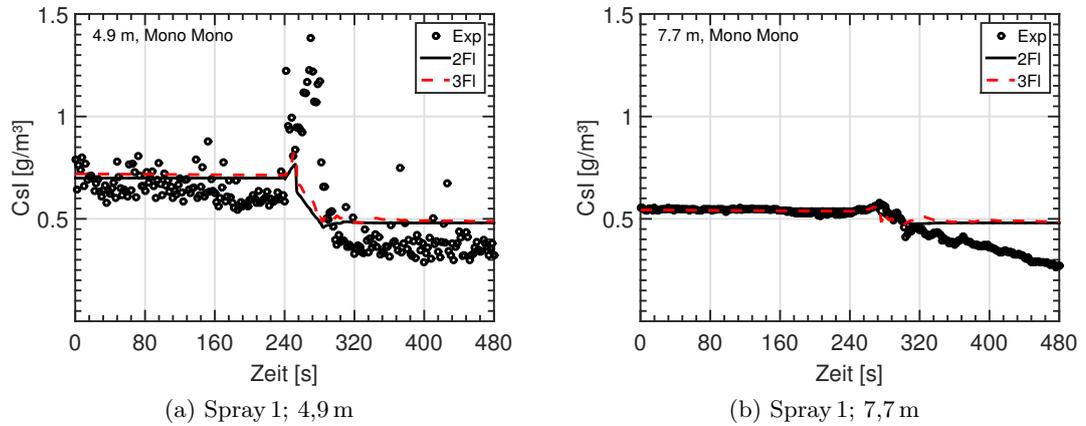


Abbildung 4.17: Vergleich von Simulationen unter Verwendung von Zwei-Fluid und Drei-Fluid Modell in Spray 1

Vergleich verschiedener Tropfen- und Partikelkonfigurationen unter Verwendung eines Drei-Fluid Modells

In diesem Abschnitt werden Simulationen mit mono- und polydispersen Tropfen- und Partikelverteilungen miteinander verglichen. Basis dafür ist ein Drei-Fluid Modell mit den Konfigurationen Mono Poly 3Fl und Poly Poly 3Fl. Um den Unterschied und die Wirkung des separaten Geschwindigkeitsfelds in den Drei-Fluid Simulationen im Gegensatz zu Simulationen mit einem Zwei-Fluid Modell herauszuarbeiten, sind zusätzlich die Simulationen Mono Mono 2Fl und Poly Mono 2Fl in den Graphen dargestellt, siehe Abb. 4.18. Werden die mono- und polydispersen Spraysimulationen für Spray 1 in Abb. 4.18 a) und b) bezüglich des CsI Gehalts auf den Messebenen 4,9 m und 7,7 m miteinander verglichen, sind Unterschiede in den Verläufen zu erkennen. Simulationen mit monodispersen Tropfen (Mono Mono 2Fl und Mono Poly 3 Fl) zeigen einen wesentlich effektiveren Auswaschvorgang. Auf den ersten Blick ist ein effektiverer Auswaschvorgang für ein monodisperses Spray nicht zu erwarten, da eine polydisperse Spraydefinition (Poly Mono 2Fl, Poly Poly 3Fl) durch eine Variation der Tropfengröße die Realität wesentlich besser abbildet. Bei genauerer Betrachtung ist der Anteil großer Tropfen im verwendeten polydispersen Spray geringer als in der monodispersen Konfiguration mit d_{32} . Ist der Anteil an größeren Tropfen höher, steigt damit auch die Menge an ausgewaschenen Partikeln. Die Graphen in Abb. 4.18 a) und b) zeigen zudem einen Unterschied bei der Verwendung einer mono- bzw. polydispersen Partikelverteilung in Verbindung mit einer polydispersen Tropfenverteilung (Poly Mono 2Fl und Poly Poly 3Fl). Bei der Verwendung einer polydispersen Partikelverteilung ergibt sich eine Verbesserung der berechneten CsI Konzentration im Vergleich zur monodispersen Partikelkonfiguration. Maßgebend hierfür

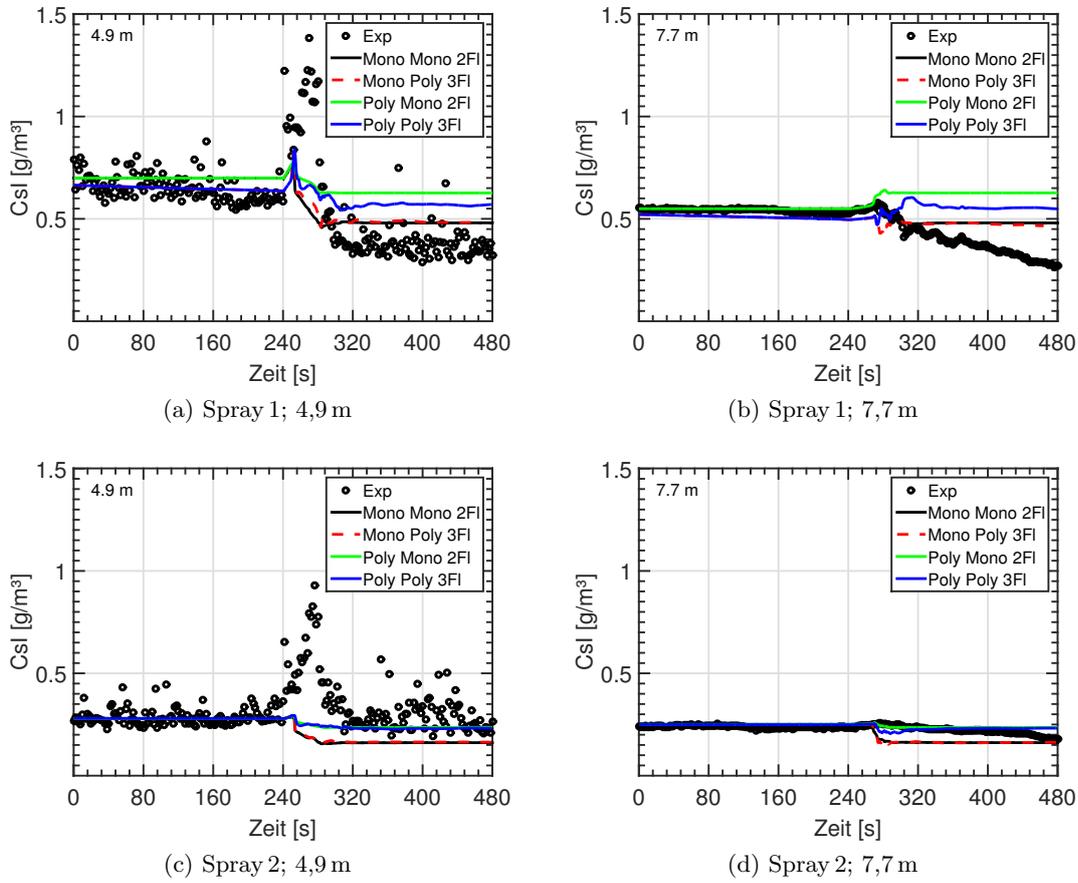


Abbildung 4.18: Vergleich von Zwei-Fluid und Drei-Fluid Ansatz für verschiedene Tropfen- und Partikelverteilungen

ist, dass kleinere Partikel von kleineren Tropfen ausgewaschen werden können, wohingegen kleine Tropfen nur einen geringen Einfluss auf wesentlich größere monodisperse Partikel haben. Bei der Annahme einer monodispersen Tropfenkonfiguration kann eine Partikelverteilung vernachlässigt werden, da kein Einfluss auf das Ergebnis zu erkennen ist. Werden Partikel mit einem separaten Geschwindigkeitsfeld modelliert, lässt sich der Absetzvorgang der Partikel in einer ruhigen Gasatmosphäre bis 240s sehr gut in der Simulation abbilden. Partikel werden durch den Einfluss der Gravitation beschleunigt und bewegen sich so in den Sumpfbereich. Die Absetzbewegung der Partikel reduziert den C_{sl} Anteil an den Messebenen. In Simulationen mit einem Zwei-Fluid Ansatz, bei denen die Partikel als Teil einer Mischung mit Gas berücksichtigt sind, ist der Absetzvorgang aufgrund eines fehlenden Geschwindigkeitsfelds für Partikel nicht zu erkennen.

Die Sequenz Spray 2 zeigt eine wesentlich bessere Übereinstimmung von Experiment und Simulation für polydisperse Tropfenkonfigurationen. In diesem Fall ist nach Ende des Sprayvorgangs kein Unterschied in der CsI Konzentration zwischen einer mono- und polydispersen Partikelverteilung zu erkennen. Das gleiche Verhalten zeigen auch die Simulationen unter Verwendung eines Zwei-Fluid Modells. Anhand der Ergebnisse ist davon auszugehen, dass der verwendete monodisperse Partikeldurchmesser von $1,19 \mu\text{m}$ das Partikelspektrum in vorliegender Simulation ausreichend approximiert. Ein Spektrum kann vernachlässigt werden. Die Simulationen mit monodispersen Tropfen berechnen eine zu effektive Reduzierung des CsI Anteils, da der Anteil großer Tropfen im Vergleich zur polydispersen Konfiguration überwiegt.

Untersuchung des Netzeinflusses

Ergebnisse aus CFD Simulationen sind oft von der Auflösung des verwendeten Netzes abhängig. Um den Einfluss des hier verwendeten THAI Netzes auf die Validierungsgröße (CsI Konzentration) zu untersuchen, werden drei verschiedene Netze (vgl. Tab. 4.3) mit dem selben CFD Setup (Mono Mono 2Fl) gerechnet. In Abb. 4.19 sind die Ergebnisse für die beiden Messebenen 4,9 m und 7,7 m dargestellt. Werden die Ergebnisse der CsI Konzentration für beide Messebenen mit drei verschiedenen Netzen miteinander verglichen, ergibt sich ein vernachlässigbar kleiner Unterschied in allen Zeitbereichen. Die CsI Konzentration wird für alle untersuchten Netze gleich berechnet. Aus den Validierungserfahrungen des Spraykühlungsmodells und der benötigten Rechenzeit, wird bei der Validierung des Auswaschmodells auf das Netz mit acht Millionen Elementen zurückgegriffen (Netz 2).

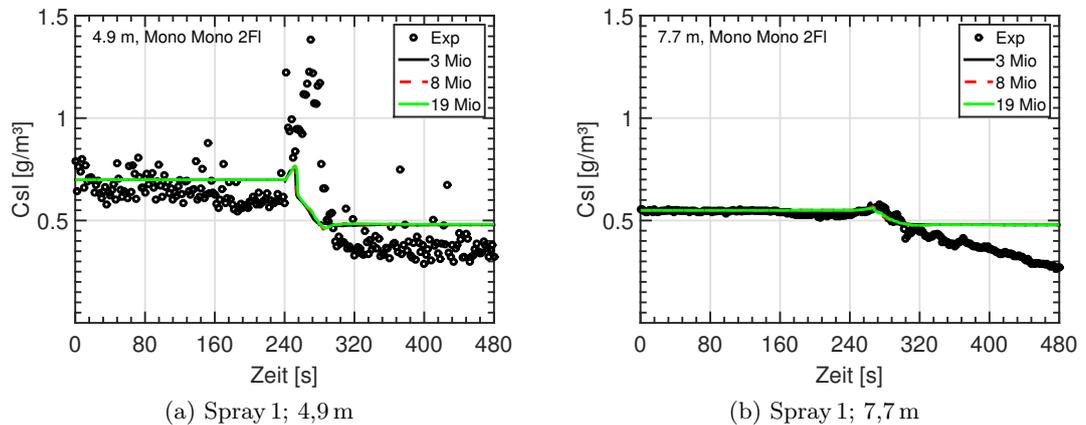


Abbildung 4.19: Sensitivitätsstudie zur Untersuchung verschiedener Netzauflösungen

4.2.4 Rechenzeit

In diesem Abschnitt sind die Rechenzeiten für die durchgeführten Partikelwaschsimulationen aufgeführt. Tab. 4.4 unterscheidet verschiedene Tropfen- und Partikelkonfigurationen. Die Rechenzeit ist in Stunden (h) bei einer Nutzung von 1176 Kernen auf dem Supercomputer 'Hazel Hen' am HLRS angegeben. Ausgehend von einer Simulation mit der Konfiguration Mono Mono 2F1 steigt die Rechenzeit unter Anwendung von Poly Poly 3F1 um 1550 %.

Tabelle 4.4: Benötigte Rechenzeit für verschiedene mono- und polydisperse Tropfen- und Partikelkonfigurationen

Konfiguration (Tropfen, Partikel)	Rechenzeit [h]
Mono Mono 2F1	4
Mono Mono 3F1	10
Mono Poly 3F1	46
Poly Mono 2F1	27
Poly Poly 3F1	62

5 Simulation eines KONVOI Sicherheitsbehälters

In diesem Kapitel wird das Modell zur Spraykühlung mit dem Modell zur PartikelAuswaschung in einem generischen DWR Sicherheitsbehälter vom Typ KONVOI kombiniert. In das geometrische Modell des KONVOI Sicherheitsbehälters, welches in der Realität über kein Spraysystem verfügt, wird ein solches implementiert. Das vorgegebene Störfallszenario soll den Anwendungsbereich der physikalischen Modelle in einer realitätsnahen CFD Simulation zeigen.

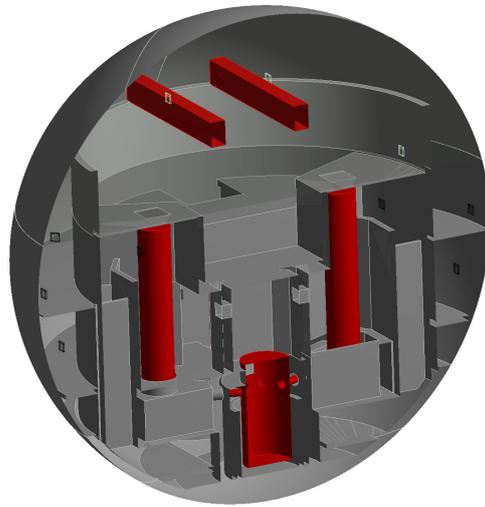
5.1 Zweck der Kombination

Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Modelle zur Simulation von Spraykühlung bzw. zur Auswaschung von Aerosolpartikeln sollen als Werkzeug dienen, um Störfälle mit Sprayeinsatz in Kernkraftwerken nachzurechnen oder bereits bei der Auslegung eines Kraftwerks mögliche Probleme zu erkennen. Untersuchungsschwerpunkte können dabei neben der Kühlung und PartikelAuswaschung durch Spray auch dessen Einfluss auf Vermischungsvorgänge verschiedener Leichtgase in der Atmosphäre des Sicherheitsbehälters sein. Dazu zählt insbesondere die Untersuchung der Vermischung von Wasserstoff und Umgebungsluft, da diese beiden Bestandteile bei idealer Zusammensetzung brennbar sind und somit eine erhebliche Gefahr für die Integrität des Sicherheitsbehälters darstellen. Ist während eines schweren Störfalls die Abfuhr der Wärme aus dem Primärkreislauf nicht mehr gewährleistet, erwärmt sich das Kühlmedium (Wasser) dieses Kreislaufs. Das ungekühlte heiße Wasser reagiert daraufhin mit dem Hüllrohrmaterial Zirkonium der Kernbrennstäbe und bildet Wasserstoff. Der Wasserstoff tritt zusammen mit Partikeln und dem Kühlwasser aus dem durch den Störfall gebildeten Leck in den Sicherheitsbehälter aus. Bisher sind im Rahmen dieser Arbeit die entwickelten Modelle zur Spraykühlung und PartikelAuswaschung separat in CFD Simulationen zu Validierungszwecken in THAI untersucht worden. In der Realität kann es jedoch zu einer gleichzeitigen Kombination beider Phänomene kommen, z.B. bei dem bereits beschriebenen unkontrollierten Kühlwasseraustritt mit instantaner Verdampfung sowie Partikelfreisetzung. In diesem Fall muss es möglich sein, beide Modelle in einem CFD Setup kombinieren zu können und die in THAI validierten Modelle auf einen realitätsnahen Sicherheitsbehälter zu extrapolieren. Die Kombination im Rahmen dieser Arbeit soll realitätsnah an einem Sicherheitsbehälter durchgeführt werden, der sehr dem eines Druckwasserreaktor

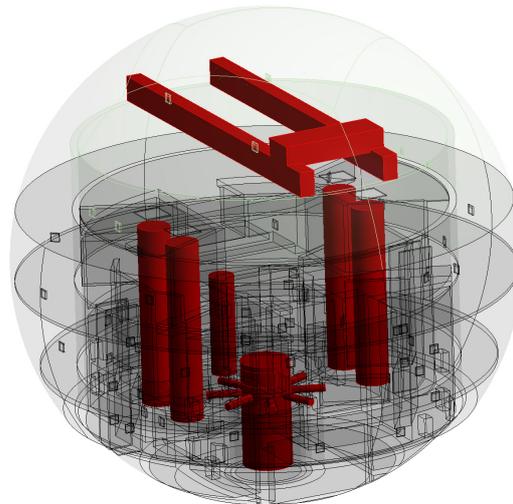
nach deutscher Bauart (KONVOI) ähnelt. Im geometrischen Modell für die Simulation ist maßstabsgetreu der Betriebs- und Anlagenraum mit verschiedenen räumlichen Abgrenzungen, Einbauten des Primärkreislaufs und Zwischengeschossen berücksichtigt. Die Anwendung von Spray ist im vorliegenden Fall als fiktives Szenario zu sehen, da es in einem KONVOI kein Spraysystem gibt. Dessen Implementierung in die Geometrie und die Anwendung von CFD soll zeigen, dass CFD Methoden in der Lage sind, die strömungsmechanischen Effekte detailliert aufzulösen.

5.2 Geometrisches Modell und Netz des KONVOI Sicherheitsbehälters

KONVOI Kraftwerke schließen den Primärkreislauf sowie den Dampferzeuger für den Sekundärkreislauf in einem Sicherheitsbehälter ein. Der Sicherheitsbehälter aus Stahl ist kugelförmig mit einem Durchmesser von 56 m und einer Dicke von 28 mm [47]. Er verleiht den KONVOI Reaktoren die bekannte und weithin sichtbare typische Kugelform. Der Sicherheitsbehälter ist auf einen Unterdruck ausgelegt und sorgt so im Falle eines Lecks im Primärkreislauf dafür, dass keine radioaktiven Materialien in die Umgebung gelangen, da sich durch den Unterdruck ein Luftstrom in das Kraftwerk hinein einstellt. Um den Sicherheitsbehälter vor äußeren Einwirkungen wie Unwetter, Flugzeugabstürze etc. zu schützen, befindet sich um ihn das Reaktorgebäude. Dieses besteht aus Spannbeton mit einer Wanddicke von ca. 1,8 m [47]. Zhang [84] verwendet ein für CFD Methoden aufbereitetes geometrisches Modell eines KONVOI, welches in Abb. 5.1 dargestellt ist. Dieses geometrische Modell ist Grundlage der durchgeführten Kombinationsrechnung. Abb. 5.1 a) zeigt einen mittigen Schnitt durch den Sicherheitsbehälter des KONVOI. Alle rot eingefärbten Bauteile spiegeln dabei den Primärkreislauf einschließlich dem Kran für die Be- und Entladung der Brennelemente wieder, während die Wand- und Stahlstruktur grau abgebildet sind. In Abb. 5.1 b) sind der Primärkreislauf samt Kran in einer transparenten Wand-/Stahlstruktur dargestellt. Bei der Geometrie handelt es sich um einen vereinfachten Aufbau des kugelförmigen Stahlsicherheitsbehälters. Dargestellt sind der Betriebsraum oberhalb des Primärkreislaufs und der Anlagenraum. Beide Bereiche sind im Normalbetrieb des Kraftwerks räumlich voneinander getrennt. Eine Verbindung zwischen beiden Bereichen wird durch verschiedene Berstscheiben hergestellt, die bei einem Störfall mit starker Druckerhöhung im Anlagenraum zerbrechen und so den Überdruck auch in den Betriebsraum verteilen. Das Modell berücksichtigt im Betriebsraum z.B. den Dampferzeugerturm und das Brennelementlagerbecken. Im Anlagenraum befindet sich der Primärkreislauf mit Reaktordruckbehälter, Dampferzeuger, Druckhalter etc. Da ein KONVOI kein Spraysystem im Sicherheitskonzept berücksichtigt, muss für die Anwendung von Spray in der Kombinationsrechnung fiktiv ein solches System implementiert werden. Insgesamt berücksichtigt der modifizierte KONVOI 25 Spraydüsen, die in regelmäßigen Abständen kreisförmig auf einer Höhe von 45 m angeordnet sind.



(a) Mittiger Schnitt durch den KONVOI, Primärkreislauf/Kran (rot) und Wand-/Stahlstruktur (grau)



(b) Darstellung des kompletten Primärkreislaufs samt Kran in transparenter Wand-/Stahlstruktur

Abbildung 5.1: CFD geeignetes geometrisches Modell eines KONVOI Kraftwerks nach [84]

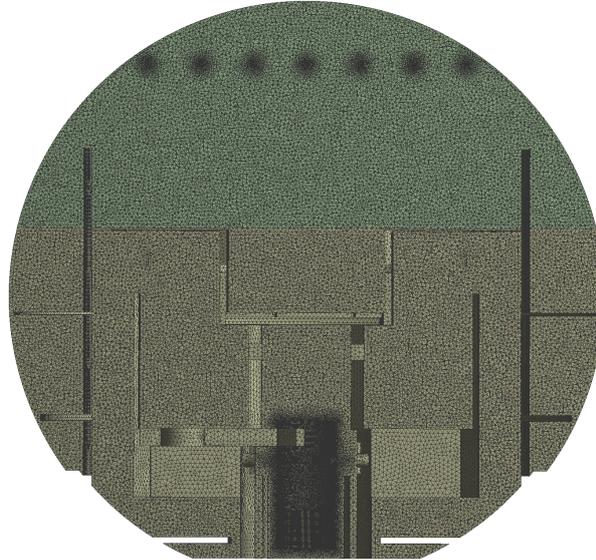


Abbildung 5.2: Schematische Darstellung des KONVOI Netzes mit Spraydüsenimplementierung im oberen Bereich des Sicherheitsbehälters

Die Düsen haben einen Austrittsdurchmesser von 8 mm. Abb 5.2 zeigt das Rechenetz des modifizierten KONVOI. Das Netz stellt das Strömungsvolumen dar, in dem sich Tropfen, Gas und Aerosolpartikel bewegen. Die Strukturen der einzelnen Wände oder Einbauten wie Reaktordruckbehälter etc. sind im Netz nicht berücksichtigt. An Stellen, an denen sich Einbauten des Primärkreislaufs oder Wände befinden, ist das Strömungsvolumen durch eine Wand abgegrenzt. Fluid-Struktur Interaktionen sind in der Simulation nicht berücksichtigt. Das Netz ist unstrukturiert mit Tetraederelementen vernetzt und ist zu den einzelnen Spraydüsen stark aufgelöst. Andere Wände, wie z.B. die Abgrenzung des Strömungsgebiets zum Sicherheitsbehälter oder zum Primärkreislauf sind unter Verwendung automatischer Wandfunktionen berücksichtigt. Die Gesamtelementanzahl des Netzes beträgt 13,8 mio.

5.3 Angenommenes Störfallszenario

Für die Kombination wird ein Bruch einer der vier Primärleitungen am Reaktordruckbehälter angenommen. Das Kühlwasser verdampft instantan beim Austritt in die Gasatmosphäre. Durch die Verdampfung des Wassers wird der Druck und die Temperatur der Atmosphäre im Sicherheitsbehälter erhöht. Zudem steigt die Belastung auf die Wand-

Tabelle 5.1: Initialbedingungen der Kombinationsrechnung im generischen KONVOI

Variable	Wert	
Temperatur Gas	90	[°C]
Temperatur Tropfen	20	[°C]
CsI Masse	0,7	[g _{CsI} /m ³]
Absolutdruck	1,5	[bar]
Düsenwassermassenstrom (pro Düse)	1	[kg/s]
Konst. Tropfendurchmesser	0,83	[mm]
Konst. Partikeldurchmesser	1,76	[μm]

struktur, die den kompletten Primärkreislauf umschließt. Es wird zudem berücksichtigt, dass durch den Störfall radioaktives Kerninventar in Form von Partikeln durch den Austritt des verdampfenden Wassers in der Atmosphäre des Sicherheitsbehälters verteilt wird. Im vorliegenden Störfall wird angenommen, dass durch die Wasserdampfeinspeisung und Partikelfreisetzung in den Sicherheitsbehälter die Gastemperatur und der Absolutdruck stark erhöht werden. Da keine experimentellen Daten für einen solchen Störfall vorhanden sind, wird das Szenario aus den beiden verwendeten Validierungsversuchen (HD-31-SE und AW 4) zusammengesetzt. Tab. 5.1 zeigt zusammengefasst die initialen Bedingungen der Simulation. Zu Beginn der Simulation wird eine konstante homogene Verteilung der Gastemperatur sowie der Aerosolpartikel im kompletten KONVOI angenommen. Das Szenario vernachlässigt den erneuten Austritt von Wasserdampf und CsI Partikel aus dem Leck des Primärkreislaufs. Es wird lediglich das bereits im Sicherheitsbehälter befindliche heiße Gas durch Spray gekühlt sowie bereits verteilte Partikel ausgewaschen. Das Spray wird nicht kontinuierlich sondern in Stößen über alle Düsen gleichzeitig eingesprüht. Der Verlauf der Aktivierungsfunktion des Sprays ist in Abb. 5.3 ersichtlich. Auf der x-Achse ist die physikalische Zeit, auf der y-Achse das Spraysignal 'Ein' oder 'Aus' aufgetragen. Es handelt sich bei der Funktion um ein Rechtecksignal, bei dem sich nach jeweils 50 s der Zustand ändert. Die Simulation hat eine Gesamtdauer von 1000 s. Die zyklische Aktivierung des Sprays hat den Hintergrund, dass dadurch eine bessere Ausmischung von Temperatur und Partikelgradienten im Zeitbereich ohne Sprayaktivierung gegeben ist. Zudem steht im Sicherheitsbehälter eine endliche Menge an Wasser zur Verfügung, die bei geschlossenem Sicherheitsbehälter von außerhalb nicht beeinflusst werden kann. Der Spraymassenstrom jeder einzelnen Düse beträgt 1 kg/s.

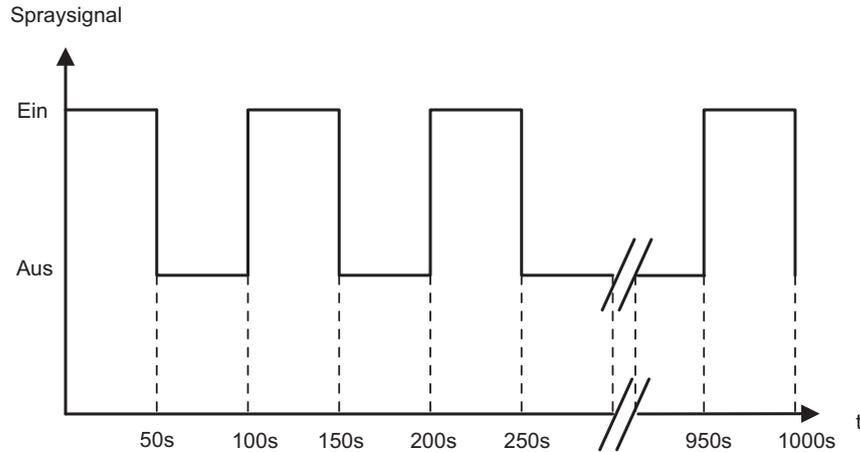


Abbildung 5.3: Aktivierungsfunktion für Spray im KONVOI

5.4 Numerisches Setup in ANSYS CFX

Die Simulation wird mit einem Euler-Euler Zwei-Fluid Modell durchgeführt. Da es sich beim KONVOI um eine sehr komplexe Geometrie handelt, werden bei der durchgeführten Simulation nur zwei Geschwindigkeitsfelder und deren Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie gelöst. Die Umgebungsluft im Sicherheitsbehälter und die Partikel werden als Gemisch mit einem Geschwindigkeitsfeld berücksichtigt. Die Tropfen sind monodispers mit $d_L = 830 \mu\text{m}$ berücksichtigt und nehmen die ausgewaschenen monodispersen Partikel mit Durchmesser $d_P = 1,76 \mu\text{m}$ auf. Die Simulation wird transient mit einem konstanten Zeitschritt von $0,05 \text{ s}$ durchgeführt. Advektive Terme der Erhaltungsgleichungen werden durch das 'High resolution scheme' diskretisiert, was eine Mischung aus den Genauigkeiten erster und zweiter Ordnung darstellt. Dieses Diskretisierungsschema stabilisiert Simulationen durch die Reduzierung der Genauigkeit von zweiter auf erste Ordnung an instabilen Zellen. Zeitliche Terme werden mit einem rückwärtsgerichteten Euler Schema mit einer Genauigkeit zweiter Ordnung diskretisiert. Die Modellierung des Sprays an den einzelnen Düsen erfolgt in der Kombinationsrechnung analog zu der in THAI verwendeten Beschreibung. Auf eine genaue Beschreibung des Sprays wird an dieser Stelle mit einem Verweis auf Abschnitt 3.2 verzichtet. Alle im KONVOI berücksichtigten Wände sind in der Simulation adiabatisch modelliert, d.h. eine Reduzierung der Atmosphärentemperatur ist nur über das Spray möglich, da etwaige konvektive Effekte mit der Umgebung und eine Wärmeabfuhr außerhalb des Sicherheitsbehälters nicht berücksichtigt sind. Ebenso wie bei THAI ist auch der Sicherheitsbehälter ein geschlossenes System, in das fortlaufend Wasser eingesprüht wird. Analog zu den Validierungsrechnungen in THAI wird im KONVOI die Bildung von Wasseransammlungen vermieden. Wasser, das sich an möglichen Ansammlungsflächen ablagert, wird unter

Verwendung der 'Degassing' Wandrandbedingung aus dem Strömungsvolumen entfernt.

5.5 Ergebnisse

Abb. 5.4 zeigt in einem zweidimensionalen Schnitt durch den KONVOI das Geschwindigkeitsfeld der Gasphase, die durch eine Mischung aus Partikeln und Umgebungsluft zu verschiedenen Zeitschritten modelliert ist. Von Beginn der Sprayaktivierung bis zu einer Zeit von 10 s stellt sich ein sehr gleichmäßiges Geschwindigkeitsfeld ein. Abb. 5.4 a) zeigt unterhalb der Spraydüsen eine stark gerichtete Strömung hin zum Anlagenraum. Dies ist durch das eingesprühete Wasser und der Widerstandskraft zwischen Tropfen und Gas zu erklären. Die Widerstandskraft sorgt dafür, dass die Gasphase mitgerissen wird. Das im Anlagenraum und direkt darüber befindliche Gas wird verdrängt und strömt entlang der Wand des Sicherheitsbehälters in den Bereich der Spraydüsen, wo es wiederum durch einen Sog in das Spray hineingezogen wird. Mit weiter fortschreitender Simulationszeit bis 1000 s, siehe Abb. 5.4 b) - e), wird das Geschwindigkeitsfeld ungleichmäßiger mit zahlreichen Wirbeln. Die Wirbelbildung und deren Auflösung und Verschiebung in andere Bereiche des KONVOI ist bedingt durch die zyklische Aktivierung des Spraysystems.

In Abb. 5.5 ist die Temperatur der Gasphase für unterschiedliche Zeitschritte in einer zweidimensionalen Schnittebene gezeigt. Bei der Schnittebene handelt es sich um dieselbe, die zur Darstellung der Geschwindigkeitsvektoren verwendet wird, siehe Abb. 5.4. Die dargestellten Temperaturverteilungen haben einen zeitlichen Abstand von 250 s, beginnend mit der Initialbedingung für die Temperatur in Abb. 5.5 a). Bis zu einer Zeit von 250 s werden die Düsen insgesamt drei Mal aktiviert und sprühen jeweils 1 kg/s Wasser mit einer Temperatur von 20°C in den Sicherheitsbehälter ein. Die Zeitschritte bei 250 s und 750 s zeigen das Temperaturfeld während der Sprayaktivierung. Im Vergleich zu den Zeitschritten ohne Aktivierung bei 500 s und 1000 s ist die starke Reduktion der Gastemperatur im Spraybereich ersichtlich. In den Spraypausen wird das Temperaturfeld des Gases mit seinen Gradienten durch anhaltende aber sich reduzierende Gasbewegungen homogenisiert. Einige Bereiche unterhalb der Düse, speziell im Anlagenraum, verbleiben aufgrund der räumlichen Abgrenzung und geringer Gasbewegung weiterhin in ungekühltem Zustand.

In Abb. 5.6 sind Temperaturverläufe der Gasphase und der Verlauf des Absolutdrucks über der Zeit dargestellt. Die Messstellen der Gastemperatur und des Drucks sind im Strömungsfeld verteilt angeordnet. Dabei repräsentiert MP 1 eine Messstelle im Zentrum des KONVOI oberhalb der Spraydüsen, während MP 2 und MP 3 im Spraygebiet positioniert sind, siehe Abb. 5.5 a). An MP 2 und MP 3 reduziert sich direkt zu Beginn der Sprayaktivierung die Gastemperatur auf ca. 85°C. Nach ca. 50 s erhöht sich die Temperatur wieder auf 90°C. Wieder 50 s später wird die Gastemperatur erneut reduziert. Der zyklische Temperaturverlauf ist auf das Spray zurückzuführen, welches an dieser Stelle das Gas sehr stark abkühlt. Die Erhöhung der Temperatur kann dagegen der Nachfüh-

zung heißerer Gasschichten und dem Homogenisierungsvorgang zugeschrieben werden. Ein zyklischer Temperaturverlauf ist bei MP 1 nicht zu erkennen. Aufgrund der Lage der Messstelle wird die Temperatur nur durch Homogenisierungsvorgänge im KONVOI beeinflusst. Dies erklärt auch die zeitversetzte Reaktion. Bis zu einer Zeit von annähernd 130s verbleibt die Temperatur konstant. Erst nachdem sich eine Gasbewegung in der Atmosphäre eingestellt hat, kommt es zu einer allmählichen Abkühlung. Im kompletten KONVOI kann die Gastemperatur während der ersten 1000s im vorliegenden Szenario durchschnittlich um 12% abgekühlt werden. Ausgehend von einem Absolutdruck von 1,5 bar im KONVOI kann dieser während den ersten 1000s auf 1,4 bar reduziert werden. Die Druckreduzierung verläuft immer im Einklang mit der Sprayeindüsung, weshalb der Verlauf während den Spraypausen konstant bleibt.

Abb. 5.7 zeigt die Verteilung der CsI Aerosolpartikel im KONVOI. Ausgehend von einer konstanten Verteilung des CsI, reduziert das Spray den Anteil der Partikel im Betriebsraum bis zu einer Zeit von 1000s sehr stark. Auffällig ist dabei, dass die Auswaschung des Gases größtenteils unterhalb der Düsen stattfindet, bis in den Spraypausen die Partikel durch die Gasbewegung wieder verteilt werden. Am Ende der Simulation konnten ca. 75% der zu Beginn der Simulation vorhandenen Partikel im KONVOI ausgewaschen werden.

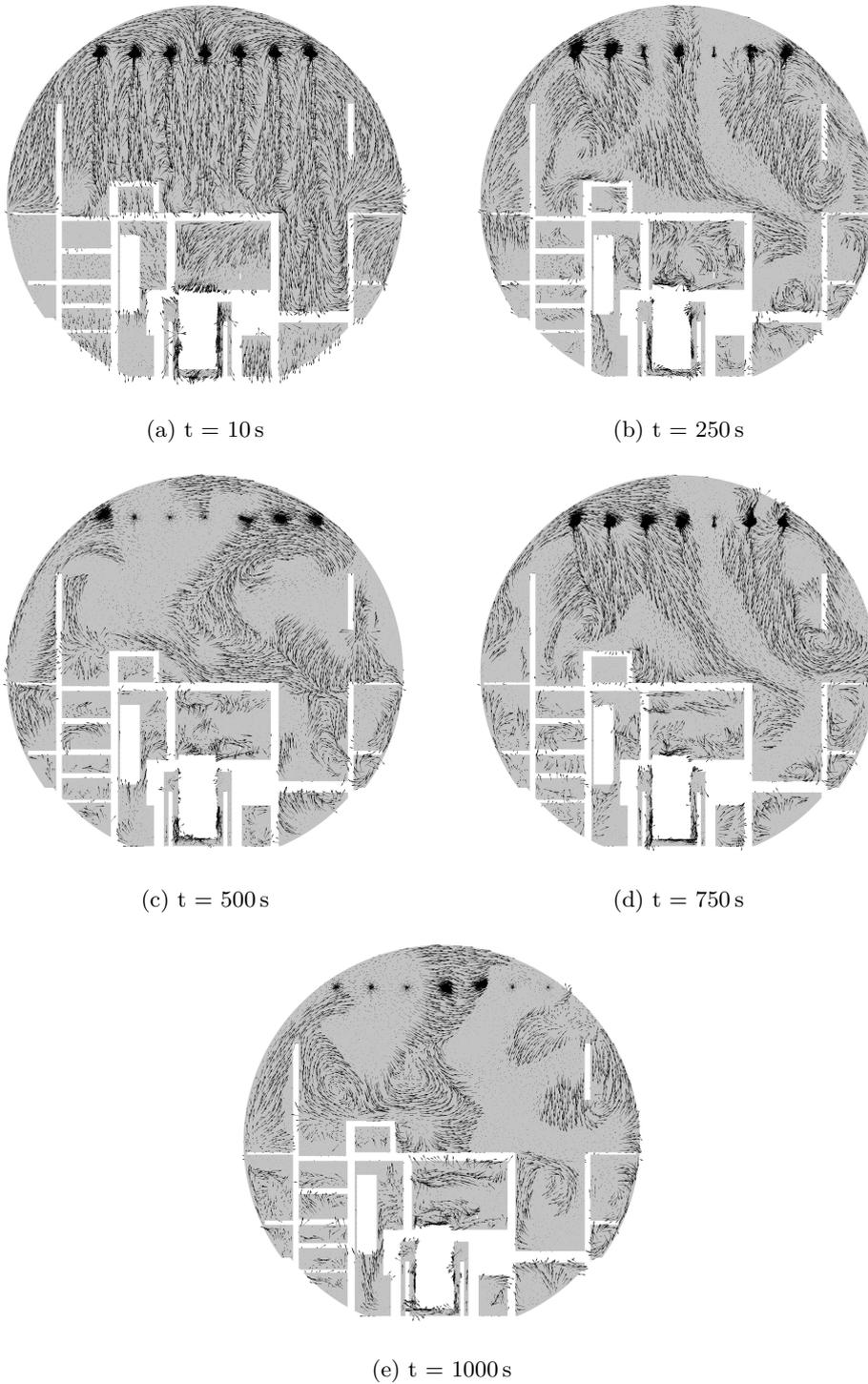


Abbildung 5.4: Geschwindigkeitsvektoren der Gasphase im generischen KONVOI bei verschiedenen Zeitschritten

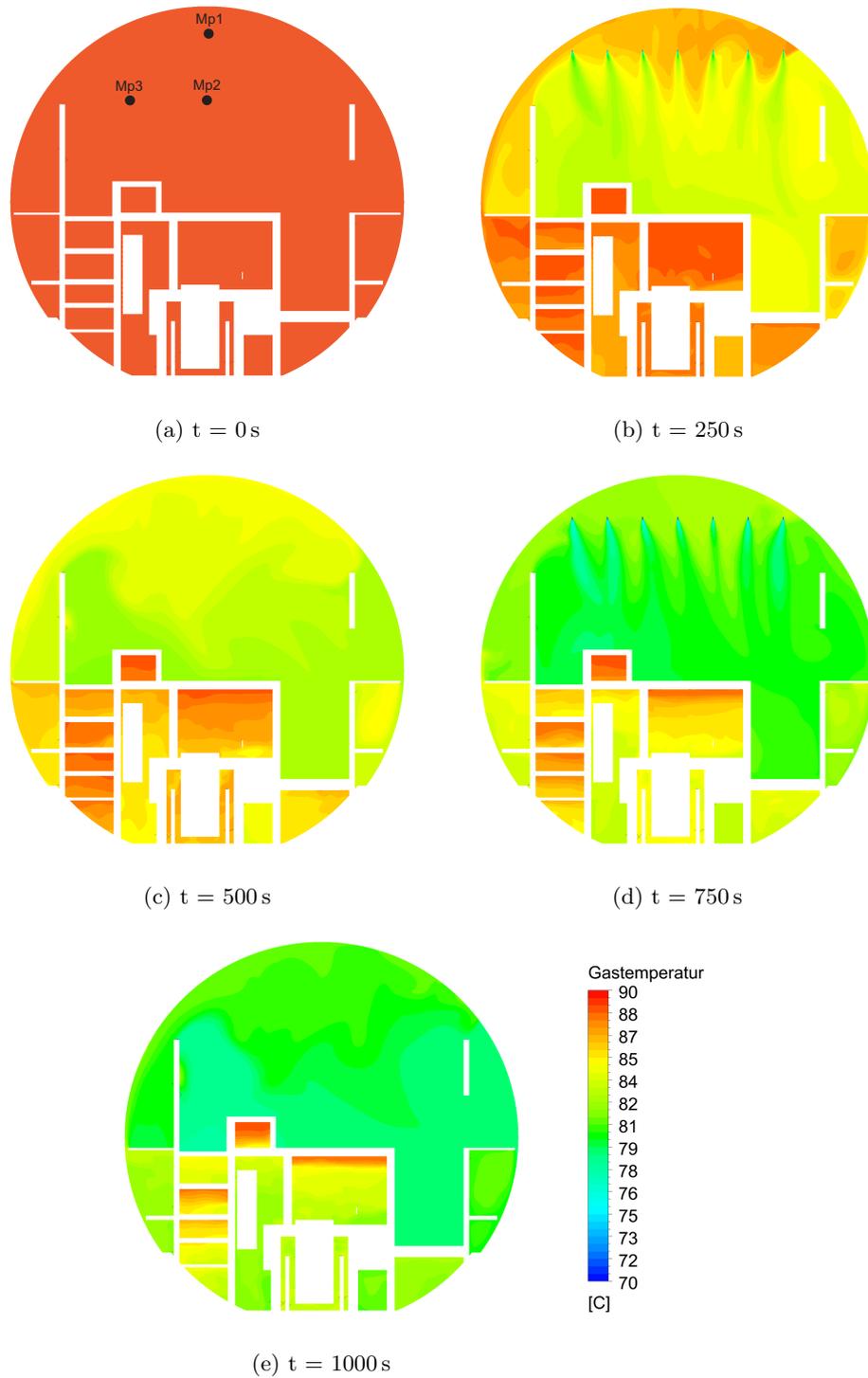
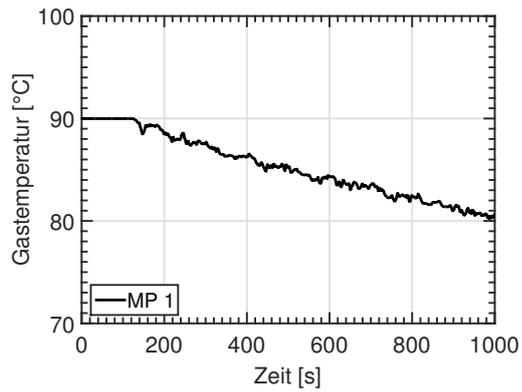
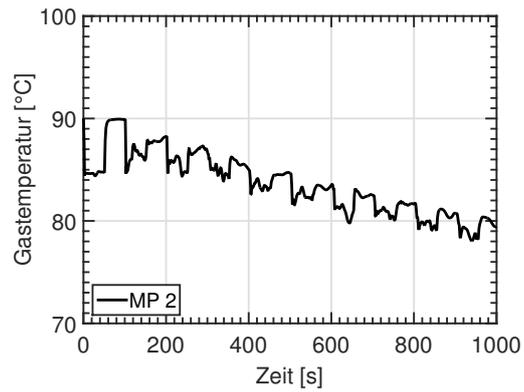


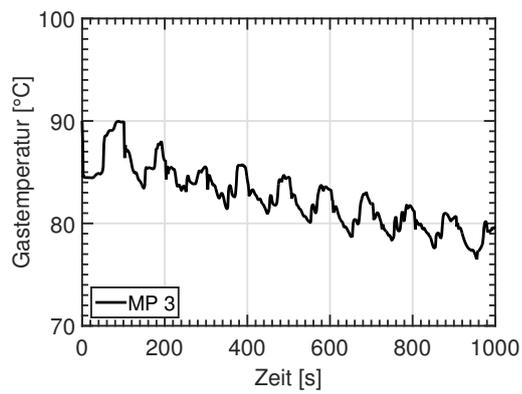
Abbildung 5.5: Gastemperatur im generischen KONVOI zu verschiedenen Zeitschritten



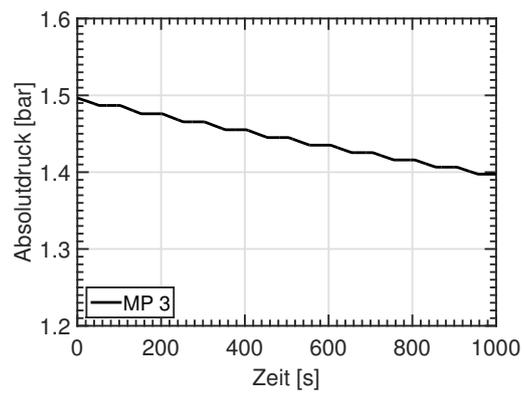
(a) Gastemperatur an MP 1



(b) Gastemperatur an MP 2



(c) Gastemperatur an MP 3



(d) Absolutdruck an MP 3

Abbildung 5.6: Quantitative Verläufe der Gastemperatur und des Absolutdrucks im KONVOI

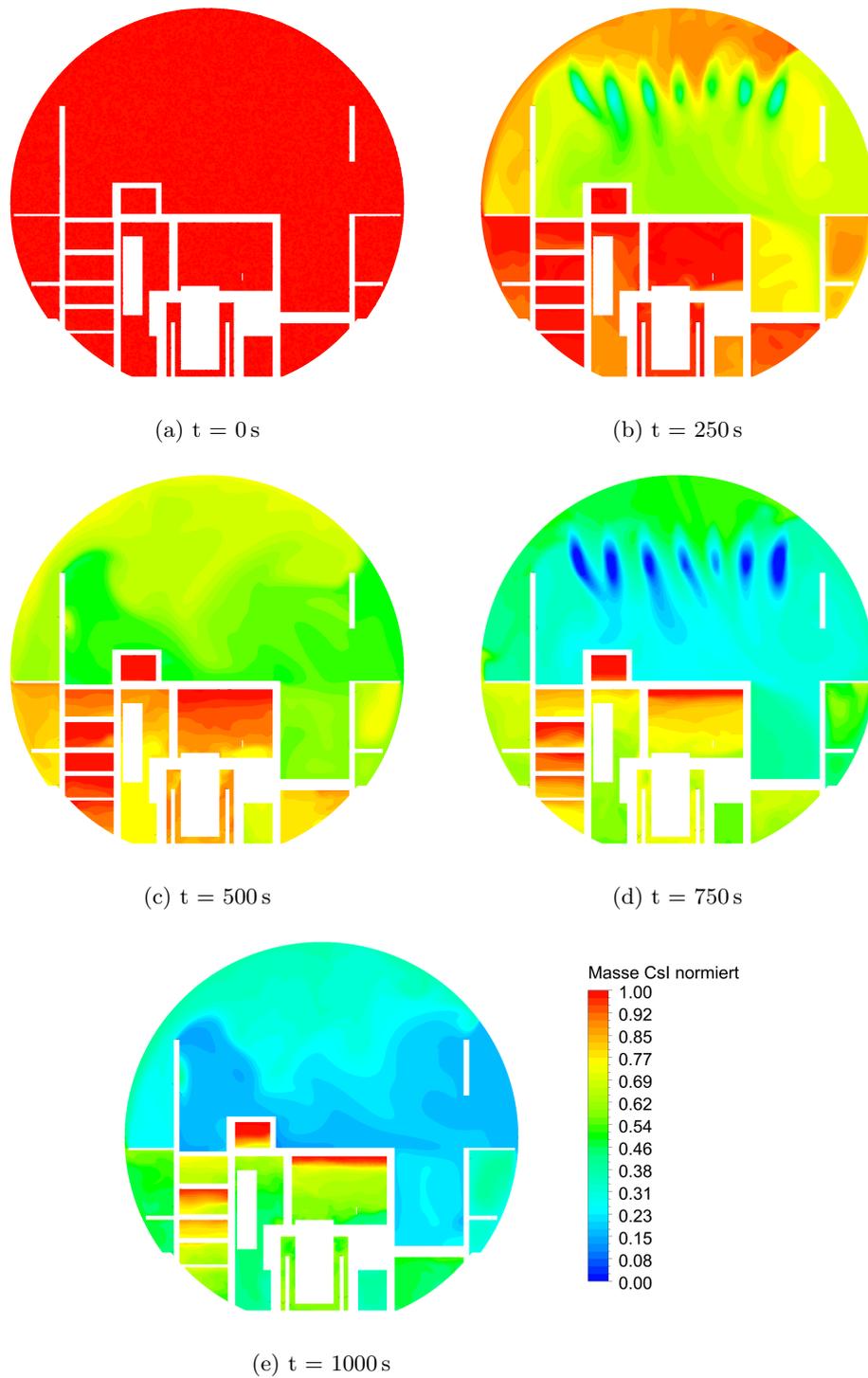


Abbildung 5.7: Normierte CsI Masse im generischen KONVOI zu verschiedenen Zeit-
schritten

6 Zusammenfassung und Ausblick

Ziel der Arbeit ist es, die Anwendungsmöglichkeiten von CFD-Methoden in der Reaktorsicherheitsforschung zu erweitern. Diese haben gegenüber den in der Reaktorsicherheitsforschung weit verbreiteten LP Codes den Vorteil, dass sie auf 'first principles' basieren, d.h. der Methode liegen Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie zugrunde. Um den Vorteil der hohen Auflösungsgüte von Strömungsgrößen und Stoffgrößen nutzen zu können, werden physikalische Modelle benötigt, die in die Grundgleichungen der CFD-Methode implementiert werden müssen. Trotz sehr hohem Rechenaufwand ist es das Fernziel der Forschung, thermohydraulische Störfälle, die im Sicherheitsbehälter einer kerntechnischen Anlage ablaufen können, in einem technisch und wirtschaftlich akzeptablen Zeitraum zu berechnen. Die vorliegende Arbeit präsentiert zwei physikalische Modelle, die auf einem Mehrfluid Ansatz basieren und zur Simulation der Spraykühlung und zur Auswaschung von Aerosolpartikel aus einer Gasatmosphäre mittels Spray verwendet werden können. Ein Mehrfluidmodell ist deshalb verwendet worden, da es sich bei Tropfen, Gas und Partikel um eigenständige Phasen mit eigenen strömungsmechanischen Eigenschaften handelt. Beide Modelle werden zur Überprüfung ihrer Wirksamkeit mit Experimenten, welche im Modellsicherheitsbehälter THAI durchgeführt wurden, validiert.

Grundlage des entwickelten Modells für Spraykühlung ist das Euler-Euler Zwei-Fluid Modell. Dieses Modell berücksichtigt ein separates Geschwindigkeitsfeld für die Gas- und Tropfenphase. Das verwendete Validerungsexperiment THAI HD-31-SE untersucht die Auswirkung, wenn ein kaltes Wasserspray in eine heiße feuchte Atmosphäre eingedüst wird, bei der die Atmosphäre aus einem Gemisch aus Luft und Wasserdampf besteht. Die initiale Gaszusammensetzung des Experiments ist an eine Zusammensetzung während eines Störfalls in einem realen Sicherheitsbehälter angelehnt. Das entwickelte physikalische Modell soll die Temperaturreduzierung des Gases sowie die Druckabsenkung vorhersagen können. Das Spraykühlungsmodell wird in zwei verschiedenen Simulationen untersucht. Die erste Simulation berücksichtigt vereinfacht monodisperse Tropfen. Durch diese Vereinfachung haben ausnahmslos alle Tropfen des Sprays den gleichen Durchmesser. Die zweite Simulation ist so erweitert, dass die real gemessene Tropfenverteilung durch fünf verschiedene Tropfendurchmesser mit je einem separaten Geschwindigkeitsfeld berücksichtigt wird. Die Ergebnisse der Simulationen zeigen eine akzeptable Übereinstimmung von Experiment und Simulation für die Konfiguration mit Tropfenspektrum.

Das entwickelte Auswaschmodell für Partikel basiert ebenso wie das Spraykühlungsmodell auf einem Euler-Euler Zwei-Fluid Modell. Bei der Modellbeschreibung sind ver-

schiedene mechanische Auswaschmechanismen zwischen Tropfen und Partikel modelliert und kombiniert worden. Der verwendete Validierungsversuch THAI AW 4 untersucht das Auswaschverhalten einer Wassersprayeindüsung in eine geschlossene partikelbeladene Gasatmosphäre. Als Partikel werden kleine Fragmente aus CsI verwendet. Durch Eindüsung von Wasser in Form eines Sprays reduziert sich der Partikelgehalt in der Gasatmosphäre, da die Partikel durch das eingebrachte Wasserspray ausgewaschen werden. Das Experiment wird in verschiedenen Simulationen nachgerechnet, bei denen der Modellierungseinfluss der Partikel und Tropfen auf die Übereinstimmung von Experiment und Simulation untersucht wird. Partikel werden zum einen aufgrund ihres sehr kleinen Durchmessers vereinfacht als Teil des Gases betrachtet und zum anderen mit einem eigenen Geschwindigkeitsfeld unabhängig von der Gasphase berücksichtigt. Untersuchungen haben gezeigt, dass bei sehr kleinen Partikeln der Rechenaufwand deutlich geringer ist, wenn die Partikel als Teil des Gases angenommen werden. Um der Realität Rechnung zu tragen, wurden in einer weiteren Simulation Partikel und Tropfen je als Verteilung mit verschiedenen Durchmessern berücksichtigt. Dazu wurde die messtechnisch ermittelte Tropfen- und Partikelverteilung verwendet. Die Ergebnisse der Simulationen zeigen, dass mit dem realitätsnächsten Simulationssetup die experimentellen Ergebnisse am Besten nachgerechnet werden können. Die Simulation benötigt jedoch aufgrund ihrer Komplexität mit zahlreichen Geschwindigkeitsfeldern sehr viel Rechenzeit. Zwischen dem einfachsten und aufwändigsten Simulationssetup variiert die Rechenzeit um bis zu 1550 %.

Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten physikalischen Modelle bilden wichtige thermohydraulische Prozesse im Sicherheitsbehälter einer kerntechnischen Anlage ab. Um die Anwendbarkeit und vor allem die Kombinationsmöglichkeit beider Modelle zu zeigen, wird ein vorliegendes CFD-Modell eines KONVOI verwendet. Da es in einer KONVOI Anlage kein Spraysystem gibt, ist für diesen Fall ein solches in die Simulation implementiert worden. Im generischen KONVOI können in einem fiktiven Störfall Spraykühlung mit paralleler Auswaschung von Aerosolpartikeln in ANSYS CFX erfolgreich simuliert werden. Mit dem vorgegebenen Störfallszenario konnte eine Abkühlung der Gastemperatur um 12 % und eine Reduktion der Aerosolpartikel um 75 % im Vergleich zu den Initialbedingungen der Simulation erreicht werden.

Aus der Entwicklung und Validierung der Modelle haben sich neben zahlreichen Erkenntnissen auch zusätzliche Fragen ergeben, welche in zukünftigen Arbeiten untersucht werden müssen. Wichtig ist hierbei die richtige und ausreichende Auflösung der Düsenregion für Sprayanwendungen. In der vorliegenden Arbeit ist der Beginn des Strömungsgebiets am Düsen Eintritt aufgrund fehlender CFD geeigneter experimenteller Daten sehr stark mit Hilfe trigonometrischer Verteilungsfunktionen für die Düsenaustrittsgeschwindigkeit modelliert. Wichtige Angaben für die Simulation von Spray mit CFD sind hierbei die Geschwindigkeitsverteilung der Tropfen über den kompletten Düsenaustritt sowie dazugehörige Tropfengrößenspektren für diese Stellen. Die angewandte Modellierung zeigt in der vorliegenden Arbeit akzeptable Ergebnisse, gleichwohl muss diese in weiterführenden

den Arbeiten an geeigneten Düsenexperimenten auf ihre Plausibilität überprüft werden.

Sehr wichtig für CFD Spraysimulationen sind detaillierte experimentelle Daten hinsichtlich Tropfengrößen über den kompletten Düseneintritt. Durch den Vergleich von monodispersen und polydispersen Tropfenverteilungen in der vorliegenden Arbeit wird der Einfluss eines Tropfenspektrums untersucht. Um die Abbildung der Realität in zukünftigen Simulationen verbessern zu können, bedarf es Messdaten, bei denen die Tropfengrößenverteilung über den kompletten Düsenaustritt gemessen wird.

In weiteren Arbeiten muss das Auswaschverhalten von Partikeln aus einer Gasatmosphäre detailliert untersucht werden. In der vorliegenden Arbeit sind mechanische Auswaschmechanismen wie Impaktion, Interzeption und Diffusionsabscheidung zum Ersten mal in Kombination mit CFD-Methoden im Kontext der Reaktorsicherheitsforschung verwendet worden. Diese Mechanismen sind wirksam solange Spraytropfen auf Partikel treffen. Es gibt jedoch auch Mechanismen, welche wirksam sind, wenn kein Spray vorhanden ist und die in diesem Fall eine Trennung von Partikel und Gasphase begünstigen. Die durchgeführten Validierungsrechnungen zum Versuch AW 4 haben gezeigt, dass die modellierten Mechanismen nicht alle Auswaschmechanismen abbilden, speziell wenn die Homogenisierungsphase im Anschluss an die Sprayaktivierung betrachtet wird. In diesem Bereich arbeitet das entwickelte Modell aufgrund des fehlenden Wassersprays nicht mehr und andere physikalische Mechanismen wie z.B. Thermophorese durch Temperaturgradienten oder Partikelinteraktionen mit Wänden werden zunehmend relevanter.

In der vorliegenden Arbeit wird für beide Validierungsfälle in THAI das angesammelte Wasser zur Reduktion des numerischen Aufwands nicht berücksichtigt. Das Wasser, welches eingesprüht wird, sammelt sich im Experiment im Sumpfbereich. Der Wasserspiegel des Sumpfs steigt mit zunehmender Wasserzufuhr an. In den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen ist dieses Verhalten komplett vernachlässigt. Treffen Tropfen auf die Wand von THAI, werden sie entfernt. In zukünftigen Arbeiten muss die Auflösung des Sumpfs berücksichtigt werden, um die Simulationen weiter an die Realität anzupassen. Es muss untersucht werden, inwiefern die Annahme eines Tropfens in einer gebildeten Wasseransammlung zutrifft und wie sich die Widerstandskraft zwischen den Tropfen in einer Ansammlung verändert. Die bisherige Modellierung des Widerstandskoeffizienten bezieht sich auf die Annahme, dass Tropfen in disperser Form vorliegen. In einer Ansammlung ist dies jedoch nicht mehr gegeben. Im konkreten Fall würde eine Simulation mit modelliertem Sumpf die Möglichkeit ergeben, den Verlauf, die Verteilung und die Ablagerung der ausgewaschenen Aerosolpartikel zu untersuchen.

Die durchgeführte Kombination beider entwickelter Modelle in einem KONVOI zeigt die Verbindung von Spraykühlung und AerosolpartikelAuswaschung in einer generischen kerntechnischen Anlage. In der Realität können während eines Störfalls noch weitere physikalische Effekte auftreten, z.B. die Vermischung von Wasserdampf und Sauerstoff zu einem zündfähigen Gemisch mit einer anschließenden lokalen Verbrennung. Das vorliegende Setup bietet für zukünftige Untersuchungen die Möglichkeit weitere Effekte wie z.B. Verbrennungsvorgänge zu berücksichtigen.

Literaturverzeichnis

- [1] ‘Nuclear Fuel Behaviour in Loss-of-coolant Accident (LOCA) Conditions’; Technischer Bericht 6846; OECD NEA; Paris, FRA, 2009
- [2] ‘The History of Nuclear Energy’; Technischer Bericht DOE/NE-0088; U.S. Department of Energy; Wahington D.C., USA, 2011
- [3] ‘OECD/SETH-2 Project PANDA and MISTRA Experiments - Final Summary Report’; Technischer Bericht NEA/CSNI/R(2012)5; OECD NEA; Paris, FRA, 2012
- [4] ‘ANSYS CFX-Solver Modeling Guide’; Technischer Bericht; ANSYS Inc.; Canonsburg, PA, USA, 2015
- [5] ‘World Energy Outlook’; Technischer Bericht; International Energy Agency (IEA); Paris, FRA, 2016
- [6] ‘International Status and Prospects for Nuclear Power 2017’; Technischer Bericht GOV/INF/2017-12GC(61)/INF/8; International Atomic Energy Agency (IAEA); Wien, AUT, 2017
- [7] ‘Nuclear Power Reactors in the World’; Technischer Bericht IAEA-RDS-2/37; International Atomic Energy Agency (IAEA); Wien, AUT, 2017
- [8] *Allelein, H.J., Arndt, S., Klein-Heßling, W., Schwarz, S., Spengler, C. und Weber, G.*: ‘COCOSYS: Status of Development and Validation of the German Containment Codes System’; Nuclear Engineering and Design; 238 872 – 889, 2008
- [9] *Allelein, H.J., Auvinen, A., Ball, J., Güntay, S., Herranz, L.E., Hidaka, A., Jones, A., Kissane, M., Powers, D. und Weber, G.*: ‘State of the Art Report on Nuclear Aerosols’; Technischer Bericht NEA/CSNI/R(2009)5; OECD NEA; Paris, FRA, 2009
- [10] *Allelein, H.J., Fischer, K., Vendel, J., Malet, J., Studer, E., Schwarz, S., Houkema, M., Paillere, H. und Bentaib, A.*: ‘International Standard Problem - ISP 47 on Containment Thermal Hydraulics - Final Report’; Technischer Bericht NEA/CSNI/R(2007)10; OECD NEA; Paris, FRA, 2007

- [11] *Allelein, H.J., Fischer, K., Vendel, J., Malet, J., Studer, E., Schwarz, S., Houkema, M., Paillère, H. und Bentaib, A.*: ‘International Standard Problem ISP-47 on Containment Thermal-hydraulics’; NEA Updates, NEA News; 25.2 28 – 29, 2007
- [12] *Ambrosini, W., Bucci, M., Forgione, N., Paci, S., Magnaud, J.P., Studer, E., Reinecke, E., Kelm, S., Jahn, W., Travis, J., Wilkening, H., Heitsch, M., Kljenak, I., Babić, M., Houkema, M., Visser, D.C., Vyskocil, L., Kostka, P. und Huhtanen, R.*: ‘Comparisons and Analysis of the Condensation Benchmark Results’; in: The 3rd European Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR-2008); Nesseber, Bulgarien, 2008
- [13] *Areva*: ‘Design, Safety Technology and Operability Features of EPR’; in: Interregional Workshop on Advanced Nuclear Reactor Technology for Near Term Development; Wien, AUT, 2011
- [14] *Babić, M., Kljenak, I. und Mavko, B.*: ‘Prediction of Light Gas Distribution in Experimental Containment Facilities Using the CFX4 Code’; Nuclear Engineering and Design; 238 538 – 550, 2008
- [15] *Babić, M., Kljenak, I. und Mavko, B.*: ‘Simulations of TOSQAN Containment Spray Tests With Combined Eulerian CFD and Droplet-Tracking Modelling’; Nuclear Engineering and Design; 239 708 – 721, 2009
- [16] *Burns, A.D., Frank, T., Hamil, I. und Shi, J.M.*: ‘The Fravre Averaged Model for Turbulent Dispersion in Eulerian Multi-Phase Flows’; in: Proc. of 5th International Conference on Multiphase Flow; Yokohama, Japan, 2004
- [17] *Cheng, L.*: ‘Collection of Airborne Dust by Water Sprays’; Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development; 12(3) 221 – 225, 1973
- [18] *Crowe, C., Sommerfeld, M. und Tsuji, Y.*: Multiphase Flows with Droplets and Particles; CRC-Press, Boca Raton, FL, USA, 1998
- [19] *Czech, J., Wirkner, J., Yvon, M., Serret, M., Krugmann, U., Schmidt, K.E., Berger, J.P. und Grenet, M.*: ‘European Pressurized Water Reactor: Safety Objectives and Principles’; Nuclear Engineering and Design; 187 25 – 32, 1999
- [20] *Ding, P., Liu, Y., Li, W., Wang, B., Zhang, C. und Chen, M.*: ‘Numerical Investigations on the Performance of the Combined Passive and Spray Cooling System Under Nuclear Severe Accident’; Annals of Nuclear Energy; 105 329 – 345, 2017
- [21] *Ding, P., Liu, Y., Wang, B., Li, W. und Wang, J.*: ‘The Homogeneous and Lagrangian Tracking Approaches of the Spray Simulation in the Containment’; Annals of Nuclear Energy; 101 203 – 214, 2017

-
- [22] *Dolder Ingenieurbüro, C.*: ‘Mollierdiagramm für 1 bar (-20C - 100C)’; https://www.dolder-ing.ch/wissen/Lueftung-Klima/h-x-diagramm/h-x-diagramm-pdf-vorlagen-download/Mollier_h,x-Diagramm_1bar_-20bis100_0-50.pdf; [Stand 22-01-2018], 2018
- [23] *Filippov, A., Grigoryev, S., Drobyshevsky, N., Kiselev, A., Shyukin, A. und Yudina, T.*: ‘CMFD Simulation of ERCOSAM PANDA Spray Tests PE1 and PE2’; Nuclear Engineering and Design; 299 81 – 94, 2016
- [24] *Fischer, K. und Kanzleiter, T.*: ‘Experiments and Computational Models for Aerosol Behaviour in the Containment’; Nuclear Engineering and Design; 191 53 – 67, 1999
- [25] *Friedlander, S.K.*: Smoke, Dust and Haze - Fundamentals of Aerosol Behaviour; John Wiley & Sons, New York, NY, USA, 1977
- [26] *Fuchs, N.*: The Mechanics of Aerosols; Pergamon Press, Oxford, UK, 1964
- [27] *Guelfi, A., Bestion, D., Boucker, M., Boudier, P., Fillion, P., Grandotto, M., Hérard, J.M., Hervieu, E. und Péturaud, P.*: ‘NEPTUNE - A New Software Platform for Advanced Nuclear Thermal Hydraulics’; Nuclear Science and Engineering; 156 281 – 324, 2007
- [28] *Gupta, S., Kanzleiter, T., Fischer, K., Langer, G. und Poss, G.*: ‘Interaction of a Stratified Light Gas Layer with a Buoyant Jet in Containment: Hydrogen/Helium Material Scaling’; in: Proc. of International Congress on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP); San Diego, CA, USA, 2010
- [29] *Gupta, S., Langer, G. und Colombet, M.*: ‘Hydrogen Combustion during Spray Operation: HD-30, HD-31 and HD-32’; Technischer Bericht OECD-NEA THAI-2 Project, 1501420-TR-HD-30-32; Becker Technologies GmbH; Eschborn, GER, 2014
- [30] *Gupta, S., Schmidt, E., Freitag, M., Langerock, G. und Funke, F.*: ‘Experimental Investigations on Containment Spray Performance Under Severe Accident Conditions’; in: The 8rd European Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR-2017); Warschau, PL, 2017
- [31] *Gupta, S., Schmidt, E., von Laufenberg, B., Freitag, M., Poss, G., Funke, F. und Weber, G.*: ‘THAI Test Facility for Experimental Research on Hydrogen and Fission Product Behaviour in Light Water Reactor Containments’; Nuclear Engineering and Design; 294 183 – 201, 2015
- [32] *Hauk, A.*: ‘Wie funktioniert eigentlich ein Photometer? - Die Laborseite’; Biologie unserer Zeit; 43 212 – 212, 2013

- [33] *Hinds, W.C.*: Aerosol Technology: Properties, Behaviour and Measurement of Airborne Particles; Wiley, New York, NY, USA, 1999
- [34] *Houkema, M., Siccama, N.B., Lycklama à Nijeholt, J.A. und Komen, E.M.J.*: ‘Validation of the CFX4 CFD Code for Containment Thermal-Hydraulics’; Nuclear Engineering and Design; 238 590 – 599, 2008
- [35] *Ishii, M. und Hibiki, T.*: Thermo-fluid Dynamics of Two-phase Flow; Springer, New York, NY, USA, 2006
- [36] *Ishii, M. und Mishima, K.*: ‘Two-Fluid Model and Hydrodynamic Constitutive Relations’; Nuclear Engineering and Design; 82 107–126, 1984
- [37] *Kaltenbach, C. und Laurien, E.*: ‘Numerical Simulation of Droplet Flows in a Pressurized Water Reactor Containment’; in: Proc. of Annual Meeting on Nuclear Technology; Hamburg, GER, 2016
- [38] *Kaltenbach, C. und Laurien, E.*: ‘Numerical Simulation of Droplet Flows in the Model Containment THAI’; in: Proc. of Computational Fluid Dynamics for Nuclear Reactor Safety Applications 6 (CFD4NRS-6); Cambridge, MA, USA, 2016
- [39] *Kaltenbach, C. und Laurien, E.*: ‘CFD Simulation of Aerosol Removal by a Spray in the Model Containment THAI’; in: Proc. of 17th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-17); Xi’an, China, 2017
- [40] *Kaltenbach, C. und Laurien, E.*: ‘CFD Simulation of Aerosol Particle Removal by Water Spray in the Model Containment THAI’; Journal of Aerosol Science; (accepted manuscript), 2018
- [41] *Kaltenbach, C. und Laurien, E.*: ‘CFD Simulation of Spray Cooling in the Model Containment THAI’; Nuclear Engineering and Design; 328 359 – 371, 2018
- [42] *Kanzleiter, T.*: ‘THAI-Experiment TH 2’; Technischer Bericht 1501218-TH2; Becker Technologies GmbH; Eschborn, GER, 2002
- [43] *Kanzleiter, T., Ahrens, G., Fischer, K., Wäflner, W., Kühnel, A., Poss, G., Funke, F., Langrock, G., Allelein, H.J., Weber, G. und Schwarz, S.*: ‘Versuchsanlage und Programm zur Untersuchung offener Fragen zum Spaltproduktverhalten im Sicherheitsbehälter, THAI Phase II - Teil 1: Versuchsanlage, Thermohydraulik- und Aerosol-Versuche’; Technischer Bericht 1501272-S1; Becker Technologies GmbH; Eschborn, GER, 2007
- [44] *Kelm, S., Kapulla, R. und Allelein, H.J.*: ‘Erosion of a Confined Stratified Layer by a Vertical Jet - Detailed Assessment of a CFD Approach Against the OECD/NEA PSI Benchmark’; Nuclear Engineering and Design; 312 228 – 238, 2017

-
- [45] *Kelm, S., Ritterath, M., Prasser, H.M. und Allelein, H.J.*: ‘Application of the Mini-Panda Test Case Erosion of Stratified Layer by a Vertical Jet for CFD Validation’; Nuclear Engineering and Design; 299 124 – 135, 2016
- [46] *Kessler, G.*: Sustainable and Safe Nuclear Fission Energy; Springer, Heidelberg, GER, 2012
- [47] *Kessler, G., Vesper, A., Schlüter, F.H., Raskob, W., Landman, C. und Päsler-Sauer, J.*: Sicherheit von Leichtwasserreaktoren - Risiken der Nukleartechnologie; Springer Vieweg, Berlin, GER, 2012
- [48] *Kim, J., Lee, U., Hong, S.W., Kim, S.B. und Kim, H.D.*: ‘Spray Effect on the Behavior of Hydrogen During Severe Accidents by a Loss-Of-Coolant in the APR1400 Containment’; International Communications in Heat and Mass Transfer; 33 1207 – 1216, 2006
- [49] *Kljenak, I. und Mavko, B.*: ‘Simulation of KAEVER Experiments on Aerosols Behavior in a Nuclear Power Plant Containment at Accident Conditions with ASTEC Code’; in: Proc. of International Conference Nuclear Energy for New Europe; Portoroz, SLO, 2008
- [50] *Kolev, N.*: Multiphase Flow Dynamics 2 - Mechanical and Thermal Interactions; Springer, Berlin, GER, 2002
- [51] *Kuhn, S.Z., Peterson, P.F. und Schrock, V.E.*: ‘Determination of the Local Heat Flux in Condensation Experiments’; Experimental Heat Transfer; 9 149 – 163, 1996
- [52] *Kuhn, S.Z., Schrock, V.E. und Peterson, P.F.*: ‘An Investigation of Condensation from Steam-Gas Mixtures Flowing Downward Inside a Vertical Tube’; Nuclear Engineering and Design; 177 53 – 69, 1997
- [53] *Laufs, P.*: Reaktorsicherheit für Leistungskernkraftwerke - Die Entwicklung im politischen und technischen Umfeld der Bundesrepublik Deutschland; Springer Vieweg, Berlin, GER, 2013
- [54] *Laurien, E. und Oertel jr., H.*: Numerische Strömungsmechanik; Springer Vieweg, Wiesbaden, GER, 2013
- [55] *Licht, W.*: Air Pollution Control Engineering: Basic Calculations for Particulate Collection; Dekker, New York, NY, USA, 1980
- [56] *Lim, K.S., Lee, S.H. und Park, H.S.*: ‘Prediction for Particle Removal Efficiency of a Reverse Jet Scrubber’; Journal of Aerosol Science; 37 1826 – 1839, 2006

- [57] *Malet, J., Blumenfeld, L., Arndt, S., Babić, M., Bentaib, A., Dabbene, F., Kostka, P., Mimouni, S., Movahed, M., Paci, S., Parduba, Z., Travis, J. und Urbonavicius, E.*: ‘Sprays in Containment: Final Results of the SARNET Spray Benchmark’; Nuclear Engineering and Design; 241 2162 – 2171, 2011
- [58] *Malet, J. und Huang, X.*: ‘Influence of Spray Characteristics on Local Light Gas Mixing in Nuclear Containment Reactor Applications’; Computer & Fluids; 107 11 – 24, 2015
- [59] *Malet, J., Lemaitre, P., Porcheron, E., Vendel, J., Bentaib, A., Plumecocq, W., Dumay, F., Chin, Y.C., Krause, M., Blumenfeld, L., Dabbene, F., Royl, P. und Travis, J.*: ‘Modelling of Sprays in Containment Applications: Results of the TO-SQAN Spray Benchmark (TEST 101)’; in: The 1st European Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR-2005); Aix-en-Provence, FRA, 2005
- [60] *Malet, J., Mimouni, S., Manzini, G., Xiao, J., Vyskocil, L., Siccama, N.B. und Huhtanen, R.*: ‘Gas Entrainment by One Single French PWR Spray, SARNET-2 Spray Benchamrk’; Nuclear Engineering and Design; 282 44 – 53, 2015
- [61] *Malet, J., Parduba, Z., Mimouni, S. und Travis, J.*: ‘Achievements of Spray Activities in Nuclear Reactor Containments During the Last Decade’; Annals of Nuclear Energy; 74 134 – 142, 2014
- [62] *Manninen, M. und Taivassalo, V.*: ‘On the Mixture Model for Multiphase Flow’; Technischer Bericht VTT Publications 288; Valtion Teknillinen Tutkimuskeskus (VTT); Espoo, FIN, 1996
- [63] *Marchand, D., Porcheron, E., Lemaitre, P. und Grehan, D.*: ‘Characterization of the Washout of Aerosols by Spraying Water for Thermal Hydraulic Conditions Representative of a Severe Accident in Nuclear Reactor Containment’; in: Proc. of International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ICLASS), 2006
- [64] *Menter, F.*: ‘Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications’; The American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal; 32(8) 1598 – 1605, 1994
- [65] *Mignot, G., Paranjape, S., Kapulla, R. und Paladino, D.*: ‘Performance of Hydrogen Mitigation Systems for a Scaled Accident Scenario: Overview of ERCOSAM Project Experimental Results for the PANDA Facility’; in: Proc. of 16th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-16); Chicago, IL, USA, 2015

-
- [66] *Mimouni, S., Lamy, J.S., Lavieville, J. und Martin, M.*: ‘Modelling of Sprays in Containment Applications with a CMFD Code’; Nuclear Engineering and Design; 240 2260 – 2270, 2010
- [67] *Möller, A. und Pape, J.*: Den Ausstieg aus der Kerntechnik sicher gestalten; Springer, Berlin, GER, 2011
- [68] *Paladino, D., Andreani, M., Guentay, S., Mignot, G., Kapulla, R., Paranjape, S., Sharabi, M., Kisselev, A., Yudina, T., Filippov, A., Kamnev, M., Khizbullin, A., Tyurikov, O., Liang, Z., Abdo, D., Brinster, J., Dabbene, F., Kelm, S., Klauck, M., Götz, L., Gehr, R., Malet, J., Bentaib, A., Bleyer, A., Lemaitre, P., Porcheron, E., Benz, S., Jordan, T., Xu, Z., Boyd, C., Siccama, A. und Visser, D.*: ‘Outcomes From the EURATOM-ROSATOM ERCOSAM SAMARA Projects on Containment Thermal-Hydraulics for Severe Accident Management’; Nuclear Engineering and Design; 308 103 – 114, 2016
- [69] *Paladino, D. und Dreier, J.*: ‘PANDA: A Multipurpose Integral Test Facility for LWR Safety Investigations’; Science and Technology of Nuclear Installations; 2012, 2011
- [70] *Park, S.H., Jung, C.H., Jung, K.R., Lee, B.K. und Lee, K.W.*: ‘Wet Scrubbing of Polydisperse Aerosols by Freely Falling Droplets’; Journal of Aerosol Science; 36(12) 1444 – 1458, 2005
- [71] *Parsly, L.F.*: ‘Removal of Radioactive Particles by Sprays’; Technischer Bericht ORNL-4671; Oak Ridge National Laboratory; Oak Ridge, TN, USA, 1971
- [72] *Poling, B.E., Prausnitz, J.M. und O’Connell, J.P.*: The Properties of Gases and Liquids; McGraw-Hill, New York, NY, USA, 2001
- [73] *Porcheron, E., Lemaitre, P., Nuboer, A., Rochas, V. und Vendel, J.*: ‘Experimental Investigation in the TOSQAN Facility of Heat and Mass Transfers in a Spray for Containment Application’; Nuclear Engineering and Design; 237 1862 – 1871, 2007
- [74] *Povilaitis, M. und Urbonavicius, E.*: ‘Simulations of MASPn Experiments in MISTRA Test Facility with COCOSYS Code’; Science and Technology of Nuclear Installations; 2008 1 – 7, 2008
- [75] *Ranz, W.E. und Marshall, W.R.*: ‘Evaporation from Drops, Part I & II’; Chemical Engineering Progress; Seiten 41 – 180, 1952
- [76] *Scheibel, H.G., Poss, G. und Weber, D.*: ‘KAEVER: An Experiment for an Improved Understanding of Aerosol Depletion Processes in a Reactor Containment’; Journal of Aerosol Science; 23 209 – 212, 1992

- [77] *Schmidt, E., Colombet, M., Freitag, M. und von Laufenberg, B.*: ‘Aerosol Spray Test with CsI Aerosols’; Technischer Bericht 1501455; Becker Technologies GmbH; Eschborn, GER, 2015
- [78] *Seinfeld, J. und Pandis, S.*: Atmospheric Chemistry and Physics; Wiley, Hoboken, NJ, USA, 2006
- [79] *Stephan, P., Schaber, K., Stephan, K. und Mayinger, F.*: Thermodynamik - Grundlagen und technische Anwendungen - Band 2: Mehrstoffsysteme und chemische Reaktionen; Springer, Heidelberg, GER, 2010
- [80] *Stewering, J., Schramm, B. und Sonnenkalb, M.*: ‘Modelling of Basic Phenomena of Aerosol and Fission Product Behavior in LWR Containments with ANSYS CFX’; in: Proc. of 17th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-17); Xi’an, China, 2017
- [81] *Strauss, W.*: Industrial Gas Cleaning (2nd Edition - S.I. Units); Pergamon Press, Sydney, AUS, 1975
- [82] *Studer, E., Magnaud, J.P., Dabbene, F. und Tkatschenko, I.*: ‘International Standard Problem on Containment Thermal-Hydraulics ISP47 Step 1 - Results from the MISTRA Exercise’; Nuclear Engineering and Design; 237 536 – 551, 2007
- [83] *Visser, D.C., Houkema, M., Siccama, N.B. und Komen, E.*: ‘Validation of FLUENT CFD Model for Hydrogen Distribution in a Containment’; Nuclear Engineering and Design; 245 161 – 171, 2012
- [84] *Zhang, J.*: Vorhersage dreidimensionaler Strömungs- und Kondensationsvorgänge im Sicherheitsbehälter mit CFD-Modellen; Dissertation; Institut für Kernenergetik und Energiesysteme, Universität Stuttgart, 2016
- [85] *Zhang, J. und Laurien, E.*: ‘Numerical Simulation of Flow with Volume Condensation in a Model Containment’; in: Proc. of International Congress on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP); Jeju Island, Südkorea, 2013
- [86] *Zhang, J. und Laurien, E.*: ‘Numerische Strömungssimulation mit Volumen Kondensation im Sicherheitsbehälter’; in: Proc. of Annual Meeting on Nuclear Technology; Berlin, GER, 2013
- [87] *Zhang, J. und Laurien, E.*: ‘Numerical Simulation of Flow with Volume Condensation in Presence of Non-condensable Gases in a PWR Containment’; in: Proc. of International Congress on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP); Charlotte, NC, USA, 2014

- [88] *Ziegler, A. und Allelein, H.J.*: Reaktortechnik - Physikalisch, technische Grundlagen; Springer Vieweg, Berlin, GER, 2013
- [89] *Zirkel, A.*: Numerical Investigation of the Turbulence Mass Transport During the Mixing of a Stable Stratification with a Free Jet; Dissertation; Institut für Kernenergetik und Energiesysteme, Universität Stuttgart, 2011
- [90] *Zirkel, A. und Laurien, E.*: 'Turbulence Modelling for CFD-Methods for Containment Flows'; in: W.E. Nagel, D.B. Kröner und M.M. Resch, Editoren, High Performance Computing in Science and Engineering '11; Seiten 451 – 468; Springer, Heidelberg, GER, 2011
- [91] *Zschoeck, G., Frank, T. und Burns, A.D.*: 'CFD Modelling and Validation of Wall Condensation in the Presence of Non-Condensable Gases'; in: Proc. of Computational Fluid Dynamics for Nuclear Reactor Safety Applications 4 (CFD4NRS-4); Yuseong, Daejeon, Südkorea, 2012
- [92] *Zschoeck, G., Frank, T. und Burns, A.D.*: 'CFD Modelling and Validation of Wall Condensation in the Presence of Non-Condensable Gases'; Nuclear Engineering and Design; 279 137 – 146, 2014