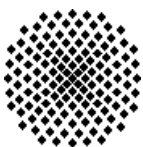


**Vorhersage dreidimensionaler
Strömungs- und
Kondensationsvorgänge im
Sicherheitsbehälter mit CFD-
Modellen**

Jing Zhang



Vorhersage dreidimensionaler Strömungs- und Kondensationsvorgänge im Sicherheitsbehälter mit CFD- Modellen

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

vorgelegt von

M.Sc. Jing Zhang

geboren in Qingdao, China

Hauptberichter:

Prof. Dr.-Ing. habil. Eckart Laurien

Mitberichter:

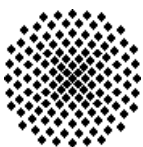
Prof. Dr.-Ing. Dr. h.c. Dr. h.c. Prof. E.h.

Michael M. Resch

Tag der Einreichung: 17.02.2015

Tag der mündlichen Prüfung: 22.07.2015

ISSN – 0173 – 6892




Institut für Kernenergetik und
Energiesysteme

Universität Stuttgart

Pfaffenwaldring 31

D-70569 Stuttgart



Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftliche Mitarbeiterin am Institut für Kernenergetik und Energiesysteme (IKE) der Universität Stuttgart. An dieser Stelle möchte ich mich herzlich bei allen bedanken, die mich während meiner Promotionszeit bei meiner Arbeit unterstützt haben.

Mein besonderer Dank gilt meinem Doktorvater Herrn Prof. Dr.-Ing. Eckart Laurien, dem Leiter der Abteilung Thermofluidodynamik, für die Überlassung des Themas sowie die Betreuung meiner Arbeit und seine wissenschaftliche Unterstützung. Durch die anregenden Diskussionen und sein umfangreiches Wissen hat er maßgeblich zum Gelingen meiner Arbeit beigetragen.

Dem Leiter des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS), Herrn Prof. Dr.-Ing. Michael M. Resch, danke ich herzlich in gleicher Weise für sein Interesse an meiner Arbeit und die Übernahme des Mitberichts.

Die vorliegende Forschungsarbeit wurde von dem Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) gefördert. Die Simulationen wurden auf dem NEC Nehalem Cluster und Cray XE6 (Hermit) Cluster des HLRS durchgeführt. Bei den Institutionen gilt mein Dank für die Unterstützung während meiner Forschungsarbeit.

Weiterhin danke ich der Firma ANSYS Germany für die stets gute Zusammenarbeit. Insbesondere möchte ich Herrn Guillermo Zschaeck für die fachliche Unterstützung bei der Anwendung in ANSYS CFX und die zahlreichen wertvollen Ratschlägen danken.

Allen Kollegen am Institut bin ich für die sehr angenehme Arbeitsatmosphäre und ihre Hilfsbereitschaft sehr dankbar. Ich möchte mich besonders bei meinem Bürokollegen David Klören für seine Hilfe und die interessanten wissenschaftlichen Diskussionen bedanken. Allen Doktoranden danke ich für den fachlichen Austausch und die gemeinsamen heiteren Aktivitäten außerhalb der Arbeitszeiten. Dafür vielen Dank an Thilo Stürzel, Jeanne Venker, Janis Lapins, Simon Leininger, Amine Ben Hadj Ali, Armin Zirkel, Yu Zhu, Josip Kutnjak, Mario Kuschewski, Nicole Guilliard, Johannes Bader, Ana Hartmann, Talianna Schmidt, Xu Chu, Mi Zhou, Torsten Boldt, Christophe D'Alessandro, Wolfgang Flaig, Ailine Trometer, Alexander Isaev, Schmid Stefan, Selvam Karthick und Christian Kaltenbach.

Mein größter Dank gilt meinen Eltern, die mich während des gesamten Studiums und der Promotion in Deutschland uneingeschränkt unterstützten. Ganz besonders danke ich meinem Mann Xiangyu Li für seine Unterstützung und Begleitung während der vergangenen Jahre.

Jing Zhang

Kurzfassung

Während eines schweren Kühlmittelverluststörfalls im Druckwasserreaktor kann Wasserstoff durch eine chemische Reaktion zwischen dem Hüllrohrmaterial Zirkonium der Brennstäbe und dem Wasserdampf entstehen. Über ein Leck im Primärkreislauf können der Wasserdampf und der produzierte Wasserstoff in den Sicherheitsbehälter freigesetzt werden. Die Kondensation kann entweder an kalten Wänden oder im freien Volumen innerhalb des Sicherheitsbehälters stattfinden. Da diese Kondensationsvorgänge die thermohydraulischen Prozesse, die Wasserstoffverbrennungsvorgänge und die räumliche Tropfenverteilung beeinflussen können, sind sie von großem Interesse für die Reaktorsicherheitsforschung.

In der CFD-Software ANSYS CFX 14.0 ist bereits ein Wandkondensationsmodell für eine Zweiphasenströmung vorhanden. Aber das Volumenkondensationsmodell ist noch nicht ausreichend entwickelt. Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein neues Volumenkondensationsmodell auf Basis des Zwei-Fluid-Modells für eine Zweiphasenströmung entwickelt. Die Gasphase ist ein Gemisch aus Wasserdampf und nichtkondensierbaren Gasen. Die Flüssigkeitsphase wird als eine disperse Tropfenphase modelliert. Unter Einsatz von mechanischen und thermischen Nichtgleichgewichtsmodellen wurden diese beiden Phasen mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten und Temperaturen simuliert. In Berücksichtigung der Schwerkraft können Tropfenbewegungen im Sicherheitsbehälter simuliert werden. Die Volumenkondensation wurde mit Massen- und Energieaustauschtermen durch die Tropfengrenzflächen modelliert.

Zuerst wurde das neu entwickelte Volumenkondensationsmodell für einen einfachen, stationären, zweidimensionalen Testfall getestet. Danach wurde das Volumenkondensationsmodell anhand des TH2-Experiments in Anwesenheit von nur einem nichtkondensierbaren Gas (Luft) und anhand des TH13-Experiments in Anwesenheit von zwei nichtkondensierbaren Gasen (Luft und Helium) validiert. Die Validierungsergebnisse zeigten eine gute Übereinstimmung mit beiden THAI-Experimenten über Temperatur und Druck. Anschließend wurde die Anwendbarkeit der Kondensationsmodelle durch Simulation des Strömungsverhaltens während eines angenommenen Störfallszenarios mit Leckströmung im Modell-Containment eines deutschen generischen DWR (Konvoi-Typ) für die Reak-

torsicherheit getestet. Da die Demonstrationsrechnung mit dem Wand- und Volumenkon-
densationsmodell im großen Modell-Containment durch die Verkleinerung der Zeit-
schrittweite sehr langsam und aufwändig ist, scheint die Anwendung des Volumenkon-
densationsmodells momentan noch nicht realistisch zu sein.

Abstract

During a loss of coolant accident in a Pressurized Water Reactor (PWR), e.g. a break of the surge line in the primary loop, a significant amount of hydrogen can be produced by a chemical reaction between steam and the zircaloy cladding. Thus, steam and hydrogen can be released from the reactor coolant system into the containment. The hydrogen-steam-air mixture could reach the conditions for deflagration of combustion or local detonations. Because of the influence of steam condensation on the gas mixing and hydrogen stratification in the containment, the wall and volume condensation phenomena are of interest for safety considerations.

The wall condensation model is available for a two-phase flow in the CFD code ANSYS CFX 14.0. However, the volume condensation has so far not been taken into account in the simulation of the two-phase flow in presence of non-condensable gases. This study presents a newly developed volume condensation model in the presence of non-condensable gases with two-phase flow for the ANSYS CFX 14.0 code. The two-fluid model with a continuous gas phase consisting of a gas mixture (steam and non-condensable gases), and a dispersed liquid phase composed of water droplets in mechanical and thermal non-equilibrium is applied. Both phases are modeled with separate temperatures and velocities. The motion of the droplet due to the gravitational force is considered. Volume condensation is modeled as a sink/source of mass and energy at the droplet interfaces.

The newly developed volume condensation model is tested firstly in a two-dimensional steady-state test case, and then validated with the condensation THAI experiments TH2 in presence of one non-condensable gas (air) and TH13 in presence of two non-condensable gases (air and helium). The transient results in temperature and pressure have shown a good agreement with both THAI experiments. Finally, the volume condensation model is used to simulate a postulated accident within a 'Generic Containment', which was developed on the basis of a German PWR (Konvoi type). During the application of the volume condensation model to the 'Generic Containment' the time step width had to be reduced drastically, which made the simulation become very time consuming. A demonstration could therefore not be performed.

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	I
Kurzfassung	III
Abstract	V
Inhaltsverzeichnis	VII
Bezeichnungen	X
1 Einleitung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Stand der Technik.....	2
1.2.1 Strömungs- und Kondensationsvorgänge im Sicherheitsbehälter	2
1.2.2 Wasserstoffverteilung im Containment.....	3
1.2.3 Experimente.....	4
1.2.4 LP-Codes	7
1.2.5 CFD-Codes	9
1.2.6 Die Theorie der Keimbildung.....	11
1.3 Zielsetzung der Arbeit	12
2 Theorie und Modellierung	15
2.1 Grundgleichungen	15
2.1.1 Ein-Fluid-Modell.....	15
2.1.2 Zwei-Fluid-Modell	18
2.2 Physikalische Kondensationsmodelle	20
2.2.1 Wandkondensationsmodell mit dem Ein-Fluid-Modell	20
2.2.2 Volumenkondensationsmodell mit dem Zwei-Fluid-Modell	22

2.2.3	Wand- und Volumenkondensationsmodell mit dem Zwei-Fluid-Modell	26
3	Verifikation	27
3.1	2D Testfall	27
3.1.1	Geometrie, Rand- und Anfangsbedingungen	28
3.1.2	Numerische Eigenschaften	29
3.1.3	Vergleich der Ergebnisse mit dem Mollier-Diagramm	29
3.2	2D TH2-Experiment	31
3.2.1	Geometrie, Rand- und Anfangsbedingungen	32
3.2.2	Numerische Eigenschaften	33
3.2.3	Gittereinfluss	33
3.2.4	Skalierbarkeit bei Parallelisierung	34
3.3	3D TH13-Experiment	36
3.3.1	Geometrie, Rand- und Anfangsbedingungen	37
3.3.2	Numerische Eigenschaften	39
3.3.3	Skalierbarkeit bei Parallelisierung	39
4	Validierung	41
4.1	2D TH2-Experiment	41
4.1.1	Ergebnisse mit dem Ein-Fluid-Modell	41
4.1.2	Ergebnisse mit dem Zwei-Fluid-Modell	48
4.2	3D TH13-Experiment	57
4.2.1	Ergebnisse mit dem Ein-Fluid-Modell	57
4.2.2	Ergebnisse mit dem Zwei-Fluid-Modell	69
5	Demonstration anhand eines 3D Modell-Containments	83
5.1	Geometrie, Rand- und Anfangsbedingungen	84
5.2	Numerische Eigenschaften	87
5.3	Skalierbarkeit bei Parallelisierung	87

5.4	Ergebnisse.....	88
5.4.1	Mit dem Ein-Fluid-Modell	88
5.4.2	Mit dem Zwei-Fluid-Modell.....	97
6	Zusammenfassung	99
7	Literaturverzeichnis	103
	Abbildungsverzeichnis.....	113
	Tabellenverzeichnis	122
	Anhang.....	123

Bezeichnungen

Lateinische Symbole

A	$[\text{m}^2/\text{m}^3]$	volumenbezogene Oberfläche
c	$[-]$	Massenkonzentration
c_D	$[-]$	Widerstandsbeiwert
d	$[\mu\text{m}]$	Tropfendurchmesser
D	$[\text{m}^2/\text{s}]$	Diffusionskoeffizient
E	$[-]$	Effizienz
E	$[\text{W}]$	Energie
g	$[\text{m}/\text{s}^2]$	Erdbeschleunigung
h	$[\text{J}/\text{kg}]$	spezifische Enthalpie
K	$[\text{m}^2/\text{s}^2]$	spezifische turbulente kinetische Energie
M	$[\text{g}/\text{mol}]$	Molmasse
M	$[-]$	Impulsaustauschterm
n	$[\text{1}/\text{m}^3]$	Tropfenanzahldichte
p	$[\text{N}/\text{m}^2]$	Druck
q	$[\text{W}/\text{m}^2]$	Wärmestromdichte
Re	$[-]$	Reynolds-Zahl
S	$[-]$	Speedup
Sc	$[-]$	Schmidt-Zahl

Sh	[-]	Sherwood-Zahl
t	[s]	Zeit
T	[K]	Temperatur
u	[m/s]	Geschwindigkeit
V	[m ³]	Volumen
y	[-]	Molanteil
y	[m]	Wandabstand

Griechische Symbole

α	[-]	volumetrischer Phasengehalt
β	[m/s]	Stoffübergangskoeffizient
ϕ	[beliebig]	einzelne Strömungsgröße
Γ	[g/m ³ s]	Massenaustauschterm
Δ	[-]	Differenz
λ	[W/m K]	Wärmeleitfähigkeit
μ	[N/m s]	dynamische Viskosität
ω	[1/s]	Wirbelfrequenz
ρ	[kg/m ³]	Dichte
τ	[N/m ²]	Schubspannung

Indizes

<i>Air</i>	Luft
<i>D</i>	Widerstand
<i>G</i>	Gasphase
<i>H₂</i>	Wasserstoff
<i>H₂O</i>	flüssiges Wasser, Wasserdampf
<i>He</i>	Helium
<i>k</i>	Phasenindex
<i>L</i>	Flüssigkeitsphase
<i>LG</i>	Leichtgas
<i>m, i, j</i>	Indexnotation in Koordinatenrichtung
<i>M</i>	Gemisch
<i>NG</i>	nichtkondensierbares Gas
<i>Re</i>	Reynolds
<i>sat</i>	Sättigungszustand
<i>t</i>	turbulent
<i>V</i>	Volumen
<i>W</i>	Wand
<i>Zr</i>	Zirkonium

Abkürzungsverzeichnis

ASTEC	Accident Source Term Evaluation Code
ATLET-CD	Analysis of Thermal-hydraulics of LEaks and Transients - Core Degradation
2D	zweidimensional
3D	dreidimensional
CCL	CFX Command Language
CFD	Computational Fluid Dynamics
COCOSYS	Containment Code System
CONAN	CONDensation with Aerosols and Noncondensable gases
DWR	Druckwasserreaktor
GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit mbH
HLRS	Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart
ISP	International Standard Problem
LOCA	Loss of Coolant Accident
LP	Lumped Parameter
LWR	Leichtwasserreaktor
MELCOR	Methods for Estimation of Leakages and Consequences of Releases
MISTRA	Mitigation and Stratification Facility
MP	Monitorpunkt
NSG	Navier-Stockes-Gleichung

PANDA	PAssive Nachwärmeabfuhr und DruckAbbau
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes Equations
RMS	root mean square
SB	Small Break
SST	Shear-Stress-Transport
SWR	Siedewasserreaktor
THAI	Thermal hydraulics, Hydrogen, Aerosols, Iodine
TMI	Three Miles Island
TOSQAN	Test platforme for Simulation and Qualification in Air- borne condition

1 Einleitung

1.1 Motivation

In der Geschichte der Kernenergie hat es drei schwerwiegende Reaktorkatastrophen gegeben [1, 2, 3, 4].

Der Unfall von Three Mile Island in 1979

Am 28. März 1979 war ein Unfall im Block 2 des Druckwasserreaktors von Three Mile Island (TMI-2), USA passiert. Die Reaktoranlage hatte insgesamt nur zwei Kühlkreisläufe. Da bei einem Pumpenausfall die Kühlung des Reaktors durch zwei Dampferzeuger ausgefallen war, stiegen die Temperatur und der Druck im Primärkreislauf des Reaktors stark an. Bei dieser hohen Temperatur kam es zu einer Kernschmelze. Zusätzlich oxidierte die Hülle der Brennstäbe durch eine Zirkonium-Wasserdampf-Reaktion. Der freigesetzte Wasserstoff gelangte zusammen mit dem Wasserdampf in das Reaktorgebäude und löste dort durch Selbstentzündung eine Explosion aus. Durch den starken Anstieg des primären Drucks öffnete das Druckentlastungsventil am Druckhalter, woraufhin der Wasserdampf in den Druckentlastungstank im Sicherheitsbehälter strömte.

Der Unfall von Tschernobyl in 1986

Am 26. April 1986 ereignete sich in Block 4 der RBMK-Reaktoranlage von Tschernobyl bei einem kontrolliert durchgeführten Versuch eine Katastrophe. Die Abkürzung RBMK steht für die russische Bezeichnung eines graphitmoderierten Siedewasser-Druckröhrenreaktors. Der Versuch sollte einen vollständigen Stromausfall am Kernreaktor simulieren. Dabei führte ein unkontrollierter Leistungsanstieg zur Explosion des Reaktors. Durch die Explosion wurde das Reaktorgebäude schwer beschädigt, zudem wurden radioaktive Stoffe in die Umwelt freigesetzt. Viele Länder in Europa wurden infolge des radioaktiven Niederschlags kontaminiert.

Der Unfall von Fukushima in 2011

Aufgrund von Schäden bei der Stromversorgung und an Kühlsystemen infolge eines starken Erdbebens und einem daraus resultierenden schweren Tsunami, kam es am 11. März

2011 in Fukushima Daiichi, Japan zu einer Nuklearkatastrophe in den Siedewasserreaktorblöcken 1-4. Mangels Kühlung kam es zur Überhitzung der Reaktoren und der Abklingbecken, sowie zur Freisetzung von Wasserstoff in das Reaktorgebäude. Durch gezielte Druckentlastungen der Reaktoren gelangten Wasserstoff, Wasserdampf und radioaktive Stoffe in den oberen Bereich des inneren Containments. Durch eine Wasserstoffexplosion wurden große Teile des Gebäudebereichs zerstört. Die Explosion setzte Spaltprodukte in die Umwelt frei.

Aufgrund des Reaktorunfalls in Fukushima wird Deutschland innerhalb rund eines Jahrzehnts vollständig aus der Kernkraft aussteigen [5]. Bis zum vorgesehenen Ausstiegsdatum im Jahr 2022 soll der letzte Reaktor vom Netz gehen. Allerdings die kerntechnischen Kompetenzen werden in den Bereichen Reaktorsicherheit, Strahlenschutz, Rückbau, Endlagerung und zur kritischen Begleitung internationaler Entwicklungen noch weit über den deutschen Ausstieg hinaus gebraucht.

1.2 Stand der Technik

In Deutschland werden ausschließlich Leichtwasserreaktoren (LWR) betrieben, die mit leichtem (natürlichem) Wasser sowohl moderiert als auch gekühlt sind. Die LWR werden als Druckwasserreaktoren (DWR) oder Siedewasserreaktoren (SWR) betrieben [6, 7]. Im Rahmen dieser vorliegenden Arbeit soll ein Werkzeug entwickelt werden, das für die Analyse eines schweren Reaktorunfalls im Sicherheitsbehälter eines deutschen DWR eingesetzt werden kann.

1.2.1 Strömungs- und Kondensationsvorgänge im Sicherheitsbehälter

Bei einem schweren Kühlmittelverluststörfall (engl. Loss of Coolant Accident; Abk.: LOCA) kann sich die Temperatur im Reaktordruckbehälter erhöhen [8]. Bei einer Temperatur der Brennstoffhüllen oberhalb von 1200 °C kann eine große Menge Wasserstoff durch eine chemische Reaktion zwischen Wasserdampf und dem Hüllrohrmaterial Zirkonium produziert werden ($Zr + 2H_2O \rightarrow ZrO_2 + 2H_2$). Gleichzeitig mit der Temperatursteigerung wird sich der Druck im Reaktordruckbehälter erhöhen. Über ein kleines Leck (engl. Small Break; Abk.: SB), z.B. bei Bruch der Leitung zwischen dem Reaktordruckbehälter und einem Dampferzeuger, strömen heißer Wasserdampf und Wasserstoff vom

Primärkreislauf in den Sicherheitsbehälter (Containment) eines Druckwasserreaktors (DWR), siehe Abbildung 1.

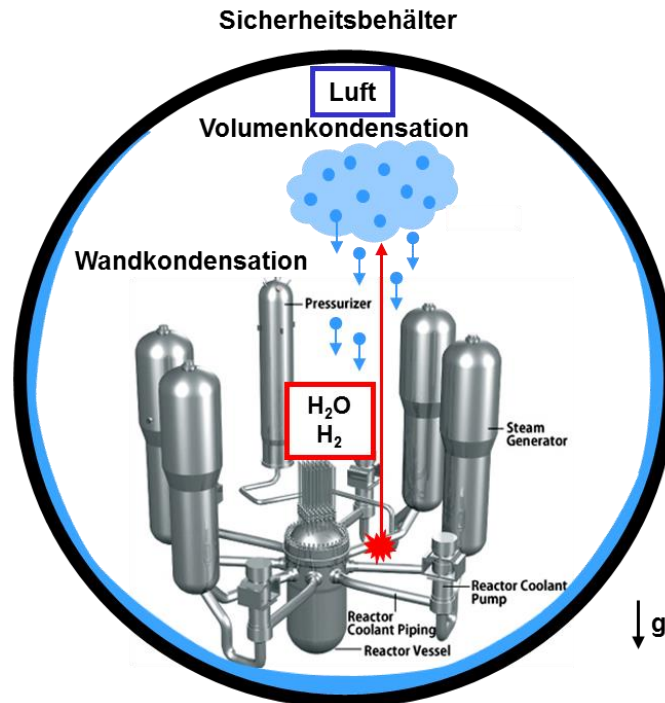


Abbildung 1: Kondensationsvorgänge im Sicherheitsbehälter eines Druckwasserreaktors

Zum einen kann Kondensation an kalten Wänden innerhalb des Sicherheitsbehälters in Anwesenheit von nichtkondensierbaren Gasen stattfinden. Zum anderen können sich, wenn der Dampfpartialdruck in der Umgebung höher als der temperaturabhängige Sättigungsdampfdruck ist, kleine Tropfen aus dem Wasserdampf im freien Volumen des Sicherheitsbehälters bilden. Dies wird als Volumenkondensation bezeichnet. Da diese Kondensationsvorgänge die thermohydraulischen Prozesse, die Wasserstoffverbrennungsvorgänge und die räumliche Tropfenverteilung beeinflussen können, sind die Kondensationsvorgänge an kalten Wänden und im Volumen von großem Interesse für die Reaktorsicherheitsforschung.

1.2.2 Wasserstoffverteilung im Containment

Seit dem Reaktorunfall in Fukushima, bei dem Wasserstoffverbrennungen und -explosionen auftraten, steht die Wasserstoffproblematik nicht nur in Deutschland sondern auch international wieder verstärkt im Fokus der Sicherheitsforschung.

Ein wichtiger Aspekt bei der Gefährdungsbeurteilung des Wasserstoffs in einer gasförmigen Mischung, ist die Zusammensetzung von zündfähigem Wasserstoff, inertisierendem Wasserdampf und Luft. Abbildung 2 zeigt ein Dreistoffdiagramm, in dem drei Bereiche unter atmosphärischer Bedingung entnommen werden [9, 10]. Im weißen Bereich ist ein Gasgemisch aufgrund von Wasserstoff- oder Sauerstoffmangel nicht brennbar. Es kann im blauen Bereich zur Deflagration oder im roten Bereich zur Detonation kommen. Die Verbrennungen werden durch zündfähige Gasmischungen und Zündquellen begünstigt, z.B. Funken von elektrischen Systemen, heiße Kernschmelzen oder kleine statische Entladungen. Während eines Reaktorstörfalls sind darüber hinaus weitere Gaskomponenten im Containment vorhanden, können sich die Zündgrenzen verschieben.

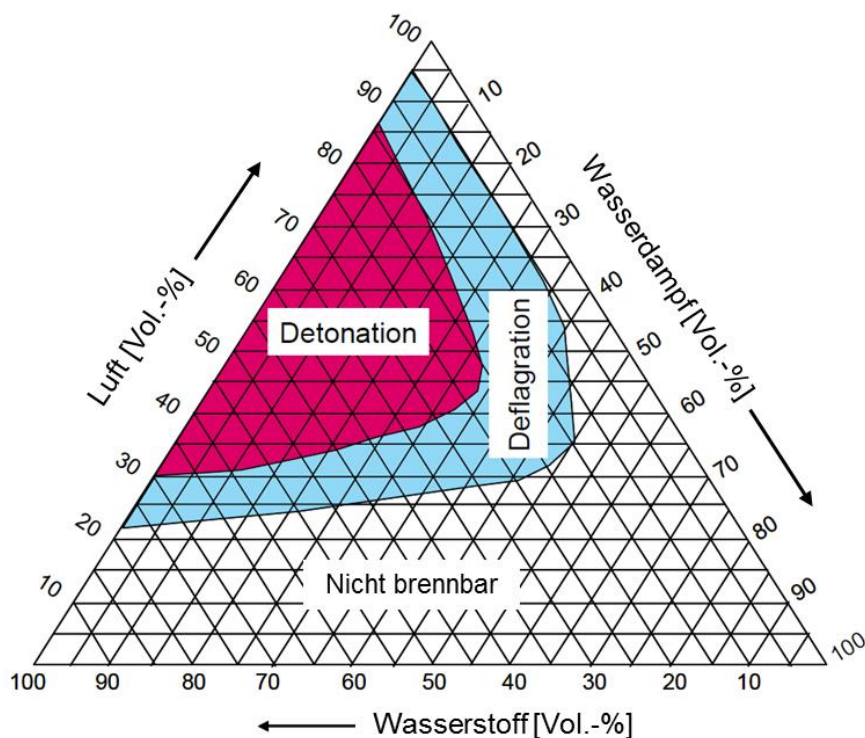


Abbildung 2: Detonations- und Deflagrationsbereich für Wasserstoff-Wasserdampf-Luft-Gasgemisch

1.2.3 Experimente

Da die Untersuchungen im realen Kernkraftwerk (wie in Tschernobyl) nicht möglich sind, wurden mehrere Versuche in experimentellen Anlagen durchgeführt, um die Störfälle kennenzulernen.

In einer wichtigen Veröffentlichung, dem International Standard Problem (ISP-47), wurden die Wasserstoff-, Wasserdampf- und Luftverteilung in Kernkraftwerken vorgestellt [11, 12]. Beim ISP-47 besteht die Möglichkeit, reproduzierbare Messungen der Strömungsphänomene durchzuführen. Um die Containment-Strömung mit Kondensationsvorgängen unter Störfallbedingungen zu untersuchen, werden in Europa mehreren Versuchsanlagen betrieben. Normalerweise dient das Edelgas Helium als Ersatzstoff für Wasserstoff bei diesen Messungen.

Das französische Modell-Containment TOSQAN (Test plateforme for Simulation and Qualification in Airborne condition) ist ein Edelstahlzylinder mit einem Volumen von 7 m³, einer Höhe von 4 m und einem innerem Durchmesser von 1,5 m, siehe Abbildung 3 (links). Die Temperaturen der Wände sind thermostatisch geregelt. Die Wände im oberen und unteren Bereich des Versuchsbehälters können erwärmt werden. Der mittlere Teil der Behälterwand wird als Kondensationsgebiet verwendet und kann unterschiedliche Temperaturen haben. Insgesamt 14 Fenster ermöglichen den optischen Zugang für Messtechniken. Wasserspray, Helium und Wasserdampf können durch Einlässe in die Anlage eingespeist werden. Mit dieser Versuchsanlage wurden die Versuche über Wasserspray von Porcheron et al. [13, 14] für eine Zweiphasenströmung durchgeführt. Die Helium- und Temperaturverteilung sowie die Tropfengeschwindigkeit wurden analysiert.

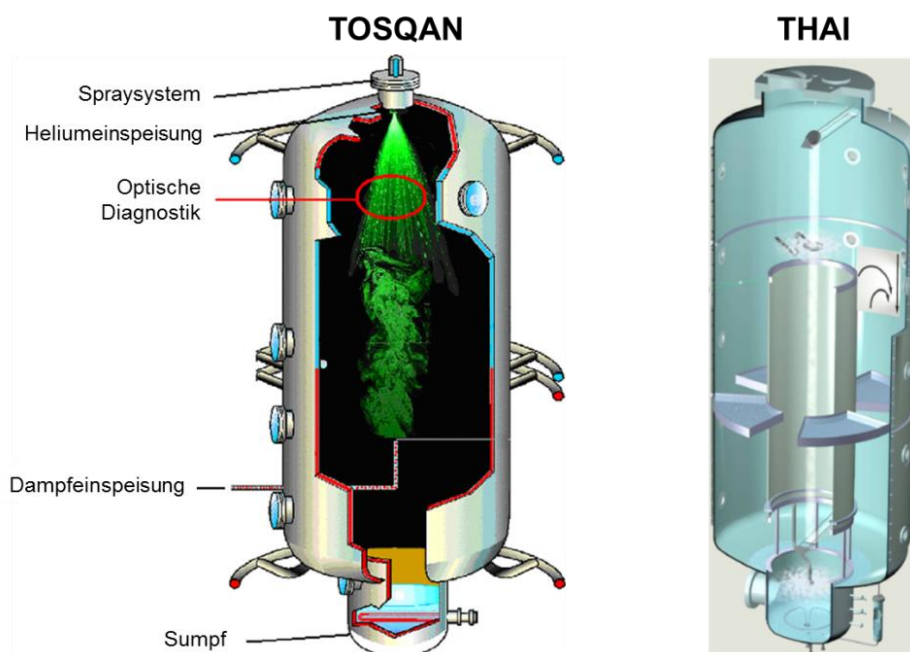


Abbildung 3: Versuchsanlagen TOSQAN (links) und THAI (rechts)

In der vorliegenden Arbeit wurde die deutsche Versuchsanlage THAI (Thermal hydraulics, Hydrogen, Aerosols, Iodine) verwendet, an der Experimente von der Firma Becker Technologies durchgeführt wurden. Diese Versuchsanlage wurde zur Untersuchung der Thermohydraulik sowie des Aerosol- und Iodverhaltens im Reaktorsicherheitsbehälter errichtet. Die Anlage hat einen zylindrischen Behälter aus Stahl mit einem Volumen von 60 m^3 , einer Höhe von ca. $9,2 \text{ m}$ und einem Durchmesser von $3,2 \text{ m}$, siehe Abbildung 3 (rechts). Eine ausführliche Beschreibung der Versuchsreihen findet sich bei Kanzleiter et al. [15, 16] in den Berichten.

Die Versuchsanlage MISTRA aus Frankreich (Mitigation and Stratification Facility) besteht ebenfalls aus einem Edelstahlzylinder, siehe Abbildung 4. Der Zylinder hat ein Volumen von $99,5 \text{ m}^3$ mit einem Durchmesser von $4,25 \text{ m}$ und einer Höhe von $7,38 \text{ m}$. Drei zylindrischen Kondensatoren sind in dem Versuchsbehälter auf unterschiedlichen Höhen platziert. Malet et al. [17] zeigten die Versuche mit Einspritzung von kalten Wassertropfen. Heißer Wasserdampf oder Gemisch von Luft-Wasserdampf-Helium wurde durch einen unteren Einlass zentrisch in das Versuchsgefäß eingespeist. Mit dem Einfluss von der Wandkondensation wurde die Temperatur- und Heliumverteilung im Rahmen mehrerer Versuchsreihen untersucht.

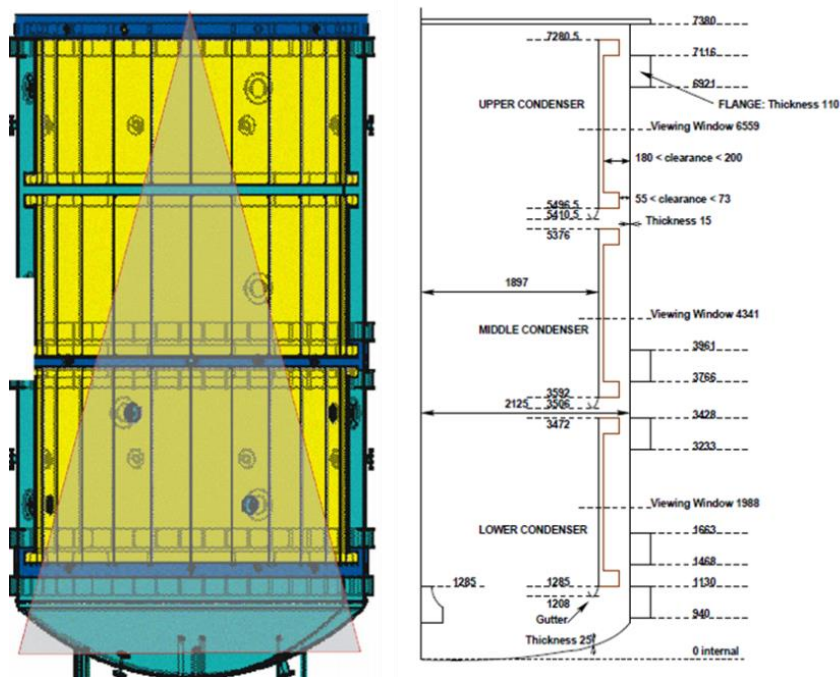


Abbildung 4: Versuchsanlage MISTRA

Die schweizerische Versuchsanlage PANDA (PAssive Nachwärmeabfuhr und DruckAbbau) besteht aus sechs unterschiedlichen zylindrischen Behältern mit einer gesamten Höhe von 25 m und einem Gesamtvolumen von 460 m³, siehe Abbildung 5. Gas kann in jedem Behälter zu- oder abgeführt werden. Die maximal zulässigen Versuchsbedingungen für Druck und Temperatur sind 10 bar und 200 °C. Zboray et al. [18] führten die Experimente mit einer Einspeisung vom überhitzten bzw. gesättigten Wasserdampf in der PANDA-Versuchsanlage durch, um Gastransport und Vermischungsphänomene zu untersuchen. Weitere PANDA-Experimente wurden von Paladino et al. [19] für den Kondensationsvorgang nach der Wasserdampfeinspeisung durchgeführt.

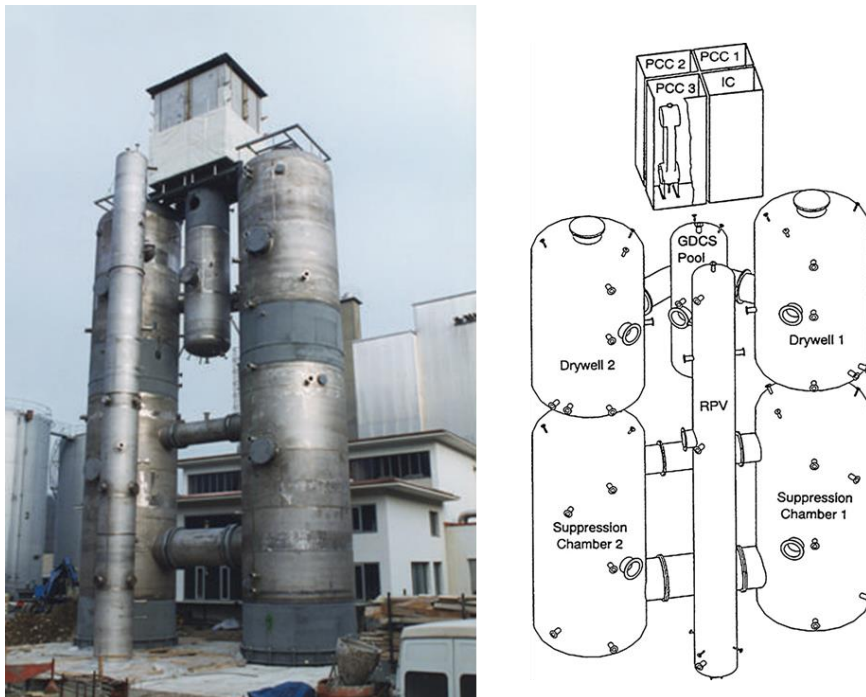


Abbildung 5. Versuchsanlage PANDA

1.2.4 LP-Codes

Im Vergleich zu Berechnungen sind experimentelle Studien aufwendig. Die Aufgabe von Versuchen ist es, qualitativ hochwertige Messwerte als Basis für die Verifikation von Berechnungswerkzeugen zu erzeugen. Zur Berechnung der Strömung im Sicherheitsbehälter stehen verschiedene Vorgehensweisen zur Verfügung. Die eingesetzten Rechenmethoden lassen sich unterteilen in die Lumped-Parameter-Methode (LP) und die Computational-Fluid-Dynamics-Methode (CFD).

Seit den späten 1970er Jahren wird die LP-Methode in Codes zur Berechnung der Thermohydraulik in großen Rechengebieten verwendet. Dies geschieht durch die Konzentration der Fluideigenschaften auf wenige Rechenpunkte. Das bedeutet, dass für große Raumbereiche Mittelwerte der Rechengrößen berechnet werden. Die Erhaltungsgleichungen der Strömungsmechanik werden bei der LP-Methode eindimensional und unter Vernachlässigung der Impulserhaltung gelöst. Deshalb können nicht alle relevanten Strömungsphänomene erfasst werden. Andererseits hat die LP-Methode den Vorteil einer geringen Rechenzeit und den Nachteil eines großen Benutzereinflusses. LP-Codes (wie COCOSYS, ASTEC, MELCOR, ATHLET-CD usw.) ermöglichen eine ganzheitliche Analyse schwerer Störfälle [20]. Diese umfasst die Produktion von Wasserstoff während eines Unfalls, sowie Temperatur- und Gasverteilung, aber auch Rekombination oder Verbrennung im Sicherheitsbehälter.

Der deutsche LP-Code COCOSYS (Containment Code System) wird für die umfangreiche Simulation von Störfallabläufen in Containment von Leichtwasserreaktoren verwendet [21]. Dabei können alle im Störfallverlauf relevanten Phänomene berücksichtigt und soweit möglich mechanistische Modelle verwendet werden. Die Modelle in COCOSYS wurden von Povilaitis et al. [22] mit Wasserspray-Versuchsreihen in MISTRA validiert. Die berechneten Ergebnisse, z.B. für den Druck und die Dampfkonzentration, wurden mit experimentellen Daten verglichen. Allelein et al. [23] zeigten die Validierungsergebnisse anhand von THAI-Experimenten und die Demonstration im DWR-Containment unter Annahme eines LOCA-Störfalls durch Anwendung von COCOSYS. Burkhardt et al. [24] verglichen die Validierungsergebnisse über Heliumkonzentration mit einem THAI-Experiment an unterschiedlichen Messpunkten unter Verwendung des LP-Codes COCOSYS.

Der deutsch-französische LP-Code ASTEC (Accident Source Term Evaluation Code) wurde zur Ermittlung möglicher radiologischer Freisetzungen aus dem Sicherheitsbehälter und angrenzender Gebäude sowie für die Analyse von Szenarien, die das phänomenologische Verständnis verbessern, entwickelt. Allelein et al. [25] zeigten transiente Temperatur- und Druckprofile nach einem LOCA-Unfall im Druckwasserreaktor. Groudev et al. [26] stellten die Berechnungsergebnisse von ASTEC für ein Modell-Containment unter Annahme eines LOCA-Störfalls dar. Der Druck im Containment und die Wasserstoff-Produktionsmasse wurden vorhergesagt.

Der amerikanische LP-Code MELCOR (Methods for Estimation of Leakages and Consequences of Releases) besteht aus vielen Einzelmodellen, die zu einem in sich konsistenten Gesamtmodell des Reaktorsystems kombiniert werden [27]. Die Einzelphänomene werden jedoch nur ungenau betrachtet. Für LP-Codes besteht weiterhin ein Verbesserungsbedarf. Szabó et al. [28] kombinierten den LP-Code MELCOR und den CFD-Code GASFLOW. In der Untersuchung wurden MELCOR für die grob aufgelöste Berechnung des Primärkreises und GASFLOW für die hoch aufgelöste Berechnung der Thermohydraulik im Sicherheitsbehälter angewendet.

Mit dem deutschen LP-Code ATLET-CD (Analysis of Thermal-hydraulics of LEaks and Transients - Core Degradation) werden schwere Kernschmelzen-Störfälle berechnet. Trommeter et al. [29] erläuterten Berechnungen von ATLET-CD zur Vorhersage eines LOCA-Störfalles in einem deutschen DWR.

Kelm et al. [30] fassten die Ergebnisse von vielen Rechnungen zusammen, die zur Vorhersage eines SB-LOCA-Reaktorstörfalles unter gleichen Randbedingungen mit unterschiedlichen LP-Codes (z.B. COCOSYS, ASTEC, MELCOR usw.) von verschiedenen Organisationen durchgeführt wurden. Die Berechnungsergebnisse der lokalen Gastemperatur und der Wasserstoffkonzentration wurden miteinander verglichen.

1.2.5 CFD-Codes

Die CFD-Methode dient zur genaueren Berechnung von Strömungen. Dabei werden die dreidimensionalen Reynoldsgemittelten Navier-Stokes-Gleichungen auf einem fein diskretisierten Rechengitter gelöst. Bei hinreichend feiner Diskretisierung lassen sich alle im Sicherheitsbehälter relevanten Strömungsphänomene erfassen. Mit dieser Methode können deutlich genauere Ergebnisse als mit der LP-Methode erzielt werden. Ihre Rechenzeiten sind jedoch erheblich höher.

Anhand des CFD-Codes ANSYS CFX wurde ein neues TSF-Turbulenzmodell (Turbulent Scalar Flux Modell) von Zirkel [31] entwickelt. Die verbesserte Vermischung mit Leichtgas wurde durch die Simulationsergebnisse eines THAI-Experiments unter Verwendung dieses Modells erzielt. Royl et al. [32] zeigten die Simulationsergebnisse über Wasserdampf- und Wasserstoffverteilung für LOCA-Störfallanalysen in einem deutschen DWR mit dem CFD-Code GASFLOW. Xiao et al. [33] verglichen die mit GASFLOW berechneten Heliumverteilungen auf verschiedenen Messhöhen mit dem MISTRA-Experiment

unter Anwendung von unterschiedlichen Turbulenzmodellen. Zur Modellierung eines Volumensiedevorgangs von Wasser in Blasen, wurde von Kutnjak [34] ein Wachstums-/Schrumpf-Effekt in ANSYS CFX implementiert. In den Simulationen wurden geeignete Modellparameter anhand der von seinem Versuchsstand gemessenen Ergebnisse ermittelt und überprüft. Wintterle [35] und Ben Hadj Ali [36] entwickelten ein Phasenwechselwirkungsmodell mit ANSYS CFX für die Flüssigkeits-/Tropfen-Abscheidung in einer turbulenten Schichtenströmung von Luft und Wasser im Gegenstrom.

Im Folgenden werden Untersuchungen zu Kondensationsvorgängen im Containment auf Basis von Methoden der numerischen Strömungssimulation (CFD) vorgestellt. Ambrosini et al. [37] verglichen die Validierungsergebnisse mit dem CONAN-Experiment (CONDensation with Aerosols and Noncondensable gases), in dem die Wandkondensation von verschiedenen Forschungsorganisationen untersucht wurde. Studer et al. [38] zeigten die Vergleichung der Berechnungsergebnisse von mehreren LP- und CFD-Codes mit einem MISTRA-Experiment, in dem Kondensation stattfinden kann. Mit dem Wandkondensationseffekt stellten Malet et al. [39, 40] die Unterschiede zwischen den von verschiedenen LP- und CFD-Codes berechneten Ergebnissen über Temperatur, Druck sowie Dampfkonzentration und dem Kondensationsexperiment TOSQAN dar. De la Rosa et al. [41] fassten die Forschungsergebnisse über Wand- und Volumenkondensation von unterschiedlichen Autoren zusammen.

Kondensationsmodelle wurden von unterschiedlichen Autoren mithilfe des Ein-Fluid-Modells unter Anwendung eines thermodynamischen Gleichgewichtsmodells entwickelt. Zschaeck et al. [42] erklärten ein in ANSYS CFX implementiertes Wandkondensationsmodell, das mit zwei Kondensationsexperimenten validiert wurde. Kljenak et al. [43] modellierten die Kondensation mit vereinfachten physikalischen Gleichungen in ANSYS CFX und zeigten die Validierungsergebnisse für Temperatur, Geschwindigkeit und die volumetrische Konzentration im Vergleich mit einem Experiment in TOSQAN. Martín-Valdepeñas et al. [44] untersuchten mit ANSYS CFX ein Wand- und Volumenkondensationsmodell in Anwesenheit von Leichtgas. Die Modelle wurden zuerst mit dem Experiment NUPEC validiert und dann auf die Vorhersage eines Störfalls in einem DWR-Containment angewendet [45]. Houkema et al. [46] erläuterten zuerst die Modellierung der Kondensation an Wänden und im Volumen mit ANSYS CFX. Danach wurden die Validierungsergebnisse mit drei Experimenten von PHEBUS, PANDA und THAI verglichen.

Babić et al. [47, 48, 49] zeigten das vereinfachte Wand- und Volumenkondensationsmodell mit ANSYS CFX und die Validierungsergebnisse mit zwei Experimenten THAI und TOSQAN. Vyskocil et al. [50] entwickelten das Wand- und Volumenkondensationsmodell mit einer anderen kommerziellen CFD-Software, ANSYS Fluent. Beide Modelle wurden mit zwei Experimenten CONAN und PANDA validiert. Royl et al. [51] zeigten die Validierungsergebnisse des Volumenkondensationsmodells mit einem Experiment THAI im CFD-Code GASFLOW. Die Transportprozesse wurden in GASFLOW aufgrund der CFD-Rechenmethodik und der feineren Diskretisierung deutlich genauer als in LP-Codes aufgelöst.

In den letzten Jahren wurde die Wandkondensation und die auf dem Zwei-Fluid-Modell basierende Volumenkondensation von Zhang und Laurien [52, 53, 54, 55, 56, 57] in ANSYS CFX modelliert. Die Modelle werden in Kapitel 2 erklärt.

1.2.6 Die Theorie der Keimbildung

Die Kondensation von Flüssigkeitstropfen aus Wasserdampf beginnt an Kondensationskeimen. Volmer und Weber [58] haben die Arbeiten von Gibbs aufgegriffen und den physikalischen Begriff des Keims definiert. Dienen Aerosole oder ausgedehnte Oberflächen als Keim, spricht man von heterogener Kondensation. Bei Abwesenheit von Kondensationsoberflächen werden Keime aus dem Wasserdampf selbst gebildet, man spricht dann von homogener Kondensation. In der vorliegenden Arbeit wird die heterogene Kondensation für die Modellierung der Volumenkondensation verwendet.

Um die Volumenkondensation im großen Volumen eines Sicherheitsbehälters physikalisch zu verstehen, wird eine Theorie aus der Meteorologie für Wolken- und Nebelbildung vorgestellt. Im Buch von Pruppacher und Klett [59] kann die Grundtheorie über Wolken und Nebel im Klima nachgelesen werden. In der Realität sind Tropfenströmungen nicht nur vom Tropfendurchmesser, sondern auch von der Tropfenanzahldichte abhängig. Abbildung 6 zeigt ein Beispiel der Tropfenverteilung in verschiedenen Typen von Kumuluswolken. Eine häufig vorkommende Kumuluswolke hat eine Tropfenanzahldichte von ca. 210 cm^{-3} und ist mit einer durchgezogenen Linie dargestellt. Bei diesem Typ besitzen die meisten Tropfen einen Durchmesser von $10 \text{ }\mu\text{m}$ bis $30 \text{ }\mu\text{m}$ und Anzahldichten zwischen 10 cm^{-3} (10^5 m^{-3}) und 60 cm^{-3} ($6 \times 10^5 \text{ m}^{-3}$). Die Implementierung eines physikalischen Modells für die Keimbildung in einem CFD-Code ist erst in der Zukunft möglich,

wenn das Zwei-Fluid-Modell und ein Keimbildungsmodell grundsätzlich entwickelt sind. Dies wurde bereits von Zhang und Laurien [56, 57] diskutiert.

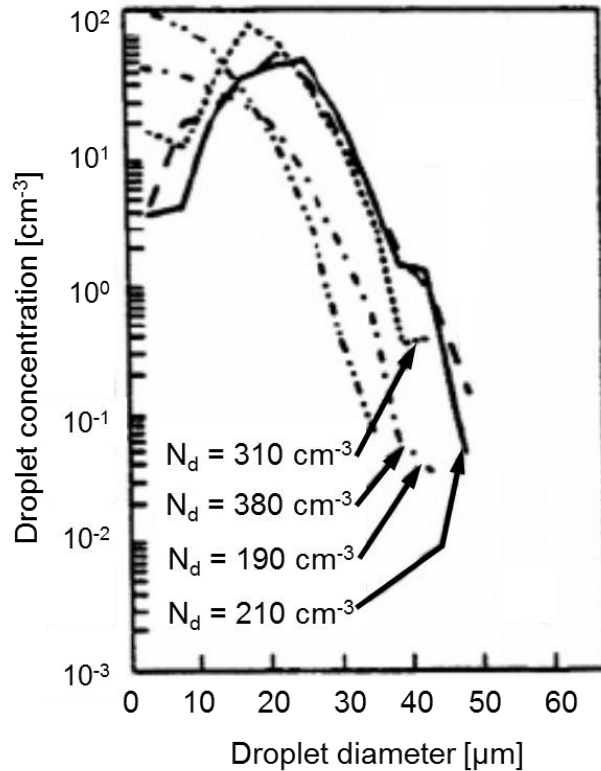


Abbildung 6: Tropfenverteilung in unterschiedlichen Typen von Kumuluswolke

In den Büchern von Clift et al. [60], Crowe et al. [61] und Sirignano [62] wurden die theoretischen Grundlagen, speziell der Tropfenbewegung, beschrieben. Aus diesen Theorien folgt der Zusammenhang von Tropfendurchmesser und der Relativgeschwindigkeit zwischen kleinem Tropfen und der Gasphase, siehe auch Zhang und Laurien [53, 54].

1.3 Zielsetzung der Arbeit

Der Transport, die Verteilung und die Kondensation vom Wasserdampf, welcher bei einem schweren Reaktorstörfall durch ein Leck im Primärkreislauf in den Sicherheitsbehälter eingetragen werden kann, soll mit Hilfe von CFD-Methoden numerisch simuliert werden. Als Modell-Containment werden die THAI-Versuchsanlage sowie das Containment eines generischen DWR (Konvoi-Typ) gewählt. In den kommerziellen Simulations-

code ANSYS CFX 14.0 sollen die Entwicklung und Validierung der Modelle für die Volumen Kondensation sowie die erforderlichen Modelle für die Vermischung mehrerer Gase einschließlich eines evtl. ebenfalls vorhandenen leichten Gases (Helium oder Wasserstoff) durchgeführt werden.

Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines numerischen Werkzeugs für die Simulation der Strömungs-, Transport- und Kondensationsvorgänge in einem Druckwasserreaktor-Containment auf Basis von Methoden der numerischen Strömungssimulation (CFD-Methoden). Durch Anwendung der entwickelten Modelle soll es ermöglicht werden, auf Basis angenommener Störfallszenarien mit Leckströmung und Wasserstoffeintrag in das Containment, das Potential für die Ausbildung eines zündfähigen Gemisches zu berechnen. Das CFD-Programm ANSYS CFX 14.0 bietet bereits die Möglichkeit, Wandkondensation zweiphasig abzubilden. Schwerpunkt dieser Arbeit ist die Entwicklung eines dreidimensionalen (3D) Modells für die Simulation der Volumen Kondensation auf Basis des Zwei-Fluid-Modells.

Im Einzelnen soll zunächst ein zweidimensionaler (2D) Testfall des Volumen Kondensationsmodells in ANSYS CFX 14.0 realisiert werden. Die Geometrie- und Strömungsparameter werden in Anlehnung an die THAI-Experimente TH2 und TH13 gewählt, die für die Validierung des Modells herangezogen werden sollen. Der hohe numerische Rechenaufwand für die Simulation der Strömungsvorgänge im Modell-Containment soll durch Entwicklung einer Grobgittermethode begegnet werden, bei der gezielt eine grobe Diskretisierung verwendet und damit in begrenztem Maße auch eine abschätzbare numerische Abweichung in Kauf genommen wird. Da andererseits die Hinzunahme weiterer Prozessoren ein Mittel zur Bewältigung des hohen numerischen Aufwandes für die Simulation eines Containment ist, soll die Tauglichkeit und Skalierbarkeit des CFD-Codes unter Verwendung der vorgeschlagenen Modelle auf Parallelrechnern am Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) systematisch untersucht werden. Zur Demonstration des entwickelten Kondensationsmodells soll abschließend auf einem Parallelrechner am HLRS ein mögliches Störfallszenario, in dem Kondensation und Wasserstoffvermischung auftritt, im Containment eines generischen Druckwasserreaktors simuliert werden.

2 Theorie und Modellierung

Vor der Durchführung der numerischen Strömungssimulation werden zuerst die Grundlagen über die numerischen Methoden eingeführt, und dann die Grundkenntnisse, besonders zu den Kondensationsvorgängen, vertieft.

2.1 Grundgleichungen

Die Navier-Stokes-Gleichungen (NSG) beschreiben vollständig die einphasige Strömung. Zur Modellierung einer zweiphasigen Strömung werden die aus den Navier-Stokes-Gleichungen abgeleiteten Gleichungen, das sogenannte Zwei-Fluid-Modell, verwendet. Im Rahmen dieser Arbeit werden die Navier-Stokes-Gleichungen entsprechend dem Zwei-Fluid-Modell als Ein-Fluid-Modell genannt.

2.1.1 Ein-Fluid-Modell

Das Ein-Fluid-Modell gilt für ein allgemeines Fluid und besteht aus den Gleichungen zur Massen-, Impuls- und Energieerhaltung. Die Gleichungen beschreiben die Strömung in Raum und Zeit.

Navier-Stokes-Gleichungen

Die Massenerhaltungsgleichung ergibt sich für eine instationäre, kompressible Strömung zu

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_m} (\rho u_m) = 0. \quad (1)$$

Hier ist ρ die Dichte und u die Geschwindigkeit. Der Index m ($m = 1, 2, 3$) beschreibt die dreidimensionale Ortskoordinatenrichtung.

Die Impulserhaltungsgleichungen lauten

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i, \quad (2)$$

wobei p den Druck und g_i die Erdbeschleunigung bezeichnet. Der erste Index i ($i = 1, 2, 3$) bezeichnet die Richtung, die senkrecht zu der Fläche steht und in der die

Schubspannung wirkt. Der zweite Index j ($j = 1,2,3$) kennzeichnet die Richtung der Schubkomponente. Die reibungsbedingte Spannung τ_{ij} an eine Fläche lautet mit der dynamischen Viskosität des Fluides μ

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \delta_{ij} \sum_{m=1}^3 \frac{\partial u_m}{\partial x_m}. \quad (3)$$

Das Kronecker-Symbol ist wie folgend definiert:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{für } i \neq j \end{cases}. \quad (4)$$

Bei der Energieerhaltungsgleichung in ANSYS CFX wird die Enthalpie h [63] verwendet

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) - \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j h) = -\frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}(u_i \tau_{ij}) + \rho g_i u_i. \quad (5)$$

Die Wärmestromdichte q_j ist durch den Fourierschen Wärmeleitungsansatz mit dem Temperaturfeld verbunden

$$q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j}. \quad (6)$$

Darin ist λ die Wärmeleitfähigkeit und T die Temperatur.

Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen

Zur Berechnung turbulenter Strömungen werden Navier-Stokes-Gleichungen basierend auf den von Reynolds vorgestellten Ideen vereinfacht und deshalb als die Reynoldsgleichungen oder die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen (engl. Reynolds-Averaged Navier-Stokes Equations; Abk.: RANS) bezeichnet. In den Reynoldsgleichungen werden die Momentanwerte der einzelnen Strömungsgrößen ϕ_i durch deren zeitgemittelten Werte $\bar{\phi}_i$ und Schwankungsgrößen ϕ_i' substituiert

$$\phi_i(x_i, t) = \bar{\phi}_i(x_i) + \phi_i'(x_i, t), \quad (7)$$

wobei der zeitliche Mittelwert über ein genügend großes Zeitintervall Δt mittels einer Integration bestimmt wird

$$\bar{\phi}_i(x_i) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \phi_i(x_i, t) dt . \quad (8)$$

Die Reynoldsgleichungen modellieren die gesamte zeitliche Variation und lauten für die turbulenten Strömungen somit:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_m} (\rho \bar{u}_m) = 0 , \quad (9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \bar{u}_i) = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} - \rho \overline{u'_i u'_j}) + \rho g_i , \quad (10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{h}) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \bar{h}) = - \frac{\partial \bar{q}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{\tau}_{ij}) + \rho g_i \bar{u}_i . \quad (11)$$

Durch die Mittelung ergeben sich zusätzliche turbulente Spannungen, die auch als Reynoldsspannungen τ_{ij}^{Re} bezeichnet werden

$$\tau_{ij}^{Re} = -\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) . \quad (12)$$

Hierbei steht μ_t für die sog. turbulente Viskosität bzw. Wirbelviskosität.

SST-Turbulenzmodell

Zur Modellierung turbulenter Strömungen existiert eine Vielzahl von Turbulenzmodellen. Ein von Menter [64, 65] entwickeltes SST-Turbulenzmodell (engl. Shear Stress Transport, Abk. SST) wird in der vorliegenden Arbeit verwendet. Das SST-Turbulenzmodell benutzt zwei zusätzliche Transportgleichungen für die turbulente kinetische Energie K sowie die Wirbelfrequenz ω :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho K) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j K) \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_k \mu_t) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right] + \mu_t \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \\ & - \beta^* \rho K \omega , \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\bar{u}_j\omega) \\
&= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_\omega\mu_t) \frac{\partial\omega}{\partial x_j} \right] + \alpha \frac{\omega}{K} \mu_t \frac{\partial\bar{u}_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \\
& - \beta\rho\omega^2 + 2(1 - F_1)\rho\sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial K}{\partial x_j} \frac{\partial\omega}{\partial x_j}.
\end{aligned} \tag{14}$$

Hierbei basiert die Blendfunktion F_1 auf den Strömungsgrößen und dem Wandabstand y :

$$F_1 = \tanh \left\{ \left\{ \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{K}}{\beta^*\omega y}, \frac{500\mu}{\rho y^2\omega} \right), \frac{4\rho\sigma_{\omega 2}K}{CD_{k\omega}y^2} \right] \right\}^4 \right\} \tag{15}$$

mit

$$CD_{k\omega} = \max \left(\frac{2\rho}{\sigma_{\omega 2}\omega} \frac{\partial K}{\partial x_j} \frac{\partial\omega}{\partial x_j}, 10^{-10} \right). \tag{16}$$

Die Wirbelviskosität berechnet sich über

$$\mu_t = \frac{\rho a_1 K}{\max(a_1\omega, SF_2)}. \tag{17}$$

Dabei ist F_2 eine andere vom Wandabstand abhängige Blendfunktion

$$F_2 = \tanh \left\{ \left[\max \left(\frac{2\sqrt{K}}{\beta^*\omega y}, \frac{500\mu}{\rho y^2\omega} \right) \right]^2 \right\}. \tag{18}$$

Hier sind a_1 , S , α , β , β^* , σ_k , σ_ω und $\sigma_{\omega 2}$ Modellkonstanten.

2.1.2 Zwei-Fluid-Modell

Das Zwei-Fluid-Modell beschreibt die zeitabhängigen Massen-, Impuls- und Energieerhaltungsgleichungen für eine Zweiphasenströmung, z.B. für die Gasphase (Index G) und Flüssigkeitsphase (Index L) [66, 67]. Beide Phasen durchdringen einander, so dass jeweils ein Satz pro Phase von eigenen Zustandsgrößen (z.B. Geschwindigkeit \bar{u}^k , Temperatur \bar{T}^k) zu jedem Zeitpunkt an jedem Ort im Strömungsfeld definiert ist. Der Phasenindex k kann den Wert G oder L annehmen. Der volumetrische Gehalt α_k der Phase k wird mit dem Volumen V berechnet

$$\alpha_k = \frac{V_k}{V}. \quad (19)$$

Für die Summe beider volumetrischen Gehalte gilt:

$$\sum_k \alpha_k = \alpha_G + \alpha_L = 1. \quad (20)$$

Die Massenerhaltungsgleichungen lauten:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k) + \nabla(\rho_k \alpha_k \bar{\mathbf{u}}^k) = \Gamma_k, \quad (21)$$

wobei ρ_k die Dichte jeder Phase und Γ_k die Massenquelle oder –senke ist. Während einer Phasenänderung muss die Masse, von der einen in die andere Phase transportiert werden. Die Summe beider Massentransportsraten Γ_k ist 0:

$$\sum_k \Gamma_k = \Gamma_G + \Gamma_L = 0. \quad (22)$$

Die Impulserhaltungsgleichungen lauten für die Koordinaten m :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k \bar{u}_m^k) + \nabla(\rho_k \alpha_k \bar{\mathbf{u}}^k \bar{u}_m^k) \\ &= -\frac{\partial}{\partial x_m}(\alpha_k p) + \nabla[\alpha_k(\bar{t}^k + \bar{t}^{Re,k})]_m + \bar{u}_m^k \Gamma_k \\ &+ \alpha_k \rho_k g_m + M_{k,m}, \end{aligned} \quad (23)$$

wobei $M_{k,m}$ der Impulsaustauschterm durch Massenaustausch an der Phasengrenzfläche ist. Diese Terme müssen anhand des Strömungsverhaltens modelliert werden und ergeben folgenden Zusammenhang:

$$\sum_k M_{k,m} = M_{G,m} + M_{L,m} = 0. \quad (24)$$

Die Energieerhaltungsgleichungen erläutern:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k \bar{h}^k) - \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k p) + \nabla(\rho_k \alpha_k \bar{\mathbf{u}}^k \bar{h}^k) \\ &= \nabla[\alpha_k(\bar{q}^k + \bar{q}^{Re,k})] + \bar{h}^k \Gamma_k + E_k. \end{aligned} \quad (25)$$

Dabei ist E_k ein Energieaustauschterm während der Phasenänderung bei einer nicht isothermen Zweiphasenströmung. Diese Terme werden für beide Phasen aufsummiert:

$$\sum_k E_k = E_G + E_L. \quad (26)$$

2.2 Physikalische Kondensationsmodelle

Die Strömungsuntersuchung wird in der Strömungsmechanik mit bestimmten Grundgleichungen durchgeführt. In folgenden Unterkapiteln werden die physikalischen Modelle auf Basis der Theorie über Wand- und Volumen Kondensation erklärt.

2.2.1 Wandkondensationsmodell mit dem Ein-Fluid-Modell

Das Wandkondensationsmodell wurde von ANSYS mit Hilfe des Ein-Fluid-Modells in Anwesenheit von Wasserdampf und nichtkondensierbaren Gasen entwickelt [42]. Falls das Fluid mehrere Komponenten enthält, kann die Massenerhaltungsgleichung nach dem Fick'schen Gesetz definiert. Die Bilanzgleichung für Wasserdampf lautet wie folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_{H_2O}) + \frac{\partial(\rho u_i c_{H_2O})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left(\rho D_{H_2O,M} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial c_{H_2O}}{\partial x_i} \right) + \Gamma_{H_2O}. \quad (27)$$

Hier sind c_{H_2O} die Massenkonzentration, $D_{H_2O,M}$ der Diffusionskoeffizient von Wasserdampf im Gasgemisch und Sc_t die turbulente Schmidt-Zahl. Γ_{H_2O} ist der Massenauswirkungsterm während der Wandkondensation.

Da die Wand bzw. die Phasengrenzfläche für nichtkondensierbare Gase undurchlässig ist, entfällt der Massenwirkungsterm in der Bilanzgleichung für nichtkondensierbare Gase oder Gasgemische:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_{NG}) + \frac{\partial(\rho u_i c_{NG})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left(\rho D_{NG,M} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial c_{NG}}{\partial x_i} \right). \quad (28)$$

Die Summe der Massenanteile von Wasserdampf und nichtkondensierbaren Gas bzw. Gasgemischen ist 1:

$$c_{H_2O} + c_{NG} = 1. \quad (29)$$

Der Energietransport ist definiert:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) - \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i h)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left(\frac{\lambda}{c_p} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial h}{\partial x_i} \right) + E_{H_2O}. \quad (30)$$

Hier ist E_{H_2O} der Wärmeauswirkungsterm.

Die Wandkondensation wird mittels Stoff- und Energietransportansätzen abgebildet [68]. Die Wandkondensation wird mit Wärme- und Massensenken durch eine kalte Wand modelliert. Zur Vereinfachung der Modellierung wird der Kondensatfilm vernachlässigt, siehe Abbildung 7.

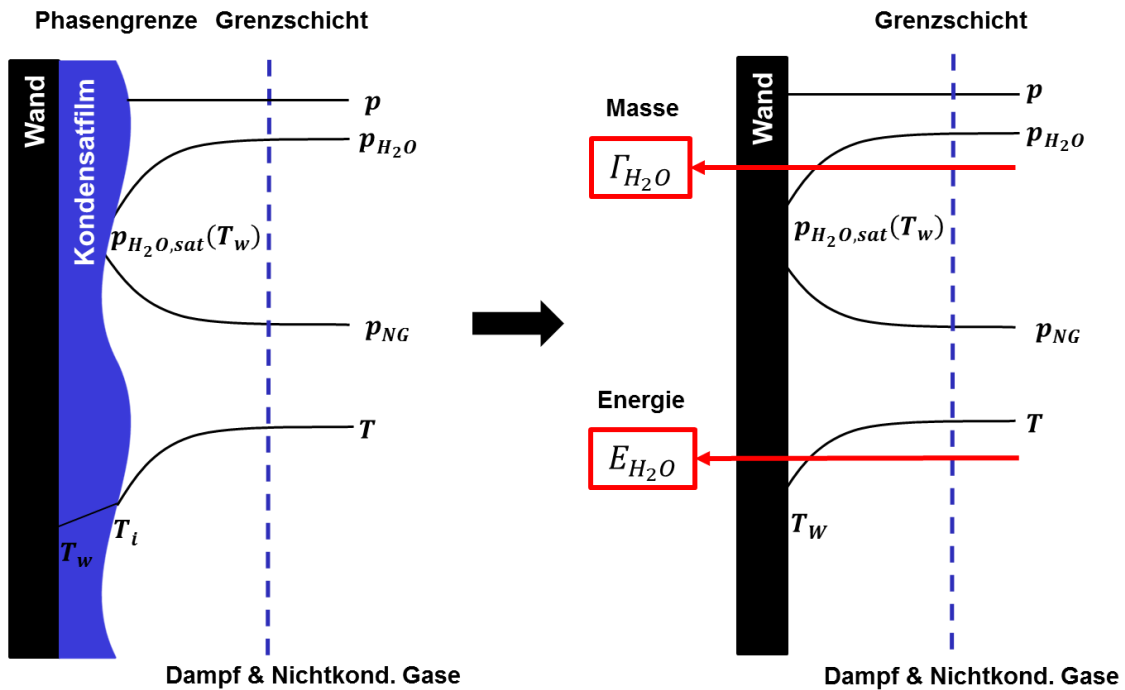


Abbildung 7: Modellvereinfachung für Wandkondensation in Anwesenheit von nichtkondensierbaren Gasen

Die Massensenke wird mittels Wasserdampfgehalte im Volumen (Index V) und an der Wand (Index W) wie folgend modelliert:

$$\Gamma_{H_2O} = -k(y^+, Sc) \rho \frac{c_{H_2O,V} - c_{H_2O,W}}{1 - c_{H_2O,W}}. \quad (31)$$

Hierbei ist $k(y^+, Sc)$ der turbulente Stoffübergangskoeffizient, welcher von der Wandfunktion und der Schmidt-Zahl abhängt [69].

Die Wärme wird durch eine Energiesenke E_{H_2O} während der Wandkondensation abgeführt:

$$E_{H_2O} = \Gamma_{H_2O} \Delta h_{L,G} . \quad (32)$$

Hier ist $\Delta h_{L,G}$ die Kondensationsenthalpie.

2.2.2 Volumenkondensationsmodell mit dem Zwei-Fluid-Modell

Die zweiphasige Volumenkondensation kann mit Hilfe des Zwei-Fluid-Modells modelliert werden. Falls die Gasphase Wasserdampf und nichtkondensierbare Gase enthält, wird die gasphasige Massenerhaltung separat für jede Komponente definiert [70, 71]. Es gilt für Wasserdampf:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_G \alpha_G c_{H_2O}^G) + \nabla (\rho_G \alpha_G c_{H_2O}^G \vec{u}^G) = \Gamma_G - \nabla (\rho_G \alpha_G D_{H_2O,G} \nabla c_{H_2O}^G) . \quad (33)$$

Hier ist $c_{H_2O}^G$ die Massenkonzentration von Wasserdampf und $D_{H_2O,G}$ der binäre Diffusionskoeffizient von Dampf in der Gasphase.

Die Massenbilanz für nichtkondensierbare Gase lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_G \alpha_G c_{NG}^G) + \nabla (\rho_G \alpha_G c_{NG}^G \vec{u}^G) = 0 - \nabla (\rho_G \alpha_G D_{NG,G} \nabla c_{NG}^G) , \quad (34)$$

wo c_{NG}^G die Massenkonzentration der nichtkondensierbaren Gase und $D_{NG,G}$ der binäre Diffusionskoeffizient der nichtkondensierbaren Gase im Gasgemisch ist.

Um den Volumenkondensationsvorgang zwischen kleinen flüssigen Tropfen (Index L) und dem umgebenden Gasgemisch (Index G) besser zu verstehen, wird die Bildung der Druck- und Temperaturgradienten eines kondensierenden Einzeltropfens in Abbildung 8 schematisch dargestellt.

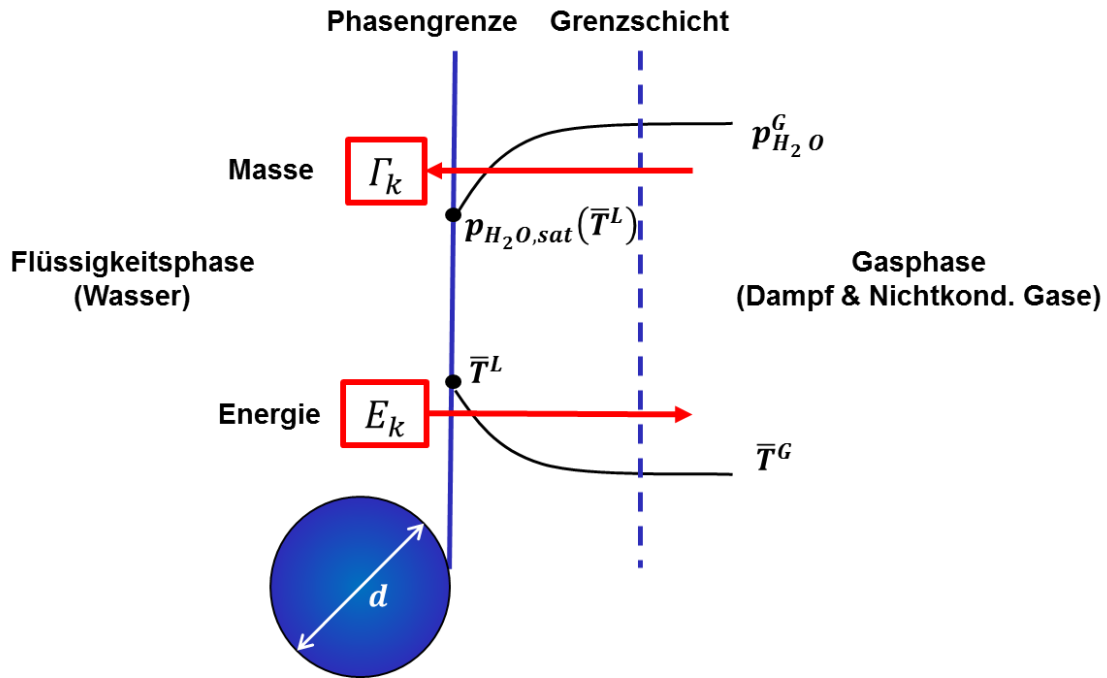


Abbildung 8: Volumen Kondensation

Der Tropfen wird in Kugelform mit einem Durchmesser d angenommen und besitzt eine einheitliche Temperatur \bar{T}^L . Die Temperatur und der Dampfpartialdruck in der Umgebung sind \bar{T}^G und $p_{H_2O}^G$. Der Dampfdruck in unmittelbarer Nähe der Tropfenoberfläche entspricht dem temperaturabhängigen Sättigungsdruck $p_{H_2O,sat}(\bar{T}^L)$ des Tropfens. Es wird angenommen, dass sich der Dampfanteil an der Phasengrenzfläche $y_{H_2O,sat}^G$ im Gleichgewicht befindet und das Verhältnis des gesättigten Partialdrucks zum statischen Druck p ist:

$$y_{H_2O,sat}^G = \frac{p_{H_2O,sat}(\bar{T}^L)}{p}. \quad (35)$$

Der Dampfmassenanteil $c_{H_2O,sat}^G$ an der Phasengrenze wird wie folgend definiert:

$$c_{H_2O,sat}^G = y_{H_2O,sat}^G \frac{M_{H_2O}}{M_{G,sat}}, \quad (36)$$

wobei $M_{G,sat}$ die Molmasse des Gasgemisches im Sättigungszustand ist:

$$M_{G,sat} = c_{H_2O,sat}^G M_{H_2O} + (1 - c_{H_2O,sat}^G) M_{NG}. \quad (37)$$

Falls das Gasgemisch mehrere nichtkondensierbare Gase enthält, z.B. Luft und ein Leichtgas (Wasserstoff oder Helium), wird die Molmasse des nichtkondensierbaren Gasgemisches definiert:

$$M_{NG} = c_{Air}^G M_{Air} + c_{LG}^G M_{LG} . \quad (38)$$

Dabei ist die Molmasse des Dampfes M_{H_2O} 18 g/mol, der Luft M_{Air} 29 g/mol, des Wasserstoffes M_{H_2} 2 g/mol und des Heliums M_{He} 4 g/mol. Der Unterschied der Dampfkonzentration ($c_{H_2O}^G - c_{H_2O,sat}^G$) verursacht den Stofftransport durch die Diffusionsgrenzschicht. Falls der Dampfmasseanteil in der Umgebung $c_{H_2O}^G$ höher ist als die Dampfsättigungskonzentration $c_{H_2O,sat}^G$, kann die aus der Gasphase kondensierte Masse Γ_G mit folgender vereinfachter Gleichung berechnet werden [72]:

$$\Gamma_G = \rho_G \beta A (c_{H_2O}^G - c_{H_2O,sat}^G) = -\Gamma_L . \quad (39)$$

Hierbei ist ρ_G die Dichte vom Gasgemisch. Zur Bestimmung des Stoffübergangskoeffizienten β kann die dimensionslose Sherwood-Zahl Sh verwendet werden:

$$\beta = \frac{Sh D_{H_2O,G}}{d} . \quad (40)$$

Der Diffusionskoeffizient von Wasserdampf im Gasgemisch $D_{H_2O,G}$ wird mit zwei binären Diffusionskoeffizienten $D_{H_2O,LG}$ und $D_{H_2O,Air}$ bestimmt [73], die in Tabelle 1 dargestellt sind:

$$D_{H_2O,G} = \left(\frac{y_{LG}^G}{D_{H_2O,LG}} + \frac{y_{Air}^G}{D_{H_2O,Air}} \right)^{-1} . \quad (41)$$

Tabelle 1: Diffusionskoeffizient [73, 74]

Binäre Gasgemisch	Diffusionskoeffizient [cm ² /s]
H ₂ O-Air	0,292
H ₂ O-He	1,136
H ₂ O-H ₂	0,927

Die Sherwood-Zahl wird für eine Kugel durch die Ranz-Marshall-Korrelation [75] mit Hilfe der Reynolds-Zahl Re und der Schmidt-Zahl Sc beschrieben:

$$Sh = 2 + 0,6Re^{\frac{1}{2}}Sc^{\frac{1}{3}}. \quad (42)$$

Die Reynolds-Zahl ist definiert:

$$Re = \frac{\rho_G \left| \bar{u}^L - \bar{u}^G \right| d}{\mu_G}, \quad (43)$$

in der μ_G die dynamische Viskosität des Gasgemisches ist.

Die Schmidt-Zahl lautet:

$$Sc = \frac{\mu_G}{\rho_G D_{H_2O,G}}. \quad (44)$$

Die gesamte Phasengrenzflächendichte aller Tropfen A aus Gl. (39) ist wie folgt definiert:

$$A = \pi n d^2 = \frac{6\alpha_L}{d}. \quad (45)$$

Hier ist n die Tropfenanzahldichte und α_L der volumetrische Flüssigkeitsgehalt. Während der Volumen Kondensation wird die Wärme aus den Tropfen in die Umgebung abgeführt. Die Wärme E_G kann durch die Freisetzung der Kondensationsenthalpie Δh_{LG} bestimmt werden:

$$E_G = -\Gamma_G \Delta h_{LG}, \quad E_L = 0. \quad (46)$$

In der Gl. (23) spielt die Strömungswiderstandskraft M_k^D eine große Rolle für den Impulsaustauschterm M_k . Andere Kräfte, z.B. die Auftriebs-, Trägheits- und Bassetkraft, spielen auch eine Rolle, werden aber in dieser Arbeit für die Untersuchung vernachlässigt. Der Impulsaustauschterm der Gasphase ist gleich dem negativen Term der Flüssigkeitsphase. Zur Untersuchung der Austauschterme von Massen, Impuls und Energie mit kleinen Tropfen, sind zwei Situationen unterschieden [76].

Im ersten Fall wird der Tropfendurchmesser d konstant gehalten. Der Impulsaustauschterm lautet:

$$M_k = M_G^D = -M_L^D = \alpha_L c_D \frac{3\rho_G}{4d} |\bar{u}^L - \bar{u}^G| (\bar{u}^L - \bar{u}^G). \quad (47)$$

Eine konstante Tropfenanzahldichte n stellt den zweiten Fall dar. Der Impulsaustauschterm lautet:

$$M_k = M_G^D = -M_L^D = n c_D \frac{\pi\rho_G}{8} \left(\frac{6\alpha_L}{n\pi}\right)^{\frac{2}{3}} |\bar{u}^L - \bar{u}^G| (\bar{u}^L - \bar{u}^G). \quad (48)$$

Der Widerstandsbeiwert c_D ist durch die Schiller-Naumann-Korrelation für einen Tropfen definiert:

$$c_D = \frac{24}{Re} (1 + 0,15Re^{0,687}). \quad (49)$$

2.2.3 Wand- und Volumenkondensationsmodell mit dem Zwei-Fluid-Modell

Das Wandkondensationsmodell ist für eine Zweiphasenströmung in ANSYS CFX ab dem „Customized Solver“ in Version 14.0 anwendbar. Um das Wandkondensationsmodell für die zweiphasige Simulation zu aktivieren, müssen bestimmte Einstellungen mittels CCL (CFX Command Language) implementiert werden. Für die Volumenkondensation werden die Massen- und Energieaustauschterm bei Phasenwechseln als Quelle oder Senke in ANSYS CFX implementiert. Im Anhang wird die Implementierung des Wand- und Volumenkondensationsmodells mit dem Zwei-Fluid-Modell gezeigt.

3 Verifikation

3.1 2D Testfall

Um das neue Volumenkondensationsmodell zu testen, wurde ein einfacher, stationärer, zweidimensionaler Testfall entwickelt. Die Annahme zweidimensionaler Strömung führt zu einer erheblichen Einsparung der erforderlichen Rechenzeit und des numerischen Aufwands.

Das Mollier-Diagramm in Abbildung 9 zeigt die Zustände und Zustandsänderungen feuchter Luft im Gleichgewicht. Der Wassergehalt ist als das Massenverhältnis von Wasser zu trockener Luft definiert. Wasser kann als Wasserdampf und als Wassertropfen auftreten. Der Wassergehalt ist für trockene Luft null, und geht für luftfreien Dampf oder flüssiges Wasser gegen unendlich. Die spezifische Enthalpie wird auf die trockene Luftmasse bezogen.

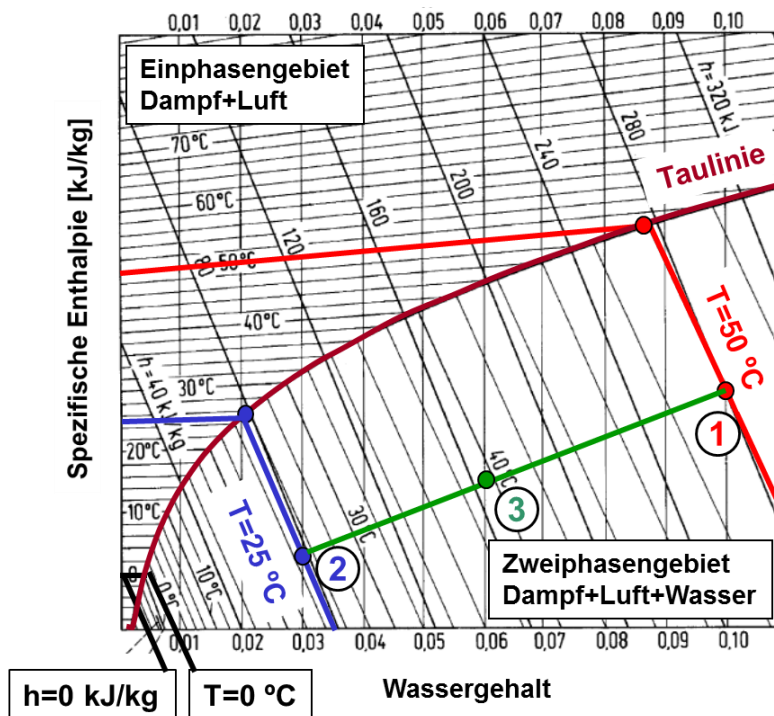


Abbildung 9: Mollier-Diagramm

Beim originalen Mollier-Diagramm ist die spezifische Enthalpie in einem schiefwinkligen Koordinatensystem über dem Wassergehalt aufgetragen [77, 78]. Die Taulinie wird durch die Antoine-Gleichung bestimmt und mit einer relativen Feuchte von Eins im Diagramm gezeigt. Die Isothermen besitzen an der Taulinie einen „Knick“. Oberhalb der Taulinie liegt das Einphasengebiet mit dem Dampf-Luft-Gemisch. Unterhalb der Taulinie ist das Zweiphasengebiet mit dem Gasgemisch und flüssigem Wasser.

Nach der Theorie von Mollier kann ein Test für die Untersuchung der Volumen Kondensation festgelegt werden. In diesem Fall stellt die Keimbildung bei der numerischen Strömungssimulation eine Schwierigkeit dar, die im Mollier-Diagramm nicht vorhanden ist. Es werden am Anfang der Simulation kleine Tropfen vorgegeben, damit der Massen- und Wärmetransport an vorhandenen Phasengrenzen stattfinden und während der Simulation berechnet werden kann. Wenn sich zwei Luftströme mit unterschiedlichen Temperaturen vermischen, so wird der Mischpunkt aufgrund der Massen- und Energiebilanz auf der Mischungsgerade zwischen den beiden Ursprungszuständen im Zweiphasengebiet liegen.

3.1.1 Geometrie, Rand- und Anfangsbedingungen

Für den 2D Testfall wurde ein offener Kanal mit einer Höhe von 5 m und einer Breite von 0,2 m ausgewählt, siehe Abbildung 10. Als Anfangsbedingung wurde der Druck konstant mit 1 bar im Kanal angenommen. Ein übersättigtes Wasserdampf-Luft-Gemisch wurde durch Einlass 1 mit hoher Einlasstemperatur 50 °C und durch Einlass 2 mit niedriger Temperatur 25 °C vorgegeben. An beiden Einlässen strömt ein volumenbezogener Massenstrom von 10 g/m³s ein. Im Kanal kam es zu einer Vermischung beider Ströme. Auslass 3 am unteren Ende wurde als Düse modelliert, um das Ausströmungsverhalten zu verbessern.

Die vorderen und hinteren Seiten wurden als Symmetrieebenen definiert. Die übrigen Wände wurden adiabatisch und reibungslos eingestellt. In diesem Testfall wurden die Tropfenzahl dichte konstant mit 10⁹ m⁻³ und der anfängliche volumetrische Flüssigkeitsgehalt mit 10⁻⁵ angenommen.

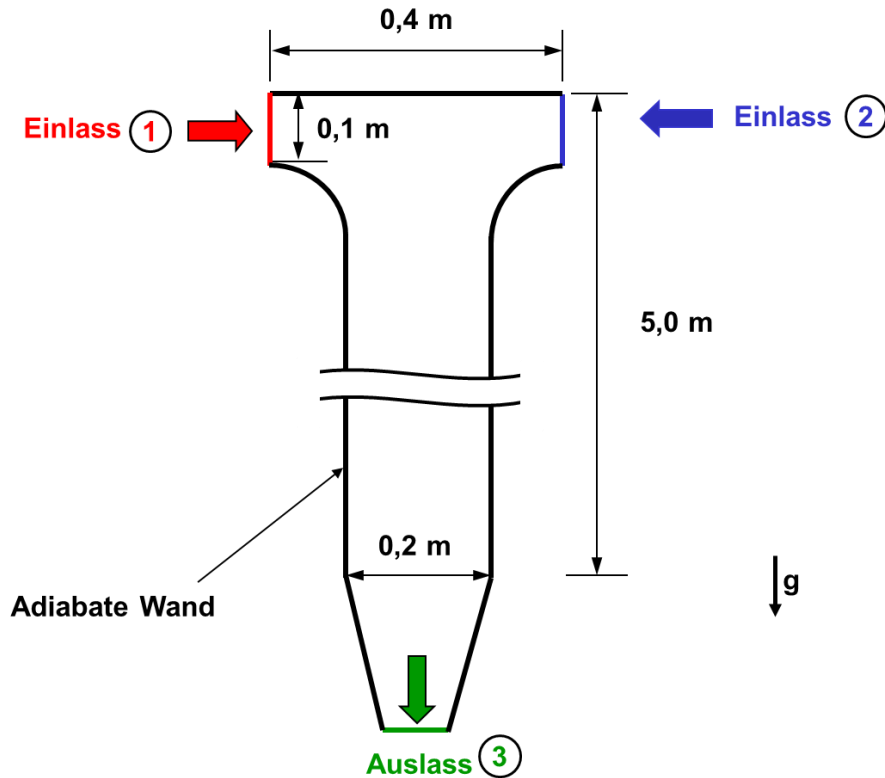


Abbildung 10: 2D Testfall

3.1.2 Numerische Eigenschaften

Die stationäre Simulation des 2D Testfalls wurde mit ANSYS CFX 14.0 durchgeführt. Das SST-Turbulenzmodell wurde für die Rechnung verwendet. Eine räumliche Diskretisierung erster Ordnung wurde für das Turbulenzmodell angewendet. Alle anderen Gleichungen wurden mit einem Verfahren zweiter Ordnung berechnet. Für die Rechnung wurde das Residuum (engl. root mean square; Abk.: RMS) von 10^{-4} vorgegeben.

3.1.3 Vergleich der Ergebnisse mit dem Mollier-Diagramm

Wie Abbildung 11 verdeutlicht, findet die Volumen Kondensation vorwiegend im oberen Bereich statt und geht am Ende des Kanals gegen null. Durch die Volumen Kondensation vergrößert sich der Flüssigkeitsgehalt, wodurch sich der Tropfendurchmesser bei konstanter Tropfenzahldichte ebenfalls erhöht. Die Gastemperatur verändert sich im oberen Teil des Kanals bei der Vermischung der Ströme und bleibt zum Auslass hin konstant.

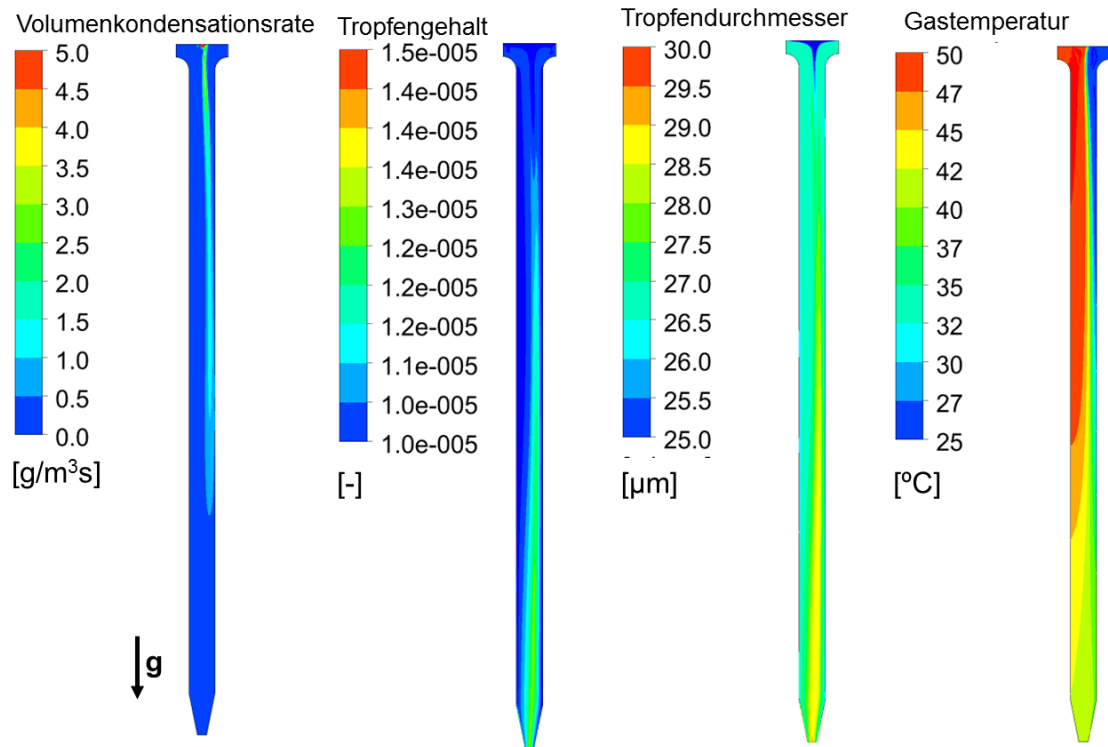


Abbildung 11: Ergebnisse des 2D Testfalls

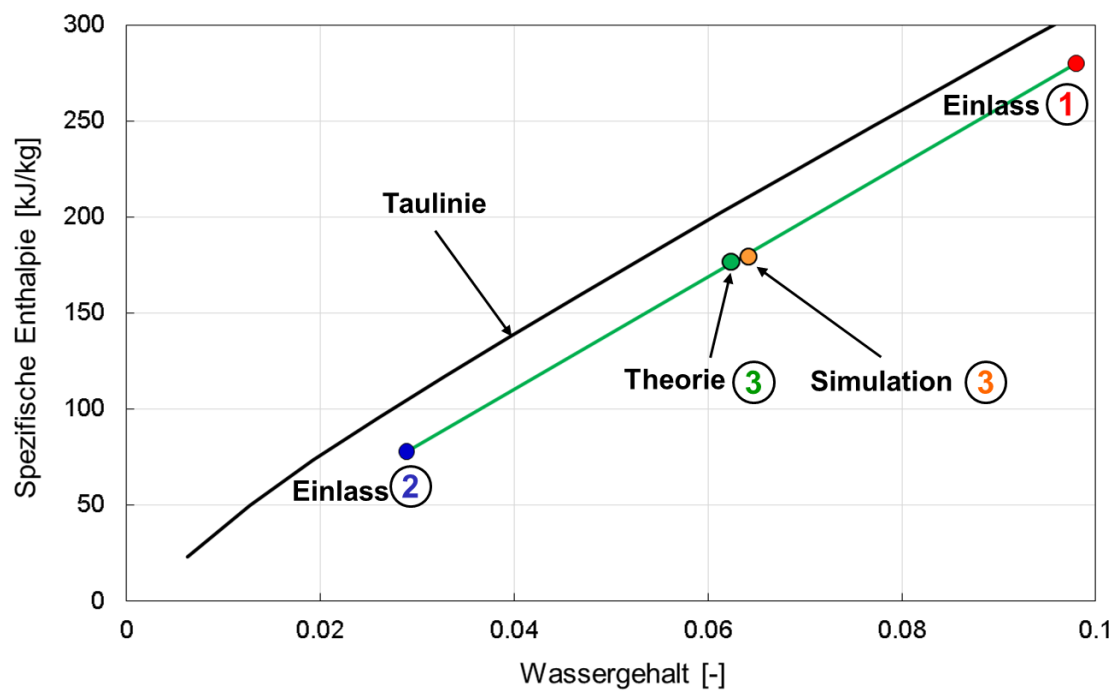


Abbildung 12: Vergleich des Simulationsergebnisses des stationären 2D Testfalls mit der Theorie im weiterentwickelten Mollier-Diagramm

Das ausfließende Fluid wird daher im Gleichgewichtszustand angenommen. Dieser Gleichgewichtszustand kann im weiterentwickelten Mollier-Diagramm (Abbildung 12) untersucht werden, in welchem der Wassergehalt über der spezifischen Enthalpie aufgetragen ist. Das Simulationsergebnis des vorgestellten Testfalls zeigt eine gute Übereinstimmung mit der Theorie und bestätigt, dass das neu entwickelte Volumenkondensationsmodell die Volumenkondensation im thermodynamischen Gleichgewicht quantitativ richtig simulieren kann.

3.2 2D TH2-Experiment

Zur Validierung des Volumenkondensationsmodells in Anwesenheit eines nichtkondensierbaren Gases (Luft), wurde das TH2-Experiment ausgewählt, welches von der Firma Becker Technologies in der Versuchsanlage THAI durchgeführt wurde. Das Hauptziel dieses Experiments ist die Untersuchung des Strömungsvorgangs während der Kondensation unter transienten Bedingungen, z.B. Druckerhöhung, Temperaturerhöhung usw.

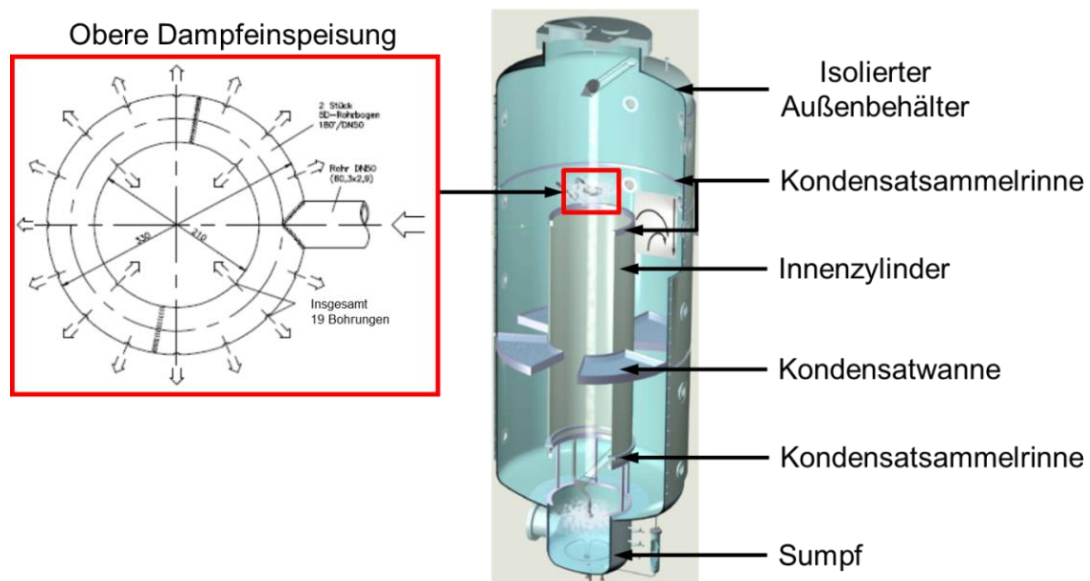


Abbildung 13: TH2-Versuchsanlage mit oberer Dampfeinspeisung

Der Hauptteil der THAI-Versuchsanlage hat einen wärmeisolierten, zylindrischen Stahlbehälter mit einer Höhe von 9,2 m, einem Durchmesser von 3,16 m und einem Volumen von ca. 60 m³, siehe Abbildung 13. Im Außenbehälter wurde ein offener Innenzylinder mit einem Durchmesser von 1,4 m und einer Höhe von 4 m eingebaut. Vier gleichverteilte

Kondensatwannen wurden im Ringbereich zwischen Außen- und Innenzylinder eingebaut. Jede sektorförmige Kondensatwanne hat einen Winkel von 60° . Die freie Öffnung zwischen den Kondensatwannen lässt eine Überströmung zwischen oberem und unterem Behälter zu. Im unteren Bereich reduziert sich der Durchmesser des Behälters auf 1,4 m und bildet einen 1,2 m hohen Sumpf. Das Kondensat kann in den Sumpf oder durch Kondensatsammelrinnen und die Kondensatwannen abfließen.

Im Verlauf von 31 Stunden gliedert sich der TH2-Versuch in sechs Versuchsphasen, wobei nur die ersten 3600 s der ersten Versuchsphase für die Validierung relevant waren. In dieser Zeit wurde ca. 35 g/s Sattdampf durch Dampfeinspeisung aus den 19 Öffnungen einer torusförmigen Rohrleitung, angeordnet über der Oberkante des Innenzylinders in der Horizontalebene, hinzugefügt. Die Dampfeinspeisungsstelle liegt auf einer Höhe von 6,7 m über dem Sumpfboden.

3.2.1 Geometrie, Rand- und Anfangsbedingungen

Zur Begrenzung der Modellgittergröße und der Rechenzeit, wurden die Simulationen aufgrund der Quasi-Rotationssymmetrie des TH2-Experiments zweidimensional durchgeführt. Die Geometrie und das strukturierte Netz wurden von Zschaeck [79] erstellt, siehe Abbildung 14.

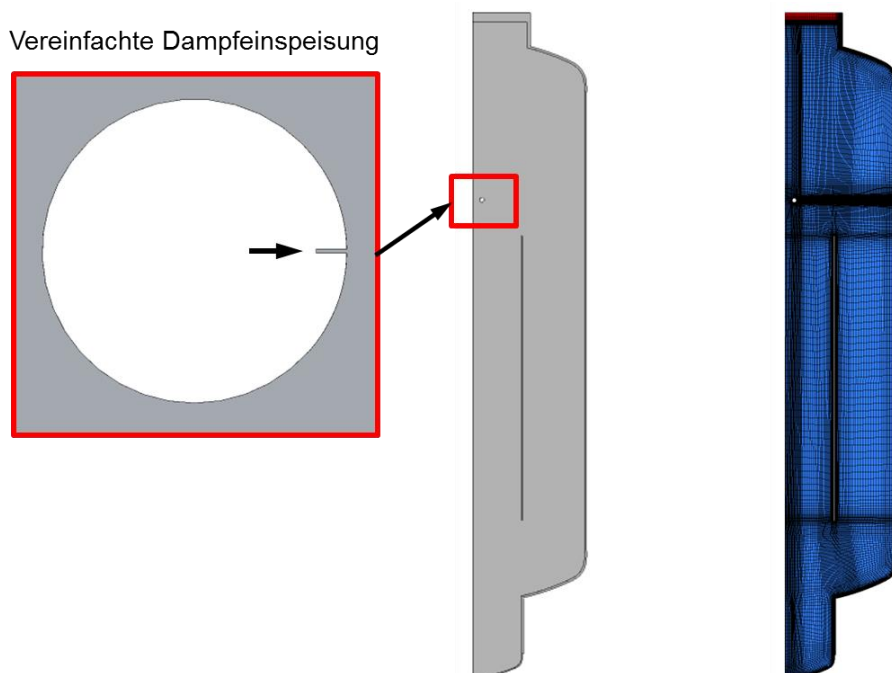


Abbildung 14: Zweidimensionale Geometrie und Gitter vom TH2-Experiment

Bei der 2D-Geometrie wird für die durch Löcher vereinfachend ein Ringspalt vorgegeben. Die Oberfläche des Spalts über den gesamten Umfang entspricht der Oberfläche aller 19 Löcher. Die inneren Teile der Kondensatsammelrinnen und der vier Kondensatwannen werden vernachlässigt. Das Rechengitter hat insgesamt ca. 80000 Knoten und besteht aus zwei Teilen: den Festkörpern und dem Freivolumen. Für die Festkörper werden nur die Energiegleichungen gelöst. Im Gegensatz dazu werden im Freivolumen zur Berechnung der Kondensation zusätzlich Massen- und Impulsgleichungen gelöst.

Zu Beginn des TH2-Versuchs war der Versuchsbehälter mit kalter Luft unter den Umgebungsbedingungen 1,042 bar und 24 °C gefüllt. Der Wärmeübergangskoeffizient von der Außenwand zur Atmosphäre und die Außentemperatur wurden als konstant angenommen. Alle Daten, z.B. die Massenströme und die Temperatur an der Einspeisungsstelle, wurden der experimentellen Datenbank [15] entnommen.

3.2.2 Numerische Eigenschaften

Die instationären Simulationen des TH2-Experiments wurden mit ANSYS CFX 14.0 unter Verwendung der Diskretisierung zweiter Ordnung durchgeführt. Das SST-Turbulenzmodell wurde für die Rechnung verwendet. Die Diskretisierung erster Ordnung wurde nur für das Turbulenzmodell angewendet. Für die Rechnung wurde das Residuum von 5×10^{-4} gegeben.

3.2.3 Gittereinfluss

Zur Untersuchung der Gitterabhängigkeit der Lösung wurden fünf Rechnungen mit unterschiedlich feinen, zweidimensionalen Rechengittern des TH2-Experiments durchgeführt. Das größte Gitter wurde mehrmals verfeinert. In Tabelle 2 ist die Anzahl der Gitterpunkte der fünf Netzte gezeigt.

Mit diesen Gittern wurden transiente Rechnungen von bis zu 50 physikalischen Sekunden durchgeführt, wobei zunächst nur das Wandkondensationsmodell eingeschaltet ist. Außer der Gittergröße, wurden alle weiteren Berechnungsparameter in dieser Studie konstant gehalten. Aufgrund des großen Rechenaufwands für die feinen Gitter wurden alle transiente Rechnungen auf einem Multiprozessorrechner (Nehalem-Cluster) am Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) durchgeführt. Die Gitterstudie zeigt, dass für eine

physikalische Sekunde 19 CPUs bei Verwendung des ersten Gitters, 47 CPUs mit zweitem Gitter, 94 CPUs mit drittem Gitter, 165 CPUs mit viertem Gitter und 262 CPUs mit fünftem Gitter benötigt werden. Je feiner das Netz ist, desto länger ist die Rechenzeit.

Tabelle 2: Gitterpunktanzahl von verschiedenen Netzen

Nr.	Anzahl der Gitterpunkte
1	$1,0 \times 10^5$
2	$3,7 \times 10^5$
3	$8,0 \times 10^5$
4	$1,4 \times 10^6$
5	$2,2 \times 10^6$

Zur Fehleranalyse des Gittereinflusses wurden der absolute Druck und die Temperatur an einem Messpunkt untersucht. Mit Hilfe der Richardson-Extrapolation [80] wurden die numerischen Fehler für den absoluten Druck und die Temperatur in den ersten 100 physikalische Sekunden abgeschätzt. Die Übereinstimmung der zeitlichen Verläufe des absoluten Drucks mit unterschiedlichen Gittern bestätigt die ausreichend Feinheit des größten Gitters. Ein Vorteil der Simulation mit dem größten Gitter ist die Reduzierung der erforderlichen Rechenzeit.

3.2.4 Skalierbarkeit bei Parallelisierung

Das Ziel der Parallelverarbeitung ist die Einsparung der Ausführungszeit eines Programms zur Lösung eines Problems durch den Einsatz von vielen parallelen Prozessoren. Zur Untersuchung der Skalierbarkeit bei Parallelverarbeitung auf dem Nehalem-Cluster am HLRS, wurden die Simulationen nur mit dem Wandkondensationsmodell und mit 20 Zeitschritten auf einer unterschiedlichen Anzahl von Prozessoren (1, 2, 4, 8, 16 und 24) durchgeführt. In diesem Fall wurde das größte Gitter verwendet, das in Kapitel 3.2.3

untersucht wurde. Zwei wichtige Begriffe werden zur Charakterisierung der Leistungsfähigkeit eines parallelen Programmes eingeführt. Der erste Begriff ist die Beschleunigung (engl. Speedup) S und berechnet sich wie folgt [81, 82]:

$$S = \frac{T_1}{T_N}. \quad (50)$$

Dabei entspricht T_N der Ausführungszeit des parallelisierten Programms beim Einsatz von N Prozessoren. Die Referenz ist die Ausführungszeit T_1 auf nur einem Prozessor.

Ein weiterer Begriff ist die parallele Effizienz E , die als Quotient aus der Beschleunigung und der Anzahl der eingesetzten Prozessoren definiert ist:

$$E = \frac{T_1}{NT_N} = \frac{S}{N}. \quad (51)$$

Die Effizienz entspricht dabei dem Anteil der Programmlaufzeit, in dem sich die Prozessoren bei der Lösung des Problems mit „sinnvoller“ Arbeit beschäftigt haben. Der restliche Anteil besteht hingegen aus Zeiten, in denen sich die Prozessoren mit Synchronisation, Kommunikation und anderem Verwaltungsaufwand, der aufgrund der Parallelisierung entstanden ist, beschäftigen müssen. Im Idealfall ist die Steigung der Beschleunigung linear zur Anzahl der eingesetzten Prozessoren und die Effizienz von Eins.

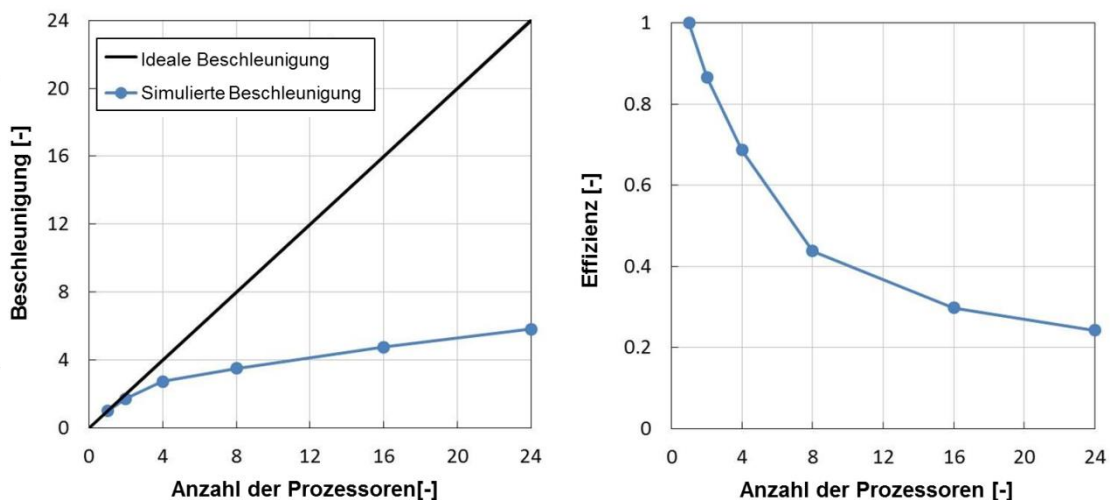


Abbildung 15: Beschleunigung (links) und Effizienz (rechts) auf Nehalem-Cluster mit steigender Anzahl der Prozessoren

Die Ergebnisse in Abbildung 15 zeigen, dass die ideale Parallelisierung in der Realität mit dem Parallelprogramm ANSYS CFX nicht erreicht werden kann. Ab 4 Prozessoren fällt die parallele Effizienz unter 0,7 ab und steigt die Kommunikationszeitverluste zum Austausch von Daten. Mit dem getesteten Gitter ist die optimale Anzahl der Prozessoren 4.

3.3 3D TH13-Experiment

Für eine weitergehende Validierung des Volumenkondensationsmodells wurde das Experiment TH13 im Rahmen des ISP-47 verwendet, bei dem die Kondensation in Anwesenheit von zwei nichtkondensierbaren Gasen (Luft und Helium) bei der Firma Becker Technologies untersucht wurde. Im Experiment ist die Anwendung von Helium anstelle von Wasserstoff in der Realität geeignet. Das TH13-Experiment verwendet den gleichen Versuchsaufbau wie das TH2-Experiment, nur mit unterschiedlichen Einspeisungsstellen, siehe Abbildung 16.

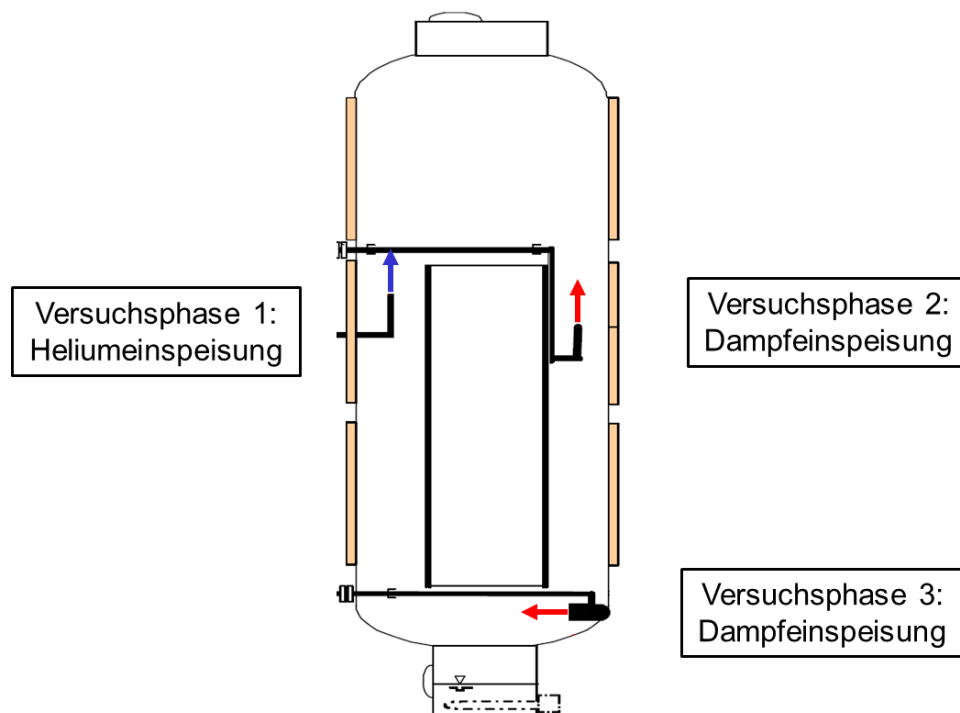


Abbildung 16: Einspeisungen im TH13-Experiment

Das TH13-Experiment besteht aus vier Versuchsphasen. Vor dem Versuchsbeginn war Luft unter Umgebungsbedingungen im Versuchsbehälter vorhanden. In der ersten Versuchsphase (0 - 2700 s) wurde kaltes Helium gleichzeitig mit einer kleinen Menge von Wasserdampf, welcher zur Erfassung des Heliumstrahls gebraucht wird, durch eine aufwärtsgerichtete Einspeisung in den Behälter freigesetzt. Durch die geringere Dichte vom Helium im Vergleich zur im geschlossenen Behälter vorhandenen Umgebungsluft, reichert sich Helium oben im Versuchsbehälter an. Und es baut sich dort eine stabile Leichtgasschicht auf. In einer zweiten Versuchsphase (2700 - 4700 s) wurde heißer Dampf mit einer abgeänderten Einspeisemethode, die aus senkrechtem Rohr besteht, das um 180 ° über den Umfang gegenüber der Heliumeinspeisungsstelle versetzt liegt, in den oberen Behälterbereich eingespeist und die Schichtung erodiert. Im unteren Behälter befand sich vorwiegend die schwerere Luft. In der dritten Versuchsphase (4700 - 5700 s) wurde heißer Dampf durch die untere Einspeisung über eine horizontale seitliche Düse in den unteren Behälterbereich eingespeist. In der letzten Versuchsphase (5700 - 7700 s) strömte kein Gas in den Versuchsbehälter ein, sondern die Versuchsanlage kühlte nur ab. Die Einspeisestellen des TH13-Experiments sind in Tabelle 3 ersichtlich.

Tabelle 3: Einspeisungsstelle

Phase	Vertikale Position [m]	Radius [m]	Radiale Position [°]
1	5,8	1,15	135
2	5,0	1,15	315
3	1,8	1,28	315

3.3.1 Geometrie, Rand- und Anfangsbedingungen

Durch die zwei um 180 ° versetzten, exzentrischen Einspeisestellen reicht die Simulation der Halbgeometrie mit einer Symmetrieebene für die Erfassung der Strömungsphänomene aus, siehe Abbildung 17. Die Einspeisung des halben Gesamtmassenstroms erfolgt nahe der Symmetrieebene, an der die Gleitbedingung gefordert wird. Die Kondensatwanne und die Kondensatsammelrinnen wurden berücksichtigt. Die Geometrie und das

Gitter wurden von Zschaeck [79] erstellt. Das Rechengitter besteht aus zwei Teilen mit ca. 1,3 Millionen Knoten. Festkörper und Freiräume wurden separat mit strukturierten Netzen generiert.

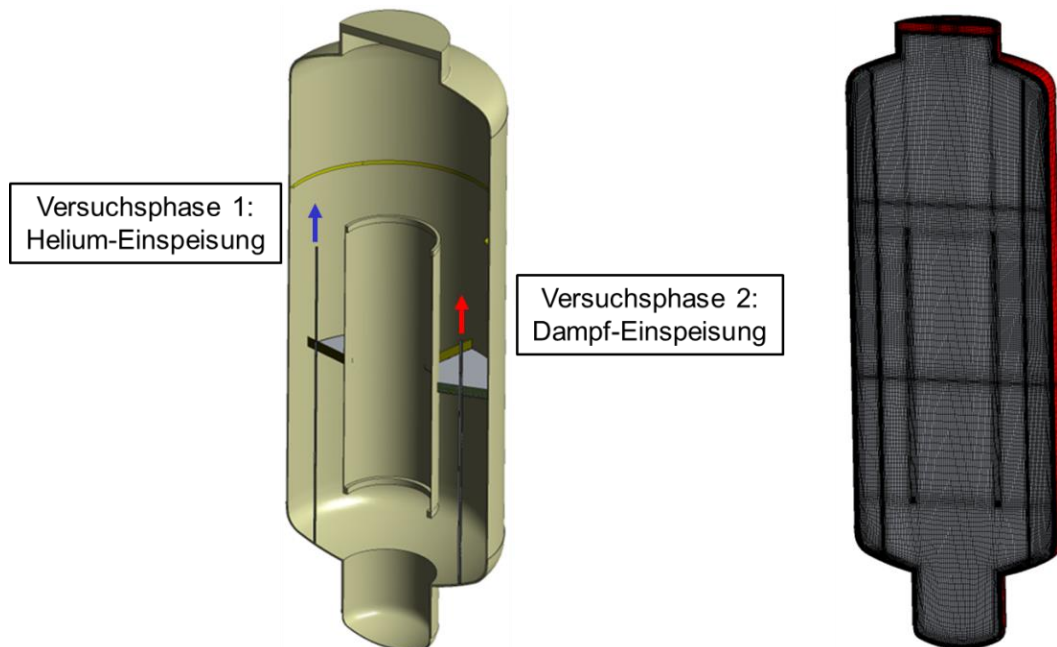


Abbildung 17: Halbgeometrie mit Einspeisungsstellen und Gitter des TH13-Experiments

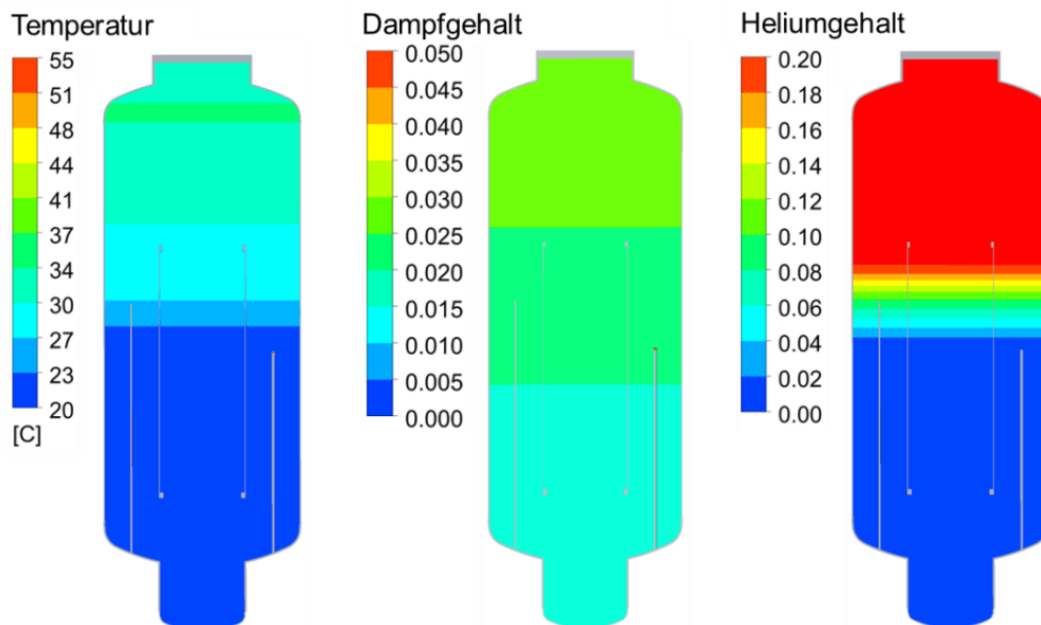


Abbildung 18: Anfangsbedingungen für die zweite Versuchsphase des TH13-Experiments

Nur die zweite Versuchsphase von 2700 s bis 3100 s wurde für die Verifikation und Validierung mit dem TH13-Experiment verwendet. Alle Daten für Massenströme und Temperaturen wurden für die TH13-Experiment in [16] angegeben. Die äußere Wand wurde adiabatisch eingestellt. Die Anfangsbedingungen der zweiten Phase (z.B. für Temperatur, Dampfgehalt und Heliumgehalt) sind in Abbildung 18 gezeigt. Da Helium leichter ist als Luft, reichert es sich im oberen Bereich des Versuchsbehälters an. Die Behälteratmosphäre lässt sich in drei Bereiche einteilen: den heliumreichen Bereich im oberen Versuchsbehälter, den heliumarmen Bereich im unteren Versuchsbehälter und den Übergangsbereich dazwischen.

3.3.2 Numerische Eigenschaften

Die transienten Simulationen des TH13-Experiments wurden mit ANSYS CFX 14.0 unter Verwendung der Diskretisierung zweiter Ordnung durchgeführt. Das SST-Turbulenzmodell wurde mit einer Diskretisierung erster Ordnung verwendet. Für die Rechnung wurde RMS von 5×10^{-4} verwendet.

3.3.3 Skalierbarkeit bei Parallelisierung

Zur Untersuchung der Skalierbarkeit bei Parallelverarbeitung auf Cray XE6 (Hermit)-Cluster am HLRS, wurden die Simulationen nur mit dem Wandkondensationsmodell und mit 20 Zeitschritten auf bis zu 96 Prozessoren durchgeführt. Abbildung 19 zeigt die Beschleunigungs- und Effizienzkurven. Es ist zu sehen, dass die optimale Effizienz mit 16 Prozessoren bei ca. 0,7 liegt. Bei steigender Anzahl von Prozessoren (ab 16) erhöht sich der Zeitverlust zur Kommunikation und die Sättigung tritt bei etwa 80 Prozessoren ein.

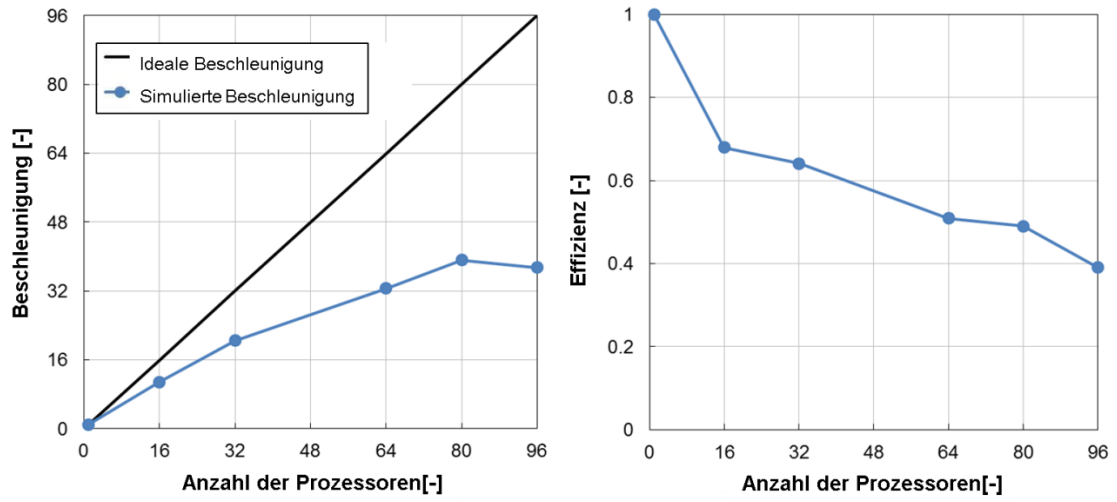


Abbildung 19: Beschleunigung (links) und Effizienz (rechts) auf dem Cray XE6 (Hermit)-Cluster in Abhängigkeit der Prozessoranzahl

4 Validierung

Um das neu entwickelte Volumenkondensationsmodell zu validieren, werden in den folgenden Unterkapiteln die Ergebnisse der beiden bereits erwähnten Versuche (TH2 und TH13) nachgerechnet. Für jedes dieser Validierungsexperimente wurden zwei Simulationen durchgeführt. Bei der ersten Simulation kam nur das Wandkondensationsmodell mit dem Ein-Fluid-Modell zum Einsatz. Bei der zweiten, zweiphasigen Simulation wurde zusätzlich das neu entwickelte Volumenkondensationsmodell mit einem konstanten Tropfendurchmesser verwendet. Beide Simulationsergebnisse wurden mit den experimentellen Daten verglichen und den Einfluss des Volumenkondensationsmodells analysiert.

4.1 2D TH2-Experiment

4.1.1 Ergebnisse mit dem Ein-Fluid-Modell

Im Folgenden werden die Ergebnisse aus der ersten Rechnung nur unter Verwendung des Wandkondensationsmodells gezeigt. In Abbildung 20 sind die berechneten Temperaturprofile auf der Symmetrieebene der Versuchsanlage im Zeitintervall zwischen 0 s und 3600 s dargestellt. Da der eingespeiste, heiße Dampf eine geringere Dichte besitzt, führt es zu einer thermischen Schichtung im oberen Bereich des Versuchsbehälters. Die Temperatur erhöht sich in diesem Bereich im Verlauf der Simulation.

Zum Vergleich der Simulationsergebnisse mit dem Experiment werden für die Temperatur die in Tabelle 4 gelisteten Monitorpunkten (MP) verwendet, die das wesentliche Strömungsverhalten im oberen, mittleren und unteren Versuchsbehälter wiedergeben.

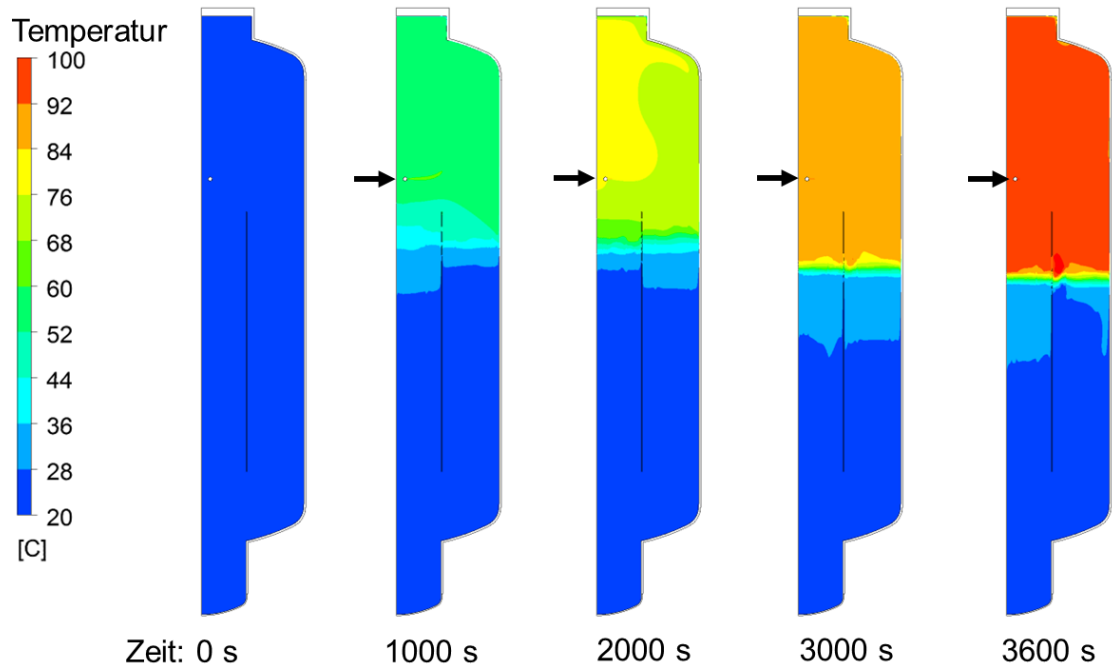


Abbildung 20: Temperaturprofile auf Symmetrieebene aus erster Simulation, mit Wandkondensationsmodell zu verschiedenen Simulationszeiten

Tabelle 4: Position der Monitorpunkte zur Messung der Temperatur

Name	Vertikale Position [m]	Radius [m]
MP2	8,4	0,7
MP25	7,7	0,7
MP27	7,0	0,7
MP4	6,3	0,7
MP46	4,9	1,14
MP6	4,9	0,35
MP12	1,2	0,35

Wegen der geringeren Dichte sammelt sich der heiße Wasserdampf oben im Versuchsbehälter und es kommt dort zu einer Kondensation an den kalten Wänden, welche mit dem Wandkondensationsmodell gut wiedergegeben wird. Von der Abbildung 21 bis Abbildung 24 werden die Temperaturtransienten aus der ersten Simulation an vier Monitorpunkten (MP2, MP25, MP27 und MP4) im oberen Bereich des Versuchsbehälters mit dem Experiment bis zu 3600 s verglichen. Die Abbildungen zeigen einander ähnliche Temperaturverläufe, aber nur eine grobe Übereinstimmung der berechneten Temperatur mit den experimentellen Messdaten an denjenigen Monitorpunkten, die oberhalb der oberen Innenzylinderkante liegen. Es sind Temperaturabweichungen bis zu 15 K zu erkennen, wobei die simulierten Temperaturverläufe anfangs unterhalb, und später oberhalb der gemessenen Temperatur liegen.

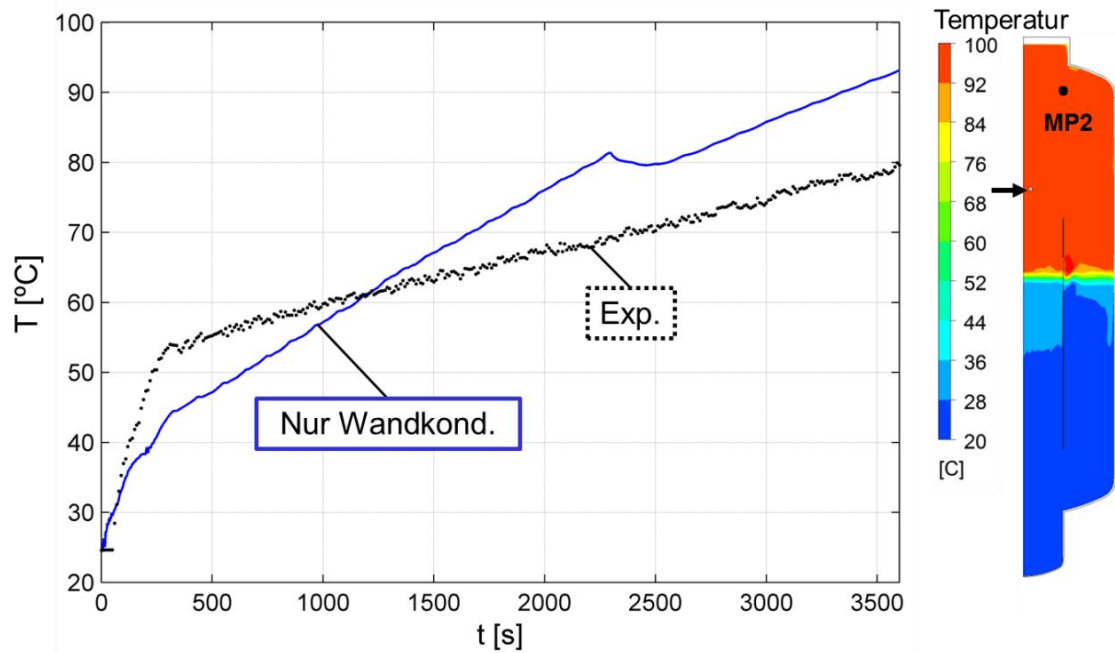


Abbildung 21: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH2-Experiment am MP2; rechts: Temperaturprofil auf Symmetrieebene aus erster Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3600 s und die Position von MP2

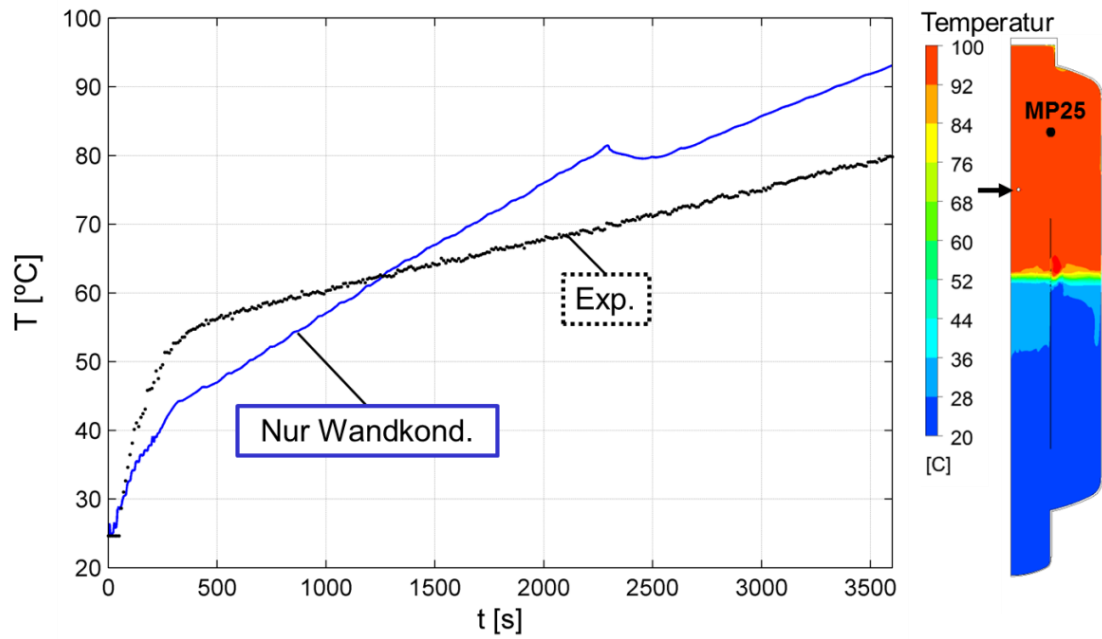


Abbildung 22: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH2-Experiment am MP25;
rechts: Temperaturprofil auf Symmetrieebene aus erster Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3600 s und die Position von MP25

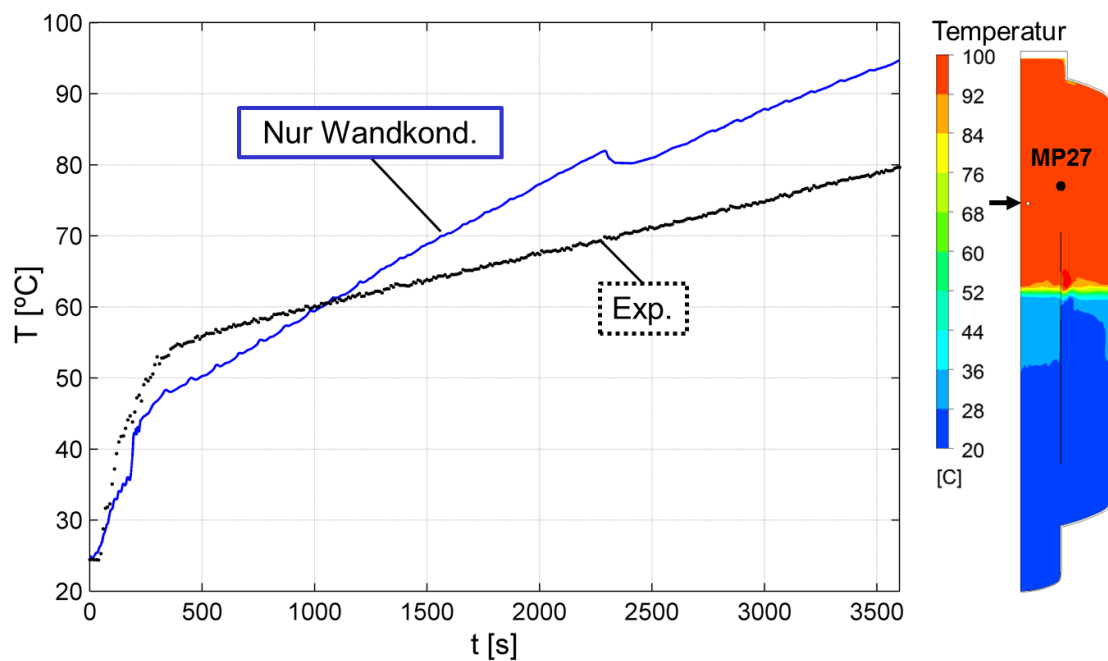


Abbildung 23: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH2-Experiment am MP27;
rechts: Temperaturprofil auf Symmetrieebene aus erster Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3600 s und die Position von MP27

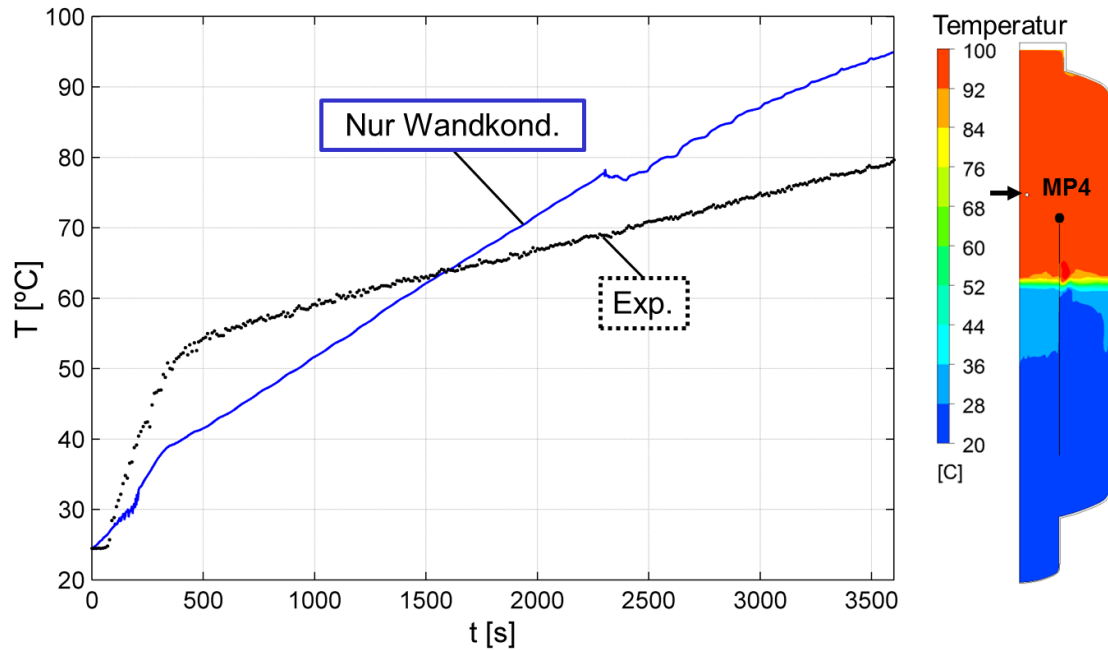


Abbildung 24: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH2-Experiment am MP4; rechts: Temperaturprofil auf Symmetrieebene aus erster Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3600 s und die Position von MP4

Abbildung 25 und Abbildung 26 zeigen die Vergleiche der berechneten Temperaturen mit dem Experiment an zwei Monitorpunkten (MP46 und MP6) im Bereich der ringförmigen Einspeisung und innerhalb des inneren Zylinders in der Mitte des Versuchsbehälters bis zu 3600 s. Die berechneten Temperaturen an beiden Monitorpunkten zeigen ähnliche Verläufe und eine schlechte Übereinstimmung mit den experimentellen Messdaten. Innerhalb der 3600 s sind Temperaturabweichungen bis zu 20 K zu erkennen, wobei die simulierte Temperaturverläufe anfangs oberhalb, und ab ca. 1100 s kontinuierlich unterhalb der gemessenen Temperaturen liegen. Im Experiment steigt die Temperatur an beiden Monitorpunkten langsam an. Aus dem simulierten Ergebnis erkennt man, dass die beiden Monitorpunkten unterhalb der thermischen Schichtung liegen und sich die Temperaturen an beiden Monitorpunkten ab ca. 1100 s nur geringfügig unterscheiden.

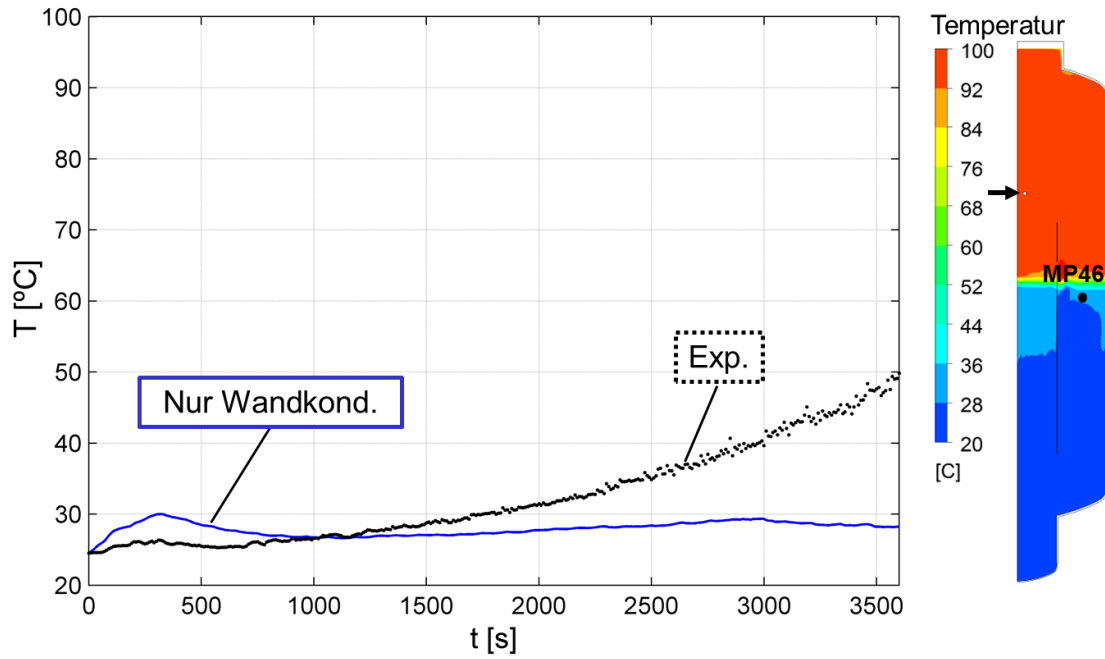


Abbildung 25: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH2-Experiment am MP46; rechts: Temperaturprofil auf Symmetrieebene aus erster Simulation mit dem Wandkondensationsmodell bei 3600 s und die Position von MP46

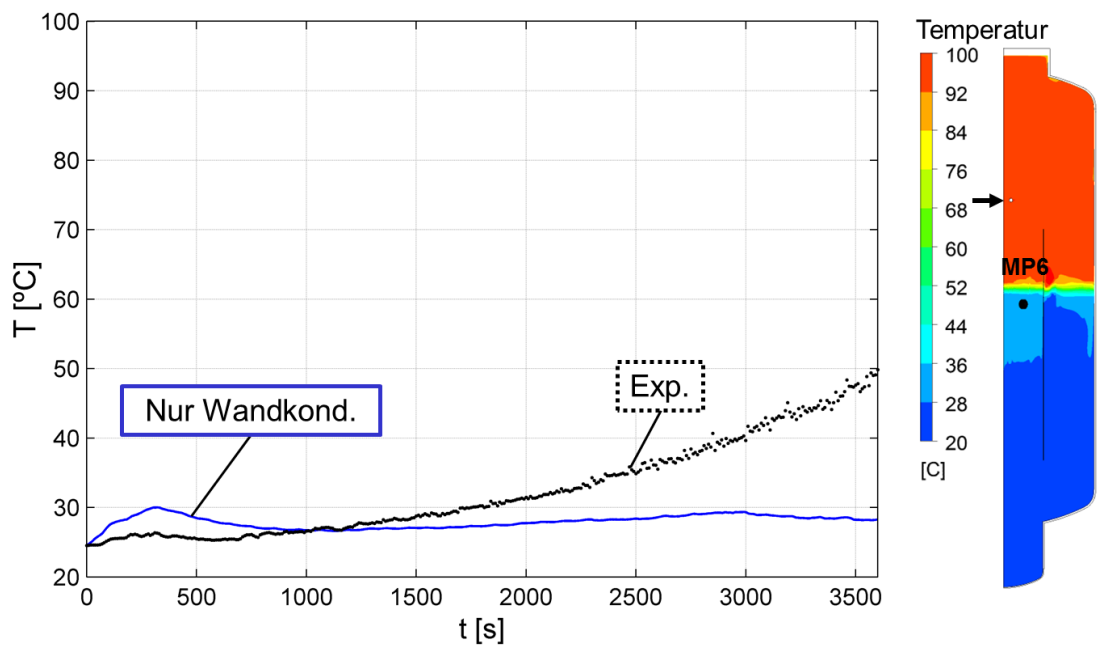


Abbildung 26: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH2-Experiment am MP6; rechts: Temperaturprofil auf Symmetrieebene aus erster Simulation mit dem Wandkondensationsmodell bei 3600 s und die Position von MP6

Abbildung 27 zeigt den Temperaturvergleich am unteren Monitorpunkt (MP12). Die thermische Schichtung bewirkt eine schwache, vermischende Strömung zwischen dem oberen und unteren Bereich des Versuchsbehälters, so dass sich die Temperatur im unteren Bereich nicht stark ändert. Unter Verwendung des Wandkondensationsmodells ist die simulierte Temperatur in guter Übereinstimmung mit den experimentellen ermittelten Messwerten.

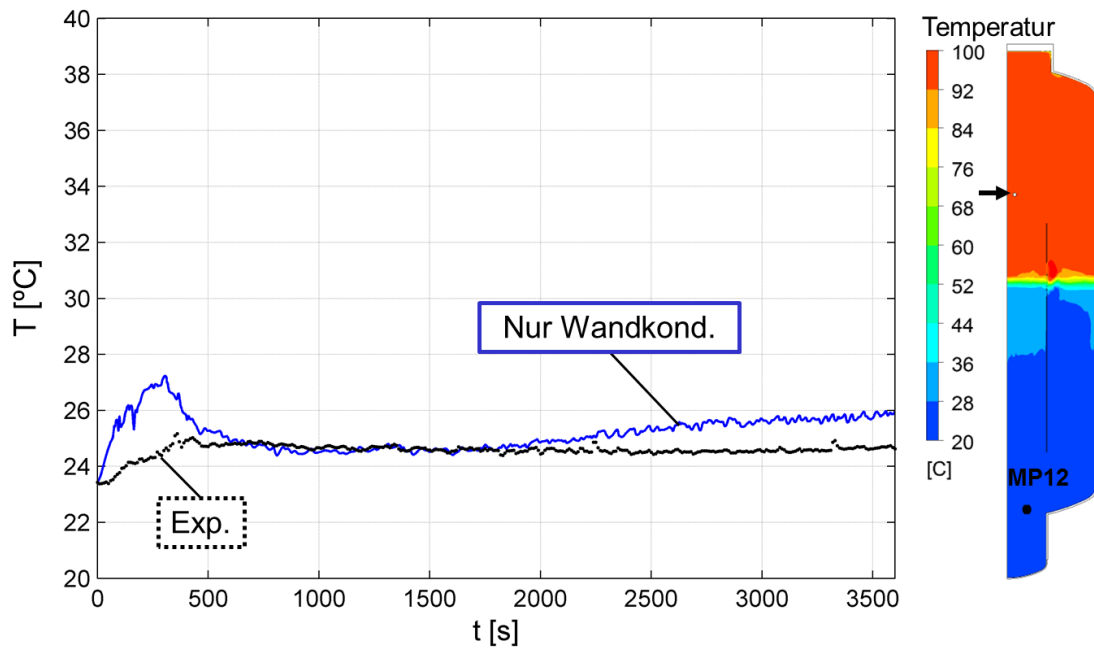


Abbildung 27: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH2-Experiment am MP12; rechts: Temperaturprofil auf Symmetrieebene aus erster Simulation mit dem Wandkondensationsmodell bei 3600 s und die Position von MP12

Abbildung 28 zeigt den Druckverlauf im Versuchsbehälter während des Versuchs. Mit Beginn der Dampfeinspeisung steigt der Druck stark an. Nach ca. 350 s flacht die Druck-erhöhung mit Einsetzen der Wandkondensation ab. Das Druckniveau unter Verwendung des Wandkondensationsmodells stimmt gut mit den Messdaten überein.

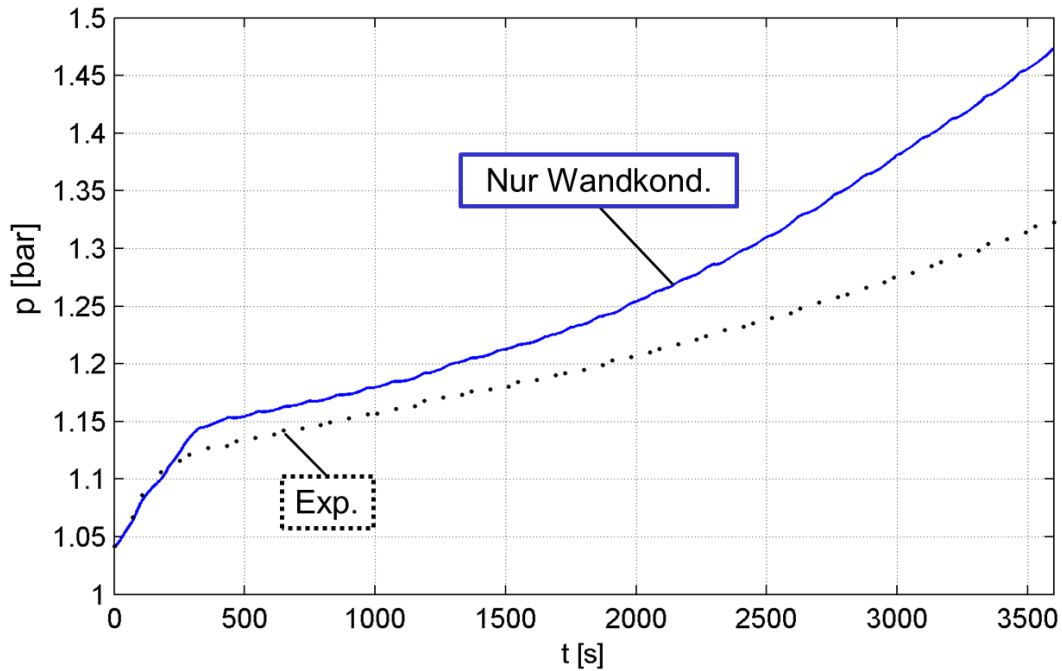


Abbildung 28: Vergleich des simulierten Druckes im Versuchsbehälter aus erster Simulation, unter Verwendung des Wandkondensationsmodells mit dem TH2-Experiment

4.1.2 Ergebnisse mit dem Zwei-Fluid-Modell

Im Folgenden werden die simulierten Ergebnisse aus der zweiten Simulation unter Verwendung des Wand- und Volumenkondensationsmodells mit Hilfe des Zwei-Fluid-Modells gezeigt. Für die zweite Simulation wurden Tropfen mit einem konstanten Tropfendurchmesser von $100\ \mu\text{m}$ und mit einem volumetrischen Flüssigkeitsgehalt von 10^{-5} zum Beginn der Rechnung gleichmäßig im Versuchsbehälter vorgegeben. In Abbildung 29 sind Temperaturprofile auf der Symmetrieebene zu unterschiedlichen Simulationszeiten dargestellt. Die Einspeisung des heißen Wasserdampfes oben verursacht einen Temperaturanstieg im oberen Bereich des Versuchsbehälters. Die thermische Schichtung aus der zweiten Simulation breitet sich wegen der während Volumenkondensation abgeführten Wärme im Vergleich zu den Temperaturprofilen aus der ersten Simulation, nur mit dem Wandkondensationsmodell, weiter unten im Versuchsbehälter aus.

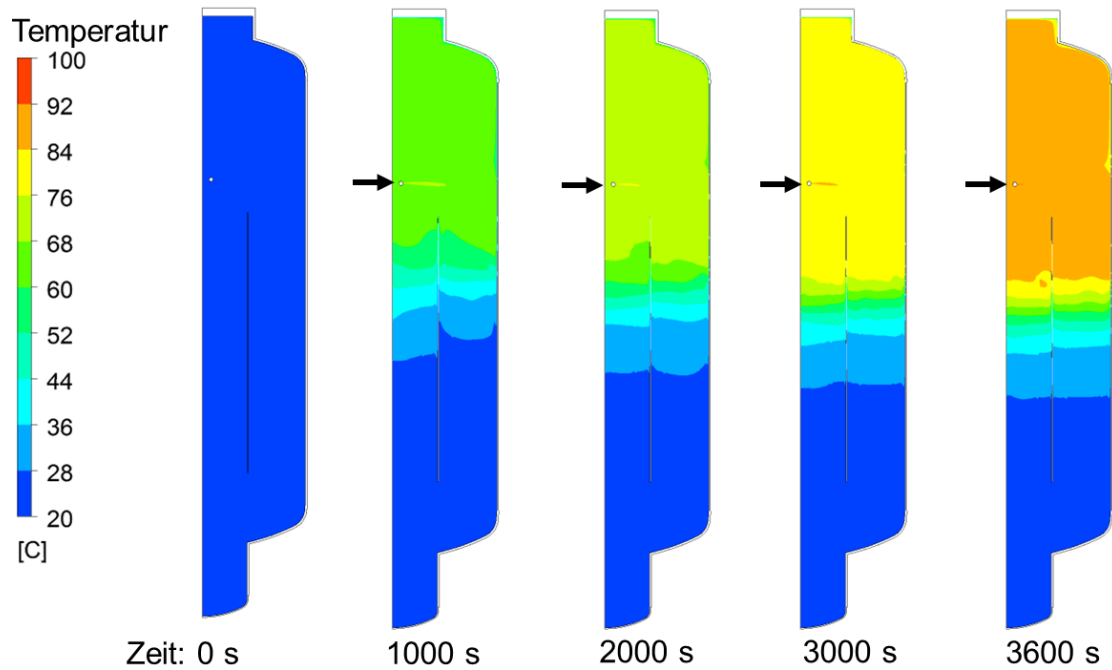


Abbildung 29: Temperaturprofile auf der Symmetrieebene aus der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell zu verschiedenen Simulationszeiten

Die Bilder zwischen Abbildung 30 und Abbildung 32 zeigen Vergleiche der Temperaturverläufe an den drei obersten Monitorpunkten. Im Vergleich zu der berechneten Temperatur nur mit dem Wandkondensationsmodell steigt die Temperatur bei zusätzlicher Verwendung des Volumenkondensationsmodells in den ersten ca. 600 s stärker an. Dies lässt sich dadurch begründen, dass durch die Volumenkondensation der Wasserdampf nach der Einspeisung direkt im oberen Volumen des Versuchsbehälters kondensiert und die Wärme an die Umgebung abgeführt wird. Beim Kontakt des Wasserdampfes mit den kalten Wänden kondensiert der Dampf nicht nur im Volumen, sondern auch an den kalten Wänden. Nach ca. 800 s stimmt das Ergebnis bis auf wenigen Kelvin gut mit dem Experiment überein.

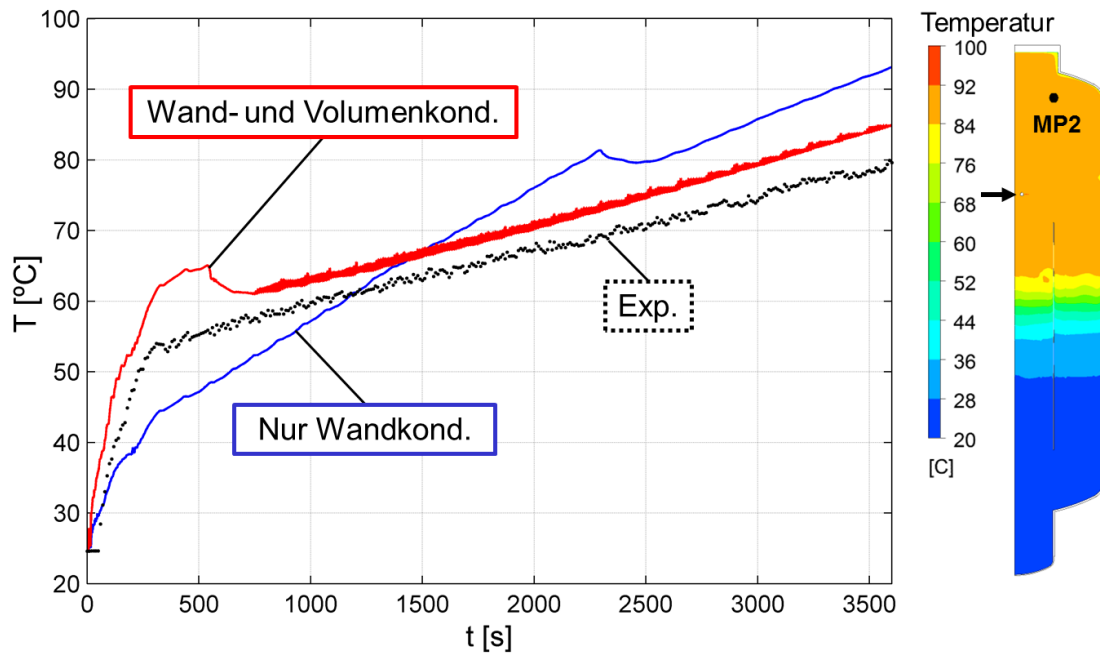


Abbildung 30: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH2-Experiment am MP2; rechts: Temperaturprofil auf der Symmetrieebene von der zweiten Simulation mit den Wand- und Volumenkondensationsmodellen bei 3600 s und die Position von MP2

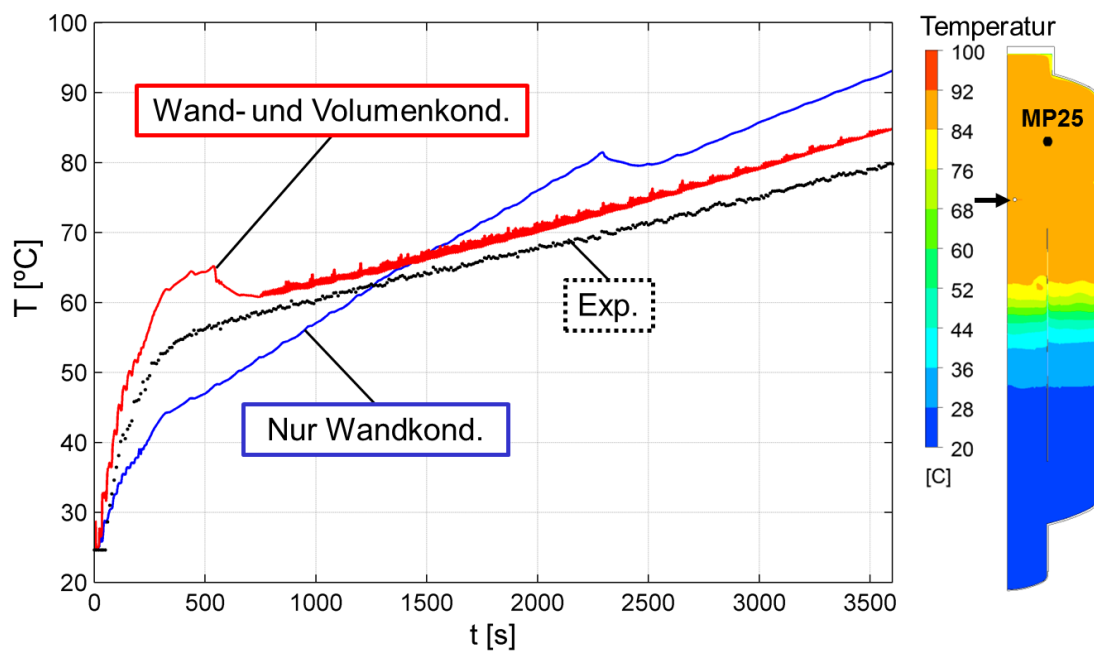


Abbildung 31: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH2-Experiment am MP25; rechts: Temperaturprofil auf der Symmetrieebene von der zweiten Simulation mit den Wand- und Volumenkondensationsmodellen bei 3600 s und die Position von MP25

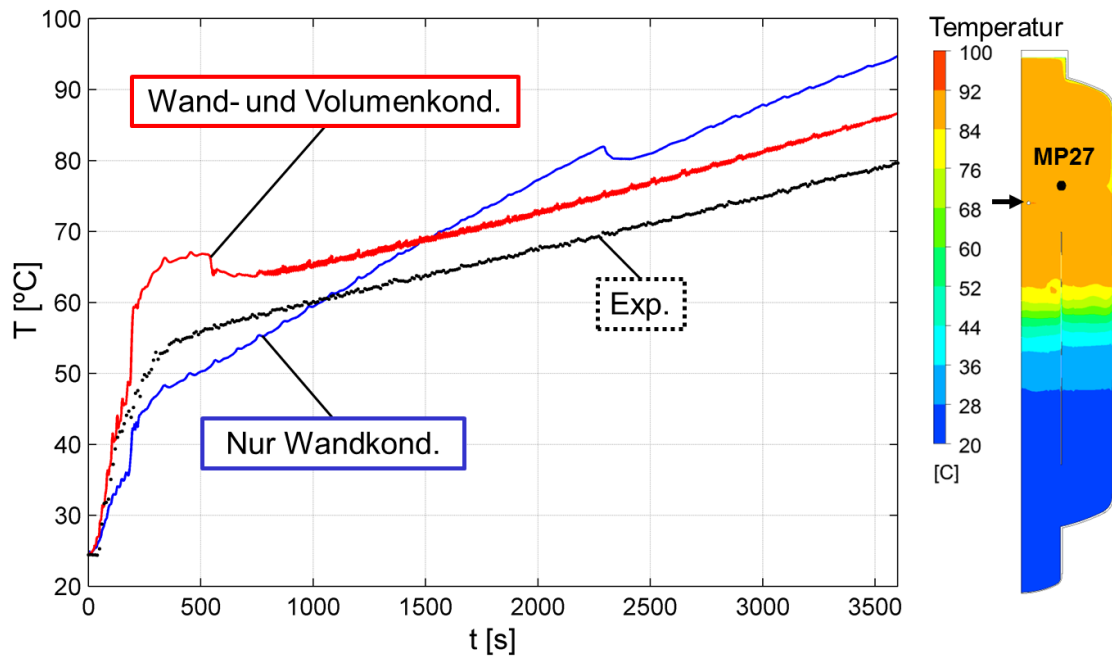


Abbildung 32: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH2-Experiment am MP27; rechts: Temperaturprofil auf der Symmetrieebene von der zweiten Simulation mit den Wand- und Volumenkondensationsmodellen bei 3600 s und die Position von MP27

Der Monitorpunkt MP4 liegt direkt über der oberen Kante des Innenzylinders. Abbildung 33 zeigt in den ersten ca. 600 s die simulierte Temperatur, die eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment am MP4 aufweist. Danach ist die Temperaturkurve nur wenige Kelvin höher als die der Messdaten.

Abbildung 34 und Abbildung 35 zeigen Vergleiche der Temperatur zwischen beiden Simulationen und dem Experiment an dem MP46 im Ringbereich und MP6 im Innenzylinderraum des Versuchsbehälters bis zu 3600 s. Da die beiden Monitorpunkte im Übergangsbereich der thermischen Stratifizierung liegen, zeigen die berechneten Temperaturkurven aus der zweiten Simulation an beiden Monitorpunkten eine größere Steigung als die experimentellen Daten. Innerhalb der Simulationszeit sind Temperaturabweichungen bis zu 20 K zu erkennen, wobei die simulierten Temperaturverläufe kontinuierlich oberhalb der gemessenen Temperatur liegen.

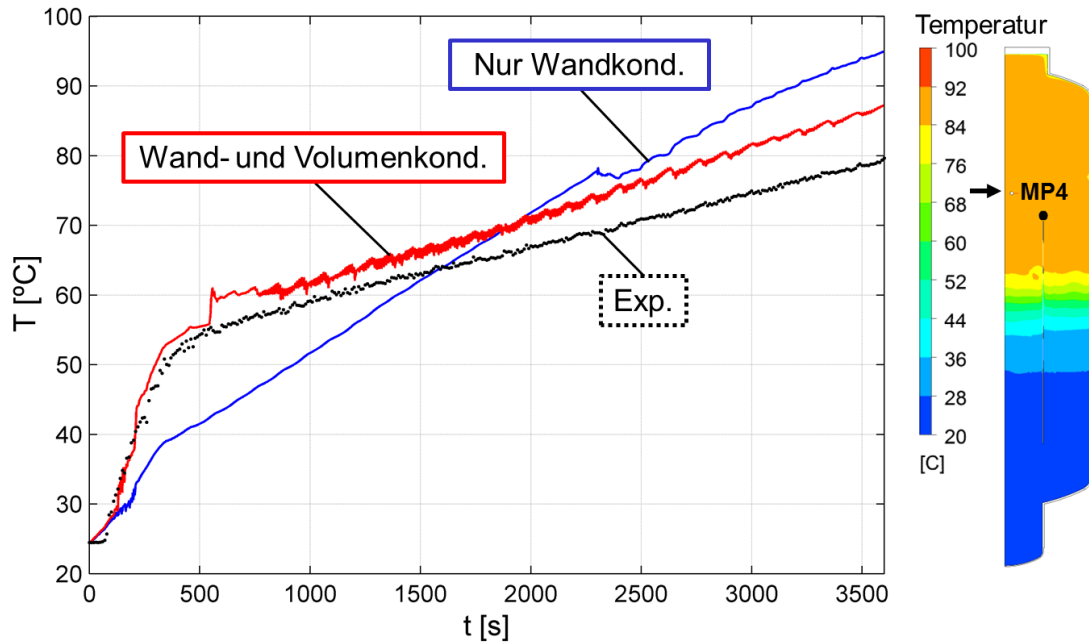


Abbildung 33: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH2-Experiment am MP4; rechts: Temperaturprofil auf der Symmetrieebene von der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3600 s und die Position von MP4

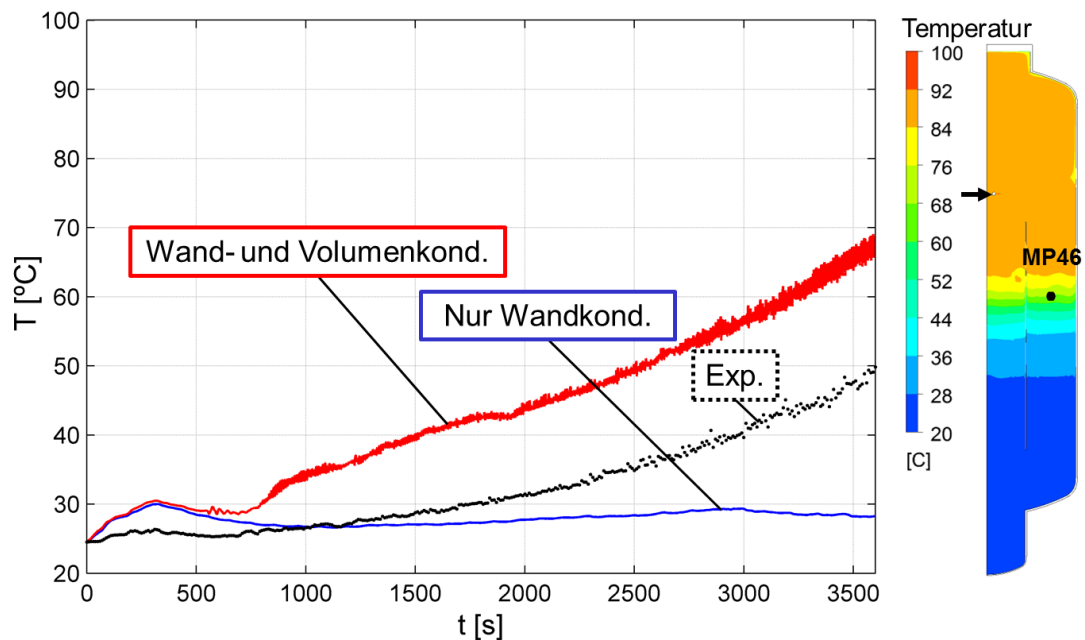


Abbildung 34: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH2-Experiment am MP46; rechts: Temperaturprofil auf der Symmetrieebene der zweiten Simulation mit den Wand- und Volumenkondensationsmodellen bei 3600 s und die Position von MP46

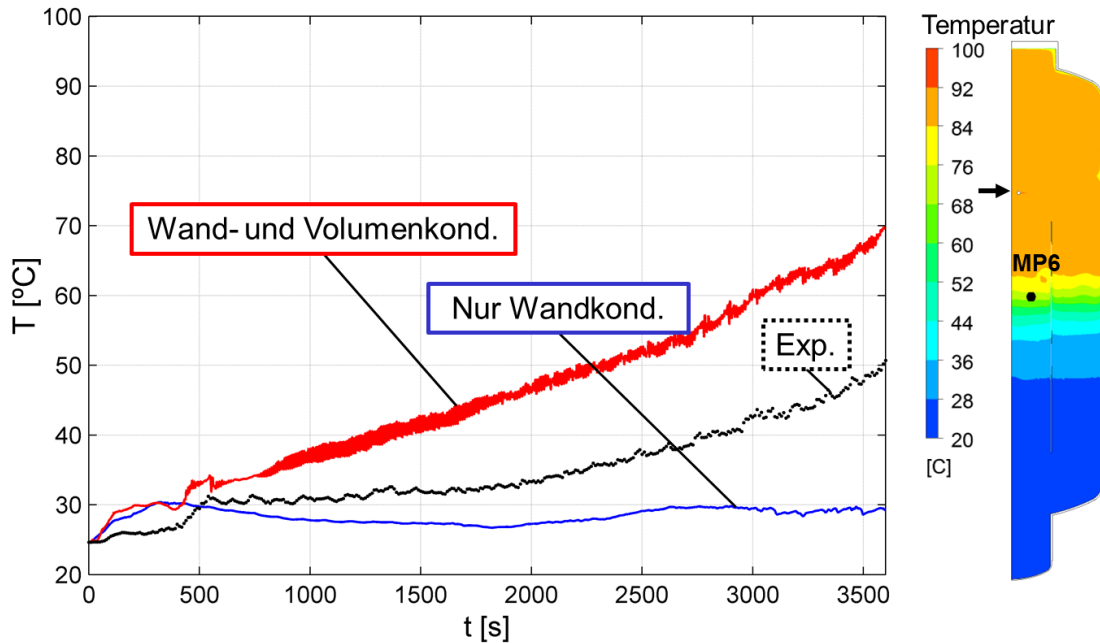


Abbildung 35: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH2-Experiment am MP6; rechts: Temperaturprofil auf der Symmetrieebene von der zweiten Simulation mit den Wand- und Volumenkondensationsmodellen bei 3600 s und die Position von MP6

Abbildung 36 zeigt den Temperaturvergleich am MP12. Die simulierte Temperatur stimmt unter Verwendung des Wand- und Volumenkondensationsmodells besser mit dem Experiment überein, als nur mit dem Wandkondensationsmodell, besonders ab ca. 2000 s.

In Abbildung 37 wird der berechnete Druck im Versuchsbehälter von der zweiten Simulation, unter Verwendung des Wand- und Volumenkondensationsmodells, nicht nur mit den experimentellen Daten, sondern auch mit dem berechneten Druck von der ersten Simulation, unter Verwendung des Wandkondensationsmodells verglichen. Der berechnete Druck zeigt nach dem Einsetzen der Wand- und Volumenkondensation eine ähnliche Tendenz und eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment. Die Abweichung zwischen dem aus zweiter Simulation berechneten Druck und dem Experiment ist bis zu 0,1 bar.

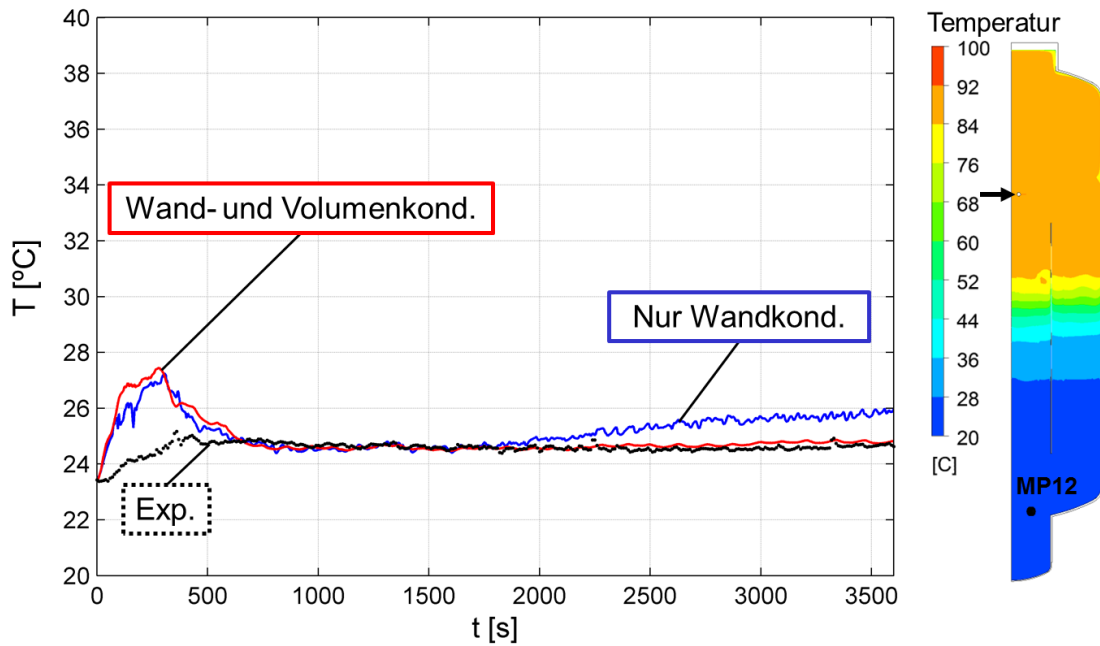


Abbildung 36: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH2-Experiment am MP12; rechts: Temperaturprofil auf der Symmetrieebene von der zweiten Simulation mit den Wand- und Volumenkondensationsmodellen bei 3600 s und die Position von MP12

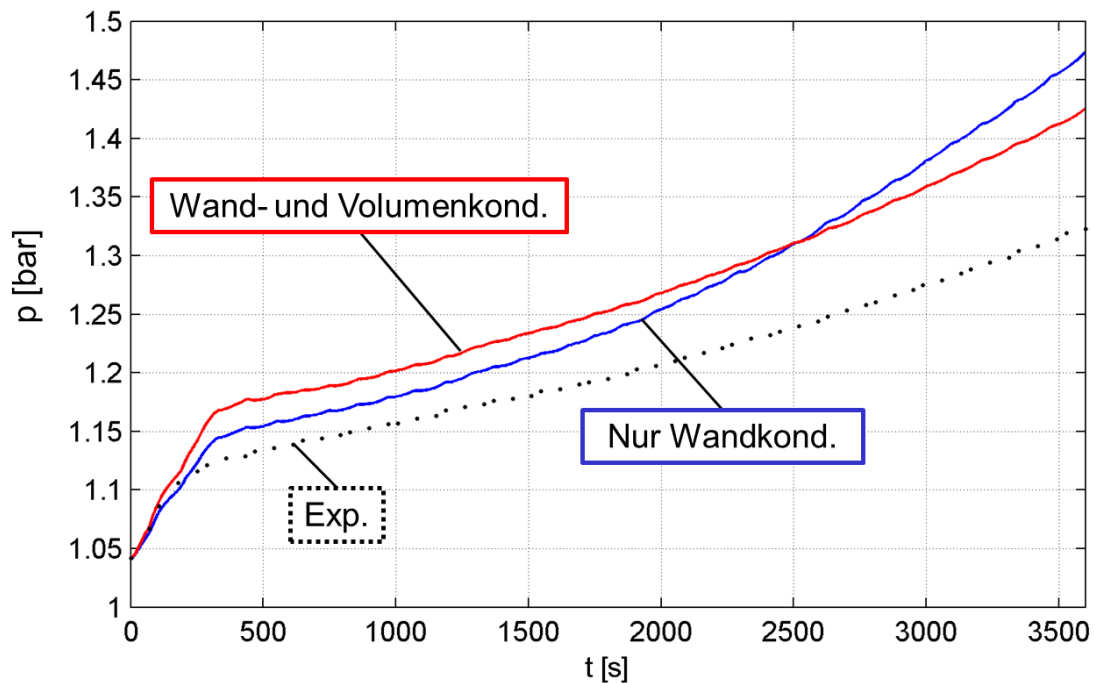


Abbildung 37: Vergleich des simulierten Druckes im Versuchsbehälter, unter Verwendung des Wand- und Volumenkondensationsmodells, sowie nur des Wandkondensationsmodells, mit den experimentellen Daten aus dem TH2-Experiment

Zur Untersuchung des Einflusses der Volumen Kondensation in der zweiten Simulation, mit den Wand- und Volumen Kondensationsmodellen, werden die Kondensationsraten an den kalten Wänden und im Volumen in Abbildung 38 miteinander verglichen. Zum Zeitpunkt 270 s erreicht die Volumen Kondensationsrate einen maximalen Wert. Zu diesem Zeitpunkt kondensiert 92 % des Wasserdampfes an den kalten Wänden und die restlichen 8 % im Volumen. Am Ende der Simulation (d.h. 3600 s) geht die Volumen Kondensationsrate gegen null und der Wasserdampf kondensiert nur noch an den Wänden. Aus dem Ergebnis erkennt man, dass die Volumen Kondensation im gesamten Kondensationsprozess, besonders am Anfang der Simulation, eine große Rolle spielt.

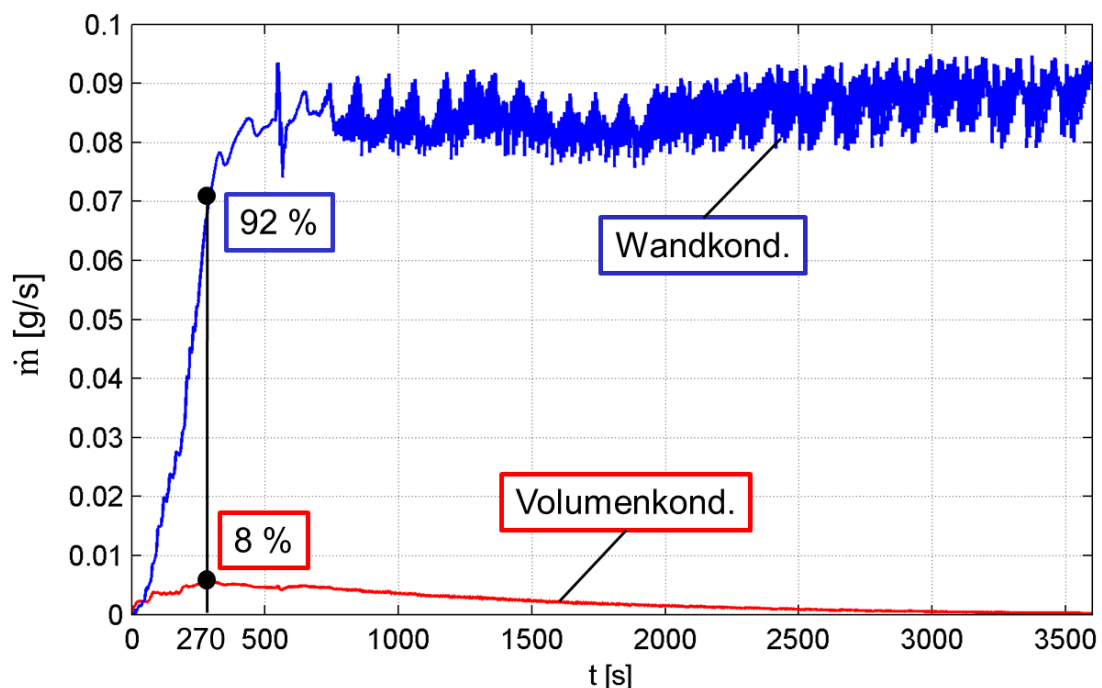


Abbildung 38: Vergleich der Kondensationsraten an den Wänden und im Volumen aus der zweiten Simulation vom TH2-Experiment

Abbildung 39 zeigt die Verteilung des Tropfengehalts auf der Symmetrieebene zu verschiedenen Simulationszeiten. Nach der Dampffreisetzung in den Versuchsbehälter, findet die Volumen Kondensation in der Nähe der Einspeisungsstelle statt. Die Tropfen werden zuerst mit der Dampfströmung in Richtung des Doms transportiert. Dann fallen sie aufgrund der Schwerkraft, meistens durch den Innenzylinder, in den Sumpf. Am Ende der Simulation (d.h. 3600 s) sammelt sich die Flüssigkeit im Sumpf und Volumen Kondensation findet kaum noch statt.

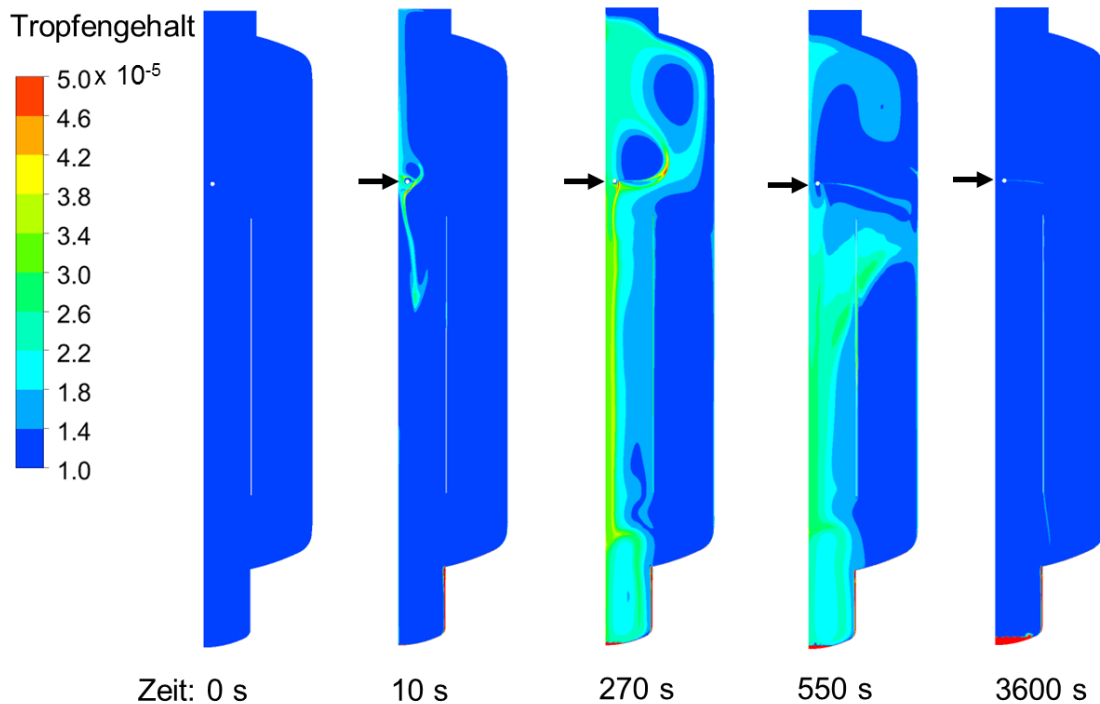


Abbildung 39: Tropfenverteilung auf Symmetrieebene aus der zweiten Simulation zu unterschiedlichen Simulationszeiten

Wie oben erläutert, spielt die Volumen Kondensation besonders am Anfang der Rechnung eine Rolle. Zur Durchführung einer Sensibilitätsanalyse bezüglich des Tropfendurchmessers wurden Simulationen unter Verwendung der Wand- und Volumen Kondensationsmodelle für die ersten 400 s durchgeführt. Bei alle Simulationen wurde ein anfänglicher, volumetrischer Flüssigkeitsgehalt von 10^{-5} angenommen. Vier unterschiedliche Tropfendurchmesser von $50\ \mu\text{m}$, $100\ \mu\text{m}$, $200\ \mu\text{m}$ und $300\ \mu\text{m}$ wurden getestet. In Abbildung 40 werden die vier berechneten Drücke mit den experimentellen Messdaten verglichen. Die Vorgabe kleinerer Tropfen führt zu einer besseren Übereinstimmung bei niedrigen Drücken, weil kleinere Tropfen insgesamt eine größere Grenzfläche besitzen, auf der im Vergleich mit größeren Tropfen, mehr Dampf kondensieren kann.

Alle Rechnungen wurden auf Nehalem-Cluster am HLRS durchgeführt. Eine Zeitmessung hat ergeben, dass für eine physikalische Sekunde 2383 CPU-Sekunden mit dem $50\ \mu\text{m}$ Durchmesser, 573 CPU-Sekunden mit dem $100\ \mu\text{m}$ Durchmesser, 520 CPU-Sekunden mit dem $200\ \mu\text{m}$ Durchmesser und 503 CPU-Sekunden mit dem $300\ \mu\text{m}$ Durchmesser benötigt werden. Je kleiner der Tropfendurchmesser ist, desto länger ist die benötigte Rechenzeit. Im Vergleich der Simulationen untereinander ist der Unterschied der berechneten Drücke nicht groß. Zur Reduzierung des numerischen Rechenaufwands wird

im Folgenden der Tropfendurchmesser von $100\ \mu\text{m}$ für weitere Rechnungen unter Verwendung des Volumenkondensationsmodells beibehalten.

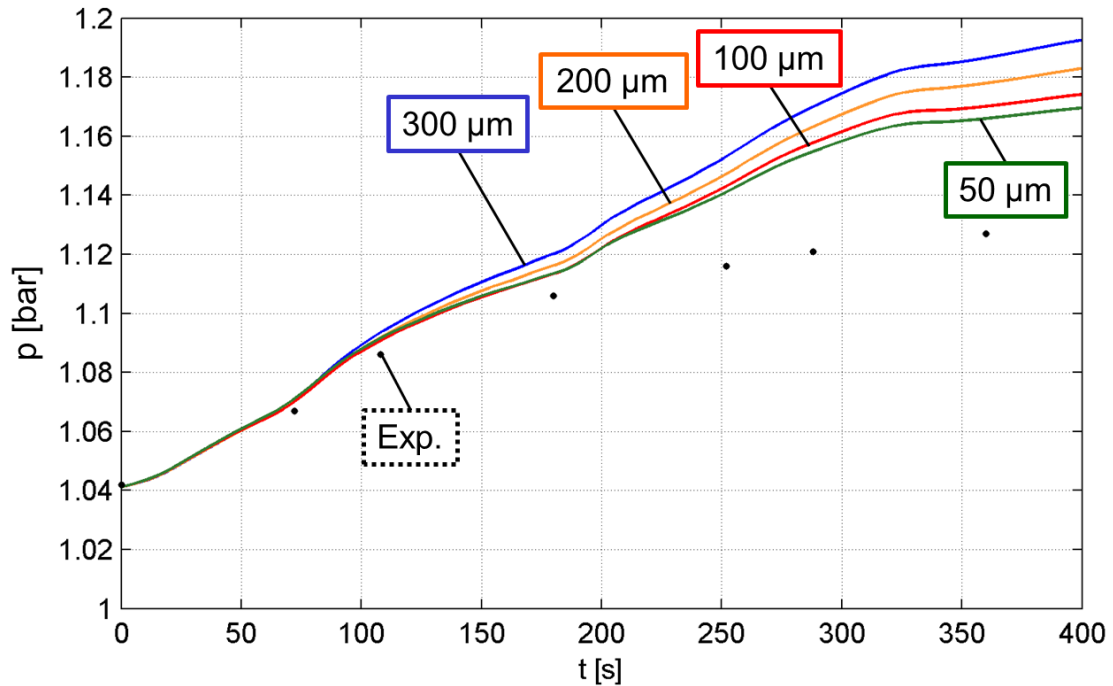


Abbildung 40: Druckvergleich aus Simulationen mit unterschiedlichen Tropfendurchmessern

4.2 3D TH13-Experiment

4.2.1 Ergebnisse mit dem Ein-Fluid-Modell

In diesem Unterkapitel werden die Simulationsergebnisse des TH13-Experiments aus der ersten Rechnung, unter Verwendung des Wandkondensationsmodells, vorgestellt. Nach dem Beginn der Dampfeinspeisung oben, wurde die Simulation von 2700 s bis 3100 s durchgeführt. In Abbildung 41 ist die räumliche Verteilung des volumetrischen Heliumgehalts in der Halbgeometrie des TH13-Versuchsbehälters zu unterschiedlichen Simulationszeiten dargestellt. Aufgrund der geringeren Dichte sammelt sich das Helium im oberen Teil des Versuchsbehälters an und bildet dort eine stabile Schicht vor der Dampfeinspeisung. Bei 2700 s ist die initiale Heliumkonzentration mit einer breiteren Übergangsschicht zu sehen. Nach der Penetrationsströmung durch die vertikale Dampfeinspeisung, verdünnt sich der Heliumgehalt im oberen Bereich des Versuchsbehälters und die stabile

Schicht sinkt bis zu der Höhe ab, in der die Kondensatwannen liegen. Aufgrund der Versperrung der Kondensatwannen ist der Übergangsbereich der Dichteschicht im Ringbereich nicht klar zu erkennen.

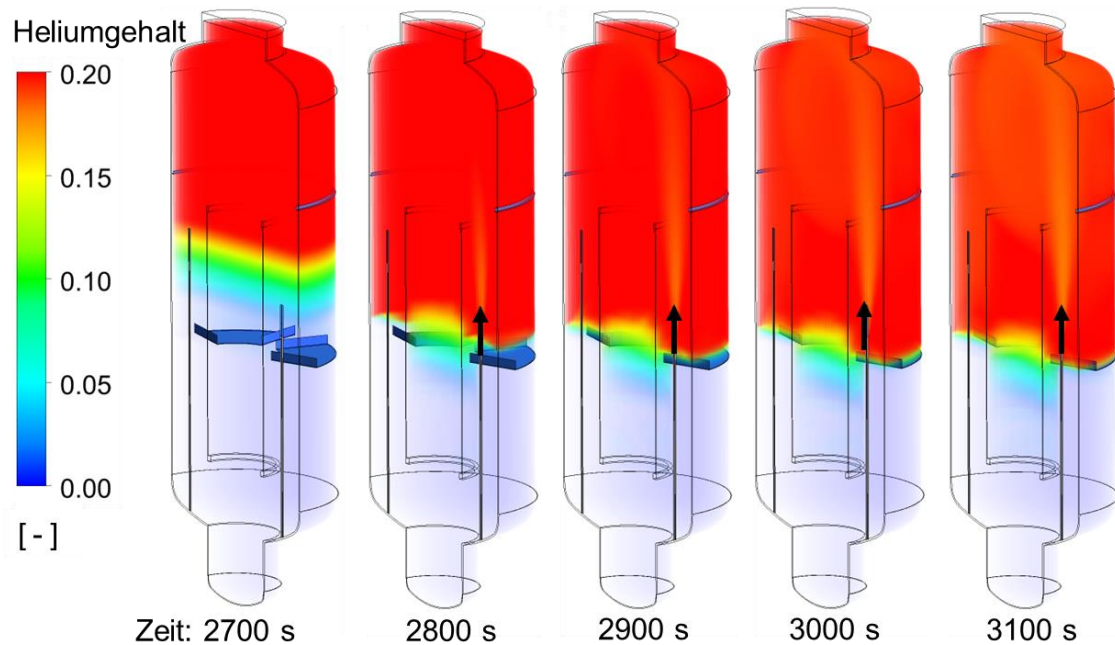


Abbildung 41: Heliumverteilung in der Halbgeometrie, erste Simulation mit Wandkondensationsmodell zu verschiedenen Simulationszeiten

Tabelle 5: Position der Monitorpunkte zur Messung der Heliumkonzentration

Name	Vertikale Position [m]	Radius [m]	Radiale Position [°]
MP201	8,7	0,65	300
MP205	8,7	0,65	300
MP209	5,7	1,05	305
MP207	4,6	1,05	305
MP210	5,4	0,3	300
MP212	1,7	0,65	60

Zum Vergleich der volumetrischen Heliumkonzentration werden die Positionen von den sechs in Tabelle 5 gelisteten Monitorpunkten verwendet. Im Versuchsbehälter liegen einige Monitorpunkte (MP201, MP205 und MP210) in 15° Staffelung, sowie einige Monitorpunkte (MP209 und MP207) in 10° Staffelung zur Dampfeinspeisungsstelle über den Freistrahls an der Symmetrieebene. Der Monitorpunkt MP212 befindet sich in der anderen, nicht simulierten Halbgeometrie des TH13-Versuchsbehälters. Um die Messdaten an diesem Monitorpunkt für die Validierung zu nutzen, wurde MP212 durch eine Spiegelung um 105° zur Dampfeinspeisungsstelle an der Symmetrieebene versetzt.

In Abbildung 42 und Abbildung 43 wird der Heliumgehalt aus der ersten Simulation, unter Verwendung des Wandkondensationsmodells, an den Monitorpunkten MP201 und MP205, die im oberen Versuchsbehälter liegen, mit dem Experiment verglichen. Die berechneten Heliumgehaltsverläufe fallen nach Beginn der oberen Dampfeinspeisung infolge der Erosionsströmung ab ca. 2750 s am MP201 und ab ca. 2725 s am MP205 steil ab sowie liegen kontinuierlich unterhalb der experimentellen Messwerte. Die Abweichung zwischen dem berechneten Heliumgehalt und dem Experiment ist innerhalb von 0,05 zu erkennen.

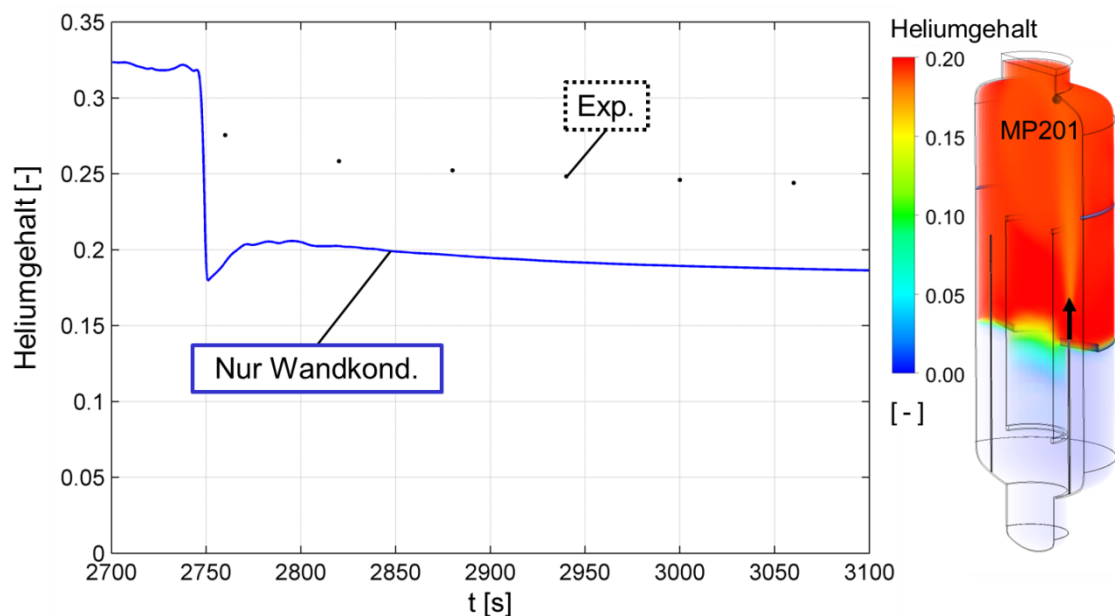


Abbildung 42: links: Vergleich des simulierten Heliumgehaltes mit dem TH13-Experiment am MP201; rechts: Heliumgehaltsverteilung von der ersten Simulation mit dem Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP201

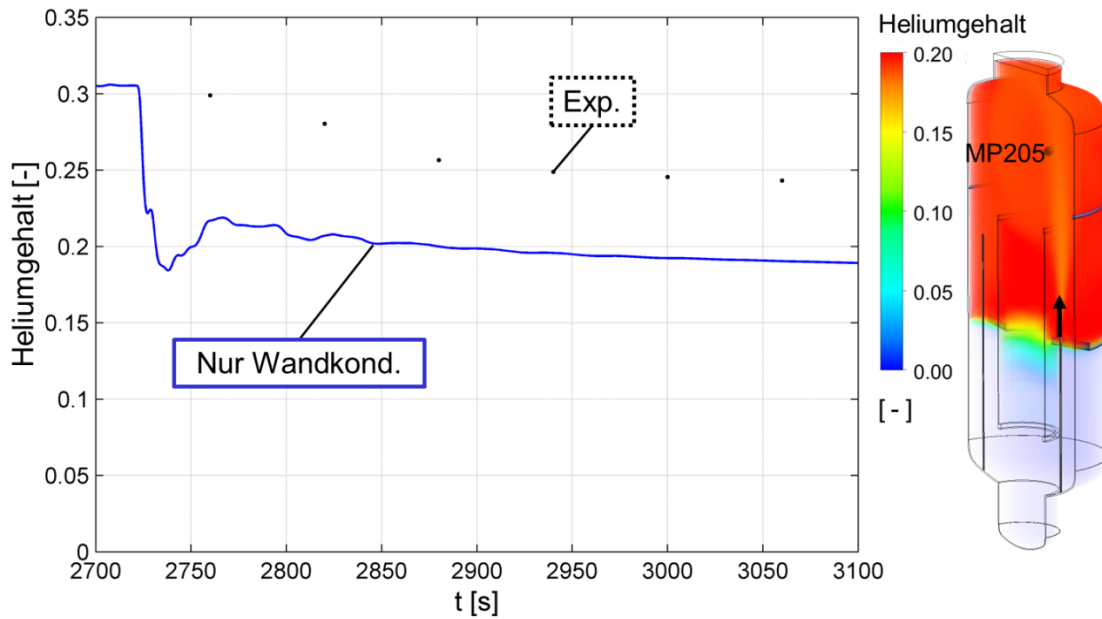


Abbildung 43: links: Vergleich des simulierten Heliumgehaltes mit dem TH13-Experiment am MP205; rechts: Heliumgehaltsverteilung der ersten Simulation mit dem Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP205

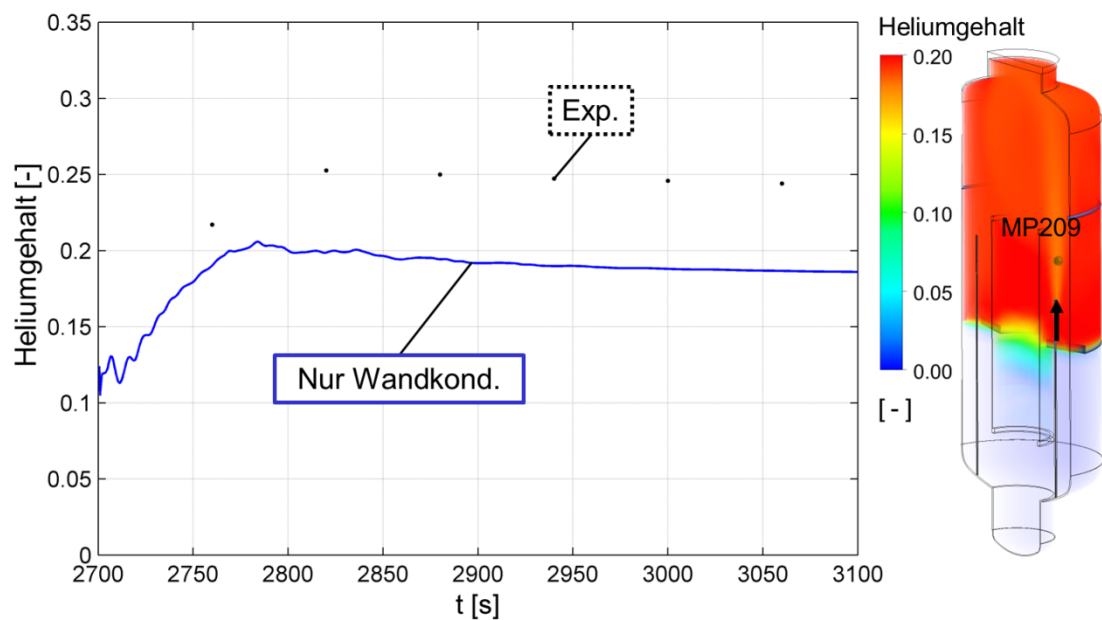


Abbildung 44: links: Vergleich des simulierten Heliumgehaltes mit dem TH13-Experiment am MP209; rechts: Heliumgehaltsverteilung der ersten Simulation mit dem Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP209

Die Monitorpunkte MP209 und MP210 liegen bei 2700 s im Übergangsbereich der Heliumschicht. Nach der vertikalen Dampfeinspeisung wird das Helium von der oberen stabilen Schicht nach unten bis zu den Kondensatwannen transportiert. Dies führt zu einer Steigung der berechneten Heliumkonzentration an beiden Monitorpunkten in den ersten ca. 80 s. Danach sind die Heliumgehaltskurven kontinuierlich unterhalb der experimentellen Messdaten, siehe Abbildung 44 und Abbildung 45.

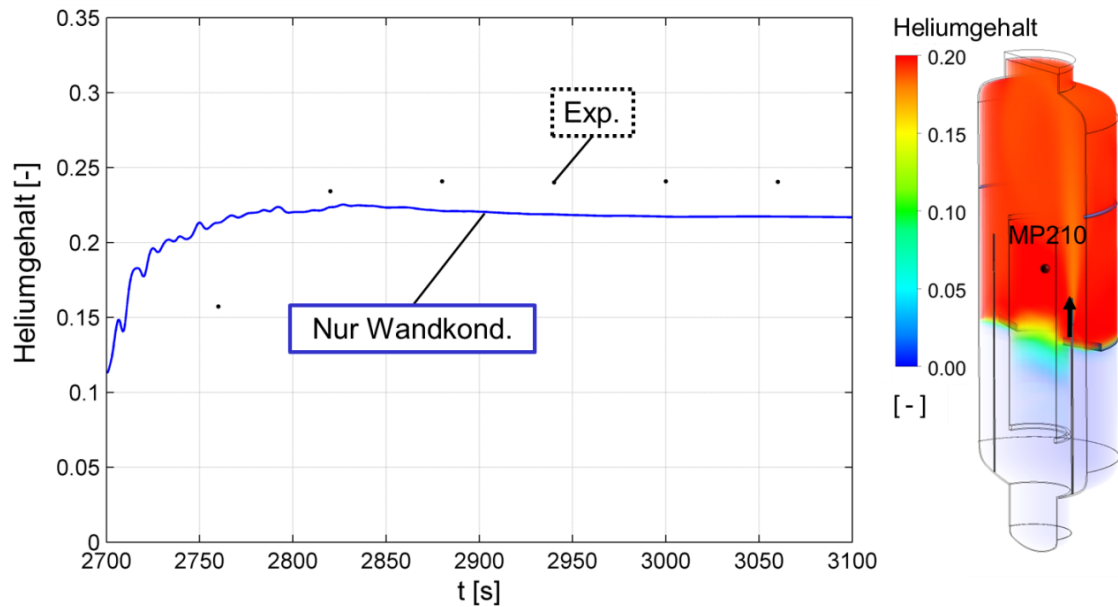


Abbildung 45: links: Vergleich des simulierten Heliumgehaltes mit dem TH13-Experiment am MP210; rechts: Heliumgehaltsverteilung der ersten Simulation mit dem Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP210

Vor dem Beginn der Simulation liegt der MP207 hinter der Einspeisungsstelle im heliumarmen Bereich. Nach der Dampfeinspeisung wird die Vermischung des oben gesammelten Heliums mit darunter liegender schwererer Luft mit dem SST-Turbulenzmodell simuliert. Abbildung 46 zeigt, dass der gerechnete Heliumgehalt viel höher, als der im Experiment am MP207 gemessene Heliumgehalt ist. Aus diesem Ergebnis ist es zu erkennen, dass sich die mit SST-Turbulenzmodell berechnete, stabile Schichtung tiefer als die im Experiment vorhandene Schichtung befindet.

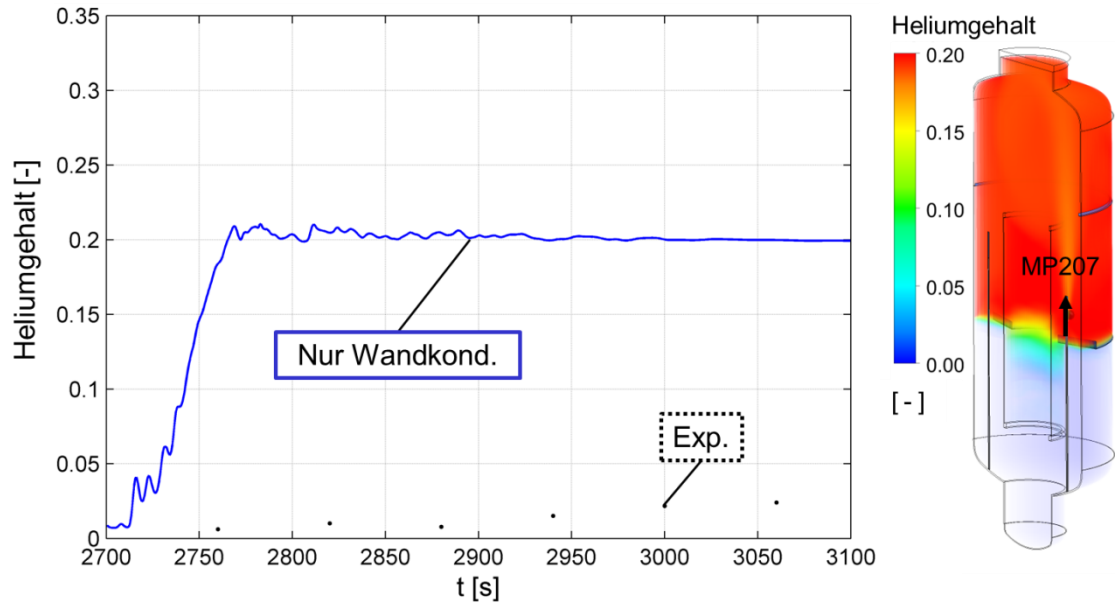


Abbildung 46 links: Vergleich des simulierten Heliumgehaltes mit dem TH13-Experiment am MP207; rechts: Heliumgehaltsverteilung der Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP207

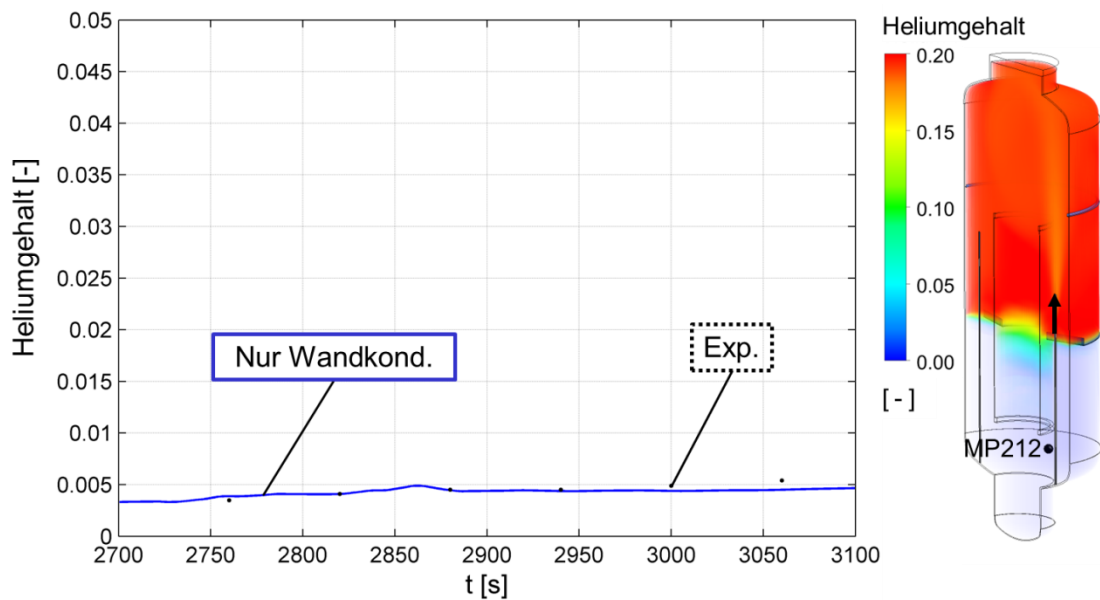


Abbildung 47: links: Vergleich des simulierten Heliumgehaltes mit dem TH13-Experiment am MP212; rechts: Heliumgehaltsverteilung der ersten Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP212

Neben dem im Experiment gemessenen Heliumgehalt, sind in Abbildung 47 die simulierten Werte am MP212 dargestellt. Da sich leichteres Helium meistens im oberen Teil des Versuchsbehälters anreichert, ändert sich der volumetrische Heliumgehalt im unteren Versuchsbehälter nur geringfügig. Die Rechnung zeigt einen nahezu linearen Konzentrationsverlauf. Daraus resultiert am MP212 eine gute Übereinstimmung des volumetrischen Heliumgehalts mit dem Experiment.

In Abbildung 48 sind die räumlichen Temperaturverteilungen in der Halbgeometrie des TH13-Versuchsbehälters von 2700 s bis 3100 s dargestellt. Durch die Aufwärtsströmung wird leichter Wasserdampf, mit hoher Temperatur, in den oberen Bereich des Versuchsbehälters freigesetzt. Dies führt insgesamt zu einer kontinuierlichen, leichten Temperaturerhöhung im oberen Versuchsbehälter.

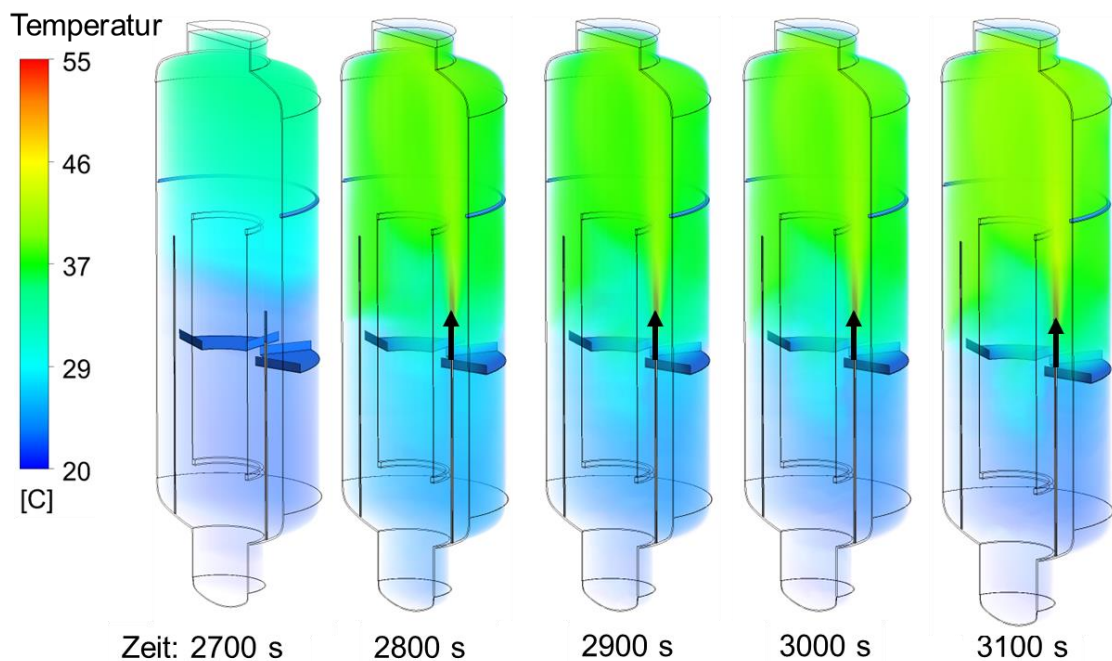


Abbildung 48: Temperaturverteilung in der Halbgeometrie, erste Simulation mit Wandkondensationsmodell zu verschiedenen Simulationszeiten

Zum Vergleich der simulierten Temperatur mit derjenigen des Experiments werden sieben Monitorpunkte verwendet. Die Positionen der Monitorpunkte werden in Tabelle 6 gezeigt. Alle Punkte liegen um 15° versetzt zur Dampfeinspeisungsstelle an der Symmetrieebene.

Tabelle 6: Position der Monitorpunkte zur Messung der Temperatur

Name	Vertikale Position [m]	Radius [m]	Radiale Position [°]
MP2	8,4	0,7	300
MP25	7,7	0,7	300
MP27	7,0	0,7	300
MP4	6,3	0,7	300
MP46	4,9	1,14	300
MP6	4,9	0,35	300
MP11	1,3	0,35	300

In den Diagrammen von der Abbildung 49 bis Abbildung 52 lassen sich die Unterschiede zwischen der simulierten Temperatur und dem Experiment an den Monitorpunkten (MP2, MP25, MP27 und MP4), die im oberen Plenum des Versuchsbehälters liegen, aufzeigen. Mit Beginn der heißen Dampfeinspeisung steigt die Temperatur zunächst in den ersten Simulationssekunden steil an. Wegen der einsetzenden Wandkondensation steigt die Temperatur danach nur noch flach an. Das Ergebnis zeigt, dass die Temperaturverläufe stark vom Experiment im oberen Versuchsbehälter abweichen.

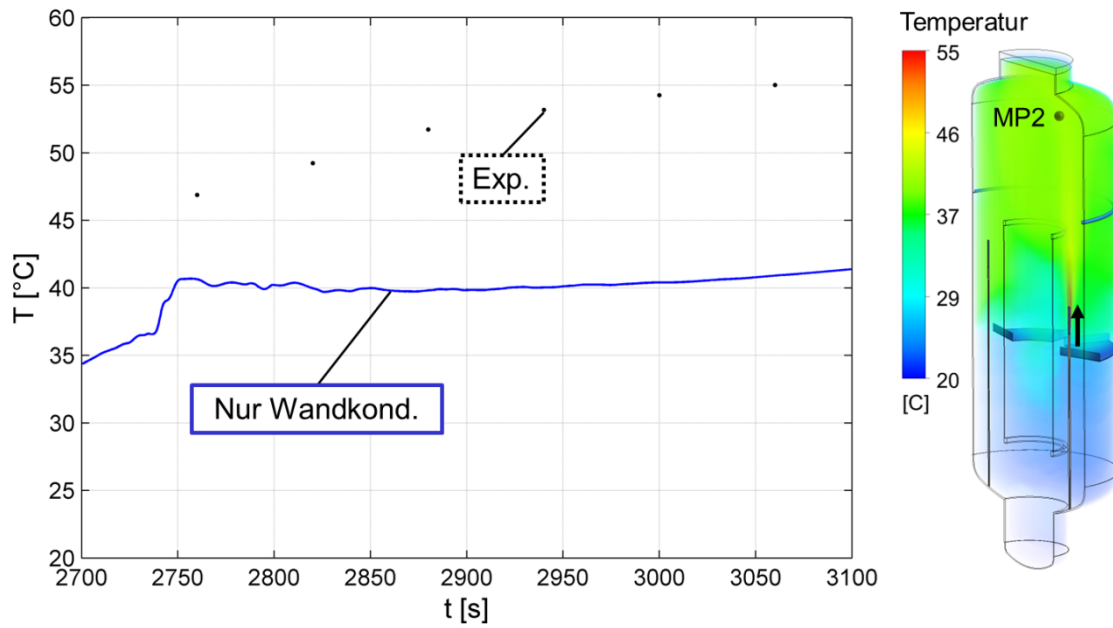


Abbildung 49: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH13-Experiment am MP2; rechts: Temperaturverteilung der ersten Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP2

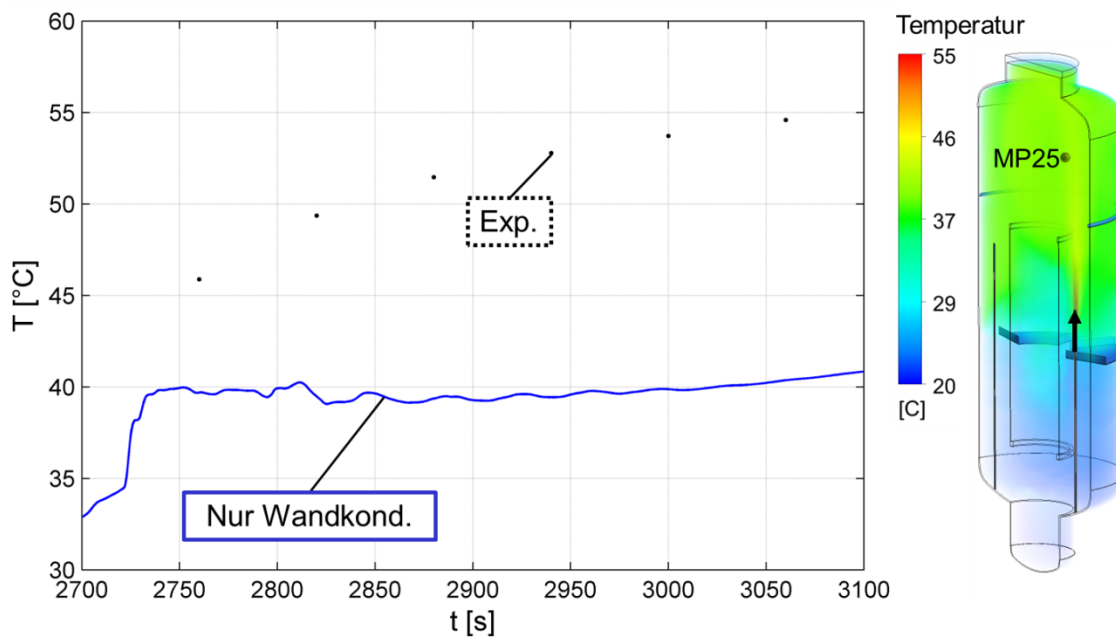


Abbildung 50: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH13-Experiment am MP25; rechts: Temperaturverteilung der ersten Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP25

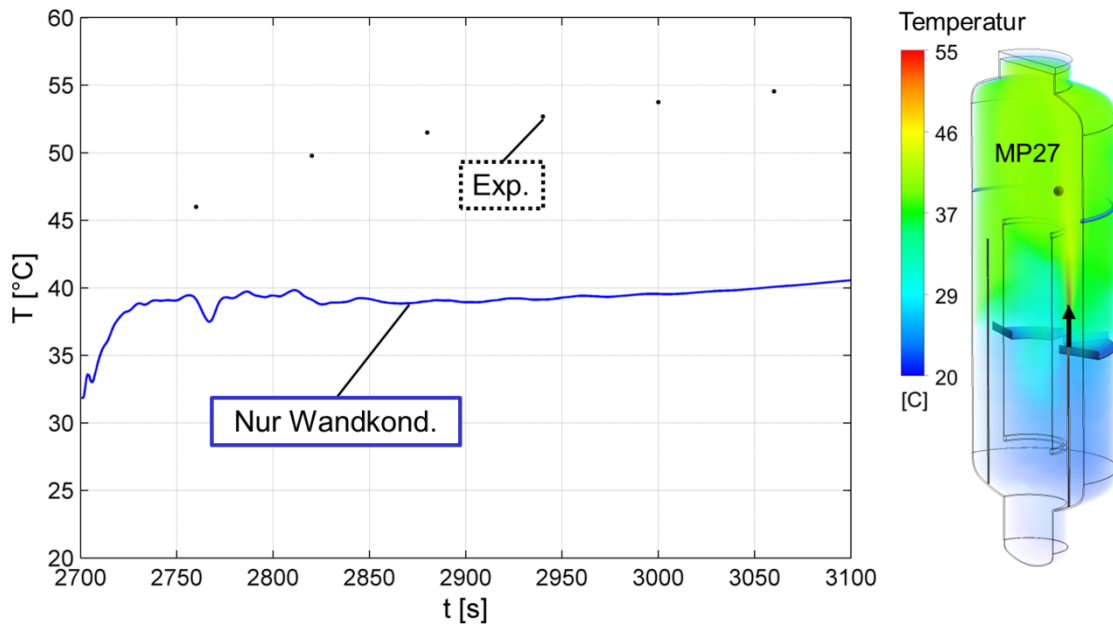


Abbildung 51: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH13-Experiment am MP27; rechts: Temperaturverteilung der ersten Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP27

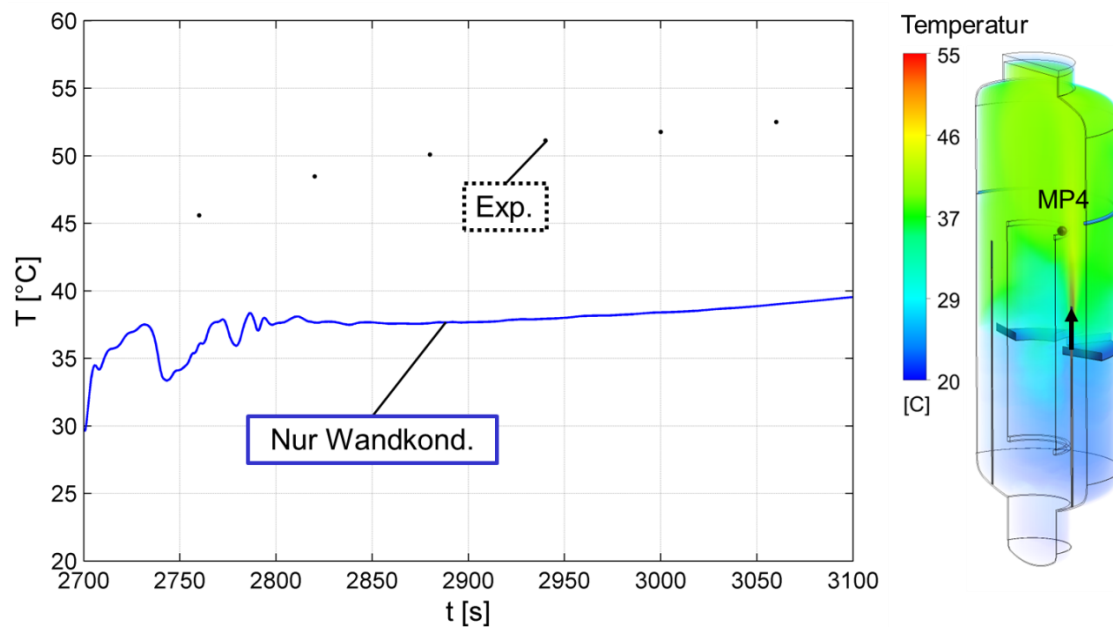


Abbildung 52: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH13-Experiment am MP4; rechts: Temperaturverteilung der ersten Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP4

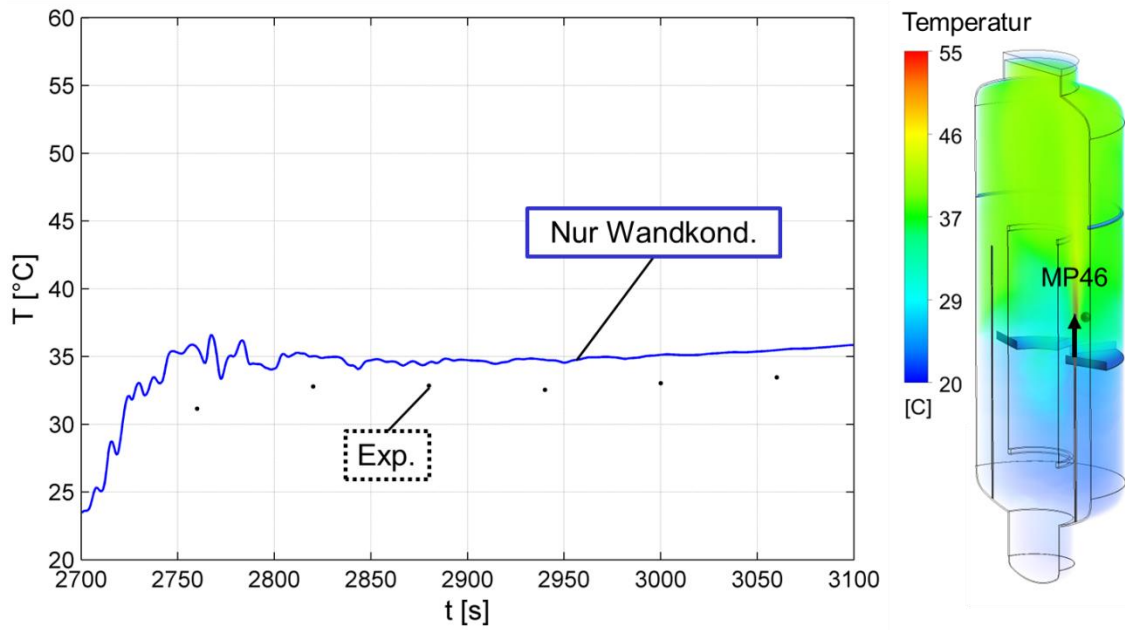


Abbildung 53: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH13-Experiment am MP46; rechts: Temperaturverteilung der ersten Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP46

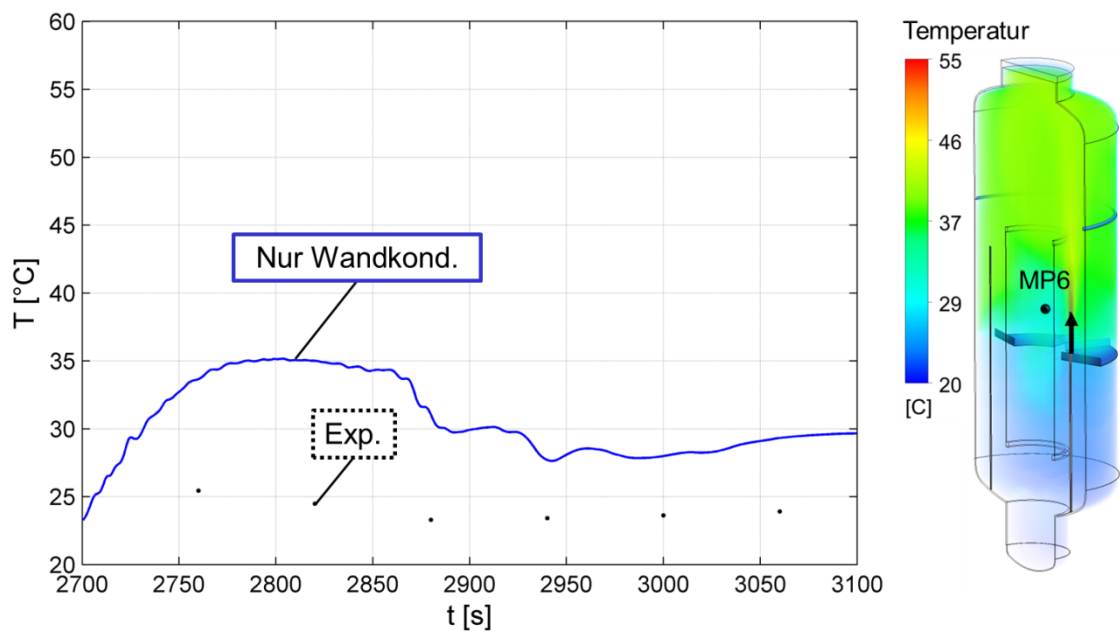


Abbildung 54: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH13-Experiment am MP6; rechts: Temperaturverteilung der ersten Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP6

In Abbildung 53 und Abbildung 54 zeigen die berechneten Temperaturverläufe an den beiden Monitorpunkten MP46 und MP6, die im Ringbereich und Innenzylinder des mittleren Versuchsbehälters liegen, eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Die Unterschiede zwischen dem berechneten Ergebnis und dem Experiment liegen innerhalb von einigen Kelvin.

In Abbildung 55 wird die simulierte Temperatur mit derjenigen des Experiments am Monitorpunkt 11 (MP11) verglichen, der im unteren Bereich des Versuchsbehälters liegt. Da sich das leichte Gasmisch aus Dampf, Helium und Luft vorwiegend aufgrund der Auftriebskraft oben im Versuchsbehälter sammelt, verändert sich die Temperatur im unteren Bereich des Versuchsbehälters nur wenig. Darüber hinaus zeigt die berechnete Temperatur bezüglich ihrer Tendenz eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment.

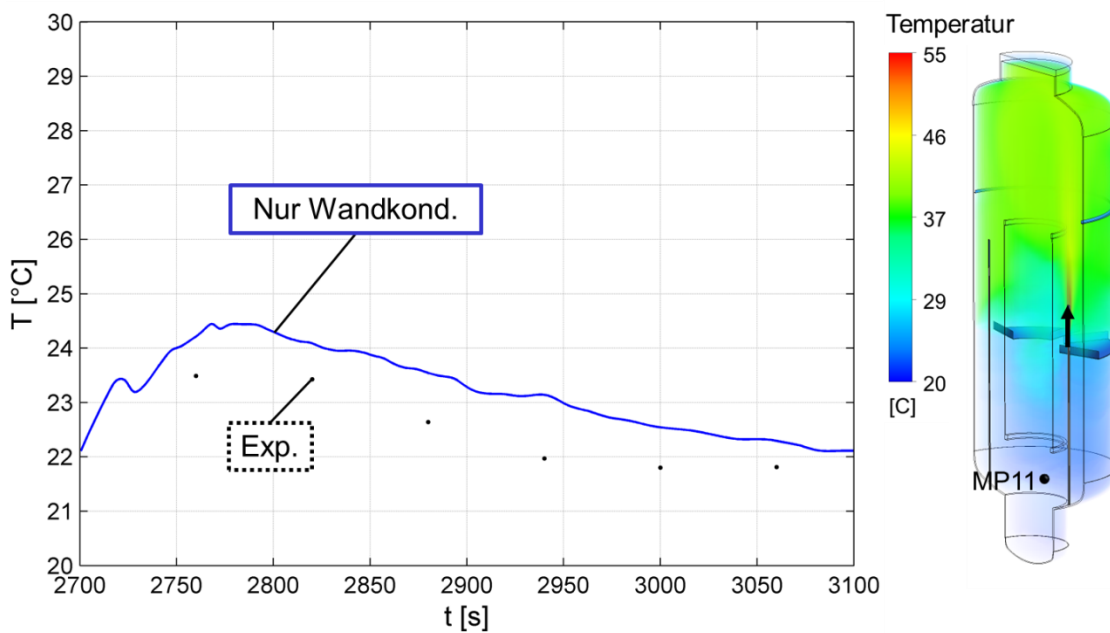


Abbildung 55: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH13-Experiment am MP11; rechts: Temperaturverteilung der ersten Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP11

In Abbildung 56 wird der simulierte Behälterdruck mit demjenigen des Experiments verglichen. Aufgrund der Dampfeinspeisung kommt es anfänglich zu einer stärkeren Drucksteigerung. Danach verlangsamt die Wandkondensation den Anstieg des Druckes. Der simulierte Druck, unter Verwendung des Wandkondensationsmodells, stimmt gut mit dem im Experiment gemessenen Druck überein.

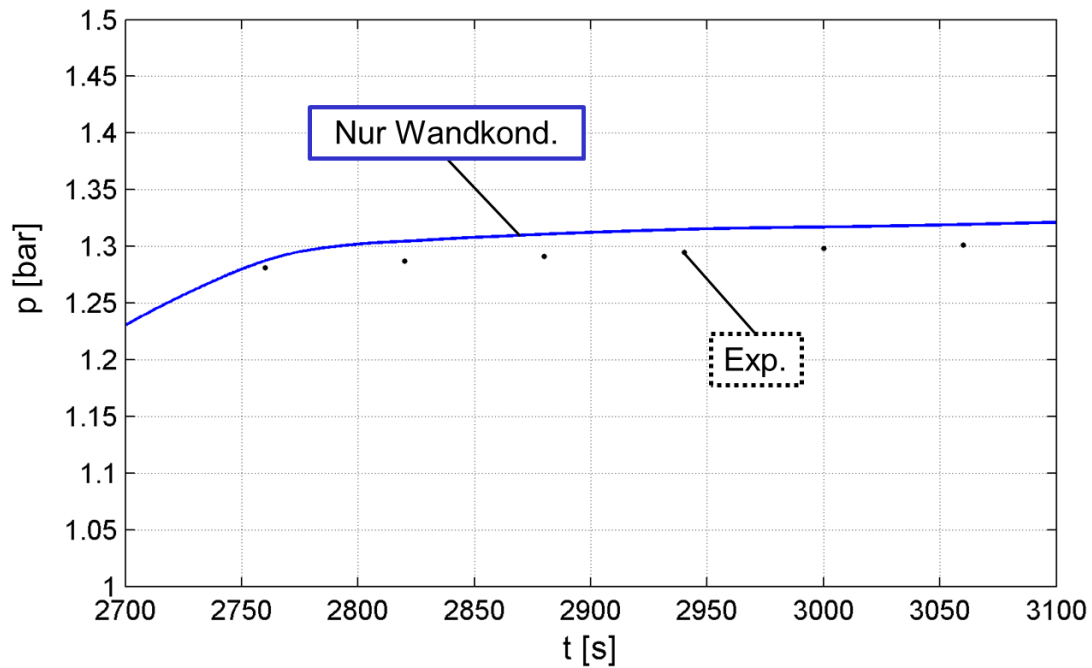


Abbildung 56: Vergleich des berechneten Drucks im Versuchsbehälter der ersten Simulation mit dem TH13-Experiment

4.2.2 Ergebnisse mit dem Zwei-Fluid-Modell

Für die zweite, zweiphasige Simulation wurde zusätzlich das neu entwickelte Volumen-kondensationsmodell mit einem konstanten Tropfendurchmesser von $100\ \mu\text{m}$ und einem initialen, volumetrischen Tropfengehalt von 10^{-5} zu Beginn der oberen Dampfeinspeisung, bis 3100 s eingesetzt. Abbildung 57 zeigt die aus der zweiten Simulation ermittelten Heliumgehaltsverteilungen in der Halbgeometrie des Versuchsbehälters zu verschiedenen Zeitpunkten. Diese sind ähnlich wie die in Abbildung 41 dargestellten Heliumgehaltsverteilungen aus der ersten Simulation ohne Volumen-kondensationsmodell.

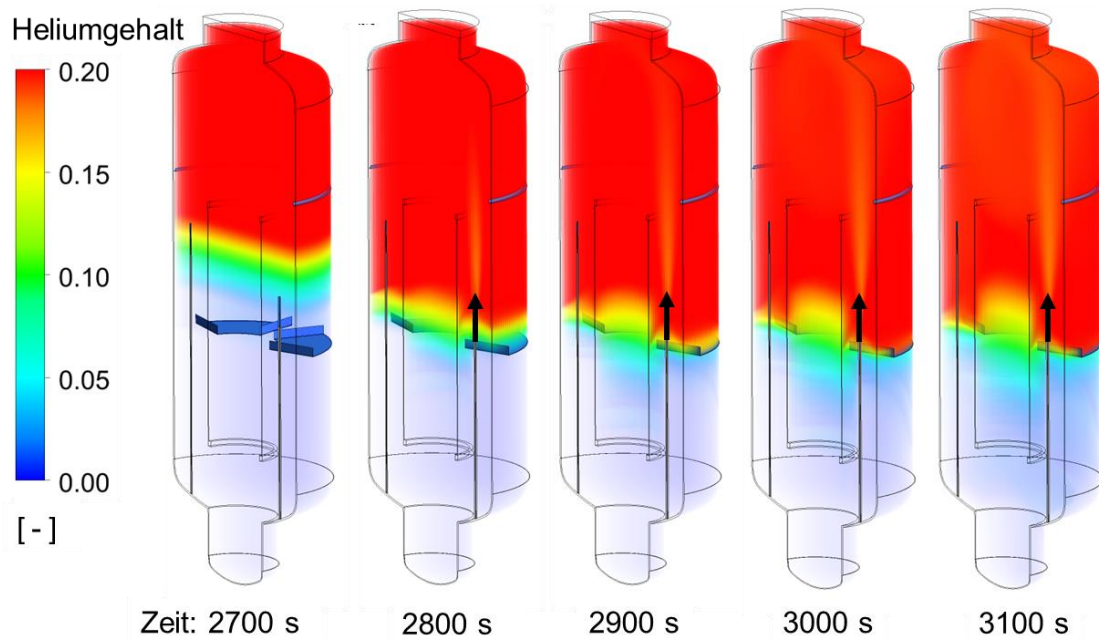


Abbildung 57: Heliumgehaltsverteilung in der Halbgeometrie, zweite Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell

In den Abbildung 58 bis Abbildung 63 werden die berechneten Heliumgehaltverläufe der zweiten Simulation, unter Verwendung des Wand- und Volumenkondensationsmodells, mit den Ergebnissen der ersten Simulation, unter Verwendung des Wandkondensationsmodells, sowie mit dem Experiment an allen sechs Monitorpunkten (MP201, MP205, MP209, MP210, MP207 und MP212) verglichen. Die Unterschiede zwischen den beiden Simulationsergebnissen sind an allen Monitorpunkten sehr gering. Deshalb werden die Diagramme nicht einzeln erklärt. Die Ergebnisse zeigen, dass der Heliumgehalt im oberen Teil des Versuchsbehälters in den Simulationen unterschätzt wird und der Vermischungsvorgang in Anwesenheit von einem Leichtgas beim Einsatz des SST-Turbulenzmodells nicht perfekt simuliert werden kann.

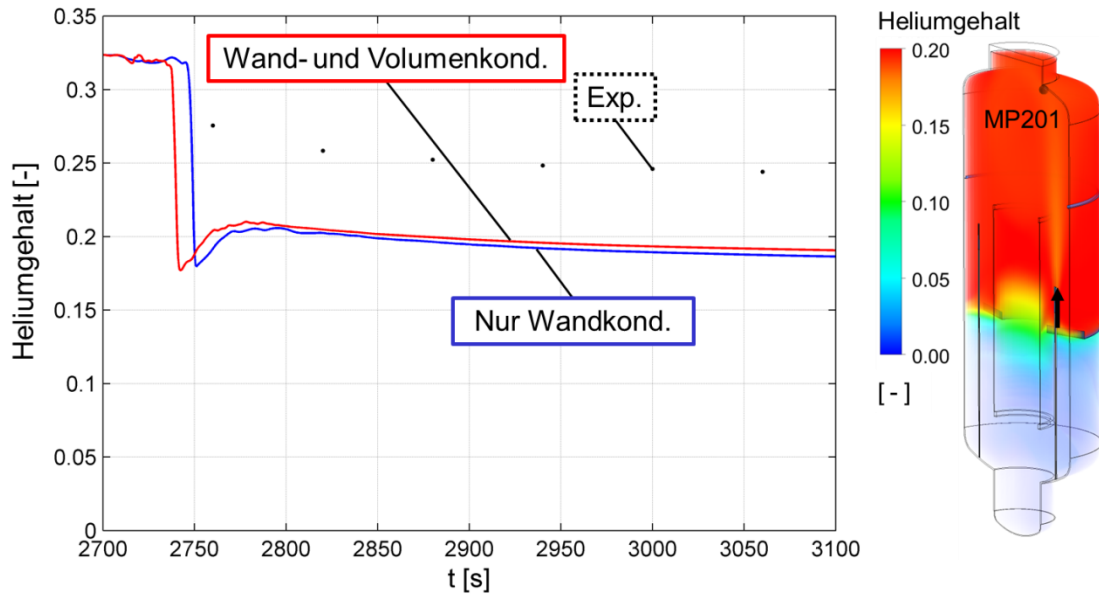


Abbildung 58: links: Vergleich der simulierten Heliumgehalte mit dem TH13-Experiment am MP201; rechts: Heliumgehaltsverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP201

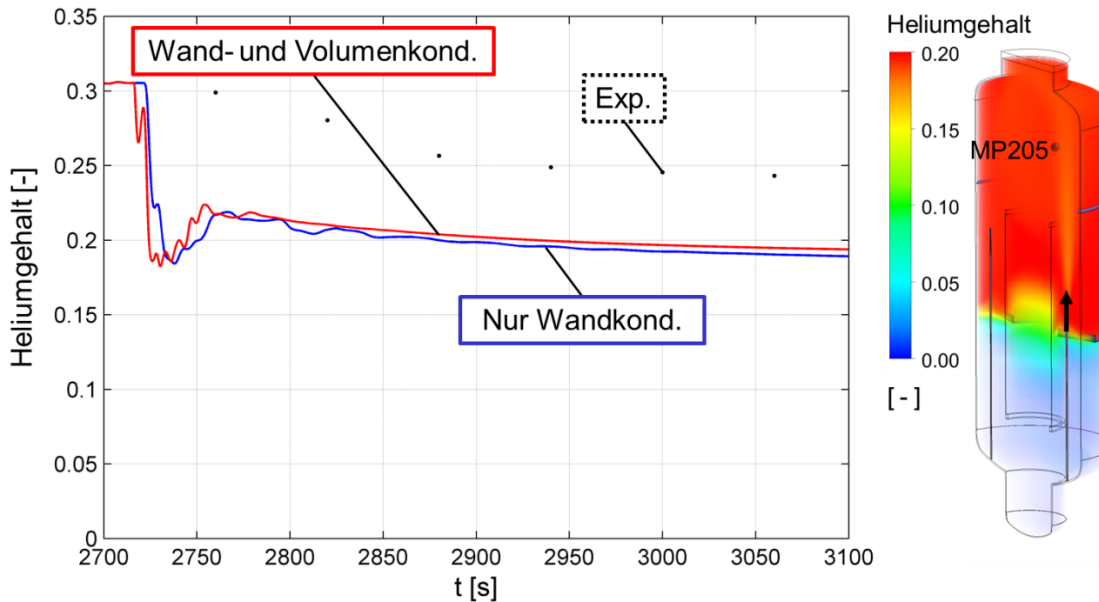


Abbildung 59: links: Vergleich der simulierten Heliumgehalte mit dem TH13-Experiment am MP205; rechts: Heliumgehaltsverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP205

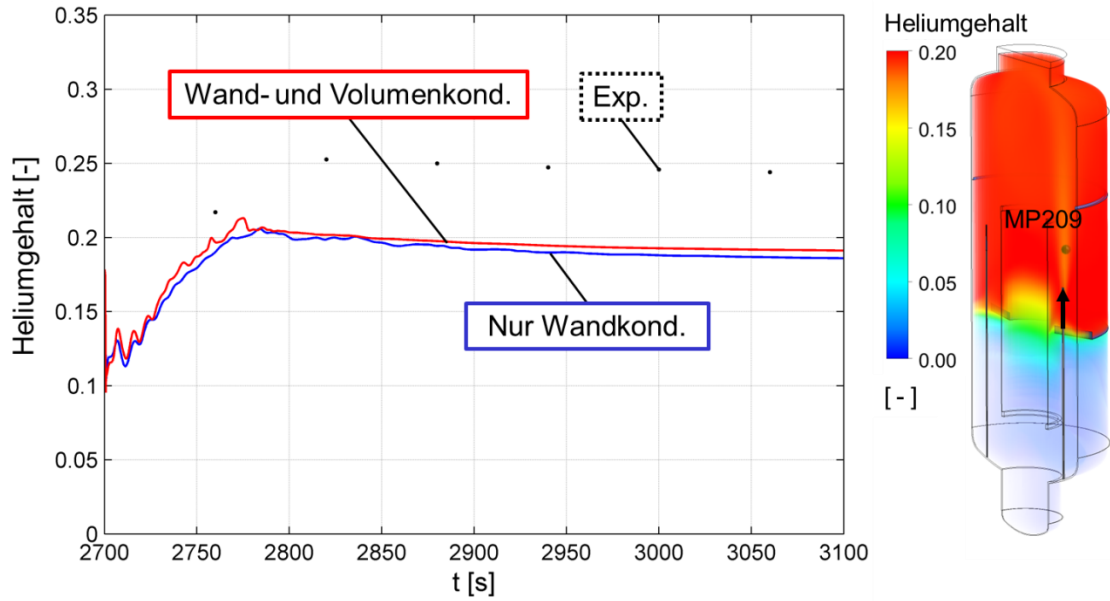


Abbildung 60: links: Vergleich der simulierten Heliumgehalte mit dem TH13-Experiment am MP209; rechts: Heliumgehaltsverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP209

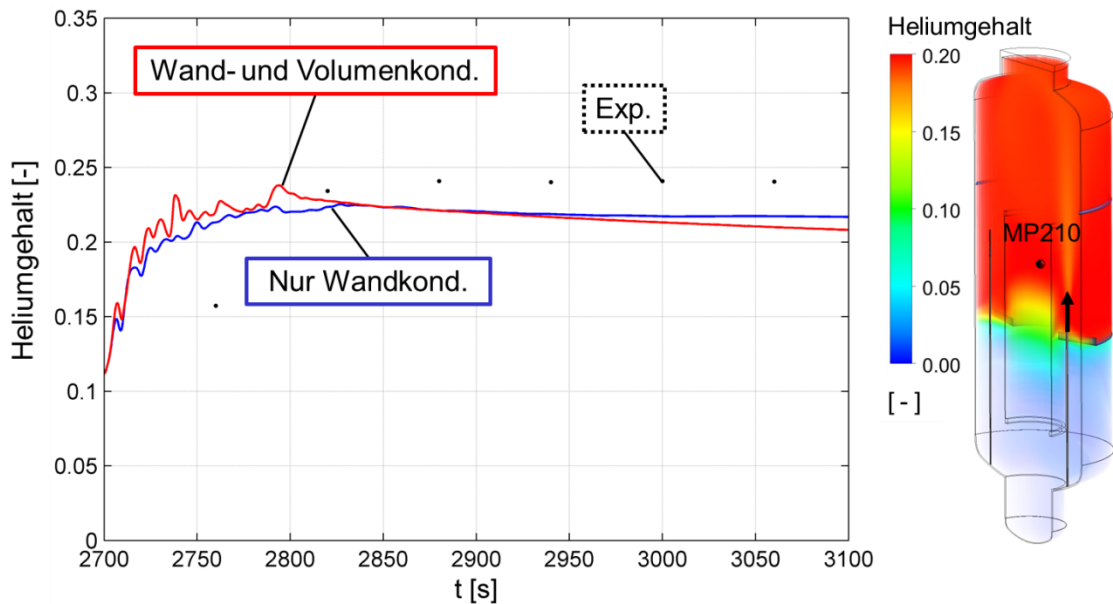


Abbildung 61: links: Vergleich der simulierten Heliumgehalte mit dem TH13-Experiment am MP210; rechts: Heliumgehaltsverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP210

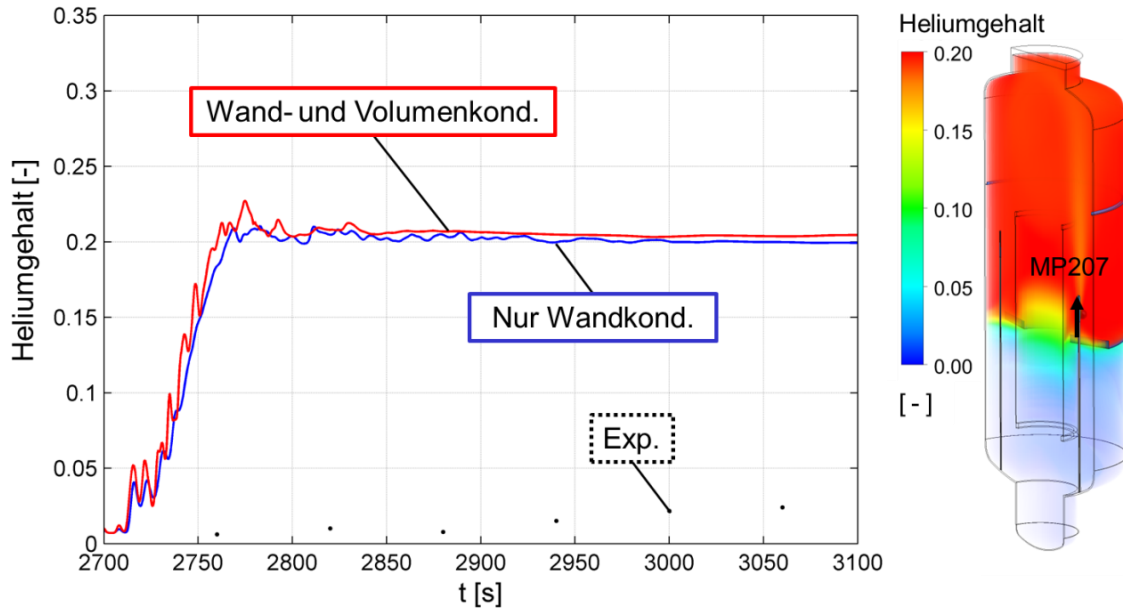


Abbildung 62: links: Vergleich der simulierten Heliumgehalte mit dem TH13-Experiment am MP207; rechts: Heliumgehaltsverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP207

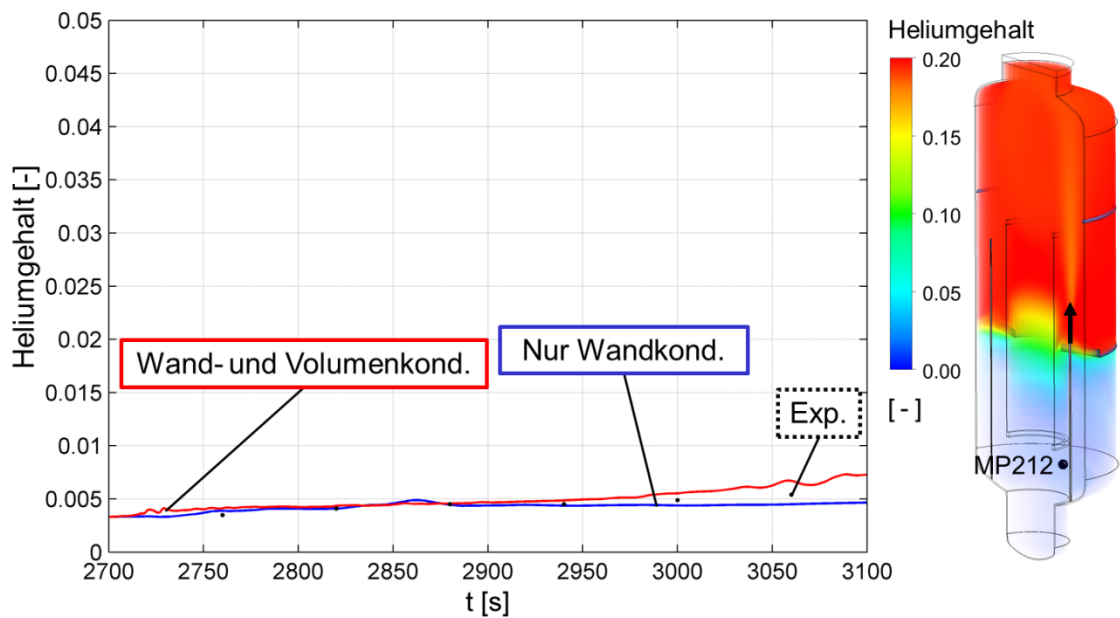


Abbildung 63: links: Vergleich der simulierten Heliumgehalte mit dem TH13-Experiment am MP212; rechts: Heliumgehaltsverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP212

Abbildung 64 zeigt räumliche Temperaturverteilungen der zweiten Simulation mit dem Wand und Volumenkondensationsmodell über der Simulationszeit bis 3100 s. Die berechnete Temperatur im oberen Versuchsbehälter ist höher als die Temperatur aus der ersten Simulation (in Abbildung 48), weil die Wärme des im oberen Volumenbereich direkt kondensierten Dampfes in die Atmosphäre abgeführt wird, so dass dies zu einer Temperaturerhöhung im oberen Bereich des Versuchsbehälters führt.

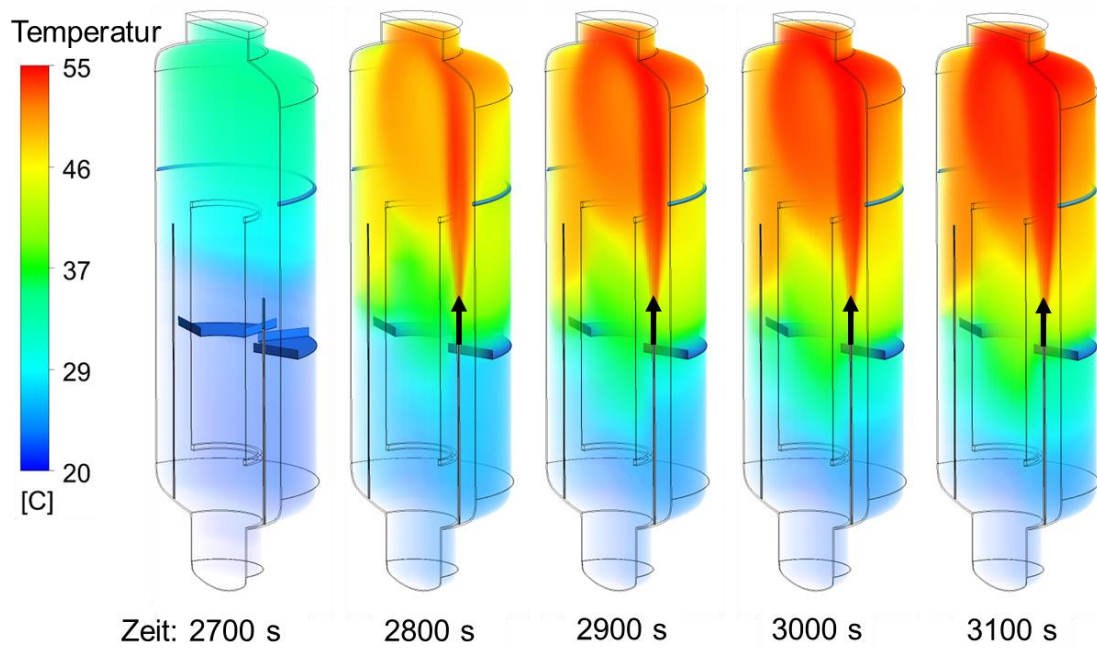


Abbildung 64: Temperaturverteilung in der Halbgeometrie, zweite Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell

Von Abbildung 65 bis Abbildung 68 werden die transienten Temperaturen aus zwei Simulationen mit dem Experiment an vier Monitorpunkten (MP2, MP25, MP27 und MP4) verglichen. Mit der zusätzlichen Verwendung des Volumenkondensationsmodells steigt die berechnete Temperatur in den ersten Sekunden der simulierten Zeit stark an. Dies lässt sich dadurch begründen, dass während der Volumenkondensation der eingespeiste, heiße Dampf direkt im oberen Volumen des Versuchsbehälters kondensiert und die Wärme an die Umgebung transportiert wird. Danach flacht die Steigung der berechneten Temperatur mit der Wirkung der Wandkondensation wieder ab. Der berechnete Temperaturverlauf der zweiten Simulation, mit Wand- und Volumenkondensationsmodell, liegt nahe an den experimentellen Messwerten.

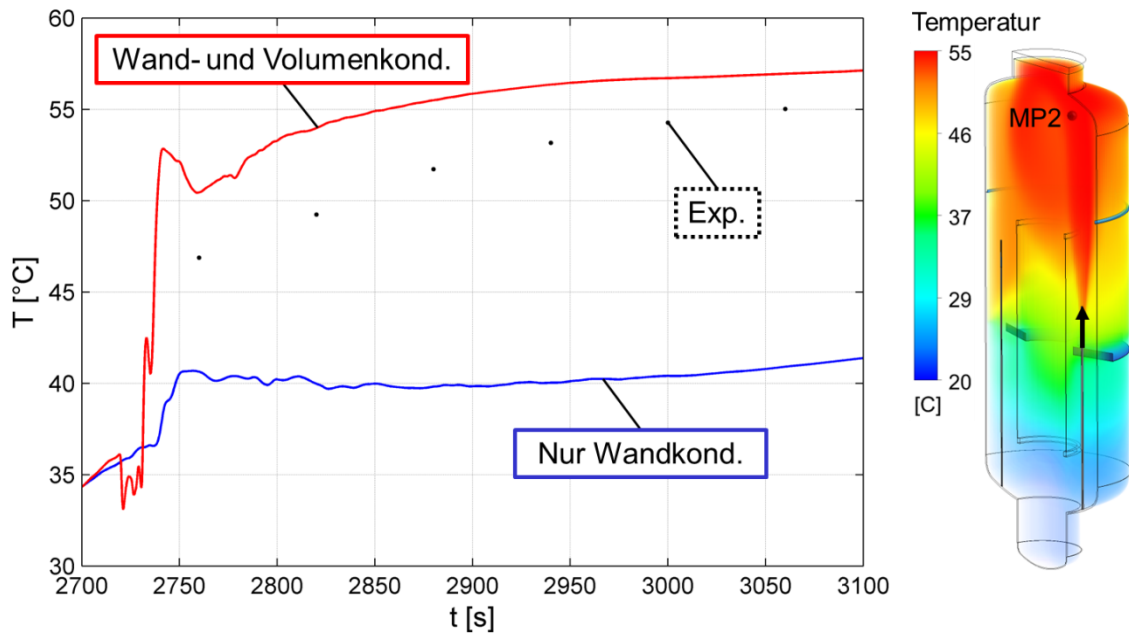


Abbildung 65: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH13-Experiment am MP2; rechts: Temperaturverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP2

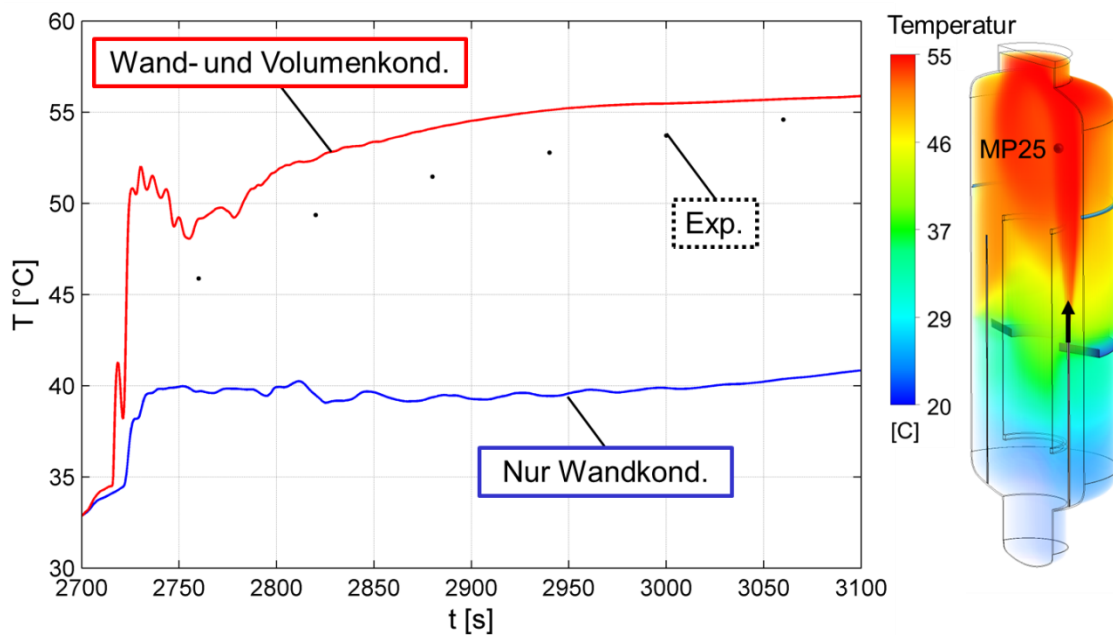


Abbildung 66: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH13-Experiment am MP25; rechts: Temperaturverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP25

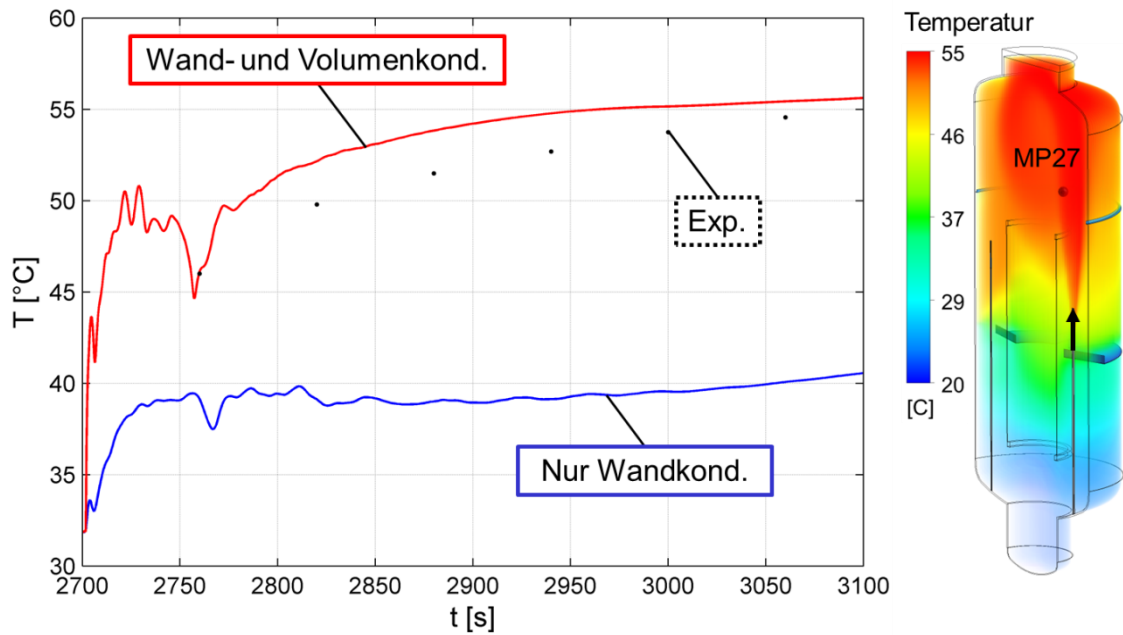


Abbildung 67: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH13-Experiment am MP27; rechts: Temperaturverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP27

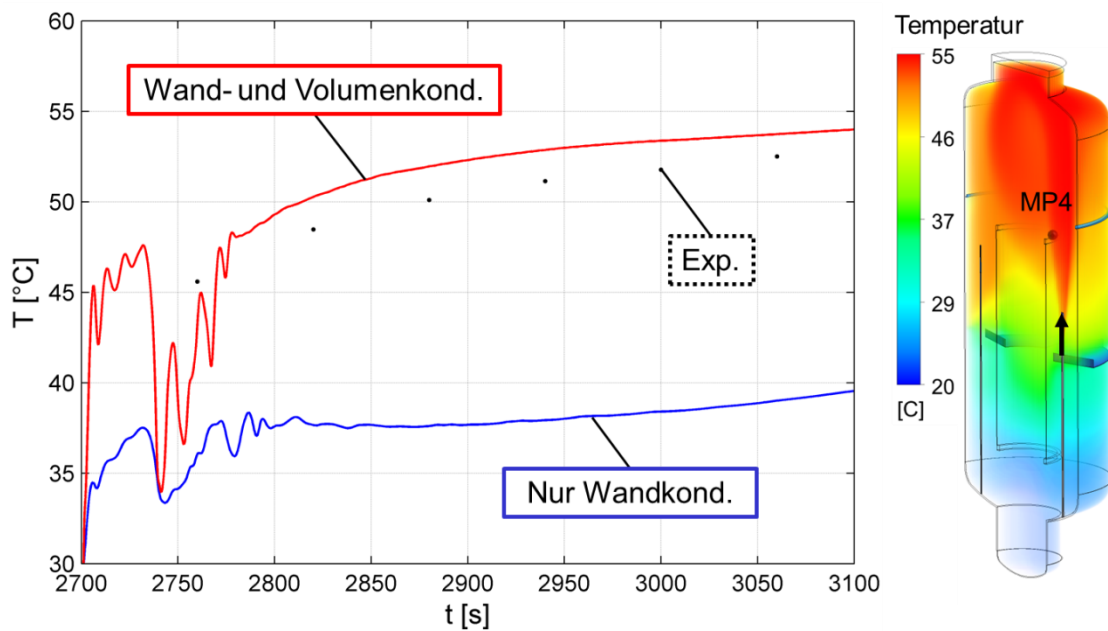


Abbildung 68: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH13-Experiment am MP4; rechts: Temperaturverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP4

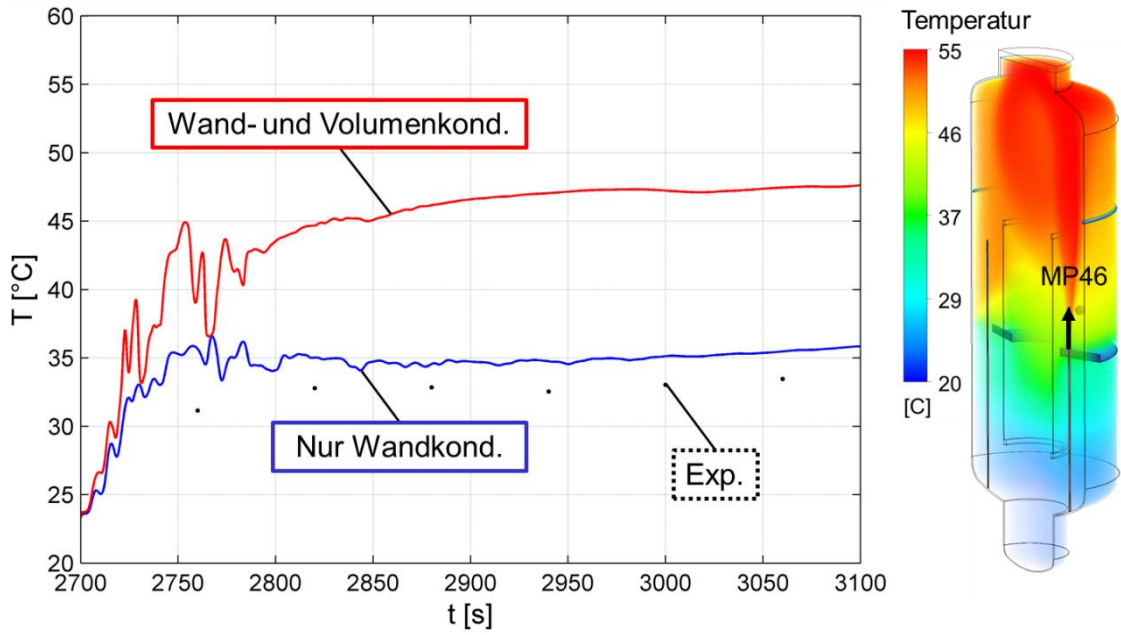


Abbildung 69: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH13-Experiment am MP46; rechts: Temperaturverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP46

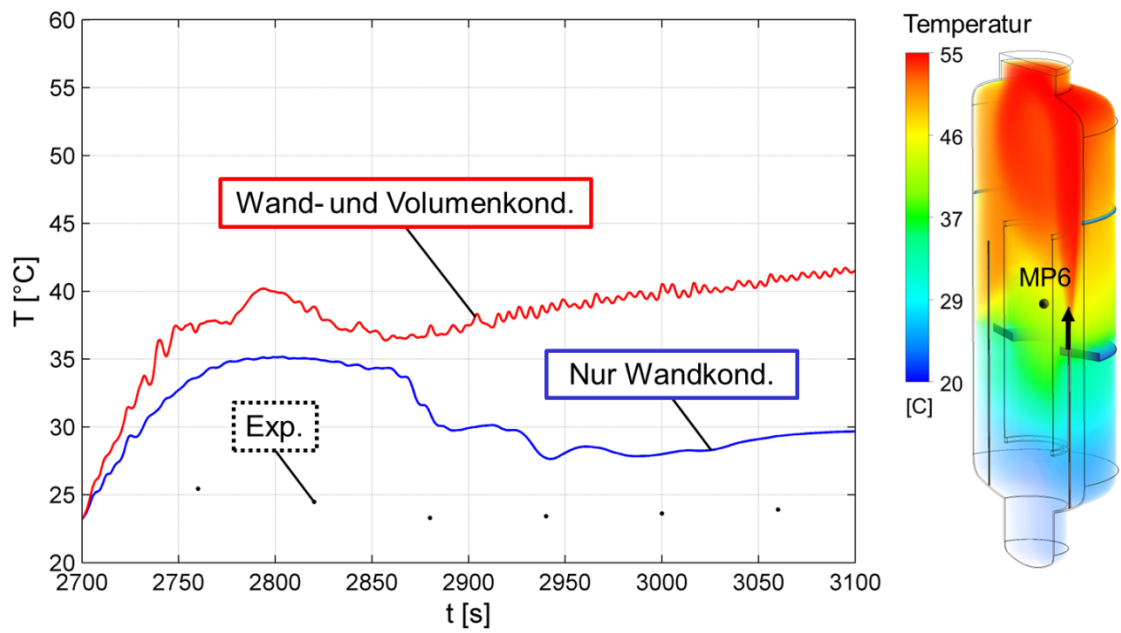


Abbildung 70: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH13-Experiment am MP6; rechts: Temperaturverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP6

Abbildung 69 und Abbildung 70 zeigen Vergleiche der Temperatur mit dem Experiment an den zwei Monitorpunkten MP46 und MP6, die in der Mitte des Versuchsbehälters liegen. Beide berechneten Temperaturkurven aus der Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell sind höher als die nur mit dem Wandkondensationsmodell und stimmen mit dem Experiment nicht genau überein.

In Abbildung 71 werden zwei simulierte Temperaturprofile mit dem Experiment am MP11 verglichen. Da sich der kondensierbare Dampf vorwiegend oben im Versuchsbehälter sammelt, ändert sich die Temperatur im unteren Bereich sehr wenig. Die Temperaturabweichung zwischen den Simulationen und dem Experiment beträgt nur bis zu 2 K. Beide Rechnungen stimmen gut mit dem Experiment überein. Mit dem Wand- und Volumenkondensationsmodell schwankt die berechnete Temperatur, weil fallende Tropfen einerseits die Temperaturschicht im Versuchsbehälter stören, und sich andererseits im unteren Versuchsbehälter, wo die Volumenkondensation immer noch stattfindet, auf die Umgebung abgeführte Wärme auswirken.

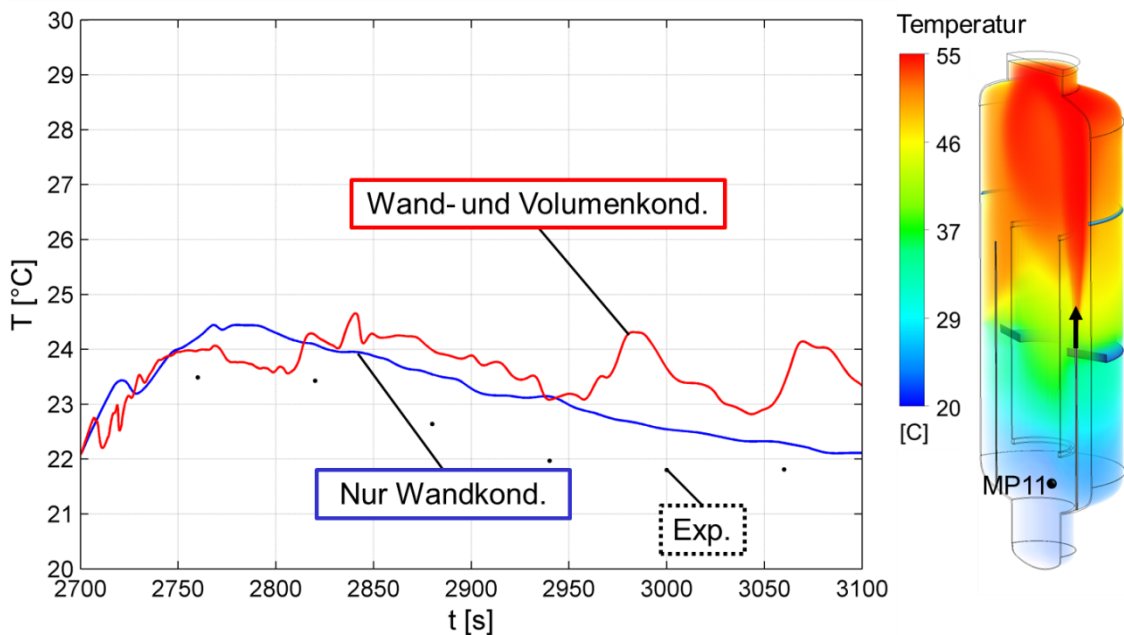


Abbildung 71: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH13-Experiment am MP11; rechts: Temperaturverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP11

Abbildung 72 zeigt den Vergleich der Drücke im Versuchsbehälter zwischen den Simulationen und dem Experiment. Der Druck aus der zweiten Simulation, mit Wand- und

Volumenkondensationsmodell, hat eine ähnliche Tendenz wie der aus der ersten Simulation berechnete Druck, liegt aber höher. Da der Druck nach der thermischen Zustandsgleichung für ideale Gase proportional zur Temperatur ist, ist der berechnete Druck von der zweiten Simulation höher als der von der ersten Simulation, denn die Temperatur aus zweiter Rechnung ist höher als die aus der ersten Rechnung. Der simulierte Druck unter Verwendung des Wand- und Volumenkondensationsmodells stimmt auch sehr gut mit dem im Experiment gemessenen Druck überein. Die Abweichung zwischen dem berechneten Druck aus der zweiten Rechnung und dem Experiment beträgt bis zu 0,05 bar.

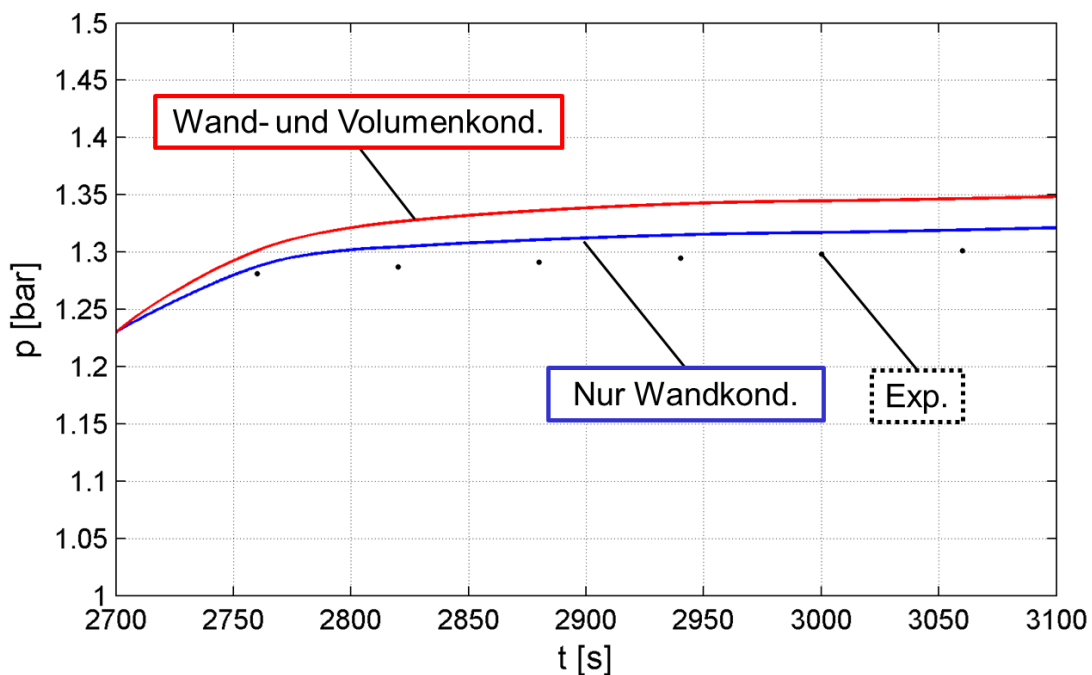


Abbildung 72: Vergleich der beiden simulierten Drücke im Versuchsbehälter beim TH13-Experiment

Um den Effekt der Volumenkondensation aufzuzeigen, wurden die gesamten Kondensationsraten an den Wänden und im Volumen in Abbildung 73 miteinander verglichen. Am Anfang der Simulation findet die Kondensation des Wasserdampfes, nach der Einspeisung, vorwiegend im Volumen statt. Nach ca. 2708 s strömt immer mehr Wasserdampf in die Nähe der kalten Wände, weshalb die Kondensation zunehmend an den Wänden stattfindet. Zum Zeitpunkt 3100 s kondensiert der Wasserdampf zu ca. 92 % an den Wänden und zu 8 % im Volumen des Versuchsbehälters. Dieses Ergebnis zeigt, dass die Volumenkondensation einen bedeutenden Anteil an der kompletten Kondensationsrate der Simulation einnimmt.

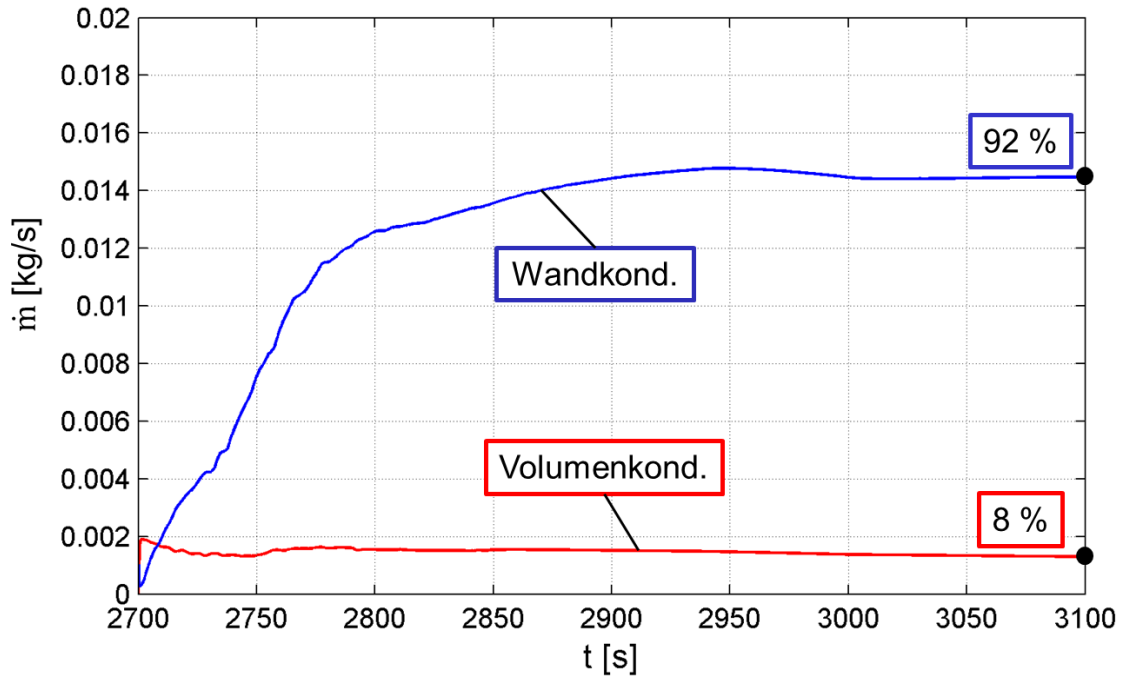


Abbildung 73: Vergleich der Kondensationsrate an den Wänden und im Volumen bei der zweiten Simulation beim TH13-Experiment

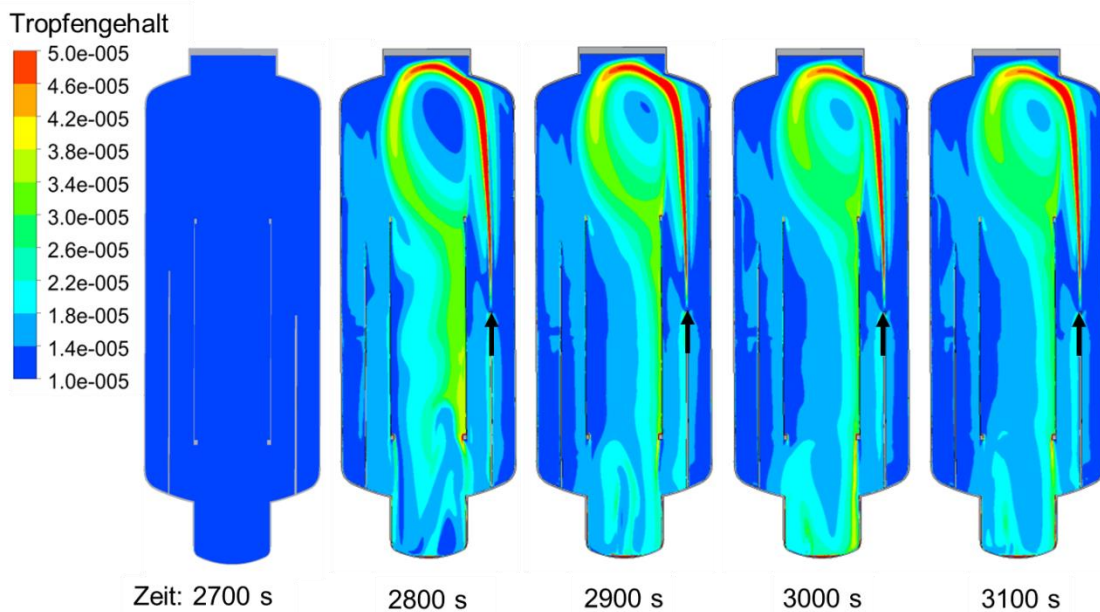


Abbildung 74: Tropfenverteilungen auf der Symmetrieebene bei der zweiten Simulation zu unterschiedlichen Zeitpunkten

Abbildung 74 zeigt die räumliche Verteilung des Tropfengehalts auf der Symmetrieebene des Versuchsbehälters, aus der zweiten Simulation, zu verschiedenen Zeitpunkten. Die

Volumenkondensation findet vorwiegend in der Nähe der exzentrischen Dampfeinspeisung statt. Während der Volumenkondensation erhöht sich der volumetrische Flüssigkeitsgehalt im Versuchsbehälter. Die Tropfen strömen zuerst mit der starken Aufwärtsströmung zum Dom und fallen dann, aufgrund der Schwerkraft, durch den Innenzylinder und den Ringbereich in den Sumpf.

5 Demonstration anhand eines 3D Modell-Containments

In der vorliegenden Arbeit wurden Untersuchungen am Beispiel eines generischen DWR durchgeführt, der an den Konvoi-Typ mit einer elektrischen Leistung von ca. 1300 MW angelehnt ist. Die Konvoi-Anlage hat einen kugelförmigen Sicherheitsbehälter aus Stahl, der von einem äußeren Luftspalt umgeben wird und eine umschließende Betonhülle, siehe Abbildung 75 [83]. Das Containment hat einen Durchmesser von ca. 56 m und ein Volumen von ca. 70000 m³. Es ist auf einen Innendruck von 0,6 MPa ausgelegt. Innerhalb des Sicherheitsbehälters befinden sich zwei Funktionsbereiche: Der Erste ist der im Betrieb wegen der Strahlung und begrenzter Lüftungsführung nicht betretbare Anlagenraumbereich, in dem sich im Wesentlichen die Komponenten des nuklearen Dampferzeugungssystems sowie der Reaktordruckbehälter befinden. Der Zweite ist der Betriebsraumbereich, der während des Betriebs aufgrund vorhandener Abschirmung und Lüftungsführung uneingeschränkt betretbar ist. Beide Raumbereiche sind durch den Trümmerschutzzylinder, die Dampferzeugertürme und das obere Deckenniveau voneinander getrennt.

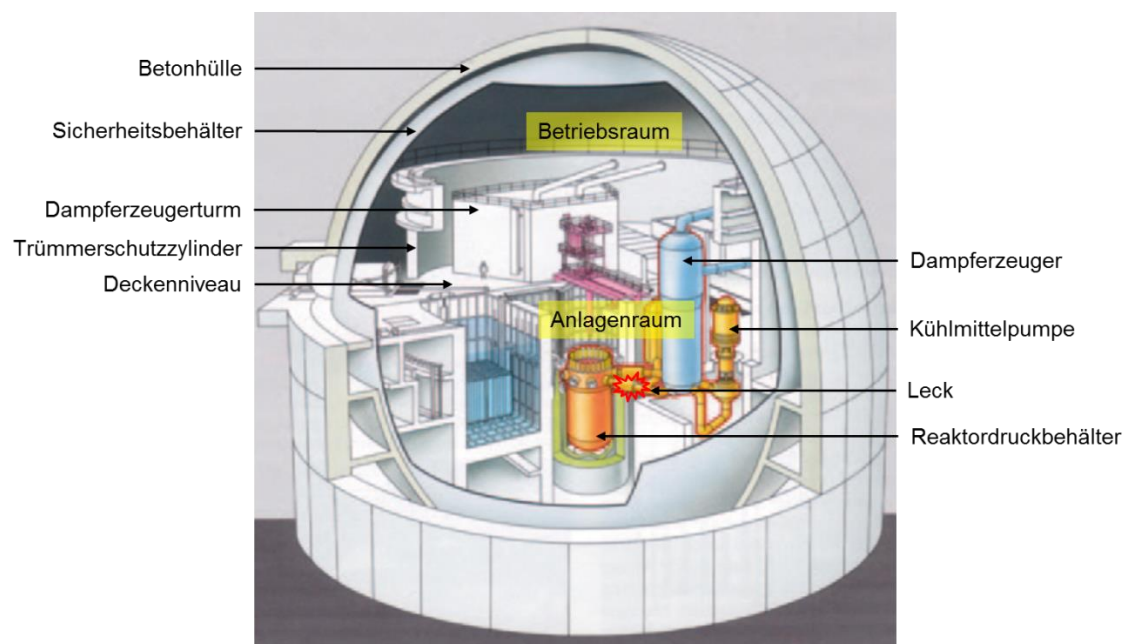


Abbildung 75: Schnittzeichnung einer generischen Konvoi-Anlage

Der Anlagenraum beinhaltet den primären Kühlkreislauf mit vier Dampferzeugern und je einer Kühlmittelpumpe. Die im Reaktordruckbehälter von den Brennelementen durch Kernspaltung erzeugte Wärmeleistung, wird durch das Kühlmittel zu den Dampferzeugern transportiert. Die Wärme wird an den Sekundärkreislauf überföhrt und das Wasser fließt danach über die Kühlmittelpumpen wieder in den Reaktordruckbehälter zurück.

Ein hypothetischer Störfall in einem generischen Konvoi-Containment wird durch Annahme eines Kühlmittelverlustes vorausgesetzt. Das Störfallszenario wird in Kapitel 5.1 vorgestellt. Zur Vorhersage der Wasserstoffverteilung während des schweren Reaktorstörfalls werden die Strömungs- und Kondensationsvorgänge in dem generischen Konvoi-Containment des Druckwasserreaktors simuliert.

5.1 Geometrie, Rand- und Anfangsbedingungen

In der vorliegenden Arbeit werden die Strömungsvorgänge bei einem schweren LOCA-Störfall innerhalb des Stahl-Sicherheitsbehälters mit einem Volumen von ca. 70000 m³ im Reaktorgebäude simuliert. Der Sicherheitsbehälter soll die aus dem Primärkreis freigesetzten Gase und deren gespeicherte Wärme aufnehmen.

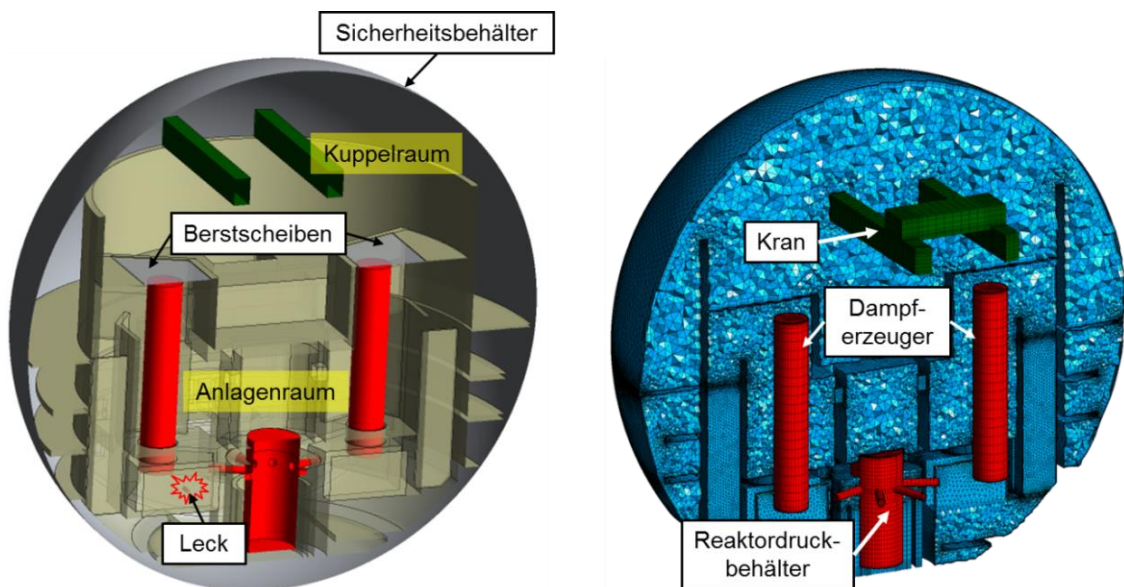


Abbildung 76: Dreidimensionale Geometrie eines generischen Containments (links) und ein numerisches Gitter (rechts)

Die dreidimensionale Geometrie und ein numerisches Netz (Gitter) des Containments wurden von ANSYS [79] und GRS (Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit mbH) [84] erstellt, siehe Abbildung 76. Die Rohrleitungen zwischen dem Reaktordruckbehälter und den Dampferzeugern wurden vernachlässigt. Ein kleines Leck (ca. 60 cm²), mit einer horizontal ausgerichteten Querschnittsfläche, wurde in die Geometrie implementiert. Der Kuppelraum und Anlagenbereich sind durch zwei Berstscheiben voneinander getrennt. Für die Studien sind keine autokatalytischen Rekombinatoren oder sonstigen Maßnahmen zur Wasserstoffreduktion vorgesehen. Festkörper wurden mit strukturierten Gittern generiert (z.B. Reaktordruckbehälter, Dampferzeuger, Kran, Betonstrukturen usw.). Freiräume wurden mit unstrukturierten Gittern generiert. Das gesamte Gitter besteht aus ca. 10,2 Millionen Knoten.

Die Angangs- und Randbedingungen, sowie die Freisetzungen aus dem Leck sind aus [85] übernommen. Anfänglich wird eine Luft-Atmosphäre mit 1 atm im Sicherheitsbehälter angenommen. Die Anfangstemperaturen sind in den inneren Räumen 30 °C und an der Wand des Sicherheitsbehälters 25 °C. Während des Störfalls wird die Wandtemperatur des Stahl-Containments konstant als 25 °C angenommen. Bei dem Kühlmittelverlust-Unfall reicht die Wassereinspeisung nicht zur Kernkühlung aus, so dass Wasserdampf und Wasserstoff entstehen.

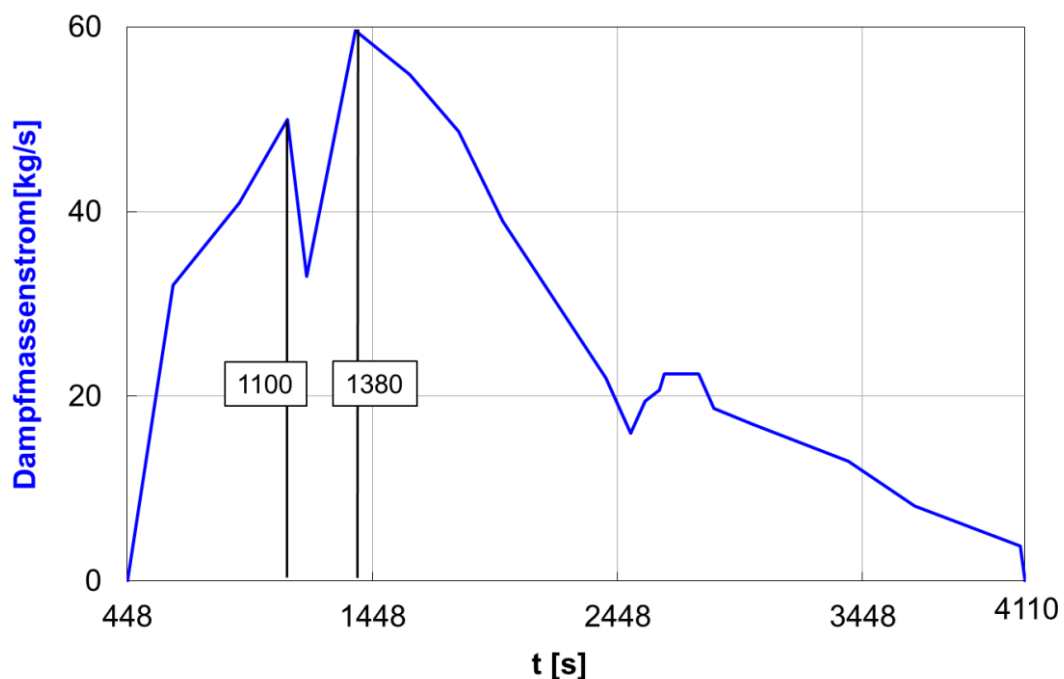


Abbildung 77: Massenstromprofil der Dampfeinspeisung

Abbildung 77 zeigt den aus dem Leck freigesetzten Quellterm von Wasserdampf, der in der Containment-Rechnung ab 448 s eingespeist wird. Über das Leck wird zuerst Wasserdampf mit einem angenommenen, zeitabhängigem Massenstrom und einer zeitabhängigen Temperatur ins Containment eingespeist. Das Massenstromprofil besitzt zwei relative Maxima bei 1100 s und 1380 s.

Mit zunehmender Dampfausströmung aus dem Leck, sinkt der Wasserfüllstand im Reaktordruckbehälter ab. Es beginnt die Kernaufheizung und die Zerstörung der Brennstabhüllrohre. Während der Zirkoniumoxidation der Hüllrohre wird Wasserstoff ins Containment freigesetzt. Wie in Abbildung 78 dargestellt ist, strömt ab 2040 s der Wasserstoff mit dem verbleibenden Wasserdampf in das Containment. Der freigesetzte Wasserstoffmassenstrom ist viel kleiner als der vom Wasserdampf und hat zwei größere Peaks bei 2500 s und 3470 s.

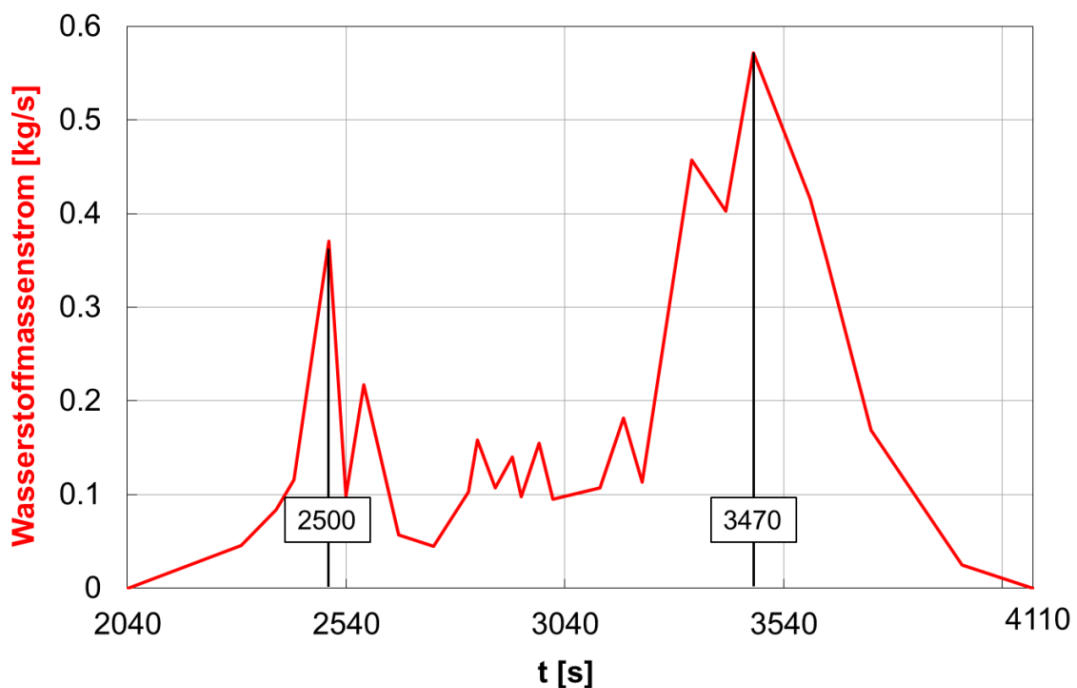


Abbildung 78: Massenstromprofil der Wasserstoffeinspeisung

Die Wasserdampf- und Wasserstoffströme aus dem Leck haben das gleiche Temperaturprofil, das einen Peak bei 2780 s hat, siehe Abbildung 79. Im Containment steigt die Temperatur, der Dampf- und Wasserstoffgehalt, so dass zündfähige Gasgemische entstehen können. Bei dem hohen Druck einer Explosion, kann die Integrität des Containments

gefährdet werden. An der Oberseite zweier Dampferzeugertürme ist jeweils eine Berstscheibe angebracht. Das Öffnen der Berstscheiben wurde bei einer Druckdifferenz von 0,04 bar modelliert. Die Öffnung ermöglicht eine Strömung zwischen Betriebs- und Anlagenbereich.

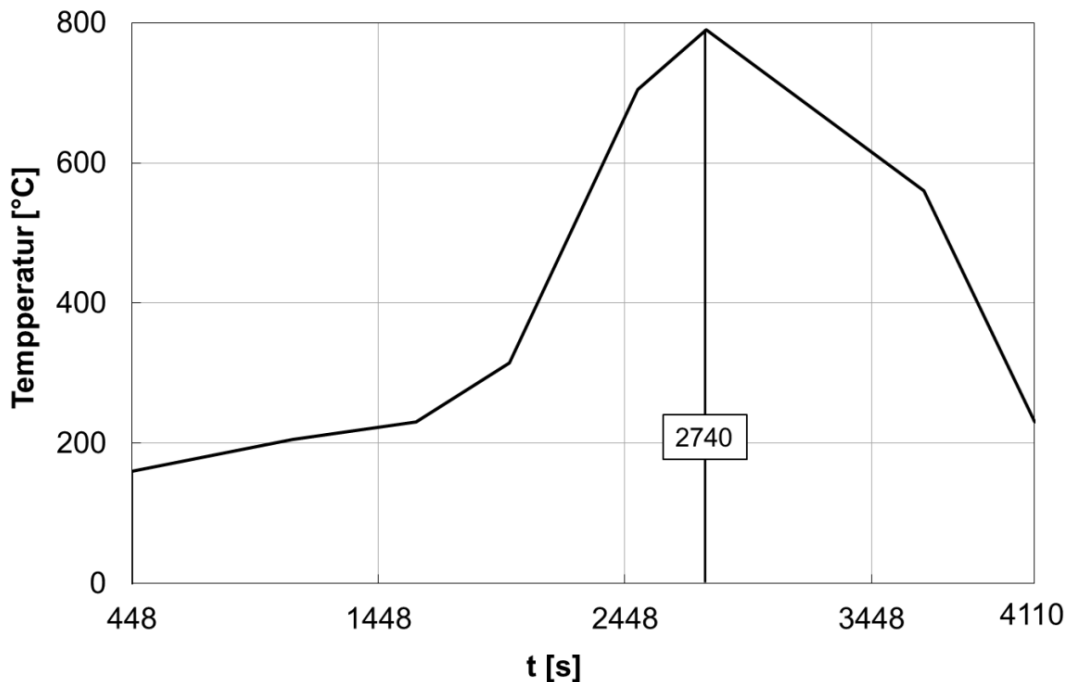


Abbildung 79: Temperaturprofil der Wasserstoff- und Dampfeinspeisung als Funktion der Zeit

5.2 Numerische Eigenschaften

Die transienten Simulationen in dem generischen Containment wurden mit ANSYS CFX 14.0 unter Verwendung der Diskretisierung zweiter Ordnung durchgeführt. Das SST-Turbulenzmodell wurde für die Rechnung verwendet. Die Diskretisierung erster Ordnung wurde nur für das Turbulenzmodell angewendet. Alle anderen Gleichungen wurden mit zweiter Ordnung berechnet. Für die Rechnung wurde das Residuum von 5×10^{-4} vorgegeben.

5.3 Skalierbarkeit bei Parallelisierung

Zunächst wurde eine einphasige Simulation mit dem Wandkondensationsmodell durchgeführt. Zur Untersuchung der Skalierung bei Parallelverarbeitung auf dem Cray XE6

(Hermit)-Cluster am HLRS, wurden Simulationen von 20 Zeitschritten mit dem Wandkondensationsmodell bis zu 240 Prozessoren durchgeführt. In Abbildung 80 sind die Beschleunigung und Effizienz aufgezeigt. Es ist zu erkennen, dass der Beschleunigungsfaktor der Simulationen sehr weit vom idealen Beschleunigungsfaktor liegt. Die Effizienz mit 32 Prozessoren ist nur 0,56. Ab 80 Prozessoren verkleinert sich die Effizienz stark und es tritt eine Sättigung ein. Eine Prozessoranzahl von 80 wurde für die Simulation mit dem generischen Containment ausgewählt.

Auf dem Cray XE6 (Hermit)-Cluster des HLRS muss jede Rechnung auf höchstens 24 Stunden beschränkt werden. Zum Beispiel hat eine typische Rechnung eine komplette Ausführungszeit von 22,5 h, wovon die Rechenzeit 15,7 h beträgt. Das heißt, dass 70 % der gesamten Zeit für die Rechnung, und der Rest 30 % für die Kommunikations-, Verwaltungs- und Auswertungsverluste gebraucht wird, die aufgrund der Parallelisierung entstanden sind.

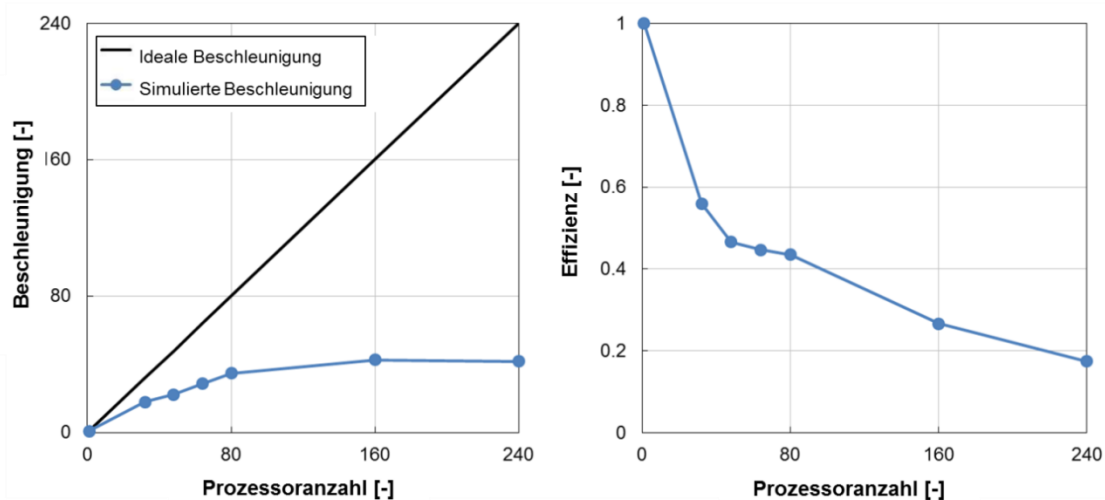


Abbildung 80: Beschleunigungsfaktor (links) und Effizienz (rechts) Cray XE6 (Hermit)-Cluster mit steigender Prozessoranzahl

5.4 Ergebnisse

5.4.1 Mit dem Ein-Fluid-Modell

Die erste Simulation unter Verwendung des Wandkondensationsmodells wurde von 448 s bis 4110 s nach der Einspeisung des zündfähigen Gasgemisches mit dem generischen

Modell-Containment durchgeführt. Abbildung 81 zeigt die globale Wasserdampfverteilung im Containment zu acht Zeitpunkten. Über das Leck wurden zuerst nur Wasserdampf und später auch Wasserstoff über eine horizontale Strömung in den unteren Bereich des Anlagenraums eingespeist. Der aus dem Leck freigesetzte, heiße Wasserdampf steigt wegen der Auftriebskraft auf. Vor dem Beginn der Simulation trennen zwei Berstscheiben den Betriebs- und Anlagenraum im Containment. Wenn der Überdruck von 0,04 bar erreicht ist, wird diejenige Berstscheibe gebrochen, die in der Nähe der Einspeisungsstelle liegt. Durch die gebrochene Berstscheibe strömt der Wasserdampf aufwärts in den Kuppelraum des Containments. Aufgrund des Auftriebs sammelt sich der leichte Wasserdampf im oberen Teil der verschiedenen Räume im Containment. Ab 2040 s wird Wasserstoff zusätzlich in den Containment freigesetzt. Dies führt zur Reduzierung des volumetrischen Dampfgehalts im Containment.

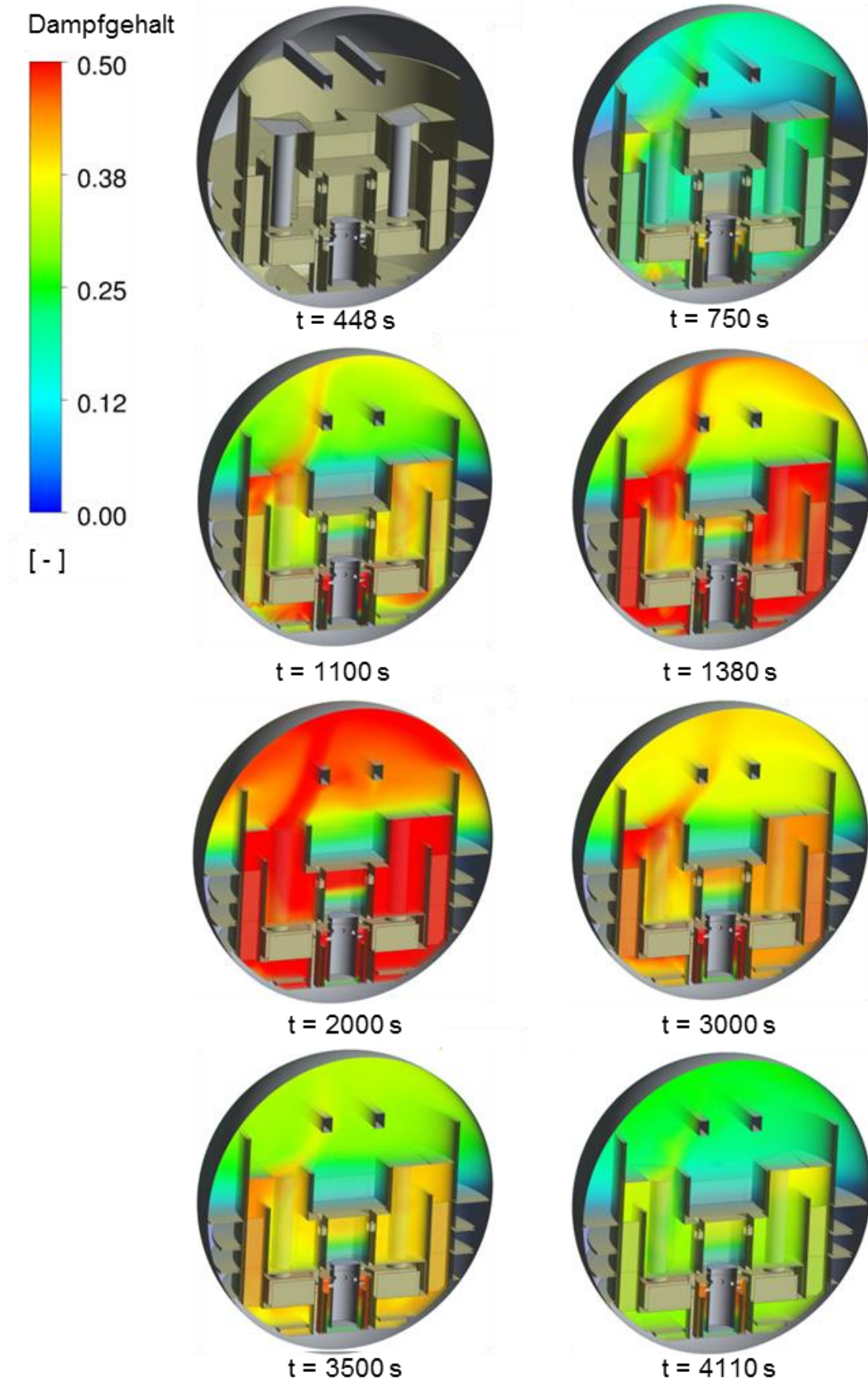


Abbildung 81: Wasserdampfverteilung im Containment zu verschiedenen Zeiten

Abbildung 82 zeigt die globale Wasserstoffverteilung im Containment zu verschiedenen Zeiten. Der aus dem Leck freigesetzte Wasserstoff steigt aufgrund der Auftriebskraft auf. Durch die gebrochene Berstscheibe strömt der Wasserstoff aufwärts in den Kuppelraum des Anlagenbereichs. Aufgrund der Auftriebskraft sammelt sich das Leichtgas Wasserstoff im oberen Teil verschiedener Räume im Containment. Der Massenstrom vom eingespeisten Wasserstoff erreicht das Maximum am 3470 s und verringert sich danach deutlich. Am Ende der Simulation (d.h. 4110 s) verursacht die Wandkondensation eine vergrößerte Gasdichte an der Stahlhülle und eine Sekundärgeschwindigkeit nach unten entsteht. Der Wasserstoff wird von der oberen, stabilen Schicht in den unteren Bereich des Kuppelraums transportiert. Mit geringerer Dichte reichert sich der Wasserstoff im oberen Bereich der verschiedenen Räume im Containment, besonders in dem halbgeschlossenen Raum an, in dem sich die zwei anderen Dampferzeuger mit der intakten Berstscheibe befinden.

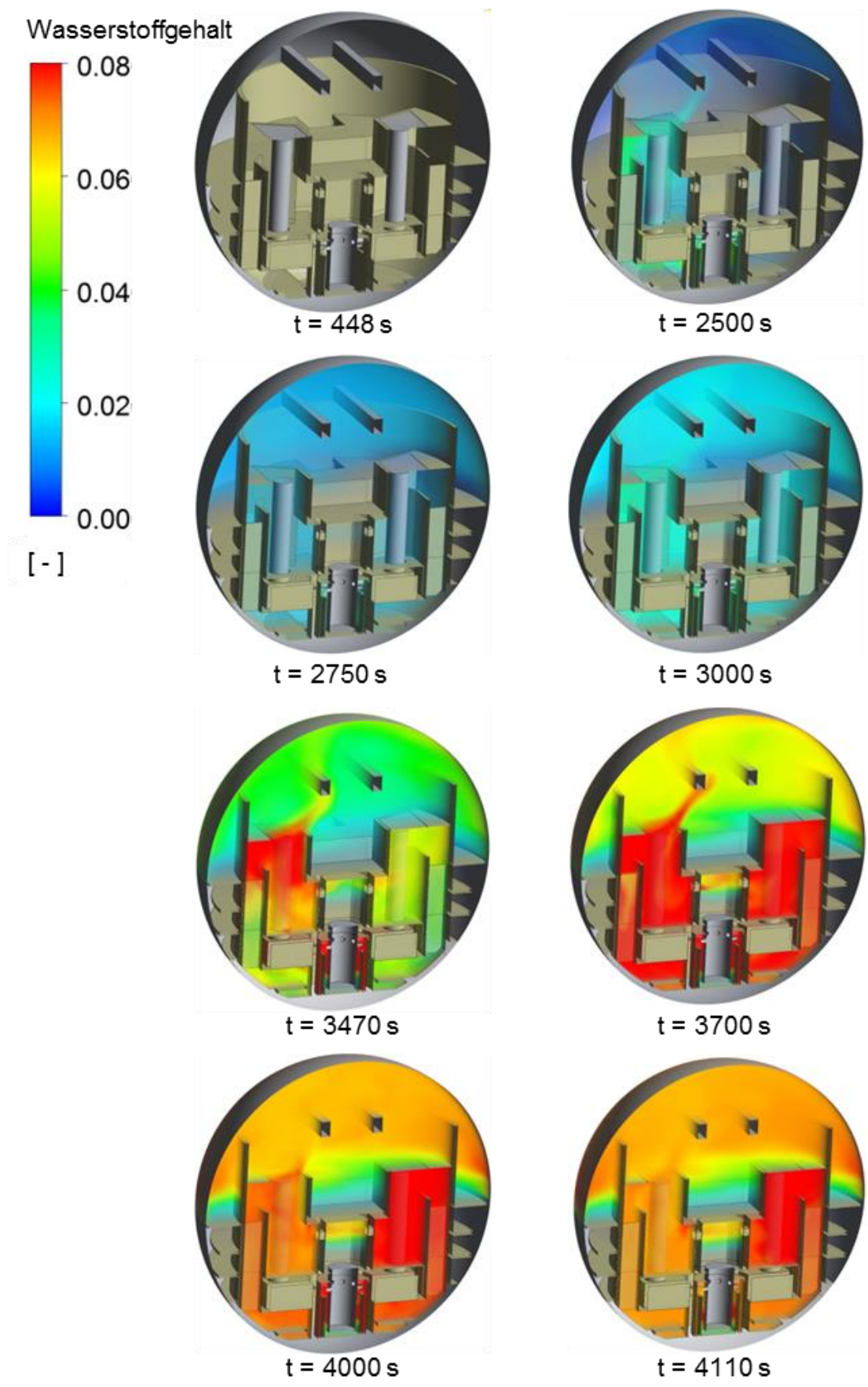


Abbildung 82: Wasserstoffverteilung im Containment zu verschiedenen Zeiten

Die Einspeisung der heißen Gasströmung führt zu Aufheizungsvorgängen im Containment. Abbildung 83 zeigt die räumliche Temperaturverteilung im Containment bei steigender Simulationszeit. Beide Berstscheiben sind anfänglich geschlossen. Eine davon öffnet sich, sobald die Druckdifferenz von 0,04 bar erreicht wird. Die heiße Gasströmung fließt über das Leck durch die geborstene Berstscheibe in den Kuppelraum und führt zu einer Temperatursteigerung im Containment. Nach 2780 s verkleinert sich die Temperatur der Einspeisungsströmung kontinuierlich. Das letzte Bild in Abbildung 83 zeigt einen starken Kühleffekt an den kalten Wänden am Ende der Simulation.

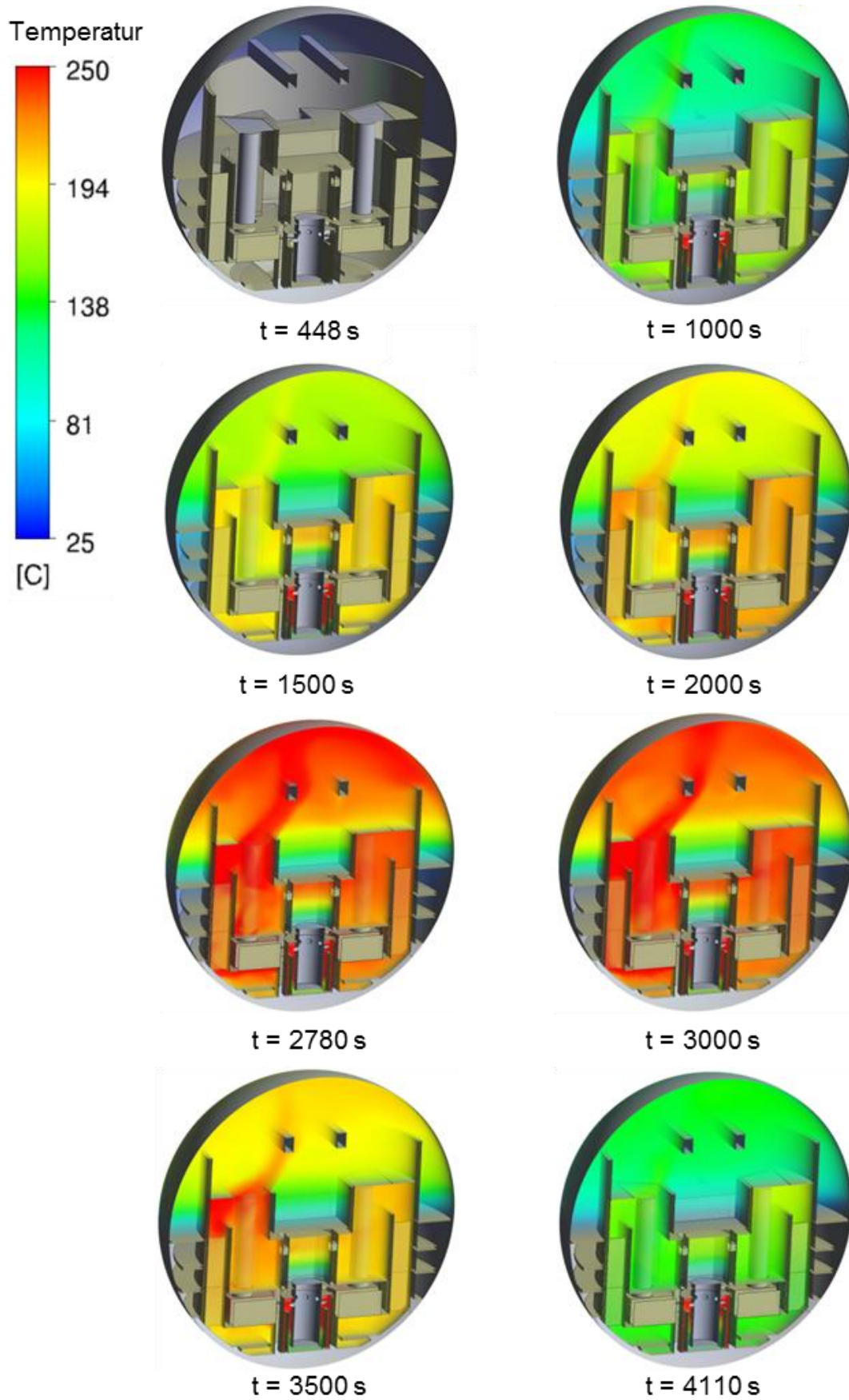


Abbildung 83: Temperaturverteilungen im Containment zu verschiedenen Zeiten

Nach der Studie über das Wasserstoffverhalten in Kapitel 1.2.2 wird die Gefährdung das berechneten Wasserstoff-Wasserdampf-Luft-Gemisch im Containment beurteilt. Wie in Abbildung 2 dargestellt, hat der Detonationsbereich eine untere Wasserstoff-Konzentrationsgrenze von ca. 14 Vol.-% und eine obere Grenze von ca. 70 Vol.-%, wobei das Gasgemisch mit dem Wasserdampf bei einer Konzentration von weniger als ca. 33 Vol.-% detonieren kann. In Abbildung 84 treten die Detonationsbereiche lokal in den quellnahen Zonen für kurze Zeit bei 3470 s auf. Danach ist die untere detonationsfähige Wolke durch den reduzierten Wasserstoffanteil im Quellstrahl unterbrochen.

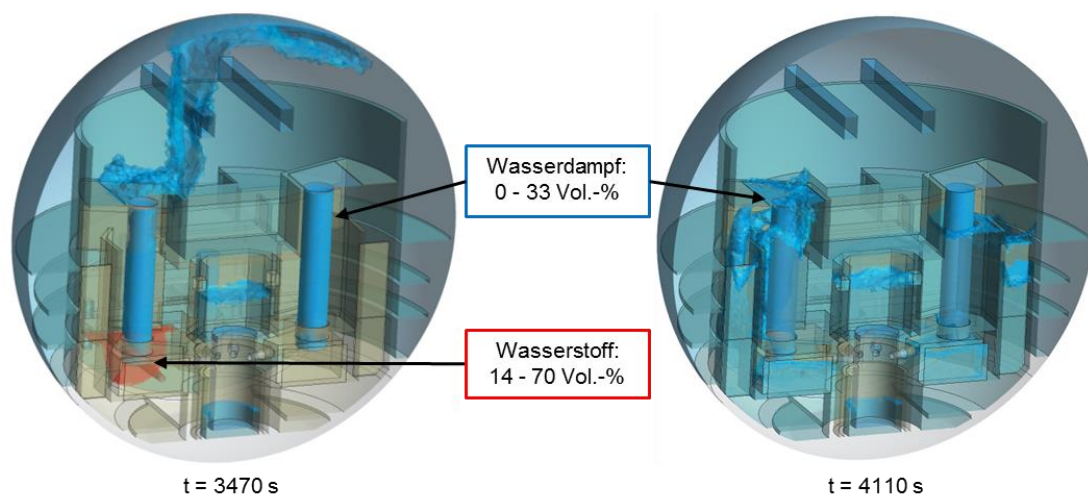


Abbildung 84: Wasserstoff- und Wasserdampf-Konzentration im Containment zu verschiedenen Zeiten

Um die genaue Berstzeit der Berstscheibe zu ermitteln, werden die Druckprofile unterhalb und oberhalb der Berstscheibe verglichen, siehe Abbildung 85. Am Zeitpunkt 497 s (d.h. 49 s nach der Leckströmung) führt die Druckdifferenz von 0,04 bar auf beiden Seiten zum Brechen der Berstscheibe. Danach sind die Drücke auf beiden Seiten fast gleich.

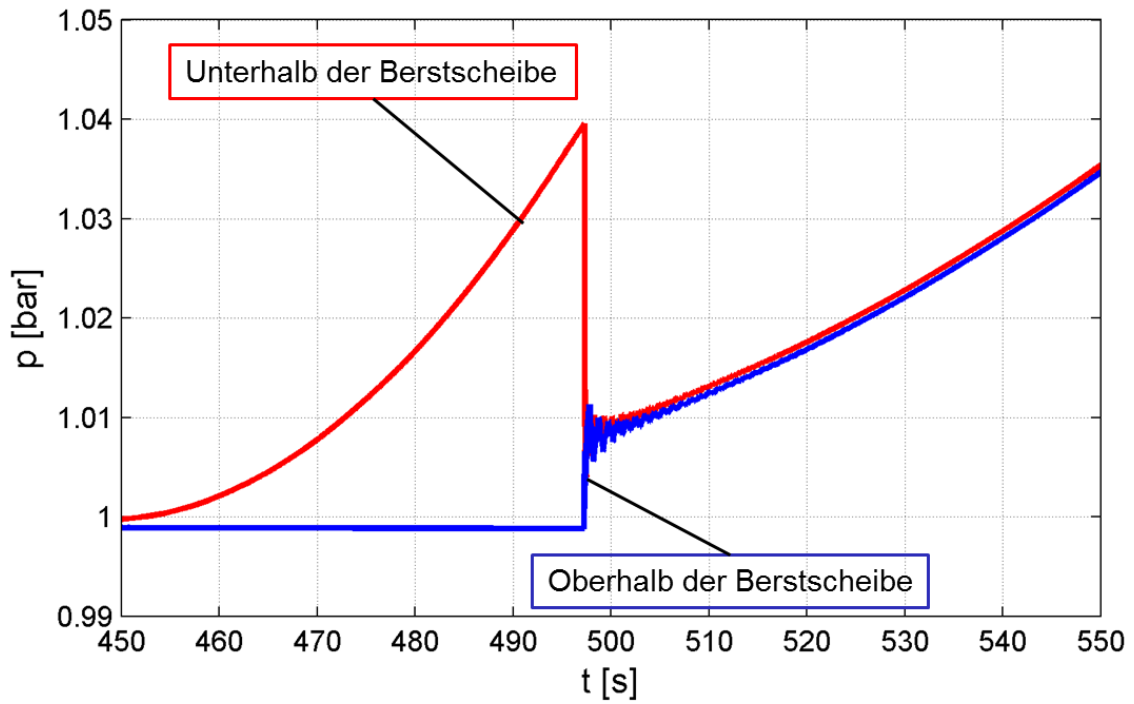


Abbildung 85: Simulierte Druckprofile unter und oberhalb der Berstscheibe

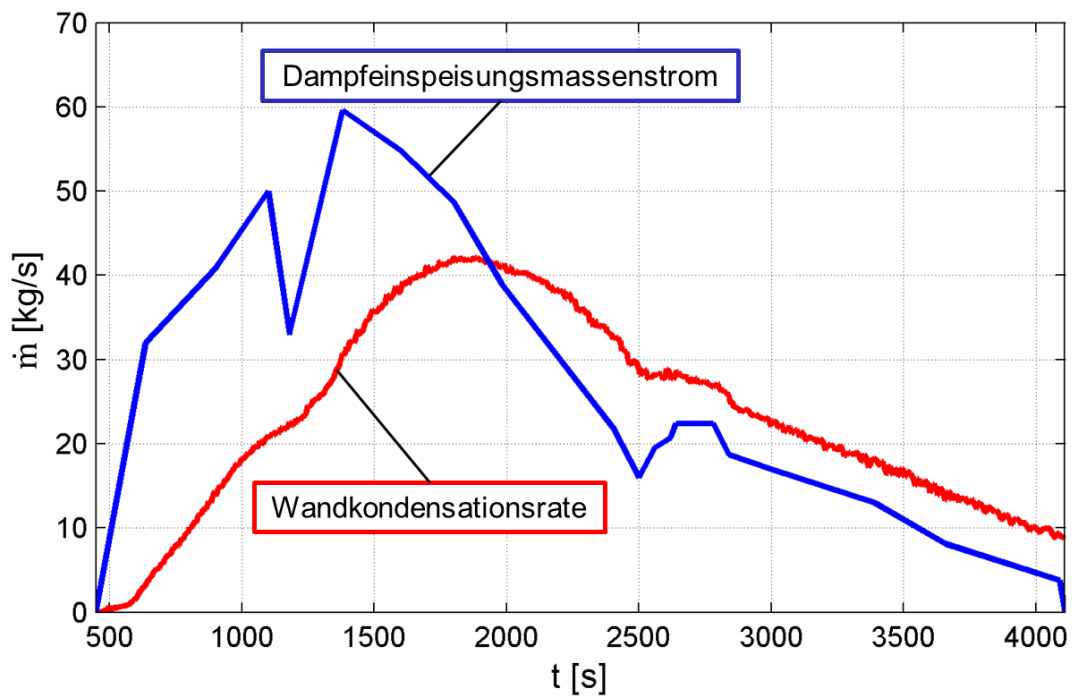


Abbildung 86: Vergleich der Wandkondensationsrate im Containment mit dem Wasserdampfpeisungsmassenstrom

Zur Untersuchung des Einflusses der Wandkondensation wird die Kondensationsrate mit dem Einspeisungsmassenstrom des Wasserdampfes in Abbildung 86 ausgewertet. In den ersten ca. 1800 s steigt die Wandkondensationsrate ständig an, da der Dampf mit steigendem Massenstrom in das Containment eingespeist wird. Danach fällt die Wandkondensationsrate mit dem reduzierten Dampfeinspeisungsmassenstrom ab.

Abbildung 87 zeigt den zeitlichen Druckverlauf im Sicherheitsbehälter. Nach dem Öffnen des Lecks strömen große Mengen von Wasserdampf aus. Dies führt zu einem starken Druckanstieg auf 2,1 bar im Sicherheitsbehälter bis ca. 1800 s. Der verringerte Massenstrom führt in Kombination mit der Kondensation des Wasserdampfs an den kalten Wänden zu einem Abfall des Druckes.

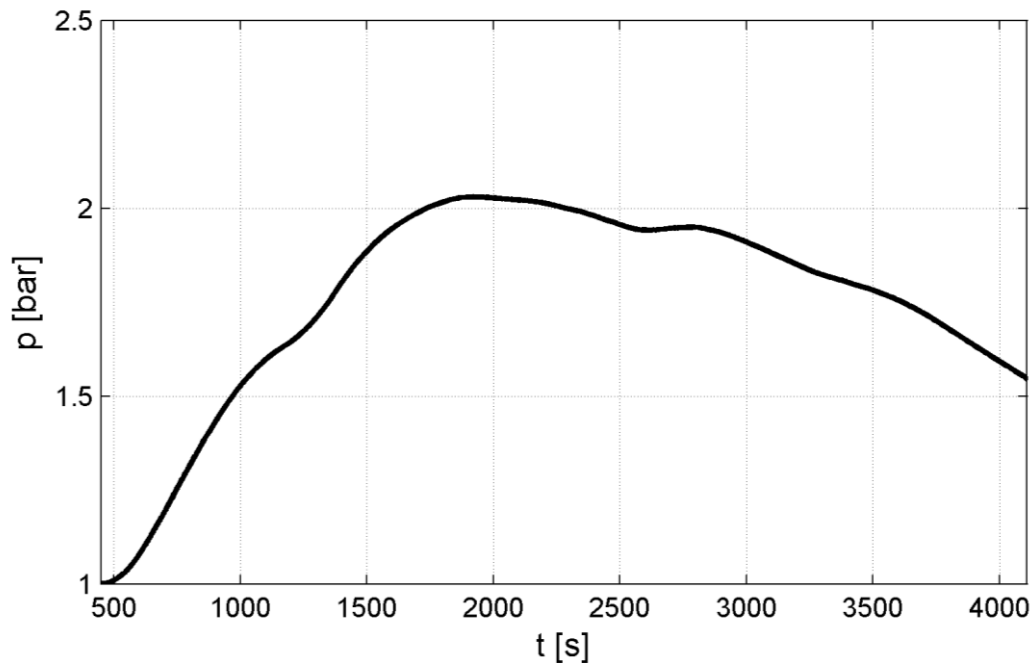


Abbildung 87: Druckentwicklung im generischen Sicherheitsbehälter nach dem Störfall

5.4.2 Mit dem Zwei-Fluid-Modell

Die zweite Simulation innerhalb des generischen Modell-Containments konnte mit den Wand- und Volumenkondensationsmodellen nur in den ersten 1,6 s nach Beginn der Wasserdampfeinspeisung durchgeführt werden. Abbildung 88 zeigt das Temperaturprofil auf einer Ebene der Einspeisungsstelle bei 449,6 s (d.h. 1,6 s nach der Wasserdampfeinspeisung). Die heiße Dampfeinspeisung führt zu einer Temperatursteigerung in der Nähe der

Einspeisestelle. Die Rechenzeiten für eine physikalische Sekunde beider Simulationen wurden verglichen: die Rechenzeit der ersten Simulation nur mit dem Wandkondensationsmodell beträgt 1087 s und von der Simulation mit dem Wand- und Volumenkondensationsmodell ca. 13 Tage. Der Grund kann mit einem sehr kleinen Zeitschritt für die zweite Simulation mit Volumenkondensationsmodell erklärt werden. Nach der Wasserdampfreisetzung sollen große Mengen an Wasserdampf im Volumen kondensieren. Dadurch wird viele Wärme als Quellterm aus der Tropfenphasengrenzfläche in die Umgebung abgeführt. Es erfolgt eine schlagartige Temperaturerhöhung in der Nähe der Dampfeinspeisungsstelle. Um Konvergenz zu erreichen, muss der Zeitschritt für die Simulation mit Volumenkondensation sehr klein eingestellt werden. Daher ist derzeit das Volumenkondensationsmodell noch nicht in einem großen Modell-Containment anwendbar. In der Zukunft ist die Anwendung des Volumenkondensationsmodells erst im Modell-Containment möglich, wenn eine größere Anzahl von Prozessoren verwendet wird und die Konvergenz der numerischen Methode bei einer größeren Zeitschrittweite erfolgt.

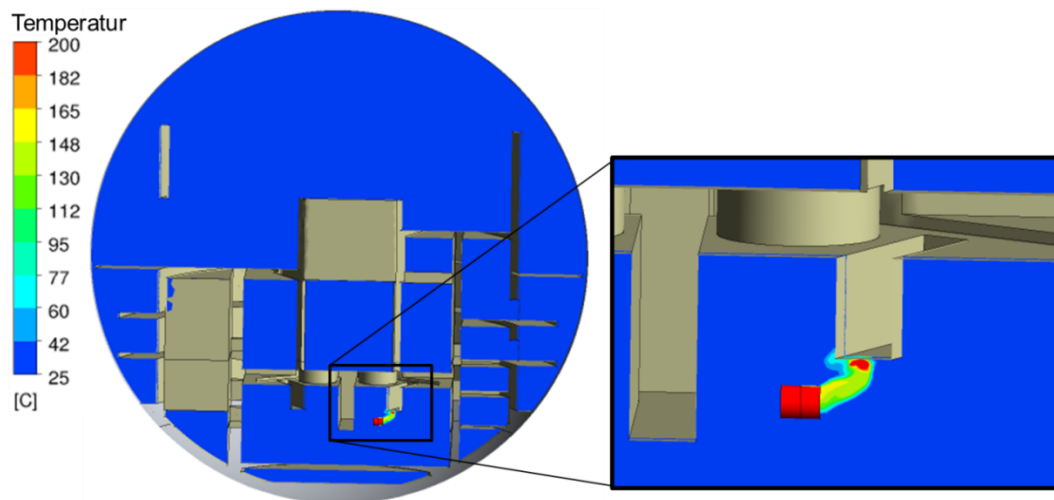


Abbildung 88: Temperaturprofil auf der Ebene der Einspeisungsstelle bei 449,6 s

6 Zusammenfassung

Während eines schweren Störfalls im Druckwasserreaktor kann Wasserstoff durch eine chemische Reaktion zwischen dem Hüllrohrmaterial Zirkonium der Brennstäbe und dem Wasserdampf produziert werden, der durch Verdampfung bei einem Kühlmittelverluststörfall entsteht. Über ein Leck im Primärkreislauf kann der produzierte Wasserstoff zusammen mit Wasserdampf in den Sicherheitsbehälter freigesetzt werden. Dieser Wasserdampf kondensiert entweder an kalten Wänden oder im freien Volumen innerhalb des Sicherheitsbehälters, wenn der Dampfpartialdruck in der Umgebung höher als der temperaturabhängige Sättigungsdampfdruck ist. Die Kondensation im freien Volumen wird als Volumenkondensation bezeichnet.

In der CFD-Software ANSYS CFX 14.0 ist bereits ein Wandkondensationsmodell für eine Zweiphasenströmung vorhanden, dagegen ist das Volumenkondensationsmodell noch nicht ausreichend entwickelt. Im Rahmen dieser Arbeit wurde daher zur Simulation von Zweiphasenströmungen ein neues Volumenkondensationsmodell anhand des Zwei-Fluid-Modells entwickelt und in ANSYS CFX 14.0 implementiert. Die Gasphase ist ein Gemisch aus Wasserdampf und nichtkondensierbaren Gasen, die Flüssigkeitsphase wird als eine disperse Tropfenphase modelliert. Es wird vorausgesetzt, dass die kleinen Tropfen als Keime entweder mit konstanter Tropfenanzahldichte oder konstantem Tropfendurchmesser gleichmäßig im Volumen vorhanden sind, damit die Massen- und Energieübertragung während der Volumenkondensation an vorhandenen Phasengrenzflächen simuliert werden kann. Unter Einsatz von mechanischen und thermischen Nichtgleichgewichtsmodellen werden diese beiden Phasen mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten und Temperaturen simuliert. In Berücksichtigung der durch die Schwerkraft verursachten Schlupfgeschwindigkeit zwischen beiden Phasen, können Tropfenbewegungen im Containment und die Tropfenablagerung auf Oberflächen ebenfalls simuliert werden.

2D Testfall

Ein zweidimensionaler Testfall wurde in Anlehnung an die Experimente TH2 und TH13 gewählt. Das neu entwickelte Volumenkondensationsmodell wurde zuerst mit dem stationären 2D Testfall getestet. Das vom 2D-Testfall berechnete Ergebnis wurde mit der

Mollier-Theorie verglichen und bestätigt, dass das Volumenkondensationsmodell die Volumenkondensation quantitativ gut simulieren kann.

TH2-Experiment

Mit dem TH2-Experiment wurde der Einfluss des Rechengitters auf das Ergebnis der Rechnung untersucht. Dazu wurden fünf Gitter mit unterschiedlich feiner Auflösung erstellt. Die Untersuchung ergab, dass das gröbste Gitter mit $1,0 \times 10^5$ Gitterpunkten ausreichend ist. Dann wurde die Skalierbarkeit bei Parallelrechnung auf Nehalem-Cluster am HLRS untersucht. Die Untersuchung ergab, dass die optimale Anzahl der Prozessoren 4 ist. Anschließend zeigten die Validierungsergebnisse des Volumenkondensationsmodells eine gute Übereinstimmung der Temperatur und des Druckes mit dem TH2-Experiment, in Anwesenheit von einem nichtkondensierbaren Gas (Luft), wobei die Volumenkondensation einen signifikanten Einfluss zeigte. Zur Sensibilitätsanalyse wurden Simulationen vom TH2-Experiment unter Einsatz unterschiedlicher Tropfendurchmesser durchgeführt. Die Rechnung mit kleineren Tropfengrößen ist langsamer und teurer. Da der Unterschied zwischen den Simulationen nicht groß ist, wurde ein Tropfendurchmesser von $100 \mu\text{m}$ zur Reduzierung des numerischen Rechenaufwandes für die weiteren Simulationen im Rahmen dieser Arbeit gewählt.

TH13-Experiment

Durch die Untersuchung der Skalierbarkeit zur Parallelrechnung auf Cray XE6 (Hermit)-Cluster am HLRS wurde die Anzahl der Prozessoren für die Berechnung des TH13-Experiments auf 16 festgelegt. Anschließend zeigten die Validierungsergebnisse des Volumenkondensationsmodells eine gute Übereinstimmung mit dem TH13-Experiment, bezüglich Temperatur und Druck, in Anwesenheit von zwei nichtkondensierbaren Gasen (Luft und Helium). Durch die Ergebnisse erkennt man, dass während der Volumenkondensation die Temperatur aufgrund des Wärmetransports aus Tropfen in der Umgebung ansteigt. Da der Druck proportional zur Temperatur ist, erhöht sich der Druck bei der Temperatursteigerung.

Demonstration im generischen Modell-Containment

Aufgrund der Untersuchung der Skalierbarkeit zur Parallelverarbeitung auf Cray XE6 (Hermit)-Cluster am HLRS wurde die Anzahl der Prozessoren für die Rechnung mit dem generischen Modell-Containment auf 80 gesetzt. Die Demonstration eines Kühlmittelverluststörfalls im deutschen generischen Modell-Containment wurde durchgeführt. Mit

dem Wandkondensationsmodell wurden globalen Wasserdampf-, Wasserstoff- und Temperaturverteilungen, sowie der Druck im Containment zu verschiedenen Simulationszeiten modelliert. Da die Demonstrationsrechnung mit dem Wand- und Volumenkondensationsmodell im großen Modell-Containment durch die Reduzierung der Zeitschrittweite sehr langsam und aufwändig ist, scheint die Anwendung des Volumenkondensationsmodells momentan noch nicht realistisch zu sein.

Zukünftige Anwendungsmöglichkeiten des Volumenkondensationsmodells im großen Modell-Containment

In der Zukunft ist die Anwendung des in der vorliegenden Arbeit entwickelten Volumenkondensationsmodells erst im großen Modell-Containment möglich, wenn die Stabilität der numerischen Methode bei einer größeren Zeitschrittweite garantiert ist und die Programme bzw. Hochleistungsrechner dahingehend weiterentwickelt werden, dass die Simulation mit einer größeren Anzahl von Prozessoren schneller durchgeführt werden kann.

Wie vorne in der Arbeit erwähnt, verbreitet sich das eingespeiste Gas nach dem Reaktorstörfall aus dem Leck zuerst im Anlagenraumbereich, und dann im Betriebsraumbereich des Containments. Zur Reduzierung des numerischen Aufwands und Erhöhung der Rechengeschwindigkeit sollte in Zukunft eine geeignete Methode entwickelt werden, mit der nur der lokal begrenzte Bereich simuliert wird, in dem sich die Leckströmung befindet.

7 Literaturverzeichnis

- [1] J. M. Neles und Christoph Pistner, Kernenergie: Eine Technik für die Zukunft?, Berlin: Springer Vieweg, 2012.
- [2] G. Kessler, A. Veser, F.-H. Schlüter, W. Raskob, C. Landman und J. Päsler-Sauer, Sicherheit von Leichtwasserreaktoren: Risiken der Nukleartechnologie, Berlin: Springer Vieweg, 2012.
- [3] B. R. Sehgal, Nuclear Safety in Light Water Reactors: Severe Accident Phenomenology, B. R. Sehgal, Hrsg., Amsterdam, Heidelberg: Elsevier, Acad. Press, 2012.
- [4] P. Laufs, Reaktorsicherheit für Leistungskernkraftwerke: Die Entwicklung im politischen und technischen Umfeld der Bundesrepublik Deutschland, Berlin: Springer Vieweg, 2013.
- [5] A. Möller, Den Ausstieg aus der Kernkraft sicher gestalten, Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2012.
- [6] A. Ziegler und H.-J. Allelein, Reaktortechnik: Physikalisch-technische Grundlagen, 2., neu bearbeitete Auflage 2013 Hrsg., Berlin, Heidelberg: Springer Vieweg, 2013.
- [7] B. J. Lederer und D. W. Wildberg, Reaktorhandbuch: Kerntechnische Grundlagen für Betriebspersonal in Kernkraftwerken, 2., neubearbeitete Auflage Hrsg., München: Hanser, 1992.
- [8] NEA und OECD, Nuclear Fuel Behaviour in Loss-of-Coolant Accident (LOCA) Conditions: State-of-the-art Report, 2009.

- [9] Z. M. Shapiro und T. R. Moffette, „Hydrogen Flammability Data and Application to PWR Loss-of-Cooland Accident,“ 1957.
- [10] M. Bendiab, „Erweiterung des Containment Codes COCOSYS zur Quelltermbewertung der trockenen Resuspension infolge transienter Strömungen,“ Ruhr-Universität Bochum, Bochum, 2007.
- [11] H. J. Allelein, K. Fischer, J. Vendel, J. Macek, E. Studer, S. Schwarz, M. Houkema, H. Paillère und A. Bentaib, „International Standard Problem ISP-47 on Containment Thermal-hydraulics: Final Report,“ 2007.
- [12] H. J. Allelein, K. Fischer, J. Vendel, J. Macek, E. Studer, S. Schwarz, M. Houkema, H. Paillère und A. Bentaib, „International Standard Problem ISP-47 on Containment Thermal-hydraulics,“ *NEA News Volume No. 25.2*, December 2007.
- [13] E. Porcheron, P. Lemaitre, D. Marchand, W. Plumecocq, A. Nuboer und J. Vendel, „Experimental and numerical approaches of aerosol removal in spray conditions for containment application,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 240, Nr. 2, pp. 336-343, 2010.
- [14] E. Porcheron, P. Lemaitre, A. Nuboer, V. Rochas und J. Vendel, „Experimental investigation in the TOSQAN facility of heat and mass transfers in a spray for containment application,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 237, Nr. 15-17, pp. 1862-1871, 2007.
- [15] T. Kanzleiter, G. Ahrens, K. Fischer, A. Kühnel, G. Poss, F. Funke, G.-U. Greger, H. J. Allelein und S. Schwarz, „Abschlußbericht, Versuchsanlage und Programm zur Untersuchung offener Fragen zum Spaltproduktverhalten im Sicherheitsbehälter, Teil 1,“ Eschborn, Deutschland, 2003.
- [16] T. Kanzleiter, G. Ahrens, K. Fischer, W. Häfner, A. Kühnel, G. Poss, F. Funke, G. Langrock, H. J. Allelein, G. Weber und S. Schwarz, „Abschlußbericht, Versuchsanlage und Programm zur Untersuchung offener Fragen zum

Spaltproduktverhalten im Sicherheitsbehälter, ThAI Phase II,“ Eschborn, Deutschland, 2007.

- [17] J. Malet, L. Blumenfeld, S. Arndt, M. Babic, A. Bentaib, F. Dabbene, P. Kostka, S. Mimouni, M. Movahed, S. Paci, Z. Parduba, J. Travis und E. Urbonavicius, „Sprays in containment: Final results of the SARNET spray benchmark,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 241, Nr. 6, pp. 2162-2171, 2011.
- [18] R. Zboray und D. Paladino, „Experiments on basic thermalhydraulic phenomena relevant for LWR containments: Gas mixing and transport induced by buoyant jets in a multi-compartment geometry,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 240, Nr. 10, pp. 3158-3169, 2010.
- [19] D. Paladino, R. Zboray und O. Auban, „The panda tests 9 and 9bis investigating gas mixing and stratification triggered by low momentum plumes,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 240, Nr. 5, pp. 1262-1270, 2010.
- [20] H.-J. Allelein, A. Auvinen, J. Ball, S. Güntay, L. E. Herranz, A. Hidaka, A. V. Jones, M. Kissane, D. Powers und G. Weber, „State-of-the-Art Report on Nuclear Aerosols,“ 2009.
- [21] W. Klein-Heßling, S. Arndt, G. Weber, H. Wolff, S. Schwarz und C. Spengler, COCOSYS Short description, Köln, 2008.
- [22] M. Povilaitis und E. Urbonavičius, „Simulation of MASPn Experiments in MISTRA Test Facility with COCOSYS Code,“ *Science and Technology of Nuclear Installations*, Bd. 2008, 2008.
- [23] H.-J. Allelein, S. Arndt, W. Klein-Heßling, S. Schwarz, C. Spengler und G. Weber, „COCOSYS: Status of development and validation of the German containment code system,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 238, Nr. 4, pp. 872-889, 2008.
- [24] J. Burkhardt, S. Schwarz und M. K. Koch, „Analysis of the Nodalisation Influence on Simulating Atmospheric Stratifications in the Experiment THAI TH13 with the

Containment Code System COCOSYS,“ *Nuclear Engineering and Technology*, Bd. 41, Nr. 9, pp. 1135-1142, 2009.

- [25] H.-J. Allelein, K. Neu und J. P. Van Dorsselaere, „European Validation of the Integral Code ASTEC (EVITA): First experience in validation and plant sequence calculations,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 235, Nr. 2–4, pp. 285-308, 2005.
- [26] P. Groudev, B. Atanasova, B. Chatterjee und H. G. Lele, „ASTEC investigations of severe core damage behaviour of VVER-1000 in case of loss of coolant accident along with Station-Black-Out,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 272, pp. 237-244, 2014.
- [27] R. O. Gauntt, R. K. Cole, C. M. Erickson, R. G. Gido, R. D. Gasser, S. B. Rodriguez und M. F. Young, MELCOR Computer Code Manuals Vol. 1 Rev. 2, Albuquerque, 2000.
- [28] T. Szabó, F. Kretschmar und T. Schulenberg, „Obtaining a more realistic hydrogen distribution in the containment by coupling MELCOR with GASFLOW,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 269, pp. 330-339, 2014.
- [29] A. Trometer, M. Buck und J. Starflinger, „INVESTIGATION ON COOLING POSSIBILITIES OF A DEGRADED CORE IN A MBLOCA SCENARIO FOR A GERMAN PWR WITH ATHLET-CD,“ in *The 19th Pacific Basin Nuclear Conference (PBNC 2014)*, Vancouver, British Columbia, Canada, 2014.
- [30] S. Kelm, P. Broxtermann, S. Krajewski, H.-J. Allelein, G. Preusser, M. Sangiorgi, W. Klein-Heßling, I. Bakalov, A. Bleyer, A. Bentaib, I. Kljenak, M. Stempniewicz, P. Kostka, S. Morandi, B. Ada del Corno, C. Bratfisch, T. Risken, L. Denk, Z. Parduba, S. Paci, A. Manfredini, A. Silde, J. Jancovic, P. Juris und H. G. Lele, „Generic Containment a Detailed Comparison of Containment Simulations Performend on Plant Scale,“ in *The 15th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermalhydraulics (NURETH-15)*, Pisa, Italy, 2013.

- [31] A. Zirkel, „Numerical Investigation of the Turbulence Mass Transport during the Mixing of a Stable Stratification with a Free Jet,“ Universität Stuttgart, Stuttgart, 2011.
- [32] P. Royl, H. Rochholz, W. Breitung, J. R. Travis und G. Necker, „Analysis of steam and hydrogen distribution with PAR mitigation in NPP containments,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 202, pp. 231-248, 2000.
- [33] J. Xiao und J. R. Travis, „How critical is turbulence modeling in gas distribution simulations of large-scale complex nuclear reactor containment?,“ *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 56, pp. 227-242, 2013.
- [34] J. Kutnjak, „Experimental Investigation and Mechanistic Modelling of Dilute Bubbly Bulk Boiling,“ Universität Stuttgart, Stuttgart, 2013.
- [35] T. Wintterle, „Modellentwicklung und numerische Analyse zweiphasig geschichteter horizontaler Strömungen,“ Universität Stuttgart, Stuttgart, 2008.
- [36] Ben Hadj Ali, Amine, „Entwicklung eines CFD-Modells für Wasserabscheidung an einer gegengerichteten Wasser-Luft Schichtenströmung,“ Universität Stuttgart, Stuttgart, 2014.
- [37] W. Ambrosini, N. Forgione, A. Manfredini und F. Oriolo, „On various forms of the heat and mass transfer analogy: Discussion and application to condensation experiments,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 236, Nr. 9, pp. 1013-1027, 2006.
- [38] E. Studer, J. P. Magnaud, F. Dabbene und I. Tkatschenko, „International standard problem on containment thermal–hydraulics ISP47 Step 1—Results from the MISTRA exercise,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 237, Nr. 5, pp. 536-551, 2007.

- [39] J. Malet, E. Porcheron und J. Vendel, „OECD International Standard Problem ISP-47 on containment thermal-hydraulics—Conclusions of the TOSQAN part,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 240, Nr. 10, pp. 3209-3220, 2010.
- [40] J. Malet, E. Porcheron, F. Dumay und J. Vendel, „Code-experiment comparison on wall condensation tests in the presence of non-condensable gases—Numerical calculations for containment studies,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 253, pp. 98-113, 2012.
- [41] J. C. de la Rosa, A. Escrivá, L. E. Herranz, T. Cicero and J. L. Muñoz-Cobo, „Review on condensation on the containment structures,“ *Progress in Nuclear Energy*, vol. 51, no. 1, pp. 32-66, 2009.
- [42] G. Zschaeck, T. Frank und A. D. Burns, „CFD Modelling and Validation of Wall Condensation in the Presence of Non-condensable Gases,“ in *Computational Fluid Dynamics (CFD) in Nuclear Reactor Safety (NRS)*, Daejeon, Korea, 2012.
- [43] I. Kljenak, M. Babić, B. Mavko und I. Bajsić, „Modeling of containment atmosphere mixing and stratification experiment using a CFD approach,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 236, Nr. 14-16, pp. 1682-1692, 2006.
- [44] J. M. Martín-Valdepeñas, M. A. Jiménez, F. Martín-Fuertes und Benítez, J. A. Fernández., „Comparison of film condensation models in presence of non-condensable gases implemented in a CFD Code,“ *Heat and Mass Transfer*, Bd. 41, Nr. 11, pp. 961-976, 2005.
- [45] J. M. Martín-Valdepeñas, M. A. Jiménez, F. Martín-Fuertes und J. A. Fernández, „Improvements in a CFD code for analysis of hydrogen behaviour within containments,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 237, Nr. 6, pp. 627-647, 2007.
- [46] M. Houkema, N. B. Siccama, J. A. Lycklama à Nijeholt und E. M. J. Komen, „Validation of the CFX4 CFD code for containment thermal-hydraulics,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 238, Nr. 3, pp. 590-599, 2008.

- [47] M. Babić, I. Kljenak und B. Mavko, „Simulation of Atmosphere Mixing and Stratification in the ThAI Experimental Facility with a CFD Code,“ in *Nuclear Energy for New Europe*, Bled, Slovenia, 2005.
- [48] M. Babić, I. Kljenak und B. Mavko, „Prediction of light gas distribution in experimental containment facilities using the CFX4 code,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 238, Nr. 3, pp. 538-550, 2008.
- [49] M. Babić, I. Kljenak und B. Mavko, „Simulations of TOSQAN containment spray tests with combined Eulerian CFD and droplet-tracking modelling,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 239, Nr. 4, pp. 708-721, 2009.
- [50] L. Vyskocil, J. Schmid und J. Macek, „CFD simulation of air–steam flow with condensation,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 279, pp. 147-157, 2014.
- [51] P. Royl, J. R. Travis und J. Kim, „GASFLOW A Computational Fluid Dynamics Code for Gases Aerosols, and Combustion,“ Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe, 2008.
- [52] J. Zhang und E. Laurien, „Numerische Strömungssimulation mit Volumen Kondensation im Sicherheitsbehälter,“ in *Jahrestagung Kerntechnik*, Berlin, Germany, 2013.
- [53] J. Zhang und E. Laurien, „Numerical Simulation of Flow with Volume Condensation in a Model Containment,“ in *International Congress on Advances in Nuclear Power Plants*, Jeju Island, Korea, 2013.
- [54] J. Zhang und E. Laurien, „Numerical Simulation of Flow with Volume Condensation in a Model Containment,“ in *High Performance Computing in Science and Engineering '13*, Cham; Heidelberg, Springer, 2013, pp. 477-492.
- [55] J. Zhang und E. Laurien, „Numerical Simulation of Flow with Volume Condensation in Presence of Non-condensable Gases in a PWR Containment,“ in

- International Congress on Advances in Nuclear Power Plants*, Charlotte, USA, 2014.
- [56] J. Zhang und E. Laurien, „CFD Simulation of Flow with Condensation in Presence of Non-Condensable Gases inside a PWR Containment,“ in *Annual Meeting on Nuclear Technology*, Frankfurt, Germany, 2014.
- [57] J. Zhang und E. Laurien, „3D Numerical Simulation of Flow with Volume Condensation in Presence of Non-condensable Gases inside a PWR Containment,“ in *High Performance Computing in Science and Engineering '14*, Cham, Heidelberg, Springer, 2014, pp. 479-497.
- [58] M. Volmer und A. Weber, „Keimbildung in übersättigten Gebilden,“ *Zeitschrift für physikalische Chemie*, 1926.
- [59] H. R. Pruppacher und J. D. Klett, *Microphysics of Clouds and Precipitation*, Dordrecht: Springer Science+Business Media B.V, 2010.
- [60] R. Clift, J. R. Grace und M. E. Weber, *Bubbles, Drops, and Particles*, Mineola, NY: Dover Publ., 2005.
- [61] C. T. Crowe, J. D. Schwarzkopf, M. Sommerfeld und Y. Tsuji, *Multiphase flows with droplets and particles*, 2 Hrsg., Boca Raton: CRC Press, 2012.
- [62] W. A. Sirignano, *Fluid Dynamics and Transport of Droplets and Sprays*, 2 Hrsg., Cambridge: Cambridge University Press, 2010.
- [63] ANSYS, *ANSYS CFX-Solver Theory Guide*, ANSYS CFX Version 14.0, Hrsg., 2011.
- [64] F. R. Menter, „Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications,“ *AIAA Journal*, Bd. 32, Nr. 8, pp. 1598-1605, 1994.

- [65] F. R. Menter, M. Kuntz und R. Langtry, „Ten Years of Industrial Experience with the SST Turbulence Model,“ in *Proceedings of the Fourth International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer*, Antalya, Turkey, 2003.
- [66] M. Ishii, „Two-Fluid Model and Hydrodynamic Constitutive Relations,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 82, pp. 107-126, 1984.
- [67] M. Ishii und T. Hibiki, *Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase Flow*, New York: Springer, 2006.
- [68] K. Stephan, *Wärmeübergang beim Kondensieren und beim Sieden*, Berlin, Heidelberg: Springer, 1988.
- [69] B. A. Kader, „Temperature and concentration profiles in fully turbulent boundary layers,“ *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Bd. 24, Nr. 9, pp. 1541-1544, 1981.
- [70] S. Mimouni, J.-S. Lamy, J. Lavieville, S. Guieu und M. Martin, „Modelling of sprays in containment applications with A CMFD code,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 240, Nr. 9, pp. 2260-2270, 2010.
- [71] R.-J. Koopmans, J. S. Shrimpton, G. T. Roberts und A. J. Musker, „A one-dimensional multicomponent two-fluid model of a reacting packed bed including mass, momentum and energy interphase transfer,“ *International Journal of Multiphase Flow*, Bd. 57, pp. 10-28, 2013.
- [72] N. I. Kolev, *Multiphase Flow Dynamics 2*, 3 Hrsg., Bd. 2, Berlin: Springer, 2007.
- [73] B. E. Poling, J. M. Prausnitz und J. P. O'Connell, *The Properties of Gases and Liquids*, 5 Hrsg., New York: McGraw-Hill, 2001.
- [74] R. B. Bird, W. E. Stewart und E. N. Lightfoot, *Transport Phenomena*, 2 Hrsg., New York: Wiley, 2007.

- [75] W. E. Ranz und W. R. Marshall, „Evaporation from Drops Part I,“ *Chemical Engineering Progress*, Bd. 48, Nr. 3, pp. 141-146, 1952.
- [76] E. Laurien und H. Oertel jr., *Numerische Strömungsmechanik*, 5., überarb. u. erw. Aufl. Hrsg., Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, 2013.
- [77] R. Mollier, „Das ix-Diagramm für Dampfluftgemische,“ *Zeitschrift des Vereines Deutscher Ingenieure*, Bd. 73, Nr. 29, pp. 1009-1013, 1929.
- [78] R. Mollier, „Ein neues Diagramm für Dampfluftgemische,“ *Zeitschrift des Vereines Deutscher Ingenieure*, Bd. 67, pp. 869-872, 1923.
- [79] G. Zschaeck, *Private Kommunikation*, ANSYS, Otterfing, Deutschland, 2013.
- [80] P. J. Roache, *Verification and Validation in Computational Science and Engineering*, Albuquerque, New Mexico: Hermosa, 1998.
- [81] T. Rauber und G. Rüniger, *Parallele Programmierung*, 3 Hrsg., Berlin, Heidelberg: Springer, 2012.
- [82] T. Ungerer, *Parallelrechner und parallele Programmierung*, Heidelberg, Berlin: Spektrum Akad. Verl., 1997.
- [83] U. Ilg, G. König und M. Erve, „Das Werkstoffkonzept in deutschen Leichtwasserreaktoren - Beitrag zur Anlagensicherheit, Wirtschaftlichkeit und Schadensvorsorge,“ *atw*, Bd. 53, pp. 766-781, 2008.
- [84] J. Stewering, *Private Kommunikation*, GRS, Köln, Deutschland, 2013.
- [85] S. Kelm, P. Broxtermann, S. Krajewski und H.-J. Allelein, „Proposal for the Generic Containment Code-to-Code Comparison – run2,“ Jülich, 2012.

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Kondensationsvorgänge im Sicherheitsbehälter eines Druckwasserreaktors	3
Abbildung 2: Detonations- und Deflagrationsbereich für Wasserstoff- Wasserdampf-Luft-Gasgemisch.....	4
Abbildung 3: Versuchsanlagen TOSQAN (links) und THAI (rechts)	5
Abbildung 4: Versuchsanlage MISTRA.....	6
Abbildung 5: Versuchsanlage PANDA	7
Abbildung 6: Tropfenverteilung in unterschiedlichen Typen von Kumuluswolke ..	12
Abbildung 7: Modellvereinfachung für Wandkondensation in Anwesenheit von nichtkondensierbaren Gasen	21
Abbildung 8: Volumenkondensation.....	23
Abbildung 9: Mollier-Diagramm.....	27
Abbildung 10: 2D Testfall.....	29
Abbildung 11: Ergebnisse des 2D Testfalls	30
Abbildung 12: Vergleich des Simulationsergebnisses des stationären 2D Testfalls mit der Theorie im weiterentwickelten Mollier-Diagramm.....	30
Abbildung 13: TH2-Versuchsanlage mit oberer Dampfeinspeisung	31
Abbildung 14: Zweidimensionale Geometrie und Gitter vom TH2-Experiment.....	32
Abbildung 15: Beschleunigung (links) und Effizienz (rechts) auf Nehalem-Cluster mit steigender Anzahl der Prozessoren	35
Abbildung 16: Einspeisungen im TH13-Experiment	36
Abbildung 17: Halbgeometrie mit Einspeisungsstellen und Gitter des TH13- Experiments	38
Abbildung 18: Anfangsbedingungen für die zweite Versuchsphase des TH13- Experiments	38

- Abbildung 19: Beschleunigung (links) und Effizienz (rechts) auf dem Cray XE6 (Hermit)-Cluster in Abhängigkeit der Prozessoranzahl.....40
- Abbildung 20: Temperaturprofile auf Symmetrieebene aus erster Simulation, mit Wandkondensationsmodell zu verschiedenen Simulationszeiten....42
- Abbildung 21: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH2-Experiment am MP2; rechts: Temperaturprofil auf Symmetrieebene aus erster Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3600 s und die Position von MP2.....43
- Abbildung 22: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH2-Experiment am MP25; rechts: Temperaturprofil auf Symmetrieebene aus erster Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3600 s und die Position von MP2544
- Abbildung 23: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH2-Experiment am MP27; rechts: Temperaturprofil auf Symmetrieebene aus erster Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3600 s und die Position von MP2744
- Abbildung 24: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH2-Experiment am MP4; rechts: Temperaturprofil auf Symmetrieebene aus erster Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3600 s und die Position von MP4.....45
- Abbildung 25: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH2-Experiment am MP46; rechts: Temperaturprofil auf Symmetrieebene aus erster Simulation mit dem Wandkondensationsmodell bei 3600 s und die Position von MP4646
- Abbildung 26: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH2-Experiment am MP6; rechts: Temperaturprofil auf Symmetrieebene aus erster Simulation mit dem Wandkondensationsmodell bei 3600 s und die Position von MP6.....46
- Abbildung 27: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH2-Experiment am MP12; rechts: Temperaturprofil auf

	Symmetrieebene aus erster Simulation mit dem Wandkondensationsmodell bei 3600 s und die Position von MP1247	
Abbildung 28:	Vergleich des simulierten Druckes im Versuchsbehälter aus erster Simulation, unter Verwendung des Wandkondensationsmodells mit dem TH2-Experiment	48
Abbildung 29:	Temperaturprofile auf der Symmetrieebene aus der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell zu verschiedenen Simulationszeiten	49
Abbildung 30:	links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH2- Experiment am MP2; rechts: Temperaturprofil auf der Symmetrieebene von der zweiten Simulation mit den Wand- und Volumenkondensationsmodellen bei 3600 s und die Position von MP2	50
Abbildung 31:	links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH2- Experiment am MP25; rechts: Temperaturprofil auf der Symmetrieebene von der zweiten Simulation mit den Wand- und Volumenkondensationsmodellen bei 3600 s und die Position von MP25	50
Abbildung 32:	links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH2- Experiment am MP27; rechts: Temperaturprofil auf der Symmetrieebene von der zweiten Simulation mit den Wand- und Volumenkondensationsmodellen bei 3600 s und die Position von MP27	51
Abbildung 33:	links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH2- Experiment am MP4; rechts: Temperaturprofil auf der Symmetrieebene von der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3600 s und die Position von MP4	52
Abbildung 34:	links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH2- Experiment am MP46; rechts: Temperaturprofil auf der Symmetrieebene der zweiten Simulation mit den Wand- und	

Volumenkondensationsmodellen bei 3600 s und die Position von MP46.....	52
Abbildung 35: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH2-Experiment am MP6; rechts: Temperaturprofil auf der Symmetrieebene von der zweiten Simulation mit den Wand- und Volumenkondensationsmodellen bei 3600 s und die Position von MP6.....	53
Abbildung 36: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH2-Experiment am MP12; rechts: Temperaturprofil auf der Symmetrieebene von der zweiten Simulation mit den Wand- und Volumenkondensationsmodellen bei 3600 s und die Position von MP12.....	54
Abbildung 37: Vergleich des simulierten Druckes im Versuchsbehälter, unter Verwendung des Wand- und Volumenkondensationsmodells, sowie nur des Wandkondensationsmodells, mit den experimentellen Daten aus dem TH2-Experiment	54
Abbildung 38: Vergleich der Kondensationsraten an den Wänden und im Volumen aus der zweiten Simulation vom TH2-Experiment.....	55
Abbildung 39: Tropfenverteilung auf Symmetrieebene aus der zweiten Simulation zu unterschiedlichen Simulationszeiten	56
Abbildung 40: Druckvergleich aus Simulationen mit unterschiedlichen Tropfendurchmessern.....	57
Abbildung 41: Heliumverteilung in der Halbgeometrie, erste Simulation mit Wandkondensationsmodell zu verschiedenen Simulationszeiten....	58
Abbildung 42: links: Vergleich des simulierten Heliumgehaltes mit dem TH13-Experiment am MP201; rechts: Heliumgehaltsverteilung von der ersten Simulation mit dem Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP201	59
Abbildung 43: links: Vergleich des simulierten Heliumgehaltes mit dem TH13-Experiment am MP205; rechts: Heliumgehaltsverteilung der ersten	

Simulation mit dem Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP205	60
Abbildung 44: links: Vergleich des simulierten Heliumgehaltes mit dem TH13- Experiment am MP209; rechts: Heliumgehaltsverteilung der ersten Simulation mit dem Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP209.....	60
Abbildung 45: links: Vergleich des simulierten Heliumgehaltes mit dem TH13- Experiment am MP210; rechts: Heliumgehaltsverteilung der ersten Simulation mit dem Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP210.....	61
Abbildung 46 links: Vergleich des simulierten Heliumgehaltes mit dem TH13- Experiment am MP207; rechts: Heliumgehaltsverteilung der Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP207	62
Abbildung 47: links: Vergleich des simulierten Heliumgehaltes mit dem TH13- Experiment am MP212; rechts: Heliumgehaltsverteilung der ersten Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP212.....	62
Abbildung 48: Temperaturverteilung in der Halbgeometrie, erste Simulation mit Wandkondensationsmodell zu verschiedenen Simulationszeiten....	63
Abbildung 49: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH13- Experiment am MP2; rechts: Temperaturverteilung der ersten Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP2.....	65
Abbildung 50: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH13- Experiment am MP25; rechts: Temperaturverteilung der ersten Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP25	65
Abbildung 51: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH13- Experiment am MP27; rechts: Temperaturverteilung der ersten	

Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP27	66
Abbildung 52: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH13- Experiment am MP4; rechts: Temperaturverteilung der ersten Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP4.....	66
Abbildung 53: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH13- Experiment am MP46; rechts: Temperaturverteilung der ersten Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP46.....	67
Abbildung 54: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH13- Experiment am MP6; rechts: Temperaturverteilung der ersten Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP6.....	67
Abbildung 55: links: Vergleich der simulierten Temperatur mit dem TH13- Experiment am MP11; rechts: Temperaturverteilung der ersten Simulation mit Wandkondensationsmodell bei 3100 s und die Position von MP11	68
Abbildung 56: Vergleich des berechneten Drucks im Versuchsbehälter der ersten Simulation mit dem TH13-Experiment.....	69
Abbildung 57: Heliumgehaltsverteilung in der Halbgeometrie, zweite Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell.....	70
Abbildung 58: links: Vergleich der simulierten Heliumgehalte mit dem TH13- Experiment am MP201; rechts: Heliumgehaltsverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP201	71
Abbildung 59: links: Vergleich der simulierten Heliumgehalte mit dem TH13- Experiment am MP205; rechts: Heliumgehaltsverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP205	71

Abbildung 60: links: Vergleich der simulierten Heliumgehalte mit dem TH13-Experiment am MP209; rechts: Heliumgehaltsverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP209	72
Abbildung 61: links: Vergleich der simulierten Heliumgehalte mit dem TH13-Experiment am MP210; rechts: Heliumgehaltsverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP210	72
Abbildung 62: links: Vergleich der simulierten Heliumgehalte mit dem TH13-Experiment am MP207; rechts: Heliumgehaltsverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP207	73
Abbildung 63: links: Vergleich der simulierten Heliumgehalte mit dem TH13-Experiment am MP212; rechts: Heliumgehaltsverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP212	73
Abbildung 64: Temperaturverteilung in der Halbgeometrie, zweite Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell.....	74
Abbildung 65: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH13-Experiment am MP2; rechts: Temperaturverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP2.....	75
Abbildung 66: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH13-Experiment am MP25; rechts: Temperaturverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP25	75
Abbildung 67: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH13-Experiment am MP27; rechts: Temperaturverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP27	76

Abbildung 68: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH13-Experiment am MP4; rechts: Temperaturverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP4.....	76
Abbildung 69: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH13-Experiment am MP46; rechts: Temperaturverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP46.....	77
Abbildung 70: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH13-Experiment am MP6; rechts: Temperaturverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP6.....	77
Abbildung 71: links: Vergleich der simulierten Temperaturen mit dem TH13-Experiment am MP11; rechts: Temperaturverteilung der zweiten Simulation mit Wand- und Volumenkondensationsmodell bei 3100 s und die Position MP11	78
Abbildung 72: Vergleich der beiden simulierten Drücke im Versuchsbehälter beim TH13-Experiment	79
Abbildung 73: Vergleich der Kondensationsrate an den Wänden und im Volumen bei der zweiten Simulation beim TH13-Experiment	80
Abbildung 74: Tropfenverteilungen auf der Symmetrieebene bei der zweiten Simulation zu unterschiedlichen Zeitpunkten.....	80
Abbildung 75: Schnittzeichnung einer generischen Konvoi-Anlage	83
Abbildung 76: Dreidimensionale Geometrie eines generischen Containments (links) und ein numerisches Gitter (rechts)	84
Abbildung 77: Massenstromprofil der Dampfeinspeisung.....	85
Abbildung 78: Massenstromprofil der Wasserstoffeinspeisung.....	86
Abbildung 79: Temperaturprofil der Wasserstoff- und Dampfeinspeisung als Funktion der Zeit.....	87

Abbildung 80: Beschleunigungsfaktor (links) und Effizienz (rechts) Cray XE6 (Hermit)-Cluster mit steigender Prozessoranzahl	88
Abbildung 81: Wasserdampfverteilung im Containment zu verschiedenen Zeiten	.90
Abbildung 82: Wasserstoffverteilung im Containment zu verschiedenen Zeiten....	92
Abbildung 83: Temperaturverteilungen im Containment zu verschiedenen Zeiten.	94
Abbildung 84: Wasserstoff- und Wasserdampf-Konzentration im Containment zu verschiedenen Zeiten.....	95
Abbildung 85: Simulierte Druckprofile unter und oberhalb der Berstscheibe	96
Abbildung 86: Vergleich der Wandkondensationsrate im Containment mit dem Wasserdampfeinspeisungsmassenstrom	96
Abbildung 87: Druckentwicklung im generischen Sicherheitsbehälter nach dem Störfall.....	97
Abbildung 88: Temperaturprofil auf der Ebene der Einspeisungsstelle bei 449,6 s	98

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Diffusionskoeffizient [73, 74]	24
Tabelle 2: Gitterpunktanzahl von verschiedenen Netzen	34
Tabelle 3: Einspeisungsstelle.....	37
Tabelle 4: Position der Monitorpunkte zur Messung der Temperatur.....	42
Tabelle 5: Position der Monitorpunkte zur Messung der Heliumkonzentration	58
Tabelle 6: Position der Monitorpunkte zur Messung der Temperatur.....	64

Anhang

Für alle Rechnungen wird der kommerzielle CFD-Code ANSYS CFX 14.0 verwendet. Das Programmsystem besteht aus Preprozessor (CFX-Pre), Rechenprogramm (CFX-Solver) und Postprozessor (CFX-Post). Um das Wandkondensationsmodell für eine zweiphasige Simulation mit dem Volumenkondensationsmodell zu kombinieren, wurde von ANSYS ein „Customized Solver“ entwickelt. Alle Einstellungen der Simulation können in CCL-Dateien (CFX Command Language) ausgegeben werden, welche als Textdatei mit einem Texteditor bearbeitet werden kann. Als Beispiel ist die Implementierung des neu entwickelten Volumenkondensationsmodells für eine zweiphasige Simulation des TH2-Experiments in einer CCL dargestellt.

LIBRARY:

CEL:

EXPRESSIONS:

```
Global Disp Droplet Diameter = 100 [micron]
Initial Disp Volume Fraction = 1e-5
Exp Reference Pressure = 1.042 [bar]
My Mix Kinematic Diffusivity = (0.292[cm^2 s^-1 bar] / Exp \
Reference Pressure) * (Gas.Temperature / 313.0[K])^(3/2)
My H2O Psat A = 5.11564
My H2O Psat B = 1687.537 [K]
My H2O Psat C = 230.17 [K]
Disp Volume Fraction = Liquid.Volume Fraction
Disp Diameter = Global Disp Droplet Diameter
Disp Radius = Disp Diameter/2.0
Disp Interfacial Area Density Calc = 3 * Disp Volume Fraction \
/ Disp Radius
Disp Volume Fraction Max = 0.634
Disp Volume Fraction Min = 1e-8
Disp Interfacial Area Density Switch = if(Disp Volume Fraction \
<= Disp Volume Fraction Min,0,1)*if(Disp Volume Fraction >= Disp \
Volume Fraction Max,0,1)
Disp Interfacial Area Density = Disp Interfacial Area Density \
Calc * Disp Interfacial Area Density Switch
Cont H2Og Psat = 1[bar] * 10^(My H2O Psat A - My H2O Psat B / \
(Saturation Temp(Gas.Temperature) + My H2O Psat C - 273.15[K]))
```

```

Cont H2Og Mol Frac Sat = Cont H2Og Psat / Absolute Pressure
Cont Mix Molar Mass Sat = Cont H2Og Mol Frac Sat * H2O Molar \
Mass + (1 - Cont H2Og Mol Frac Sat) * Air Molar Mass
Cont H2Og Mass Frac Sat = Cont H2Og Mol Frac Sat * (H2O Molar \
Mass / Cont Mix Molar Mass Sat)
Cont H2Og Mass Frac = Gas.H2Og.Mass Fraction
Cont Mass Frac Diff Calc = Cont H2Og Mass Frac Sat - Cont H2Og \
Mass Frac
Cont Mass Frac Switch = if(Gas.H2Og.Conservative Mass Fraction \
>1,0,1) * if(Gas.Conservative Mass Fraction <0,0,1)
Cont Mass Frac Diff = Cont Mass Frac Diff Calc * Cont Mass \
Frac Switch
Slip Vel = sqrt ((Liquid.u - Gas.u)^2 + (Liquid.v - Gas.v)^2 + \
(Liquid.w - Gas.w)^2)
Reynolds Number = Gas.Density * Slip Vel * Disp Diameter / \
Gas.Dynamic Viscosity
Schmidt Number = Gas.Dynamic Viscosity / (Gas.Density * My Mix \
Kinematic Diffusivity)
Sherwood Number = 2 + 0.6 * (Reynolds Number)^(1/2) * (Schmidt \
Number)^(1/3)
Mass Transfer Coeff = Sherwood Number * My Mix Kinematic \
Diffusivity / (Disp Diameter)
My Toroid Radius All = sqrt((x - 135 [mm])^2+(z-6700[mm])^2)
My Toroid Clipping = if(My Toroid Radius All <= 42 [mm],0,1)
Mass Transfer Rate = Gas.Density * Mass Transfer Coeff * Disp \
Interfacial Area Density * Cont Mass Frac Diff * if(Wall Distance <= \
3.0[mm],0,1)*My Toroid Clipping
Mass Transfer Rate Cond Calc = min(Mass Transfer Rate,0 \
[kg m^-3 s^-1])
Continous Volume Fraction Min = 1e-8
Mass Transfer Rate Cond = Mass Transfer Rate Cond Calc * \
Gas.Volume Fraction / max(Continous Volume Fraction Min,Gas.Volume \
Fraction)
Heat Source Term Cond = -Latentheat * Mass Transfer Rate Cond
END
END

ADDITIONAL VARIABLE: AV Mass Transfer Rate Cond
Option = Definition
Tensor Type = SCALAR
Units = [kg m^-3 s^-1 ]

```

```

Variable Type = Specific
END
ADDITIONAL VARIABLE: AV Cont Mass Frac Diff
Option = Definition
Tensor Type = SCALAR
Units = []
Variable Type = Specific
END
ADDITIONAL VARIABLE: AV Disp Interfacial Area Density
Option = Definition
Tensor Type = SCALAR
Units = [m^-1]
Variable Type = Specific
END

MATERIAL: GasMixture
Material Group = User
Materials List = Air Ideal Gas,H2Og
Option = Variable Composition Mixture
END
END

FLOW: Flow Analysis 1
DOMAIN: Fluid Doman
FLUID DEFINITION: Gas
Material = GasMixture
MORPHOLOGY:
Option = Continuous Fluid
END
END
FLUID DEFINITION: Liquid
Material = H2O1
MORPHOLOGY:
Mean Diameter = Global Disp Droplet Diameter
Option = Dispersed Fluid
END
END

FLUID MODELS:
ADDITIONAL VARIABLE: AV Cont Mass Frac Diff
Option = Fluid Dependent

```

```

END
ADDITIONAL VARIABLE: AV Disp Interfacial Area Density
  Option = Fluid Dependent
END
ADDITIONAL VARIABLE: AV Mass Transfer Rate Cond
  Option = Fluid Dependent
END
FLUID: Gas
  ADDITIONAL VARIABLE: AV Cont Mass Frac Diff
    Additional Variable Value = Cont Mass Frac Diff
    Option = Algebraic Equation
  END
  ADDITIONAL VARIABLE: AV Disp Interfacial Area Density
    Additional Variable Value = Disp Interfacial Area Density
    Option = Algebraic Equation
  END
  ADDITIONAL VARIABLE: AV Mass Transfer Rate Cond
    Additional Variable Value = Mass Transfer Rate Cond
    Option = Algebraic Equation
  END
END
END

FLUID PAIR: Gas | Liquid
  INTERPHASE HEAT TRANSFER:
    Option = Ranz Marshall
  END
  MOMENTUM TRANSFER:
    DRAG FORCE:
      Option = Schiller Naumann
    END
  END
END

INITIALISATION:
  FLUID: Gas
    INITIAL CONDITIONS:
      VOLUME FRACTION:
        Volume Fraction = 1-Initial Disp Volume Fraction
      END
    END
  END

```

```

END
FLUID: Liquid
  INITIAL CONDITIONS:
    VOLUME FRACTION:
      Volume Fraction = Initial Disp Volume Fraction
    END
  END
END
END
END

SUBDOMAIN: Subdomain Condensation
FLUID: Gas
  SOURCES:
    EQUATION SOURCE: energy
      Option = Source
      Source = Heat Source Term Cond
    END
    EQUATION SOURCE: continuity
      Option = Fluid Mass Source
      Source = Mass Transfer Rate Cond
    END
  END
END
FLUID: Liquid
  SOURCES:
    EQUATION SOURCE: continuity
      Option = Fluid Mass Source
      Source = -Mass Transfer Rate Cond
    END
  END
END
END

SOLVER CONTROL:
  MULTIPHASE CONTROL:
    Volume Fraction Coupling = Coupled
  END
END
END

```

Um das Wandkondensationsmodell für die zweiphasige Simulation des TH2-Experiments zu aktivieren, müssen folgende Einstellungen mittels CCL implementiert werden.

```
FLOW: Flow Analysis 1
  DOMAIN: Fluid Domain
    BOUNDARY: Fluid_Solid_Interface Side 1
      FLUID: Gas
        BOUNDARY CONDITIONS:
          COMPONENT: H2Og
            Option = Wall Condensation Model
          END
        END
      END
    END
  FLUID MODELS:
    FLUID: Gas
      WALL CONDENSATION MODEL:
        Option = Concentration Boundary Layer Model
      END
    COMPONENT: H2Og
      Kinematic Diffusivity = My Mix Kinematic Diffusivity
      Option = Transport Equation
    CONDENSATION MODEL:
      Homogeneous Binary Mixture = H2Ogl
      Option = Condensable
    END
  END
END
END
END
```