



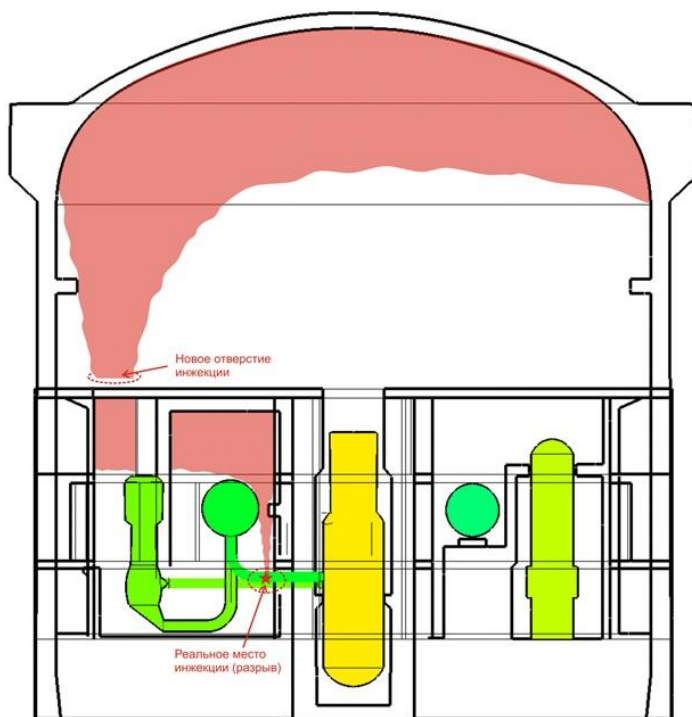
Математическое моделирование в задачах водородной безопасности

Готов В.Ю., Канаев А.А.

ИБРАЭ РАН Институт проблем безопасного развития
атомной энергетики РАН, Москва

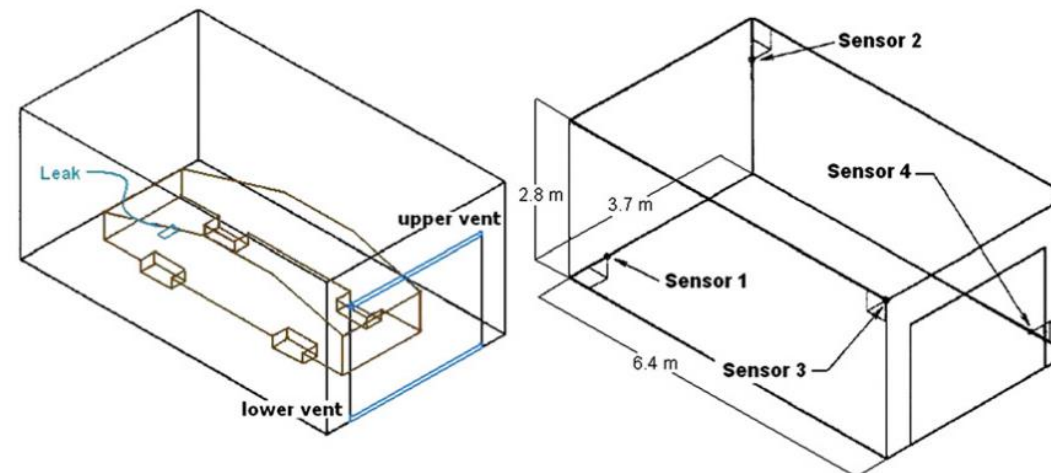
glotov-v@yandex.ru

Водородная взрывобезопасность АЭС



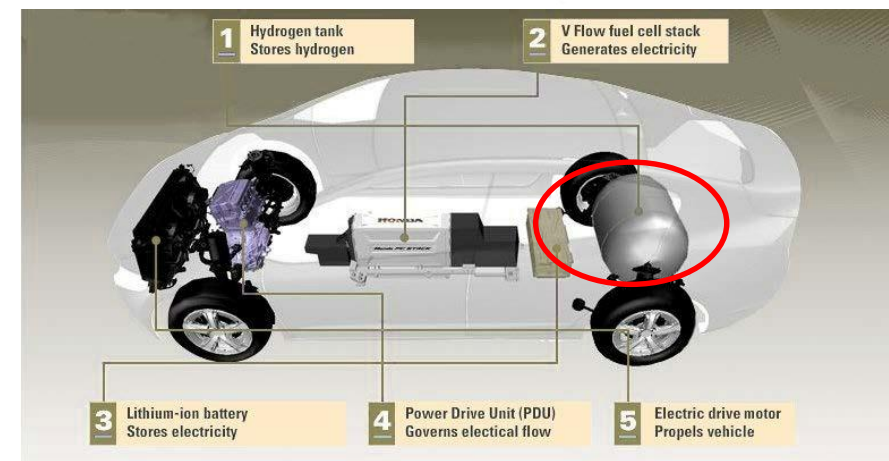
Упрощенная схема контейнмента с выделенной зоной инжекции и схема аппроксимации новой зоны инжекции

Безопасность водородной энергетики



Honda FCX clarity	Parameters
Storage pressure [1]	35 MPa
Storage volume [1]	171 L
TPRD diameter	4.2 mm
Storage temperature	20 °C

[1] 2009 Honda FCX Specifications.
<http://www.hondaclarity.org/>.



- Основные изучаемые процессы
 - Истечение
 - Распространение
 - Горение/детонация
- Сопутствующие процессы
 - Струи (дозвук/сверхзвук)
 - Естественная конвекция
 - Турбулентность
 - Стратификация
 - Конденсация пара
 - Теплоперенос излучением
- Влияние работы систем безопасности
 - Рекомбинаторы, спринклеры, теплообменники



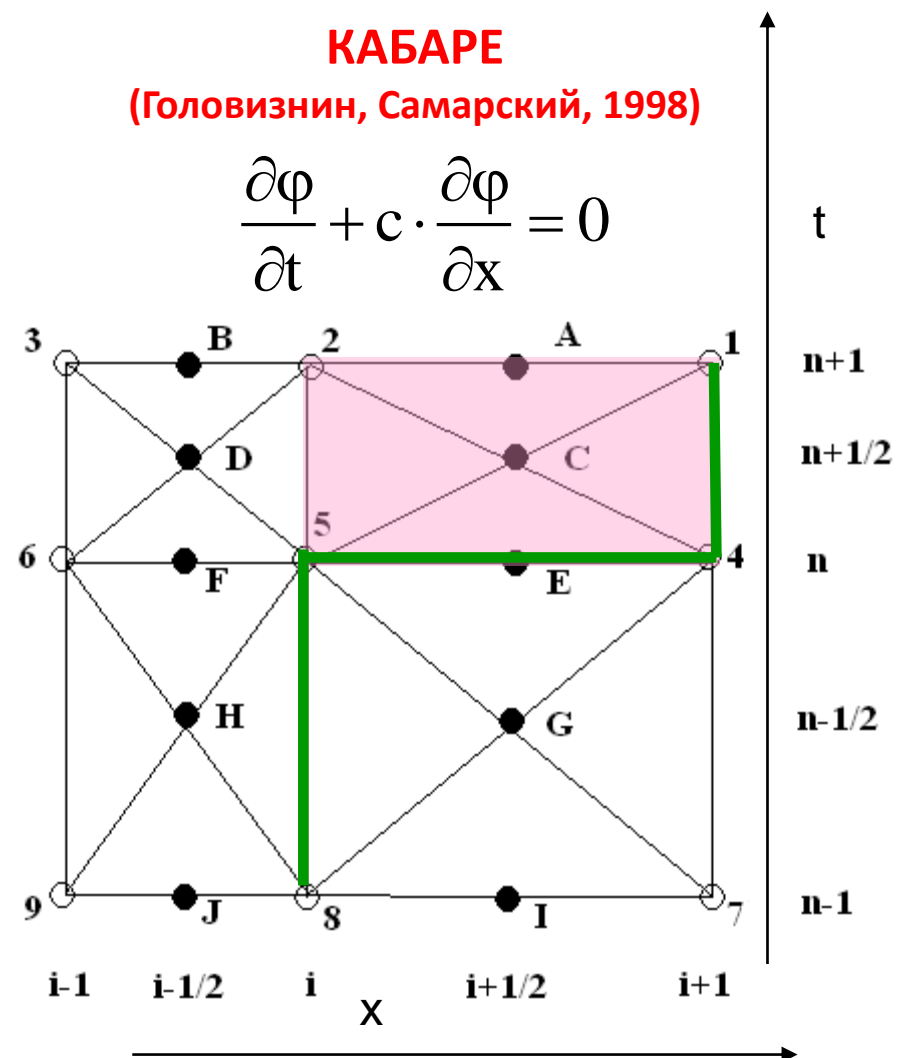
Код CABARET-SC1

ЗАДАЧИ

- 1. Повышение прогнозных возможностей:**
 - неявное моделирование подсеточных масштабов турбулентности без использования настроечных параметров с помощью методики КАБАРЕ. Анализ сеточной сходимости решения.
- 2. Повышение вычислительной эффективности:**
 - сжимаемое и слабосжимаемое приближения для «быстрых» и «медленных» процессов;
 - асинхронное интегрирование по времени;
 - оптимизация MPI-обменов (ISend, IRecv).

КАБАРЕ
(Головизнин, Самарский, 1998)

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + c \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0$$





Математическая модель

Модель многокомпонентной смеси газов для «медленных» течений ($M \ll 1$)

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_k \vec{u}) = -\operatorname{div}(\vec{j}_k), \quad k = 1, \dots, N \\ \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u_i \vec{u}) + \nabla_i P^* = \nabla_i \tau_{ij} + \rho g_i, \quad i, j = 1, \dots, 3 \\ \frac{\partial \rho c_v T}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho c_p T \vec{u}) = -\operatorname{div} \left(\vec{q} + \left(\sum_{k=1, N} c_{p,k} \vec{j}_k \right) T \right) + Q_s \end{array} \right.$$

$$P = P_0 + P^*$$

$$P_0(t) = \frac{\int_V \rho \varepsilon dV}{\int_V \frac{1}{\gamma - 1} dV}, \quad \nabla P_0 = 0$$

- «термодинамическое» давление

$$P^* = c^2 (\rho - \rho_0^*),$$

- «динамическое» давление (приближение слабой сжимаемости, вводится искусственная сжимаемость)

$$\rho_0^*(t, \vec{r}) = \rho(t, \vec{r}) \left(P_0(t) / P(t, \vec{r}) \right)^{\frac{1}{\gamma(t, \vec{r})}}$$

Нагрев газа при адиабатическом сжатии

1D область $L=100\text{м}$, $S=1\text{х}1\text{м}^2$

Начальное состояние: воздух $P=101325\text{Па}$, $T=300\text{К}$

ГУ на стенках: проскальзывание, $Q=0\text{Вт/м}^2$

ГУ на входе: пар с расходом $q=0,5\text{кг/с}$ и $T=300\text{К}$

Теплопроводность, вязкость и диффузия выключены

$$\tilde{T}(\tilde{x}, t) = \begin{cases} \tilde{T}_{in} \cdot (1 - \tilde{x}(t))^{-\gamma_a(\gamma_v - 1)/\gamma_v}, & \tilde{x} < \tilde{x}_i(t) \\ \tilde{T}_a(t), & \tilde{x} > \tilde{x}_i(t) \end{cases}$$

$\tilde{x}_i(t) = 1 - \tilde{P}(t)^{-1/\gamma_a}$ - положение контактного разрыва

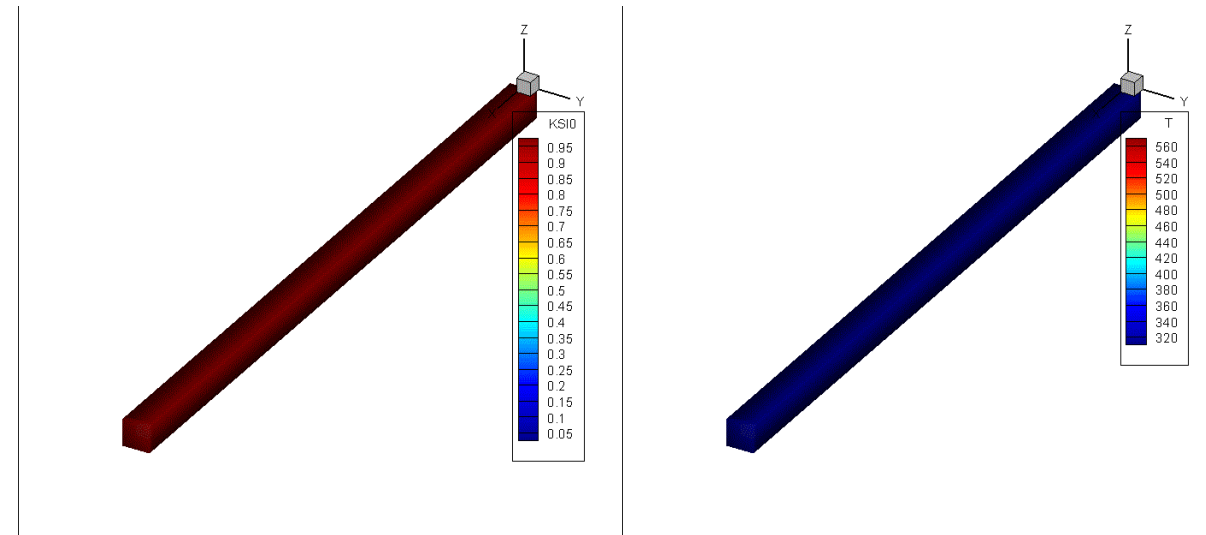
$\tilde{P}(t) = T_a(t)^{\gamma_a/(\gamma_a - 1)}$ - давление

Уравнение для температуры воздуха

$$(\gamma_v - 1)(\tilde{T}_a - 1) + (\gamma_a - 1)\left(\tilde{T}_a^{\gamma_a/(\gamma_a - 1)} - \tilde{T}_a\right) = \beta\gamma_v(\gamma_a - 1)\tilde{T}_{in}$$

На контактном разрыве температура будет испытывать разрыв первого рода

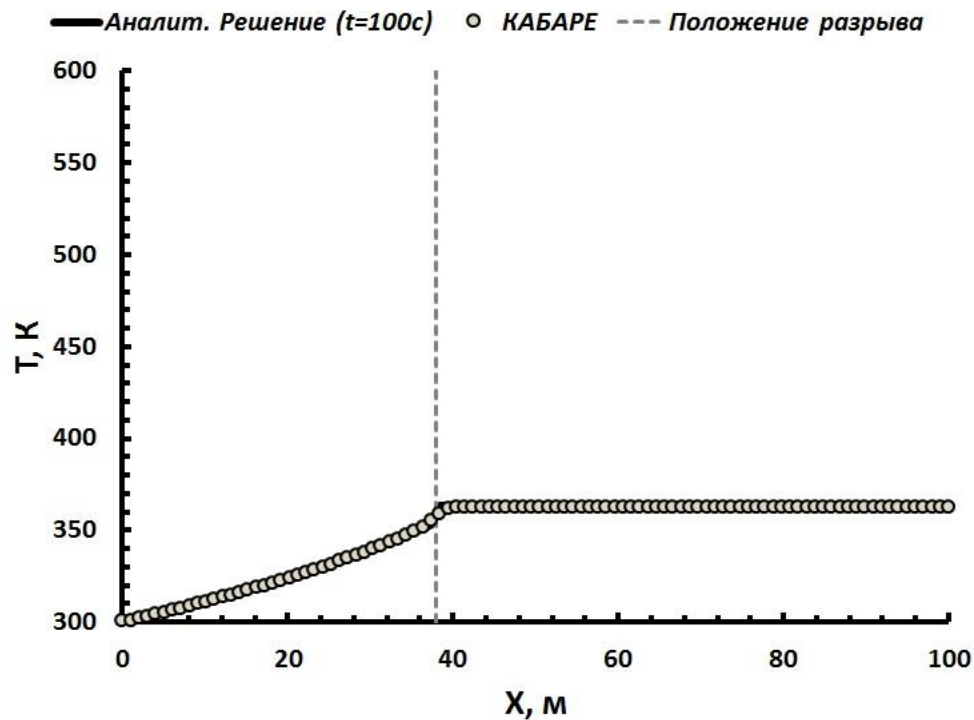
$$\tilde{T}_i^{(-)} = \tilde{T}_{in} \cdot \tilde{P}^{(\gamma_v - 1)/\gamma_v} \quad \tilde{T}_i^{(+)} = \tilde{P}^{(\gamma_a - 1)/\gamma_a}$$



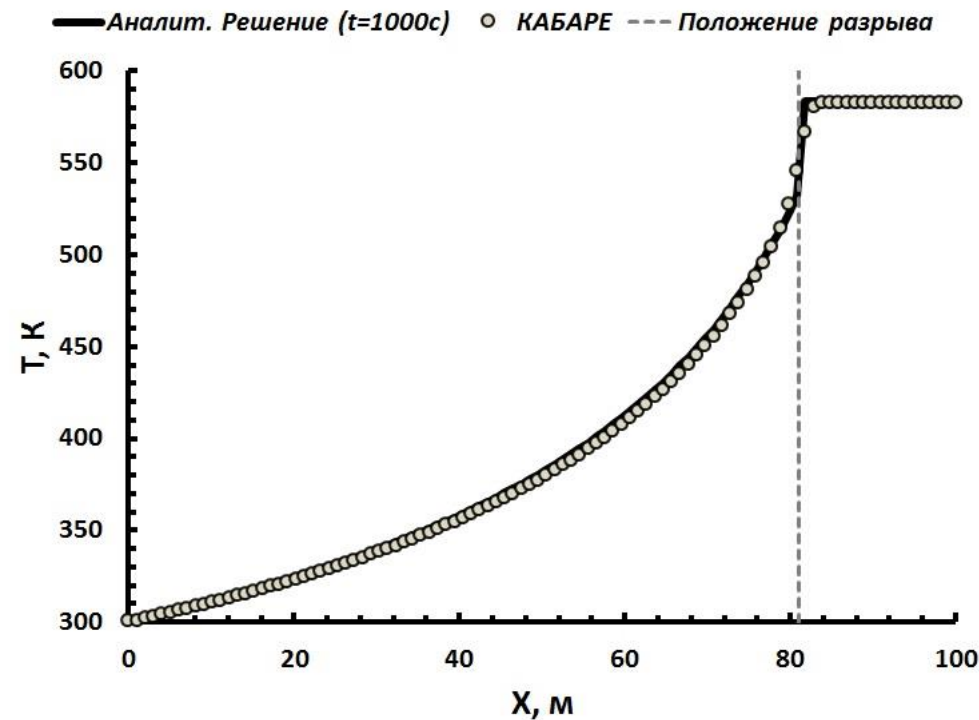
Массовая доля воздуха

Температура

Нагрев газа при адиабатическом сжатии (результаты)



Профиль температуры в момент времени $t=100\text{c}$



Профиль температуры в момент времени $t=1000\text{c}$

Модель многокомпонентной смеси газов для «быстрых» течений ($M \sim 1, M > 1$)

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_k \vec{u}) = -\operatorname{div}(\vec{j}_k), \quad k = 1, \dots, N \\ \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u_i \vec{u}) + \nabla_i P = \nabla_i \tau_{ij} + \rho g_i, \quad i, j = 1, \dots, 3 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}((\rho E + P)\vec{u}) = \nabla_i (\tau_{ij} u_j) + \rho(\vec{g}, \vec{u}) - \operatorname{div} \left(\vec{q} + \left(\sum_{k=1, N} c_{p,k} \vec{j}_k \right) T \right) + Q_s, \quad i, j = 1, \dots, 3 \end{array} \right.$$

$$E = \frac{1}{2}(\vec{u}, \vec{u}) + \varepsilon$$

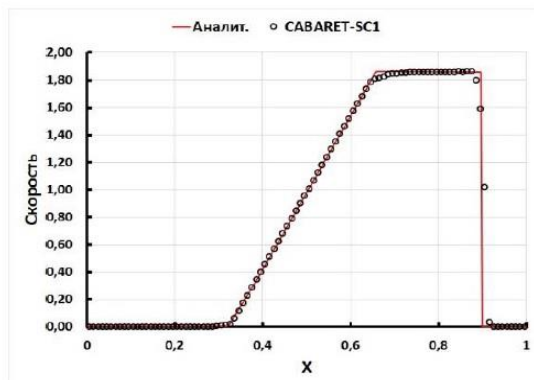
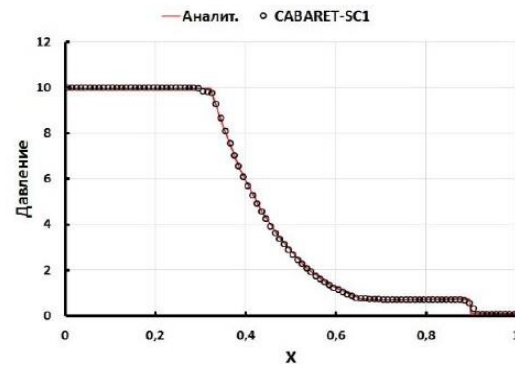
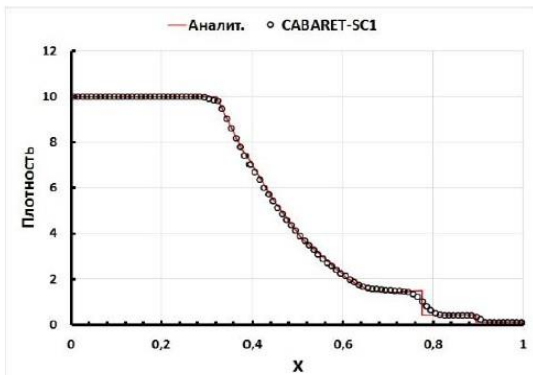
$$P = (\gamma - 1) \rho \varepsilon$$

Задача Римана о распаде произвольного разрыва

Задача Сода

$$(\rho, p, u)_L = (10, 10, 0)$$

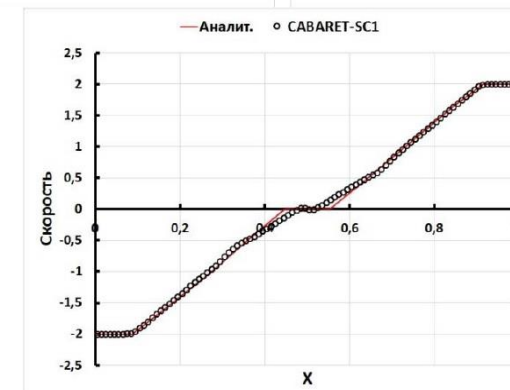
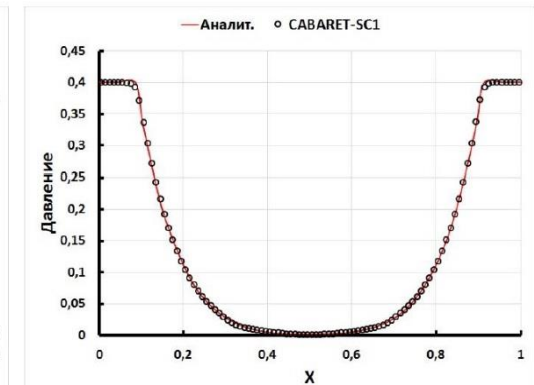
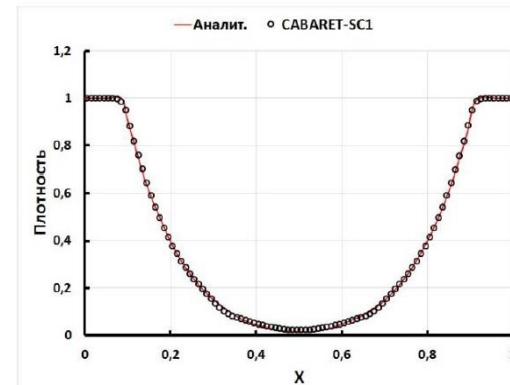
$$(\rho, p, u)_R = (0.125, 0.1, 0)$$



Разбегание 2-ух сверхзвуковых потоков

$$(\rho, p, u)_L = (1, 0.4, -2)$$

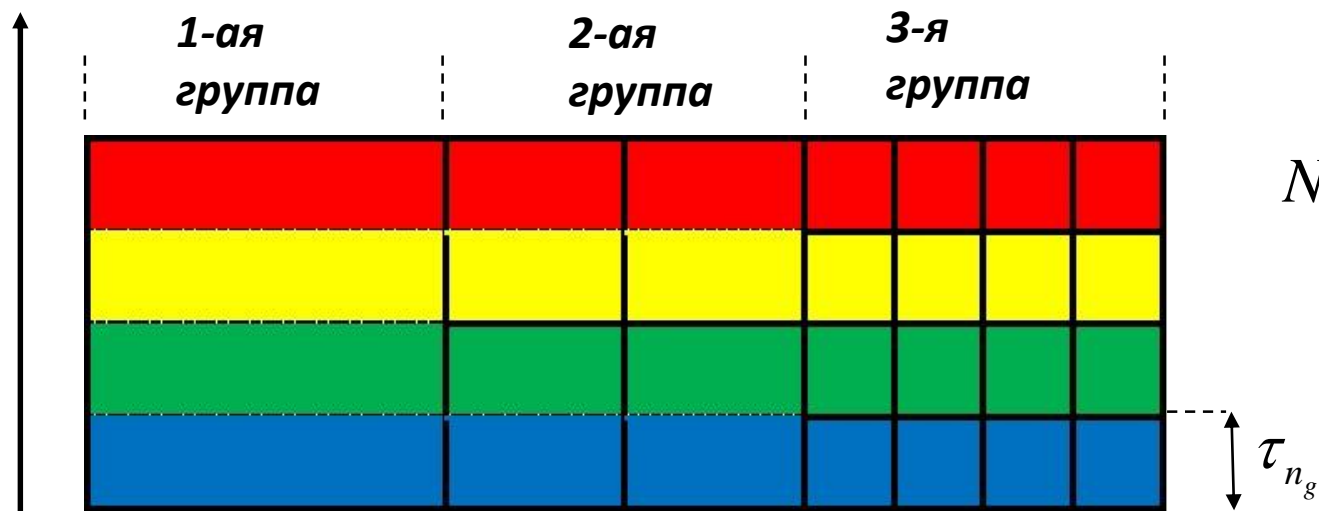
$$(\rho, p, u)_R = (1, 0.4, 2)$$





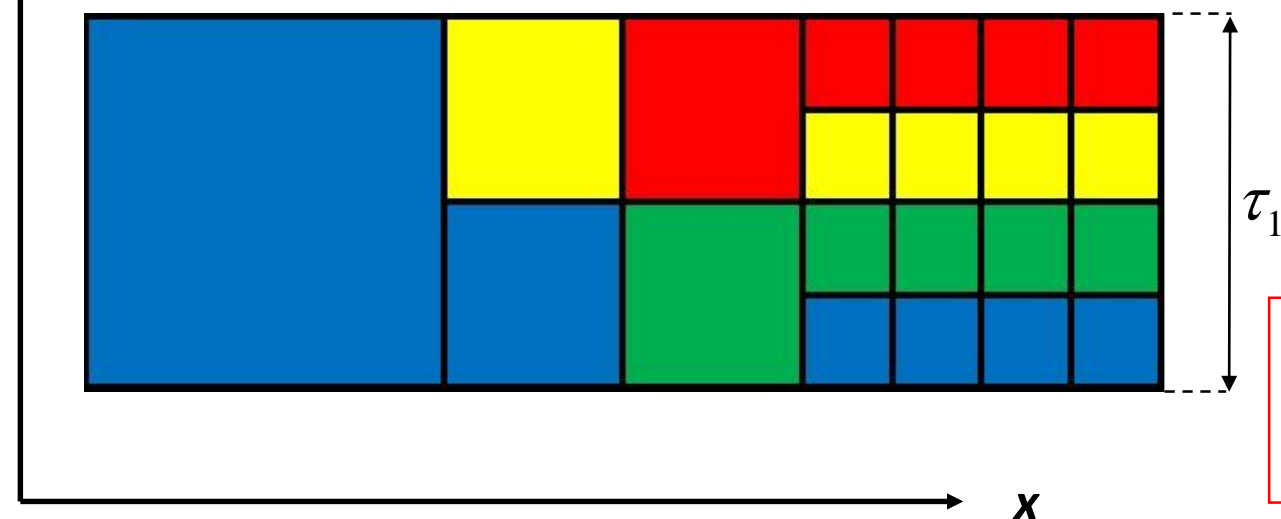
Асинхронное интегрирование уравнений по времени

Синхронное интегрирование



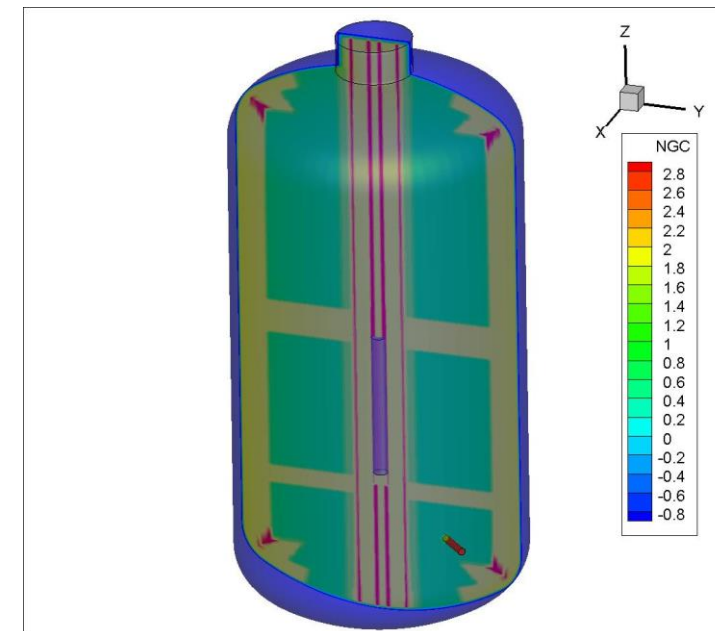
$$N_{Sync} = 2^{n_g - 1} n_c$$

Асинхронное интегрирование



$$N_{Async} = \sum_{i=1}^{n_g} 2^{i-1} n_{ci}$$

$$A = \frac{N_{Sync}}{N_{Async}} = \sum_{i=1}^{n_g} \left(2^{n_g - i} \cdot \frac{n_{ci}}{n_c} \right)$$



Elem[1] = 898057 / 2151630
(41.738449%)

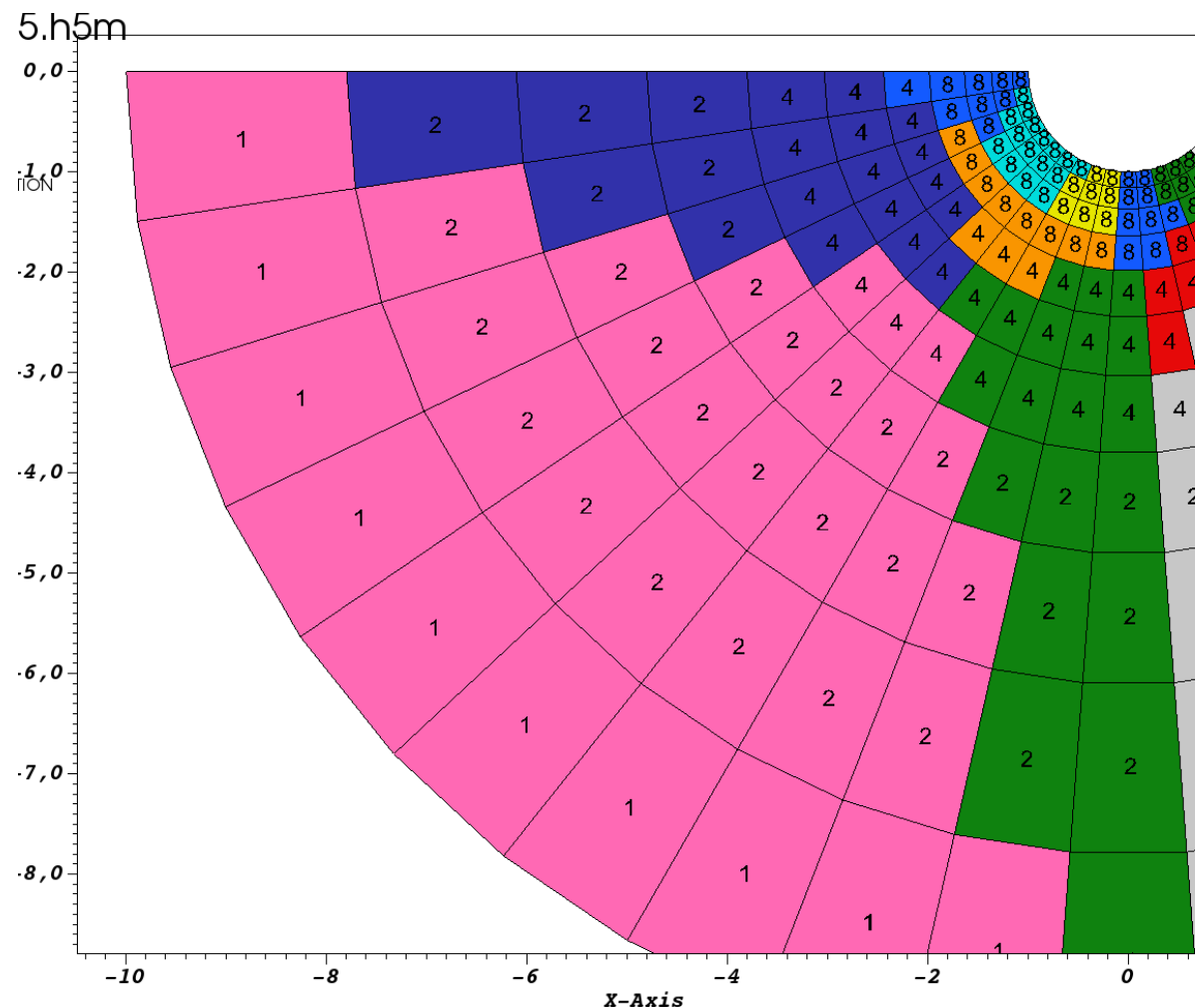
Elem[2] = 1232828 / 2151630
(57.297398%)

Elem[3] = 20745 / 2151630
(0.964153%)

acceleration = **2.497037**

Асинхронное интегрирование по времени

$$\tau < CFL \frac{l}{|v| + c}$$



Вычислительная сложность (вес)



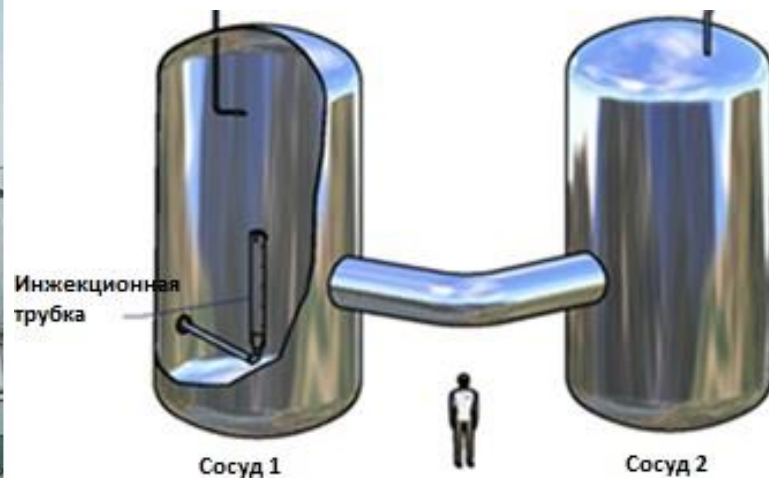
Примеры расчетов

1. Распространение водорода

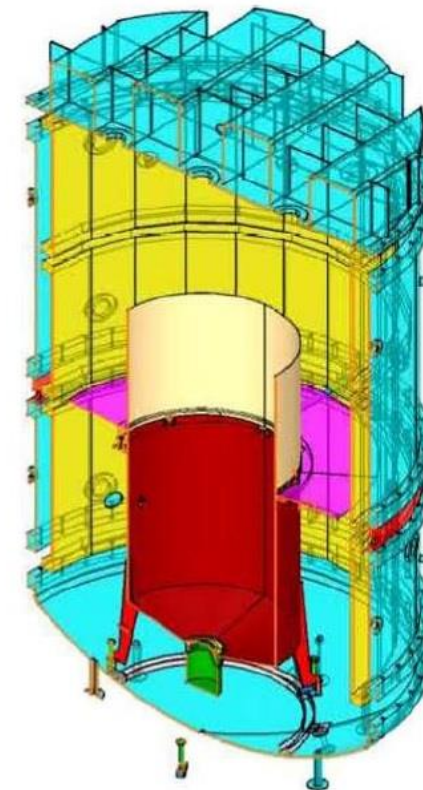
Программы международных экспериментальных исследований в области обеспечения ВБ на АЭС

Программа	Годы проведения	Основные явления	Участие ИБРАЭ
OECD/NEA: SETH	2001-2006	1. <i>Изучение механизмов, приводящих к стратификации водорода (струи и всплывающие струи, транспорт и стратификация)</i>	-
OECD/NEA: SETH-2	2007-2010	1. <i>Изучение механизмов разрушения стратификации (струи с отрицательной плавучестью, всплывающие струи, работа систем безопасности – форсунка, теплообменник-конденсатор, рекомбинатор (тепловой эффект))</i>	-/+
EURATOM- ROSATOM: ERCOSAM- SAMARA	2010-2014	1. <i>Формирование стратификации легкого газа в сценарии постулируемой ТА с потерей теплоносителя (LOCA) на LWR</i> 2. <i>Разрушение стратификации легкого газа при работе систем безопасности в отмасштабированных условиях</i>	+
OECD/NEA: HYMERES	(2013-2016)	1. <i>Разрушение стратификации струями в более реалистичных условиях (взаимодействие струй с препятствиями)</i> 2. <i>Влияние комбинированной работы систем безопасности на распределение легкого газа</i> 3. <i>Процессы перемешивания, связанные с работой систем безопасности</i>	+
OECD/NEA: HYMERES-2	с 2017 по н.в.	1. <i>Расширение базы данных по разрушению стратификации струями, взаимодействующими с препятствиями</i> 2. <i>Анализ влияния излучения</i> 3. <i>Расширение базы данных по перемешиванию работой систем безопасности</i>	+

Крупномасштабные многоблочные экспериментальные установки

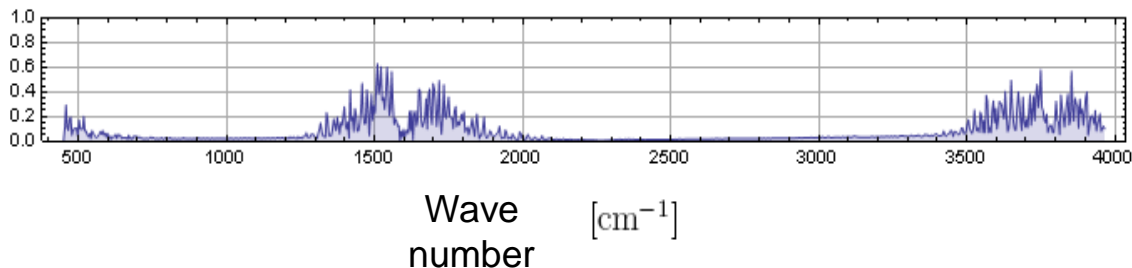


Экспериментальная установка PANDA (PSI, Швейцария)
Объем 2-х сосудов 183,3 м³



Экспериментальная установка MISTRA (CEA, Франция)
Объем сосуда 97,6 м³

Моделирование теплообмена излучением



В экспериментах на крупномасштабной установке PANDA парциальное давление пара находится в пределах 0.8 и 1.3 бар. Можно вычислить «оптическую толщину» слоя

$$\tau = \kappa P L;$$

κ = «средний» коэффициент поглощения для пара ($\text{atm}^{-1} \text{m}^{-1}$)

Аппроксимация по Планку (для $\tau \ll 1$):

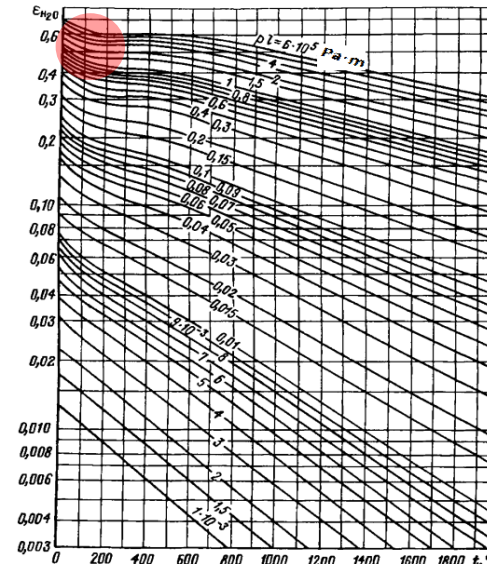
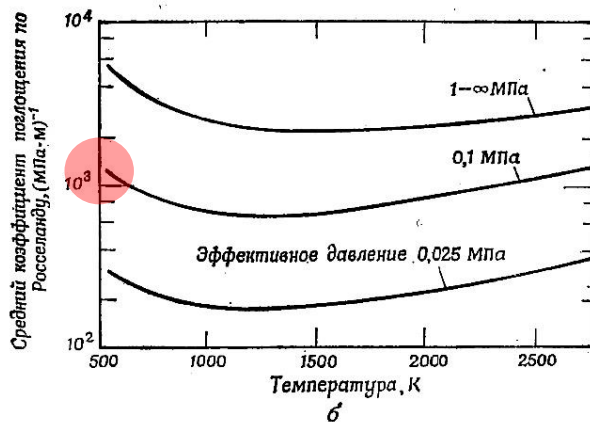
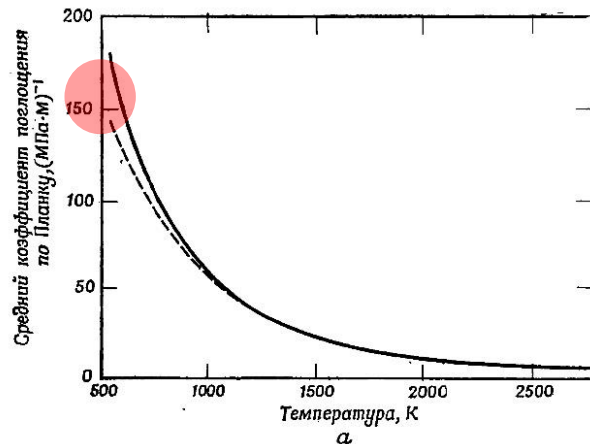
$$\kappa_P = 18.4 (555.56/T) [1 - 0.054(555.56/T)^2] = 18.4 \text{ atm}^{-1} \text{ m}^{-1} \text{ при } 555.56\text{K (288 } ^\circ\text{C)}$$

Аппроксимация по Росселанду (для $\tau \gg 1$):

$$\kappa_R \sim 120 \text{ atm}^{-1} \text{ m}^{-1} \text{ при } 555.56\text{K и } 1\text{бар.}$$

Т.к. $L=0(1)$;

$$\tau = 15-160 \text{ (в зависимости от условий)} \gg 1$$



Теплообмен со стенкой

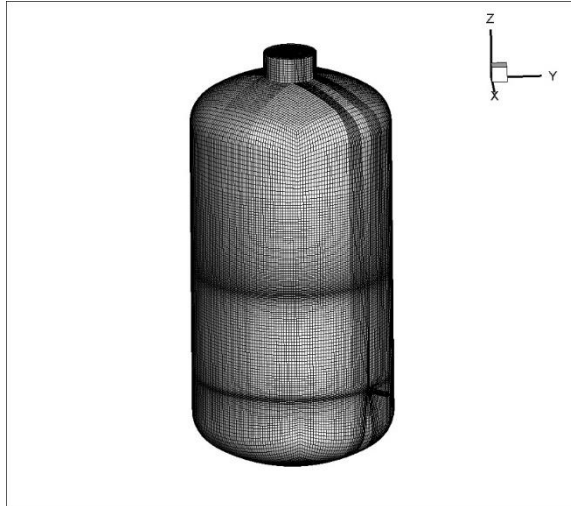
$$W_g = -\varepsilon_{wg} \sigma (T_{wall}^4 - T_g^4)$$

$$\varepsilon_{wg} = \frac{\varepsilon_g \varepsilon_{wall}}{\varepsilon_{wall} + \varepsilon_g (1 - \varepsilon_{wall})}$$

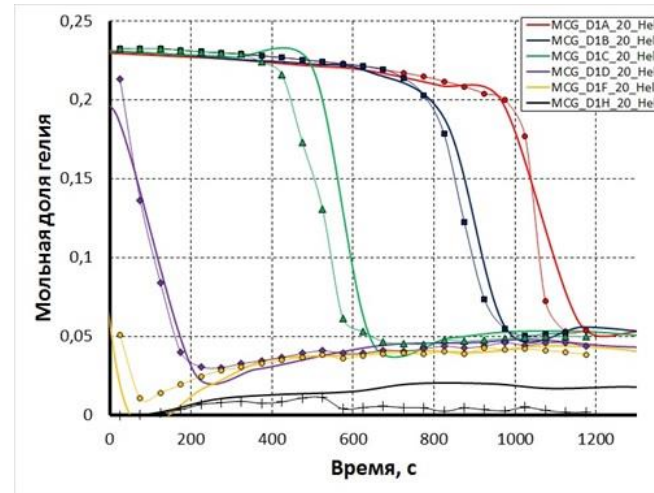
Модель Росселанда лучистой теплопроводности

$$k_{sum} = k + k_R, \quad k_R = \frac{16}{3} \sigma l_R T^3$$

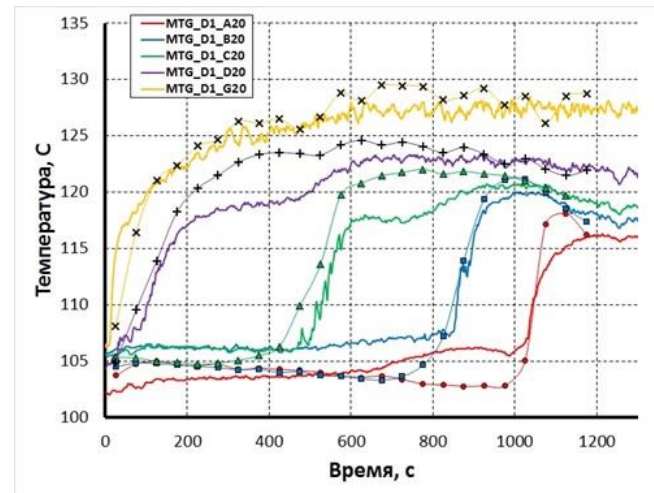
Размытие стратификации легкого пара струей горячего пара



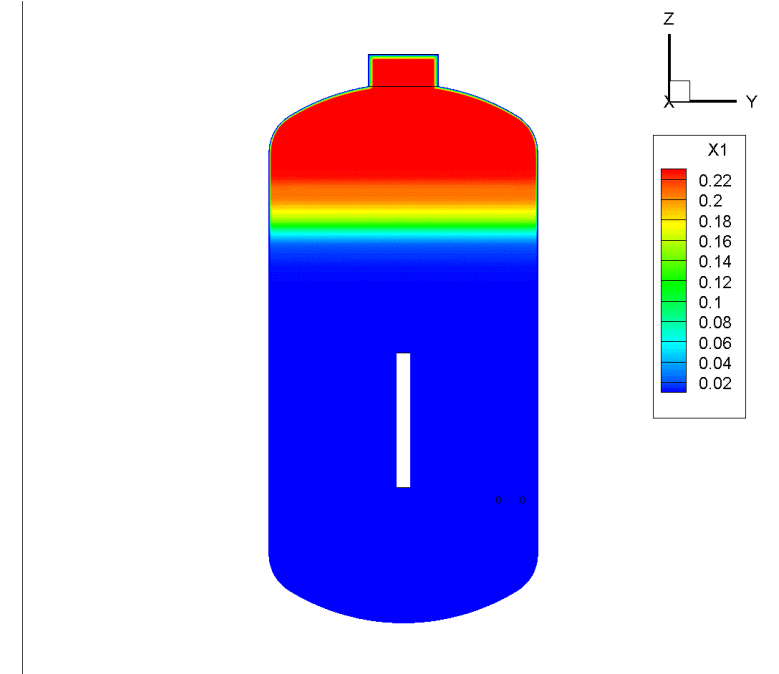
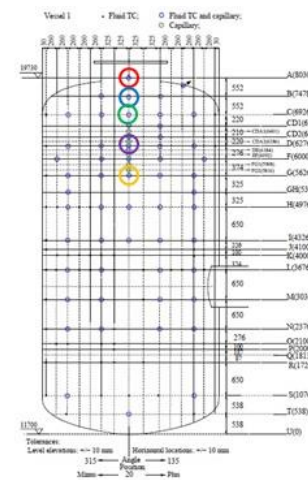
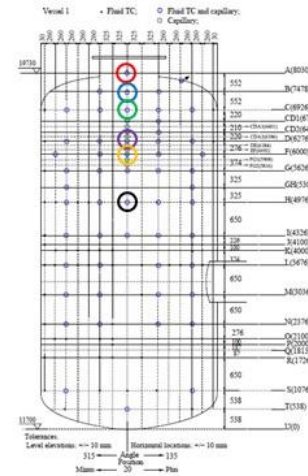
Сеточная модель
Эксперимент
HYMERES-2 H2P1_0



Мольная доля гелия



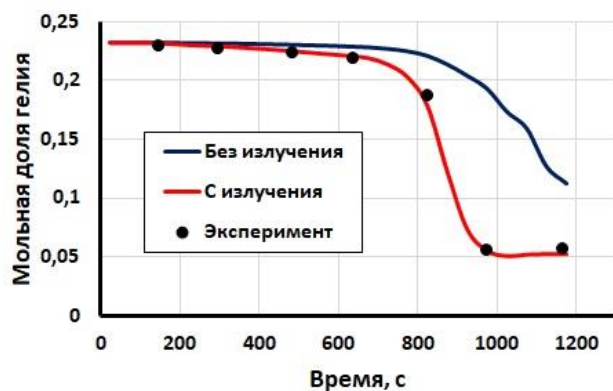
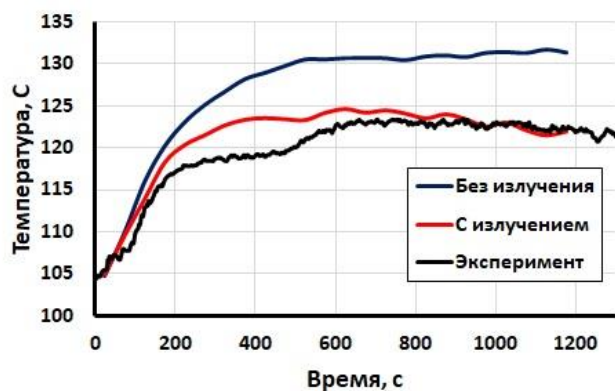
Температура газа



Мольная доля гелия

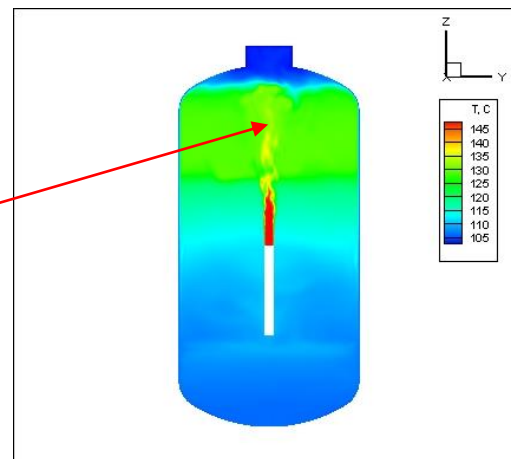
Влияние теплообмена излучением на динамику размытия стратификации

- ✓ Завышение средней температуры газа
- ✓ Снижение скорости размытия стратификации, возникновение «застойных» зон

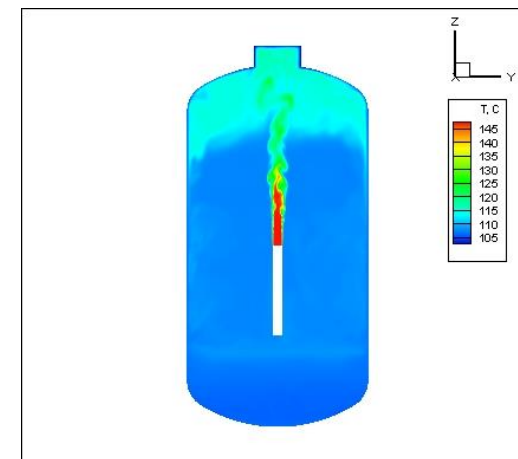


Температура

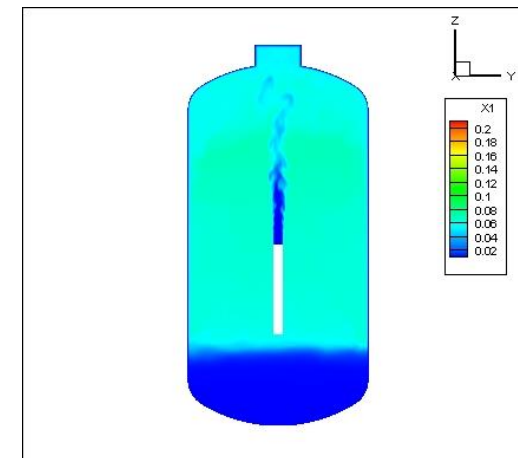
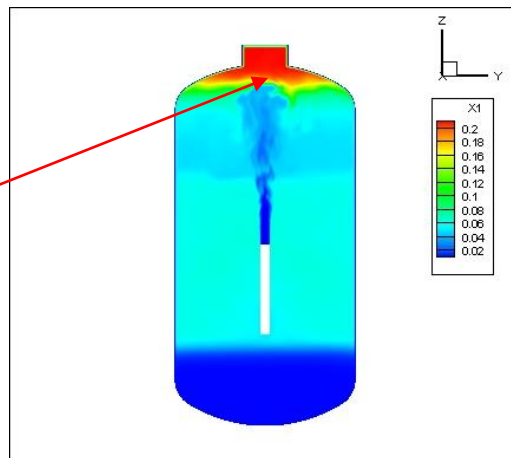
Без излучения



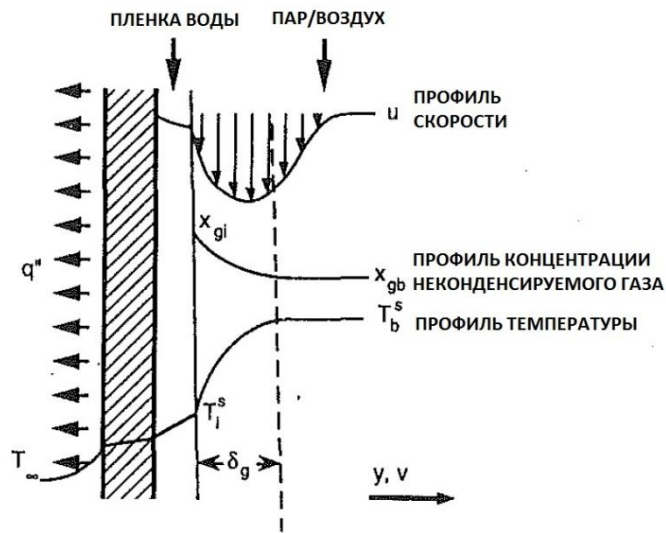
С излучением



Мольная доля гелия



Конденсация пара



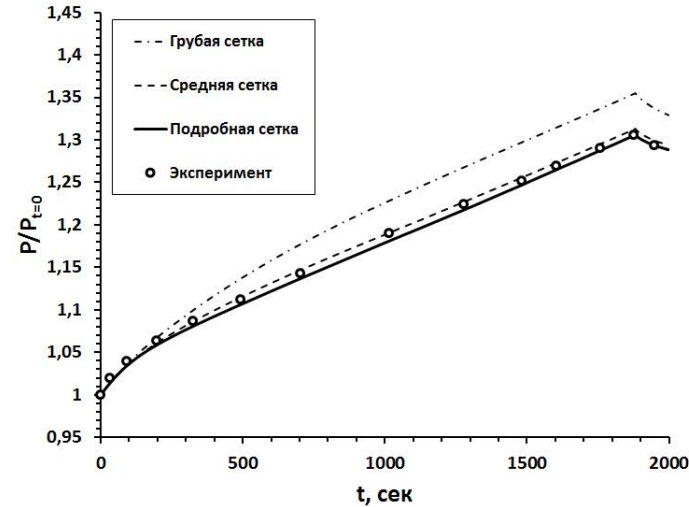
Модель диффузионного слоя в приближении тонкой пленки

Диффузионный поток пара

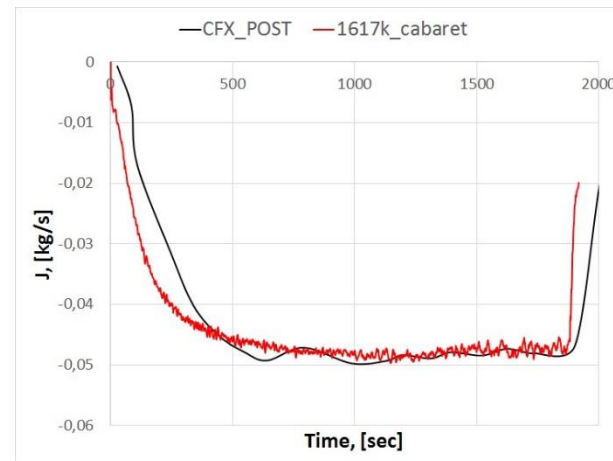
$$j_{i,v} = \frac{M_v}{M} \rho D \frac{\partial \ln(x_{i,g})}{\partial y}$$

Конденсационный поток тепла на стенку

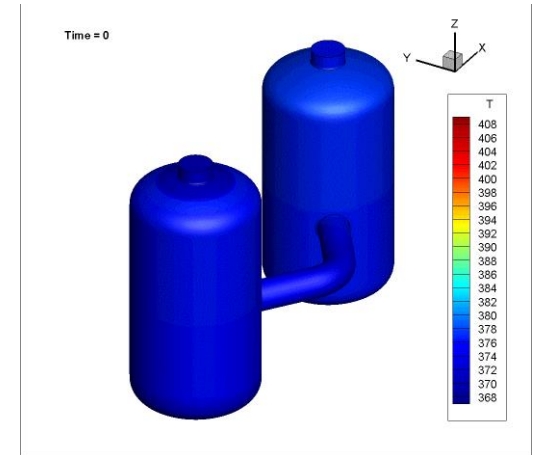
$$q_c'' = h_{fg} j_{i,v}$$



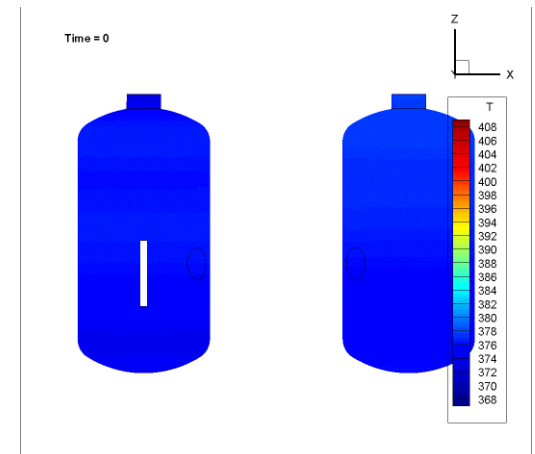
Давление (Эксперимент РЕ4, фаза накачки пара)



Скорость конденсации пара, сравнение с CFX PostTest (k-omega based SST)

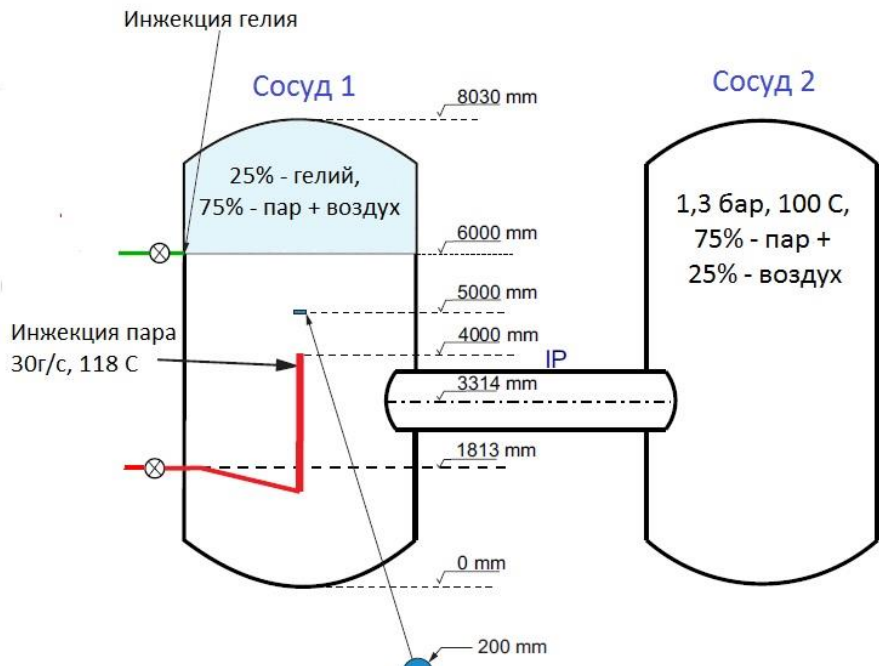


Температура стенок

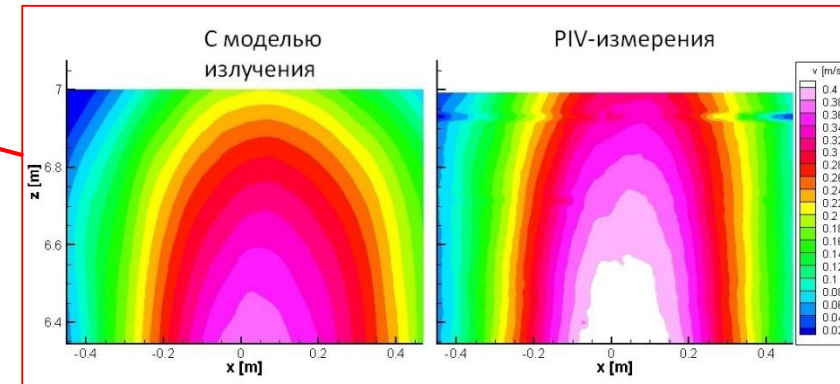
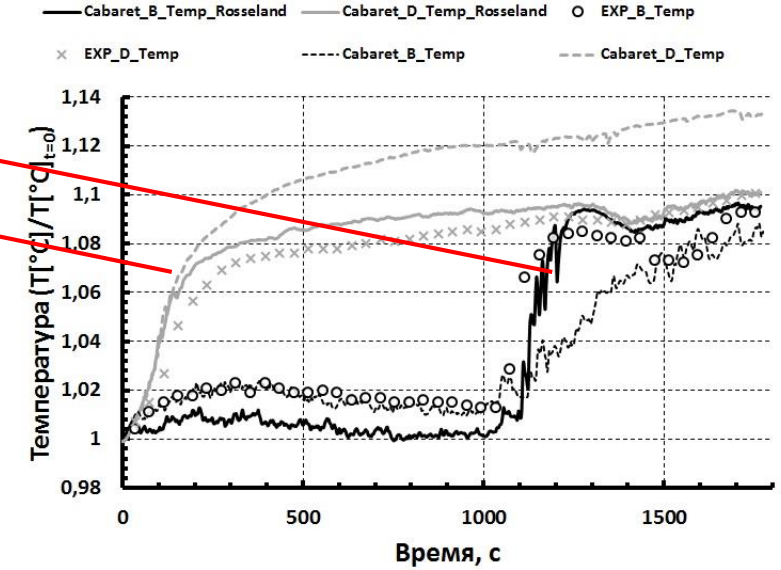
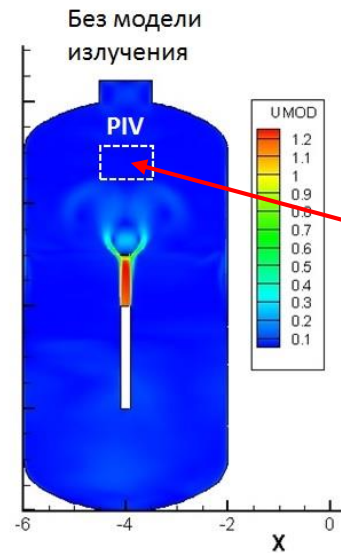
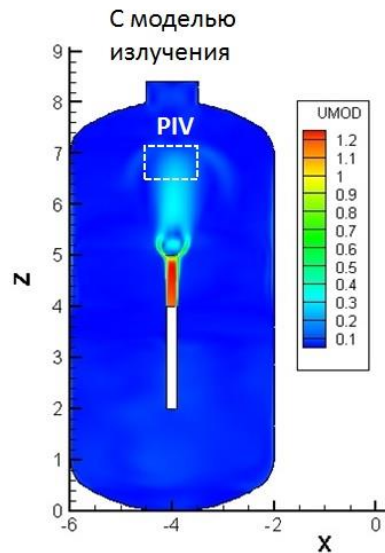
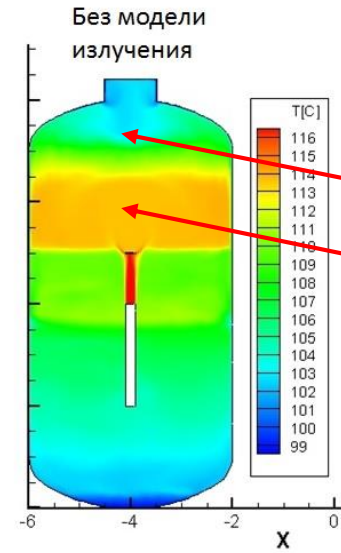
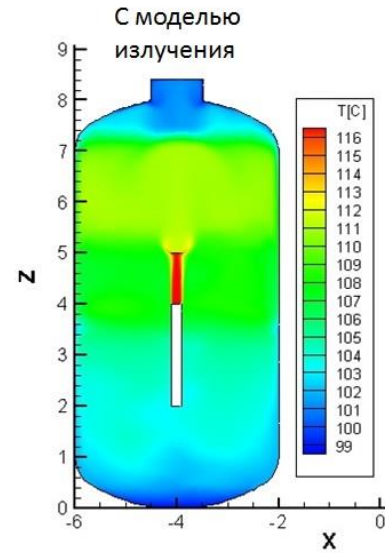


Температура газа

Размытие стратификации легкого пара диффузной струей горячего пара



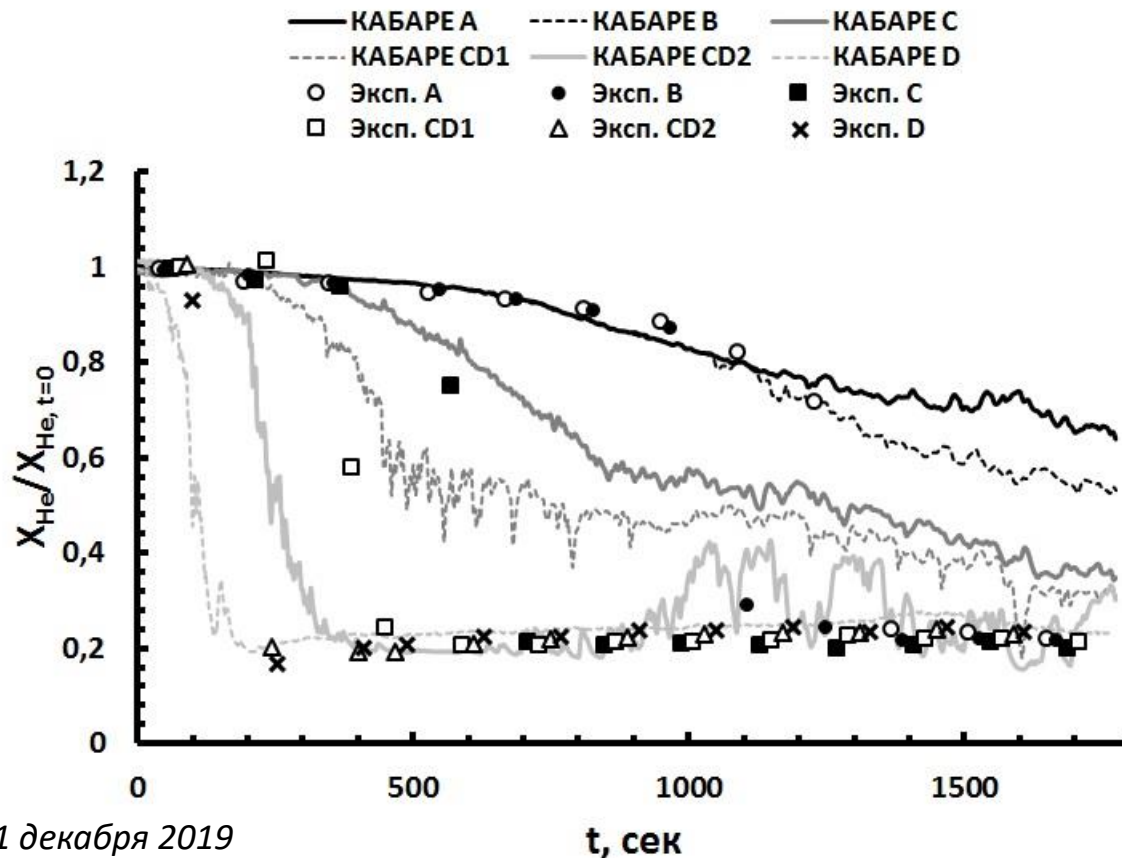
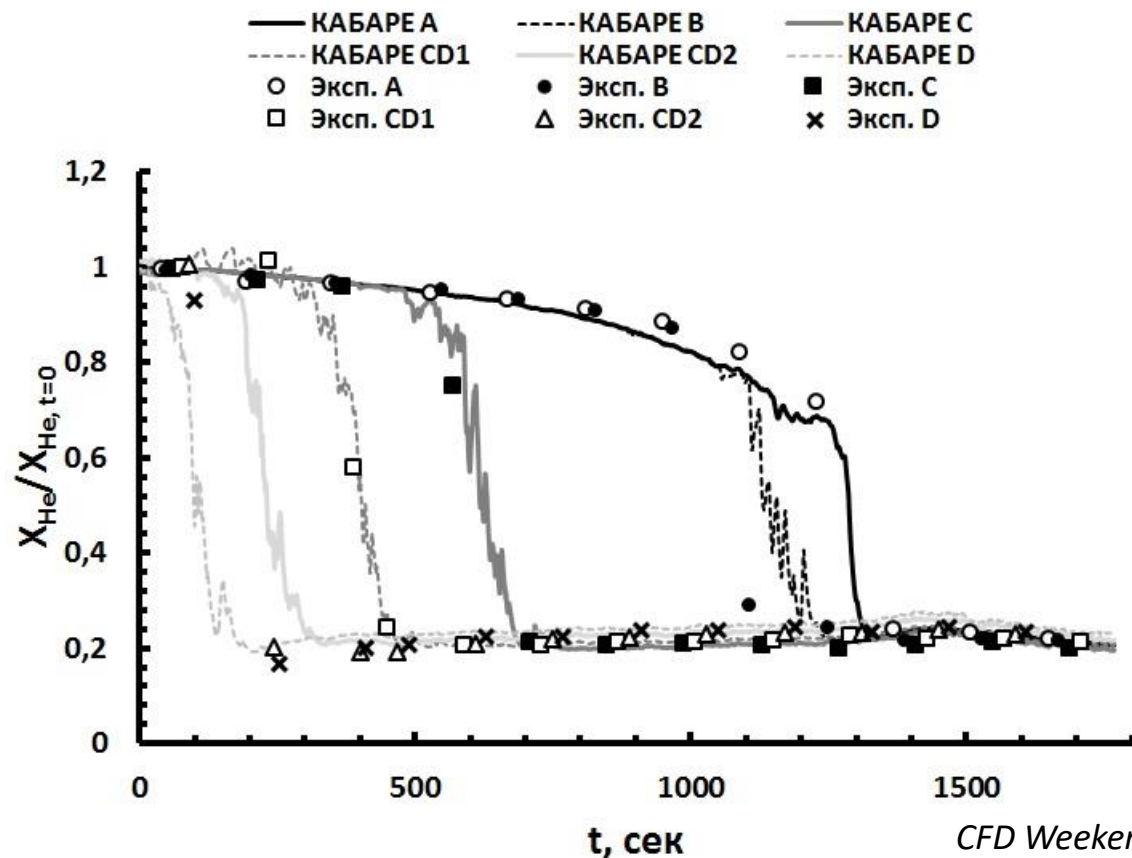
Конфигурация эксперимента
HYMERES HP1_8



Мольная доля гелия в зоне стратификации в сравнении с экспериментом

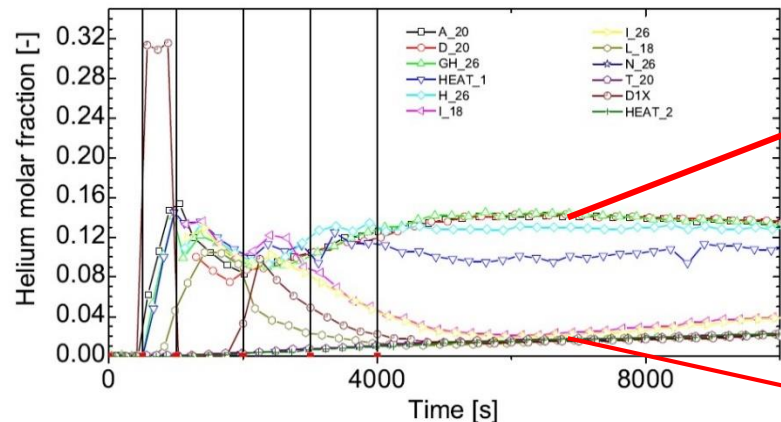
С моделью излучения

Без модели излучения

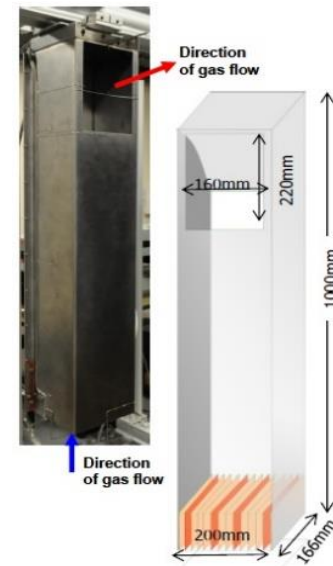
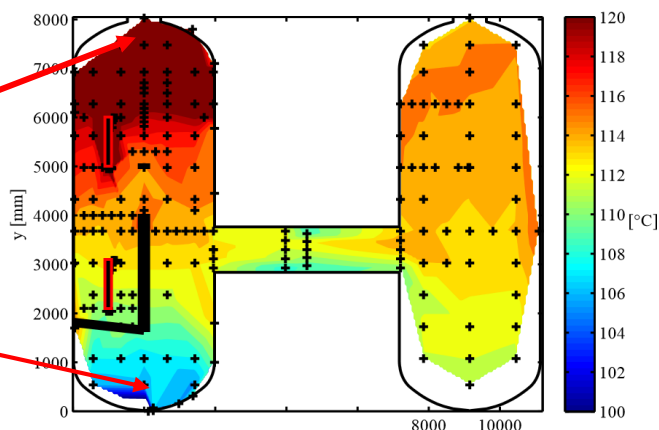


Тепловой эффект работы рекомбинатора водорода

Мольная доля гелия

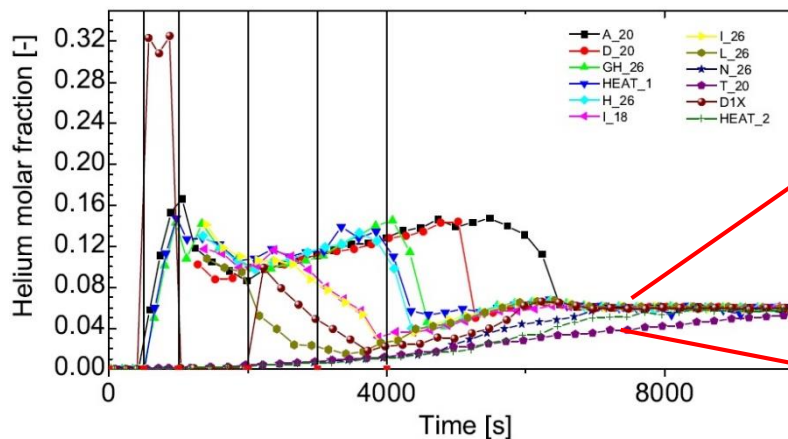


Поле температуры при работе верхнего рекомбинатора

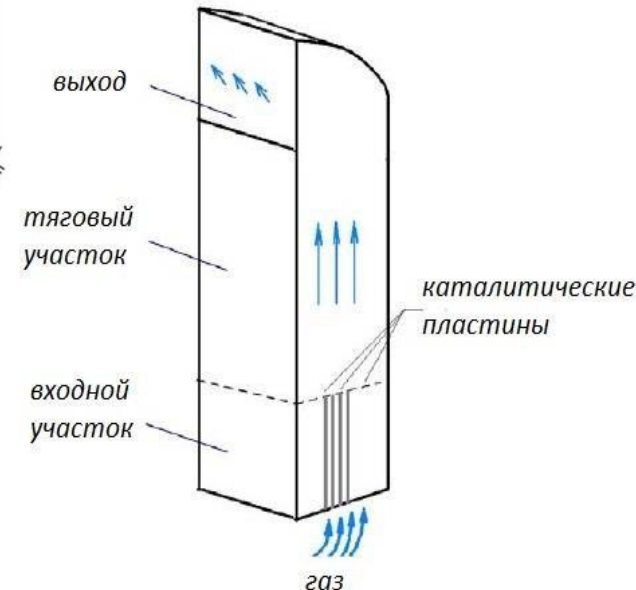
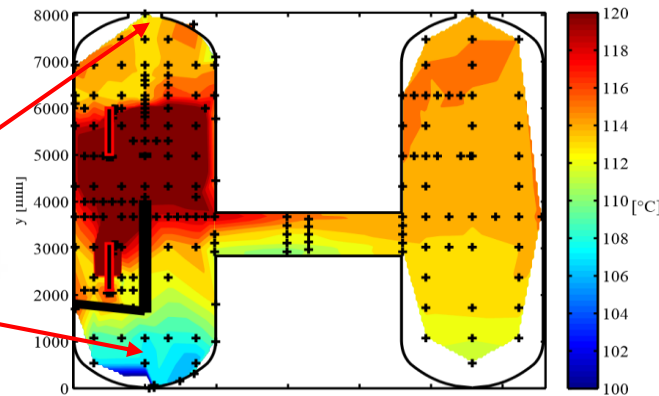


Имитатор ПАР (нагреватель)

Мольная доля гелия



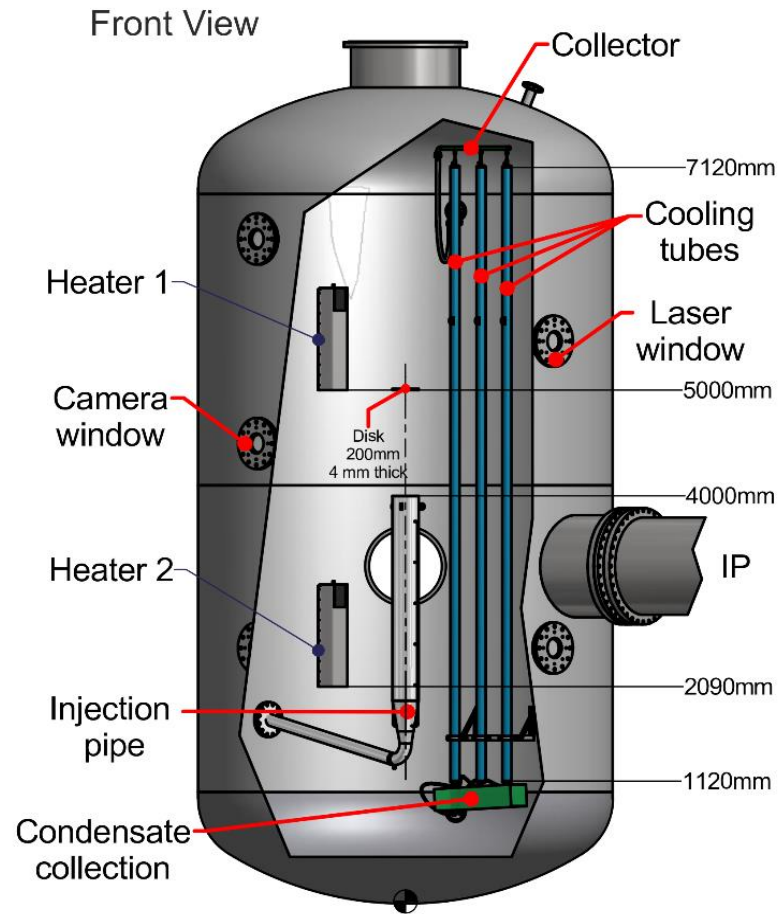
Поле температуры при работе нижнего рекомбинатора



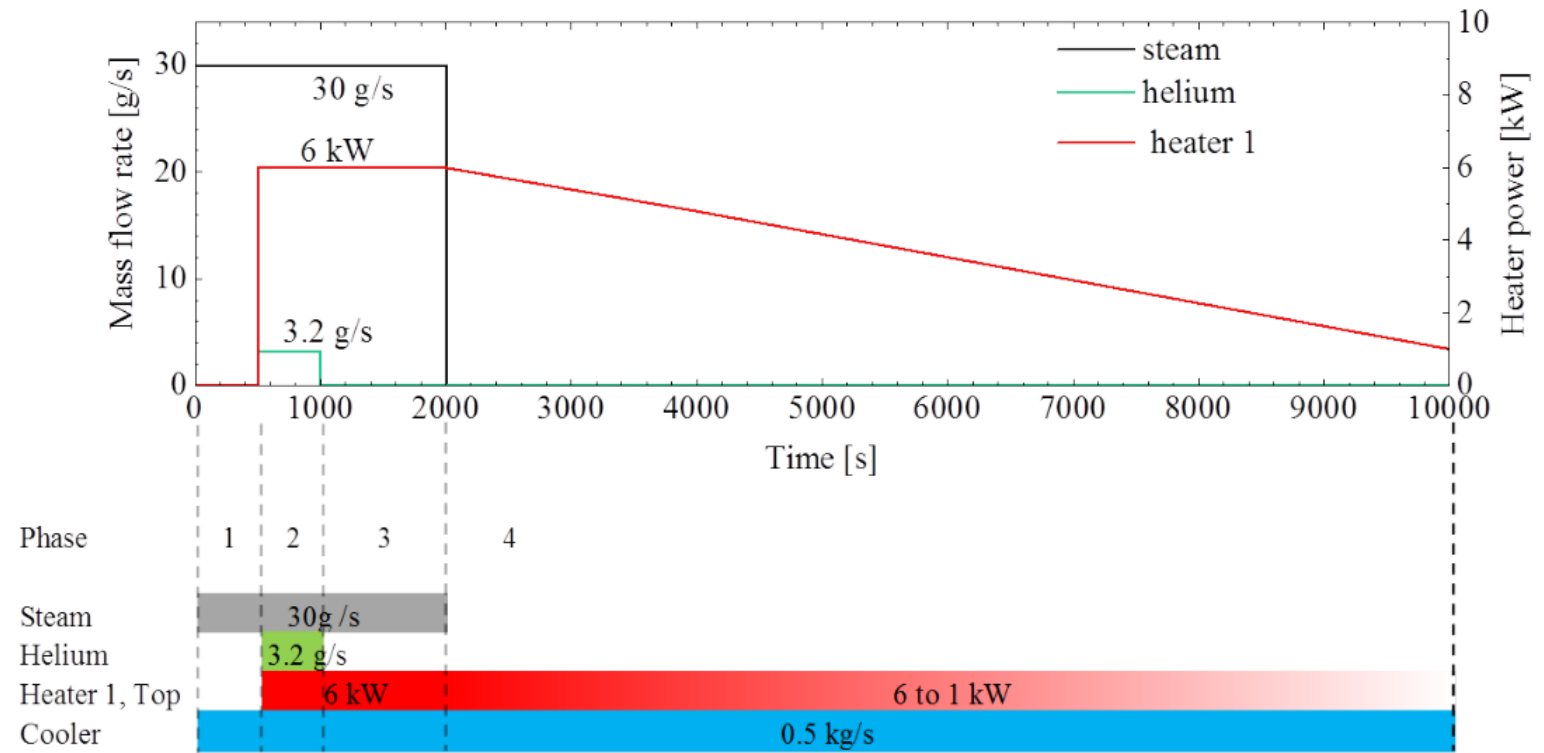
Принцип работы ПАР

HYMERES HP2_1 и HP2_2

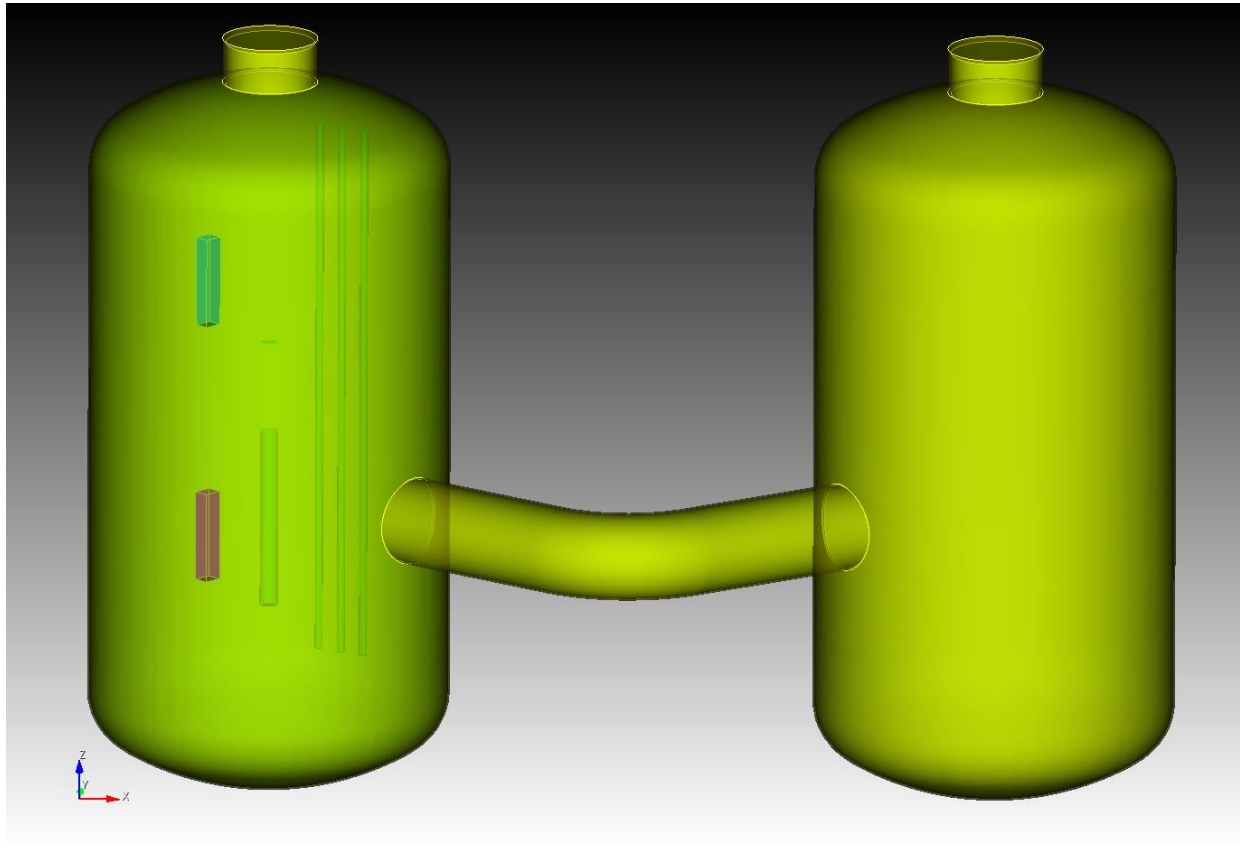
Конфигурация эксперимента HP2_1_2



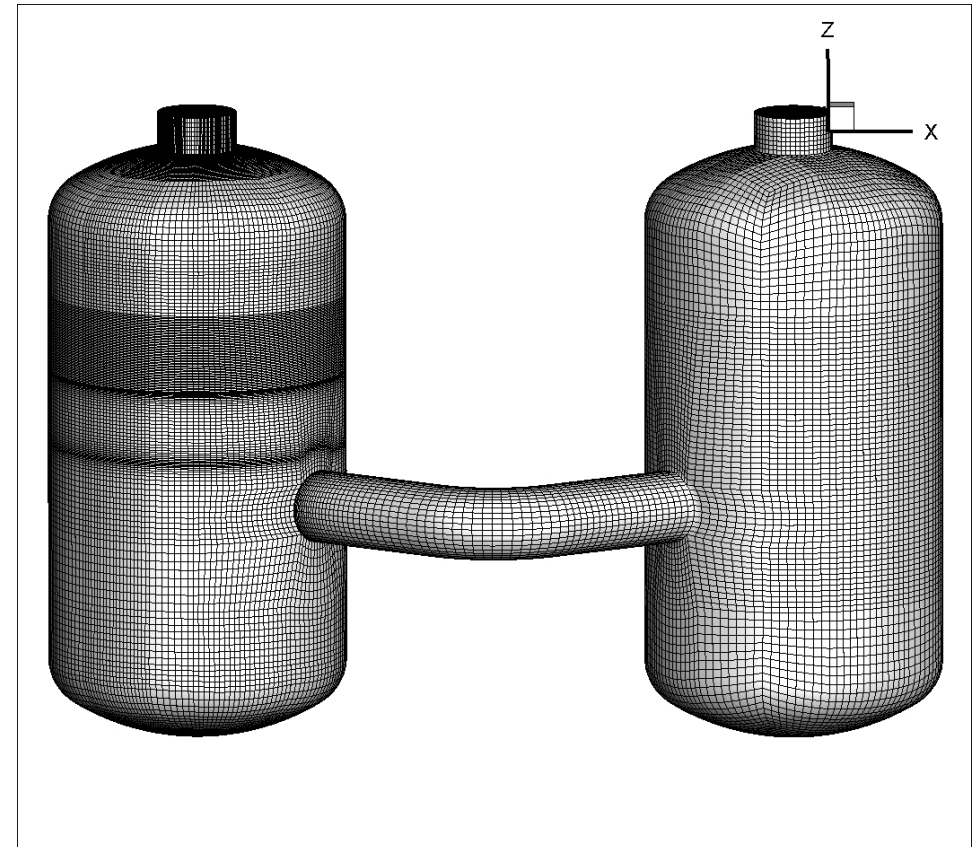
Сценарий эксперимента HP2_1_2



Геометрия расчетной модели

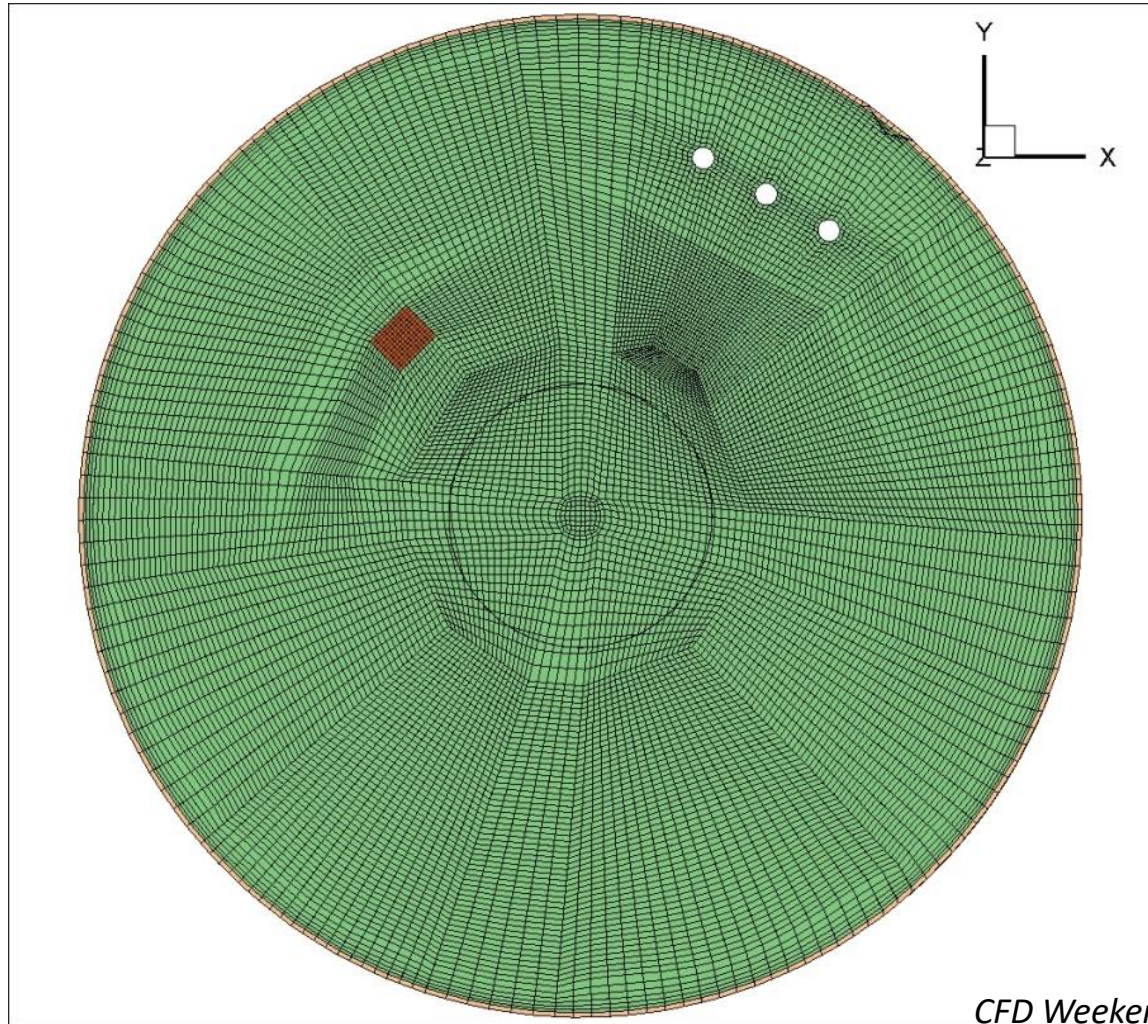


Сетка

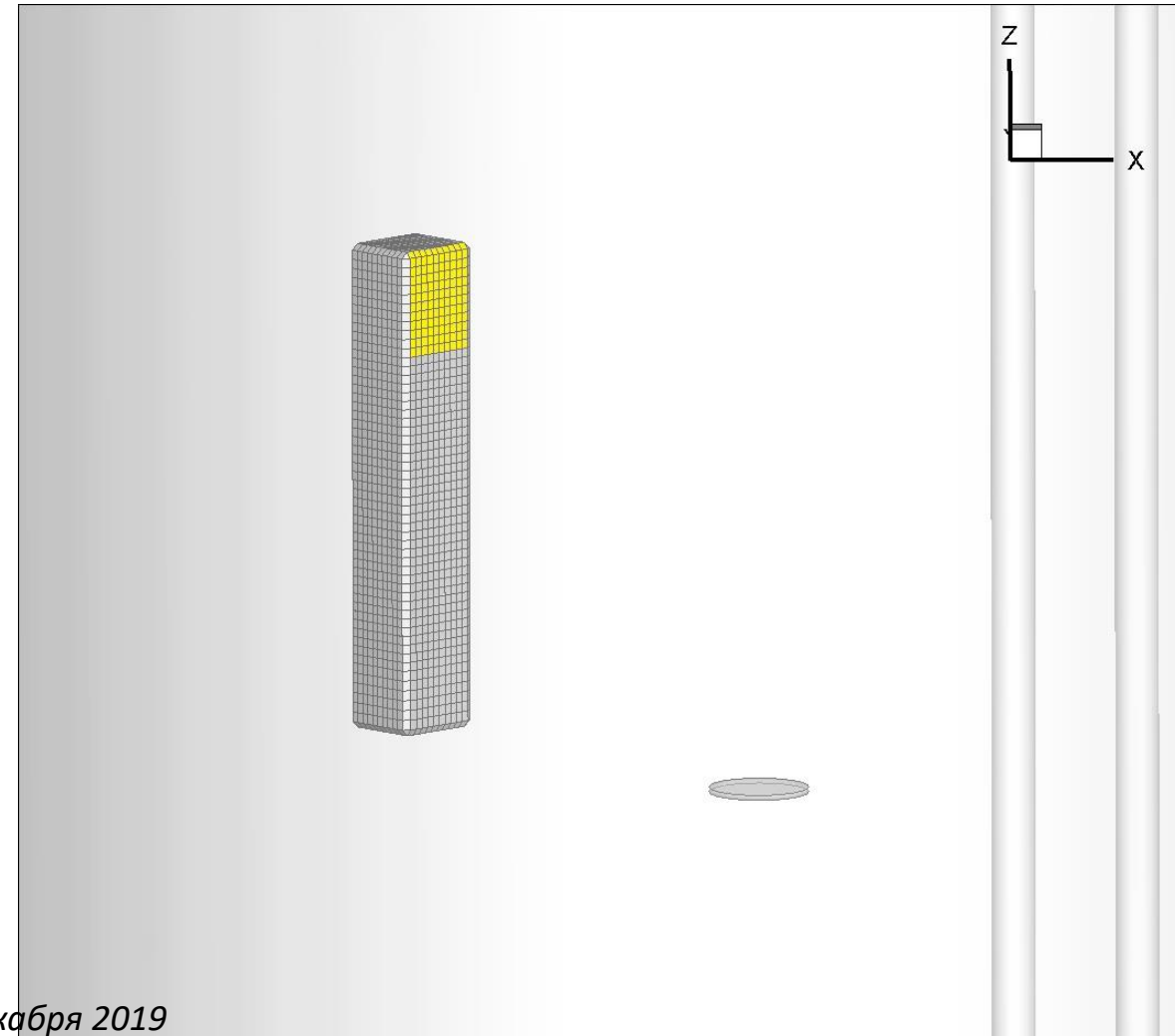


1-3 млн. ячеек

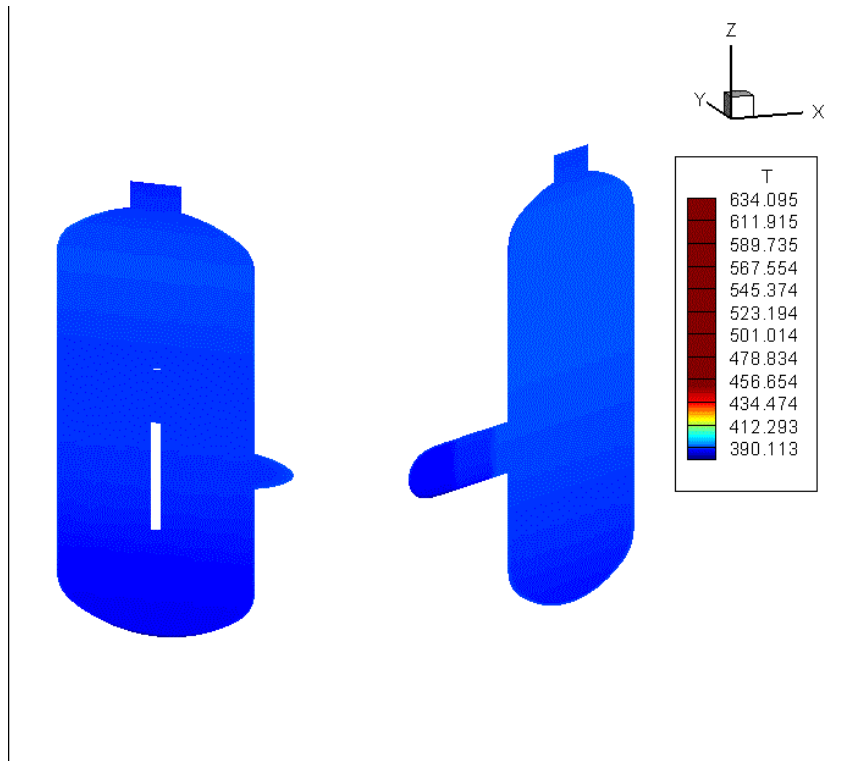
Сетка в сечении XY



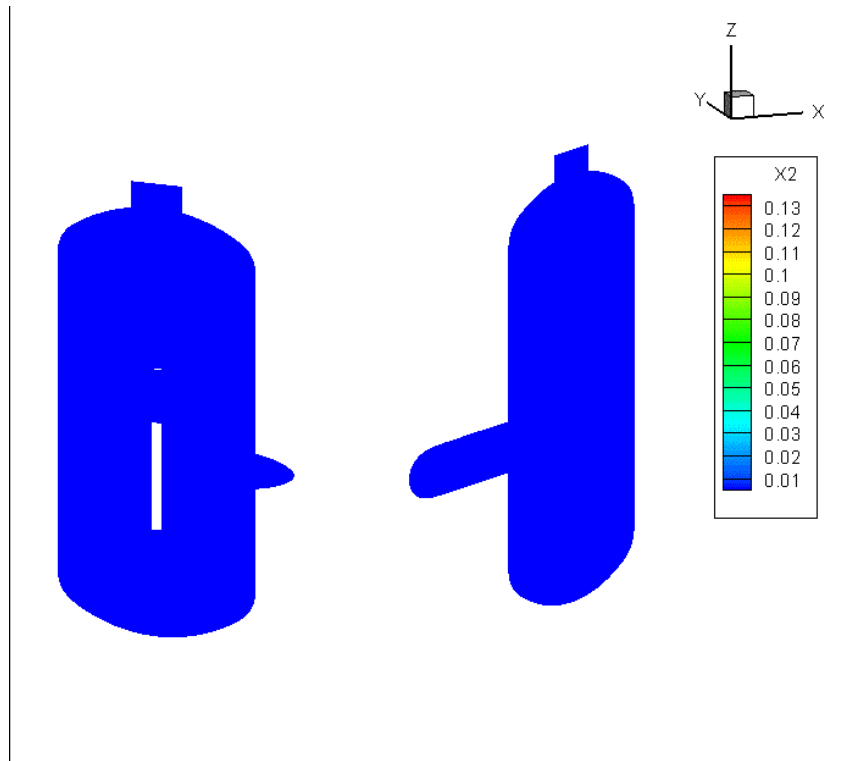
Сетка на рекомбинаторе



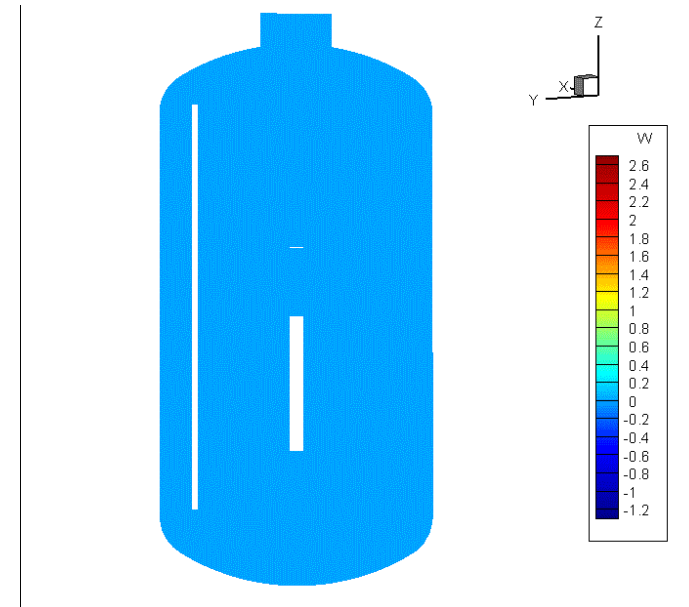
Температура

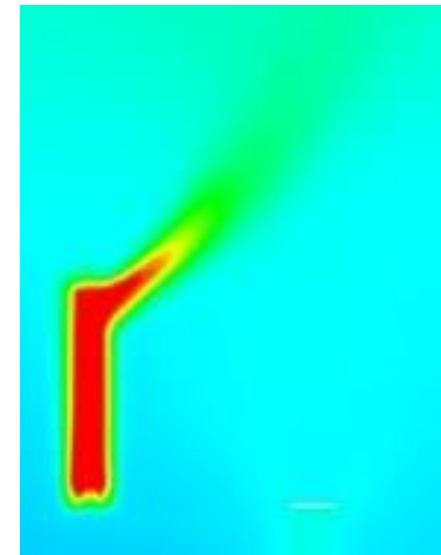
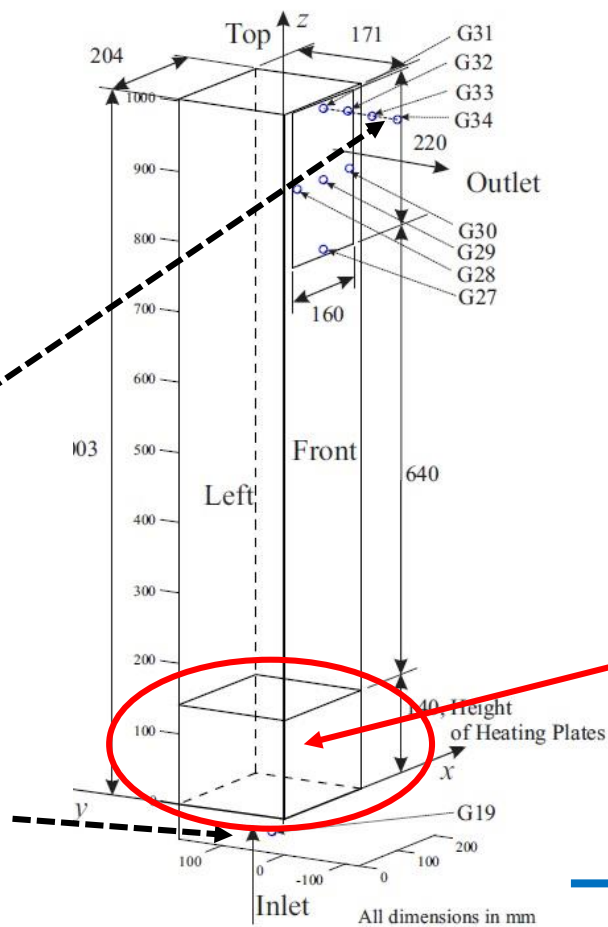
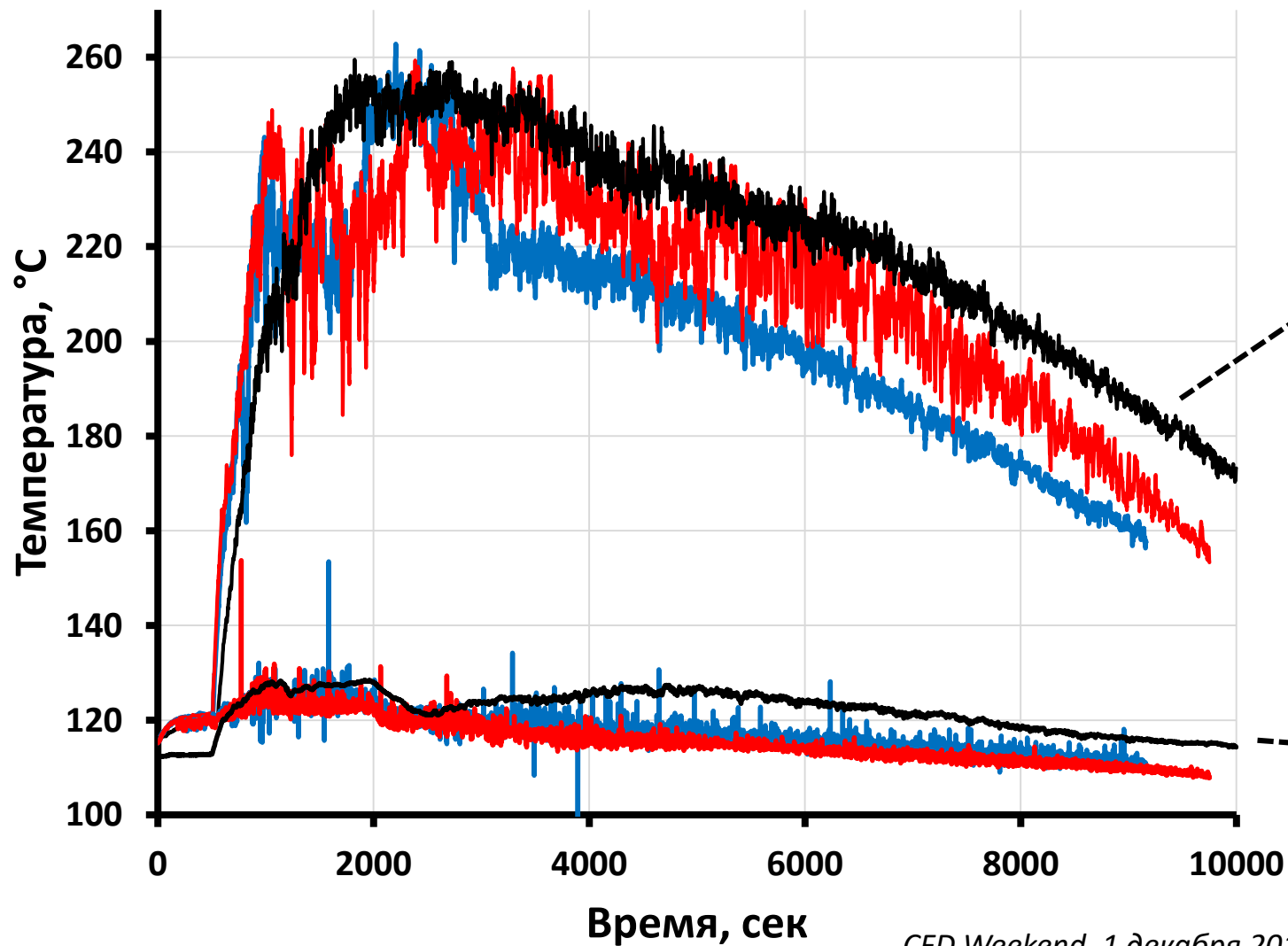


Мольная доля гелия



Скорость (вертикальная компонента)

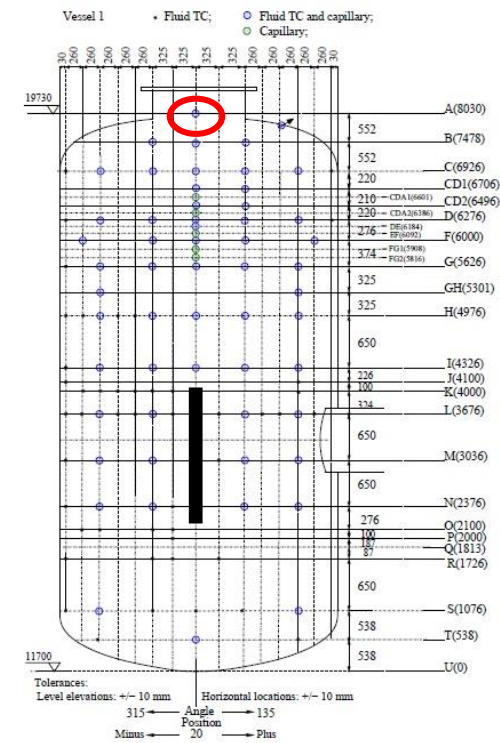
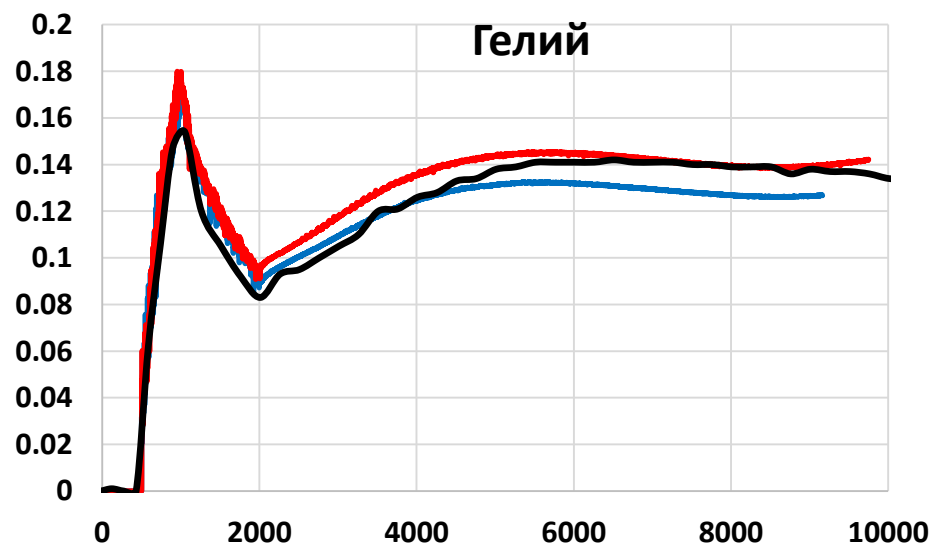
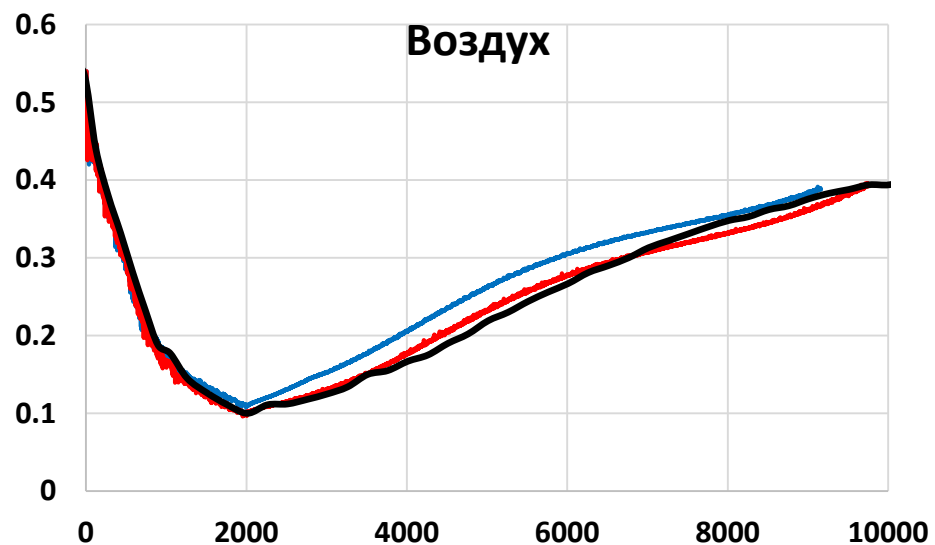
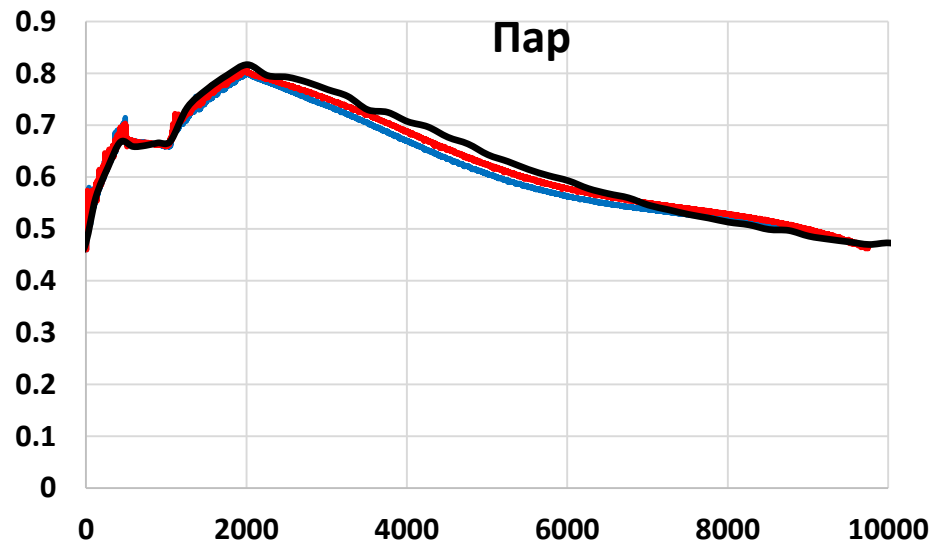
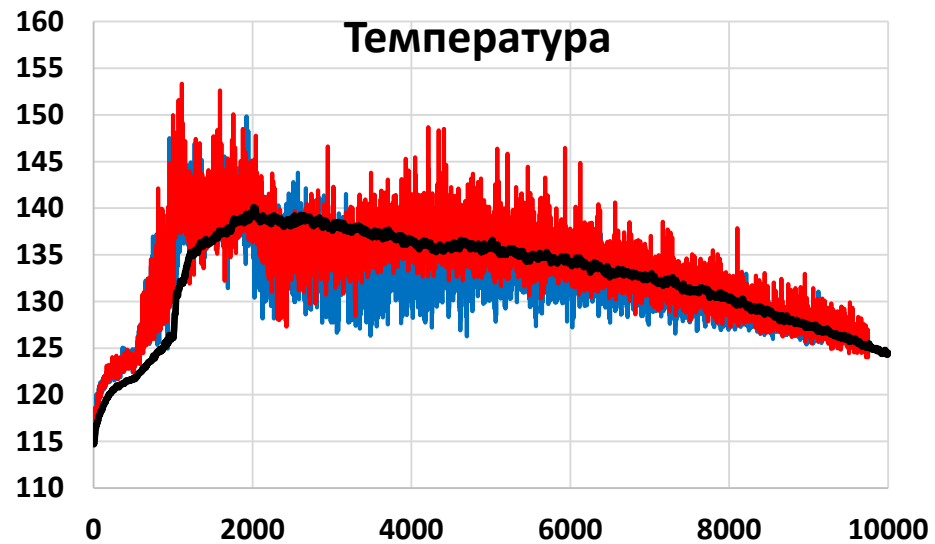




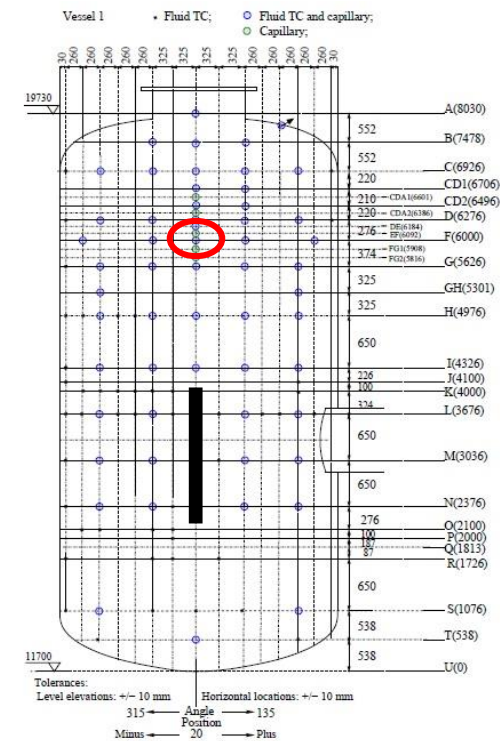
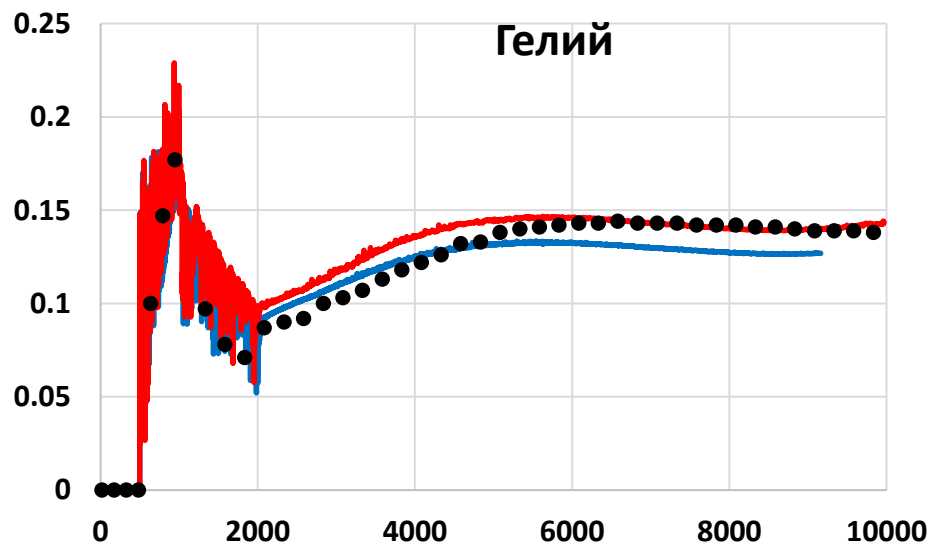
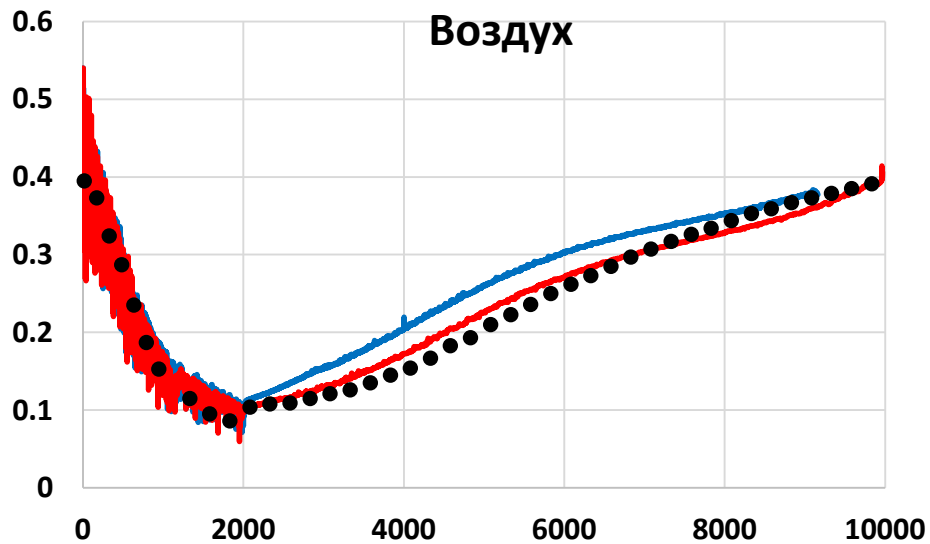
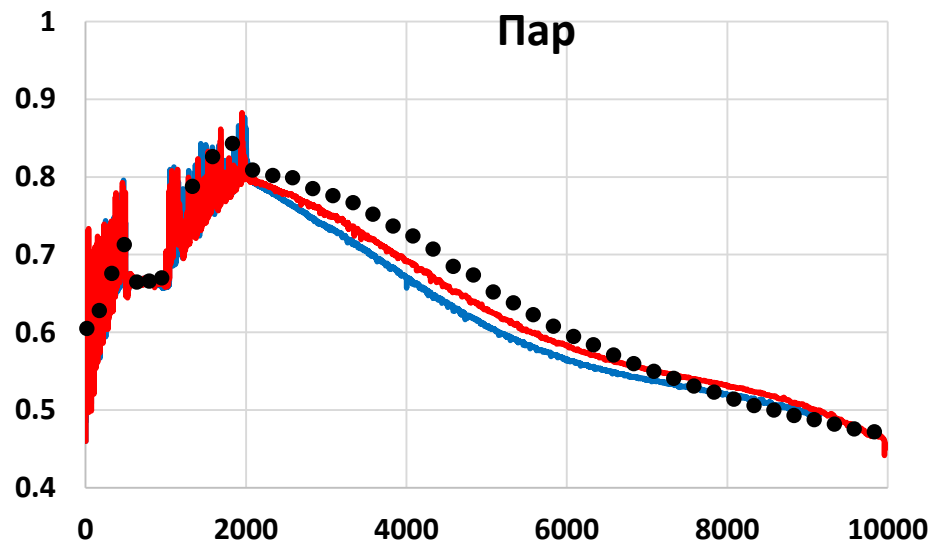
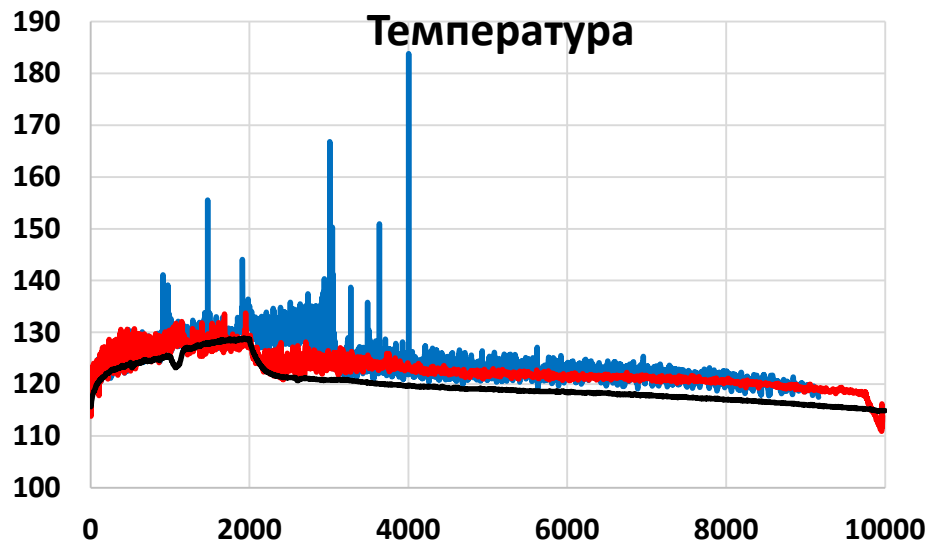
$$\frac{\partial p}{\partial z} = -K_{loss} \frac{\rho U^2}{2}$$

— $K_{loss} = 0$

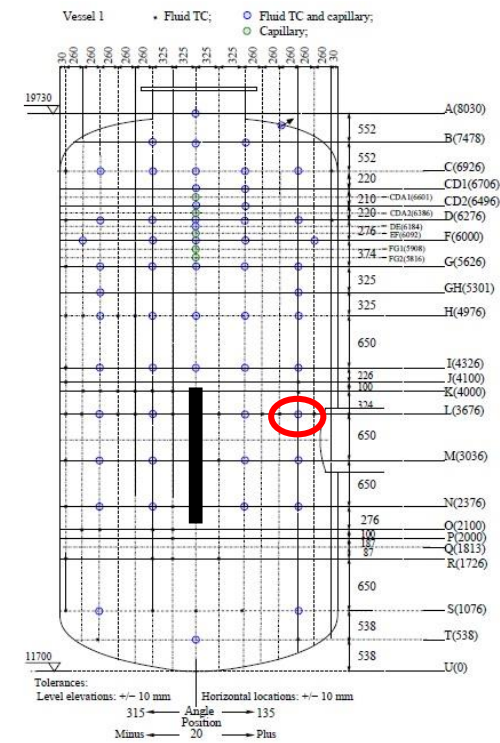
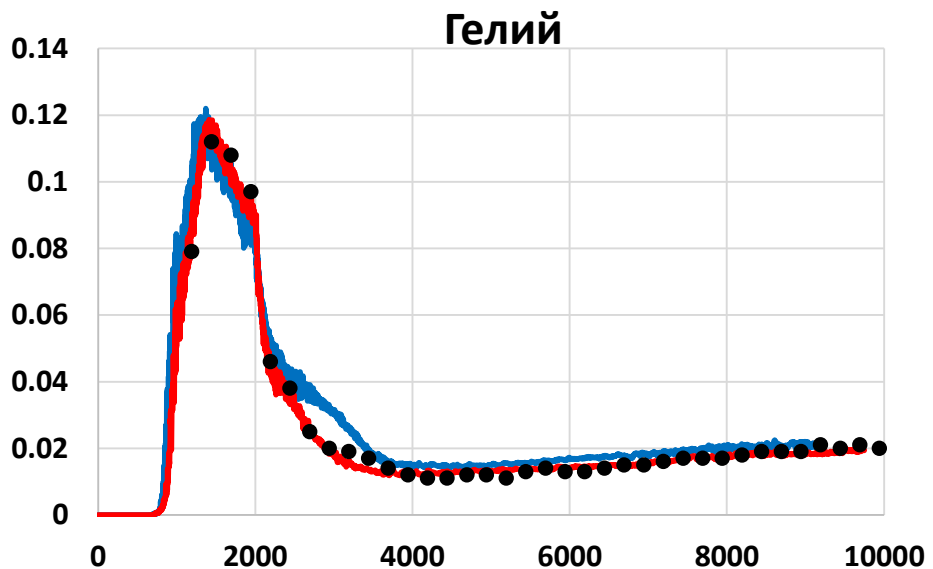
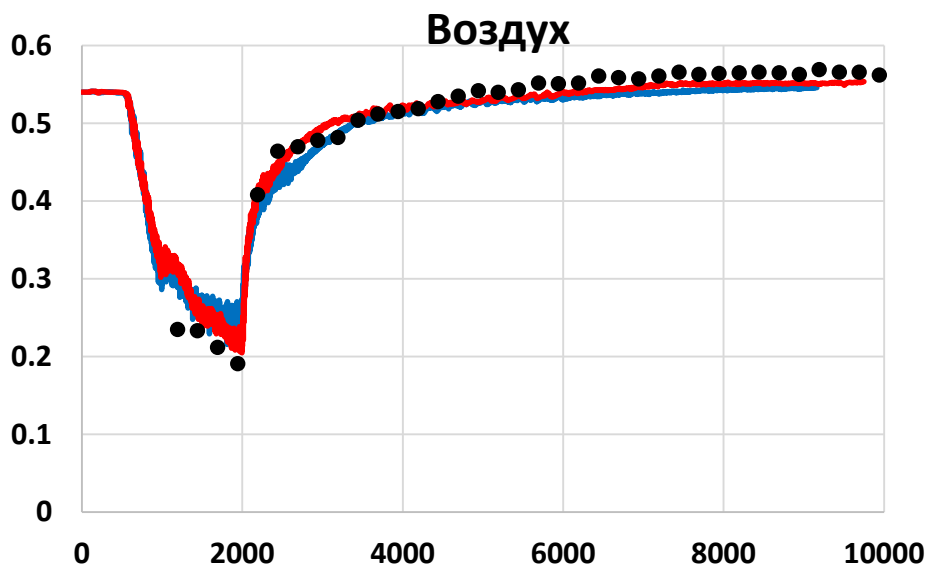
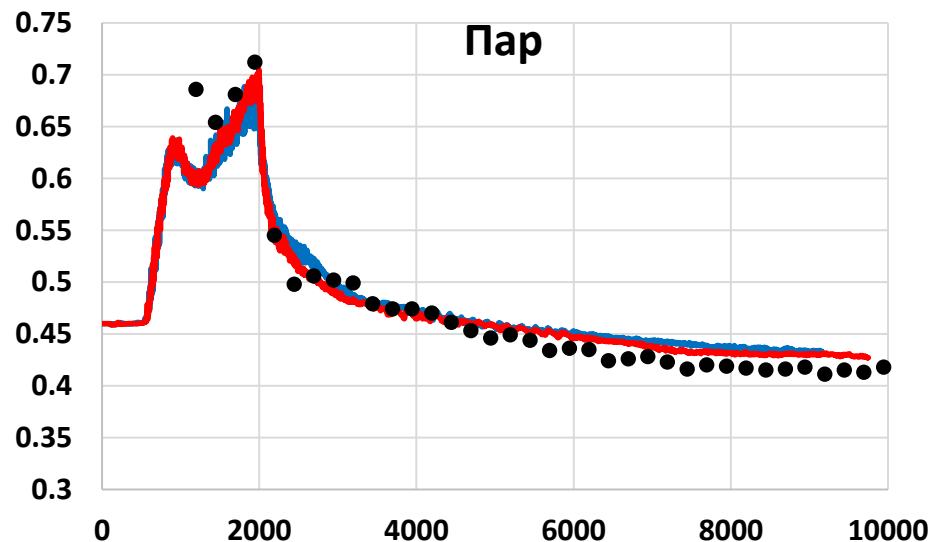
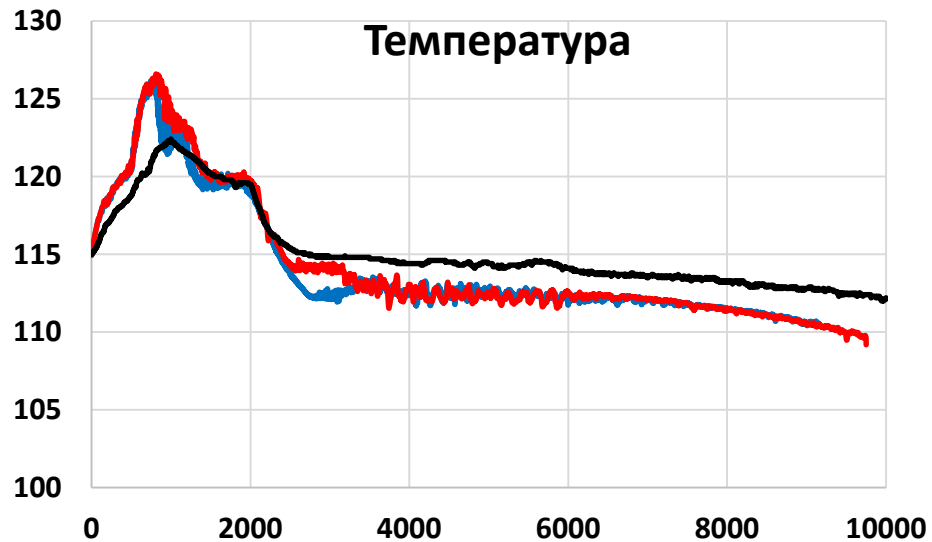
— $K_{loss} = 20 m^{-1}$



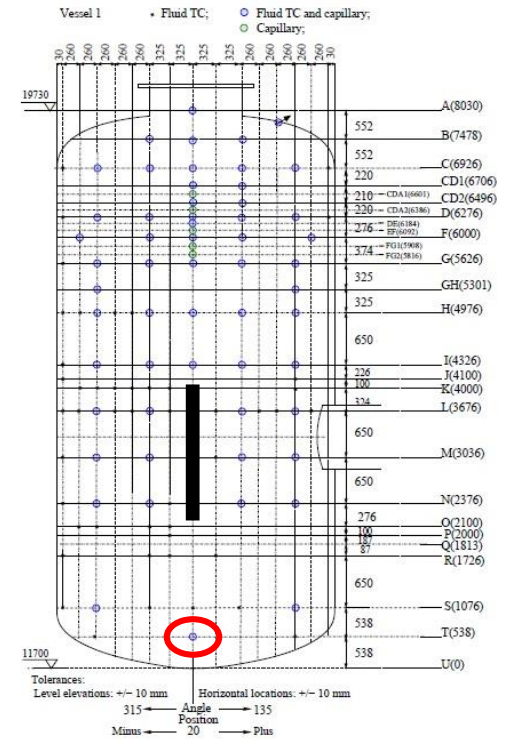
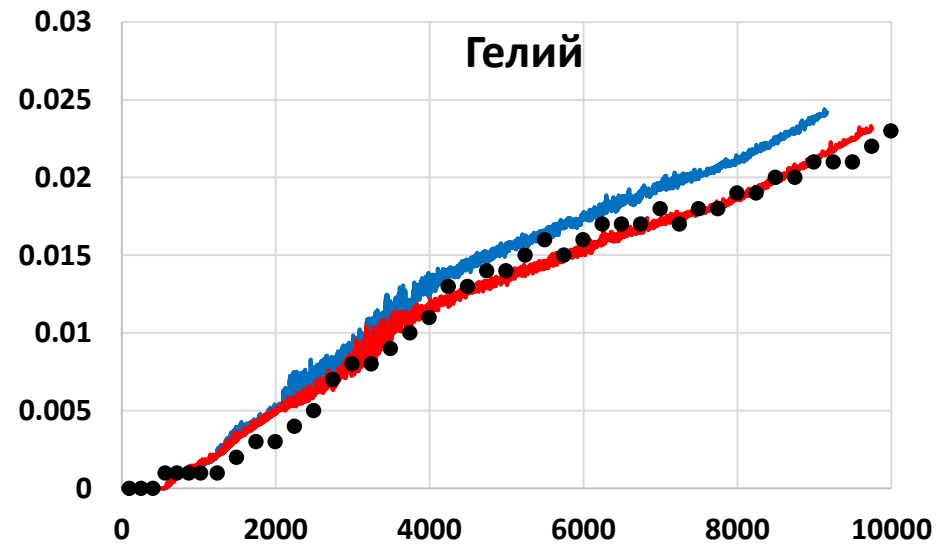
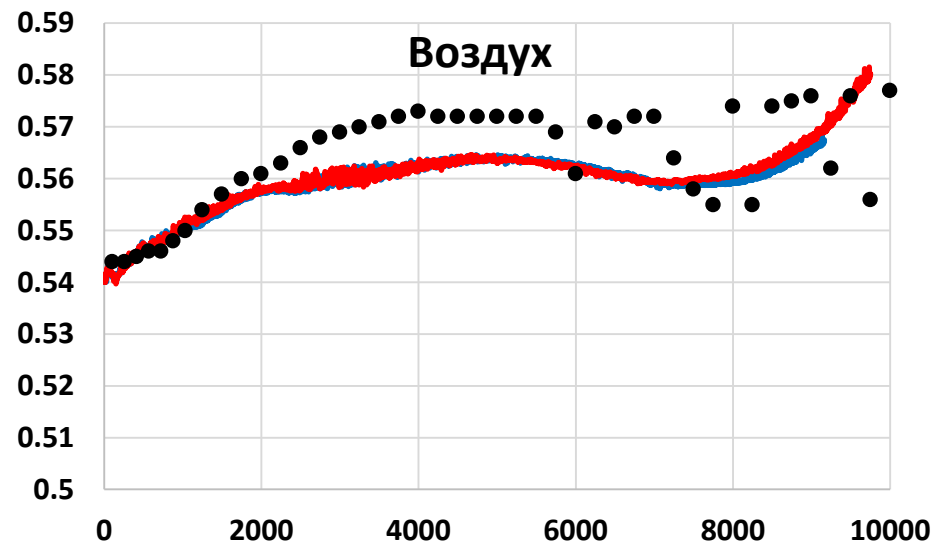
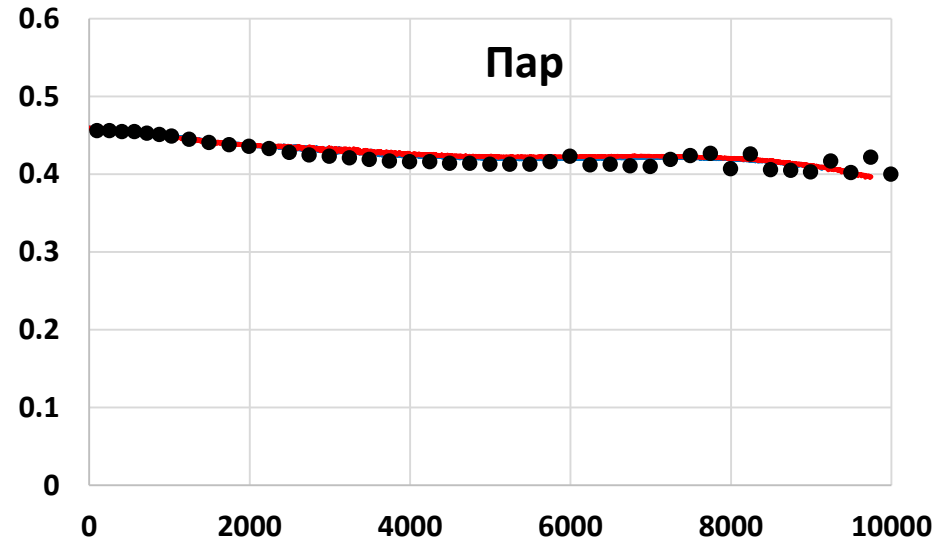
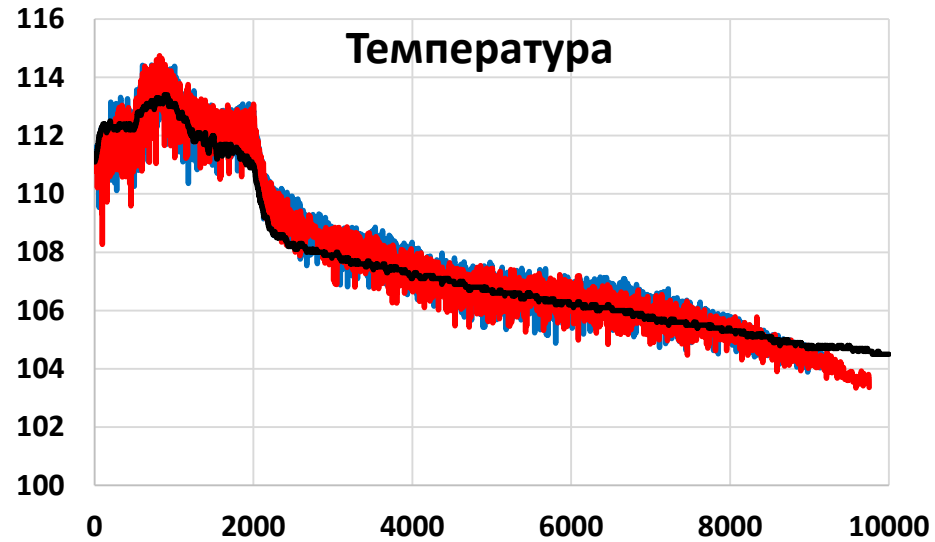
D1_A20



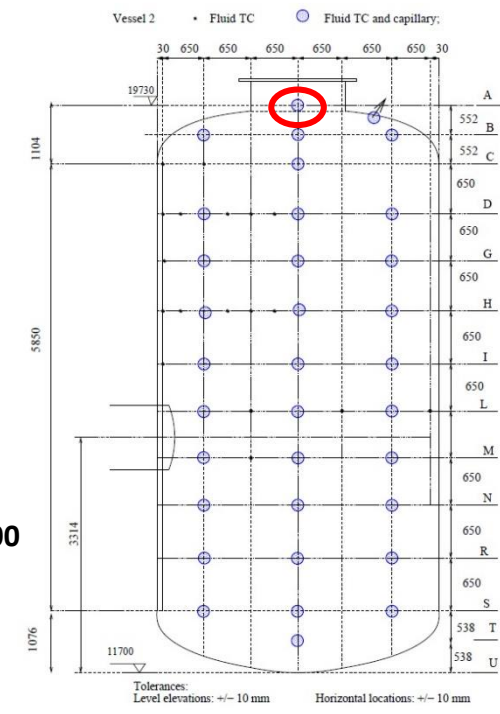
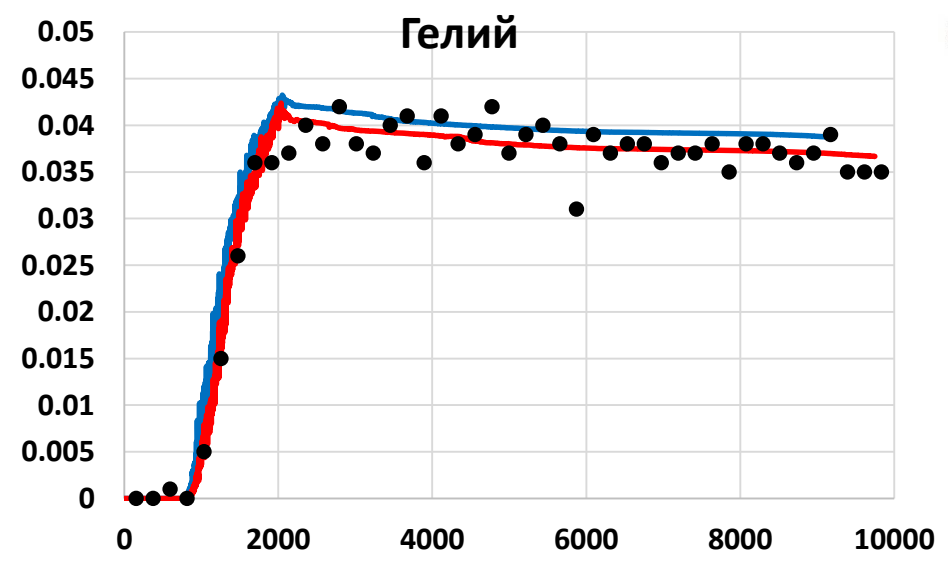
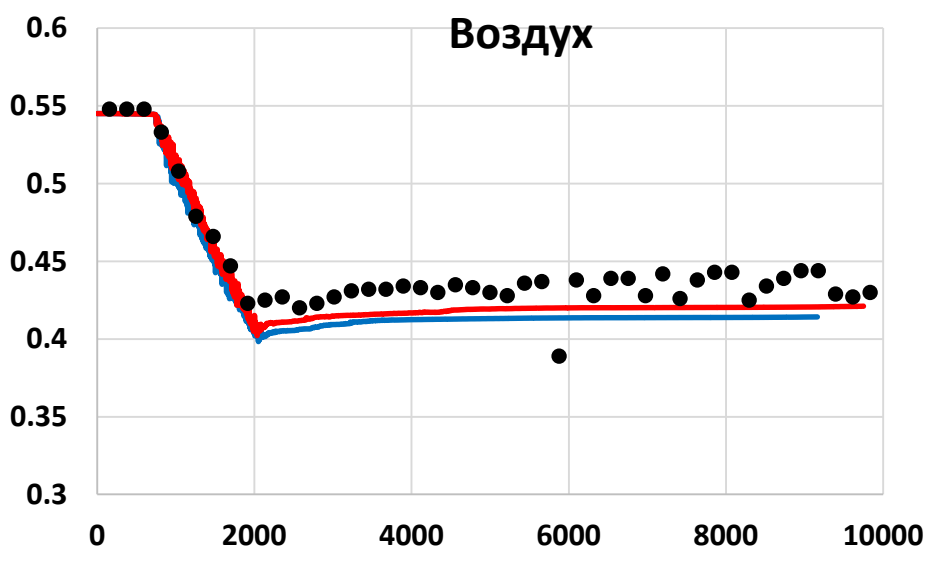
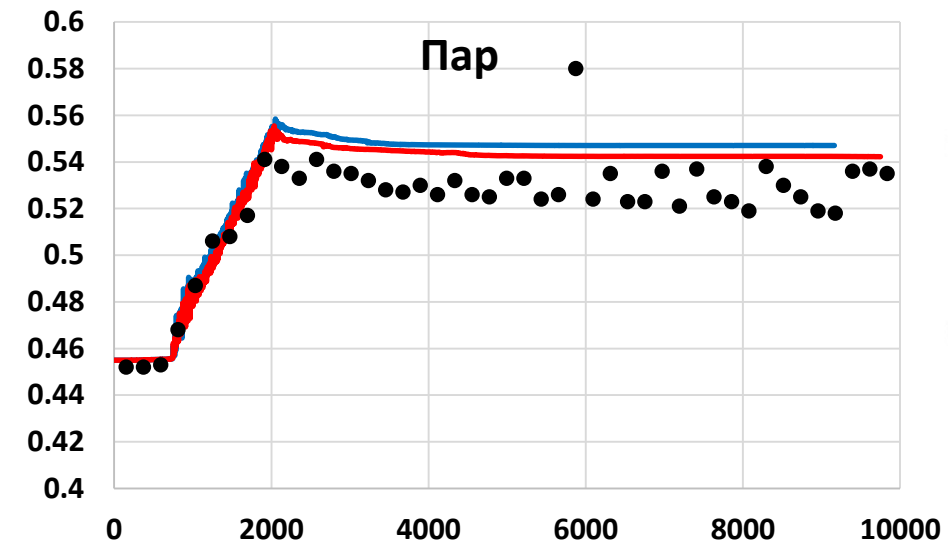
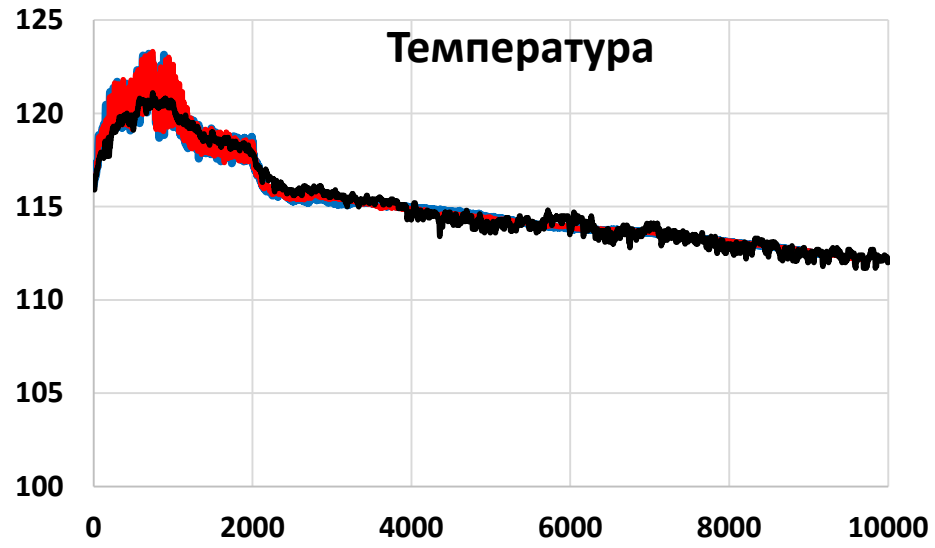
D1_F20



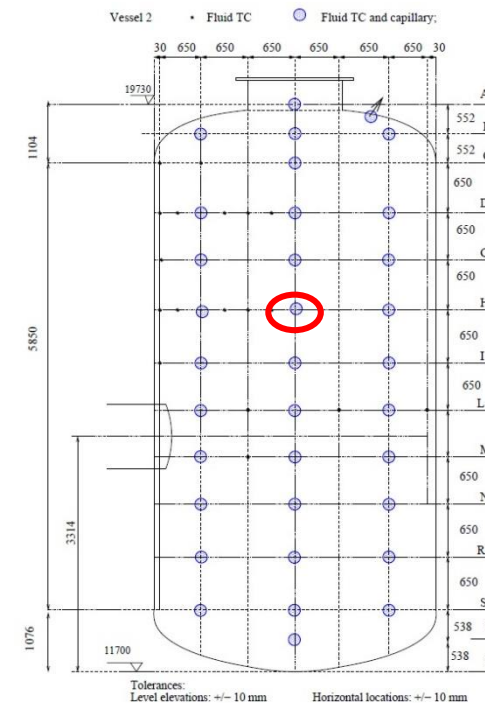
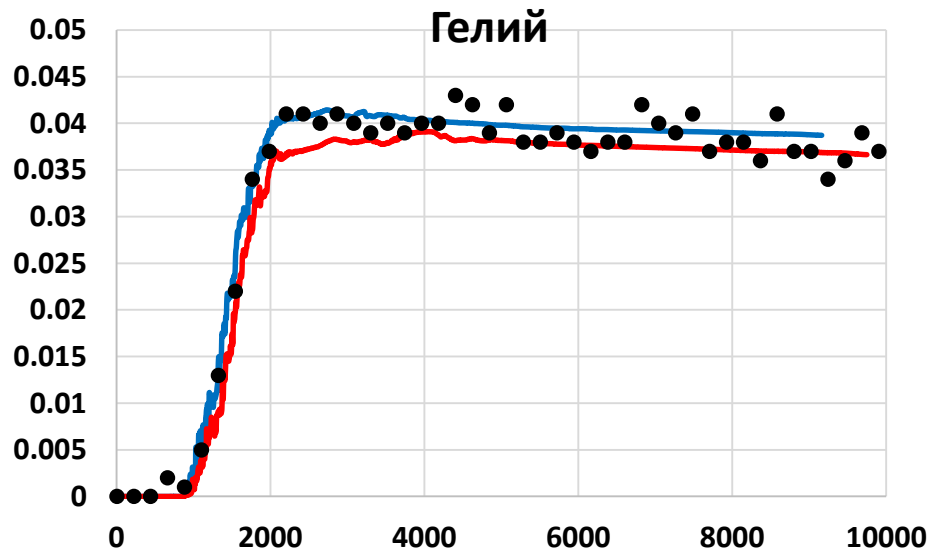
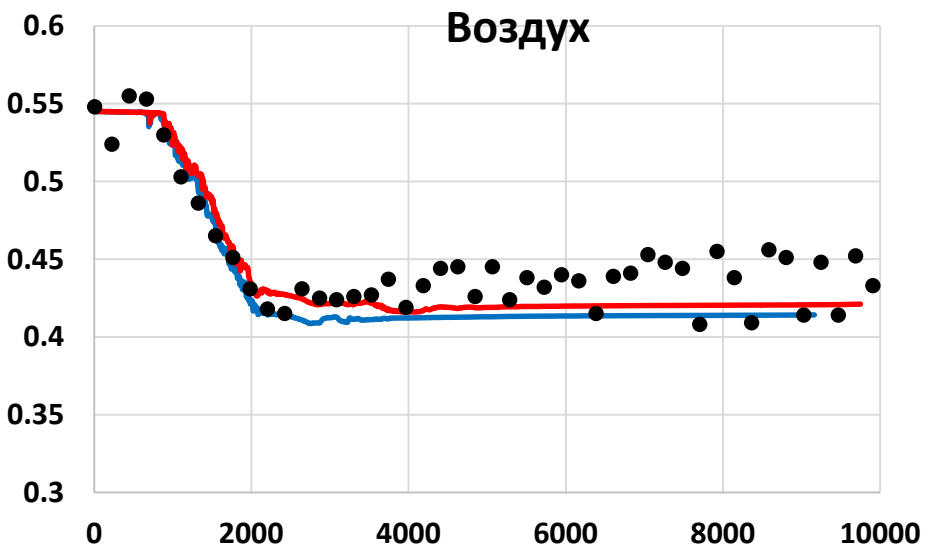
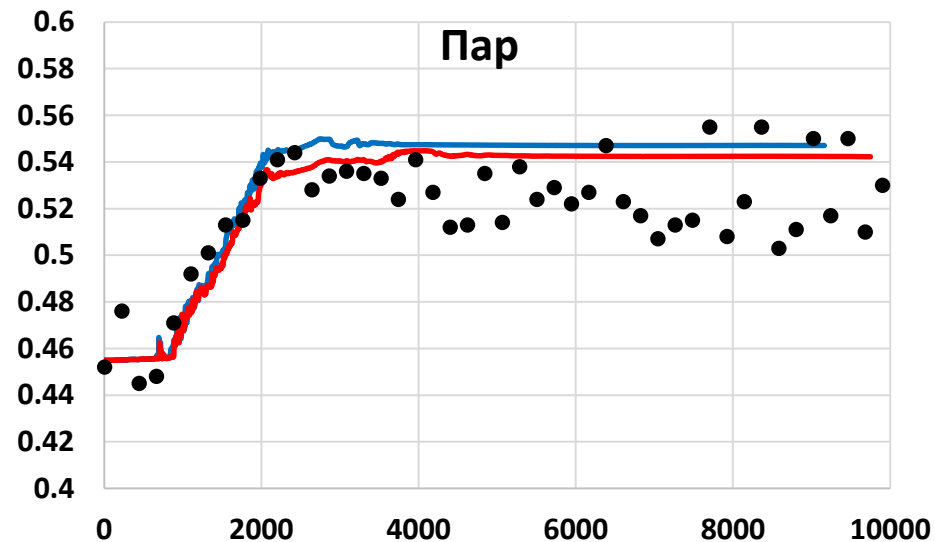
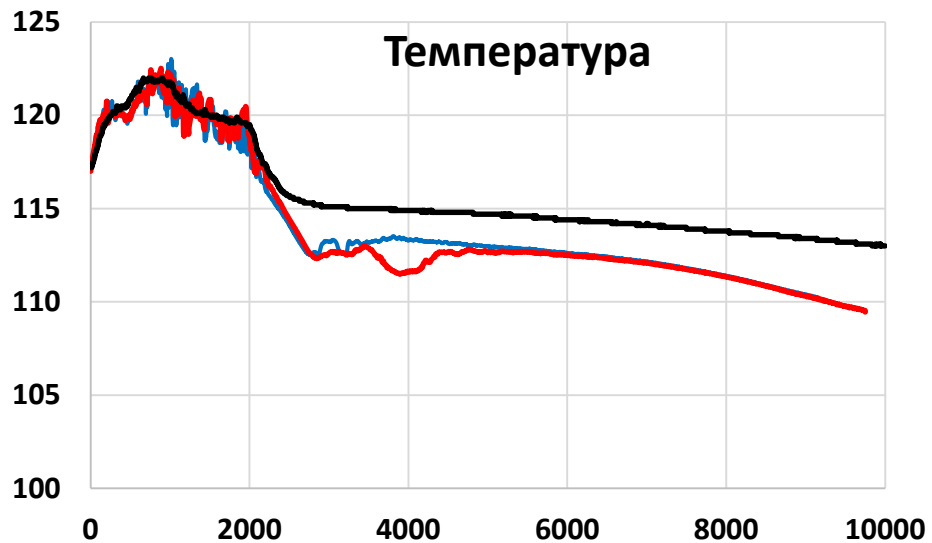
D1_L26



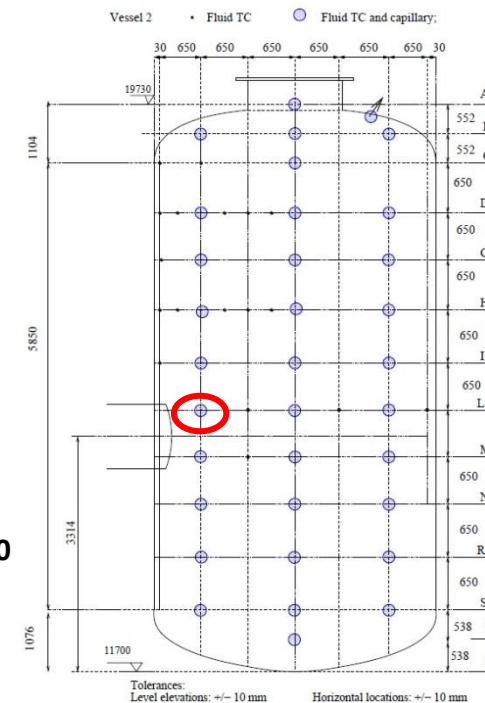
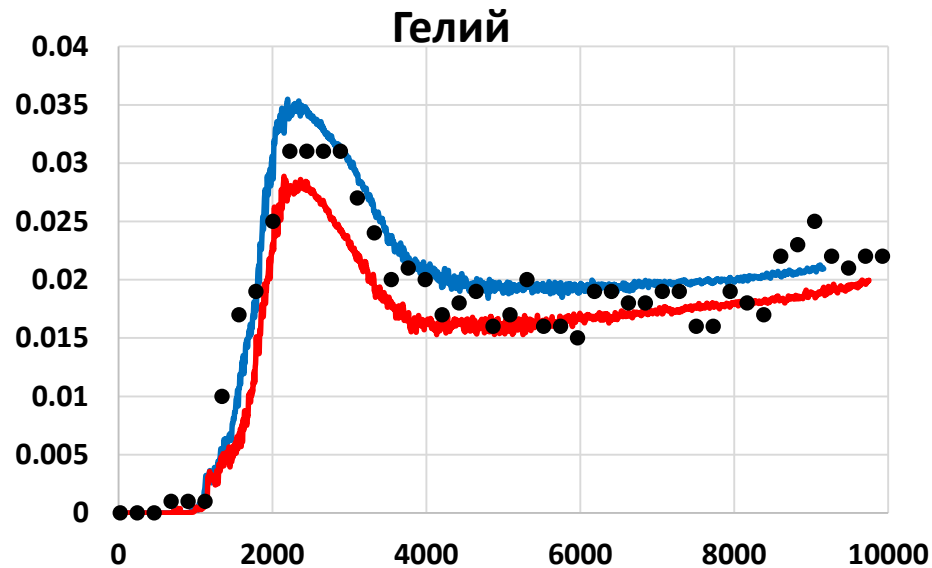
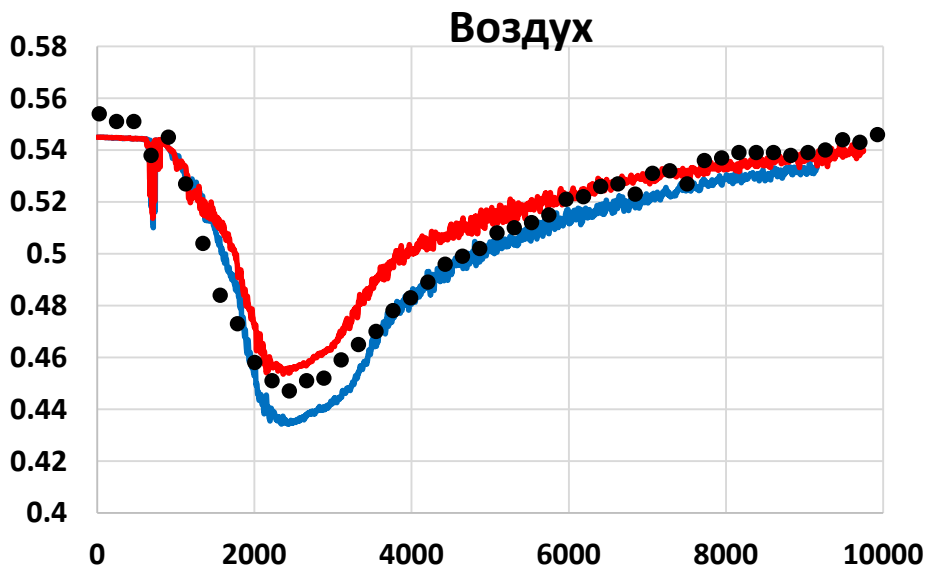
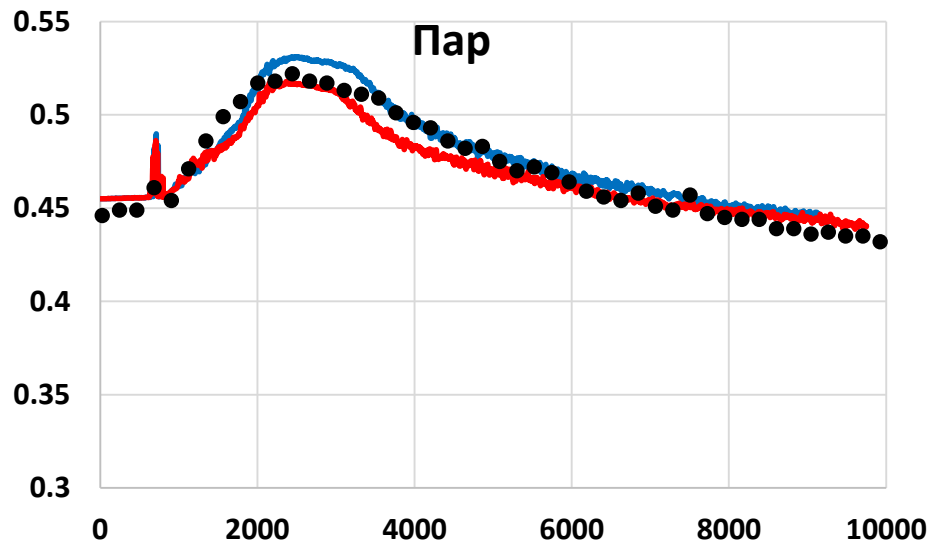
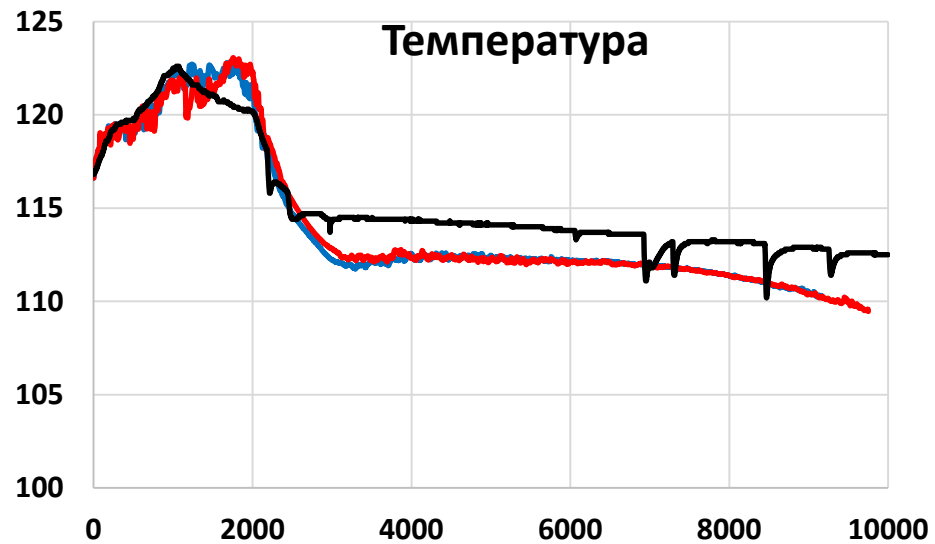
D1_T20



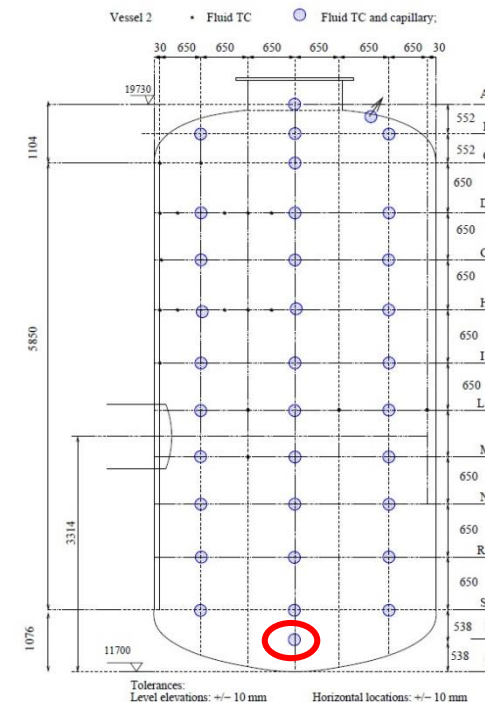
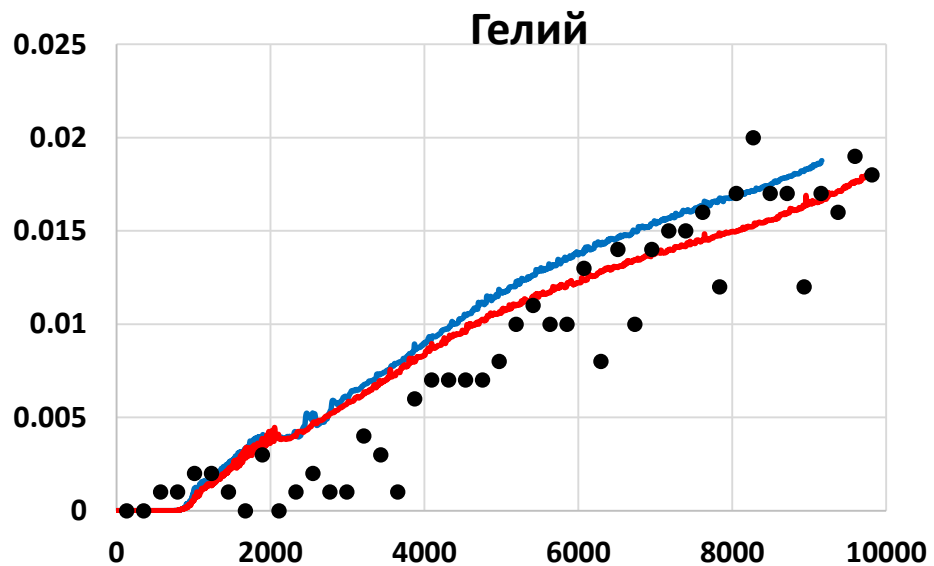
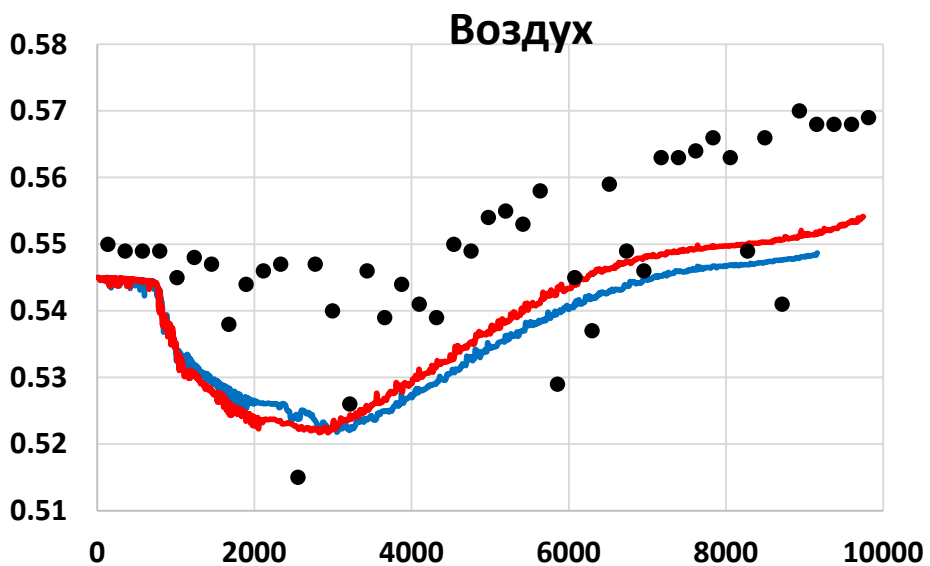
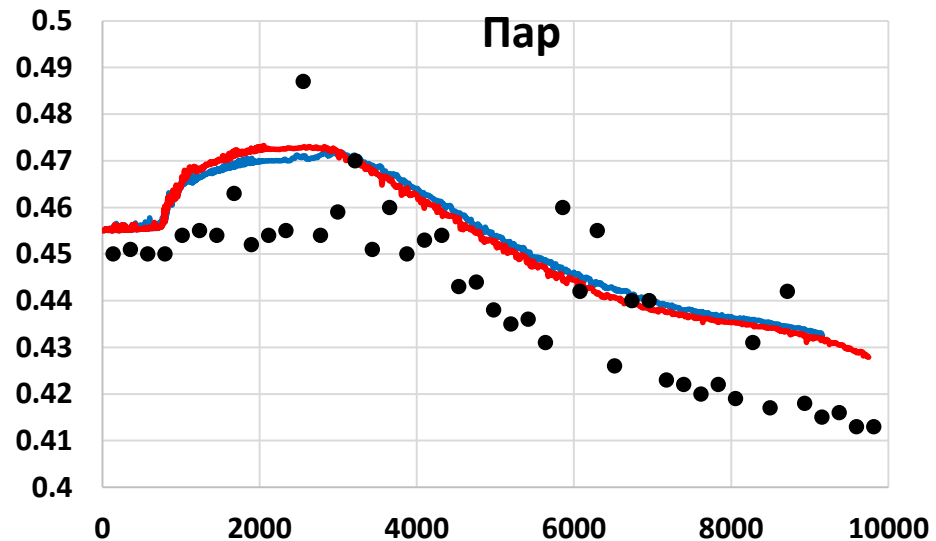
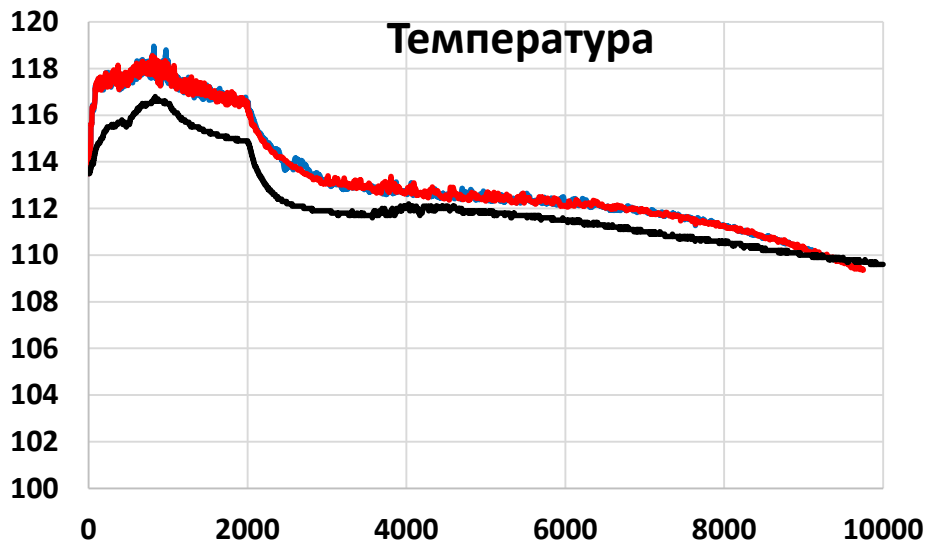
D2_A20



D2_H2O



D2_L15



D2_T20

GexCon D27(HySafe SBEP 5)

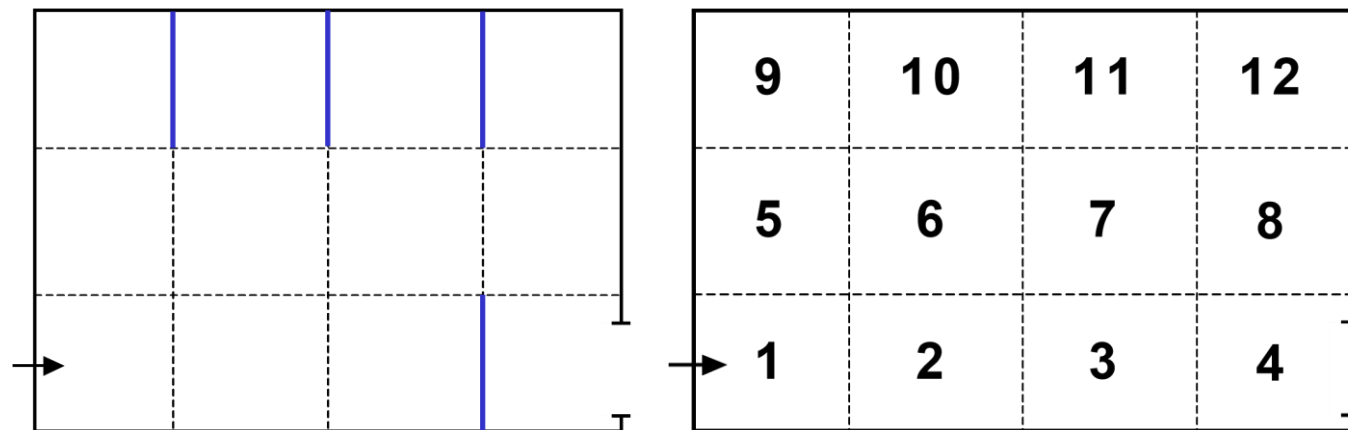
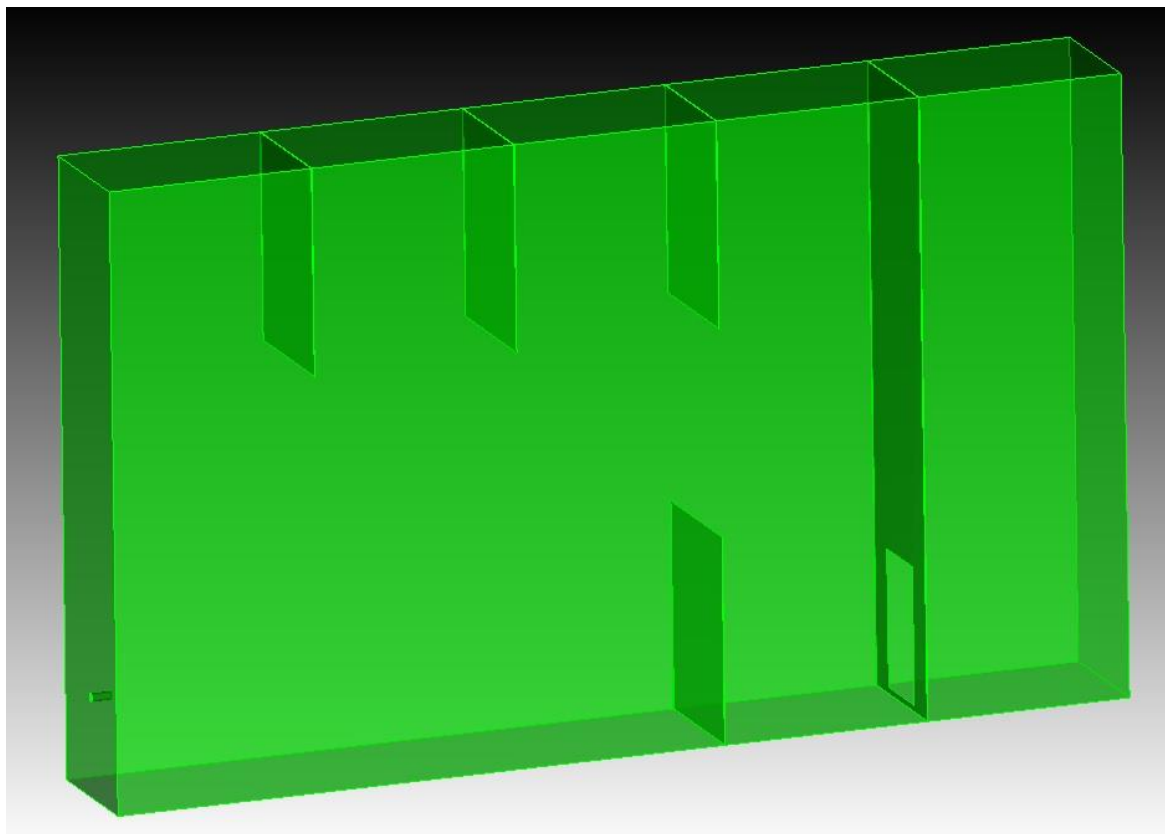


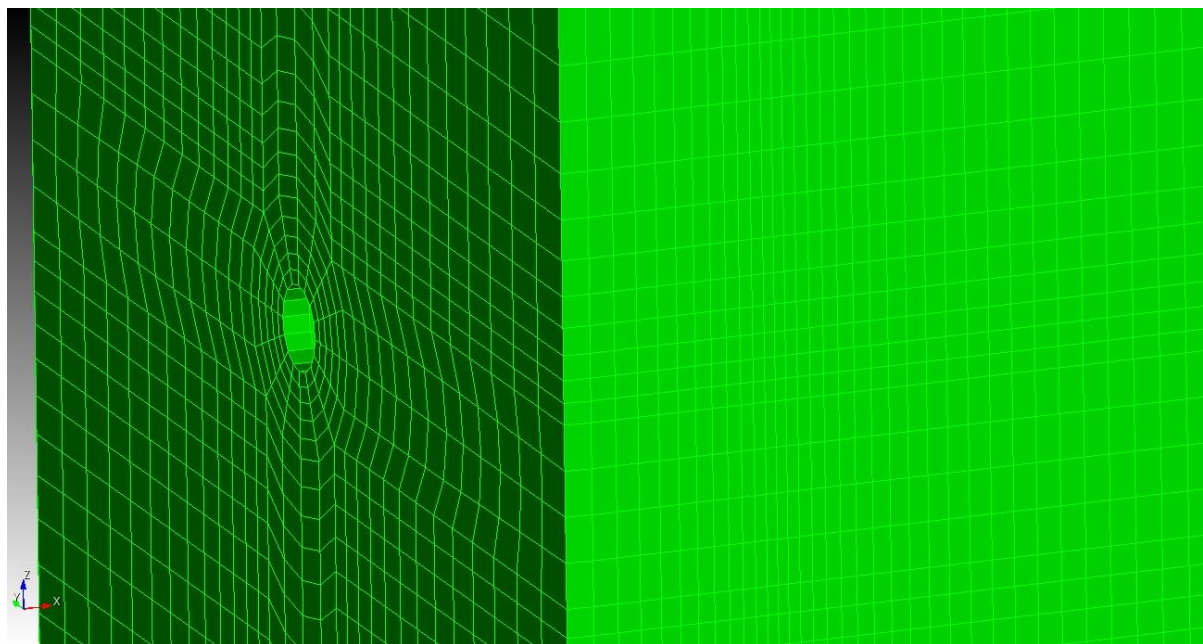
Figure 2. Geometry configuration of test D27

Release period (s)	Nozzle diameter (mm)	Exit velocity (m s^{-1})	Flow rate (NI s^{-1})
60	12	10.17	1.15

Геометрия расчетной модели

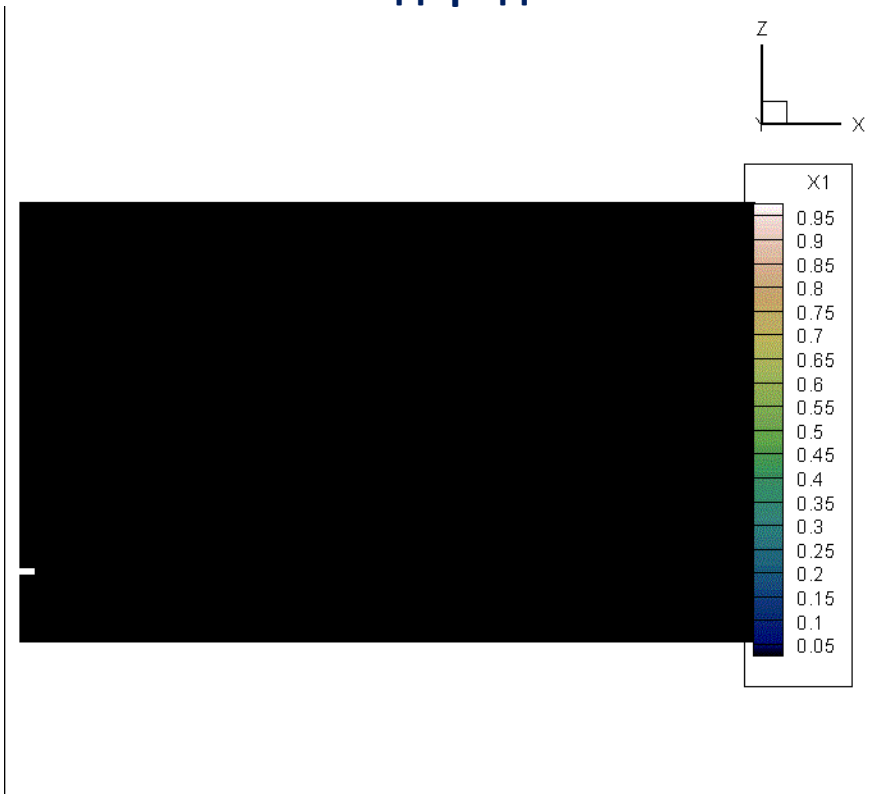


Сетка



1 млн. ячеек

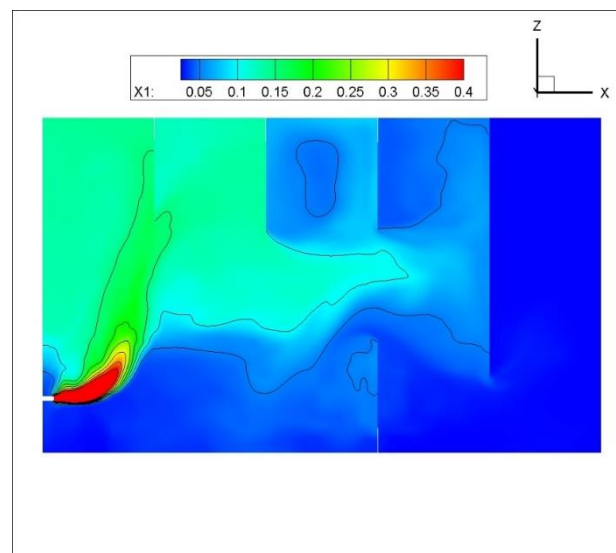
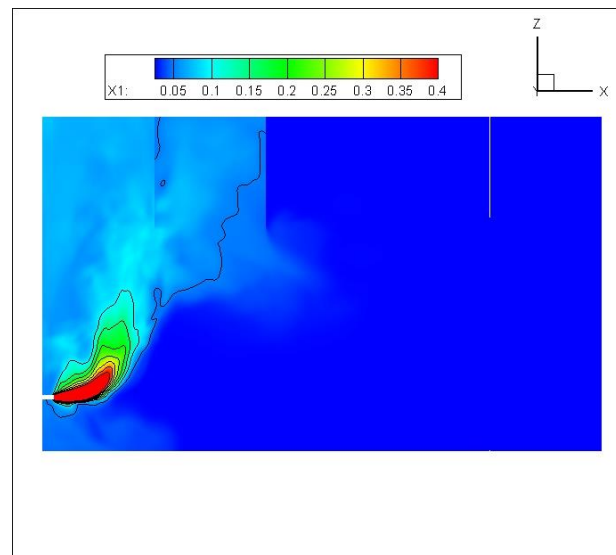
Мольная доля водорода



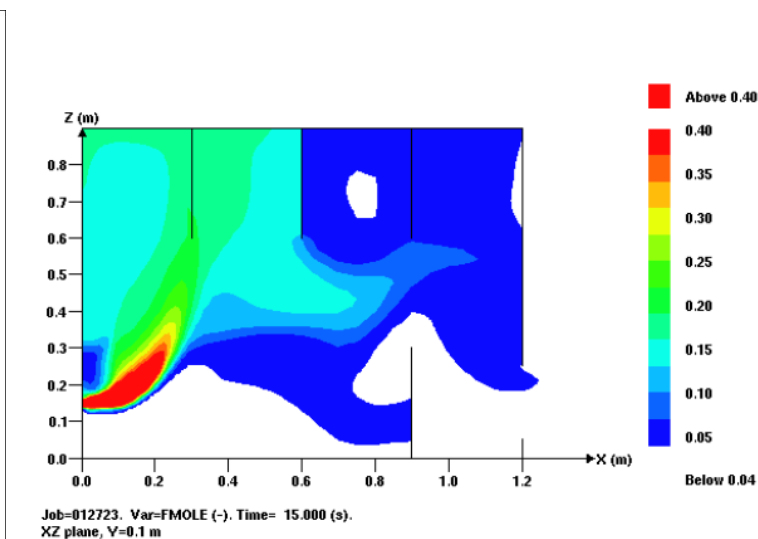
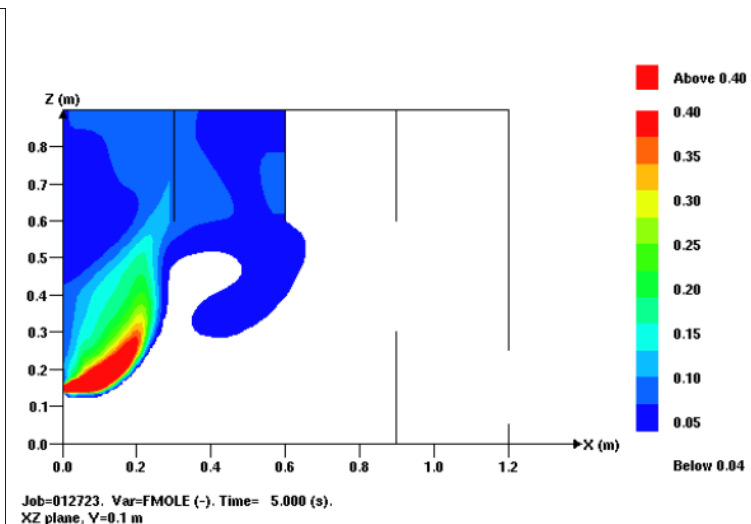
t=5сек

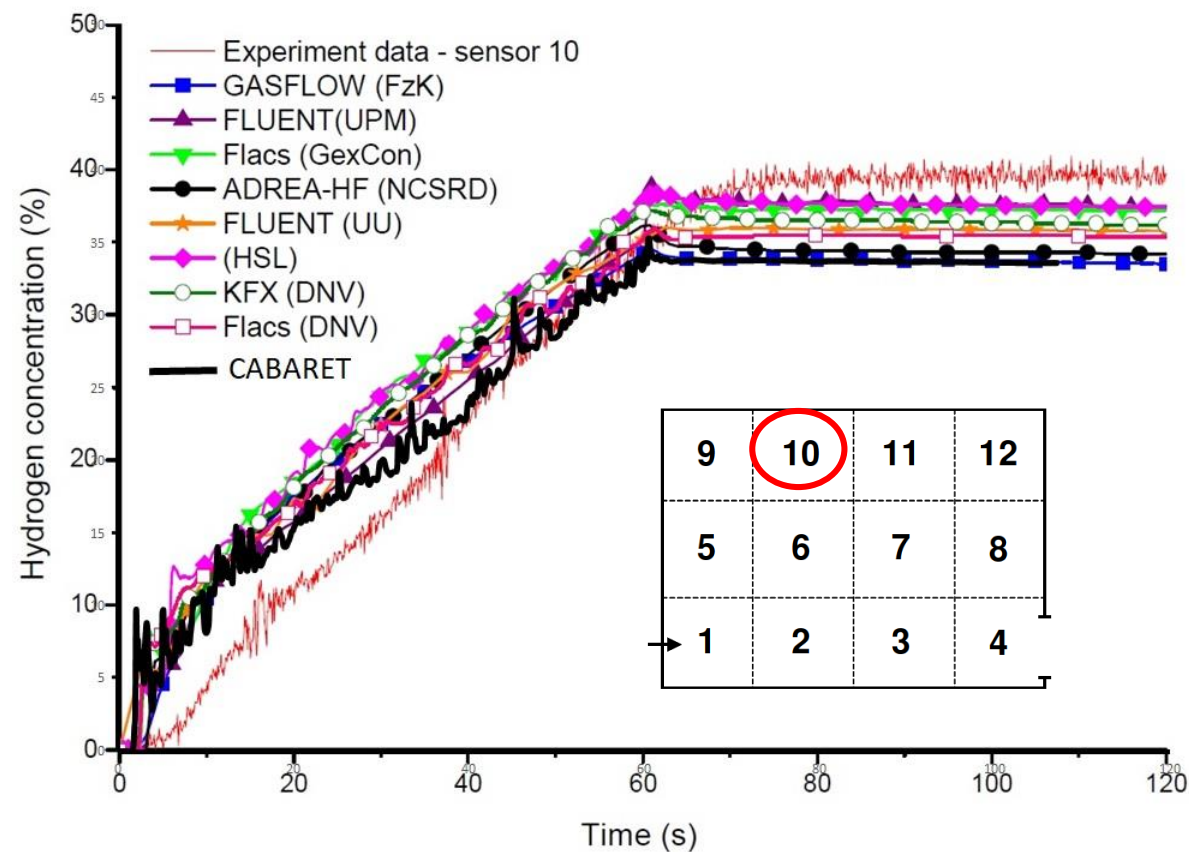
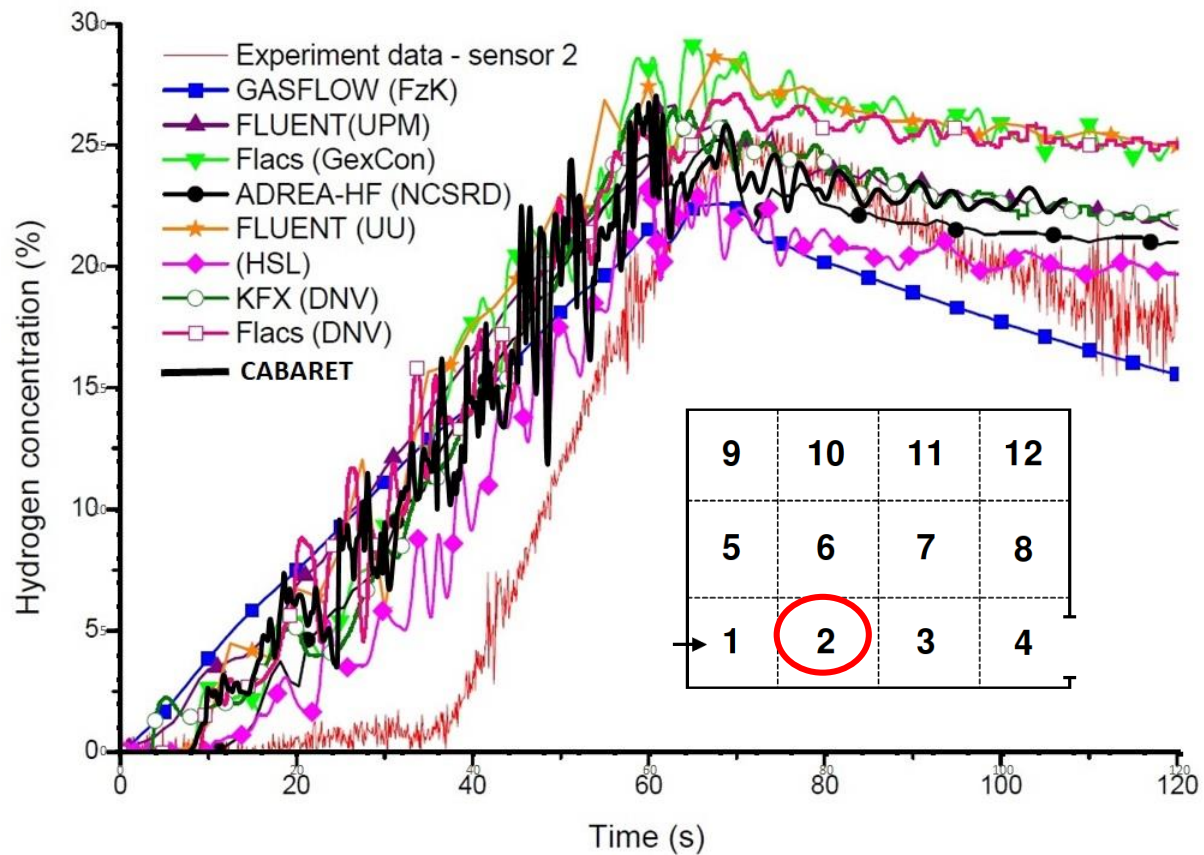
t=15сек

CABARET-SC1



FLACS



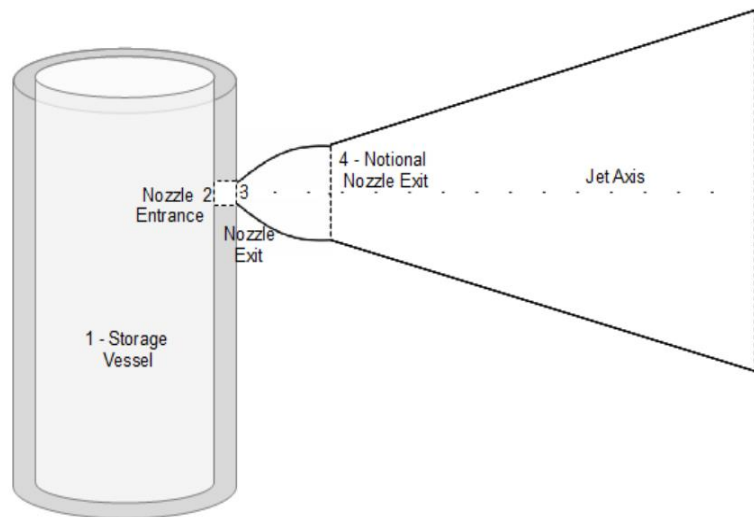




Примеры расчетов

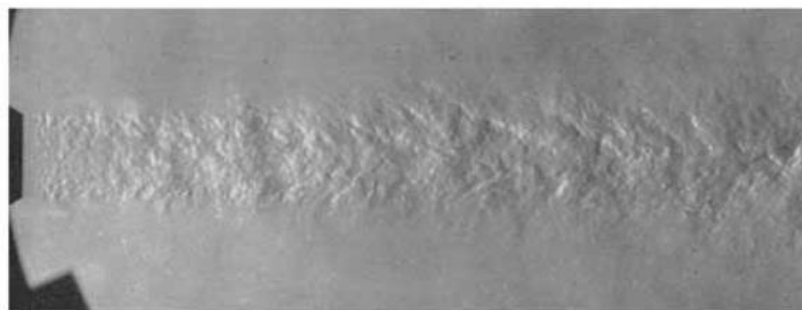
2. Истечение водорода

C. D. Donaldson and R.S. Snedeker. A study of free jet impingement. Part 1.
Mean properties of free and impinging jets.

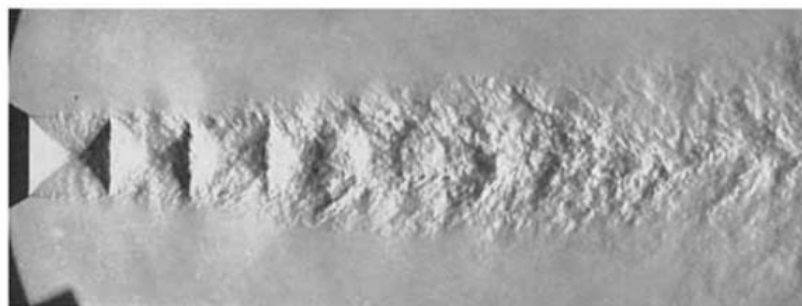


$$\eta_0 = \frac{P_0}{P_\infty}$$

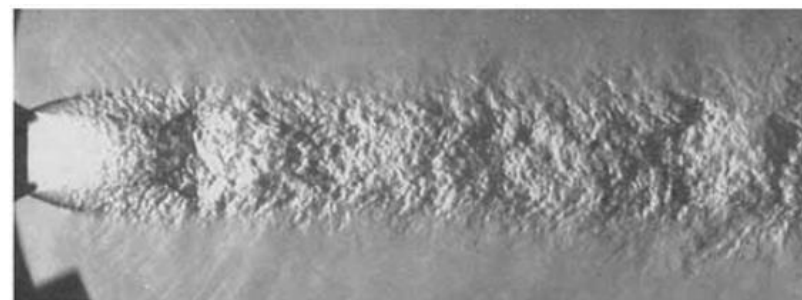
$$\eta_e = \frac{P_e}{P_\infty}$$



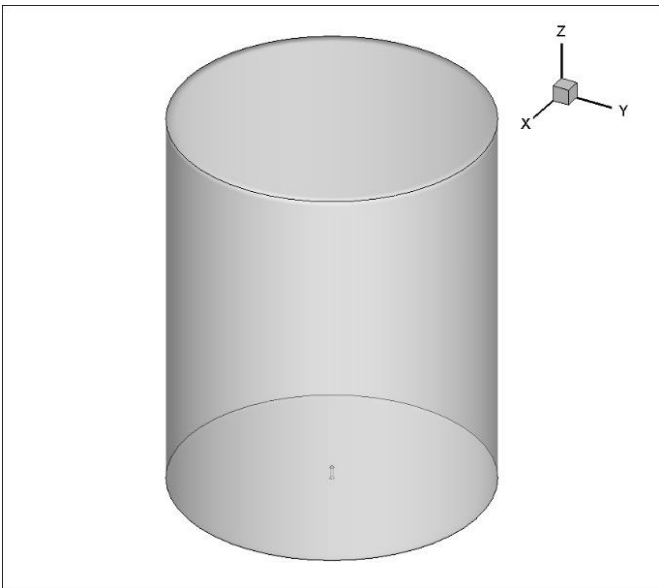
$$\eta_e = 1$$



$$\eta_e = 1,42$$

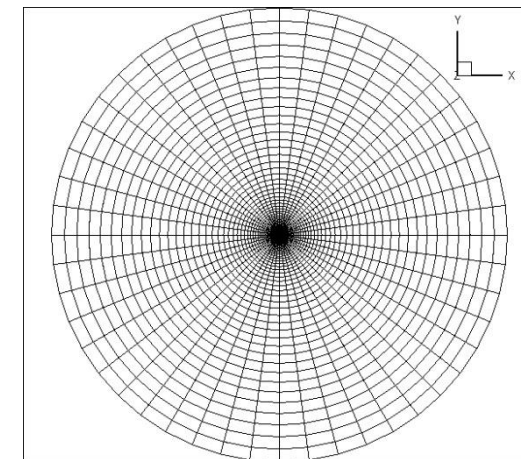
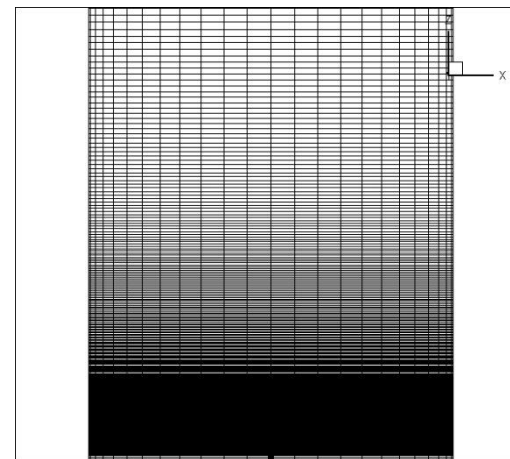


$$\eta_e = 3,57$$



Геометрия

Грубая сетка

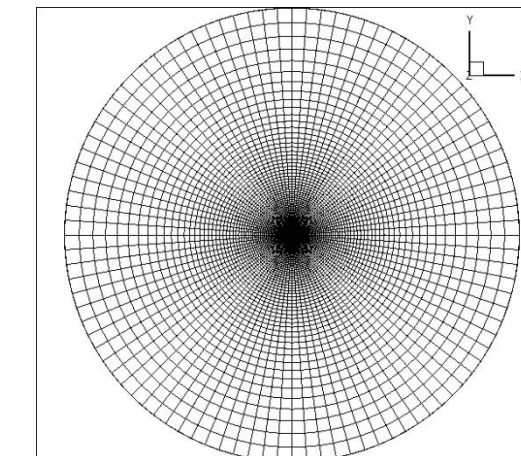
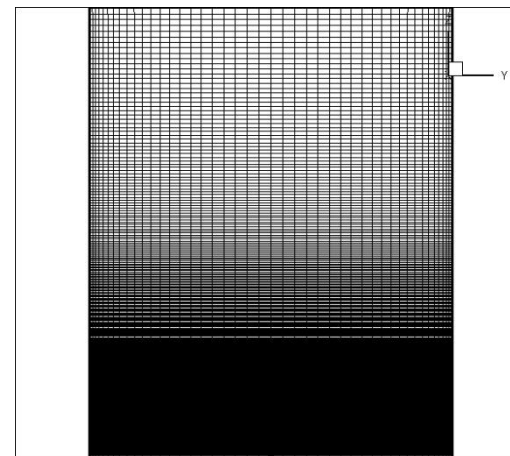


$$d = 1,29794 \text{ cm}$$

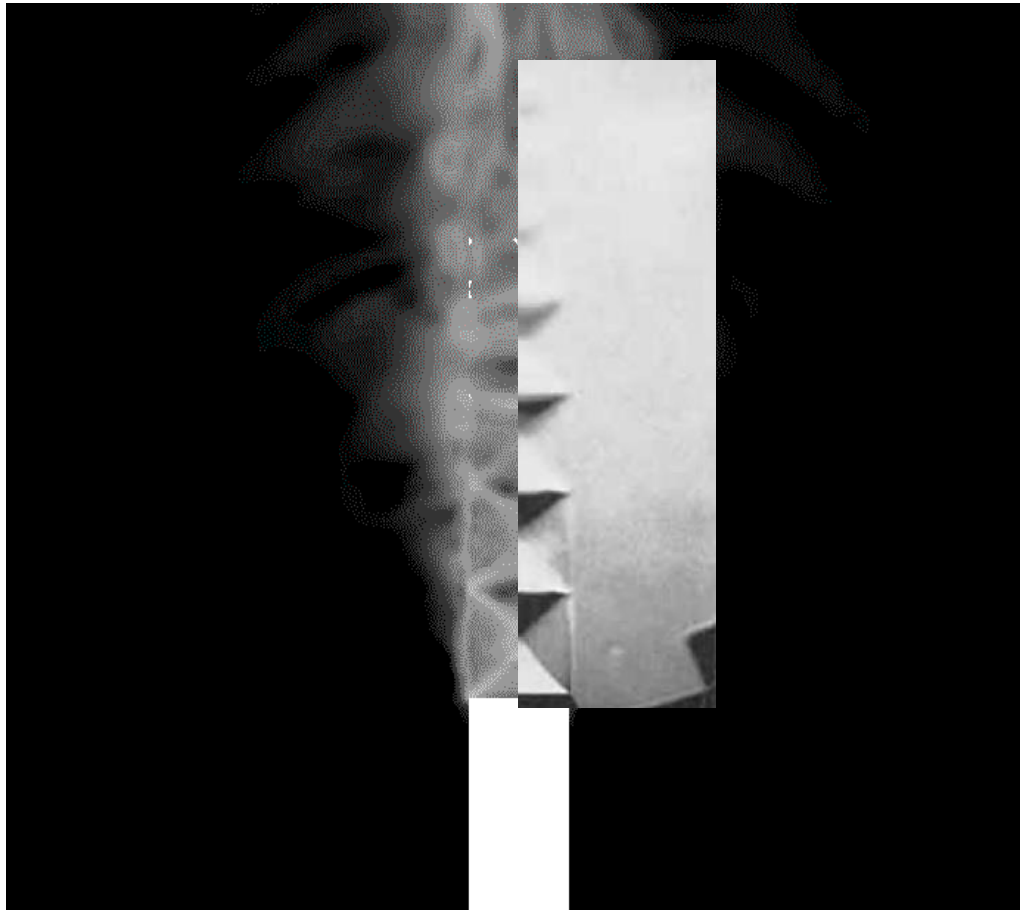
$$r = 40d$$

$$z = 100d$$

Подробная сетка



	Число ячеек на диаметр сопла	Число ячеек по оси Z	Общее число ячеек
Грубая сетка	20	322	890 000
Подробная сетка	40	592	3 974 400



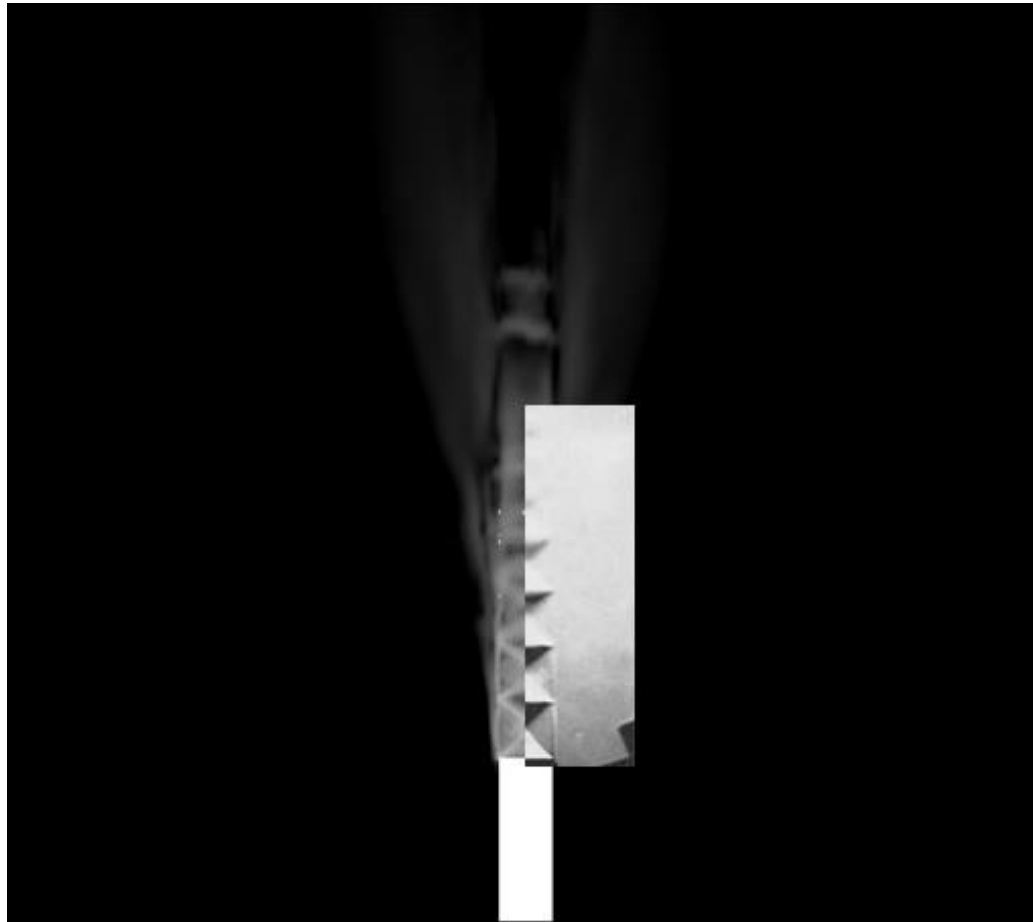
$$\log_{10} (|\nabla \rho|)$$

N=1.42

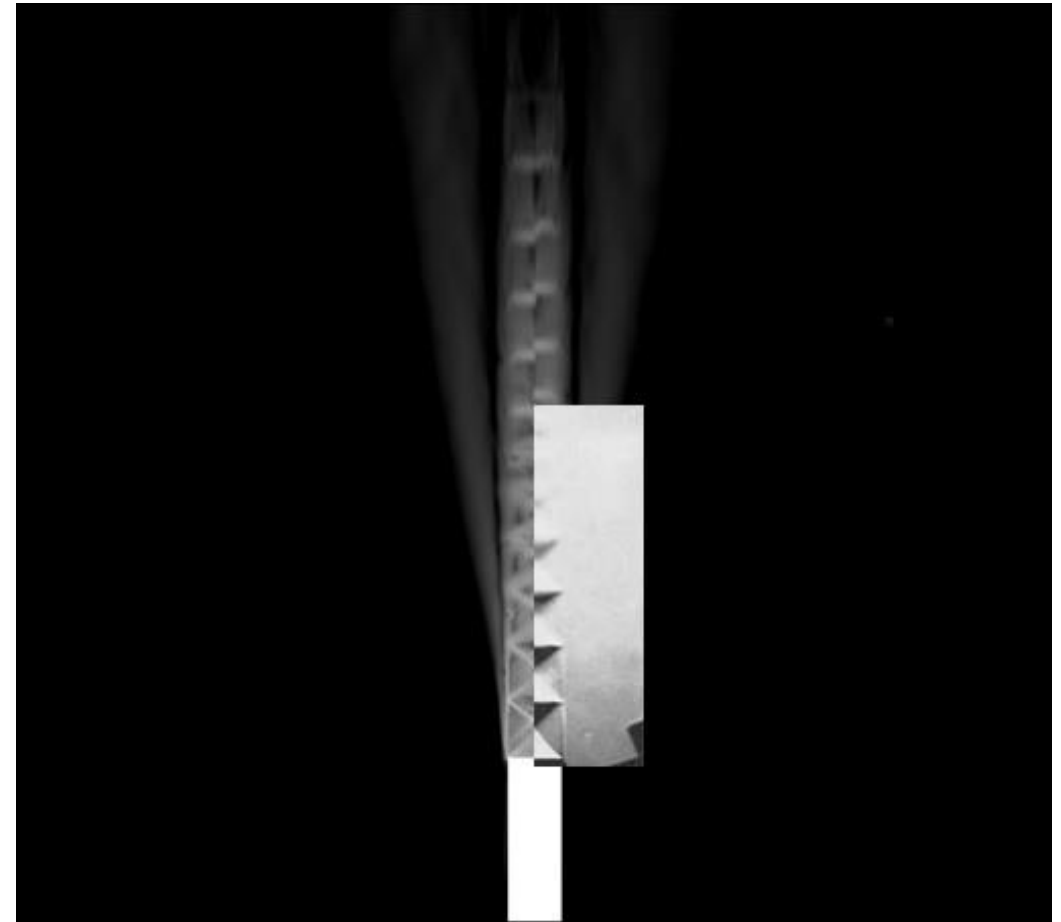


N=3.57

Грубая сетка

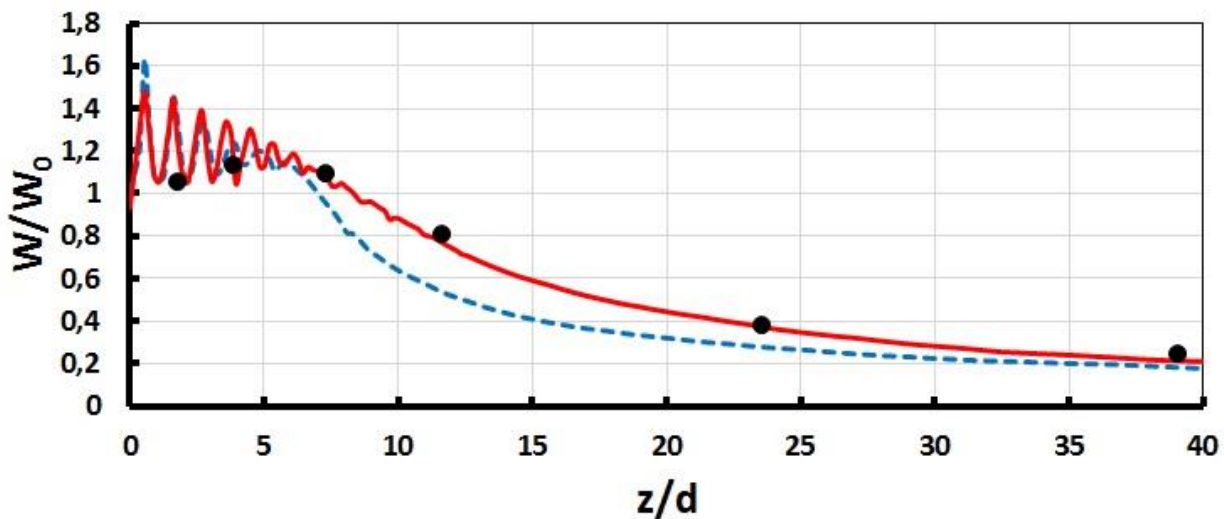


Подробная сетка



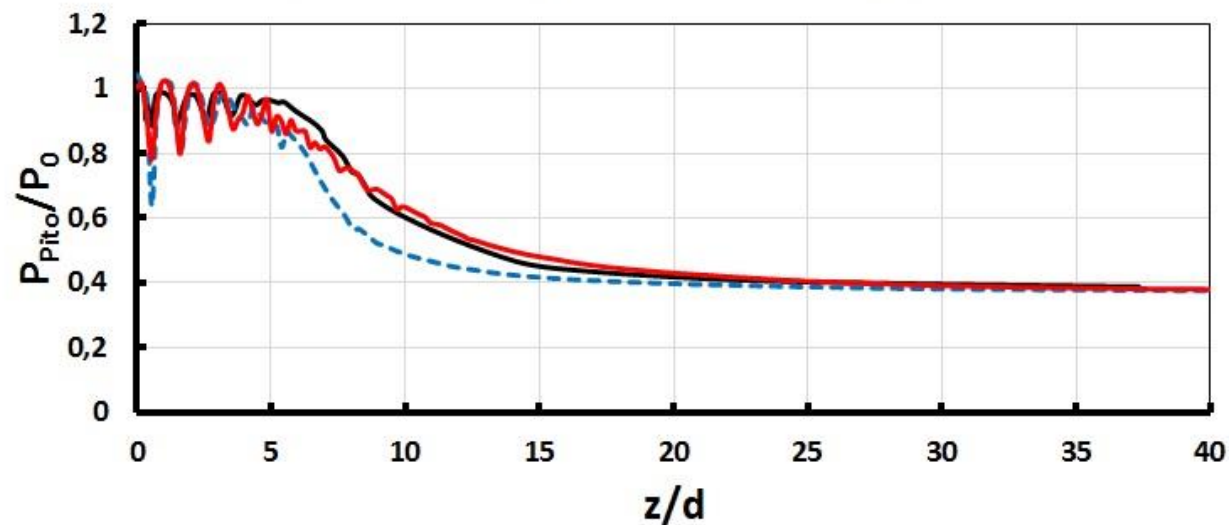
Профиль продольной скорости по оси Z

● Эксперимент - - - Грубая сетка — Подробная сетка

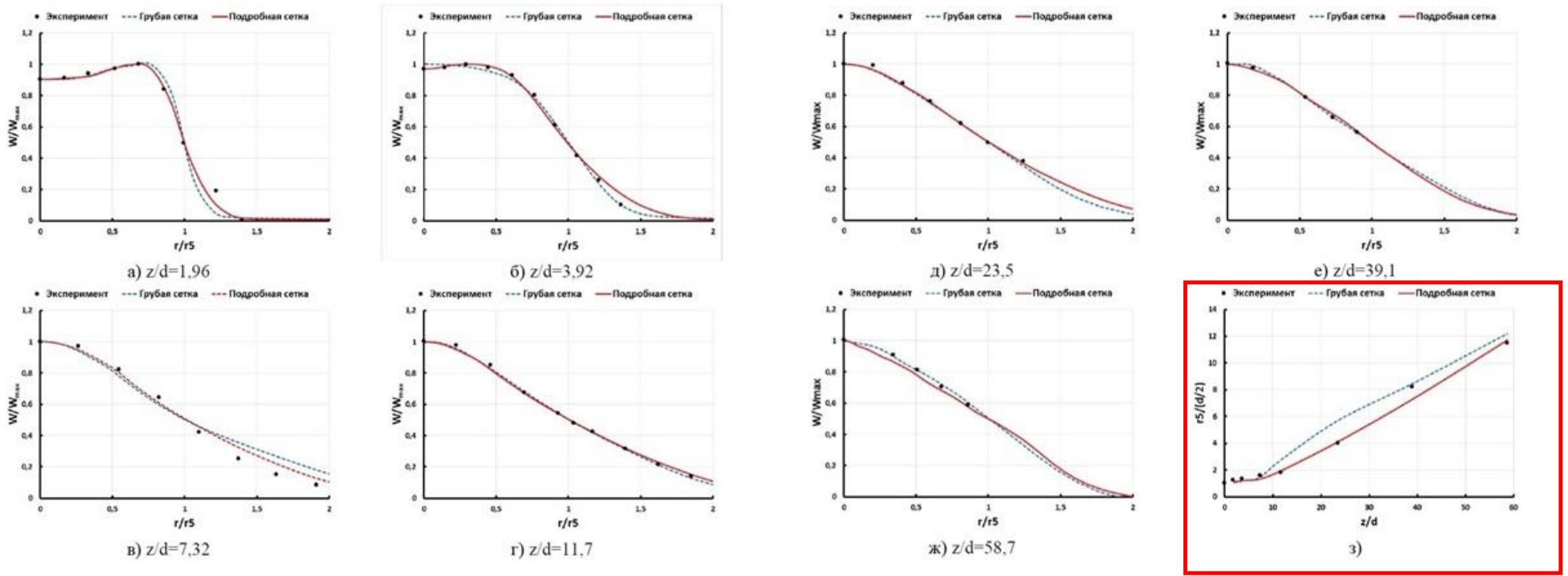


Профиль давления по оси Z

— Экспреимент - - - Грубая сетка — Подробная сетка



Профили продольной скорости по оси R в различных сечениях Z/D

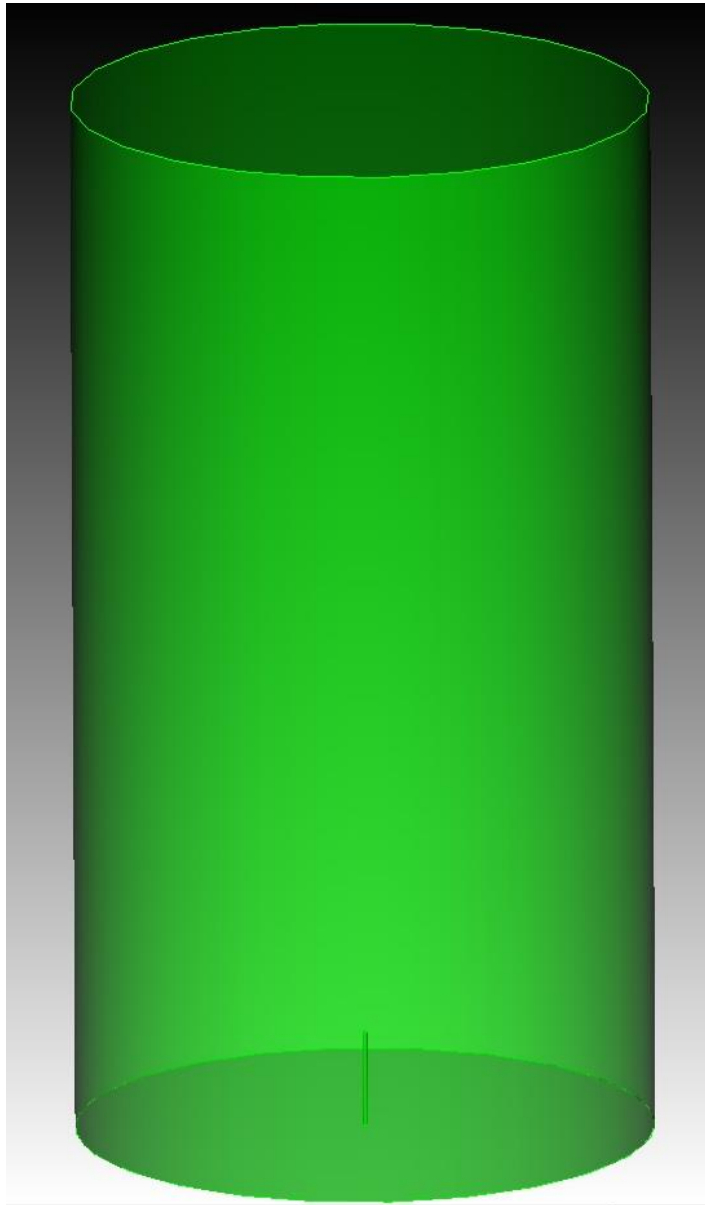


Полуширина струи в зависимости от Z/D

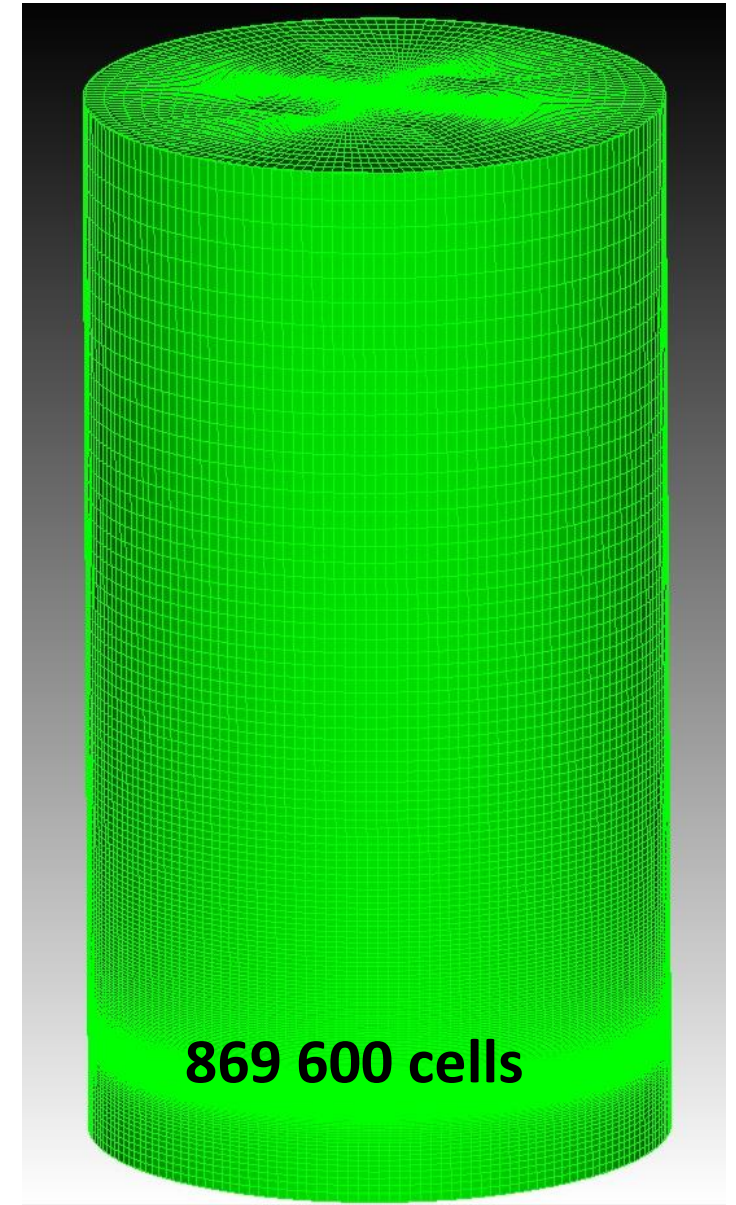
Моделирование дальнего поля струи с помощью моделей эффективного сечения

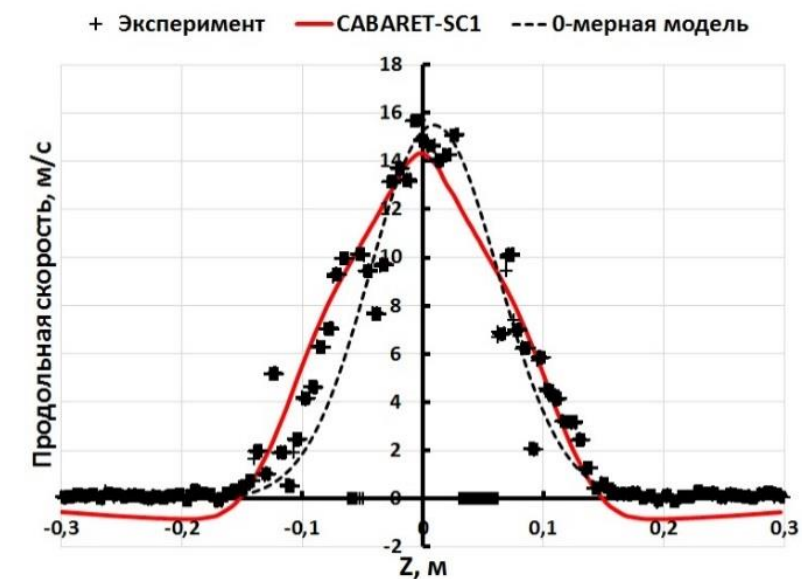
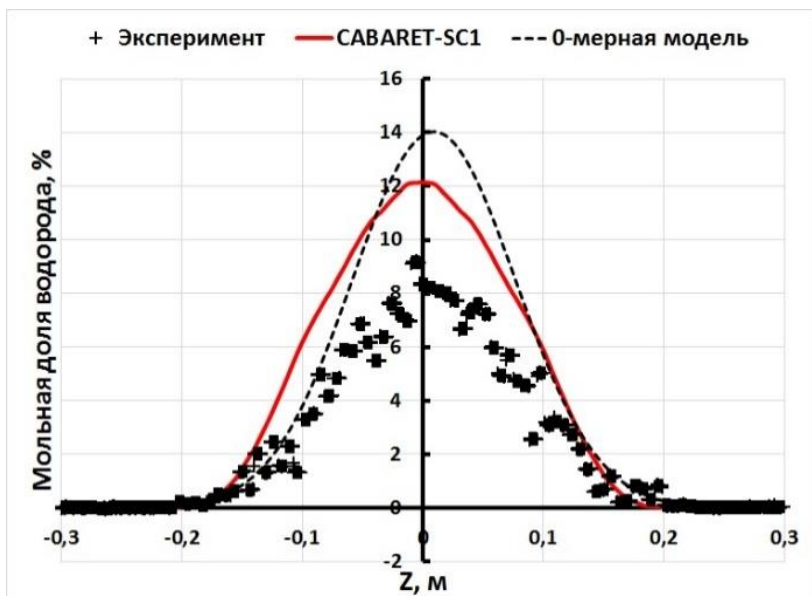
Table 2 – Conditions at the notional nozzle.

Approach	Temperature (K)	Density (kg/m ³)	Velocity (m/s)	Diameter (10 ⁻³ m)	Mass flow rate (10 ⁻³ kg/s)	Momentum flow rate (kg m ² /s)	Enthalpy flux (kJ/s)	Net rate of energy flow (10 ³ kJ/s)
HD35-37 (1 mm nozzle diameter, 53.27 bar)								
Birch1984	287.6	0.0854	1292	5.262	2.4	3.1	10.2	2.01
Birch1987	287.6	0.0854	1984	4.247	2.4	4.76	10.2	4.73
Ewan	238.8	0.1029	1178	5.024	2.4	2.83	8.58	1.67
Schefer	287.6	0.0854	2001	4.228	2.4	4.81	10.2	4.82
Harstad	278.4	0.0882	510	8.241	2.4	1.23	9.92	0.32

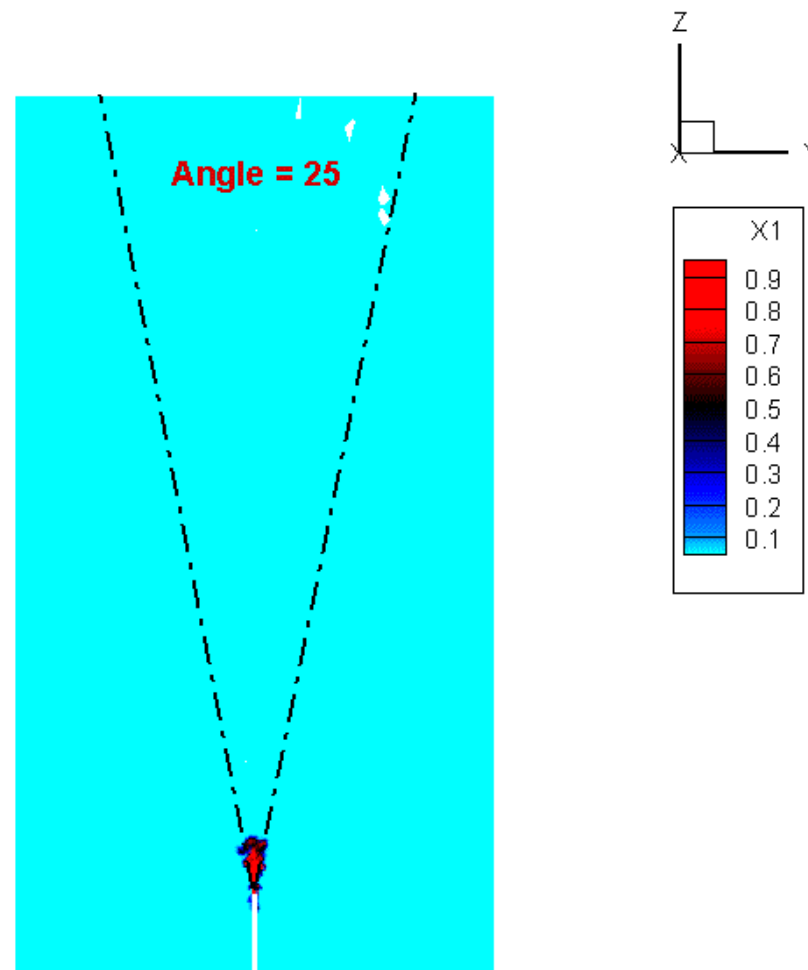


Длина цилиндра : 1m
Диаметр цилиндра : 0.6m
Диаметр сопла: 5.262mm





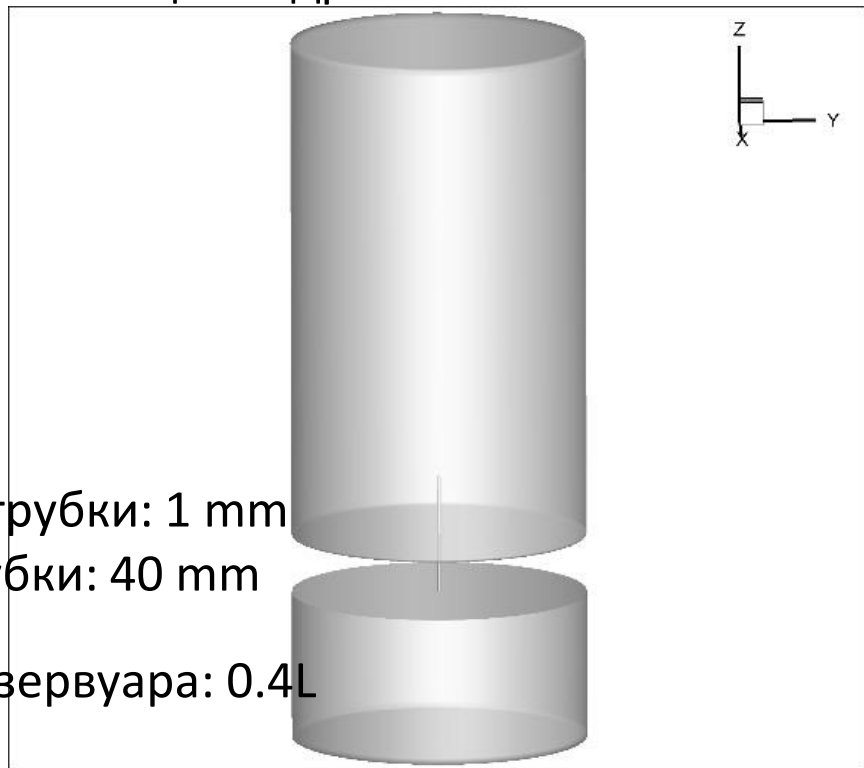
Дальнее поле, диаметр сопла = 5.262 mm



Моделирование ближнего поля струи для нахождения параметров в эффективном сечении

Ближнее поле, диаметр сопла = 1 mm

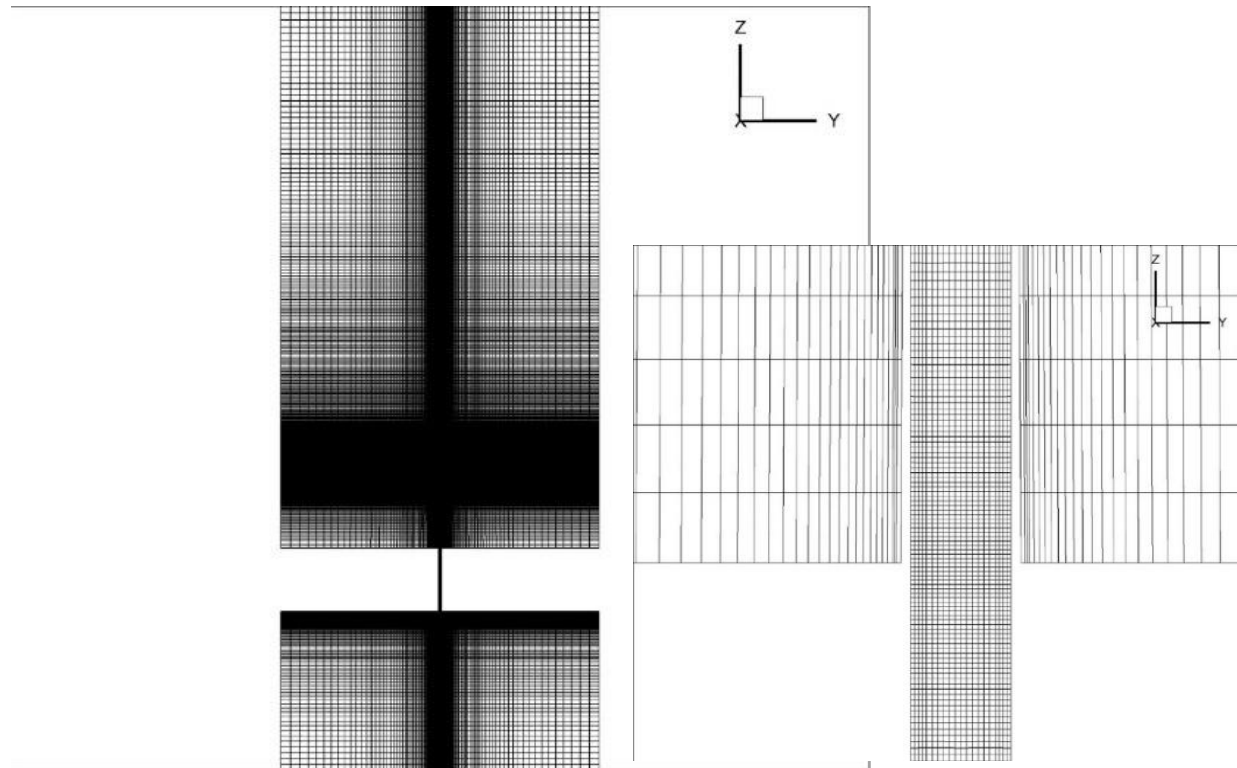
Высота верхнего цилиндра : 150 mm



Диаметр трубки: 1 mm

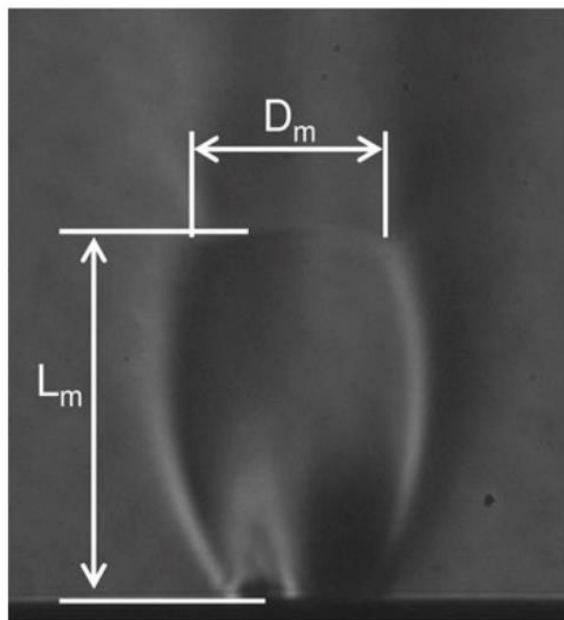
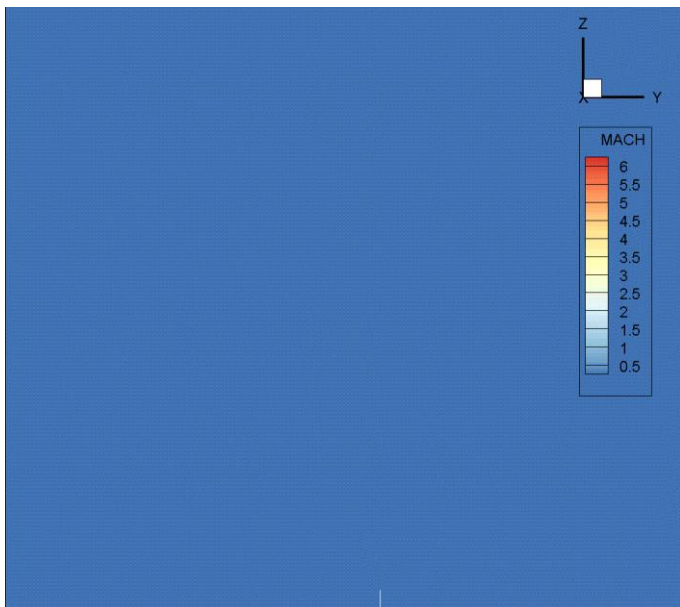
Длина трубки: 40 mm

Объем резервуара: 0.4L



	Число ячеек на диаметр сопла	Число ячеек вдоль оси Z	Общее число ячеек
Сетка	20	320	1 600 368

Бочка Маха



Расстояние до диска Маха

$$L/d \approx 4,8$$

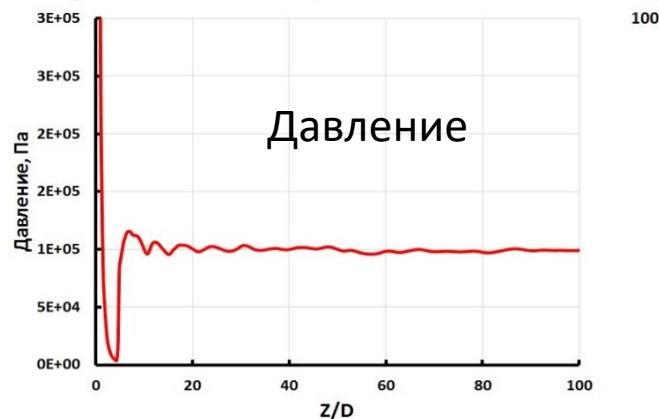
$$L/D = 0,67 \sqrt{P_0/P_\infty} \approx 4,9$$

Диаметр диска Маха

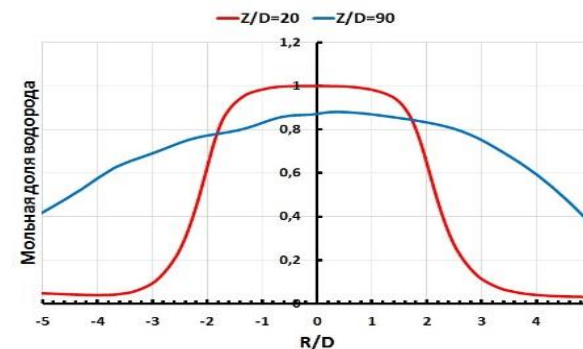
$$D_{DM}/D \approx 2,4$$

$$D_{DM}/D = 0,36 \sqrt{P_0/P_\infty - 3,9} \approx 2,5$$

CFD Weekend, 1 декабря 2019



Мольная доля водорода



Заключение

- **Проведенные валидационные исследования** кода CABARET-SC1 на экспериментах по водородной безопасности, показали высокую точность соответствия расчетных и измеренных данных при условии учета всех определяющих процессов и использования достаточно подробной сеточной модели.
- **Проведена адаптация физико-математических моделей** в коде CABARET-SC1 для моделирования сверхзвуковых и трансзвуковых течений сжимаемых газовых смесей при больших перепадах давления и плотности. Развивается двухэтапный подход для моделирования задач истечения водорода из сосудов высокого давления (ближнее и дальнее поле струи).
- **Дальнейшие планы** – разработка модуля для расчета задач горения и детонации.



Спасибо за внимание