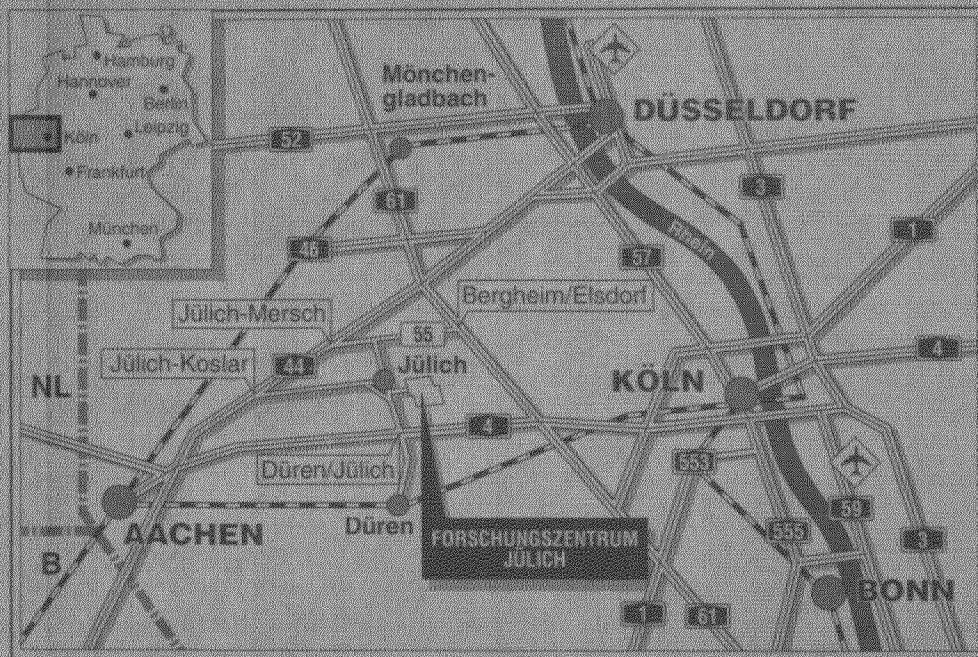


*Institut für Sicherheitsforschung
und Reaktortechnik*

**Beitrag zur Auswertung von Ballon-
Experimenten zu den Ausbreitungs-
funktionen von detonierenden
Wasserstoff-Luft-Gemischen mit
Anwendungsfällen**

Werner Rehm

Wilfried Jahn



Berichte des Forschungszentrums Jülich : 2854

ISSN 0944-2952

Institut für Sicherheitsforschung und Reaktor Technik Jül-2854

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek
D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland

Telefon: 02461/61-6102 · Telefax: 02461/61-6103 · Telex: 833556-70 kfa d

Beitrag zur Auswertung von Ballon-Experimenten zu den Ausbreitungsfunktionen von detonierenden Wasserstoff-Luft-Gemischen mit Anwendungsfällen

Werner Rehm

Wilfried Jahn

Contribution to the Investigation of Balloon Experiments for the Propagation Functions of Detonating Hydrogen-Air-Mixtures with Test Examples

W. Rehm, W. Jahn

ABSTRACT

The purpose of this study is to investigate transient pressure loads from hydrogen combustion. Specially, the study relates to the analysis of the pressure time-history of detonating hydrogen-air-mixtures from balloon experiments.

The study has shown that measured pressure time-functions can be reproduced by numerical simulations with the detonation code DET. Furthermore, it was shown that edges and corners focus detonation waves in real enclosures with obstacles which significantly increase pressure loads from normally reflected detonation waves.

Beitrag zur Auswertung von Ballon-Experimenten zu den Ausbreitungsfunktionen von detonierenden Wasserstoff- Luft-Gemischen mit Anwen- dungsfällen

W. Rehm, W. Jahn

KURZFASSUNG

Der Zweck dieser Studie ist die Untersuchung der transienten Druckbelastungen infolge einer Wasserstoffverbrennung. Insbesondere betrifft die Studie die Analyse der Druck-Zeit-Historie von detonierenden Wasserstoff-Luft-Gemischen aus Ballon-Experimenten.

Die Studie zeigte, daß die gemessenen Druck-Zeit-Verläufe anhand von numerischen Simulationen mit dem Detonationscode DET reproduziert werden können. Außerdem wurde gezeigt, daß durch Kanten und Ecken Detonationswellen in realen Einschlüssen mit Hindernissen fokussiert werden, die die Druckbelastungen einer normal reflektierten Detonationswelle wesentlich übersteigen können.

INHALTSVERZEICHNIS

	Seite
1. Einleitung	1
2. Versuchsbeschreibung	2
3. Auswertungsfaktoren	4
4. Darstellung der Druckverläufe	7
5. Auswertung und Nachrechnung	14
6. Anwendungsbeispiele	27
7. Zusammenfassung	34
8. Literatur	36
9. Anhang	38
Anhang A1: Druck-Zeit-Verläufe	39
Anhang A2: Eingabedaten DET-1D	58
Anhang A3: Vergleich Versuch 5	60

1. EINLEITUNG

Die Untersuchung der Belastungen einer störfallbedingten Wasserstoffverbrennung in Einschlüssen hat für die Sicherheitstechnik in der letzten Zeit zunehmend an Bedeutung gewonnen:

(*) Dies liegt beispielsweise daran, daß Wasserstoff, der auf konventionellem oder nuklearem Wege erzeugt werden kann, als ein zukünftiger Energieträger besonders interessant erscheint. Dabei ergeben sich spezielle Sicherheitsaspekte, die mit der Erzeugung und Lagerung sowie beim Transport verbunden sind (H₂-Anlagen).

(*) Ferner ist die Wasserstoffproblematik auch bei der Auslegung eines Containments gegen Kernschmelzen für neuere Kernreaktoren von sicherheitstechnischer Relevanz (Containmentanalysen). Im Fall einer Kernschmelze würden u.U. erhebliche Mengen eines Wasserstoff-Dampf-Gemisches in die Atmosphäre des Sicherheitsbehälters gelangen und dort reagieren können.

Ziel der Sicherheitsuntersuchungen ist es, die Druckbelastungen innerhalb und außerhalb von Einschlüssen bei einer potentiellen Wasserstoffverbrennung zu bestimmen.

Die Verbrennung von Wasserstoff ist eine chemische Explosion, bei der sich die Flammenfront im Unterschallbereich (Deflagration) oder mit Überschallgeschwindigkeit (Detonation) ausbreitet. Die Deflagration ergibt statische Drücke in dem Einschluß, während die Detonation dynamische Drücke erzeugt, die Resonanzschwingungen der Struktur hervorrufen können.

Zur Untersuchung der Druck-Zeit-Verläufe von Wasserstoff-Detonationsfronten wurde vom Fraunhofer (FhG) Institut für Chemische Technologie (ICT) eine experimentelle Studie für das Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik (INR) des Kernforschungszentrums Karlsruhe (KfK) durchgeführt. Mit diesen Experimenten können numerische Rechenverfahren überprüft und für Sicherheitsanalysen abgesichert werden. Bei der Codevalidierung ist das Institut für Sicherheitsforschung und Reaktortechnik (ISR) der KFA Jülich involviert.

2. VERSUCHSBESCHREIBUNG

Vom ICT der FhG wurden sechs Versuchsreihen zur Ausbreitung von detonierenden Wasserstoff-Luft-Gemischen in Ballon-Experimenten durchgeführt. Die Experimente erfolgten für das INR der KfK im Rahmen der Untersuchung von chemischen Wasserstoffexplosionen in Sicherheitseinschlüssen. Die Experimente dienen der Analyse von Einzeleffekten und der Überprüfung von Rechenmodellen.

Bei der Auswertung der Ballon-Experimente war das ISR der KFA beteiligt. Der vorliegende Bericht beschreibt die in diesem Zusammenhang durchgeführten Arbeiten. Die systematische Darstellung der Meßergebnisse erfolgte mit Hilfe eines Plotprogramms; zur Nachrechnung von Versuchen wurde das Rechenprogramm DET verwendet.

Die Versuche zur Bestimmung der Ausbreitungsfunktionen (Überdruck, Dauer und Impuls der positiven Druckphase, sowie Ankunftszeit) homogener Wasserstoff-Luft-Gemische wurden in dünnwandigen hemisphärischen Polyäthylen-Ballons mit einem Volumen von etwa 50 m^3 durchgeführt. Die Wasserstoff-Konzentration lag bei 29,6 Vol% (stöchiometrisch) und bei 20 Vol% (oberhalb der unteren Detonationsgrenze von Wasserstoff in Luft). Die Zündung erfolgte zentral am Boden mit 50 g Sprengstoff /1/.

Die erzeugten Druckwellen wurden mit Piezo-Druckaufnehmern innerhalb und außerhalb des Ballons gemessen (bei ca. 450 bzw. 70 kHz Eigenfrequenz), die auf der Erdoberfläche montiert waren. Die Meßpositionen sind aus Abb. 1a und 1b ersichtlich.

Die verwendete Meßstrecke wurde in Vorversuchen skaliert, wobei zunächst die Ausbreitungsfunktionen der reinen Zündladung gemessen wurden, die eine Explosionswärme von $5,259 \text{ kJ/g}$ besitzt. Die Abb. 2 gibt einen Überblick über die erforderliche Mindestenergie zur direkten Initiierung einer Detonation /2/, die im allgemeinen relativ groß ist.

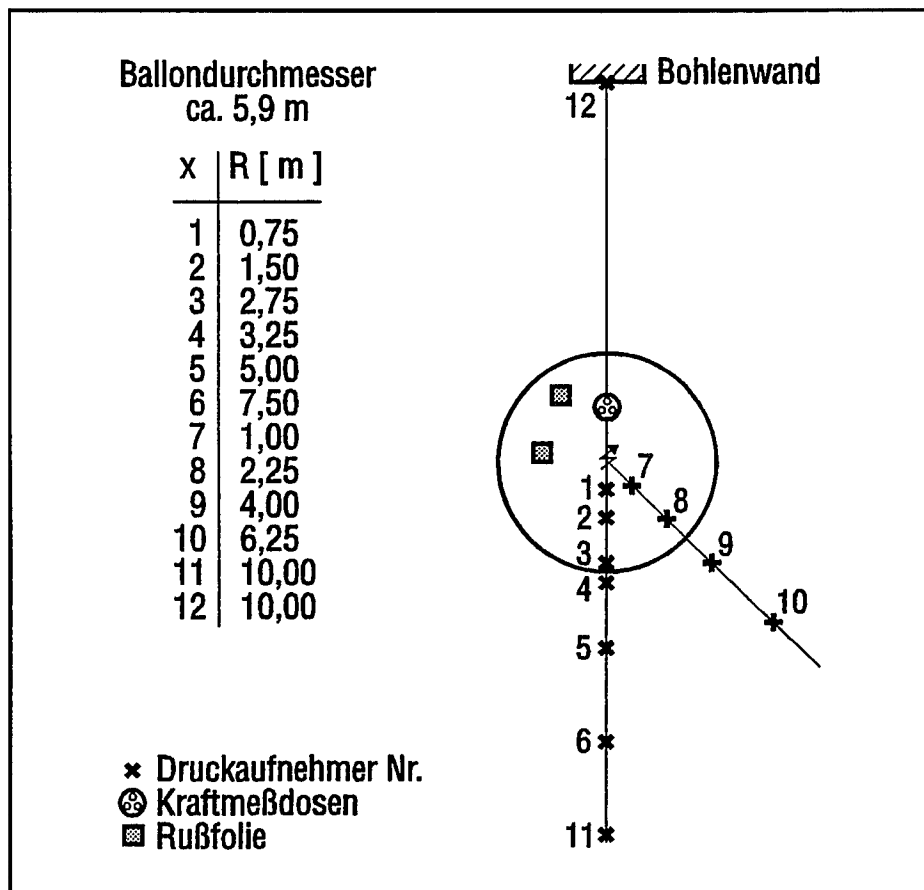


Abb. 1a: Meßpositionen der Versuche HBAL 1 bis 4

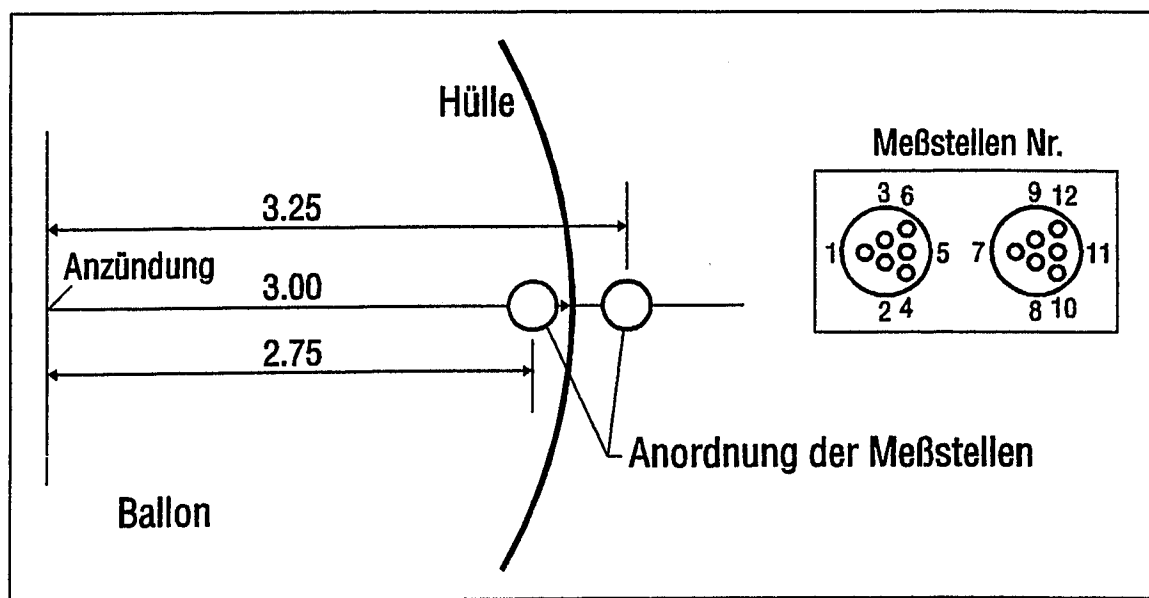


Abb. 1b: Meßpositionen der Versuche HBAL 5 und 6

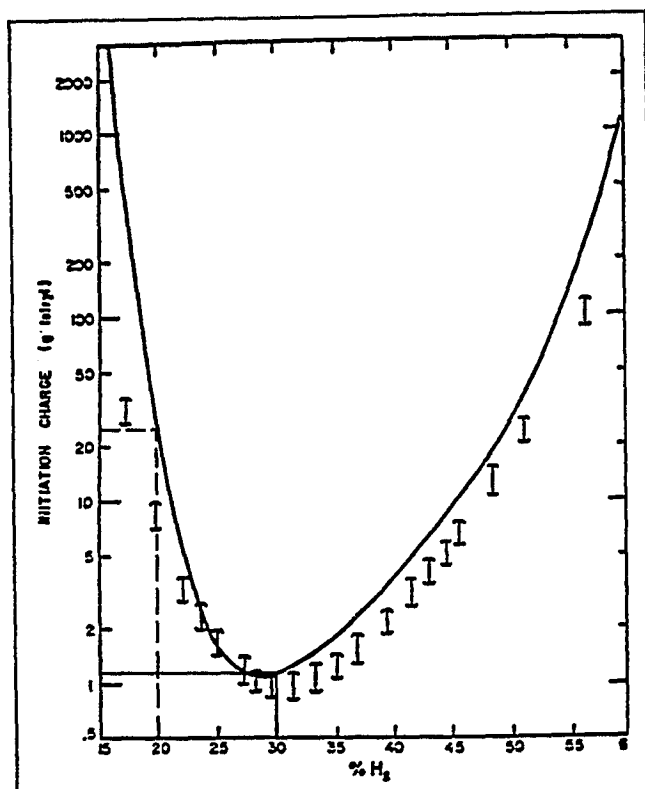


Abb. 2: Minimale Energie zur direkten Initiierung einer Detonation (1g Tetryl = 4,27 kJ)

3. AUSWERTUNGSFAKTOREN

Die spezifischen Anfangsbedingungen der einzelnen Wasserstoff-Luft-Gemische, mit denen die sechs Versuche durchgeführt wurden, sind in Tab. 1 zusammengestellt. Die Meßergebnisse wurden vom ICT für die Auswertung rechnergesteuert aufgezeichnet und entsprechend den Vorversuchen korrigiert. Die für die Darstellung der Meßergebnisse bei den 12 Meßstellen der Versuche HBAL 1 bis 6 zugrunde gelegten Umrechnungsfaktoren sind aus Tab. 2 ersichtlich.

Damit konnten die Drucksignale der hochdynamischen Drucksensoren wiedergegeben werden, wie sie bei der detonativen Verbrennung von Wasserstoff-Luft-Gemischen in einer hemisphärischen Geometrie zu erwarten sind.

Tab. 1: Versuchsspezifische Daten von HBAL 1 bis 6

Versuch 1: $V = 53 \text{ m}^3$; $T = 31^\circ \text{C} = 304 \text{ K}$,
 $p_o = 749 \text{ Torr} = 999 \text{ hPa}$,
 $\text{CH}_4 = 29,05 \text{ Vol } \%$; $Q = 2800 \text{ kJ/kg}$, $M = 21,055 \text{ g/Mol}$
 $d_o = 0,8318 \text{ kg/m}^3$, $m = 44,083 \text{ kg}$,
 $E = 2,46865 \times 10^5 \text{ kJ}$

Versuch 2: $V = 50 \text{ m}^3$, $T = 28^\circ \text{C} = 301 \text{ K}$,
 $p_o = 748 \text{ Torr} = 997 \text{ hPa}$,
 $\text{CH}_4 = 18,52 \text{ Vol } \%$, $Q = 1900 \text{ kJ/Kg}$, $M = 23,881 \text{ g/Mol}$
 $d_o = 0,9509 \text{ kg/m}^3$, $m = 47,544 \text{ kg}$,
 $E = 1,80667 \times 10^5 \text{ kJ}$

Versuch 3: $V = 50 \text{ m}^3$, $T = 35^\circ \text{C} = 308 \text{ K}$,
 $p_o = 748 \text{ Torr} = 997 \text{ hPa}$,
 $\text{CH}_4 = 26,91 \text{ Vol } \%$, $Q = 2640 \text{ kJ/kg}$, $M = 21,628 \text{ g/Mol}$
 $d_o = 0,8416 \text{ kg/m}^3$, $m = 42,081 \text{ kg}$,
 $E = 2,22186 \times 10^5 \text{ kJ}$

Versuch 4: $V = 50,2 \text{ m}^3$, $T = 22^\circ \text{C}$, $p_o = 1002 \text{ mbar}$,
 $\text{CH}_4 = 19,07 \text{ Vol } \%$

Versuch 5: $V = 51,1 \text{ m}^3$, $T = 25^\circ \text{C}$, $p_o = 993 \text{ mbar}$,
 $\text{CH}_4 = 20,5 \text{ Vol } \%$

Versuch 6: $V = 51,0 \text{ m}^3$; $T = 25^\circ \text{C}$, $p_o = 993 \text{ mbar}$,
 $\text{CH}_4 = 20,0 \text{ Vol } \%$

Tab. 2: Umrechnungsfaktoren der Versuchsreihen

Meßstelle	Versuch		
	1 - 3	4	5 - 6
1	0.712	0.712	0.154
2	0.776	0.776	0.146
3	0.751	0.751	0.142
4	1.401	1.401	0.146
5	10.0	10.0	0.146
6	50.0	50.0	0.144
7	0.732	0.732	0.712
8	1.447	1.447	0.776
9	10.0	10.0	0.751
10	50.0	50.0	0.732
11	50.0	50.0	1.401
12	50.0	50.0	1.447

Die Abb. 3 zeigt eine typische Ausbreitung derartiger Luftstoßfronten (Blastwelle), die zusätzlich mit einer Hochfrequenzkamera (5000 Bilder/sek) aufgezeichnet wurden. Damit war es möglich, die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flammfronten zu ermitteln. Die Detonationsgeschwindigkeit beträgt z.B. für ein stöchiometrisches H₂-Luftgemisch rund 1950 m/s, wie aus Abb. 4 hervorgeht /3/.

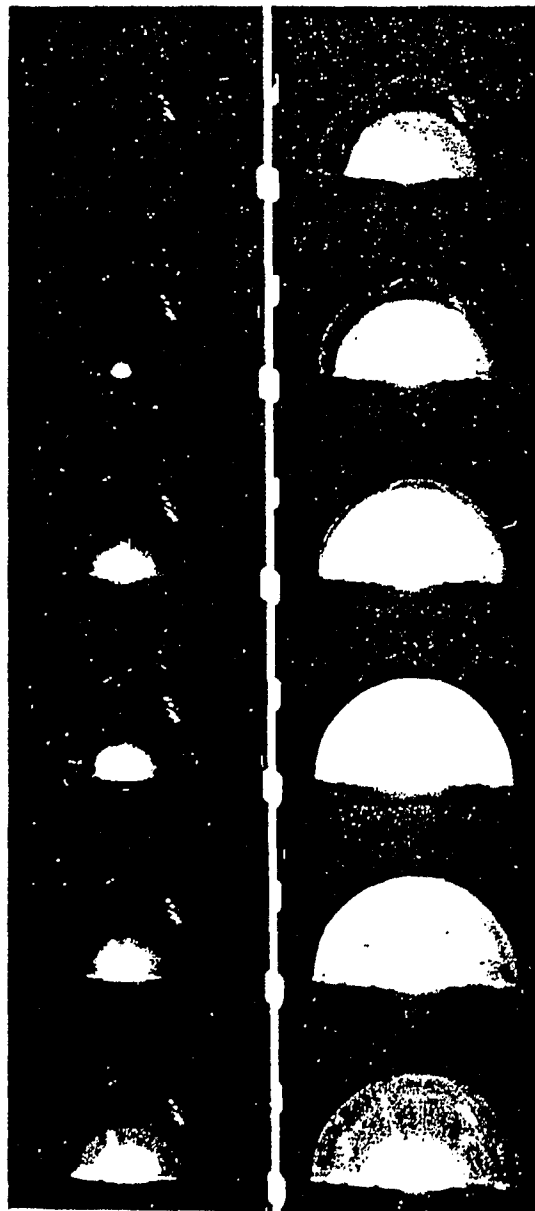


Abb. 3: Hemisphärische Ausbreitung einer Detonationsfront

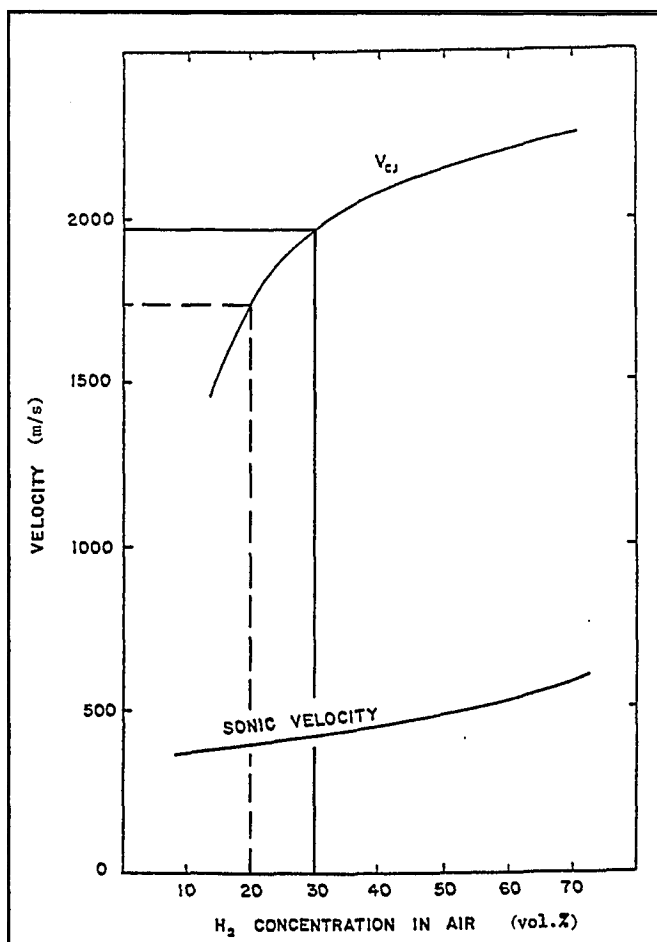


Abb. 4: CJ-Detonationsgeschwindigkeit für verschiedene Wasserstoff-Luft-Gemische bei Normalbedingungen (gleich der Machzahl mal Schallgeschw. im unverbrannten Gas).

Für die integrale Druckmessung war ein Kraftaufnehmer vorgesehen und zur Darstellung der Detonationsmuster Rußfolien. Beide Einrichtungen ergaben jedoch meßtechnische Probleme.

4. DARSTELLUNG DER DRUCKVERLÄUFE

Die Darstellung der Meßergebnisse konzentrierte sich im wesentlichen auf die gemessenen Druck-Zeit-Verläufe der Drucksensoren. Zur Einordnung und Interpretation der folgenden Abbildungen ist es hilfreich, kurz auf einige Grundphänomene bei schnellen Verbrennungsabläufen einzugehen.

Im Vordergrund steht eine Klassifizierung nach den Druckniveaus. In der Abb. 5 ist der prinzipielle Aufbau einer Gasdetonationsfront dargestellt. Der führende Schock heizt das unverbrannte Gas auf hohe Temperaturen. In der Induktionszone dissoziieren dadurch die Moleküle zu Radikalen. In der Reaktionszone erzeugen Rekombinationsreaktionen die Reaktionswärme, wodurch die Gas-temperatur stark ansteigt. In der Chapman-Jouguet (CJ) Ebene haben die nach hinten abströmenden Verbrennungsprodukte, relativ zur Reaktionszone, Schallgeschwindigkeit erreicht. Dabei ist die Detonationsgeschwindigkeit (D) größer als die Schallgeschwindigkeit (C) der Verbrennungsprodukte (V); d.h. $D = C + V$.

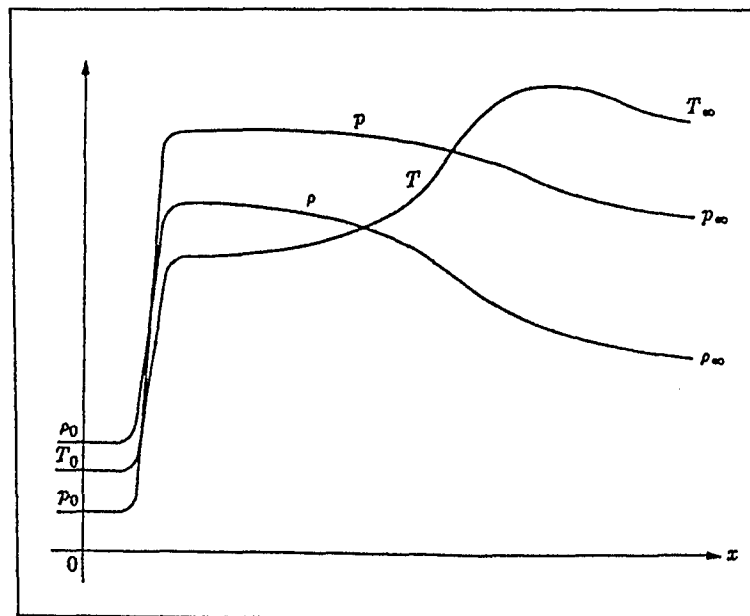


Abb. 5: Verlauf des Drucks, der Temperatur und der Dichte in einer Detonationsfront mit Schockfront, Induktions/Reaktionszone und der CJ-Ebene.

Die resultierenden Druckverhältnisse einer planaren Detonationswelle sind in Abb. 6 in Abhängigkeit der H_2 -Konzentration dargestellt (mittlere Kurve), im Vergleich mit einer reflektierten Schockwelle (obere Kurve) und bei einer deflagrativen Verbrennung (untere Kurve als AICC-Wert; d.h. bei einer adiabaten, isochoren, vollständigen Verbrennung) bei Normalbedingungen /3/.

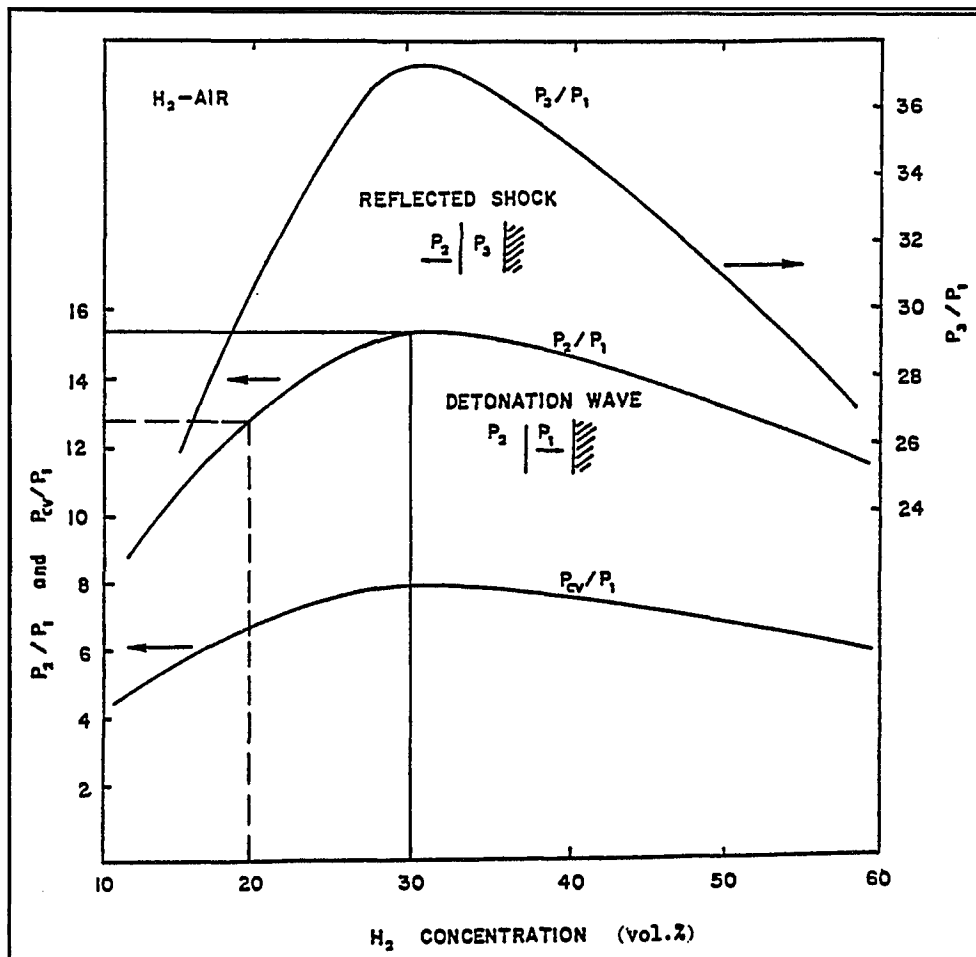


Abb. 6: Druckverhältnisse bei einer Deflagration, Detonation und reflektierten Schockwelle für H₂-Luft-Gemische.

Aus Abb. 6 geht hervor, daß der CJ-Gleichgewichtsdruck in erster Näherung das 2-fache des statischen AICC-Drucks beträgt. Der von Neumann-Druck (v_N) in der Reaktionszone (hier nicht eingezeichnet) ist in etwa zweimal so groß wie der CJ-Druck. Der reflektierte CJ-Druck ist nahezu das 2,5-fache des einfallenden CJ-Drucks. Ferner können Fokussierungseffekte in Ecken oder Turbulenzen an Hindernissen Spitzendrücke des mehr-fachen CJ-Drucks bewirken /3/, wie später beispielsweise gezeigt wird.

Typische thermodynamische Eigenschaften eines stöchiometrischen H₂-Luft-Gemisches sind zum Beispiel in Tab. 3 wiedergegeben.

Tab.3: Eigenschaften eines stöchiometrischen H₂-Luft-Gemisches bei 298 K und 1 atm

Property	AICC	CI	Reflected CI
Pressure, P	0.813 MPa	1.582 MPa	3.844 MPa
Specific heat ratio, γ	1.1686	1.1639	1.1604
Detonation velocity, V_{CI}		1967.6 m/s	
Sound speed, a	1053.1 m/s	1090.6 m/s	1155.2 m/s

Auf die räumliche und zeitliche Ausbreitung einer Detonationswelle haben Rand- und Geometriebedingungen einen entscheidenden Einfluß. Die Abb. 7 zeigt zum Vergleich die Unterschiede bei der Reflexion einer Detonationswelle in einer planaren, zylindrischen und sphärischen Geometrie. Man erkennt die einzelnen Reflexionspeaks bis der AICC-Druck erreicht wird /4/.

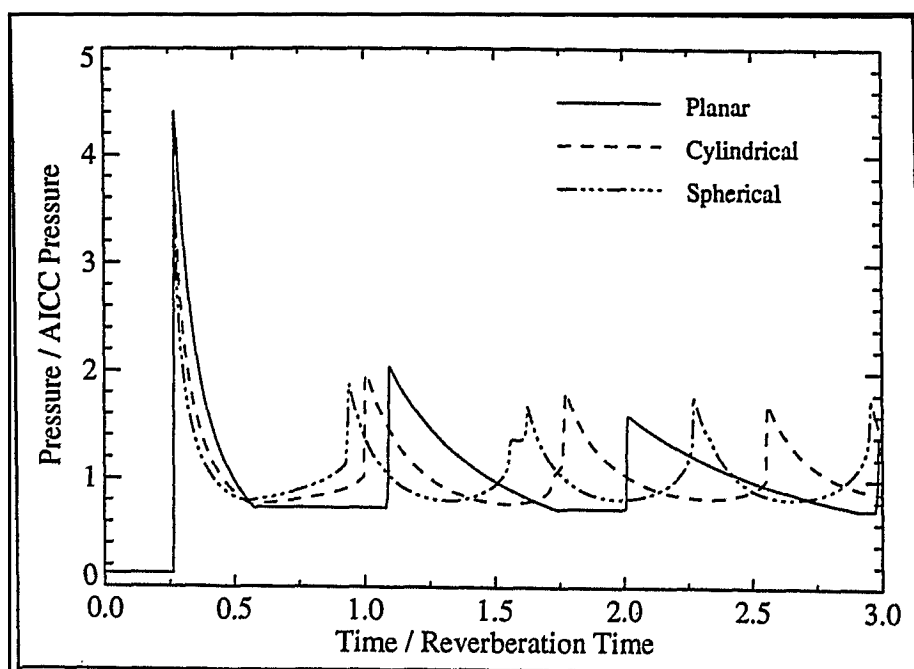


Abb. 7: Vergleich der Reflexionsdrücke in planaren, zylindrischen und sphärischen Geometrien.

Entsprechend der eingangs erwähnten Beschreibung wurden die Meßergebnisse der Versuche HBAL 1 bis 6 mittels eines Plotprogramms systematisch dargestellt und kondensiert. Aufbereitet wurden die Meßwerte, bei denen eine Interpretation sinnvoll war. Ausgesondert wurden fehlerhafte Meßstellen, oder Meßwerte, die unklare Umrechnungsfaktoren ergaben.

Dabei wurden die ersten Millisekunden als Bezugspunkt so eingestellt, daß nach der Umrechnung ein Anfangsdruck von rund 1 bar vorlag. Die so aufbereiteten Meßergebnisse der Versuche 1, 3, 4, 5 und 6 sind als Druck-Zeit-Verläufe bis 60 ms im Anhang 1 dargestellt. Zusammenfassend ergibt sich daraus folgendes Bild:

- * Die Versuche 1 und 3 verlaufen ähnlich, da sie in einem vergleichbaren stöchiometrischen Bereich durchgeführt wurden.
- * Entsprechendes gilt für die Versuche 4, 5 und 6, die im mageren Bereich (20 %H₂) erfolgten.
- * Der Versuch 2 (18.5 %H₂) ergab nach /1/ keine stabile Detonation, was auf eine zu geringe Zündenergie schließen läßt.
- * Gemessen wurden Spitzendrücke im Bereich um 15 und 25 bar, was neben dem CJ-Gleichgewichtsdruck auf vN-Druckspitzen hindeutet.
- * Neben der ersten Druckspitze kann eine zweite beobachtet werden, die eine schwache Reflexion an der Gemischgrenze in der Ballonhülle erkennen läßt.
- * Für die weitere Auswertung wurden als repräsentative Versuche HBAL 1, 4 und 5 ausgewählt.

Um einen Eindruck zu gewinnen, zeigen die Abb. 8 und 9 am Beispiel des Versuchs 3 typische Druck-Zeit-Verläufe der Meßergebnisse innerhalb und außerhalb des Ballons. Die Zündung erfolgte bei rund 10 ms. Erwartungsgemäß sind der Detonationsdruck von 15 bar und um 2 ms verzögert ein Reflexionspeak von 6 bar bei R=1,5 m zu erkennen (Abb. 8). Bei R=7,5 m liegt der Spitzendruck nach weiteren 8 ms bereits unter 2 bar (Abb. 9, entsprechend 20 ms auf der Zeitskala).

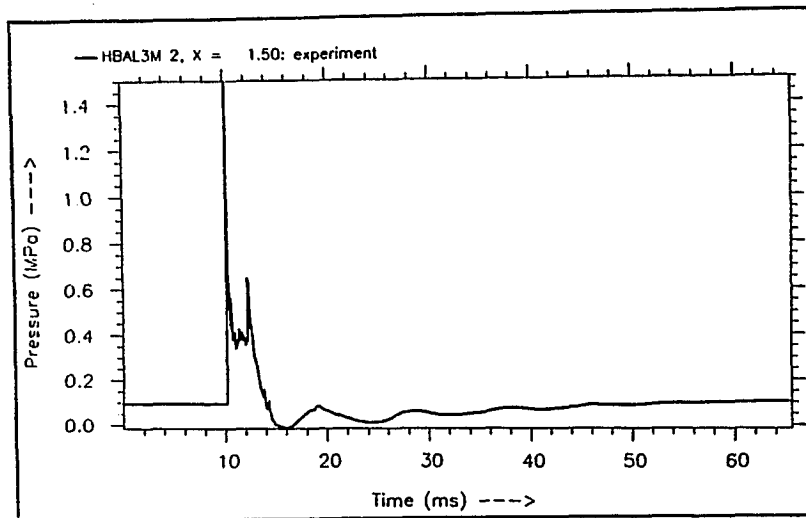


Abb. 8: Druck-Historie von Versuch 3 bei $R = 1,5$ m
(innerhalb des Ballons, Pos. 2).

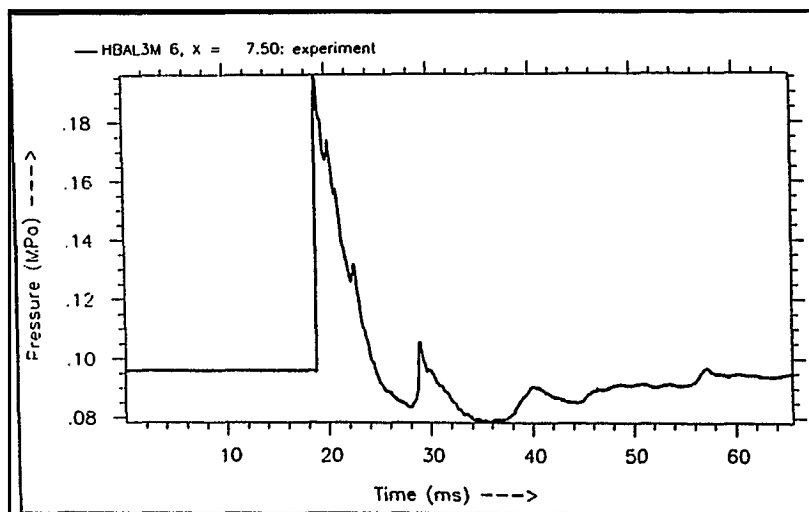


Abb. 9: Druck-Historie von Versuch 3 bei $R = 7,5$ m
(außerhalb des Ballons, Pos. 6).

Vergleicht man die Meßergebnisse außerhalb des Ballons im gleichen Abstand $R=10$ m, wobei der Druck jeweils ohne (Pos. 11) und mit (Pos. 12) einer Hinderniswand gemessen wurde, so erkennt man aus Abb. 10 und 11, unterschiedliche Druckspitzen und Druckphasen bei gleicher Ankunftszeit der Druckwelle von 22 ms.

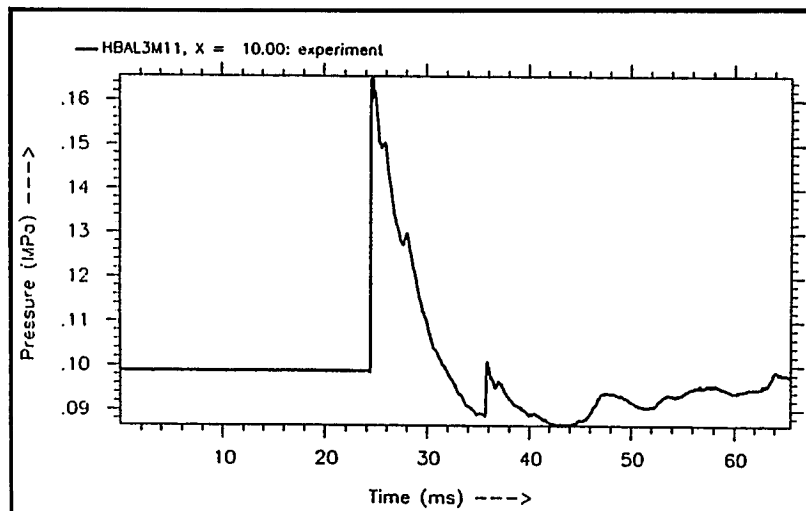


Abb. 10: Druck-Historie von Versuch 3 bei $R = 10$ m
(ohne Wand, Pos. 11).

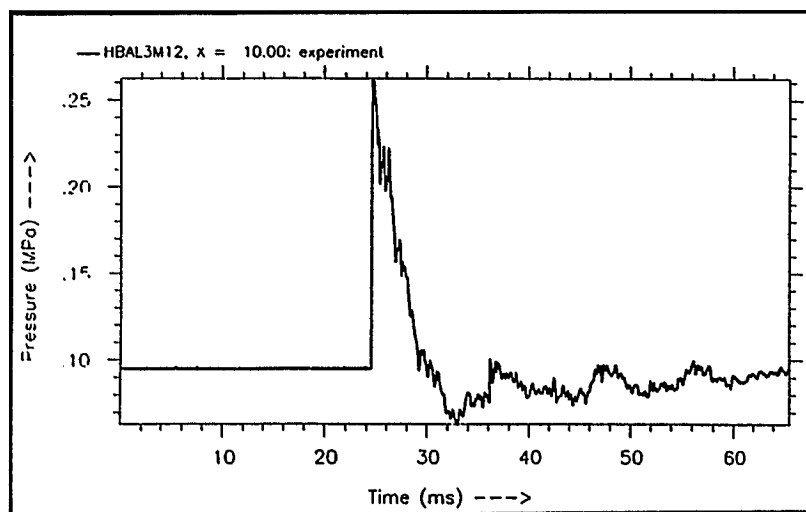


Abb. 11: Druck-Historie von Versuch 3 bei $R = 10$ m
(mit Wand, Pos. 12).

Hinsichtlich einer Weg-Zeit-Analyse der Detonationsfronten wurden Ausschnitte der gemessenen Druck-Zeit-Verläufen, die dafür geeignet erschienen, zeitlich gespreizt dargestellt und genauer ausgewertet, auf die später noch eingegangen wird.

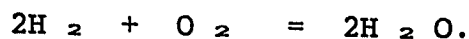
5. Auswertung und Nachrechnung

Die Auswertung und Nachrechnung der Ballon-Experimente erfolgte mit dem Detonationsprogramm DET. Das Programm verwendet ein eindimensionales Modell mit dem die Zustandsgrößen außerhalb der eigentlichen Reaktionszone berechnet werden können. Rückschlüsse über die Zustandsgrößen innerhalb der Reaktionszone können damit nur dann gewonnen werden (z. B. von Neumann-Druckspitzen), wenn durch eine lokale Netzverfeinerung die Reaktionszone numerisch räumlich aufgelöst wird. Aussagen über die geometrischen Grenzen, in denen eine Detonation ablaufen kann, sind damit nicht gegeben. Als repräsentative Versuche wurden die Versuche HBAL 1, 4 und 5 für die Nachrechnungen ausgewählt.

Der Rechencode DET simuliert numerisch die Gasdetonationen von Wasserstoff-Luft-Dampf-Gemischen. Die einzelnen Gaskomponenten werden hinsichtlich ihres Molgewichtes als auch ihrer spezifischen Wärme unterschieden. Für die Gasphase wird eine homogene Durchmischung angenommen /5/.

Bei der Gasdynamik werden die Euler'schen Gleichungen für die Erhaltungsgrößen: Masse, Impuls und Energie mit der Zustandsgleichung idealer Gase eindimensional in kartesischer, zylindrischer und kugelsymmetrischer Geometrie gelöst. Mit der zweidimensionalen Version erfolgt der numerische Lösungsalgorithmus für kartesische Geometrien (Feinstrukturoption).

Bei der Reaktionskinetik wird als erste Näherung ein Vier-Komponenten-Modell und eine Ein-Schritt-Reaktion verwendet für:



Die Reaktionsgeschwindigkeit wird in Arrheniusform angesetzt, wobei der Frequenzfaktor, Temperaturexponent und die Aktivierungsenergie sowie die kritische Temperatur Eingangsgrößen sind. (Die Sechs-Komponenten-Version arbeitet mit einem speziellen reduziertem Reaktionsmodell für Wasserstoff-Luft-Gemische des IMT der RWTH Aachen /6/, das hier noch nicht verwendet wurde).

Zur numerischen Integration werden die Ausgangsgleichungen in der Form zusammengefaßt:

$$W_{t+\Delta t} + F(W)_x = G + R$$

wobei die linke Seite die Zustands- und Flußvektoren bedeuten, die rechte Seite die Geometrie- und Reaktionsvektoren, die mit Hilfe expliziter Differenzenverfahren iterativ gelöst werden. Dazu wird zu jedem Zeitpunkt t mit dem 'Splitting Verfahren' der Reihe nach die Gleichung für die Hydrodynamik ($w+F=0$), die Geometrie ($w=G$) und die Reaktion ($w=R$) gelöst. Dabei ist die Zeitschrittweite begrenzt durch die sog. Courant-Friedrichs-Lewy Stabilitätsbedingung (für die Hydrodynamik):

$$\Delta t = \sigma * \Delta x / \max(c + \text{abs } u)$$

mit der Schallgeschwindigkeit c , der Strömungsgeschwindigkeit u und dem Stabilitätsfaktor σ (kleiner eins). Für die Lösung der Hydrodynamik-Gleichung sind mit dem 'Upwind-Verfahren' z.B. Verfahren wählbar nach: Harten, Lax, van Leer oder Roe. Für die beiden Gleichungssysteme der Geometrie und Reaktion stehen die Lösungsverfahren nach Euler-Cauchy oder Heun zur Verfügung.

Um den Reaktionsbereich feiner zu unterteilen, kann das Gesamt-rechengitter (Grob-gitter) in der Reaktionsfront durch ein zweites Gitter (Feingitter) überlagert werden.

Für die Spezifikation der Anfangs- und Randbedingungen wird der Rechenbereich in drei Teilbereiche unterteilt. Im ersten Bereich werden die Bedingungen für die Zündungszone definiert, im zweiten und dritten Bereich werden die Ausgangsbedingungen vorgegeben werden.

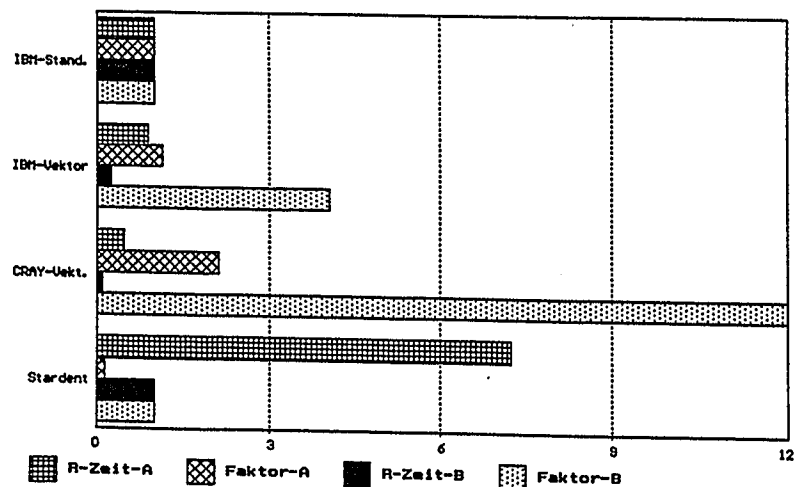
Ein typischer Eingabedatensatz, wie er für die numerische Auswertung der Ballon-Versuche zu H₂-Detonationen verwendet wird, ist aus dem Anhang 2 zu entnehmen /7/. Der Schwerpunkt der Analysen lag bei der globalen Beschreibung gemessener Druck-Zeit-Verläufe für stöchiometrische und magere H₂-Luft-Gemische.

Anhand von Testrechnungen wurde der Code DET-1D für die Versuchsauswertung optimiert und zur Visualisierung der numerischen Ergebnisse an ein Farbgraphiksystem adaptiert. Die Tab. 4 zeigt einen Vergleich der erzielten Rechenzeiten für verschiedene Rechenanlagen. Die Vektorisierung auf dem CRAY-Rechner ergab einen Beschleunigungsfaktor 12 gegenüber der Standardversion auf dem IBM-Rechner.

Tab. 4: Vergleich der Rechenzeiten für den DET-1D Code

A: Originalversion; B: Optimierung der Loops
R: Relative Rechenzeit zum IBM Rechner (R-Zeit)
F: Beschleunigungsfaktor zum IBM Rechner (Faktor)

Rechner	A: Originalversion		B: Optimierung	
	R	F	R	F
IBM Standard ES 9000	1	1	(1)	(1)
IBM Vektor ES 9000	0.88	1.14	0.25	4.05
CRAY Vektor YMP 94	0.47	2.12	0.083	12.0
Stardent Vektor GS 2000	7.26	0.14	1	1



Bei den Nachrechnungen von repräsentativen Ballon-Experimenten mit dem DET-1D Code konnte insgesamt gesehen eine hinreichend gute Übereinstimmung erzielt werden, die im folgenden anhand von Beispielen aufgezeigt wird, wobei Unterschiede erläutert werden.

In den Abb. 12, 13 und 14 sind gemessene und gerechnete Druck-Zeit-Verläufe des Detonationsversuchs HBAL 1 (29,6 %H₂) für die Vergleichspositionen Nr. 1 (R=0,75 m im Zentrum), Nr. 3 (R=2,75 m vor der Hülle) und Nr. 11 (R=10 m im Freien) dargestellt:

- * Aus Abb. 12 erkennt man, daß die gezackte Meßkurve im Zentrum der Detonation bei R=0,75 m durch die berechnete Drucktransiente im Mittel recht gut wiedergegeben wird. Dem Reflexionspeak folgt anschließend die Druckausgleichsphase.
- * Der Vergleich der Drucktransienten kurz vor der Ballonhülle bei R=2,75 m ergibt, daß die gepeakte Meßkurve durch die Rechenkurve tendenziell gut angenähert wird, wie aus Abb. 13 hervorgeht.

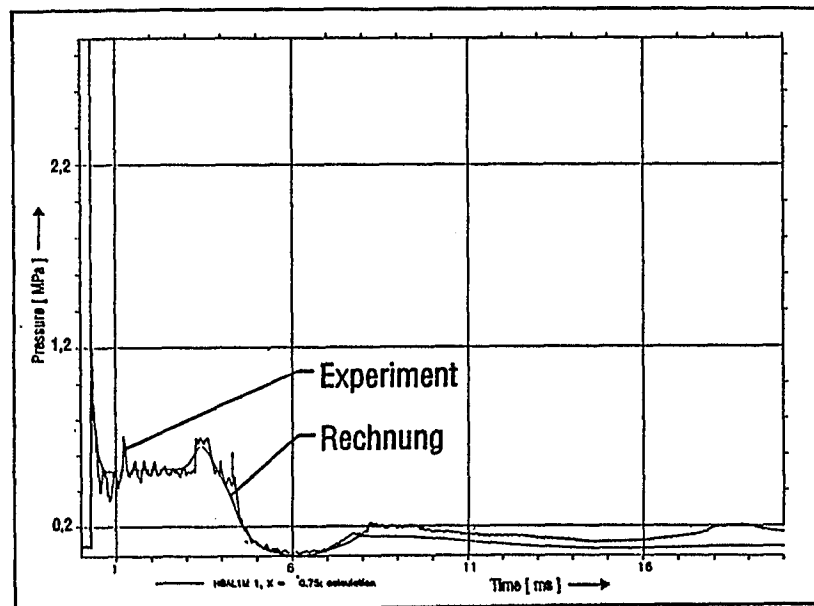


Abb. 12: Vergleich der gemessenen und gerechneten Druck-Zeit-Verläufe des Versuchs HBAL 1 für Pos. 1 (R=0,75 m)

- * Außerhalb der Ballonhülle, die bei der Detonation zerstört wird, ergeben sich im Umkreis von z.B. $R=10$ m geringfügige Abweichungen bei den berechneten Druckpeakwerten im Vergleich zu den Meßwerten, die in Abb. 14 ersichtlich sind.

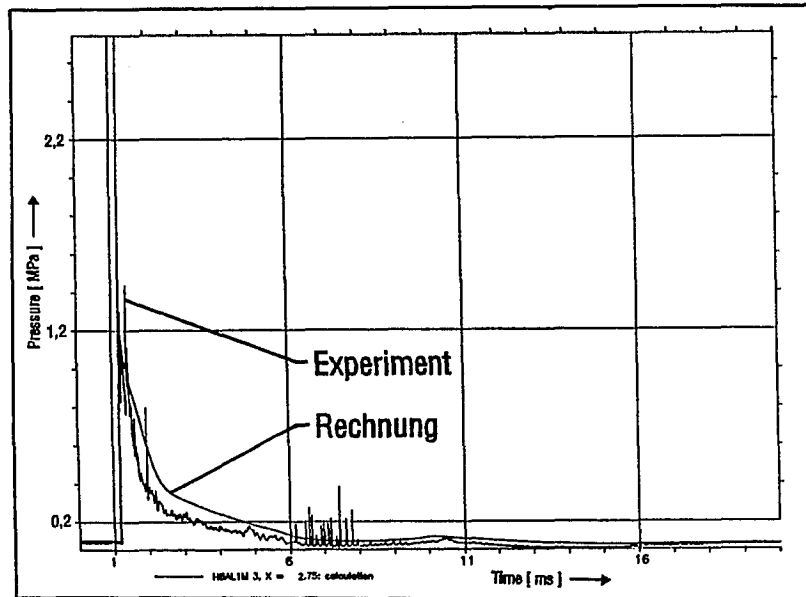


Abb. 13: Nachrechnung des Versuchs HBAL 1 für Pos. 3 ($R=2,75$ m)

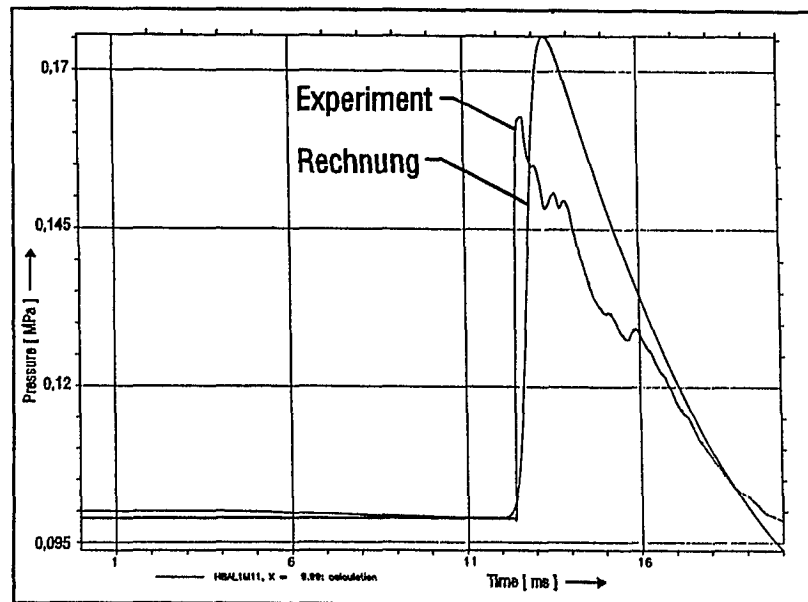


Abb. 14: Nachrechnung des Versuchs HBAL 1 für Pos. 11 ($R=10$ m)

Die Berechnung der Drucktransienten erfolgte mit einem Grobrechengitter von 200 Ortspunkten. Bei der Verwendung eines zusätzlichen Feinrechengitters konnte - im Rahmen dieser Arbeiten - insgesamt gesehen noch keine wesentliche Verbesserung bei der Übereinstimmung erzielt werden; weitere Arbeiten sind initiiert.

Die Nachrechnung des Versuches HBAL 4 (19 %H₂) ergab, daß nach der Detonation im Zentrum, deren Druckverläufe in Abb. 15 für R=0,75m dargestellt sind, diese nicht im ganzen Ballon stabil war, wie aus dem atypischen Druckverlauf der Messung gegenüber der Rechnung in Abb. 16 für R=2,75m zu erkennen ist. Ferner sind die berechneten Druckintegrale der Versuche HBAL 1 und 4 in Abb. 17 vergleichend zusammengestellt.

Zur Verdeutlichung der Ausbreitungsfunktionen von detonierenden Wasserstoff-Luft-Gemischen sind für Versuch 1 der Ballon-Experimente die Druckfronten in Abb. 18 zusammenfassend dargestellt, die durch numerische Simulationen mit dem Rechencode DET erzeugt wurden. Die Abb. 19 zeigt das typische Auslaufen einer kugelförmigen Detonationsfront an der Stoffgrenze in die Umgebungsluft.

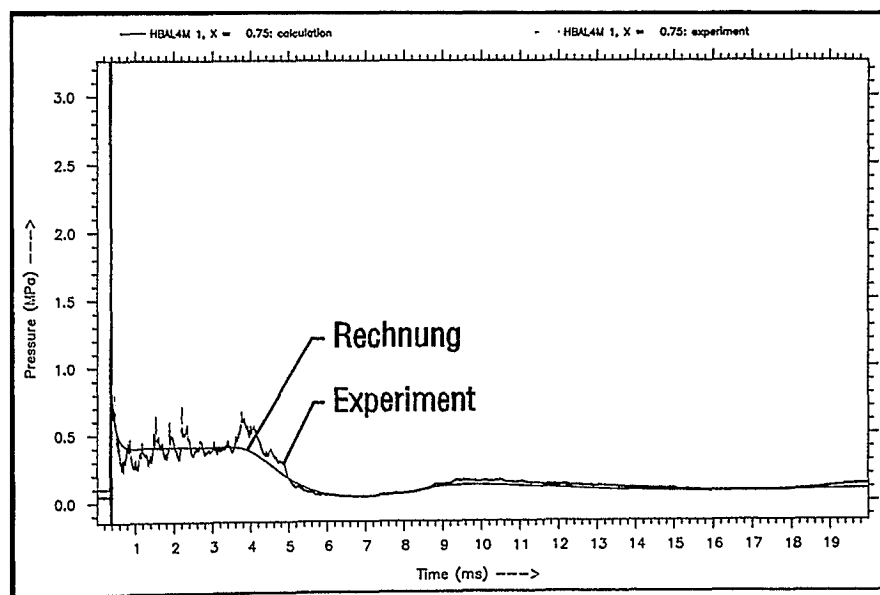


Abb. 15: Vergleich der gemessenen und gerechneten Druck-Zeit-Verläufe des Versuchs HBAL 4 für Pos. 1 (R=0,75 m).

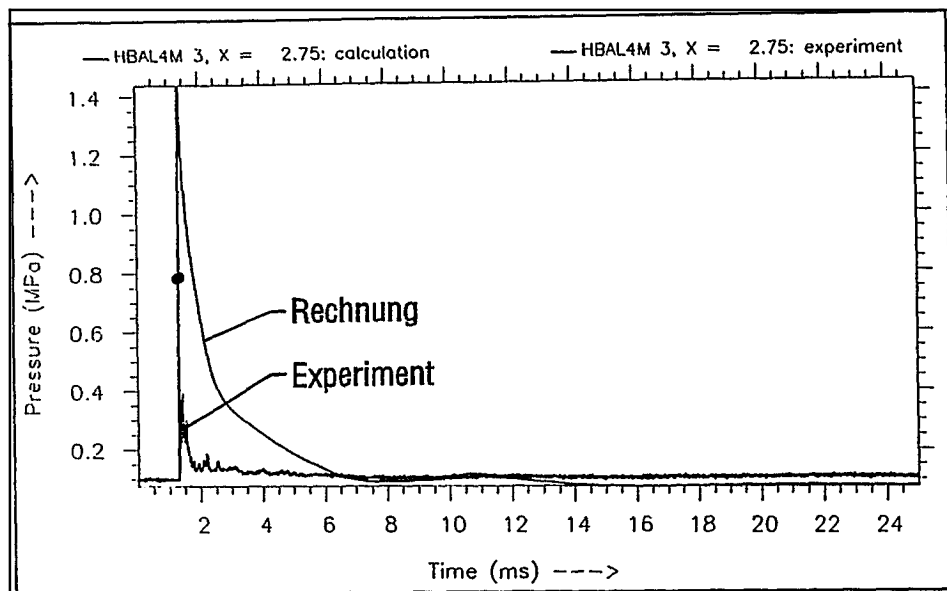


Abb. 16: Vergleich der gemessenen und gerechneten Druck-Zeitverläufe des Detonationsversuchs HBAL 4 für die Position Nr. 3 ($R=2,75$ m).

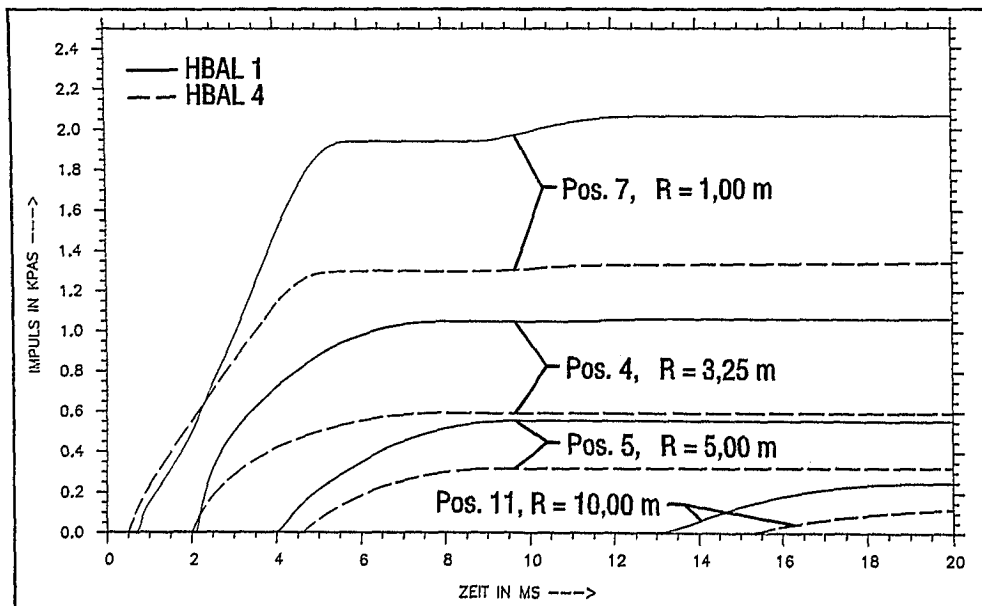


Abb. 17: Vergleich der berechneten Druckintegrale für die Detonationsversuche HBAL 1 und 4.

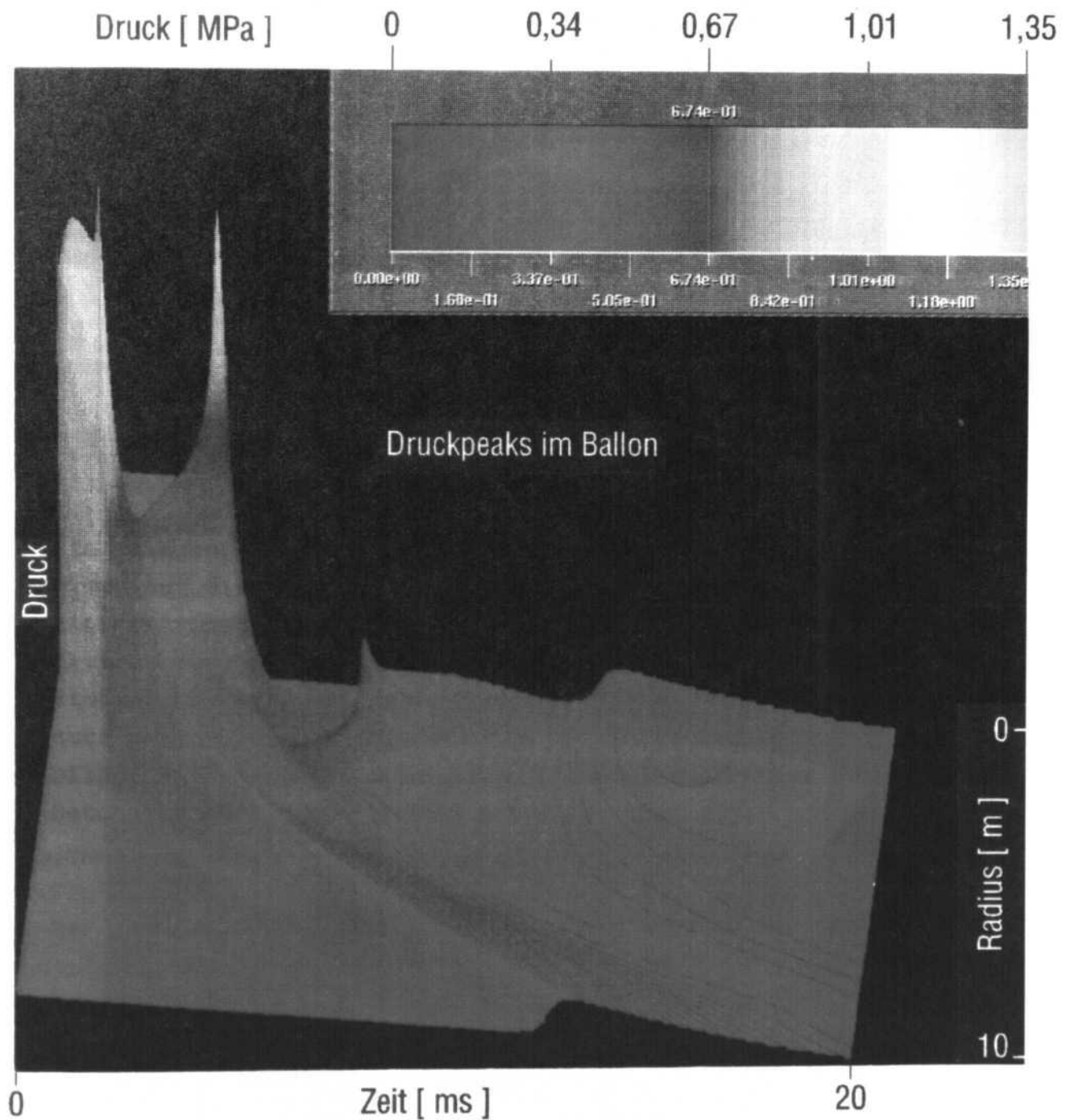


Abb. 18: Numerische Simulation zur Ausbreitung einer Detonationsfront eines Wasserstoff-Luft-Gemisches in den Ballon-Experimenten (Versuch HBAL 1).

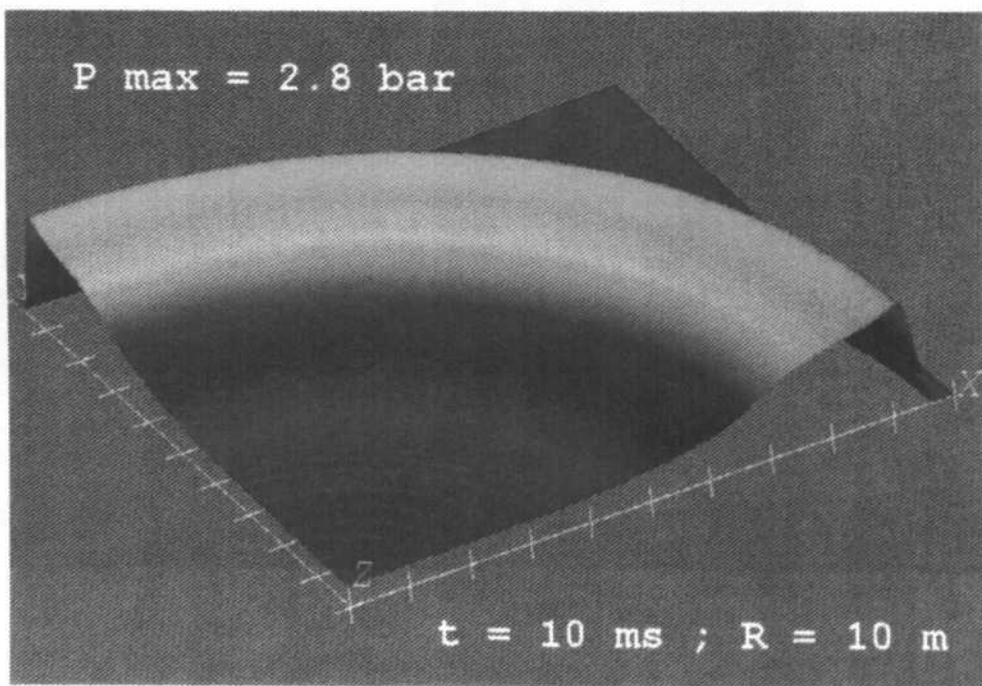
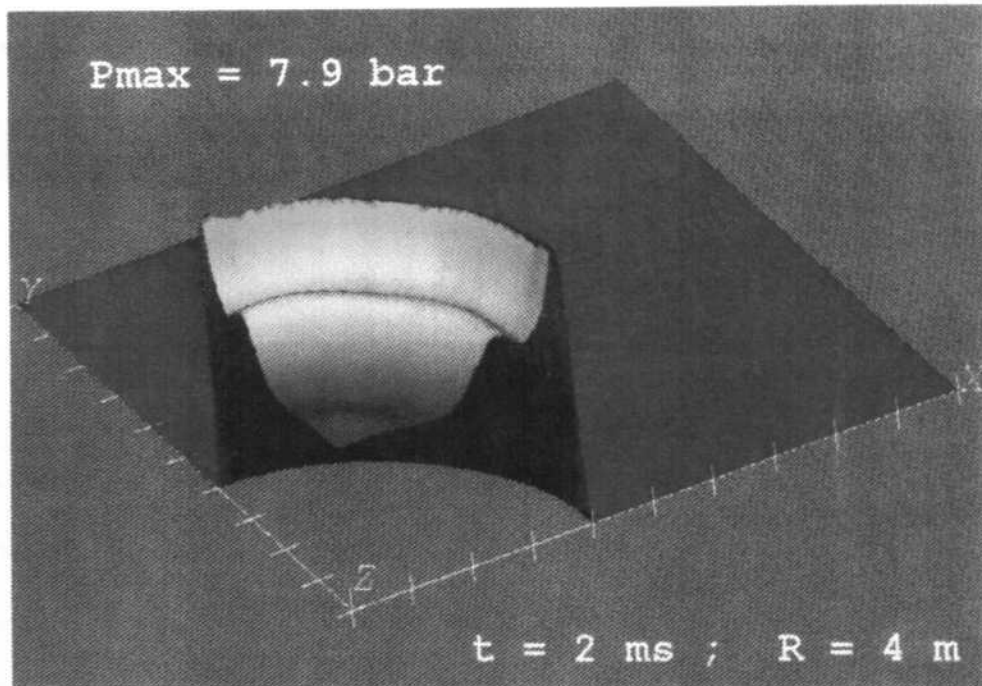


Abb. 19: Numerische Simulation zum Auslaufen einer kugelförmigen Detonationsfront eines Wasserstoff-Luft-Gemisches außerhalb der Ballonhülle ($R = 3 \text{ m}$) im Abstand $R = 4 \text{ m}$ (oben) und $R = 10 \text{ m}$ (unten).

In den Versuchen HBAL 5 und 6 wurde eine bestimmte Anordnung der Meßpositionen (Abb. 1 b) gewählt, um eine Feinstruktur der Detonationswellen zu erkennen, die Abb. 20 schematisch zeigt /8/.

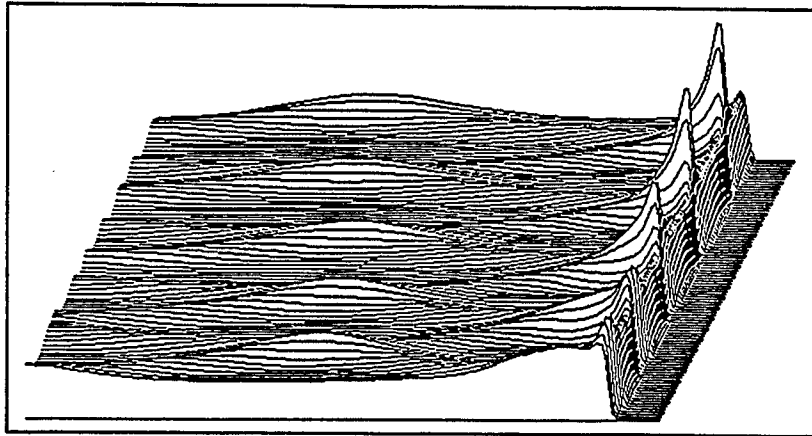


Abb. 20: Wellenstruktur einer Detonationsfront.

Wie eingangs beschrieben, bringt ein Verdichtungsstoß das Gemisch auf die erforderliche Zündtemperatur und nach einer Induktionszeit beginnt die chemische Reaktion mit Freisetzung der Reaktionswärme. Die dadurch in der Detonationsfront ausgehenden Stoßwellen breiten sich sowohl in Hauptströmungsrichtung als auch quer zu dieser aus. Infolge der Reflexion zweier Stoßwellen bildet sich eine typische Detonationszellenstruktur aus, die die Detonationszellgröße Λ aufweist (Abb. 21).

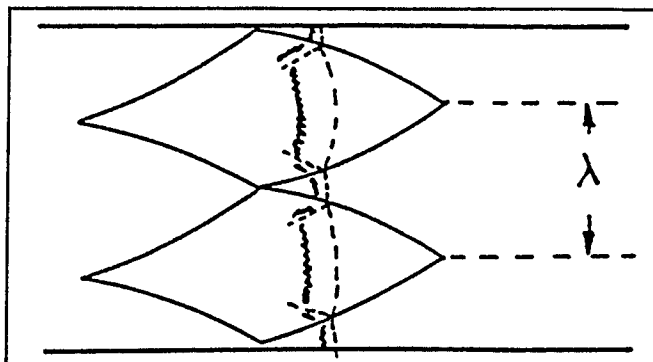


Abb. 21: Definition der Detonationszellgröße Λ .

Die Detonationszellgröße ist eine charakteristische Größe, die von der Gemischzusammensetzung, dem Anfangszustand des Gemisches und von den geometrischen Randbedingungen abhängt /9/.

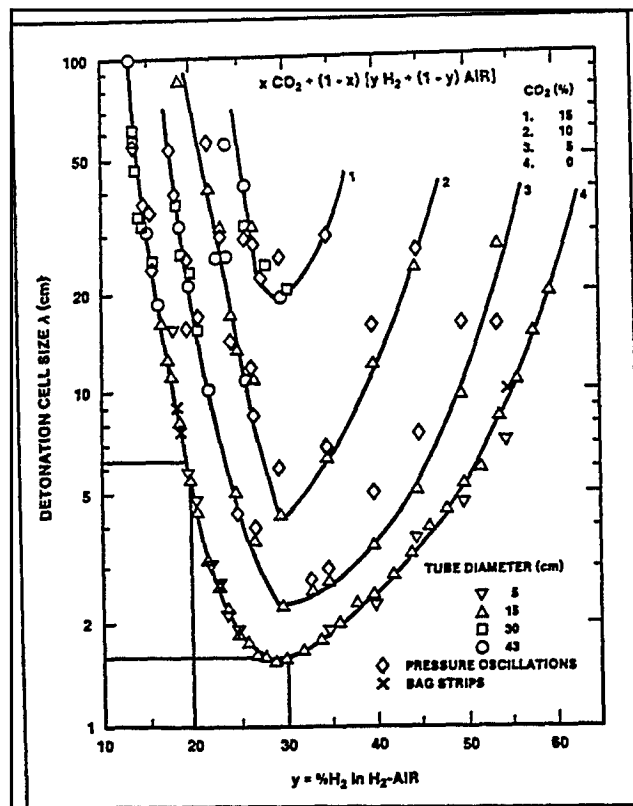


Abb. 22: Abhängigkeit der Detonationszellgröße von der H_2 -Konzentration für H_2 -Luft- CO_2 -Gemische bei NTP

Experimentelle Untersuchungen mittels Rußfolien haben ergeben, daß ein Gemisch um so detonationsempfindlicher ist, je kleiner die Detonationszellgröße ist. Verschiedene Gemische haben unterschiedliche Induktionszeiten, wobei kürzere Induktionszeiten höhere Reflexionsfrequenzen ermöglichen und somit kleinere Zellstrukturen auftreten können. Die kleinsten Detonationszellgrößen weisen i. a. stöchiometrische Gemische auf, wie aus Abb. 22 für ein Wasserstoff-Luft-Gemisch hervorgeht /9/.

Damit eine Detonation überhaupt ablaufen kann, müssen aufgrund der Detonationszellstruktur bestimmte geometrische Bedingungen erfüllt sein, die meistens empirisch ermittelt werden. Für ein freies, glattes Detonationsrohr muß der Umfang mindestens einer Zellgröße entsprechen, d. h. der minimale Durchmesser beträgt so λ/π /9/.

Die Detonationszellgröße beträgt nach Abb. 22 für die beiden H₂-Luft-Gemischtypen der Ballon-Experimente entsprechend rund:

$\Lambda_1 = 1,5 \text{ cm}$ für 30 % H₂ und

$\Lambda_2 = 5,0 \text{ cm}$ für 20 % H₂.

Die bei den Ballon-Experimenten verwendeten Rußfolien erbrachten nach /1/ keine deutlich erkennbaren Zellstrukturen. Feinstruktureffekte können daher nur versuchsweise anhand von Druckspitzen im Druck-Zeit-Verlauf interpretiert werden.

Für diese Gemische sind aus dem Weg/Zeit-Diagramm mit den CJ-Geschwindigkeiten nach Abb. 4 von ca.:

$V_1(\text{CJ}) = 1950 \text{ m/s}$ (30 % H₂) und

$V_2(\text{CJ}) = 1700 \text{ m/s}$ (20 % H₂)

demnach periodische Druckspitzen zu erwarten bei etwa:

$t_1 = 0,008 \text{ ms}$ (30 % H₂) und

$t_2 = 0,03 \text{ ms}$ (20 % H₂).

Die Auswertung der Druck-Zeit-Verläufe der Versuche 5 und 6 ergab keine eindeutige Zuordnung der Druckpeaks zur Zellgröße. Die Abb. 23 zeigt eine Nachrechnung des Versuchs 5 (s. Anhang 3). Bei den Verläufen der Versuche 1, 3 und 4 lassen lediglich die Meßpositionen 1 und 7 des Versuchs HBAL 1 (29,5 %H₂) Druckpeaks erkennen (Abb. 24), die so einer Zellgröße von rund 2 cm entsprechen würden. Allerdings wird dabei auch die Grenze der Meßgenauigkeit erreicht.

Daher ist aus diesen Gründen vorzuschlagen, daß die Ausmessungen der Detonationszellgrößen von Wasserstoff-Luft-Gemischen, insbesondere im mageren Bereich, anhand von Experimenten gezielter untersucht werden (z. B. im Zusammenhang mit Versuch 2). Auch sind Zusätze wie Dampf, Stickstoff und Kohlendioxid auszuwerten.

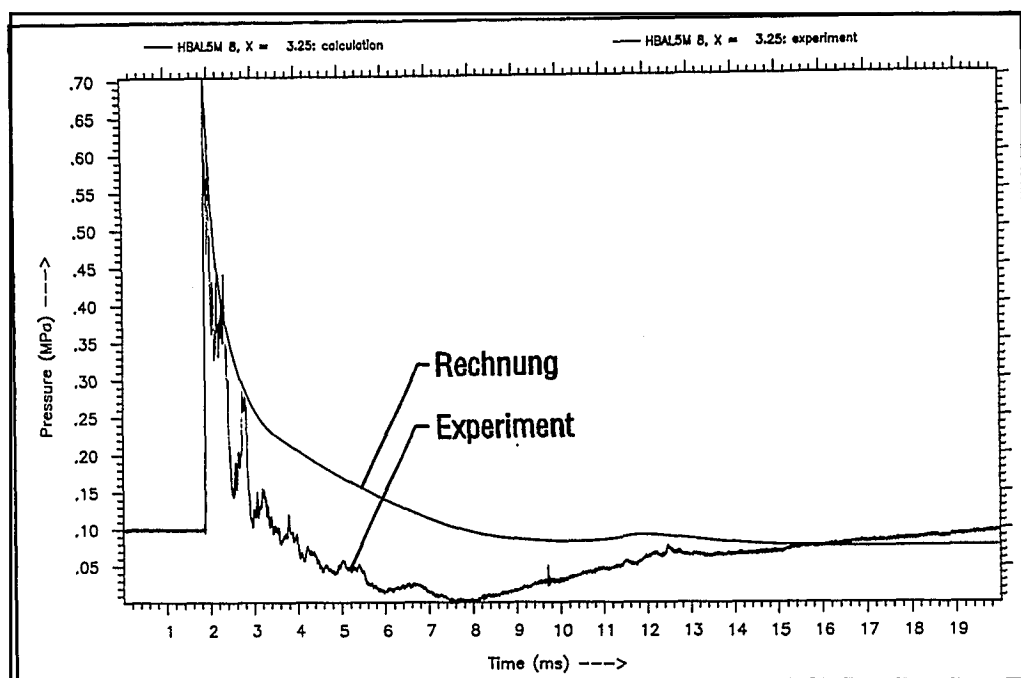


Abb. 23: Nachrechnung der Druck-Historie von Versuch HBAL 5 für Pos. 8 ($R=3,25\text{m}$).

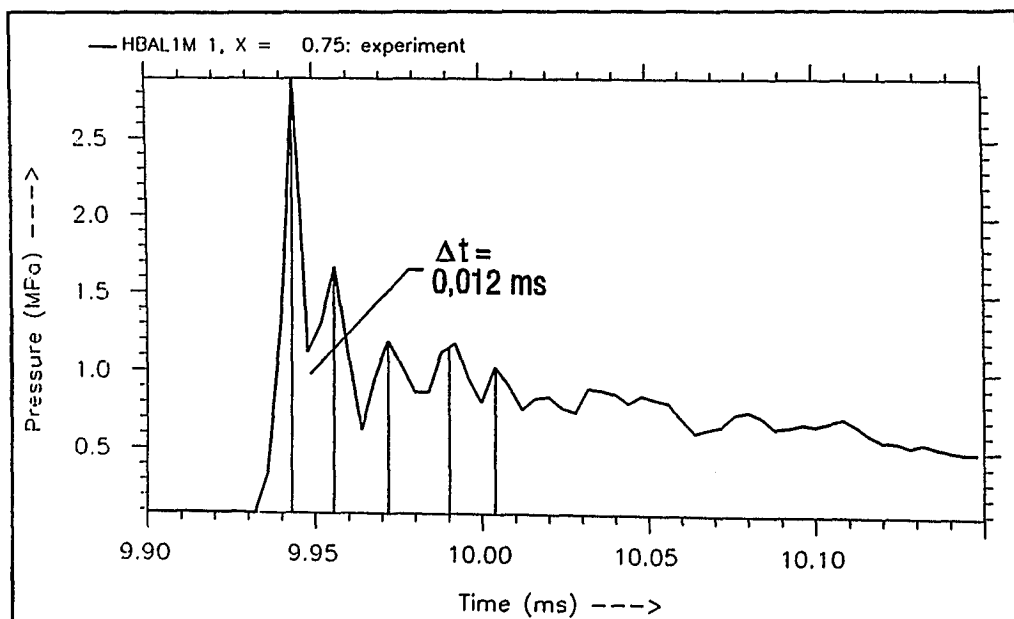


Abb. 24: Periodische Druckspitzen im Versuch HBAL 1 bei Pos. 1 ($R=0,75\text{m}$).

6. ANWENDUNGSBEISPIELE

Die numerische Auswertung der Ballon-Experimente zu den Ausbreitungsfunktionen detonierender Wasserstoff-Luft-Gemische hat ergeben, daß derartige Verbrennungsabläufe mit dem Rechencode DET im Prinzip analysiert werden können. Reale Geometrien von Einschlußkomponenten (z.B. Containments) besitzen Berandungen und Einbauten, an denen Detonationswellen reflektiert und fokussiert werden, die zusätzliche Spitzendrücke bewirken. Die dabei auftretenden Belastungen sind im starken Maße geometrieabhängig, wie für folgende Anwendungsfälle gezeigt wird.

Wird das Ballon-Experiment mit einer festen Außendwand durchgeführt, entsprechend einer kugelförmigen Einschlußgeometrie, so hat die zentrale Zündung eines stöchiometrischen Wasserstoff-Luft-Gemisches eine Vielfach-Reflexion an der Außenwand bzw. Fokussierung im Zentrum zur Folge (Abb. 25).

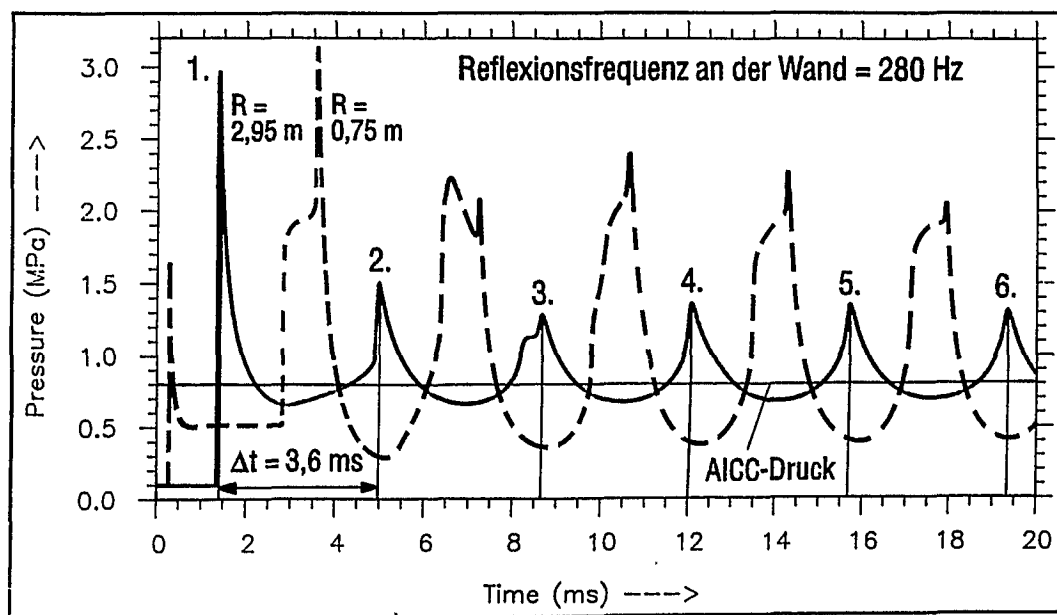


Abb. 25: Laufzeitanalyse einer Detonationswelle in einer Kugelgeometrie ($R=2,95$ m) mit Reflexion am Rand und Fokussierung der Schockwelle im Zentrum.

Für die lokalen und globalen Belastungen ist hier von Bedeutung:

- * Der Detonationsspitzendruck beträgt 1,5 MPa und der der ersten reflektierten Schockwelle 3 MPa (2-facher CJ-Druck).
- * Anfangs beträgt die Reflexionszeit der Schockwelle an der Wand ($R=2,95$ m) im verbrannten Gas 3,6 ms, deren Amplitude langfristig auf den AICC-Druck abfällt.
- * Der zeitlich versetzte, periodische Druckverlauf im Abstand $R=0,75$ m ergibt sich durch die Fokussierung im Zentrum der von der Wand reflektierten Schockwelle. Im Zentrum selbst entstehen lokal extreme Spitzendrücke.
- * Nach sechs Reflexionen wirkt auf die Außenwand eine Impuls- last von rund 15 KPas.

Somit zeigt sich, daß auf der kugelförmigen Außenwand relativ niedrige Belastungen gegenüber dem Zentrum auftreten, was vorteilhaft im Vergleich zur Zylindergeometrie ist. Planare Geometrien führen zu größeren Belastungen am Reflexionsende (s. Abb. 7). Die Rechnungen ergaben, daß die höchsten Spitzendrücke erreicht werden, wenn eine planare Detonationswelle unter einem Winkel von 45° in eine Ecke trifft, wobei lokale Spitzendrücke bis zum 5-fachen CJ-Wert errechnet werden /10/.

Die Anwesenheit von Einbauten, wie es bei vielen Einschlußgeometrien der Fall ist, beeinflussen den Detonationsablauf und die Belastungen ganz wesentlich. Diese stellen Strömungshindernisse dar, an denen Detonationswellen gebeugt, reflektiert und fokussiert werden können. Beispielsweise zeigt Abb. 26 die zunächst ungestörte Ausbreitung einer kugelförmigen Detonationswelle 1,8 ms nach der Zündung in einer kartesischen Geometrie mit einem zentralen Hindernis (29,5 %H₂ bei NB). Nach 5,8 ms wurde die Detonationswelle am Hindernis gebeugt und an der rechten Wand als Schockwelle ins verbrannte Gas reflektiert (Abb. 27).

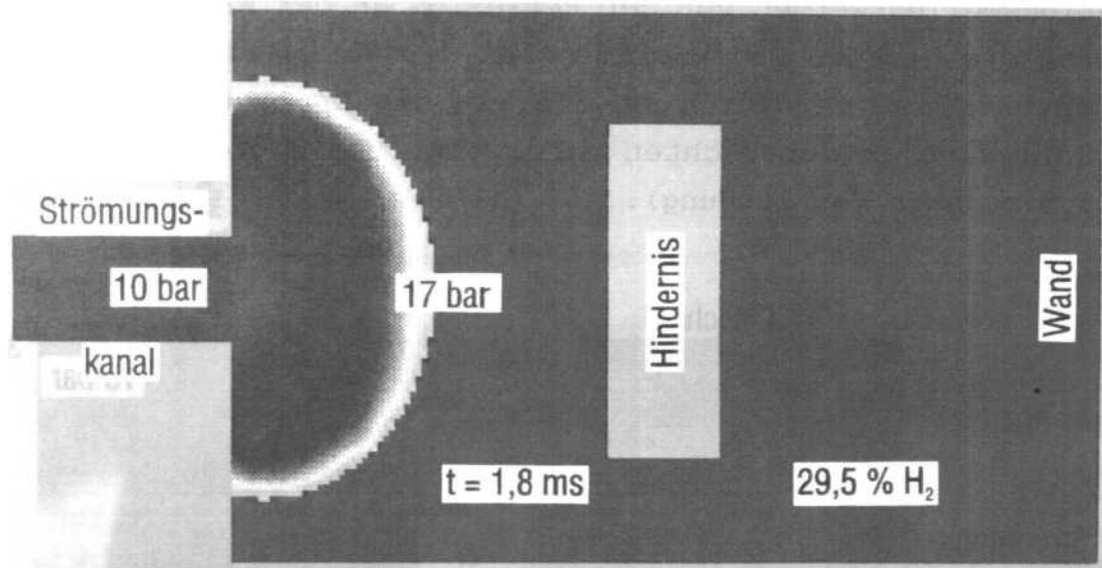


Abb. 26: Ausbreitung einer kugelförmigen Detonationsfront in einer kartesischen Geometrie (5 m x 10 m).

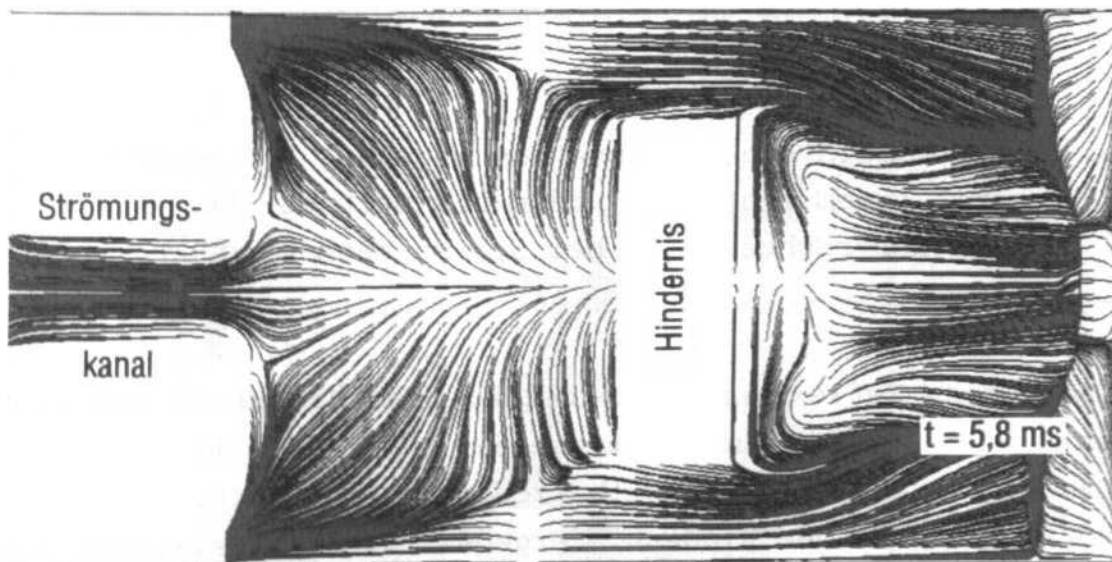


Abb. 27: Stromlinien einer kugelförmigen Detonationsfront um ein zentrales Hindernis mit Reflexionen.

Entsprechend dem Strömungsfeld um das Hindernis stellt sich die Druckverteilung im Einschluß ein. Die am Hindernis gebeugten Detonationswellen werden vor der Reflexion an der Wand überlagert, wodurch die größten Druckspitzen bei der Reflexion in Wandmitte auftreten. Dazu verdeutlicht Abb. 28 die Druckverteilung nach der Reflexion an der rechten Wand; d.h. zum gleichen Zeitpunkt für 5,8 ms nach der Zündung).

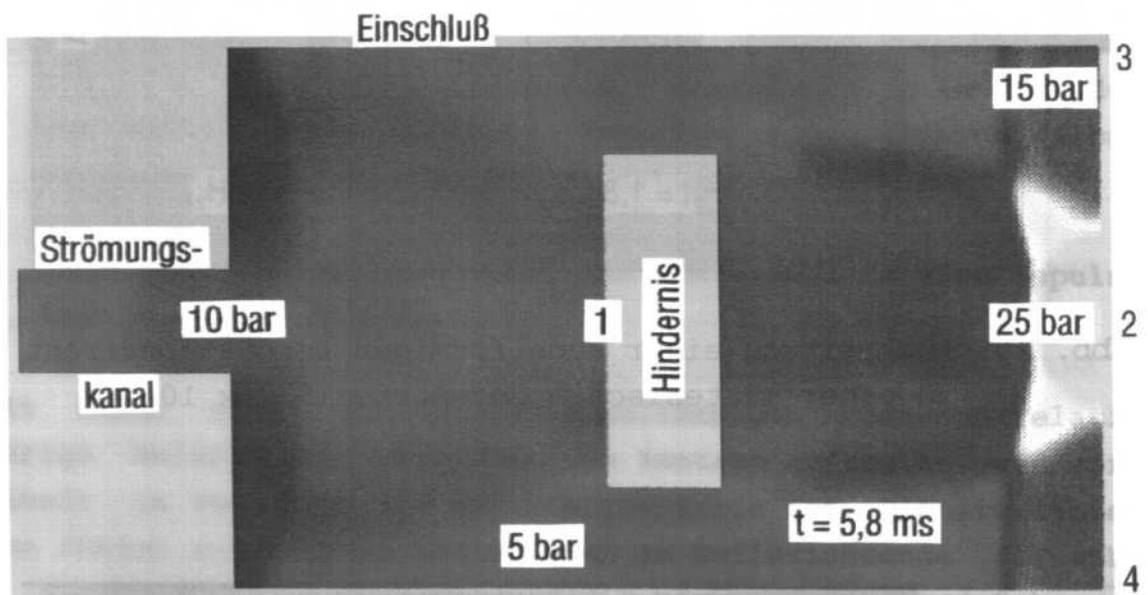


Abb. 28: Druckfeld einer Detonation in einer 2D Geometrie mit einem zentralen Hindernis nach der Reflexion an der rechten Wand bei 5,8 ms nach Zündung.

Die maximalen Reflexionsdrücke betragen am Hindernis und in den Ecken 3,0 MPa, sowie in Wandmitte 5,5 MPa, d.h. den 3,5-fachen CJ-Druck, was in Abb. 29 ersichtlich ist. Die Druck-Zeit-Verläufe vor und hinter dem Hindernis ergeben für die Positionen 1 bis 4 unterschiedliche Ankunftszeiten der Detonationswelle und der reflektierten Schockwellen im verbrannten Gas, die nach einigen Mehrfachreflexionen auf AICC-Druckniveau im Einschluß abfallen.

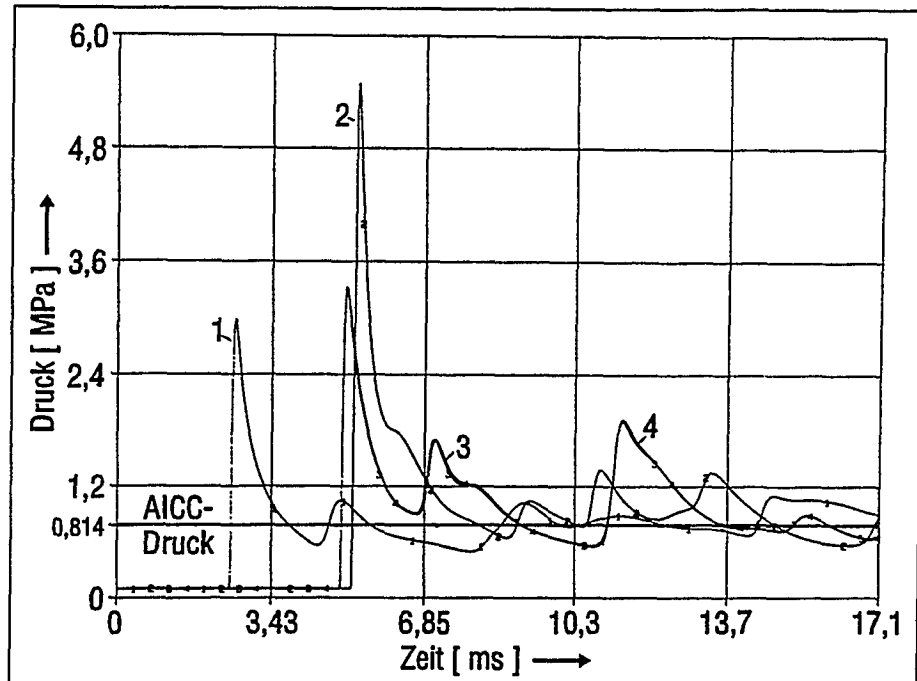


Abb. 29: Druck-Zeit-Verläufe für Positionen am Hindernis und an der rechten Wand.

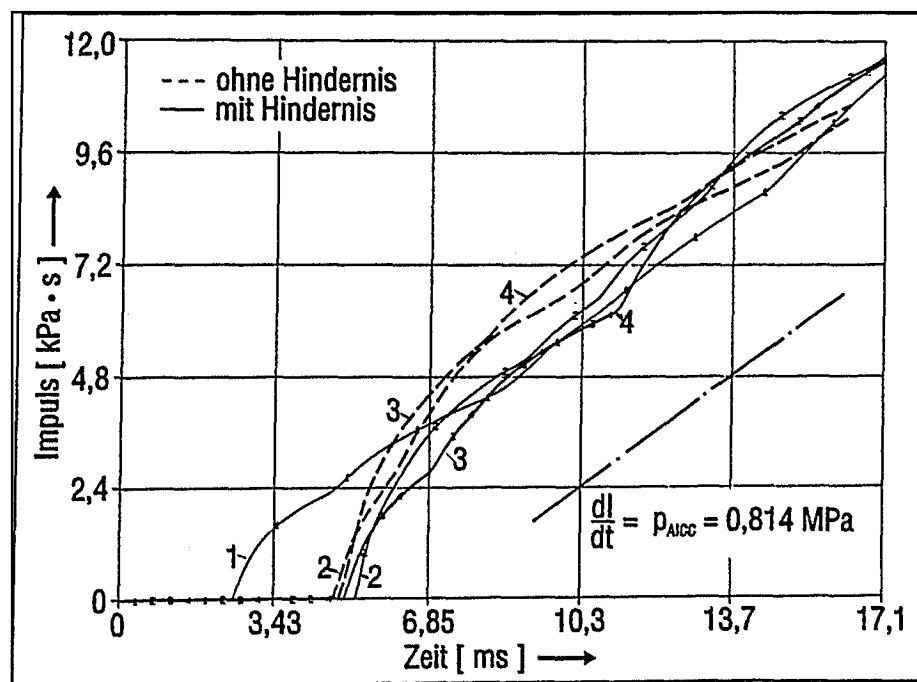


Abb. 30: Übertragene Impulse mit und ohne Hindernis an der rechten Wand des Einschlusses.

Die Integration der Druck-Zeit-Verläufe liefert die Impulse, die im Verlauf der Zeit auf die Komponenten übertragen werden. Abb. 30 zeigt den typischen Einfluß eines zentralen Hindernisses bei der Impulsübertragung auf die Wand (Pos. 1 bis 4). Mit und ohne Hindernis sind die Impulse zeitlich versetzt, die entsprechend der Laufzeiten der Wellen nach 17 ms auf einen Wert um 12 KPas ansteigen. Der mittlere Anstieg der Impulskurven entspricht dem AICC-Druck im verbrannten Gas.

Damit wird deutlich, daß das Hindernis durch Beugung der Detonationswelle und Reflexion der Schockwellen kinetische Energie absorbiert, die hinter dem Hindernis nicht mehr als Verformungsenergie in der Wand umgesetzt wird.

Durch die Anordnung von Hindernissen können Detonationswellen so gebrochen werden, daß die Belastungen hinter dem Hindernis kleiner sind, als wenn das Hindernis nicht da wäre.

Auf der anderen Seite können durch Hindernisse Turbulenzen beim Umströmen erzeugt werden, wodurch ein anfangs langsamer Verbrennungsvorgang in eine schnelle Verbrennung übergehen kann: sogenannten 'Deflagration-to-Detonation Transition' (DDT).

In einem Wasserstoff-Luft-Gemisch kann sich unter bestimmten Anfangs- und Randbedingungen durch folgende Mechanismen ein DDT-Ablauf entwickeln: Turbulenzen, Gemischgradienten, Vermischung von verbranntem und unverbranntem Gas, oder Gaskompression in fokussierenden Raumecken. Ausgangsbedingung für DDT-Abläufe ist im allg. eine lokale Explosion mit positiver Rückkopplung von Gasströmung und Verbrennungsablauf, die eine stabile Detonationszündung zur Folge haben kann. Dadurch werden Detonationsgrenzen aufgeweitet. Das DDT-Gebiet ist noch nicht hinreichend untersucht /11/. Bei einem DDT-Ablauf können sich infolge der Interaktion von Blast/Schockwellen Drücke ergeben, die die Drücke einer Detonation übersteigen. Zur Untersuchung der bei DDT-Abläufen in großräumigen Geometrien auftretenden Belastungen wurde vom ISR eine Programmentwicklung in internationaler Zusammenarbeit initiiert /12/.

Die Programmentwicklung basiert auf semi-empirischen Modellansätzen, die anhand von experimentellen Daten und Korrelationen abgeleitet werden, um das Entstehen von DDT-Abläufen numerisch zu simulieren. Kernpunkt des Simulationscodes ist die Weiterentwicklung der 'Integrated Fluid - Structure Analysis Software by CDL/ Canada' mit dem Verbrennungsmodul SUPERSTATE. Die in diesem Zusammenhang installierten Rechencodes sind in Abb. 31 wiedergegeben. Die DDT-Programmentwicklung soll in einer späteren Phase in Verbindung mit Experimenten getestet werden.

-
-
- (*) Containment Thermodynamics,
Propagation, Slow Combustion,
Deflagration Pressure Loads:
RALOC-HYDCOM; CONTAIN-HCTR.
 - (*) Deflagration-to-Detonation Transition (DDT), Modelling Approach
on the Basis of 2D/3D Codes:
Integrated Fluid-Structure Analysis
Software with SUPERSTATE.
 - (*) Fast Combustion, Detonation Wave
and Reflected Shock Wave Pressure
Loads: DET-1/2D and PLEXUS-3D.
 - (*) Dynamic Blast Wave Pressure
Loads in Enclosures: DYNA-3D.
 - (*) Experimental Data, for examp.:
HDR Facility, KfK BALLON Tests,
SNL FLAME Tests, AECL DDT Tests.
-
-

Abb. 31: Rechencodes zur Untersuchung der Belastungen von Wasserstoff-Explosionspotentialen in Enclosures von technischen Systemen.

7. ZUSAMMENFASSUNG

Vom ICT der FhG Pfinztal wurden im Jahre 1991 Ballon-Experimente zu den Ausbreitungsfunktionen detonierender Wasserstoff-Luft-Gemische im stöchiometrischen und mageren Bereich durchgeführt. Diese Versuche wurden vom ISR der KFA Jülich in Zusammenarbeit mit dem INR der KfK Karlsruhe ausgewertet und repräsentative Versuche mit dem Detonationscode DET nachgerechnet, wobei folgende Ergebnisse erzielt wurden:

Die Darstellung und Auswertung der H₂-Detonationsversuche ergab, daß die Versuche konsistente Druck-Zeit-Verläufe innerhalb und außerhalb der Ballonhülle ($R=2,95\text{m}$) lieferten. Die dynamischen Drucksensoren registrierten beim stöchiometrischen Gemisch nach einigen ms innerhalb der Ballonhülle von-Neumann-Druckspitzen um 25 bar und Chapman-Jouguet-Gleichgewichtsdrücke bis zu 15 bar. An der Gemischgrenze zur Umgebungsluft wurden schwache Reflexionen beobachtet. Die Druckfronten waren in der Umgebung ($R=10\text{ m}$) an einer reflektierenden Außenwand auf Werte unter 2,5 bar abgefallen. Die Versuche mit magerem Gemisch führten erwartungsgemäß zu niedrigeren Druckkurven, wobei sich bei zwei Versuchen keine stabilen Detonationsdrücke ausbildeten.

Bei der Nachrechnung der Versuche mit stöchiometrischem und magerem Gemisch konnten die gemessenen Druck-Zeit-Verläufe in erster Näherung mit den gerechneten Drucktransienten des Detonationscodes DET tendenziell recht gut reproduziert werden. Dazu wurde der Code für praktische Anwendungen erweitert und bezüglich der Rechenzeit optimiert.

Die verwendeten Rußfolien ergaben keine erkennbare Feinstruktur der Detonationszellmuster. Die Druckpeaks konnten in der Druck-Historie nicht identifiziert werden. Zur Auswertung von Detonationszellgrößen sind weitergehende Versuche vorzuschlagen, insbesondere im mageren Gemischbereich mit Beimischungen und verschiedenen Strömungshindernissen im Einschluß.

Im Zusammenhang mit dem Ballon-Experiment wurde eine **Versuchsvariante** mit fester Außenwand mit dem Detonationscode DET numerisch simuliert. Für ein stöchiometrisches Wasserstoff-Luft-Gemische wurde die typische Reflexion einer Detonationswelle in der Kugelschale, die Fokussierung im Zentrum und die Wandreflexion der Schockwellen im verbrannten Gasgemisch analysiert. Die Reflexion einer kugelförmigen Detonationswelle ergibt den 2-fachen CJ-Druck. Die Schockwellenlaufzeit beträgt hier 3,6 ms. Die Integration der Druck-Zeit-Verläufe liefert die lokalen und globalen Impulse. Dabei konnte gezeigt werden, daß auf eine kugelförmige Außenwand relativ niedrige Belastungen wirken.

Reale Einschlüsse mit einem Wasserstoff-Detonationspotential besitzen im allg. Hindernisse, an denen Detonationswellen gebeugt, reflektiert und fokussiert werden können. Für ein zentrales Hindernis in einer kartesischen Einschlußgeometrie wurde beispielsweise die charakteristische Ausbreitung einer kugelförmigen Detonation eines stöchiometrischen Gemisches untersucht. Dabei zeigte sich, daß durch Überlagerung der gebeugten Detonationswellen hinter dem Hindernis lokale Reflexionsdrücke auf der Wand bis zum 3,5-fachen CJ-Druck auftreten können. Durch die Anordnung von Hindernissen sind die Belastungen dahinter geringer, als wenn die Hindernisse nicht da wären.

Auf der anderen Seite können Strömungshindernisse zu **Turbulenzen** führen, die u.U. von einer langsamen Verbrennung in eine schnelle Verbrennung übergehen und so die H₂-Detonationsgrenzen aufweiten (Deflagration-to-Detonation Transition, DDT-Gebiet). Die Grundzüge einer DDT-Programmentwicklung, die in internationaler Kooperation eingeleitet wurde, wurden dargelegt.

DANKSAGUNG:

Die Arbeiten erfolgten mit dankenswerter Unterstützung durch W. Breitung und R. Redlinger vom INR, KfK, Karlsruhe. Hilfreiche Informationen zur Reaktionskinetik wurden von R. Klein, ITM, RWTH Aachen geliefert. Die Zeichnungen wurden von S. Begemann, ISR, KfA, Jülich in besonderer Weise für den Bericht erstellt.

8. LITERATUR

- /1/ H. Pförtner: Ausbreitungsfunktionen detonierender Wasserstoff-Luft-Gemische; FhG-Projekt Nr. 102 555, Dez. 1991, Fraunhofer-Institut für Chemische Technologie, Pfinztal-Berghausen/Karlsruhe.

- /2/ F. Mayinger, G. Strube, R. Beauvais: Derzeitiger Wissensstand über den Verlauf der Grenze für den Übergang einer Deflagration in eine Detonation (DDT) im Dreistoff-Diagramm Wasserstoff/Luft/Wasserdampf nach Shapiro/Moffette; BMU-1988-200, Juni 1988, Schriftreihe Reaktorsicherheit und Strahlenschutz.

- /3/ C.K. Chan, K.N. Tennankore: A State-of-the-Art Report on Flame Acceleration and Transition to Detonation in Hydrogen/Air/Diluent Mixtures; AECL-10 459, Dec. 1991, Atomic Energy of Canada Limited, Whiteshell Laboratories, Pinawa, Manitoba.

- /4/ K.W. Boyack, S.R. Tieszen, D.W. Stamps: Loads From the Detonation of Hydrogen-Air-Steam Mixtures, SAND92-0541.UC-741, July 1992, Sandia National Laboratories, Albuquerque, USA.

- /5/ R. Redlinger: Der 1D-Detonations Code DET-1D, Primärbericht, 1992, Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik, Kernforschungszentrum Karlsruhe.

- /6/ G. Paczko, R. Klein: Reduzierte Reaktionsmechanismen für H₂-Luft-Dampf-Detonationen, Projekt Nr.: 325/031 798 80/0105, Juli 1992, Institut für Technische Mechanik, RWTH-Aachen.

- /7/ W. Breitung, R. Redlinger: pers. Mitteilung, im Jan. 1993, INR, KfK, Karlsruhe.

- /8/ S.B. Dorofeev, A.S. Kochurko, B.B. Chaivanov: Evaluation of the Hydrogen Explosion Hazard, 18th Water Reactor Safety Meeting Washington, DC, USA, Oct. 22-24, 1990.

- /9/ C.M. Guirao, R. Knystautas, J.H. Lee: A Summary of Hydrogen-Air Detonation Experiments, SAND87-7128, NUREG/CR-4961 May 1989, McGill University, Montreal, Quebec, Canada, Prepared for U.S. NRC, Washington, DC, USA.

- /10/ D. Sawyers, W. Jahn, W. Rehm: Hydrogen Detonation Calculations Using the Numerical Code DET-2D, KFA-ISR-IB-17/93, Sep. 1993, KFA Report, Forschungszentrum Jülich.

- /11/ F. Wetzel: Untersuchung der Mechanismen bei Detonationsentstehungs- und Detonationsausbreitungsvorgängen, VDI-228 Reihe 7: Strömungstechnik, Sep. 1993, VDI-Verlag, Düsseldorf.

- /12/ E. Hicken, W. Rehm, N. Peters, R. Klein, P. Thibault: Effects of Deflagration-to-Detonation Transition on Hydrogen Explosion Loads in Large-Scale Enclosures, Aug. 1993, CEC Activities on Reactor Safety for the Hydrogen Project, Commission of the European Communities, Brussels, Belgium.

9. ANHANG

9.1 Anhang A1:

S. 39

Gemessene Druck-Zeit-Verläufe
der Versuche HBAL 1, 3, 4, 5, 6
(s. auch Abb. 1a und 1b, S.3).

9.2 Anhang A2:

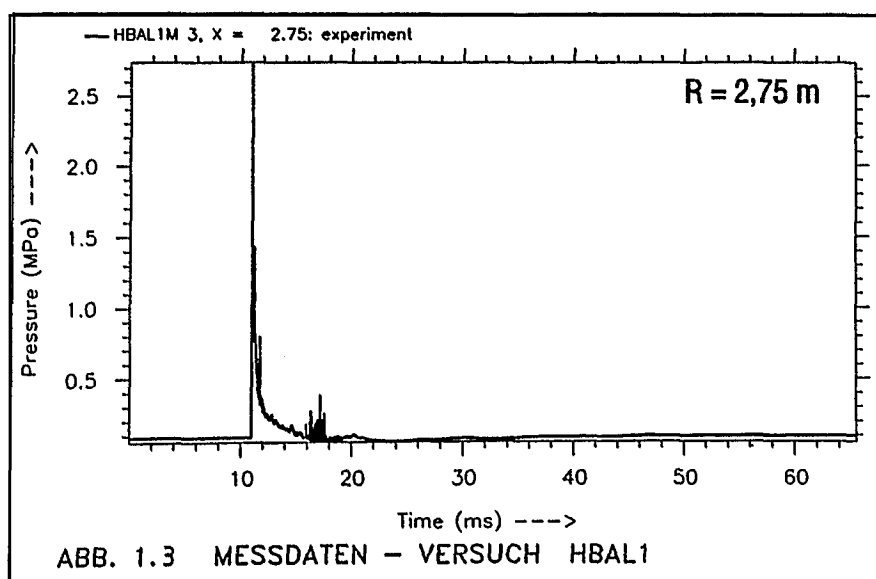
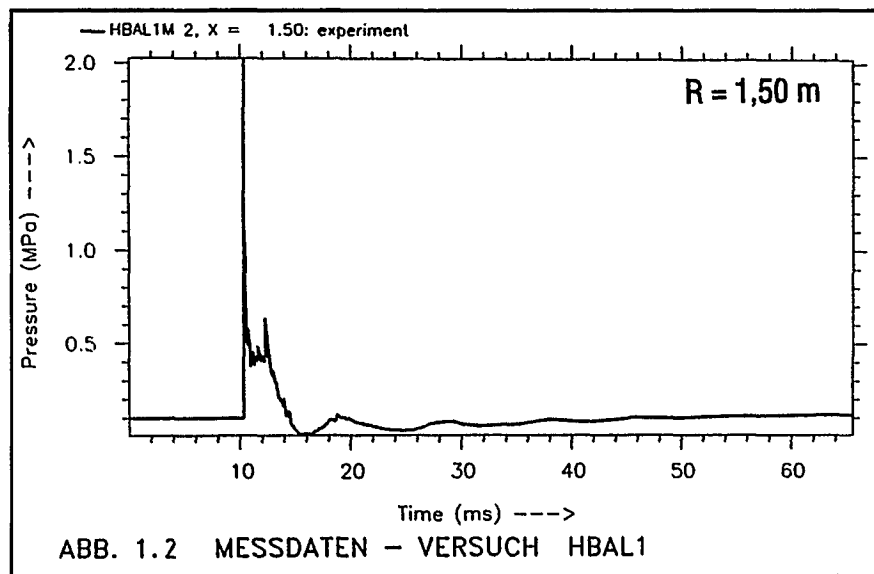
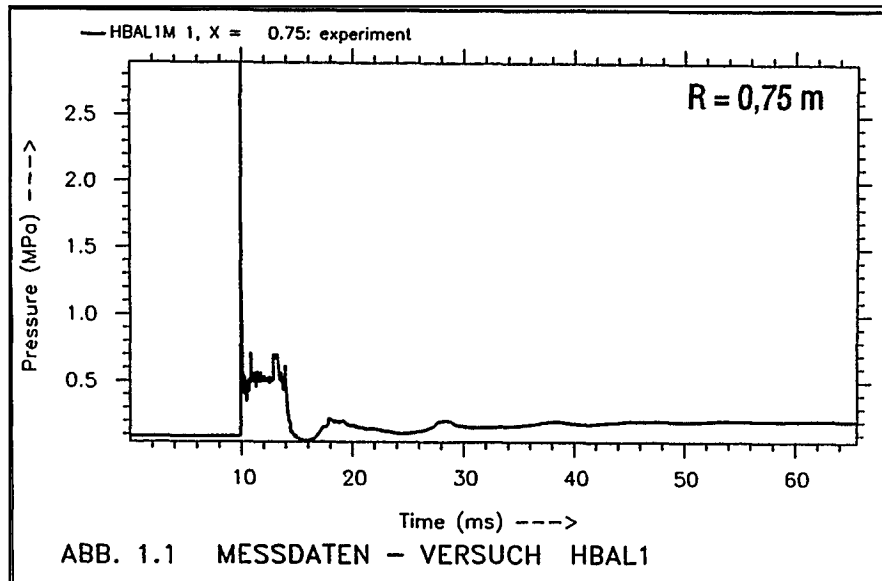
S. 58

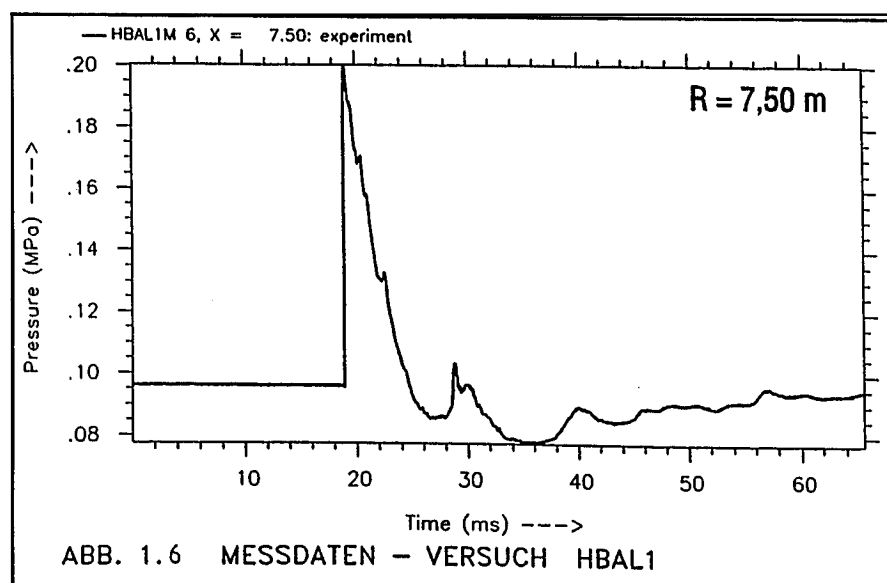
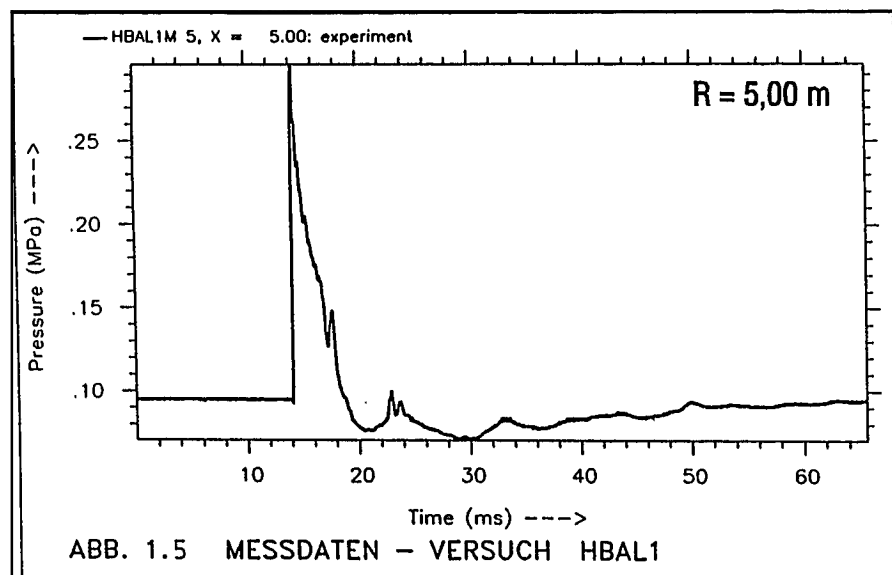
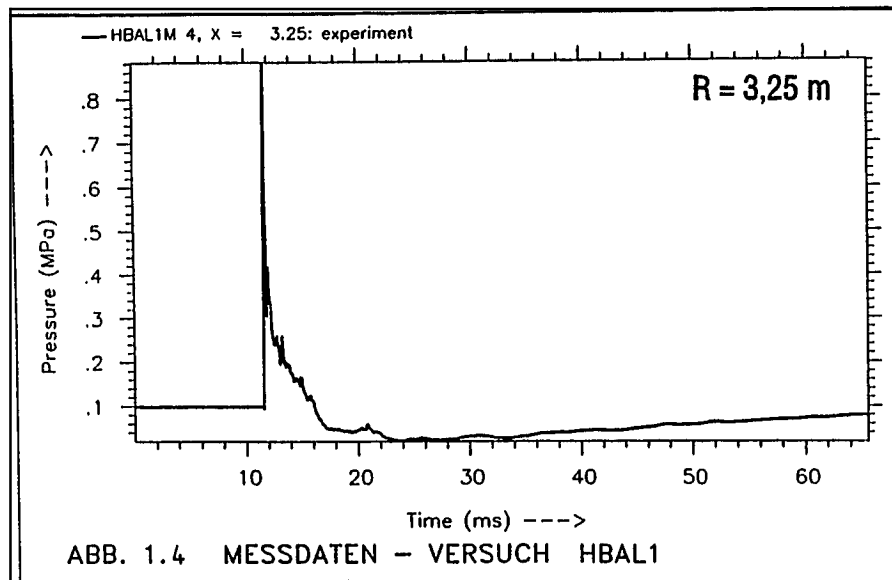
Eingabedatensatz für den Code DET-1D.

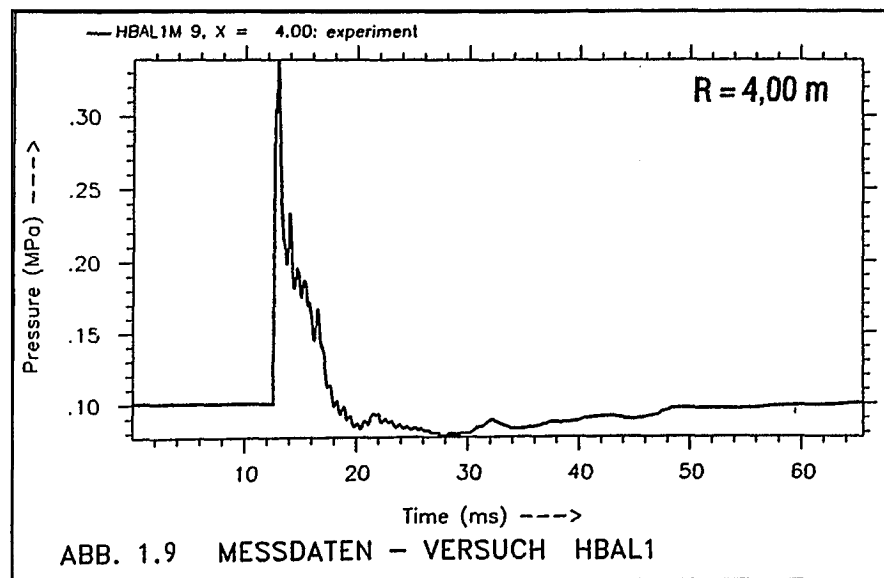
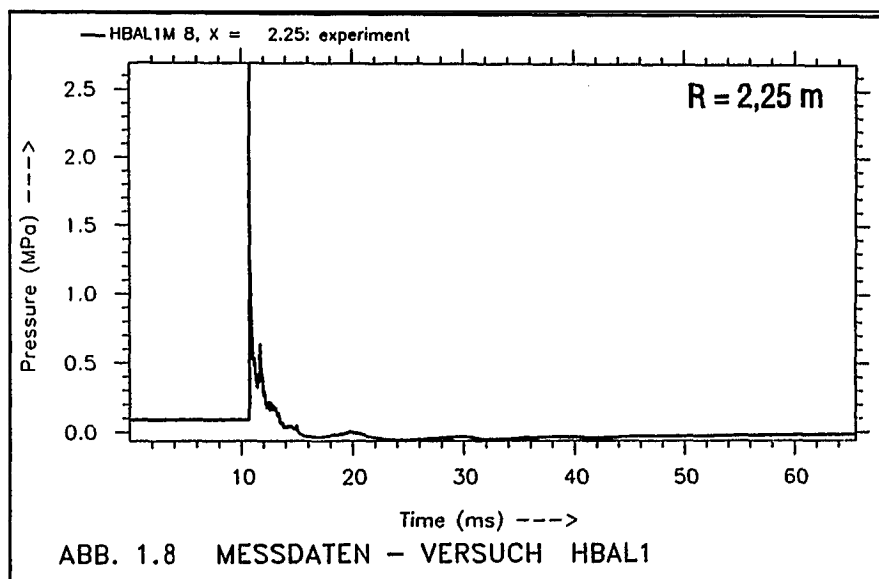
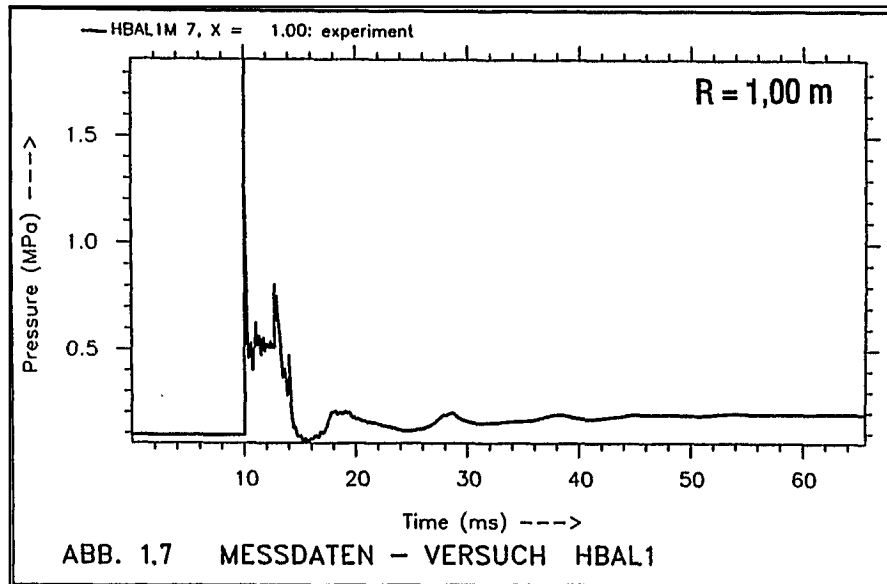
9.3 Anhang A3:

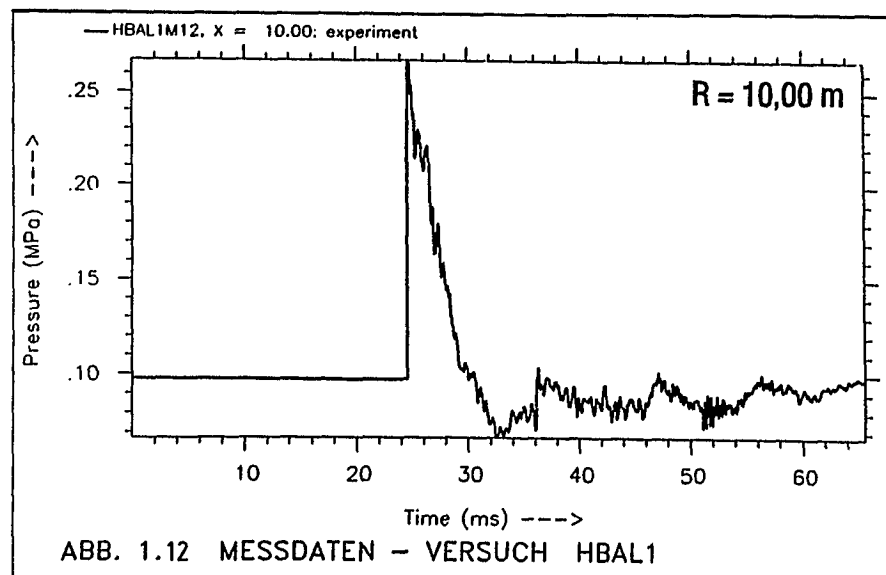
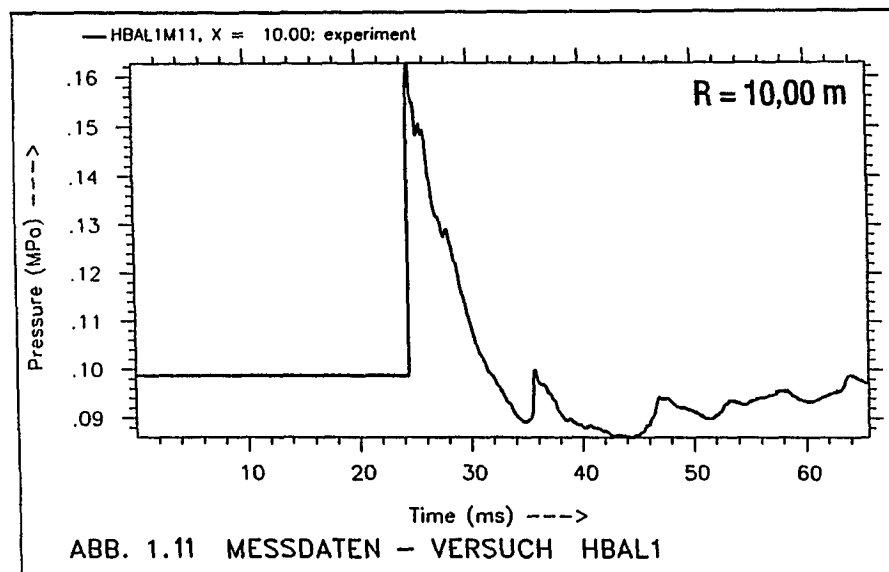
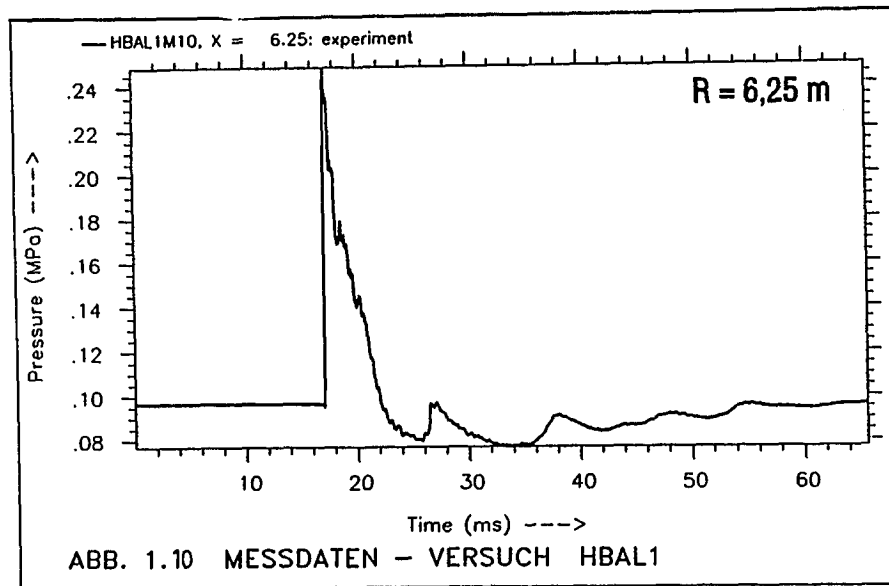
S. 60

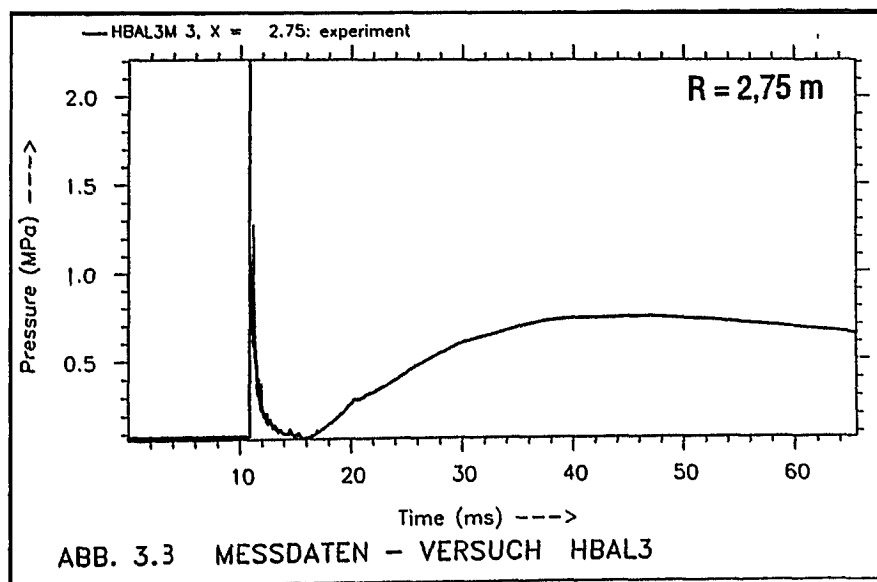
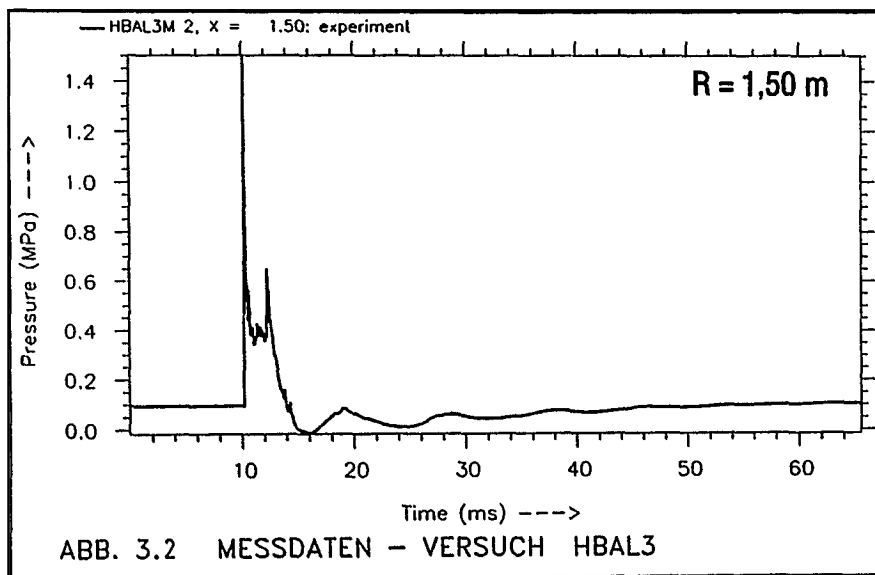
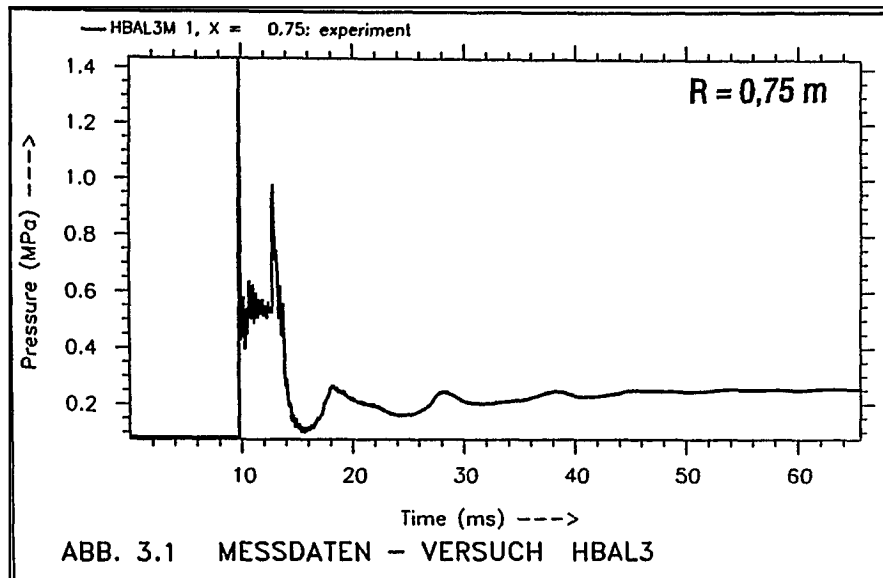
Vergleich Experiment und Rechnung für
Versuch HBAL 5 (s. auch Abb. 1b, S.3).
Anmerkung: Bei den experimentellen
Druckverläufen erfolgte nach der Druck-
ausgleichsphase ein Druckanstieg, der
durch Driften der Meßwerte bedingt war
und im Vergleich nicht korrigiert wurde.

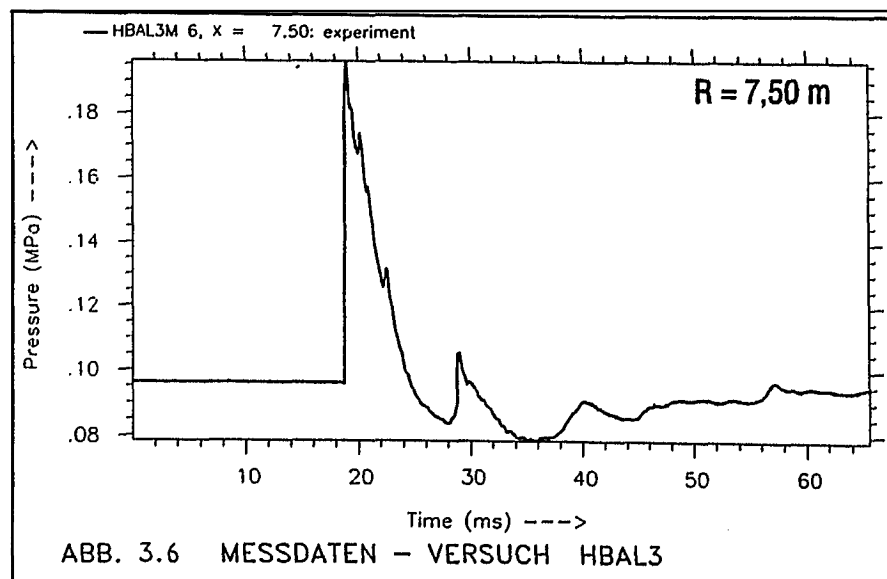
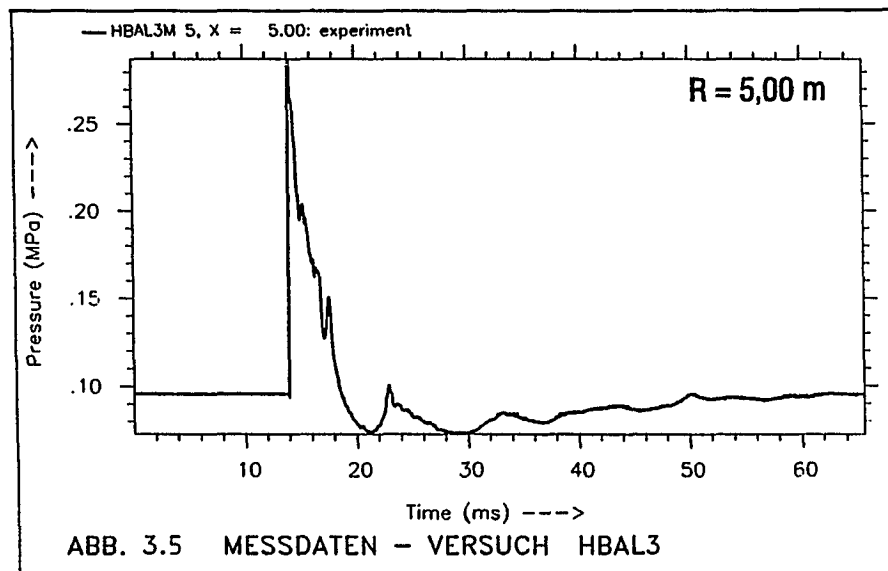
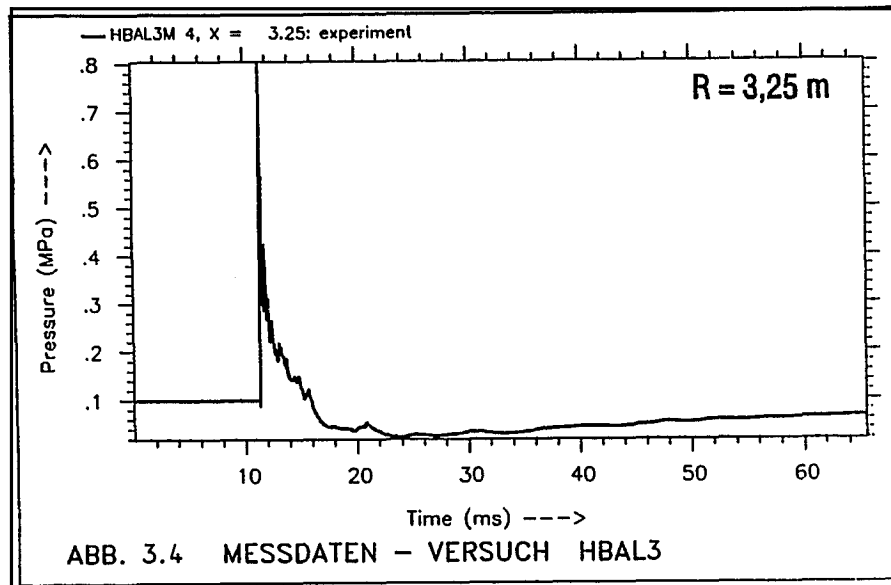


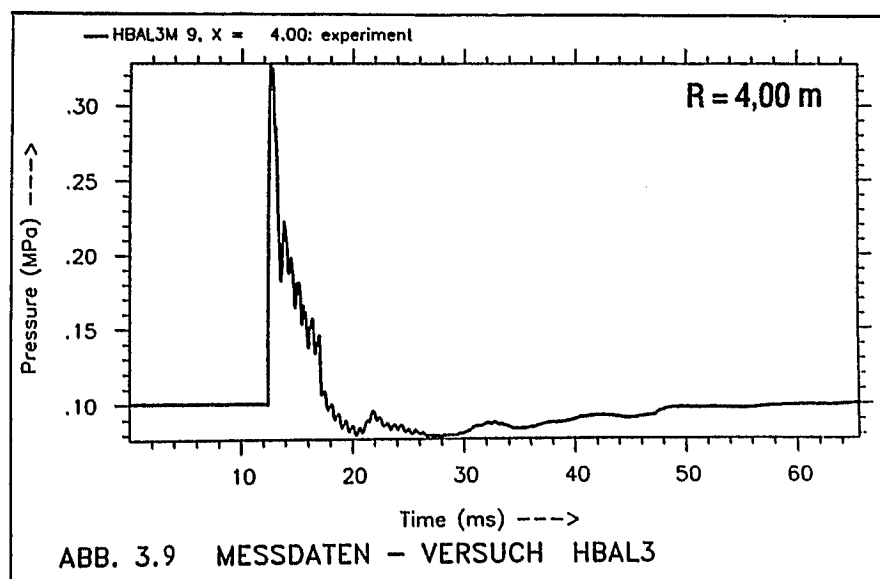
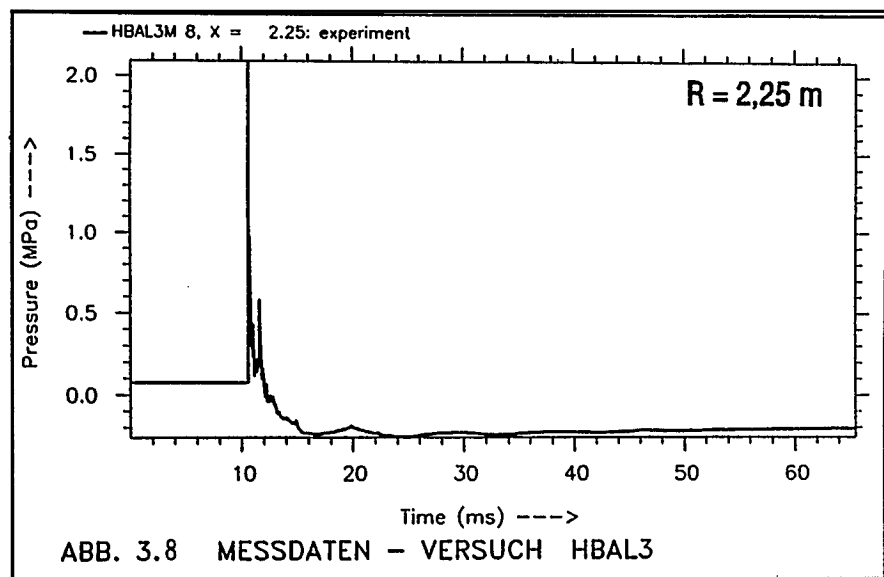
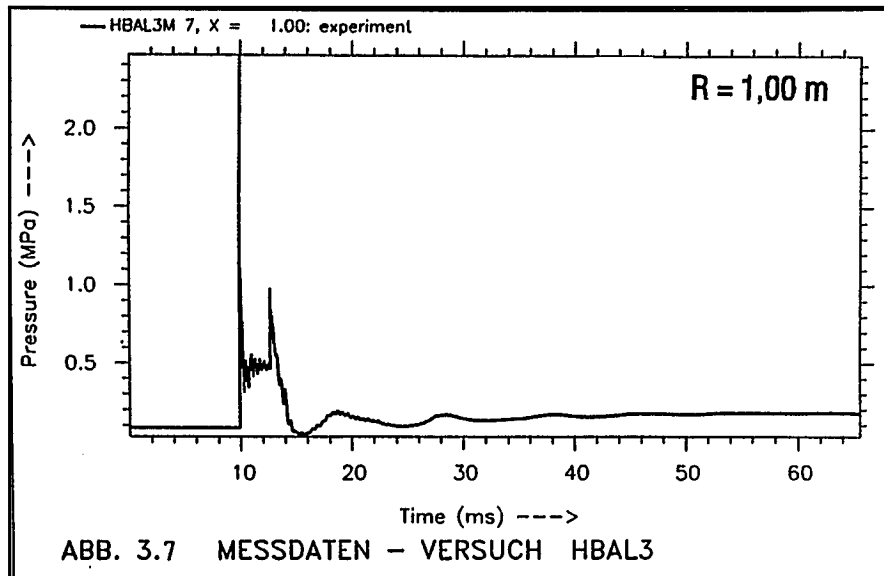


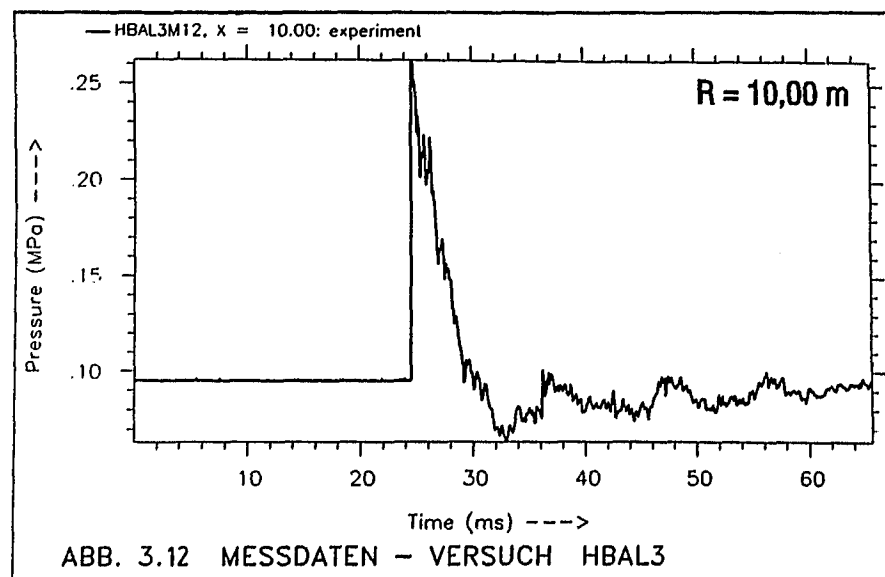
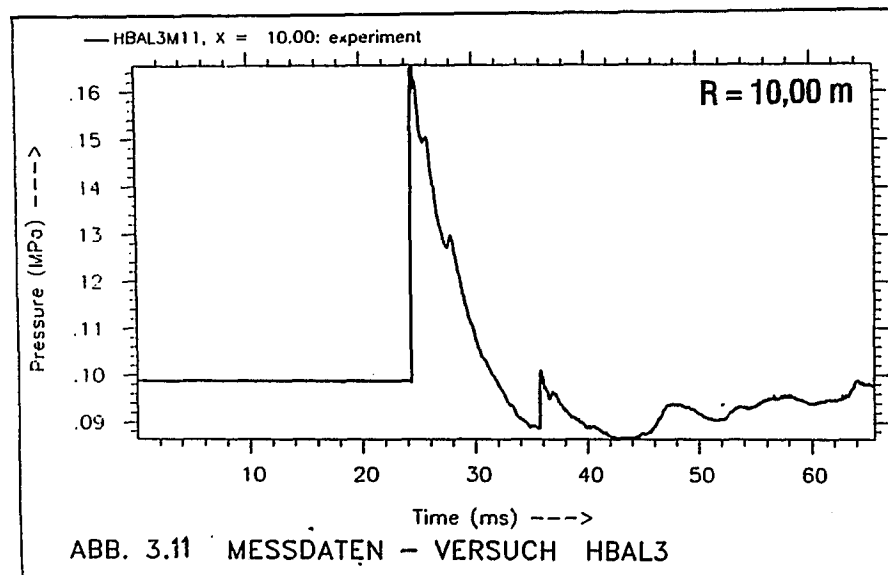
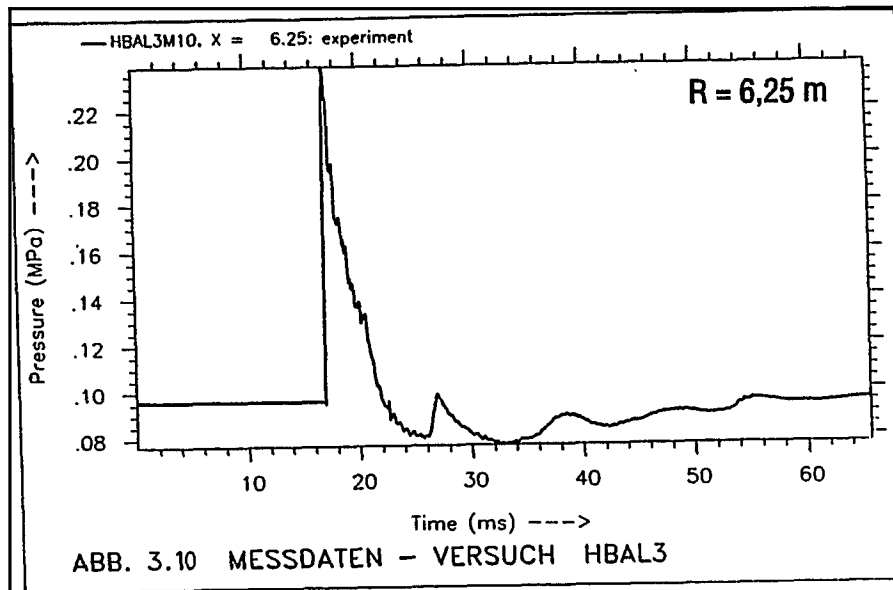


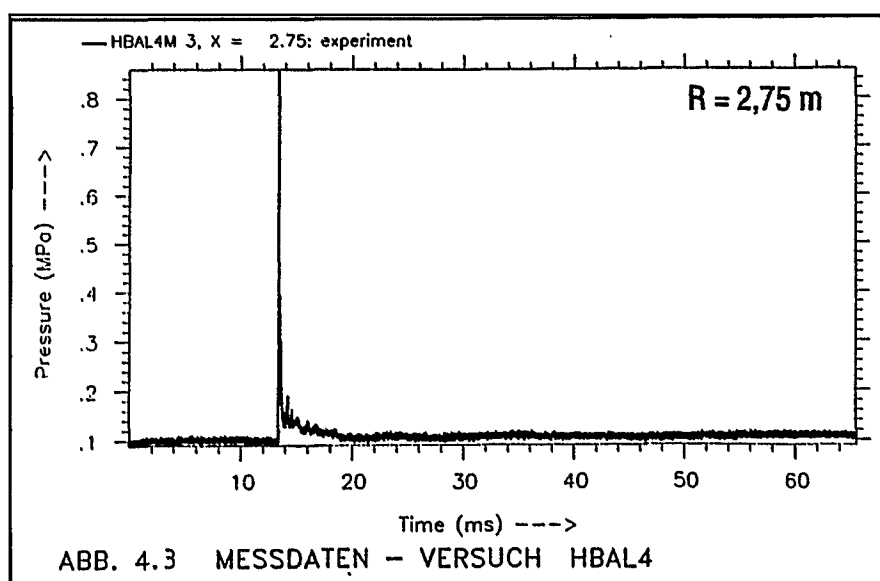
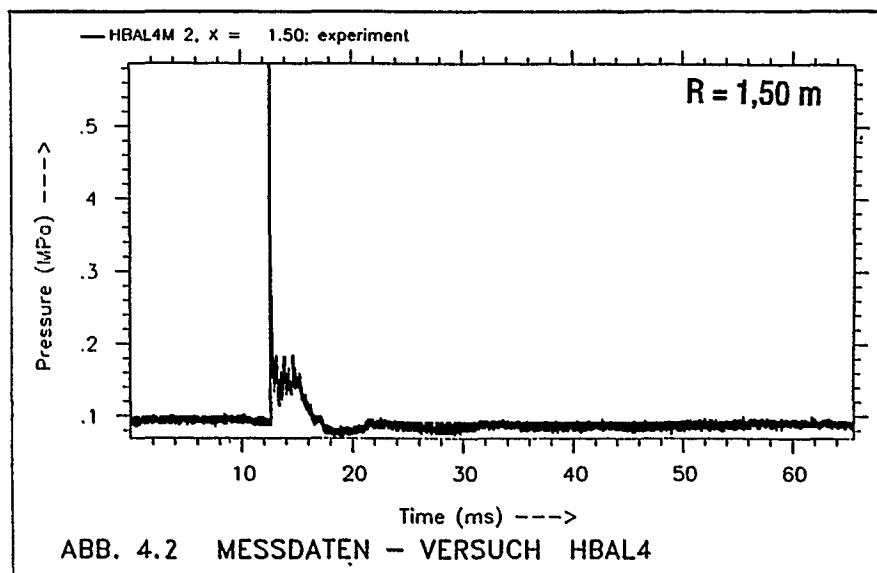
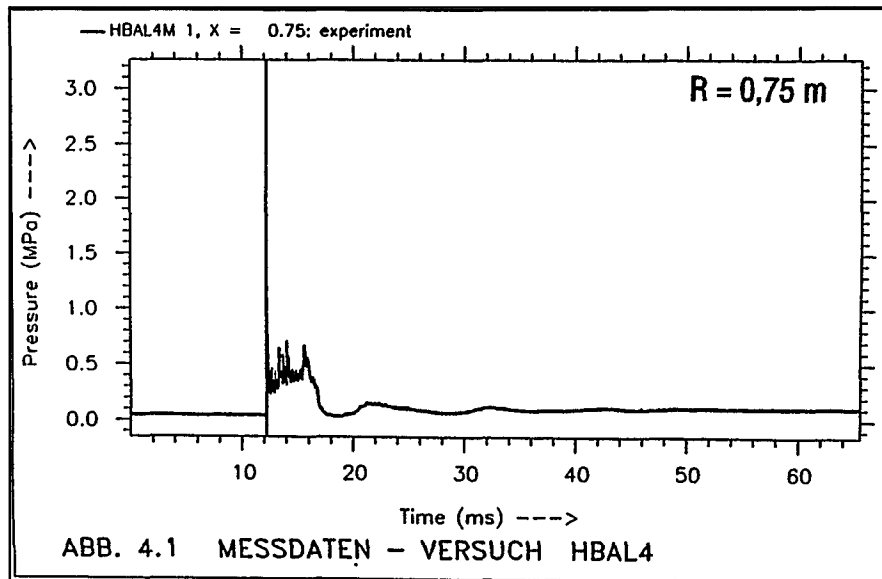


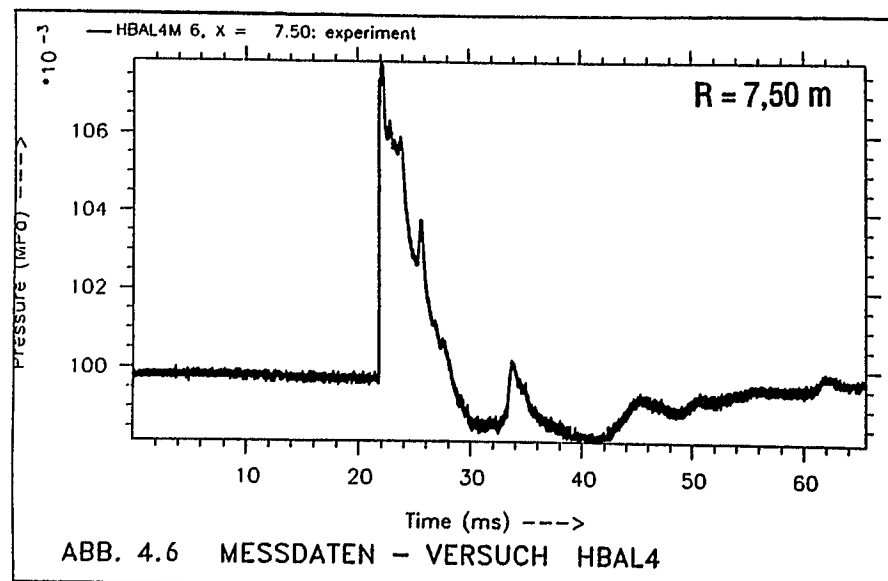
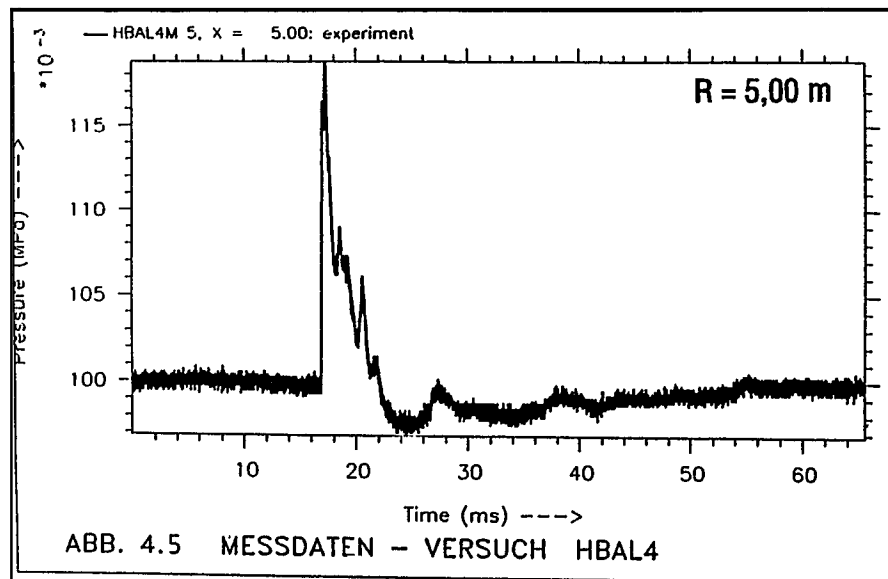
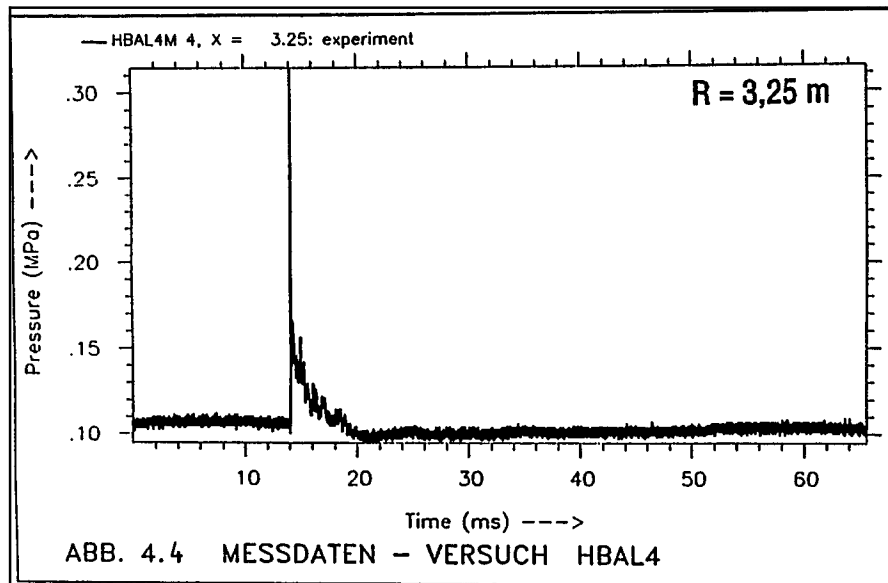


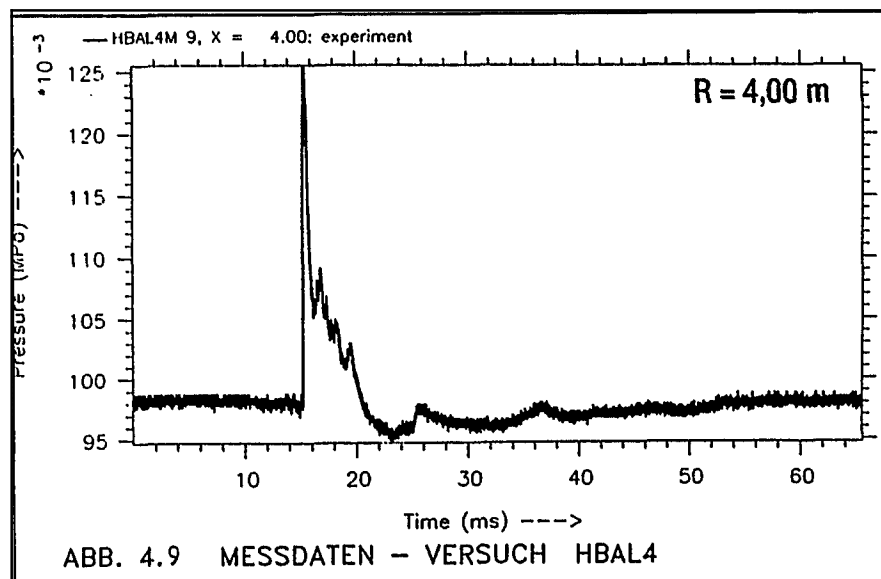
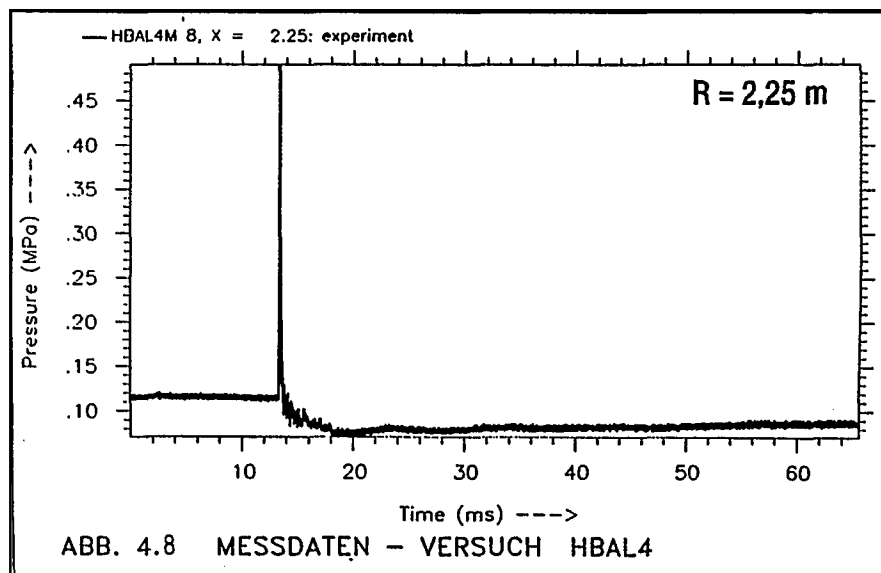
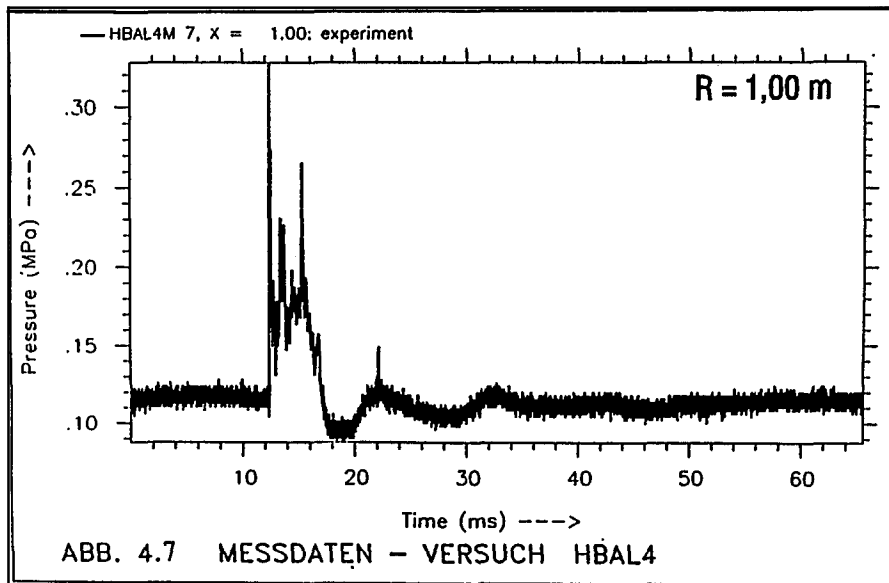


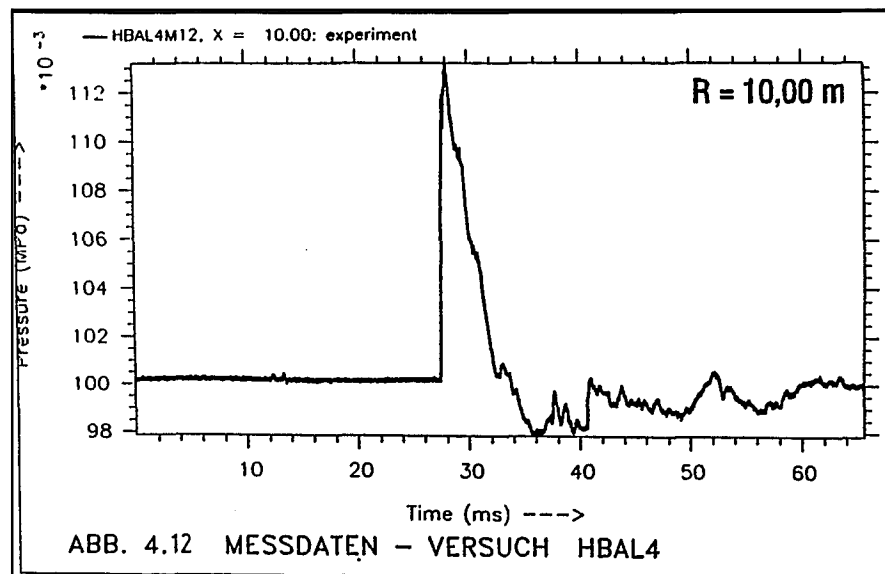
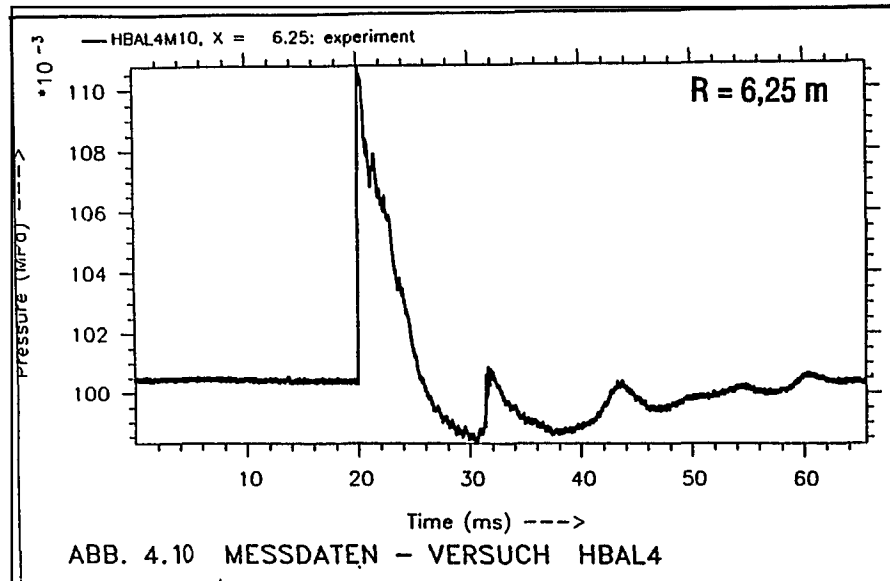


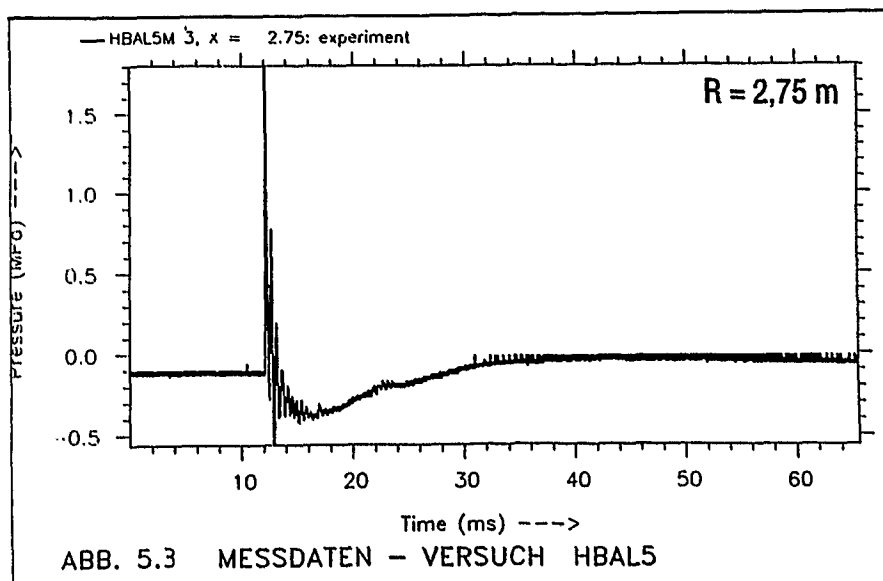
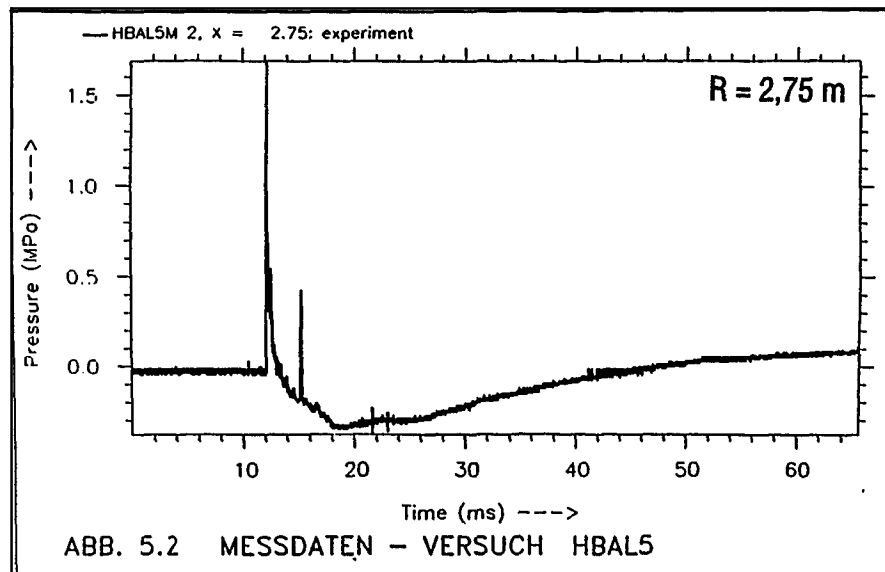
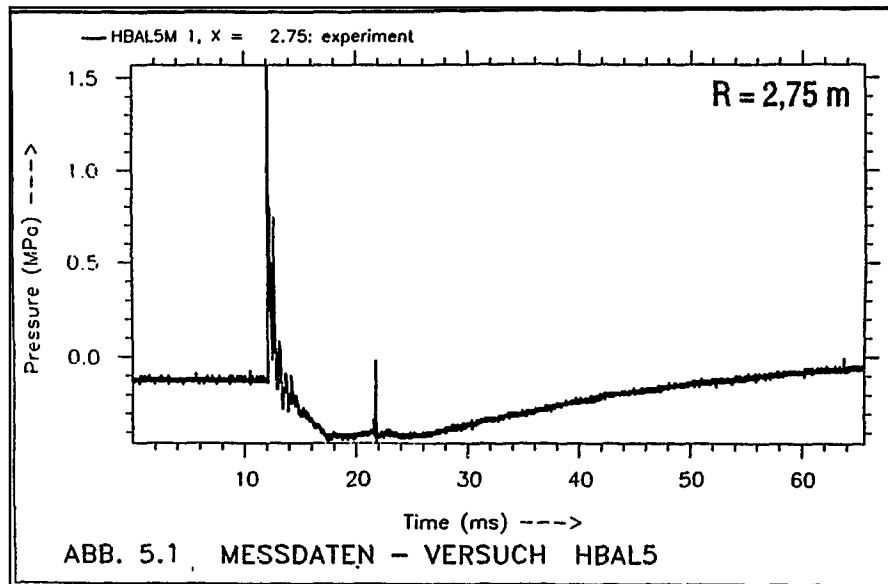


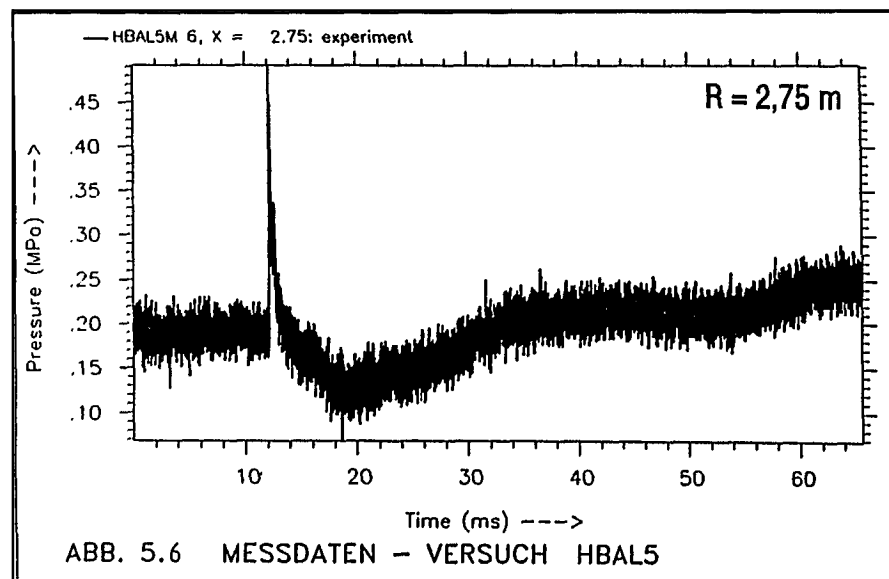
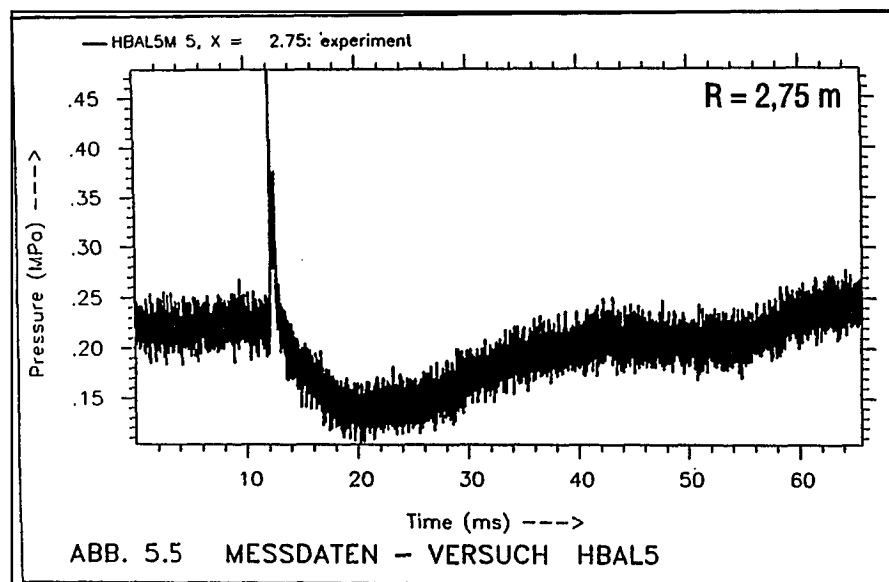
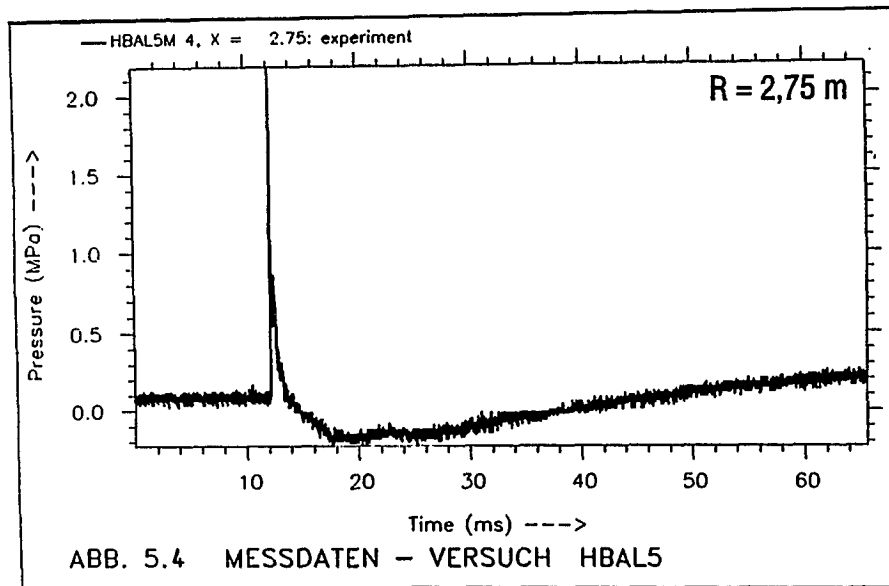


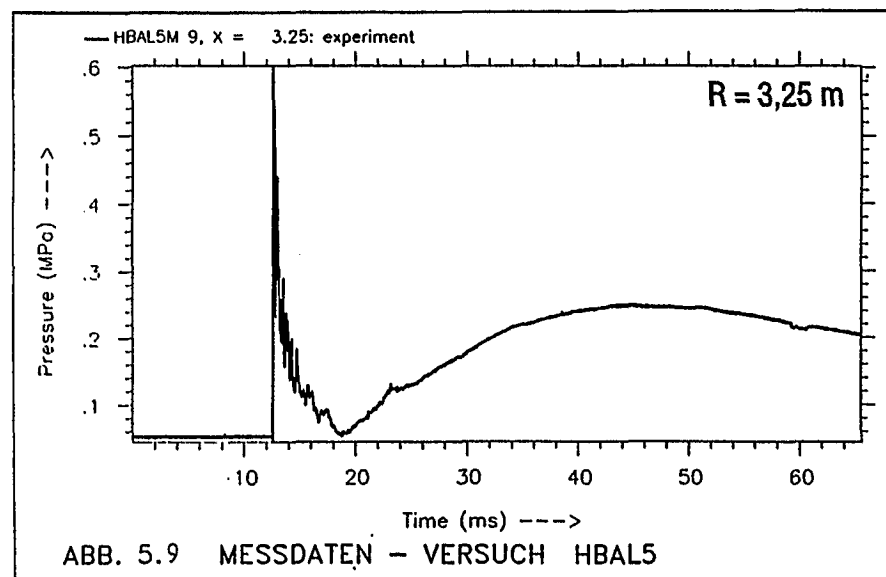
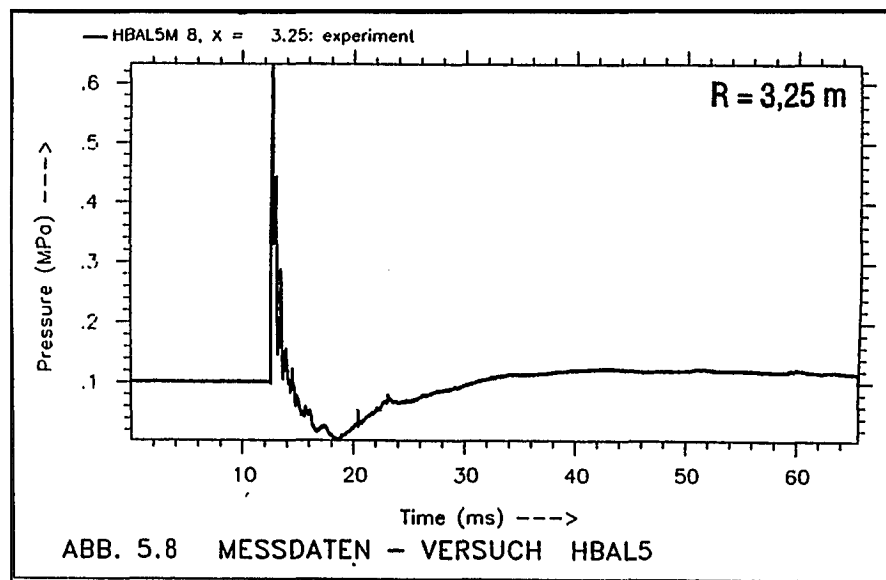
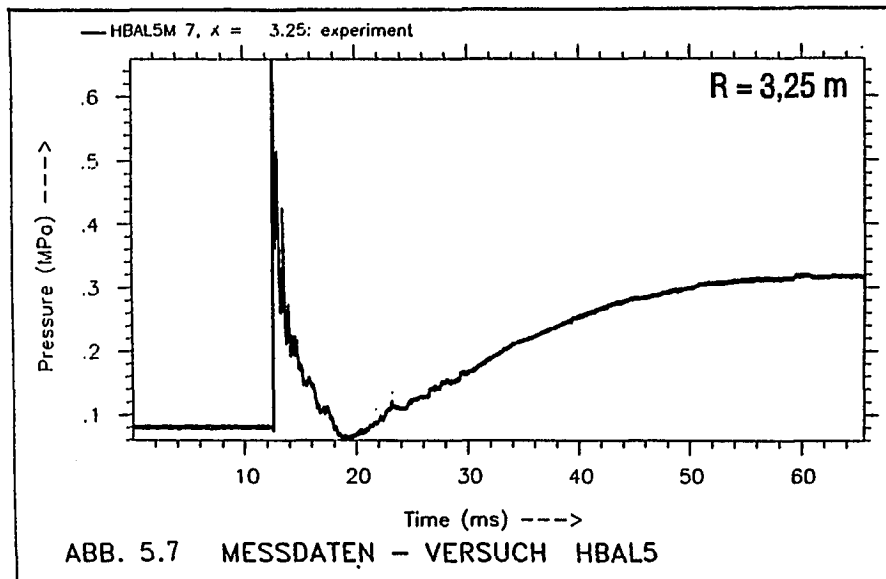


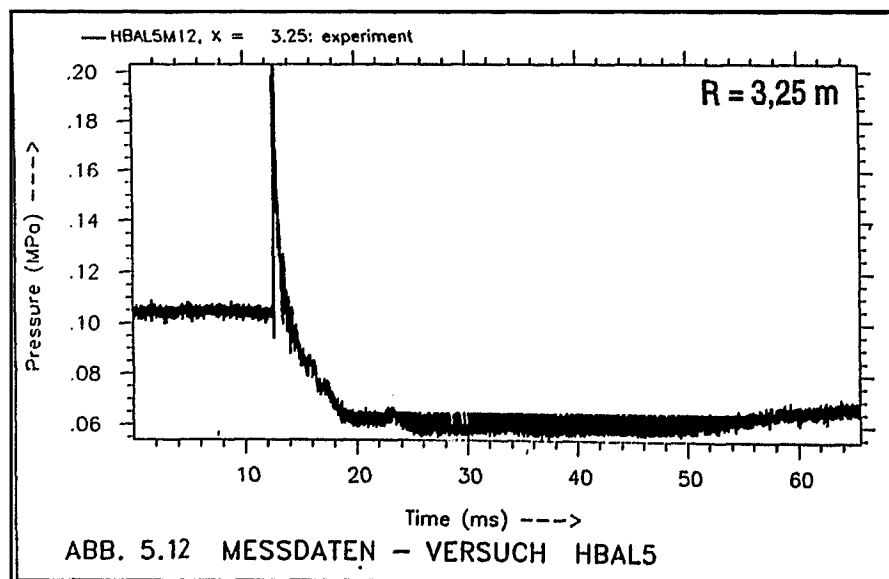
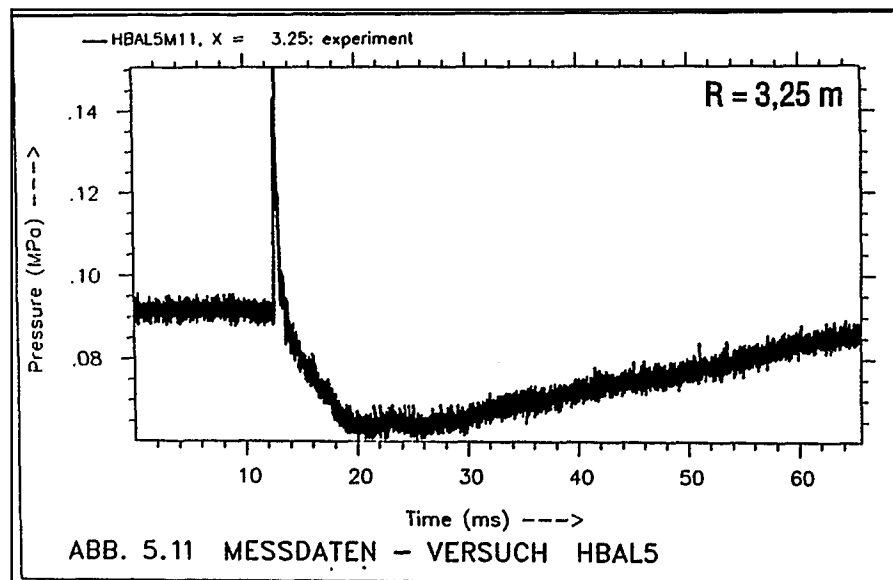
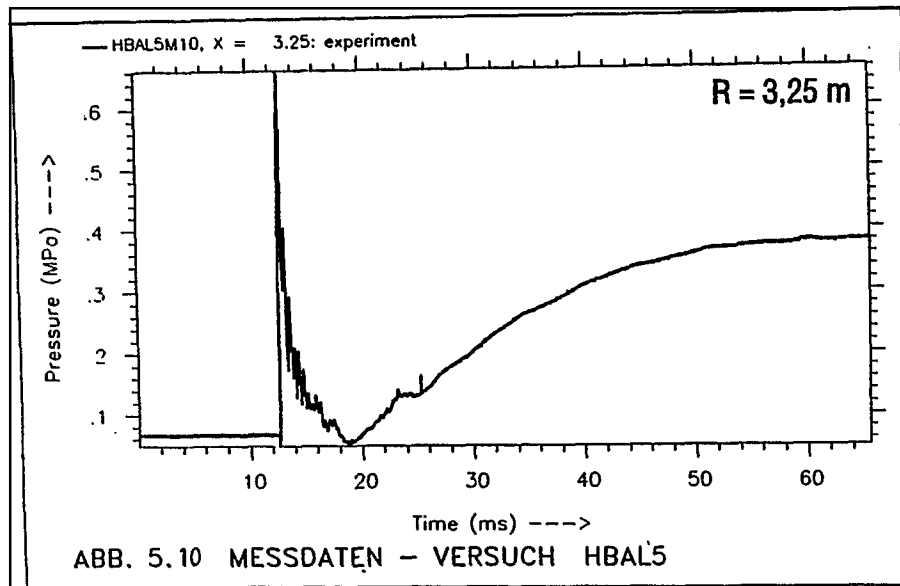


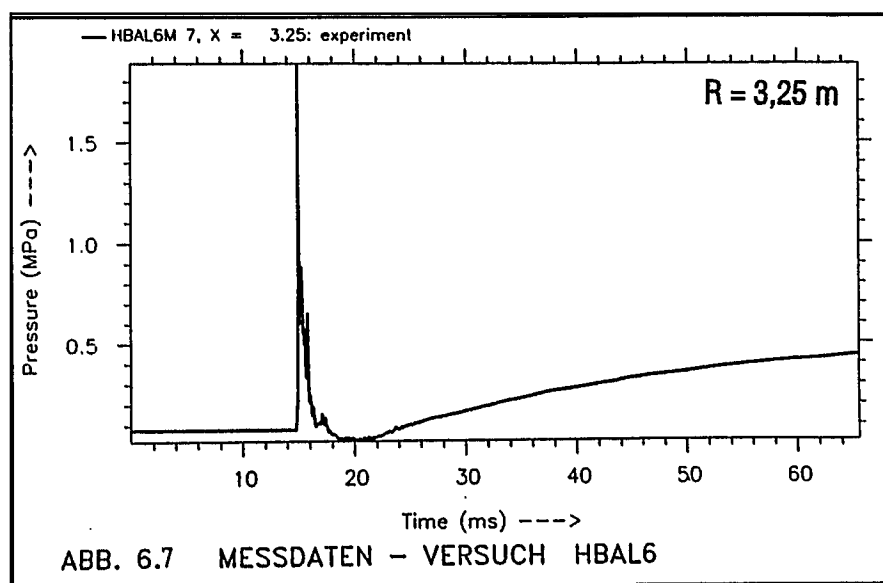
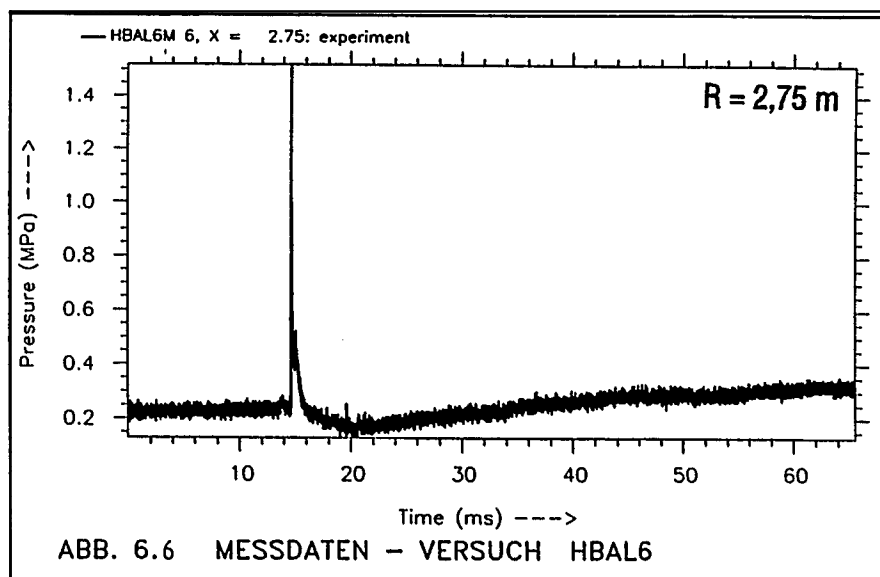
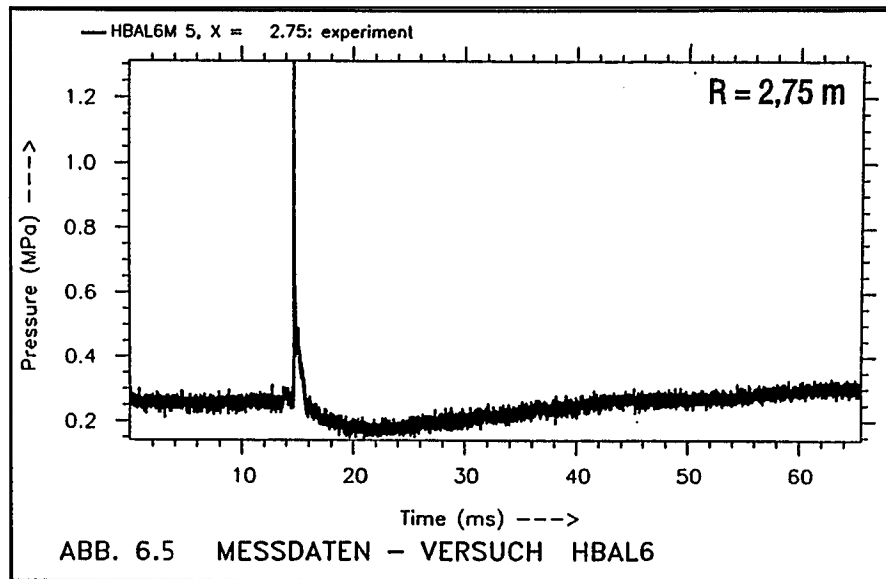


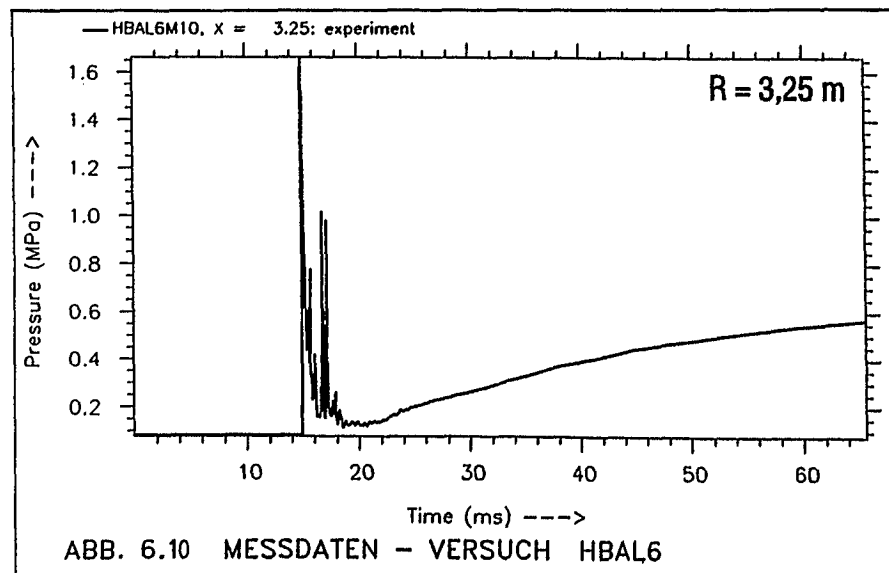
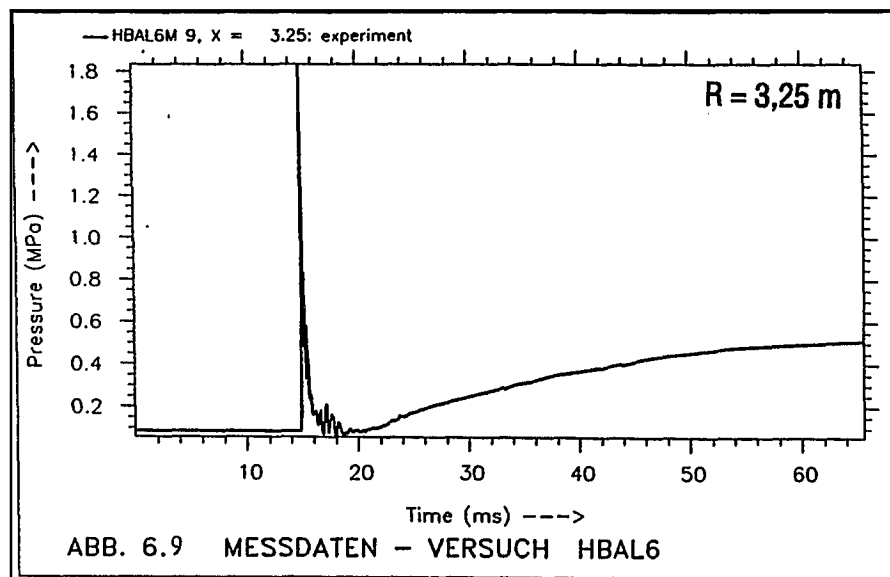
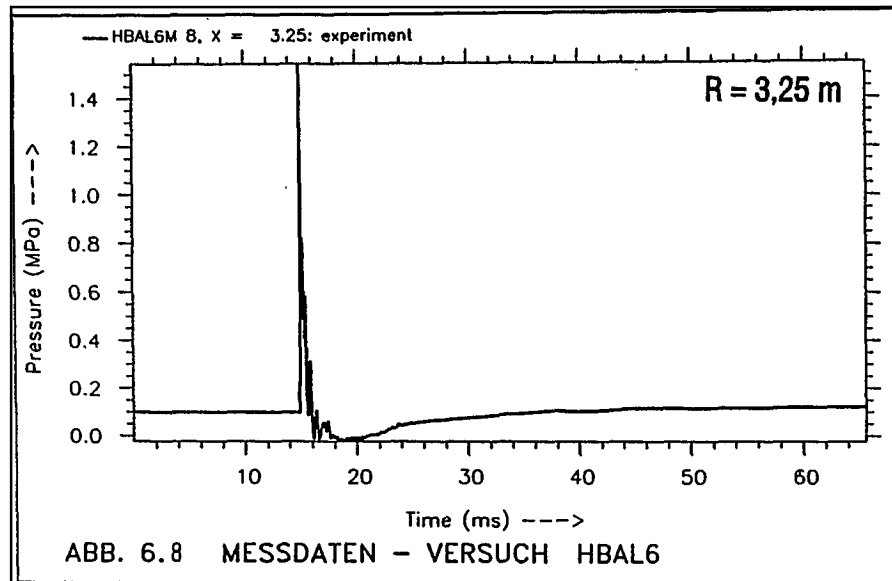


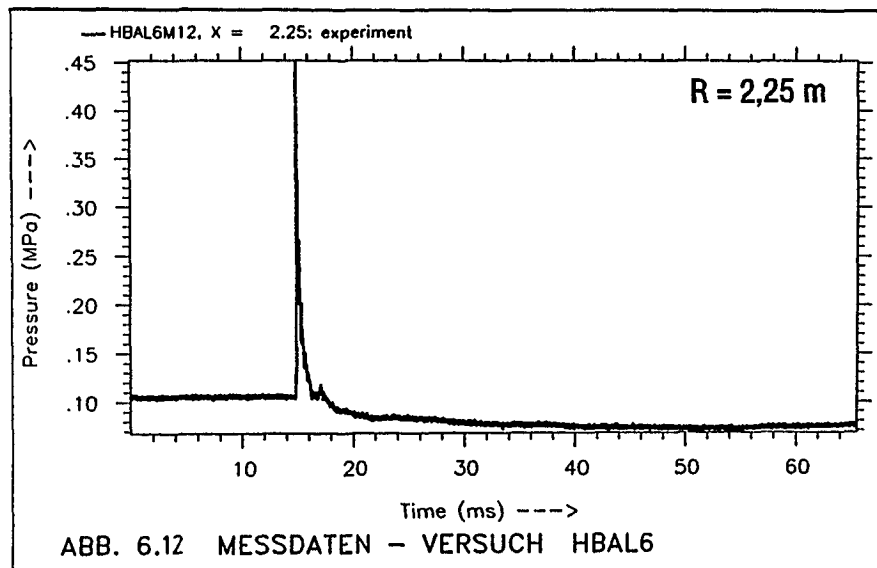
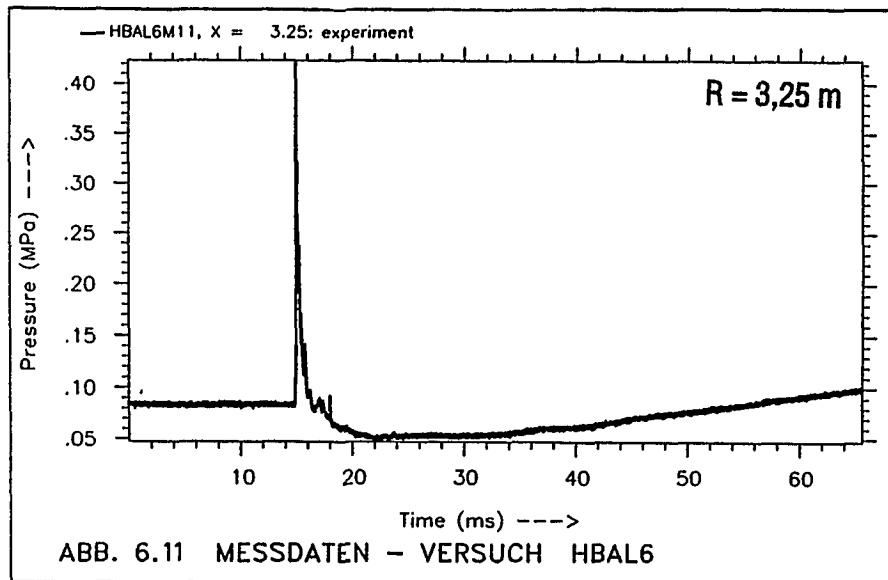








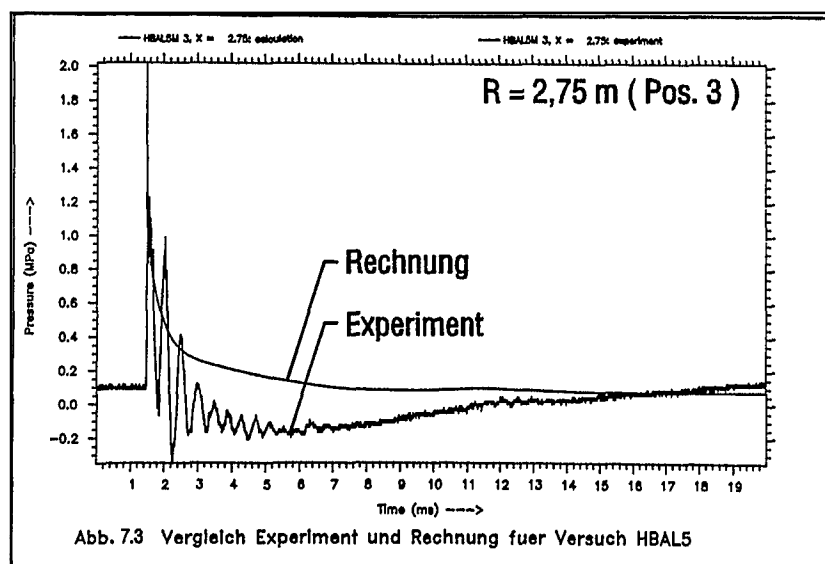
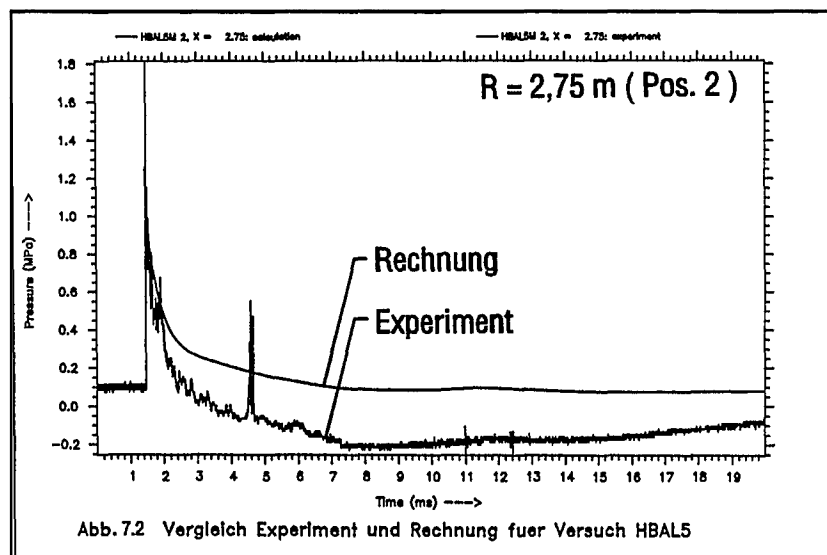
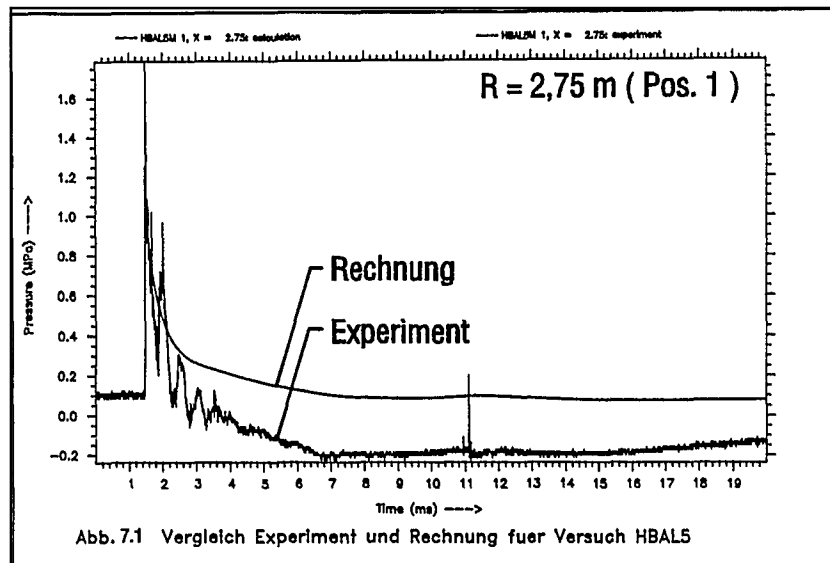


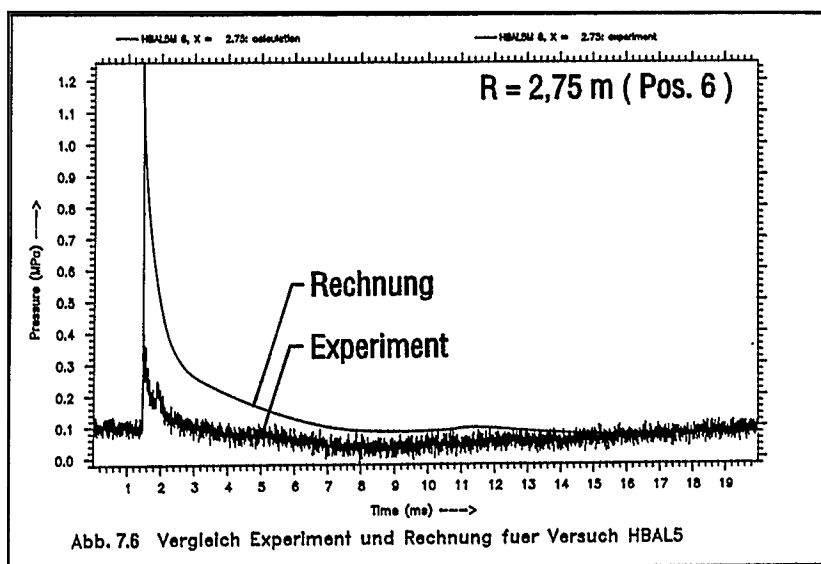
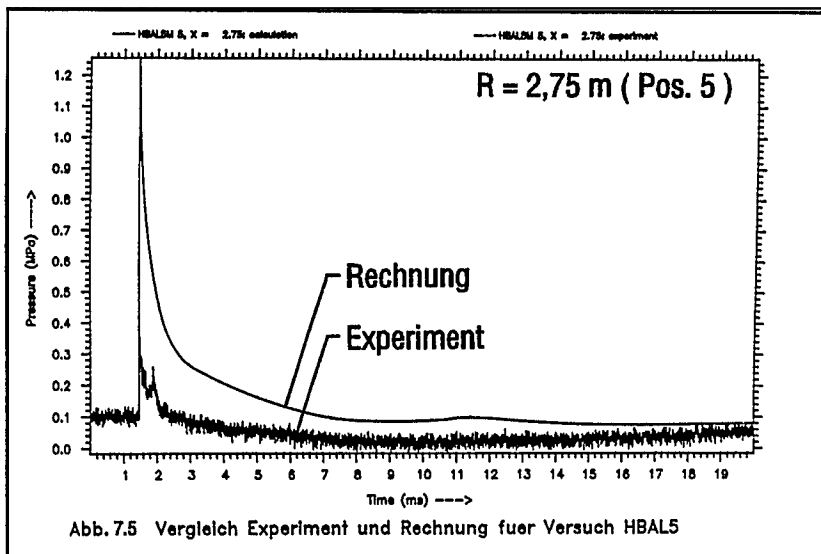
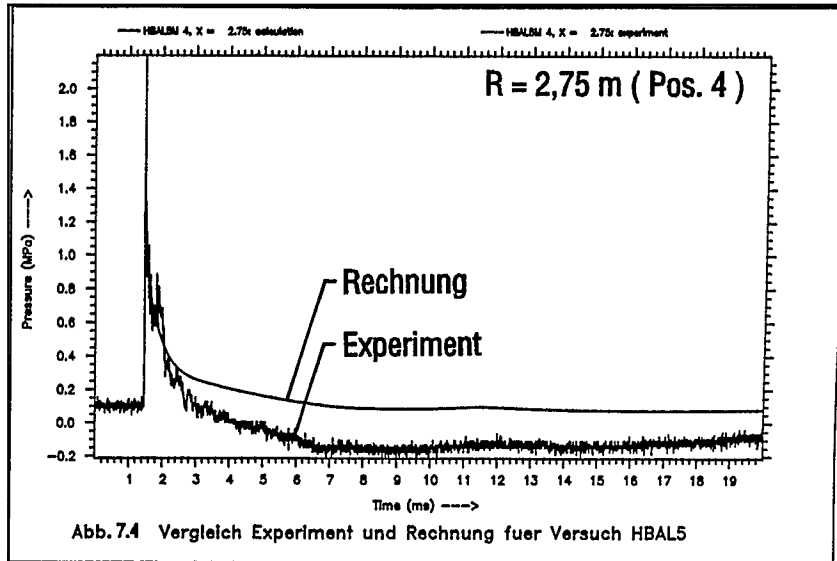


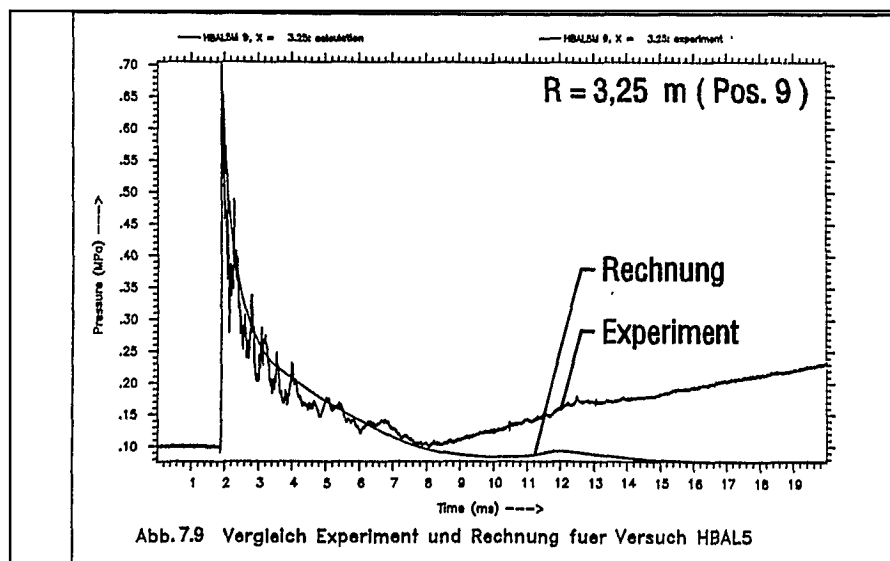
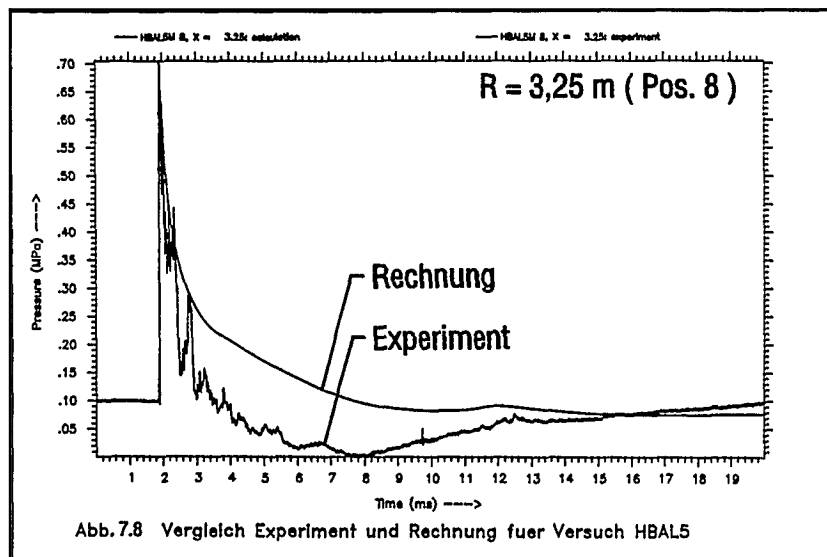
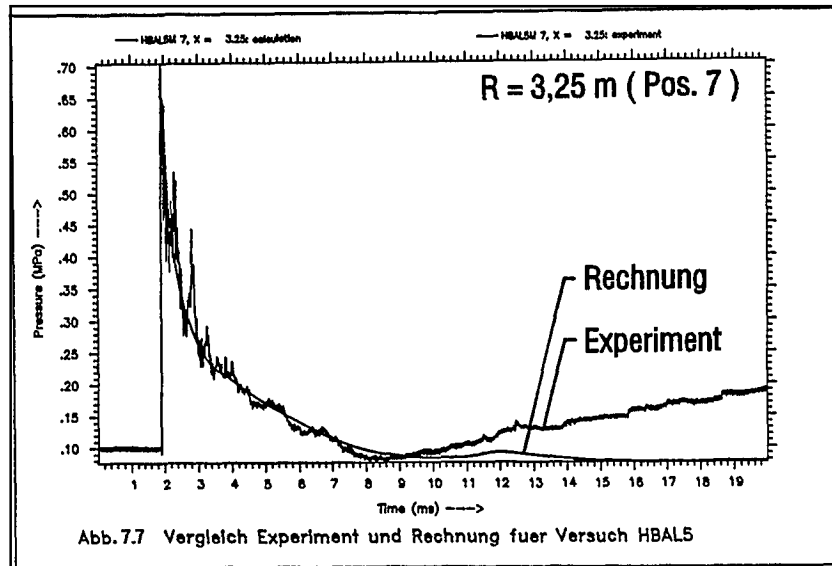
A2: Eingabedatensatz für DET-1D

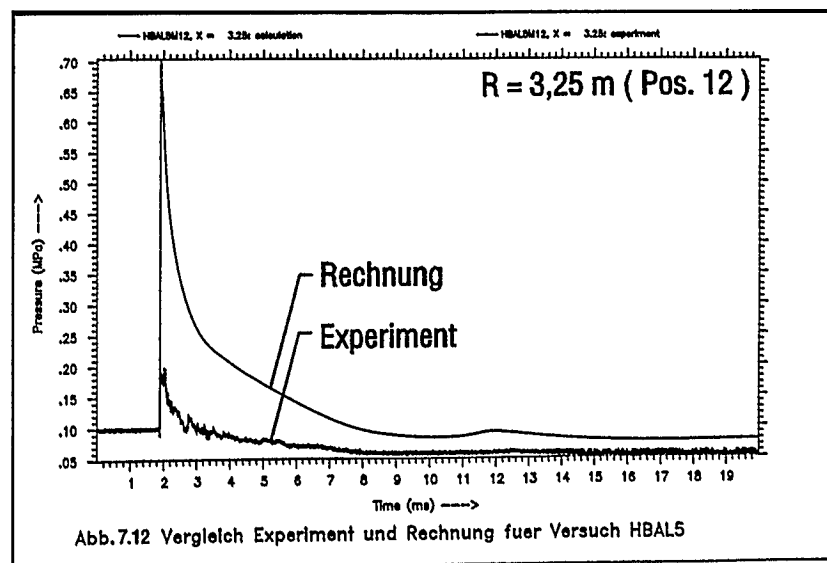
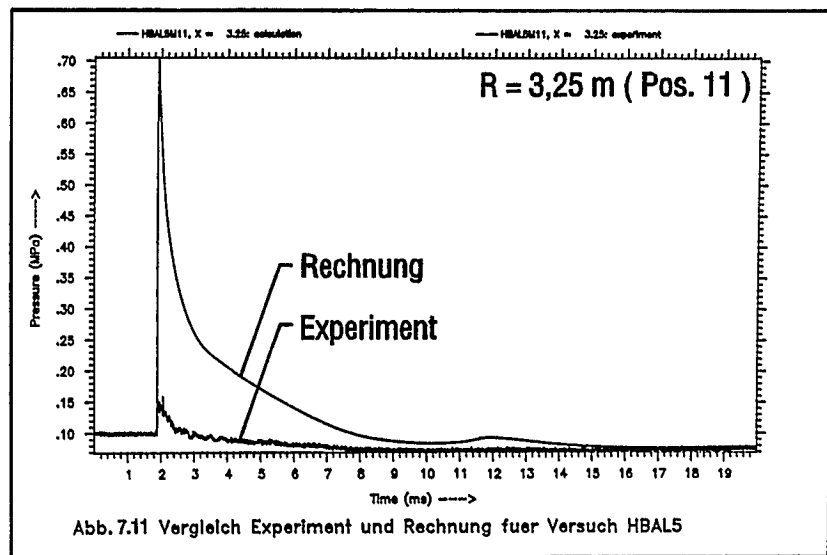
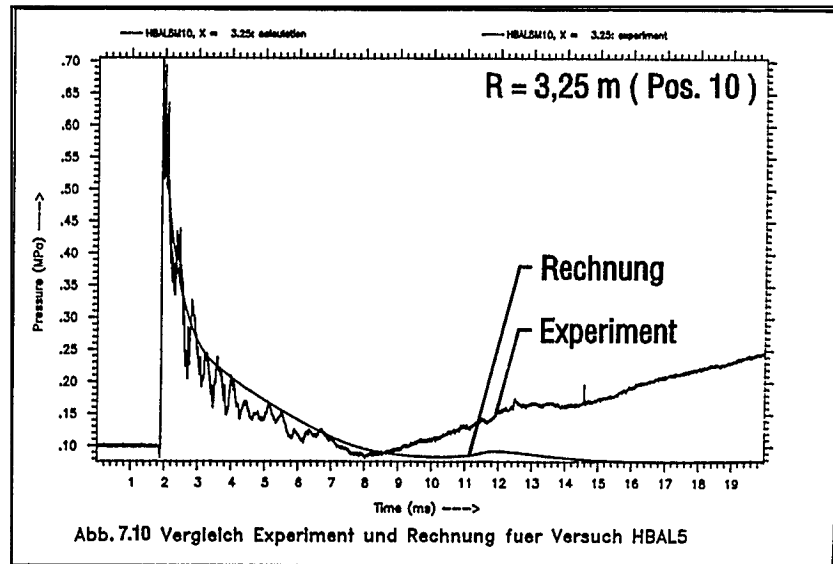
TAYLORCJ	ANFWER	RIEMANNCJ, TAYLORCJ, RIEMANN
20.00000	ZEIT	RECHENZEIT IN MS
100000	NZEIT	MAXIMALE ANZAHL ZEITSCHRITTE
10	NZD	DRUCK-,PLOT-AUSGABE: ZEITEN
10.00000	RAUM	RECHENGEBIET: LAENGE IN M
0.00000	STARTX	POSITION LINKE VORDERE ECKE
0.20	XSPR	SPRUNGSTELLE IN M
2.95	XSPR1	SPRUNGSTELLE 1 IN M
200	NRAUM	ANZAHL DER STUETZSTELLEN
GITTER2NO	CGIT2	GITTER2 (ODER NICHT)
5	G2ADV	G2 VOR FRONT
10	NX2	ZELLEN GIT2 JE ZELLE GIT1
15	QDT12	ZEITSCHRITTQUOTIENT GIT1/GIT2
1	QSYM22	ZEITSCHRQUOT. SYMMETRIE GIT2
1	QCHE22	ZEITSCHRQUOT. CHEMIE GIT2
1	QSYM11	ZEITSCHRQUOT. SYMMETRIE GIT1
1	QCHE11	ZEITSCHRQUOT. CHEMIE GIT1
0.80000	SIGMA	COURANTZAHL
HLL	CMETH	GODUNOV,HLL,VAN LEER ODER ROE
NULL	CHLL	NULL,EINS,MITTEL
-1	ISMUTH	GLAETTUNG
0	ITERM	0 ,1 PRIMITIV, 2 CHARACTER
0	ISTEIG	0 0, 1 S1, 2 SVL, 3 SM, 4 S2
1.30000	SK1	NUR NOETIG FUER ISTEIG=4
2.00000	SK2	NUR NOETIG FUER ISTEIG=4
1.30000	SK3	NUR NOETIG FUER ISTEIG=4
1	SYMETH	0 EUL-CAU,1 HEUN
1	IREA	0 EUL-CAU,1 HEUN
WALL	CRANDL	RANDBED.:WALL,INFLOW,OUTFLOW
OUTFLOW	CRANDR	RANDBED.:WALL,INFLOW,OUTFLOW
KUSYM	CSYM	CARTES, ZYLSYM ODER KUSYM
PLOTTER ON	CPLOT	DATENAUSGABE FUER PLOT
REACTIONS ON	CREACT	CHEMICAL REACTIONS ON - OFF
TEMPER	CGAMMA	TEMPER(ATURABHAENIGES GAMMA)
3.000	TCJO	STARTWERT FUER CJ-ITERATION
ETOTAL	CENERG	ETOTAL(E ENERGIEDICHTE)
DIMBEH	DIMBEH	DIM(ENSIONS)BEH(AFTETE EINGABE)
NEIN	CDETEX	BERECHNUNG EXAKTE LOESUNG
8.31451	RGAS	ALLGEMEINE GASKONSTANTE IN J/K*MOL
50.0	BREA1	FREQUENZ-FAKTOR
1	NREA1	TEMPERATUR-EXPONENT
20.0	EREA1	AKTIVIERUNGSENERGIE
252.0	QREA1	VERBRENNUNGSWAERME IN KJ/MOL1
1.750	TKRIT	KRITISCHE TEMPERATUR IN 1000K

2.000	MOL1	MOLGEWICHT, 1.KOMPONENTE IN G/MOL
0.00175	HMOL12	ENTHALPIE-BERECHNUNG
27.061	HMOL11	ENTHALPIE-BERECHNUNG IN J/K*MOL
315.22	HMOL10	ENTHALPIE-BERECHNUNG
32.000	MOL2	MOLGEWICHT, 2.KOMPONENTE IN G/MOL
0.00180	HMOL22	ENTHALPIE-BERECHNUNG
30.469	HMOL21	ENTHALPIE-BERECHNUNG IN J/K*MOL
-540.89	HMOL20	ENTHALPIE-BERECHNUNG
28.000	MOL3	MOLGEWICHT, 3.KOMPONENTE IN G/MOL
0.00159	HMOL32	ENTHALPIE-BERECHNUNG
29.22	HMOL31	ENTHALPIE-BERECHNUNG IN J/K*MOL
-288.23	HMOL30	ENTHALPIE-BERECHNUNG
18.000	MOL4	MOLGEWICHT, 4.KOMPONENTE IN G/MOL
0.00470	HMOL42	ENTHALPIE-BERECHNUNG
32.034	HMOL41	ENTHALPIE-BERECHNUNG IN J/K*MOL
-263.053	HMOL40	ENTHALPIE-BERECHNUNG
2	NUE1	REAKTIONS-GLEICHUNG
1	NUE2	REAKTIONS-GLEICHUNG
2	NUE4	REAKTIONS-GLEICHUNG
T,U,P	CEING	EINGABE RHO,U,P ODER T,U,P
VOLANT	CALPHA	MASSANT, VOLANT
3.14286	RHOW	DICHTE WEIT IN KG/M**3
0.0	UW	GESCHWINDIGKEIT WEIT IN KM/S
0.100	PW	DRUCK WEIT IN MPA
0.304	TW	TEMPERATUR WEIT IN 1000K
0.00	ALFA1W	ANTEIL 1 WEIT
19.8	ALFA2W	ANTEIL 2 WEIT
79.2	ALFA3W	ANTEIL 3 WEIT
0.94388	RHOR	DICHTE RECHTS IN KG/M**3
0.0	UR	GESCHWINDIGKEIT RECHTS IN KM/S
0.1	PR	DRUCK RECHTS IN MPA
0.304	TR	TEMPERATUR RECHTS IN 1000K
29.000	ALFA1R	ANTEIL 1 RECHTS
14.500	ALFA2R	ANTEIL 2 RECHTS
56.500	ALFA3R	ANTEIL 3 RECHTS
3.14286	RHOL	DICHTE LINKS IN KG/M**3
0.0	UL	GESCHWINDIGKEIT LINKS IN KM/S
1.6	PL	DRUCK LINKS IN MPA
3.0	TL	TEMPERATUR LINKS IN 1000K
0.00	ALFA1L	ANTEIL 1 LINKS
0.00	ALFA2L	ANTEIL 2 LINKS
56.50	ALFA3L	ANTEIL 3 LINKS
11	PNMESS	ANZAHL DER MESSPUNKTE
0.75	PM(1)	ORTSKOORDINATE MESSPUNKT 1
1.50	PM(2)	ORTSKOORDINATE MESSPUNKT 2
2.75	PM(3)	ORTSKOORDINATE MESSPUNKT 3
3.25	PM(4)	ORTSKOORDINATE MESSPUNKT 4
5.00	PM(5)	ORTSKOORDINATE MESSPUNKT 5
7.50	PM(6)	ORTSKOORDINATE MESSPUNKT 6
1.00	PM(7)	ORTSKOORDINATE MESSPUNKT 7
2.25	PM(8)	ORTSKOORDINATE MESSPUNKT 8
4.00	PM(9)	ORTSKOORDINATE MESSPUNKT 9
6.25	PM(10)	ORTSKOORDINATE MESSPUNKT 10
9.99	PM(11)	ORTSKOORDINATE MESSPUNKT 11









Jül-2854

Dezember 1993

ISSN 0944-2952