



ANSYS Germany GmbH
Staudenfeldweg 12, 83624 Otterfing

Abschlussbericht

Reaktorsicherheitsforschung-Vorhaben-Nr.: 150 1328

Vorhabentitel: Entwicklung von CFD-Software zur Simulation mehrdimensionaler Strömungen in Reaktor-kühlsystemen

Autoren: PD Dr.-Ing. habil. Thomas Frank
Dr. Conxita Lifante
Dr. Christine L. Waata
Dr. Jochen Schütze

Dienststelle des Autors: ANSYS Germany GmbH
Staudenfeldweg 12
D-83624 Otterfing
Germany

Berichtsdatum: 31. Oktober 2009

Berichtsnummer: ANSYS / TR-09-02



ANSYS Germany GmbH
Staudenfeldweg 12, 83624 Otterfing

Final Report

Reactor Safety Research Project No.: 150 1328

Project Title: Development of CFD Software for Simulation of
Multidimensional Flows in Reactor Cooling
Systems

Author: PD Dr.-Ing. habil. Thomas Frank
Dr. Conxita Lifante
Dr. Christine L. Waata
Dr. Jochen Schütze

Performing Organisation: ANSYS Germany GmbH
Staudenfeldweg 12
D-83624 Otterfing
Germany

Publication Date: 31. October 2009

Report-No.: ANSYS / TR-09-02

Berichtsblatt

1. ISBN oder ISSN	2. Berichtsart Schlussbericht		
3a. Titel des Berichts Entwicklung von CFD-Software zur Simulation mehrdimensionaler Strömungen in Reaktorkühlsystemen			
3b. Titel der Publikation			
4a. Autoren des Berichts (Name, Vorname) Frank, Thomas; Lifante, Conxita; Waata, Christine; Schütze, Jochen		5. Abschlussdatum des Vorhabens 30. September 2009	
		6. Veröffentlichungsdatum 31. Oktober 2009	
4b. Autoren der Publikation (Name, Vorname)		7. Form der Publikation Broschüre	
8. Durchführende Institution (Name, Adresse) ANSYS Germany GmbH Staudenfeldweg 12 83624 Otterfing		9. Ber.Nr. Durchführende Institution ANSYS / TR-09-02	
		10. Förderkennzeichen 150 1328	
		11a. Seitenzahl Bericht 161	
		11b. Seitenzahl Publikation	
13. Fördernde Institution (Name, Adresse) Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi) 53107 Bonn		12. Literaturangaben 53	
		14. Tabellen 25	
		15. Abbildungen 87	
16. Zusätzliche Angaben			
17. Vorgelegt bei (Titel, Ort, Datum)			
18. Zusammenfassung Im Rahmen des vorliegenden Projektes der Sicherheitsforschung des BMWi wurde an der Fortentwicklung eines allgemein anwendbaren CFD-Softwarepakets für die Strömungsberechnung in Reaktorkühlsystemen gearbeitet. Das Projekt wurde in Kooperation mit der GRS in Garching und dem Forschungszentrum Rossendorf (FZR) ausgeführt. Die CFD-Entwicklung basierte auf der kommerziellen CFD-Software ANSYS CFX. Der Schwerpunkt lag dabei im vorliegenden Projekt auf ausgeprägt dreidimensionalen Mehrphasenströmungen, auf der Modellierung von Wasser-Wasserdampf-Strömungen bei hohem Systemdruck und signifikantem Anteil der Dampfphase sowie auf polydispersen Wasser-Wasserdampf-Blasenströmungen mit starker Volumen Kondensation unter Weiterentwicklung des inhomogenen MUSIG-Modells bei Berücksichtigung des Einflusses von Wärme- und Stoffübergang zwischen den Phasen auf die Entwicklung von Blasengrößenverteilungen. Die im Rahmen des vorliegenden Forschungsvorhabens entwickelten Mehrphasenmodelle wurden einer eingehenden Verifikation sowie Validierung gegenüber den seitens des Forschungszentrums Dresden-Rossendorf von der TOPFLOW-Versuchseinrichtung bereitgestellten detaillierten experimentellen Daten unterzogen. Ein weiterer Schwerpunkt des vorliegenden Forschungsvorhabens bestand in der prototypischen Untersuchung zu Möglichkeiten einer Kopplung von ANSYS CFX mit dem eindimensionalen thermohydraulischen Störfallrechenprogramm ATHLET der GRS und mit dem Neutronenkinetikprogramm DYN3D des Forschungszentrums Dresden-Rossendorf. Für beide Code-Kopplungsstrategien wurden prototypische Implementierungen entwickelt und an ausgewählten Testfällen verifiziert und validiert. Die entwickelten Kopplungsprototypen wurden den jeweiligen Projektpartnern GRS und FZD zur eigenen Weiterentwicklung und Anwendung auf realitätsnahe Störfallszenarien übergeben.			
19. Schlagwörter CFD, Modellierung, Mehrphasenströmungen, Wärme- und Stoffübergang, Sieden, Verdampfung, Kondensation, MUSIG, Codekopplung, Systemcode, ATHLET, Neutronenkinetik, DYN3D, Kernreaktor, Primärkühlkreislauf, SWR, DWR			
20. Verlag ANSYS Germany GmbH, Otterfing		21. Preis	

BMWA-Vordr. 3831/10.02

Document Control Sheet

1. ISBN or ISSN	2. Type of Report Final Report
3a. Report Titel Development of CFD software for simulation of multidimensional flows in reactor cooling systems	
3b. Title of Publication	
4a. Autor(s) of the Report (Family Name, First Name) Frank, Thomas; Lifante, Conxita; Waata, Christine; Schütze, Jochen	5. End of Project 30. September 2009
	6. Publication Date October 2009
4b. Autor(s) of the Publication (Family Name, First Name)	7. Form of Publication Booklet
8. Performing Organization(s) (Name, Address) ANSYS Germany GmbH Staudenfeldweg 12 83624 Otterfing	9. Originator's Report Number ANSYS / TR-09-02
	10. Reference Number 150 1328
	11a. No. of Pages Report 161
	11b. No. of Pages Publication
13. Sponsoring Agency (Name, Address) Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi) 53107 Bonn	12. No. of References 53
	14. No. of Tables 25
	15. No. of Figures 87
16. Supplementary Notes	
17. Presented at (Titel, Place, Date)	
18. Abstract <p>The main goal of this project in the area of safety research of the BMWi was the further development of a generally applicable CFD software package for flow prediction in the primary cooling circuit of nuclear reactors. The project has been carried out in cooperation with the the GRS, Garching and Research Center Dresden-Rossendorf (FZD). CFD development was based on the commercial CFD package ANSYS CFX. The emphasis in the current project was on pronounced 3-dimensional multiphase flows, the modeling of water-steam flows under high system pressure and for significant amount of the steam phase as well as on polydisperse water-steam bubbly flows with strong recondensation by using and further developing the inhomogeneous MUSIG model for polydispersed flows, taking into account the influence of heat and mass transfer processes on the development of bubble size distributions. The newly developed and implemented multiphase flow models have been thoroughly verified and validated against the detailed experimental data, which had been formerly obtained at the TOPFLOW test facility of the Research Institute Dresden-Rossendorf (FZD).</p> <p>Further focus in the underlying research and development project was on development and verification of various prototypical code coupling technologies. Therefore ANSYS CFX was coupled with the onedimensional thermohydraulic system code ATHLET developed by GRS and with the 3-dimensional neutron kinetics code DYN3D developed by FZD. In both cases the investigations resulted in the successful implementation of a code coupling interface and prototype, which had been verified and validated on a number of selected test cases, representing typical application scenarios. The derived prototypes of intended CFD-1d and CFD-neutron kinetics code coupling have been transferred to project partners GRS and FZD respectively for their further own development, further in-depth validation and application of the coupled code solutions to more realistic accident scenarios.</p>	
19. Keywords CFD, modeling, multiphase flows, heat and mass transfer, boiling, evaporation, condensation, MUSIG, code coupling, system code, ATHLET, neutron kinetics, DYN3D, nuclear reactor, primary cooling circuit, PWR, BWR	
20. Publisher ANSYS Germany GmbH, Otterfing	21. Price

Inhalt

Abbildungsverzeichnis	8
1 Einleitung	13
2 Physikalische Modellierung	15
2.1 Eulerische Mehrphasenmodellierung für Gas-Flüssigkeits-Strömungen.....	15
2.1.1 Die geltenden Transportgleichungen.....	15
2.1.2 Kräfte in Blasenströmungen.....	16
2.1.3 Thermodynamische Fluidparameter und Zustandsgleichungen.....	24
2.1.4 Polydisperse Blasenströmungen – das MUSIG-Modell.....	25
2.1.4.1 Das homogene und das inhomogene MUSIG-Modell.....	26
2.1.4.2 Die Erweiterung des MUSIG-Modells für Mehrphasenströmungen mit Wärme- und Stoffübertragung.....	28
2.1.5 Das RPI-Wandsiedemodell in ANSYS CFX 12.0.....	30
2.1.5.1 Der „Heat Flux Partitioning Algorithm“ des RPI-Wandsiedemodells und dessen Untermodelle.....	31
3 Validierung der Mehrphasenmodelle und Vergleich mit experimentellen Daten	36
3.1 Die Anwendung von CFD Best Practice Guidelines.....	36
3.2 Mehrphasenströmungen mit ausgeprägt 3-dimensionalem Charakter.....	37
3.2.1 TOPFLOW: Das Hubblenden-Experiment 074.....	37
3.2.1.1 Beschreibung der Versuchseinrichtung.....	37
3.2.1.2 CFD-Simulationsergebnisse und Vergleich mit dem Experiment.....	43
3.3 Polydisperse Mehrphasenströmungen bei hohen Drücken und Volumenanteilen der gasförmigen Phase.....	44
3.3.1 Der Edwards-Test – Schockverdampfung bei momentaner Druckentlastung 44	
3.3.1.1 Strömungsgebiet, Gittergenerierung, CFD-Setup und Randbedingungen der CFD-Simulation.....	44
3.3.1.2 CFD-Simulationsergebnisse und Vergleich mit dem Experiment.....	47
3.3.2 Massenbasierte Diskretisierung des MUSIG-Modells und Änderungen im Systemdruck.....	48
3.3.3 Verifikation des MUSIG-Modells für starke Systemdruckänderungen.....	48
3.3.3.1 Beschreibung des Verifikationstest und CFD-Setup.....	49
3.3.3.2 Vergleich mit analytischer Lösung.....	50
3.3.4 Das Wandsiede-Experiment nach Bartolomej et al.....	51
3.3.4.1 Beschreibung der Versuchseinrichtung.....	52
3.3.4.2 Strömungsgebiet, Gittergenerierung und Randbedingungen der CFD- Simulation.....	53
3.3.4.3 Das Modell-Setup der CFD-Simulation.....	54
3.3.4.4 CFD-Simulationsergebnisse und Vergleich mit dem Experiment.....	54
3.3.4.5 Schlussfolgerungen aus den Testfalluntersuchungen.....	60
3.4 Polydisperse Mehrphasenströmungen mit Volumen Kondensation.....	60
3.4.1 Erste CFD-Setup-Untersuchungen an der MT-Loop-Geometrie.....	62
3.4.2 TOPFLOW: Das Kondensationsexperiment nach Lucas & Prasser.....	63

3.4.2.1	Strömungsgebiet, Gittergenerierung und Randbedingungen der CFD-Simulation	64
3.4.2.2	Das Modell-Setup der CFD-Simulation	67
3.4.2.3	CFD-Simulationsergebnisse und Vergleich mit dem Experiment	68
3.4.2.4	Schlussfolgerungen aus den Testfalluntersuchungen.....	79
4	Kopplung von Simulationstechniken	80
4.1	Kopplung von 3-dimensionalen CFD-Verfahren und 1-dimensionalen Systemcodes (ANSYS CFX \Leftrightarrow ATHLET)	80
4.1.1	Zielstellung	80
4.1.2	Spezifikation der Kopplungsschnittstelle – Softwareanforderungen	82
4.1.3	Kopplungs-Randbedingungen und Softwaretechnische Umsetzung der Code-Kopplung	83
4.1.3.1	Sequentielle Code-Kopplung	83
4.1.3.2	Kopplung an Randbedingungen	84
4.1.3.3	Typen von Kopplungsrandbedingungen und Austauschgrößen.....	84
4.1.4	Implementierung der Schnittstelle zur Code-Kopplung.....	86
4.1.4.1	Die Junction-Box-Routine in ANSYS CFX.....	86
4.1.4.2	Code-Kopplung mittels Shared Library Technologie	88
4.1.4.3	Programmablauf einer gekoppelten ANSYS CFX und ATHLET-Simulation	89
4.1.4.4	Ausgeführte Modifikationen am ATHLET-Code	90
4.1.4.5	Steuerung der Kopplung über CCL-Objekte und Definitionen in ANSYS CFX	90
4.1.4.6	Modifikationen von ANSYS CFX für die Kopplung mit ATHLET.....	91
4.1.5	Unterstützte Typen von Randbedingungen	92
4.1.5.1	Von ANSYS CFX unterstützte Einlassrandbedingungen	93
4.1.5.2	Von ANSYS CFX unterstützte Auslassrandbedingungen	94
4.1.5.3	Von ANSYS CFX unterstützte Opening-Randbedingungen	96
4.1.5.4	Von ATHLET unterstützte Typen von Randbedingungen.....	96
4.1.6	Kombinationen von Kopplungsrandbedingungen von ANSYS CFX und ATHLET.....	97
4.1.6.1	Kopplung an ANSYS CFX Einströmrändern	97
4.1.6.2	Kopplung an ANSYS CFX Ausströmrändern.....	99
4.1.6.3	Kopplung an ANSYS CFX Opening-Randbedingungen	99
4.1.7	Verifikation der ANSYS CFX \Leftrightarrow ATHLET Kopplung.....	101
4.1.7.1	Testfall 1: Horizontales Rohr mit Kopplung an einer Einlassrandbedingung von ANSYS CFX	102
4.1.7.2	Testfall 2: Beispiel einer gekoppelten Simulation eines offenen Systems	111
4.1.7.3	Testfall 3: Beispiel einer gekoppelten Simulation für ein geschlossenes System	114
4.1.7.4	Testfall 4: Beispiel einer gekoppelten Simulation mit Strömungsumkehr	122
4.1.8	Zusammenfassung des erreichten Entwicklungsstandes einer Kopplung von ANSYS CFX mit ATHLET	123
4.1.9	Zukünftig notwendige Weiterentwicklungen des Kopplungsverfahrens und hierdurch mögliche Anwendungsszenarien.....	125

4.2	Entwicklung einer prototypischen Schnittstelle zur Kopplung von 3-dimensionaler CFD-Verfahren und Neutronenkinetik (ANSYS CFX \leftrightarrow DYN3D)	128
4.2.1	Einleitung	128
4.2.2	Motivation	129
4.2.3	Charakterisierung der Aufgabenstellung	129
4.2.4	Spezifikation der Kopplungsschnittstelle	130
4.2.4.1	Vorgänge im Kühlmittel	130
4.2.4.2	Vorgänge im übrigen Reaktorkern	132
4.2.5	Algorithmen zum Datenaustausch von Volumendaten auf Gitternetzen/Nodalisierungen sehr unterschiedlicher räumlicher Auflösung	132
4.2.5.1	Zuordnung von Kontrollvolumina	133
4.2.5.2	Übertragung konservativer Größen	135
4.2.5.3	Optionen für die Datenübertragung	136
4.2.6	Implementierung der prototypischen Schnittstelle zur Code-Kopplung von ANSYS CFX \leftrightarrow DYN3D	137
4.2.6.1	DYN3D-Netz in CFX	137
4.2.6.2	Anschluß an CFX	138
4.2.6.3	Frei und flexibel einstellbare Lösung	139
4.2.6.4	Anschluß an DYN3D	139
4.2.6.5	Parallelverarbeitung	141
4.2.6.6	Kurzzusammenfassung	141
4.2.7	Stationäres und instationäres Kopplungsverfahren	142
4.2.7.1	Simulation eines stationären Zustandes	142
4.2.7.2	Simulation eines transienten Vorgangs	143
4.2.8	Verifikation der ANSYS CFX \leftrightarrow DYN3D Kopplung	144
4.2.8.1	Stationärer Zustand – „Hot Full Power“	145
4.2.8.2	Transienter Anfahrvorgang	147
4.2.9	Detailvergleich der Strömungslöser	148
4.2.10	Zusammenfassung	150
4.2.11	Ausblick	150
5	Bereitstellung der CFD-Module für die Projekt-Verbundpartner	152
6	Zusammenarbeit mit anderen Stellen	152
7	Zusammenfassung	153
8	Danksagung	155
9	Veröffentlichungen	156
10	Literaturnachweis / Referenzen	158

Das diesem Bericht zugrunde liegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie unter dem Förderkennzeichen 150 1328 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Autor.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1: IAPWS-IF97 Stoffdaten-Bereiche.....	25
Abb. 2 : Anordnung der TOPFLOW-Versuchsanlage am FZ Dresden-Rossendorf mit vertikal verschiebbarer, halbmond-förmiger Hubblende.....	37
Abb. 3: Vergleich der Gasgehaltsverteilung in den Messquerschnitten stromab der Hubblende für die Messquerschnitte bei $z=+10\text{mm}$ bis zu $z=+520\text{mm}$. Die CFD-Ergebnisse sind links dargestellt, während sich auf der rechten Seite die experimentellen Daten befinden. Die CFD-Daten enthalten zusätzlich die Vektoren der normalisierten Geschwindigkeit der Luftphase in den horizontalen Schnittebenen.....	38
Abb. 4: Definierte Querschnitte für einen detaillierteren CFD-Experiment-Vergleich für das Hubblenden-Experiment TOPFLOW-074.....	39
Abb. 5: Verteilung des Gasgehaltes und Vektoren der Horizontal-Komponenten der Geschwindigkeiten der Gasphase (x-y-Komponenten) exemplarisch für die Messquerschnitte bei a) $z=+20\text{mm}$, b) $z=+80\text{mm}$ und c) $z=+160\text{mm}$. Die linke Spalte der Bilder a)-c) zeigen die Simulationsergebnisse mit ANSYS CFX während die Abb. der rechten Seite d), e) und f) die Messergebnisse der Wire-Mesh-Sensoren an den gleichen Messquerschnitten zeigen (Man beachte die unterschiedliche farbliche Skalierung in den einzelnen Abb.).....	40
Abb. 6: Vergleich von normalisiertem Gasgehalt und Absolutbetrag der vertikalen Wassergeschwindigkeiten an den definierten Profilquerschnitten in der Symmetrieebene ($z=0\text{mm}$) und für verschiedene vertikale Messquerschnitte.....	41
Abb. 7: Vergleich von normalisiertem Gasgehalt und Absolutbetrag der vertikalen Wassergeschwindigkeiten an den definierten Profilquerschnitten bei $x=\pm 35\text{mm}$ und für verschiedene vertikale Messquerschnitte.....	42
Abb. 8: Versuchsanordnung des Edwards-Tests (Edwards, et al., 1970).....	44
Abb. 9: Berechneter Druckverlauf für die ersten 50ms des Edwards-Tests.....	46
Abb. 10: Berechneter Druckverlauf für die gesamte 600ms währende Transiente des Edwards-Tests bis hin zur fast vollständigen Verdampfung der Wasserphase.....	46
Abb. 11: Berechneter Verlauf der Dampfgehaltsentwicklung für die gesamte 600ms währende Transiente des Edwards-Tests an der Messstelle bei $x=1.469\text{m}$	47
Abb. 12: Blasendurchmesser-Verteilung. Links: Vor dem Systemdruckanstieg. Rechts: Danach.....	49
Abb. 13: 2D Kavität mit Luft und Wasser.....	49
Abb. 14: Links: Systemdruck; Rechts: Mittlerer Sauter-Durchmesser Blasenklassen aller drei Geschwindigkeitsgruppen über der Zeit.....	50
Abb. 15: Links: Wasservolumenanteil am Anfang der Simulation; Rechts: Wasservolumenanteil nach 5 Sekunden auf Grund der Kompression der Gasphase.....	51
Abb. 16: Schematische Darstellung der experimentellen Anlage.....	52
Abb. 17: Schematische Darstellung des Bartolomej-Testfalls.....	53

Abb. 18: Links: Grid 1; Mitte: Grid 2; Rechts: Grid 3. Oben: Wassertemperatur; Unten: Dampfgehalt.....	55
Abb. 19: Links: Durchschnittliche Temperatur auf verschiedenen Höhen mit verschiedener Wandkraftmodellierung. Links: Antal Modell. Rechts: Ohne Wandkraft.....	56
Abb. 20: Durchschnittlicher Dampfgehalt auf verschiedenen Höhen mit verschiedener Wandkraftmodellierung. Links: Antal Modell. Rechts: Ohne Wandkraft.....	56
Abb. 21: Spezifischer Dampfgehalt für verschiedene Wandkraftmodellierung.....	57
Abb. 22: Spezifischer Dampfgehalt für verschiedene Wärmestromdichten an der Wand.	58
Abb. 23: Dampfgehalt für verschiedene Gitternetze und Wandkraftmodellierungen.	60
Abb. 24: Links: Grid 1; Mitte: Grid 2; Rechts: Grid 3. Oben: Wassertemperatur-Verteilung; Unten: Dampfgehalt.....	59
Abb. 25: Verifikationsfall. Links: Transiente Entwicklung der Size Fraction über der Zeit; Rechts: Transienter Dampfolumanteil.	61
Abb. 26: Berechneter Dampfolumanteil aus einer stationären CFD-Simulation des konstruierten MT-Loop-Testfalls.....	63
Abb. 27: Links: Schematische Darstellung der TOPFLOW-Versuchseinrichtung. Rechts oben: Wire-Mesh Sensor (WMS). Rechts unten: Einspeisungskammer.	64
Abb. 28: Experimentelle Messwerte (FZD). Links: Radiale Verteilung des Dampfolumanteils auf verschiedenen Höhen von TOPFLOW. Rechts: Blasendurchmesserverteilung auf verschiedenen Höhen.....	65
Abb. 29: Vergrößerte Darstellung des Gitternetzgebietes in der Nähe der Dampfinspeisung.....	66
Abb. 30: Erweiterte MUSIG-Modell Simulation. Links: Verteilung des volumetrischen Dampfgehalts. Rechts: Querschnitts-gemittelter Dampfolumanteil auf verschiedenen Höhen stromab der Dampfinspeisung.	69
Abb. 31: Monodisperse/Standard-MUSIG/Erweiterte MUSIG Simulationen. Radiale Verteilung des Dampfolumanteils auf den Messebenen A, C, F, I, L, O.	70
Abb. 32: Monodisperse/Standard-MUSIG/Erweiterte MUSIG Simulationen. Radiale Blasendurchmesserverteilung auf Ebene A, C, F, I, L, O.....	71
Abb. 33: Radiale Dampfverteilung auf der Messebene C in Abhängigkeit von der Variation der diskutierten CFD-Parameter.	74
Abb. 34: Ergebnisse der drei untersuchten Variationen des ursprünglichen CFD-Setups für den TOPFLOW-Kondensationsversuch. Querschnitts-gemittelter Dampfolumanteil auf verschiedenen Höhen von TOPFLOW.	75
Abb. 35: Ergebnisse der drei untersuchten Variationen des ursprünglichen CFD-Setups für den TOPFLOW-Kondensationsversuch. Radiale Dampfolumanteilverteilung auf Ebene A, C, F, I, L, O.	77
Abb. 36: Blasengrößenverteilungen auf den TOPFLOW-Messebenen A, C, F, I, L, O.	78
Abb. 37: Sequentielle Code-Kopplung von ANSYS CFX und ATHLET.....	83

Abb. 38: Kopplung an Randbedingungen.....	84
Abb. 39: Kopplung an hydraulischen Randbedingungen	85
Abb. 40: Kopplung an thermischen Randbedingungen	85
Abb. 41: Kopplungsrandbedingungen für Mehrphasenströmungen.....	86
Abb. 42: Programmablaufschemata der bei der Kopplung ausgeführten Schritte für die gekoppelte Simulation von ANSYS CFX und ATHLET	87
Abb. 43: Struktur der Shared Library für die Code-Kopplung.....	88
Abb. 44: Programmablaufplan für die Arbeitsschritte bei der Beendigung der gekoppelten Simulation	90
Abb. 45: 3d-Modell eines $\frac{1}{4}$ Symmetriesegments eines horizontalen Rohres	101
Abb. 46: Rohrquerschnitt der Testfallgeometrie mit dem 3d-Gitternetz der CFD-Simulation	102
Abb. 47: Schematische Darstellung der drei ausgeführten und miteinander verglichenen Simulationsrechnungen.....	102
Abb. 48: Das ATHLET-Modell der Rohrströmungssimulation	104
Abb. 49: Stufenfunktion für den Druck am Einlassrand.....	105
Abb. 50: Maximum Residual Plot für die eigenständige ANSYS CFX Simulation	106
Abb. 51: Maximum Residual Plots für die gekoppelte Simulation	106
Abb. 52: Geschwindigkeits-Konturplot für die eigenständige ANSYS CFX Simulation	107
Abb. 53: Geschwindigkeits-Konturplot für die gekoppelte Simulation	107
Abb. 54: Konturplot für die Verteilung des absoluten Drucks für die eigenständige ANSYS CFX Simulation	108
Abb. 55: Konturplot für die Verteilung des absoluten Drucks für die gekoppelte Simulation	108
Abb. 56: Absoluter Druck über der Rohrlänge im Vergleich der eigenständigen und gekoppelten Simulationen.....	109
Abb. 57: Massenstrom am Einlassrand über der Zeit im Vergleich der eigenständigen und gekoppelten Simulationen.....	109
Abb. 58: Fluid-Temperatur-Profile über der Zeit für verschiedene Positionen und im Vergleich der eigenständigen und gekoppelten Simulationen.....	110
Abb. 59: Schematische Darstellung der gekoppelten Simulation eines offenen Systems.....	111
Abb. 60: Maximale Residuen von Masse und Impuls während der gekoppelten Simulation des offenen Systems.....	112
Abb. 61: Entwicklung des Massenstroms über der Zeit, aufgezeichnet an den verschiedenen Kopplungsschnittstellen der Simulation	112
Abb. 62: Schematische Darstellung der untersuchten gekoppelten Simulation eines geschlossenen Strömungskreislaufs.....	113

Abb. 63: Die ANSYS CFX Strömungsgeometrie.....	113
Abb. 64: Randbedingungen der ANSYS CFX Strömungsgeometrie.	114
Abb. 65: Maximale Residuen für Massenerhalt und Impulstransport der ANSYS CFX Simulation für die Vermischungskammer in der gekoppelten Simulation.....	116
Abb. 66: Massendefekt über der Zeit in der ANSYS CFX Simulation für den geschlossenen Strömungskreislauf.....	116
Abb. 67: In der ATHLET-Simulation vorgegebene prozentuale Pumpenleistung über der Zeit	117
Abb. 68: Massenstrom über der Zeit am Einlass- und Auslassrand der ANSYS CFX Geometrie.....	117
Abb. 69: Absoluter Druck an den Einlass- und Auslassrandbedingungen des ANSYS CFX Strömungsgebietes über der Zeit	118
Abb. 70: Zeitliche Änderung der Pumpenleistung im zweiten Simulationsversuch	119
Abb. 71: Resultierender Massenstrom aus Änderung der Pumpenleistung entsprechend Abb. 70.....	120
Abb. 72: Absoluter Druck über der Zeit an den Kopplungsrandbedingungen zwischen ATHLET und ANSYS CFX.....	120
Abb. 73: Masse in der ANSYS CFX Strömungsgeometrie über der Zeit	121
Abb. 74: Vorgeschriebene transiente Druckänderung an der ATHLET Einlassrandbedingung zur Herbeiführung von Strömungsumkehr	121
Abb. 75: Druckverlauf über der Zeit für die gekoppelte und eigenständigen Simulationen mit Strömungsumkehr.....	122
Abb. 73: Übersichtsdarstellung der Aufgabenteilung und Datenübermittlungen zwischen ANSYS CFX und DYN3D in der gekoppelten Simulation.....	133
Abb. 74: Veranschaulichung der Zuordnung von Netzknoten des ANSYS-CFX-Netzes (links) zu Kontrollvolumina des DYN3D-Netzes (rechts). Einzelheiten im Text.	134
Abb. 75: Die Auswirkungen der verschiedenen Wahlmöglichkeiten auf die Ergebnisse einer e indimensionalen Datenübertragung von einem groben Netz auf ein inhomogenes Netz. Einzelheiten im Text.	136
Abb. 76: Schematische Darstellung der Parallelisierung von ANSYS CFX und der Kopplung mit DYN3D.....	140
Abb. 77: Aktionssequenz für die ersten drei Zeitschritte einer transienten Simulation, wenn DYN3D ganz in den iterativen Lösungsablauf von ANSYS CFX eingekoppelt wäre.....	142
Abb. 78: Aktionssequenz für die ersten drei Zeitschritte einer transienten Simulation, wenn DYN3D nur jeweils einmal am Ende eines Zeitschrittes aufgerufen wird.....	143
Abb. 79: Ergebnisse der stationären Simulation des hypothetischen Minimalreaktors bei voller Leistung: a) Wärmefreisetzungsrate 0-158 MW/m ³ ; b) Kühlmitteltemperatur 285,98-307,19 °C; c) Kühlmitteldichte 711,34-753,75 kg/m ³	144

Abb. 80: Vertikale Kühlmitteltemperaturprofile in der Simulation des stationären Zustandes bei voller Reaktorleistung. Standard-DYN3D und gekoppelte Simulation.....	145
Abb. 81: Vertikale Kühlmitteltemperaturprofile in der Simulation des stationären Zustandes bei voller Reaktorleistung. Standard-DYN3D und gekoppelte Simulation, letztere mit einer um 0,1555 K reduzierten Kühlmittel-Einlaß-Temperatur.	146
Abb. 82: Zeitlicher Verlauf der integralen, momentanen Wärmeerzeugungsrates in den Brennstäben während des untersuchten Anfahrvorgangs. Reine DYN3D-Simulation.	147
Abb. 83: Zeitlicher Verlauf der integralen, momentanen Wärmeerzeugungsrates in den Brennstäben während des untersuchten Anfahrvorgangs. Reine DYN3D- sowie gekoppelte Simulationen, jeweils bei vier verschiedenen Zeitschrittweiten.....	148
Abb. 84: Vergleich der Strömungslöser nach einem Sprung der Einlasstemperatur auf einen um 5 K niedrigeren Wert. Ergebnisse nach Berechnung genau <i>eines</i> Zeitschrittes.	149

1 Einleitung

In der Reaktorsicherheit werden bisher vorrangig thermohydraulische Störfallrechenprogramme eingesetzt, die auf einer eindimensionalen Modellierung der Zweiphasenströmungen basieren. In bestimmten Fällen, bei denen räumliche Effekte eine entscheidende Rolle spielen, entsteht zunehmender Bedarf an dreidimensionalen Strömungsfeldberechnungen. Die derzeit verfügbaren CFD¹-Programmsysteme sind jedoch bisher nur eingeschränkt in der Lage, Mehrphasenströmungen mit variablem Mischungsverhältnis aus flüssiger und gasförmiger Phase bei wechselnder Strömungsmorphologie zu berechnen und müssen für die angestrebten Anwendungsfälle ertüchtigt werden.

Die Hauptzielsetzung des vorliegenden Projekts im Rahmen der Reaktorsicherheitsforschung des BMWi besteht in der Entwicklung eines allgemein anwendbaren CFD-Softwarepakets für die Strömungsberechnung in Reaktorkühlsystemen. Das Projekt wird in Kooperation mit der GRS in Garching und dem Forschungszentrum Dresden-Rossendorf (FZD) ausgeführt. Die CFD-Entwicklung basiert auf der kommerziellen CFD-Software ANSYS CFX². Der Schwerpunkt wurde dabei im zurückliegenden Projektzeitraum auf die Simulation von ausgeprägt dreidimensionalen Mehrphasenströmungen, auf die Berechnung von Wasser-Wasserdampf-Systemen und auf Mehrphasenströmungen mit starkem Wärme- und Stoffübergang gelegt. Die Software wird durch ANSYS Germany entwickelt. Die GRS und andere Partner aus dem CFD-Verbund Reaktorsicherheitsforschung wenden die neu entwickelten Softwaremodule an. Alle Projektpartner beteiligen sich an der Formulierung neuer geeigneter Modelle. Einen besonderen Stellenwert in dem vorliegenden Forschungsvorhaben nahm die Validierung der entwickelten und implementierten Mehrphasenmodelle gegenüber experimentellen Daten ein. Die benötigten experimentellen Ergebnisse mit guter räumlicher und zeitlicher Auflösung der Messergebnisse und mit für CFD-Validierung geeigneter Instrumentierung wurden im Wesentlichen durch das Forschungszentrum Dresden-Rossendorf bereitgestellt. Zusätzlich wurden Literaturdaten für spezifische Validierungsaufgaben herangezogen. An den für die Modell-Validierung notwendigen und mitunter aufwendigen numerischen Untersuchungen beteiligten sich neben ANSYS Germany auch die GRS und das FZ Dresden-Rossendorf. Eine der Hauptzielsetzungen war und ist es, ANSYS CFX dahingehend weiterzuentwickeln, dass verschiedene Strömungsregime für Zweiphasenströmungen in Strömungsgeometrien der Reaktorsicherheitsforschung mit ANSYS CFX berechnet werden können. Dies erfordert spezielle Modellformulierungen für den Phasenanteil, die Zwischenphasengrenzflächendichte, die Schließungsbedingungen für Masse-, Impuls- und Energieaustauschtermen an der Zwischenphasengrenzfläche sowie für die Topologie und polydisperse Größenverteilung der Gasphase im Rahmen von Populationsbilanzmodellen wie dem in enger Zusammenarbeit zwischen ANSYS Germany und dem Forschungszentrum Dresden-Rossendorf entwickelten inhomogenen MUSIG-Modell. Das finale Entwicklungsziel ist die Bereitstellung einer CFD-

¹ CFD - computational fluid dynamics

² ANSYS CFX ist ein CFD-Softwaresystem der ANSYS Inc. und Bestandteil der ANSYS Workbench Software-Umgebung.

Software, die in der Lage ist, die Strömung in Reaktorkühlsystemen unter normalen Betriebsbedingungen und in bestimmten Havarieszenarios zu berechnen.

Die von ANSYS Germany im Berichtszeitraum ausgeführten Arbeiten und die Arbeiten der Projektpartner im CFD-Verbund Reaktorsicherheit lassen sich wie folgt klassifizieren:

1. Mehrphasenströmungen mit ausgeprägt dreidimensionalem Charakter
2. Polydisperse Mehrphasenströmungen bei hohen Drücken und hohen Anteilen der dispersen Phase unter Berücksichtigung von Wärme- und Stoffübergang
3. Polydisperse Mehrphasenströmungen von Wasser und Wasserdampf mit starker Volumen Kondensation

Ein weiterer Schwerpunkt im Rahmen des vorliegenden Forschungsvorhabens bestand in der Kopplung von Simulationstechniken. Zum einen besteht ein zunehmendes Interesse in der Kopplung von dreidimensional aufgelösten CFD-Simulationen für eine ausgewählte Komponente des Reaktorkühlkreislaufes mit herkömmlichen Methoden der eindimensionalen Simulation unter Verwendung von thermohydraulischen Störfallrechenprogrammen wie z.B. ATHLET der GRS. In einer derartigen gekoppelten 1d-3d-Simulation kann lokal ein ausgeprägt dreidimensionales Strömungsverhalten detaillierter und im Kontext der Gesamtsimulation des Reaktorkühlkreislaufes untersucht werden. Die eindimensionale Thermohydrauliksimulation liefert hierbei genauere und transiente Randbedingungen für die CFD-Simulation, während mit der dreidimensionalen CFD-Simulation der Komponentenströmung ein qualitativ und quantitativ verbesserter Einblick in das strömungstechnische Verhalten der Systemkomponente gewonnen werden kann. Aus diesem Grund wurde im vorliegenden Forschungsvorhaben die Möglichkeit einer Kopplung von ANSYS CFX und ATHLET – zunächst beschränkt auf einphasige Strömungskonfigurationen und eine prototypische Implementierung – genauer untersucht. Die erzielten Ergebnisse sind in Kapitel 4.1 dargestellt.

Ein weiterer Anwendungsfall von Kopplung bestehender Simulationstechniken in der Reaktortechnik, der zunehmend an Interesse gewinnt, besteht in der Kopplung von Neutronenkinetik und CFD-Simulation der Kühlmittelströmung im Reaktorkern. Exemplarisch und in einer Prototyp-Implementation wurde ANSYS CFX mit dem Neutronenkinetik-Code DYN3D des Forschungszentrums Dresden-Rossendorf (FZD) gekoppelt und auf einen stationären und einen transienten Verifikationstestfall angewendet. Spätere Anwendungsszenarios einer derartigen Code-Kopplung beziehen sich z.B. auf transiente Borvermischungs-Störfälle in Reaktorgeometrien, die eine dreidimensionale Quervermischung zwischen Kühlmittel-Unterkälen im Reaktorkern zulassen. In diesem Fall kann es durch einen im Querschnitt unterschiedlichen Anstieg der Kritikalität des Reaktorkerns zu einsetzenden Siedeprozessen zu großräumigen dreidimensionalen Austausch- und Rezirkulationsprozessen kommen, die ihrerseits wiederum die Neutronenreaktion beeinflussen. Ähnliche Szenarios sind bei Ausfällen von Kühlmittelpumpen und einem asymmetrischen Anstieg der Reaktorkritikalität denkbar und bedürfen der Untersuchung, wofür jedoch eine eindimensionale Thermohydrauliksimulation in den bestehenden Thermohydraulikmodulen der Neutronenkinetikprogramme oder Kopplungen mit externen eindimensionalen Simulationsprogrammen der Reaktorthermohydraulik ungeeignet sind. Die erzielten Ergebnisse der Kopplung von ANSYS CFX mit dem Neutronenkinetik-Code DYN3D sind in Kapitel 4.2 dieses Abschlußberichtes dargestellt.

Es war und ist das Ziel des vorliegenden Projektes, mit ANSYS CFX ein effizientes CFD-Softwarepaket für die Strömungssimulation in Reaktorkühlsystemen bereitzustellen. ANSYS Germany hat während der gesamten Projektlaufzeit allen beteiligten Projektpartnern laufend Zwischenversionen von ANSYS CFX zur Validierung, Anwendung und fortlaufenden Weiterentwicklung der Mehrphasenmodelle und für den Einsatz von ANSYS CFX im Rahmen von Kosimulationen mit ATHLET und DYN3D zur Verfügung gestellt. ANSYS Germany unterstützt die Projektpartner des Weiteren in Ihren eigenen Aktivitäten zur Modellentwicklung und bei der Installation und Nutzung der Software. Weiterentwicklungen der physikalischen Modelle gehen fortlaufend in die Dokumentation und grafische Benutzeroberfläche der CFD-Software von ANSYS ein.

2 Physikalische Modellierung

2.1 Eulerische Mehrphasenmodellierung für Gas-Flüssigkeits-Strömungen

Die mathematische Beschreibung von Mehrphasenströmungen basiert in ANSYS CFX auf der Herleitung von Transport- und Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie im Rahmen des sogenannten Euler-Euler-Verfahrens. Im Rahmen der Eulerischen Beschreibung einer Mehrphasenströmung wird die Annahme getroffen, dass sich die verschiedenen Phasen oder Fluide einer Mehrphasenströmung als sich gegenseitig durchdringende Kontinua beschreiben lassen. Lokal ist jedes der beteiligten Fluide durch einen Volumenanteil, r_α repräsentiert, wobei die Summe der Volumenanteile über alle Fluide oder Phasen für jeden Ort im Raum und jeden Zeitpunkt jeweils 1 ergibt:

$$\sum_{\alpha} r_{\alpha} = 1 \quad (2.1)$$

Unter diesen Voraussetzungen führt die Eulerische Mehrphasenmodellierung zu Ensemble-gemittelten Transportgleichungen für Masse, Impuls und Energie für jede der beteiligten Phasen.

2.1.1 Die geltenden Transportgleichungen

Für jede Phase erhalten wir ein partielles Differentialgleichungssystem aus einer Kontinuitätsgleichung und einer Navier-Stokes-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_{\alpha} \rho_{\alpha}) + \nabla \cdot (r_{\alpha} \rho_{\alpha} \vec{U}_{\alpha}) = S_{MS_{\alpha}} + \sum_{\beta=1}^{N_p} \Gamma_{\alpha\beta} \quad (2.2)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \rho_\alpha \vec{U}_\alpha) + \nabla \cdot (r_\alpha (\rho_\alpha \vec{U}_\alpha \otimes \vec{U}_\alpha)) \\
& = -r_\alpha \nabla p_\alpha + \nabla \cdot \left(r_\alpha \mu_\alpha \cdot (\nabla \vec{U}_\alpha + (\nabla \vec{U}_\alpha)^T) \right) \\
& + \sum_{\beta=1}^{N_p} (\Gamma_{\alpha\beta}^+ \vec{U}_\beta - \Gamma_{\beta\alpha}^+ \vec{U}_\alpha) + S_{M\alpha} + M_\alpha
\end{aligned} \tag{2.3}$$

In den Gleichungen steht $\alpha = f$ für die kontinuierliche flüssige Phase und $\alpha = d$ für die disperse gasförmige Phase. Letztere wird häufig als bestehend aus dispersen Blasen mit einem konstanten Blasendurchmesser d_p betrachtet.

Der Term S_{MS_α} stellt die benutzerdefinierte spezifische Massenquellterme dar und $\Gamma_{\alpha\beta}$ ist die Massenstromrate aus der Phase β in die Phase α . Der Term $\Gamma_{\alpha\beta}^+ \vec{U}_\beta - \Gamma_{\beta\alpha}^+ \vec{U}_\alpha$ wird als sekundärer Fluss bezeichnet, und berücksichtigt die induzierte Impulsübertragung auf Grund der Stoffübertragung. Die Volumenkräfte und benutzerdefinierte Impulsquellterme sind durch $S_{M\alpha}$ in der Impulserhaltungsgleichung eingeführt. Der Term M_α repräsentiert die Summe der Zwischenphasenkräfte. Diese auf die disperse Phase wirkenden Kräfte bestehen im Einzelnen aus der Widerstandskraft $\vec{F}_{\alpha\beta}^D$, der Auftriebskraft $\vec{F}_{\alpha\beta}^L$, der Wandkraft $\vec{F}_{\alpha\beta}^{WL}$, der turbulenten Dispersionskraft $\vec{F}_{\alpha\beta}^{TD}$ und der Kraft der virtuellen Masse $\vec{F}_{\alpha\beta}^{VM}$.

Das resultierende gekoppelte Differentialgleichungssystem bedarf im Weiteren der Schließung hinsichtlich der Modellierung des turbulenten Anteils des Spannungstensors und hinsichtlich der Beschreibung der Zwischenphasenkräfte in den Impulserhaltungsgleichungen beider Phasen. Für die Beschreibung der Impulsaustauschterme sind hierzu in aller Regel weitergehende Annahmen hinsichtlich der Morphologie und Form der Zwischenphasengrenzfläche zwingend erforderlich, da andererseits diese Terme auf der rechten Seite der Impulserhaltungsgleichungen nicht quantitativ beschrieben werden können. Weitere Details hinsichtlich der Herleitung der Eulerischen Modellgleichungen für Mehrphasenströmungen finden sich in (ANSYS Inc., 2009) und (Drew, et al., 1998).

2.1.2 Kräfte in Blasenströmungen

Eine auf einer ausführlichen Literaturstudie basierende Zusammenstellung der in der Literatur bekannten Formulierungen und Korrelationen für die Zwischenphasenkräfte in dispersen Mehrphasenströmungen wurde mit (Frank, 2003) erarbeitet. Aus diesem Grund soll im Folgenden nur auf die gebräuchlichsten Formulierungen für die Zwischenphasenkräfte eingegangen werden. Die Zwischenphasenkräfte werden hierbei als auf die disperse Phase wirkende Kräfte notiert. Der korrespondierende Impulsaustauschterm in der für die fluide Phase geltenden Impulstransportgleichung unterscheidet sich lediglich durch das Vorzeichen.

Widerstandskraft

Allgemein kann für die auf disperse Partikel in einem kontinuierlichen Fluid wirkende Widerstandskraft von einer Proportionalität zur Relativgeschwindigkeit zwischen den Phasen ausgegangen werden.

$$\vec{F}_{fd}^D = C_{fd}^{(d)} (\vec{U}_f - \vec{U}_d) \tag{2.4}$$

Für den Proportionalitätsfaktor in dieser Beziehung für die Widerstandskraft kann geschrieben werden:

$$C_{fd}^{(d)} = \frac{1}{8} C_D A_{fd} \rho_f |\vec{U}_f - \vec{U}_d| \quad (2.5)$$

Hierbei steht C_D für den auf eine Blase wirkenden Widerstandsbeiwert und A_{fd} für die Zwischenphasengrenzflächendichte. Unter der Annahme, dass die disperse Phase aus kugelförmigen Einzelpartikeln, -tropfen oder -blasen besteht, ergibt sich:

$$A_{fd} = \frac{6r_d}{d_p} \quad (2.6)$$

$$C_{fd}^{(d)} = \frac{3}{4} \frac{C_D}{d_p} r_d \rho_f |\vec{U}_f - \vec{U}_d| \quad (2.7)$$

$$\vec{F}_{fd}^D = \frac{3}{4} \frac{C_D}{d_p} r_d \rho_f |\vec{U}_f - \vec{U}_d| (\vec{U}_f - \vec{U}_d) \quad (2.8)$$

Der Widerstandsbeiwert für Blasen ist in der Vergangenheit durch eine Vielzahl von Autoren für kugelförmige, ellipsenförmige und kugelkappenförmige Blasen experimentell untersucht worden. Die Parameterabhängigkeit für den Widerstandsbeiwert C_D kann hierbei in Abhängigkeit von den folgenden drei dimensionslosen Kennzahlen bestimmt werden:

$$Re_p = \frac{\rho_f v_{rel} d_p}{\mu_f} \quad (2.9)$$

$$Eo = \frac{g(\rho_f - \rho_d) d_p^2}{\sigma} \quad (2.10)$$

$$Mo = \frac{g \mu_f^4 (\rho_f - \rho_d)}{\rho_f \sigma^3} \quad (2.11)$$

In ANSYS CFX verfügbare und für Blasenströmungen häufig verwendete Korrelationen für den Widerstandsbeiwert unter Berücksichtigung der Blasenform sind z.B. die nach Ishii-Zuber (Ishii, et al., 1979) und Grace (Clift, et al., 1978) (siehe auch (ANSYS Inc., 2009)). Eine weitere Korrelation wurde in Rahmen dieses Projektes untersucht. Diese wurde jüngst auf der NURETH Konferenz 1999 von Tomiyama (Takamasa, et al., 1999) veröffentlicht. Die Korrelation ist der von Grace sehr ähnlich, enthält jedoch eine zusätzliche Korrektur für höhere Gasgehalte und eine Veränderung des Blasenwiderstandes auf Grund von Verunreinigungen der fluiden Phase:

$$C_D = \max \left[\min \left[\frac{A}{Re_p} (1 + 0,15 Re_p^{0,687}), \frac{3A}{Re_p} \right], \frac{8}{3} \frac{Eo}{Eo + 4} \right] r_f^{-0,5} \quad (2.12)$$

Der Modellparameter A steht hierbei für den Einfluss von Verunreinigungen der kontinuierlichen Phase auf den Widerstand einer Einzelblase durch Kontamination der Zwischenphasengrenzfläche, wobei von Tomiyama Werte von $A=16$ für ein reines Gas-Flüssigkeits-System (z.B. destilliertes Wasser mit Luftblasen) und $A=24$ für ein gering kontaminiertes Gas-Flüssigkeits-System (z.B. Luftblasen in Leitungswasser) angegeben werden. Die Korrelation berücksichtigt den Einfluss der Blasenform auf den Widerstandsbeiwert, indem zwischen den Termen für den Widerstandsbeiwert kugelförmiger Blasen (roter Term in Gl. (2.12)), ellipsenförmige Blasen (grüner Term) und kugelhappenförmiger Blasen (blauer Term) automatisch umgeschaltet wird.

Auftriebskraft

Die Gasgehaltsverteilung in Zweiphasenströmungen vom Typ Gas-Flüssigkeit ist nicht nur durch die Widerstandskraft bestimmt, sondern wird wesentlich von den im Folgenden diskutierten Kraftwirkungen auf Einzelblasen beeinflusst (im Englischen als „non-drag forces“ bezeichnet). In Scherströmungen mit einem ausgeprägten Fluidgeschwindigkeitsgradienten ist die Hauptkomponente dieser zusätzlichen Kraftwirkungen der senkrecht zur Hauptströmungsrichtung wirkenden Auftriebskraft zuzurechnen. Diese transversale Auftriebskraft auf Grund von Scheranströmung eines kugelförmigen dispersen Partikels kann wie folgt beschrieben werden:

$$\vec{F}_{fd}^L = C_L r_d \rho_f (\vec{U}_f - \vec{U}_d) \times \nabla \vec{U}_f \quad (2.13)$$

Für nichtdeformierbare und kugelförmige Feststoffpartikel ist der Auftriebsbeiwert C_L im Allgemeinen positiv und kann experimentell in Abhängigkeit von der Partikel-Reynoldszahl und einer dimensionslosen Scherrate bestimmt werden. Entsprechende Korrelationen wurden von Saffman (1965/68), McLaughlin (1991/93), Dandy & Dwyer (1990), Mei, Adrian & Klausner (1991/92/94) und Moraga et al. (1999) veröffentlicht (siehe (Frank, 2003) und (Frank, 2002)). Eine Verallgemeinerung der Korrelation von Saffman wurde in ANSYS CFX implementiert. Diese wurde mittels der Wirbel-Reynoldszahl formuliert

$$Re_\omega = \frac{\rho_f \omega_f d_p^2}{\mu_f} \quad \omega_f = |\nabla \times \vec{U}_f| \quad (2.14)$$

Der Auftriebsbeiwert ergibt sich dann wie folgt:

$$C_L = \frac{3}{2\pi\sqrt{Re_\omega C'_L}} \quad (2.15)$$

Hierzu ist

$$C'_L = \begin{cases} 6.46f(Re_p, Re_\omega), & Re_p < 40 \\ 6.64 \cdot 0.0524(\beta Re_p)^{0.5}, & 100 > Re_p > 40 \end{cases} \quad (2.16)$$

Die Parameter f und β wurden wie folgt berechnet

$$\beta = \frac{1}{2} \left(\frac{Re_\omega}{Re_p} \right) \quad (2.17)$$

$$f(Re_p, Re_\omega) = (1 - 0.3314\beta^{0.5})e^{-0.1Re_p} + 0.331\beta^2$$

Entsprechende Untersuchungen für den Auftrieb von Blasen sind von Legendre & Magnaudet (1998) und von Tomiyama (1998) bekannt. Für kugelförmige Blasen und Partikel ist der rein aerodynamische Auftrieb in einer Scheranströmung mit einer aus dem asymmetrischen turbulenten Nachlauf resultierenden Auftriebskomponente überlagert. Diese Superposition beider Auftriebskomponenten führt mit steigender Partikel-Reynoldszahl und Scherrate zu einem Vorzeichenwechsel für den experimentell zu bestimmenden Auftriebsbeiwert C_L und dieser wird negativ. Die in ANSYS CFX vorgenommene Implementierung des Legendre-Modells ergibt

$$C_L = \sqrt{(C_{L,low Re})^2 + (C_{L,high Re})^2} \quad (2.18)$$

Wobei die entsprechenden Koeffizienten sind:

$$C_{L,low Re} = \frac{6}{\pi} (Re_p Sr)^{-0.5} \frac{(2.55)}{1 + 0.2 \frac{Re_p}{2\beta}}, \quad (2.19)$$

$$C_{L,high Re} = \frac{1}{2} \frac{1 + 16Re_p^{-1}}{1 + 29 Re_p^{-1}}$$

Ein ähnlicher Effekt lässt sich für große Blasen, die in einer Scherströmung einer Blasendeformation ausgesetzt sind, beobachten, wo sich der aerodynamische Formauftrieb mit Auftriebseffekten aus dem asymmetrischen turbulenten Nachlauf überlagert. Eine diesen Vorzeichenwechsel berücksichtigende Korrelation für den Auftriebsbeiwert C_L als Funktion von Partikel-Reynoldszahl Re_p und Eötvös-Zahl Eo wurde von Tomiyama (Takamasa, et al., 1999) veröffentlicht. Von Prasser et al. konnte anhand von TOPFLOW-Experimenten experimentell nachgewiesen werden, dass der vom Tomiyama-Modell vorhergesagte Vorzeichenwechsel in der Auftriebskraft auch für Wasser-Dampf-Strömungen unter hohem Druck seine Gültigkeit behält. Der Vorzeichenwechsel der Auftriebskraft erfolgt hier auf Grund der thermodynamischen Eigenschaften des Wasser- Dampf-Gemisches (insbesondere der von Druck und Temperatur abhängigen Oberflächenspannung) bei Blasendurchmessern von 1-2mm Durchmesser. Die Korrelation nach Tomiyama wurde für die im Folgenden ausgeführten Simulationen leicht abgewandelt, da sich nur mit $C_L = -0.27$ für $Eo > 10$ eine stetige Abhängigkeit $C_L = C_L(Re_p, Eo_d)$ ergibt:

$$C_L = \begin{cases} \min[0.288 \tanh(0.121Re_p), f(Eo_d)] & Eo_d < 4 \\ f(Eo_d) & 4 \leq Eo_d \leq 10 \\ -0.27 & Eo_d > 10 \end{cases} \quad (2.20)$$

Hierbei ist:

$$f(Eo_d) = 0.00105Eo_d^3 - 0.0159Eo_d^2 - 0.0204Eo_d + 0.474 \quad (2.21)$$

und Eo_d ist eine Eötvös-Zahl, die mit dem Längenmass der längeren Achse einer deformierbaren Blase gebildet wird, deren Form als Rotations-Ellipsoid angenommen wird:

$$Eo_d = \frac{g(\rho_f - \rho_d)d_H^2}{\sigma}, \quad d_H = d_p(1 + 0.163Eo^{0.757})^{\frac{1}{3}} \quad (2.22)$$

Wandkraft

Antal (Antal, et al., 1991) führte eine zusätzliche Wandkraft ein, um die Abstoßungskraft auf eine Blase in der Nähe einer Wand zu berücksichtigen, die durch die Oberflächenspannung und die asymmetrische Anströmung der Blase in Wandnähe durch Wandgrenzschichten verursacht wird:

$$\vec{F}_{fd}^{WL} = -C_{WL}r_d\rho_f |\vec{U}_{rel} - (\vec{U}_{rel} \cdot \vec{n}_w)\vec{n}_w|^2 \vec{n}_w \quad (2.23)$$

mit

$$C_{WL} = \max \left\{ 0, \frac{C_{w1}}{d_p} + \frac{C_{w2}}{y_{pw}} \right\} \quad (2.24)$$

Die von Antal empfohlenen Modellparameter sind hierbei $C_{w1} = -0.01$ und $C_{w2} = 0.05$. Tomiyama (Takamasa, et al., 1999), (Tomiyama, 2002) modifizierte die von Antal vorgeschlagene Modellformulierung auf Grund von Experimenten an Luftblasen in Glycerin:

$$C_{WL} = C_{w3} \frac{d_p}{2} \left(\frac{1}{y_w^2} - \frac{1}{(D - y_w)^2} \right) \quad (2.25)$$

wobei hier der Koeffizient C_{w3} von der Eötvös-Zahl abhängig ist und somit eine Abhängigkeit der Amplitude der Wandkraft von der Oberflächenspannung in das Modell einführt. Um wiederum eine stetige Abhängigkeit dieses Modellparameters $C_{w3} = C_{w3}(Eo)$ zu erreichen, wurde die von Tomiyama ursprünglich in (Tomiyama, 1998) angegeben Beziehung für den Wandkraftkoeffizienten C_{w3} geringfügig modifiziert:

$$C_{w3} = \begin{cases} e^{-0.933Eo+0.179} & 1 \leq Eo \leq 5 \\ 0.00599Eo - 0.0187 & 5 < Eo \leq 33 \\ 0.179 & 33 < Eo \end{cases} \quad (2.26)$$

Bei näherer Untersuchung zeigt sich jedoch, dass beide Formulierungen nach Gl. (2.24) und Gl. (2.25) Nachteile für eine allgemeine Anwendbarkeit in einem CFD-Lösungsalgorithmus aufweisen. Die Formulierung nach Antal ist zwar von der eigentlichen Strömungsgeometrie unabhängig. Es kann jedoch gezeigt werden, dass die auf Grundlage der Gleichungen (2.23) und (2.24) berechnete Wandkraft von ihrer Amplitude her zu klein ist, um in Wandnähe die auf Grundlage der Gleichungen (2.13) und (2.20) berechnete starke Auftriebskraft in einer

Kräftebilanz auszugleichen oder sogar zu übertreffen. Die unter bestimmten Strömungsverhältnissen verletzte Kräftebilanz in Wandnähe führt in Folge zu überbestimmten wandnahen Maxima in der radialen Gasgehaltsverteilung für Gas-Flüssigkeits-Strömungen in vertikalen Rohrleitungen. Demgegenüber führt die Verwendung der Wandkraftformulierung nach Tomiyama entsprechend den Gleichungen (2.23), (2.25) und (2.26) zu deutlich verbesserten Simulationsergebnissen für die radialen Gasgehaltsverteilungen in vertikalen Rohrströmungen für einen weiteren Bereich von Strömungsparametern. Dies ist vor allem auf die höhere Amplitude der Wandkraft nach Tomiyama zurückzuführen, die sich in Wandnähe proportional zu $\sim 1/y_w^2$ verhält. Dadurch können die maximale Amplitude und die radiale Position des Maximums in der radialen Gasgehaltsverteilung in recht guter Übereinstimmung mit experimentellen Daten bestimmt werden. Die von Tomiyama vorgeschlagene Formulierung ist in ihrer Anwendung jedoch auf radialsymmetrische Geometrien beschränkt, da in Gl. (2.25) der Rohrdurchmesser D als expliziter Geometrie-Längenmaßstab eingeht. Um die Nachteile beider Formulierungen für die Wandkraft zu überwinden, wird eine verallgemeinerte Wandkraftformulierung vorgeschlagen (Frank, 2005). Diese ist zum einen frei von expliziten Geometrieparametern und erhält andererseits die von Tomiyama eingeführte Abhängigkeit der Wandkraft von der Blasenoberflächenspannung:

$$C_{WL} = C_{w3}(Eo) \cdot \max \left\{ 0, \frac{1}{C_{WD}} \cdot \frac{1 - \frac{y_w}{C_{WC}d_p}}{y_w \cdot \left(\frac{y_w}{C_{WC}d_p}\right)^{p-1}} \right\} \quad (2.27)$$

Diese veränderte Wandkraftformulierung hängt im Wesentlichen von einem Clipping-Parameter C_{WC} , einem Dämpfungsparameter C_{WD} und einer variablen potentiellen Abhängigkeit der Amplitude der Wandkraft vom Wandabstand in der Form $F^{WL} \sim 1/y_w^{p-1}$. Der von der Eötvös-Zahl abhängige Koeffizient $C_{w3}(Eo)$ wird aus Gl. (2.26) berechnet und erhält somit die Abhängigkeit von der Oberflächenspannung aus Tomiyamas Formulierung. Durch den Vergleich numerischer Berechnungen konnte ermittelt werden, dass für $C_{WC} = 10.0$, $C_{WD} = 6.8$ und $p = 1.7$ eine gute Übereinstimmung der CFD Ergebnisse mit experimentellen Daten resultiert (Frank, 2006). Das Verhalten der Wandkraft-Formulierung nach Tomiyama kann mit der neuen Formulierung nach Gl. (2.23) und (2.27) vollständig reproduziert werden und zudem wird die Einführung eines geometrieabhängigen Modellparameters vermieden, der für eine beliebige 3-dimensionale Strömungsgeometrie nur schwer allgemeingültig bestimmt werden kann.

Turbulente Dispersionskraft

Ursprünglich wurde für die turbulente Dispersionskraft die Formulierung nach Lopez de Bertodano et al. (Moraga, et al., 2003) vom Rensselaer Polytechnical Institute (RPI) verwendet:

$$\vec{F}_{fd}^{TD} = -C_{TD}\rho_f k_f \nabla r_d \quad (2.28)$$

wobei von verschiedenen Autoren je nach Anwendungsfall Werte für den Kraftbeiwert von $C_{TD} = 0.1, \dots, 0.5$ verwendet wurden. Verschiedene andere Modellformulierungen wurden in

Folge vorgeschlagen, insbesondere die von Carrica (Carrica, et al., 1999) und Gosman & Issa (Behzadi, et al., 2001)(Gosman, et al., 1992). Diese Modelle versuchen im Wesentlichen, die latent in dem Kraftbeiwert C_{TD} des RPI Modells noch vorhandene Parameterabhängigkeit von der Stokes-Zahl und anderen Strömungsparametern zu bestimmen und zu berücksichtigen. Unlängst wurde von Burns et al. (Burns, et al., 2004), (Frank, et al., 2004) eine mathematische Herleitung für die turbulente Dispersionskraft veröffentlicht, die auf einem auf die Navier-Stokes-Gleichungen angewandten zweiten Mittelungsprozess basiert, bei dem man die Mittelung des Widerstandsterms auf der rechten Seite der Eulerischen Impulserhaltungsgleichungen berücksichtigt. Dies trägt dem Fakt Rechnung, dass der Term der turbulenten Dispersionskraft auf die über die Zwischenphasenreibung vermittelte Wirkung von turbulenten Wirbeln auf die Blasen, Tropfen oder Partikel einer dispersen Mehrphasenströmung zurückzuführen ist. Die Details der als Favre-Mittelung bezeichneten Herleitung der turbulenten Dispersionskraft aus diesem Ansatz können in (Burns, et al., 2004) und (Frank, et al., 2004) nachgelesen werden. Vorausgesetzt, man formuliert die Widerstandskraft in der Form:

$$\vec{F}_{\alpha\beta}^D = D_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta} (\vec{U}_\alpha - \vec{U}_\beta) \quad (2.29)$$

so lautet die resultierende Formulierung für die turbulente Dispersionskraft:

$$\vec{F}_{\alpha\beta}^{TD} = D_{\alpha\beta} \bar{A}_{\alpha\beta} \frac{v_{i\alpha}}{\sigma_{r\alpha}} \left(\frac{\nabla \bar{r}_\beta}{\bar{r}_\beta} - \frac{\nabla \bar{r}_\alpha}{\bar{r}_\alpha} \right) \quad (2.30)$$

und wird im Weiteren als FAD-Modell bezeichnet. Hierbei steht $\sigma_{r\alpha}$ für eine turbulente Schmidt-Zahl, die zunächst mit $\sigma_{r\alpha} = 1$ angenommen wird. Vergleicht man die Formulierung nach Gl. (2.28) mit Gl. (2.30) für eine Zweiphasenströmung vom Typ Gas-Flüssigkeit mit $r_d + r_f = 1$, so lässt sich für das RPI-Modell und das FAD-Modell die folgende Äquivalenzbeziehung für den Kraftbeiwert C_{TD} der turbulenten Dispersionskraft in Gl. (2.28) ableiten:

$$C_{TD} = \frac{C_\mu}{\sigma_{r\alpha}} \frac{D_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta}}{\rho_\alpha} \frac{k_\alpha}{\varepsilon_{\alpha\beta}} \left(\frac{1}{\bar{r}_\beta} + \frac{1}{\bar{r}_\alpha} \right) = \frac{3}{4} C_D \frac{v_{if}}{\sigma_{rf}} \frac{|\vec{U}_f - \vec{U}_d|}{d_p k_f} \frac{1}{1 - r_d} \quad (2.31)$$

Auf Grund von numerischen Vergleichsrechnungen in (Frank, et al., 2004) konnte gezeigt werden, dass die Variation der tatsächlichen Werte des im RPI-Modell als konstant angenommenen Kraftbeiwertes C_{TD} groß sind im Vergleich zu den bis dahin gemeinhin angenommenen Werten. In dispersen Zweiphasenströmungen in vertikalen Rohrleitungen betrug diese Variation von C_{TD} über den Rohrquerschnitt mitunter mehr als eine Größenordnung und kann damit nicht vernachlässigt werden.

Kraft der virtuellen Masse

Die Kraft der virtuellen Masse kann folgendermaßen beschrieben werden:

$$\vec{F}_{fd}^{VM} = -\vec{F}_{df}^{VM} = r_d \rho_f C_{VM} \left\{ \frac{D\vec{U}_d}{Dt} - \frac{D\vec{U}_f}{Dt} \right\} \quad (2.32)$$

Diese ist proportional zu der relativen Beschleunigung zwischen beiden Phasen, und hat in aller Regel eine stabilisierende Wirkung in Mehrphasenströmungen. Numerische Probleme waren in ersten Implementierungen dieser Kraftwirkung noch vorhanden, weil die Kraft zunächst als ein einzelner Volumenkraftterm in die rechte Seite der Impulstransportgleichung eingeführt wurde. Deswegen wurde eine neue stabilere Implementierung in ANSYS CFX 12.0 eingeführt, die eine verbesserte Linearisierung dieses Kraftterms verwendet. Dieses neue Verfahren basiert auf der Massenerhaltungsgleichung. Diese kann wie folgt umgeschrieben werden

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho}_\alpha \vec{U}_\alpha) = \dot{M}_\alpha \quad (2.33)$$

Damit ergibt die totale Ableitung multipliziert mit der Dichte folgenden Ausdruck

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_\alpha \frac{D\vec{U}_\alpha}{Dt} &= \tilde{\rho}_\alpha \frac{\partial \vec{U}_\alpha}{\partial t} + \tilde{\rho}_\alpha (\vec{U}_\alpha \cdot \nabla \vec{U}_\alpha) \\ &= \frac{\partial \tilde{\rho}_\alpha \vec{U}_\alpha}{\partial t} - \vec{U}_\alpha \frac{\partial \tilde{\rho}_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho}_\alpha \vec{U}_\alpha \vec{U}_\alpha) - \vec{U}_\alpha \nabla \cdot (\tilde{\rho}_\alpha \vec{U}_\alpha) \\ &= \frac{\partial \tilde{\rho}_\alpha \vec{U}_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho}_\alpha \vec{U}_\alpha \vec{U}_\alpha) - \vec{U}_\alpha \dot{M}_\alpha \end{aligned} \quad (2.34)$$

Die zwei totalen Ableitungen in Gl. (2.32) können durch den erhaltenen Ausdruck aus Gl. (2.34) ausgedrückt werden. Der erste Term wäre dann:

$$\begin{aligned} r_d \rho_f C_{VM} \frac{D\vec{U}_d}{Dt} &= r_d \rho_f \frac{r_f}{r_f} C_{VM} \frac{D\vec{U}_d}{Dt} = \tilde{\rho}_f \frac{r_d}{r_f} C_{VM} \frac{D\vec{U}_d}{Dt} = \tilde{\rho}_f \frac{r_d}{r_f} \frac{\tilde{\rho}_d}{\tilde{\rho}_d} C_{VM} \frac{D\vec{U}_d}{Dt} \\ &= \frac{\tilde{\rho}_f}{r_f \rho_d} C_{VM} \tilde{\rho}_d \frac{D\vec{U}_d}{Dt} = C_{VM}^{fd} \tilde{\rho}_d \frac{D\vec{U}_d}{Dt} \end{aligned} \quad (2.35)$$

Die gleiche Strategie kann für den zweiten Teil angewendet werden und es ergibt sich:

$$r_d \rho_f C_{VM} \frac{D\vec{U}_f}{Dt} = r_d \frac{r_f}{r_f} \rho_f C_{VM} \frac{D\vec{U}_f}{Dt} = \frac{r_d}{r_f} C_{VM} \tilde{\rho}_f \frac{D\vec{U}_f}{Dt} = C_{VM}^{df} \tilde{\rho}_f \frac{D\vec{U}_f}{Dt}$$

Der Wert r_f in den Koeffizienten C_{VM}^{df}, C_{VM}^{fd} ist hierbei geringfügig modifiziert. Ein beschränkter Beiwert wurde angenommen. Wenn es eine hohe Menge von der gasförmigen Phase gibt, ist das Modell für die Kraft der virtuellen Masse auf eine Einzelblase nicht mehr physikalisch und der Betrag der Kraft sollte zu null gehen. Um das zu erreichen, wird der begrenzte Wert $r_f' = \max(r_f, r_{clip})$ in der Formulierung verwendet.

Die Neuigkeit an dieser Stelle ist, dass die Kraft der virtuellen Masse in drei verschiedene Anteile (transienter, roter; konvektiver, blauer; und Massenquellterm, grüner) zerlegt wird.

$$\begin{aligned}
\vec{F}_{fd}^{VM} &= r_d \rho_f C_{VM} \left\{ \frac{D\vec{U}_d}{Dt} - \frac{D\vec{U}_f}{Dt} \right\} = \\
&= C_{VM}^{fd} \left[\frac{\partial \tilde{\rho}_d \vec{U}_d}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho}_d \vec{U}_d \vec{U}_d) - \vec{U}_d \dot{M}_d \right] \\
&\quad - C_{VM}^{df} \left[\frac{\partial \tilde{\rho}_f \vec{U}_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho}_f \vec{U}_f \vec{U}_f) - \vec{U}_f \dot{M}_f \right]
\end{aligned}$$

Eine Linearisierung der Terme ist nun möglich und mittels einer Rhie & Chow Formulierung führt die Verwendung des Modells nun zu einem deutlich stabileren und robusteren numerischen Lösungsverhalten.

2.1.3 Thermodynamische Fluidparameter und Zustandsgleichungen

Die Erhaltungs- und Transportgleichungen brauchen Zustandsgleichungen für die Stoffdichte und Enthalpie um das Gleichungssystem zu schließen. In den allgemeinsten Fall sehen diese Gleichungen so aus

$$\rho = \rho(p, T) \quad (2.36)$$

$$dh = \left. \frac{\partial h}{\partial T} \right|_p dT + \left. \frac{\partial h}{\partial p} \right|_{Tp} dp \quad (2.37)$$

Verschiedene Annahmen können getroffen werden um diese Gleichungen zu vereinfachen: feste Dichte ($\rho = \rho_{spec}$, inkompressibler Fall), Annahme eines idealen Gases ($\rho = \frac{w P_{abs}}{R_0 T}$), usw.

Trotzdem ist die Verwendung von genauen Stoffdaten für einen breiten Temperatur und Druckbereich besonders für Wasser/Wasserdampf Strömungen von besonderer Bedeutung um CFD Simulationen in der Kernenergie-technik erfolgreich einsetzen zu können.

ANSYS CFX beinhaltet verschiedene Methoden, um die benötigten Stoffeigenschaften berechnen zu können. Eine davon ist die Verwendung von Redlich-Kwong-Gleichungen. Diese Methode basiert auf der Verwendung von kubischen Zustandsgleichungen. Der Anwender braucht nur die Stoffeigenschaften im kritischen Punkt zu kennen, die für viele verschiedene Stoffe zur Verfügung stehen. Die Redlich-Kwong Gleichung wurde erst 1949 veröffentlicht (Redlich, et al., 1949), und wurde in Folge von Aungier (Aungier, 1995) modifiziert. In diesem Fall sieht die Zustandsgleichung so aus

$$p = \frac{RT}{v - b - c} - \frac{a(T)}{v(v + b)} \quad (2.38)$$

Wobei v das spezifische Volumen ist,

$$a = a_0 \left(\frac{T}{T_c} \right)^{-n}, a_0 = \frac{0.4247 R^2 T_c^2}{p_c}, b = \frac{0.08664 R T_c}{p_c}, c = \frac{RT_c}{p_c + \left(\frac{a_0}{v_c(v_c + b)} \right)}$$

$$n = 0.4986 + 1.2735 \omega + 0.4754 \omega^2,$$

und ω als azentrischer Faktor bezeichnet wird.

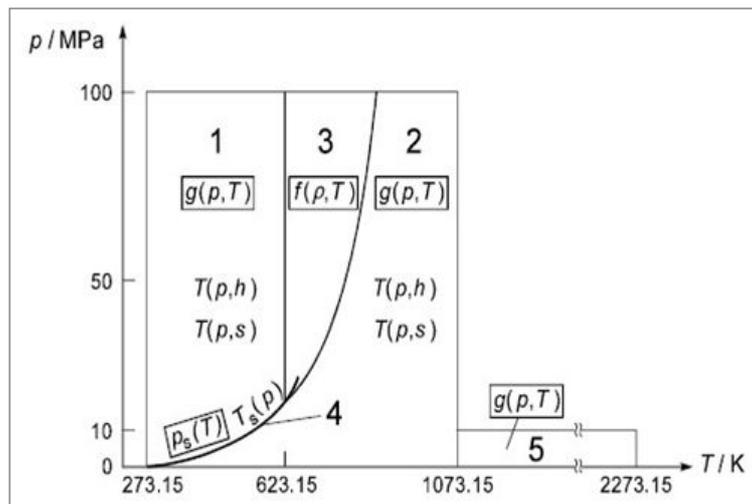


Abb. 1: IAPWS-IF97 Stoffdaten-Bereiche.

In den neueren Versionen von ANSYS CFX ab der Version 11.0 kann man zusätzlich die Wasser-/Wasserdampf-Stoffeigenschaften nach dem IAPWS-IF97-Industriestandard (Wagner, et al., 1998) verwenden. Hochgenaue Beschreibungen der Materialeigenschaften von Wasser und Wasserdampf stehen für fünf verschiedene Bereiche bzgl. Druck und Temperatur zur Verfügung: unterkühltes Wasser, superkritisches Wasser/Wasserdampf, überhitzter Wasserdampf und Sättigungsdaten (siehe Abb. 1). Die Daten sind bereichsübergreifend auf der Grundlage beim Start von ANSYS CFX entsprechend dem angegebenen Druck-Temperatur-Bereich generierter RGP-Tabellen verwendbar.

In ANSYS CFX sind die analytischen Zustandsgleichungen des IAPWS-Standards in RGP-Tabellen überführt, die in einer CFD Simulation mit höherer Effizienz und Rechengeschwindigkeit berechnet werden können. Der Anwender hat lediglich einen Druck- und Temperaturbereich vorzugeben, und der Löser berechnet dann während der CFD-Simulation die thermodynamischen Stoffeigenschaften auf der Grundlage der IAPWS-Stoffdaten. Die Genauigkeit der Stoffdatenberechnung kann mittels der Vorgabe der Anzahl der Datenpunkte in der RGP-Tabelle beeinflusst werden.

2.1.4 Polydisperse Blasenströmungen – das MUSIG-Modell

Für Anwendungen mit niedrigem Gasgehalt kann die Annahme einer monodispersen Blasenströmungen hinreichend sein. Das ist jedoch nicht der Fall, wenn das Gasgehalt sich erhöht. Für höhere Gasgehalte ist ein polydisperses Berechnungsverfahren nötig, das verschiedene Blasenrößen berücksichtigt. Die Populationsbilanz-Methode ist hierfür eine geeignete Wahl, wie z.B. das in ANSYS CFX implementierte MUSIG (**M**ultiple **S**ize **G**roup) Modell. Das MUSIG-Modell diskretisiert das Blasenrößenpektrum in einem Satz von Massenklassen, die abhängig von den am Anfang vorgegebenen Blasendurchmessern sind. Durch eine Referenzdichte wird die Masse für jeden Blasenklassen-Durchmesser berechnet. Diese mit den Blasenrößenklassen korrespondierenden Massen werden die ganze Simulation unverändert gelassen und definieren somit die Blasenklassen.

$$m_i = \rho_{ref} \frac{\pi}{6} (d_i^{t_0})^3, \quad d_i^{t_j} = \sqrt[3]{\frac{6 m_i}{\pi \rho^{t_j}}} \quad (2.39)$$

Die Anzahl von Blasen einer bestimmten Blasengröße wird durch die Lösung einer Transportgleichung für jeden Blasendurchmesser beschrieben, deren Quellterme die Stoffübertragung zwischen den einzelnen Blasenklassen charakterisieren. Diese Gleichungen werden aus den Populationsbilanzgleichungen hergeleitet und in Größenanteilsleichungen umgewandelt. Diese variablen massenbezogenen Größenklassenanteile werden Size Fractions genannt und wie folgt definiert

$$f_i = \frac{r_i}{r_\alpha} \quad (2.40)$$

An dieser Stelle können zwei Annahmen bezüglich des Blasengeschwindigkeitsfeldes getroffen werden: 1) dass sich alle Blasen mit der gleichen Geschwindigkeit bewegen (homogenes MUSIG-Modell); 2) dass sich jeweils Gruppen von Blasenklassen mit einer eigenen Geschwindigkeit bewegen können (inhomogenes MUSIG-Modell). Dieser Unterschied kann in manchen Anwendungen eine tiefgreifende Rolle für die Genauigkeit der Berechnungen spielen, in denen die Blasen z.B. lateralen Auftriebskräften mit unterschiedlichem Vorzeichen unterliegen. Es wurde bereits unter anderem festgestellt, dass die kleineren Blasen sich eher mit der kontinuierlichen Phase zusammen bewegen, während die größeren Blasen unter einem stärkeren Einfluss von Gravitation und Auftrieb stehen. Das Vorzeichen des lateralen Auftriebsbeiwerts (lift force coefficient) wechselt abhängig von Druck und Temperatur, und aus diesem Grund wechselt die Richtung der wirkenden Auftriebskraft entsprechend. Das sind nur einige Beispiele, um den Einfluss der angewendeten Lösungsmethode zu verdeutlichen.

Diese zwei Verfahren werden homogenes bzw. inhomogenes MUSIG-Modell genannt. In der inhomogenen Methode werden die Blasenklassen in verschiedene Geschwindigkeitsgruppen eingeteilt, und für jede Gruppe wird noch ein zusätzlicher Satz von Navier-Stokes Gleichungen gelöst, wodurch sich der Berechnungsaufwand erhöht. Die Anzahl der betrachteten Geschwindigkeitsgruppen wird jedoch in der Regel auf 2-3 beschränkt, um den gesamten Berechnungsaufwand des CFD-Verfahrens in einer heute auf modernen Cluster-Rechenanlagen beherrschbaren Größenordnung zu halten.

2.1.4.1 Das homogene und das inhomogene MUSIG-Modell

Der Ausgangspunkt für die Herleitung des MUSIG-Modelles sind die Populationsbilanzgleichungen. Diese können wie folgt geschrieben werden:

$$\frac{\partial}{\partial t} n(m, \vec{r}, t) + \frac{\partial}{\partial \vec{r}} (U(m, \vec{r}, t), n(m, \vec{r}, t)) = S \quad (2.41)$$

Wobei n die Blasenanzahldichte der Blasen mit Masse m zur Zeit t ist. Nun wird Gl. (2.41) in Größenklassen diskretisiert und für jede Blasenklasse wird die Anzahldichte wie folgt definiert:

$$N_i(t) = \int_{m_{i-1/2}}^{m_{i+1/2}} n(m, t) dm \quad (2.42)$$

Die gesamte Masse der i-ten Klasse von Blasen kann dann wie in Gl. (2.43) geschrieben werden

$$m_i N_i = \rho_i r_i \quad (2.43)$$

Hier repräsentiert ρ_i die Dichte der i-ten Blasenklasse und r_i den Volumenanteil der i-ten Blasenklasse. Die Integration der Gl. (2.41) gefolgt von einer Multiplikation mit m_i ergibt:

$$\frac{\partial(m_i N_i(t))}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (U_i^i(t) N_i(t)) = S_i \quad (2.44)$$

Oder auf dem Volumenanteil r_i basierend:

$$\frac{\partial(\rho_i r_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_i r_i U_i^i) = S_i \quad (2.45)$$

Der Volumenanteil einer Blasengrößenklasse (r_i) kann durch den Ausdruck in Gl. (2.40) für den homogenen Fall und durch die folgende Gleichung für den inhomogenen Fall umformuliert werden:

$$f_i^c = \frac{r_i}{r_\alpha} \quad (2.46)$$

r_d repräsentiert den gesamten Dampfphasen-Volumenanteil, und r_α den Volumenanteil der Gasphase einer Geschwindigkeitsgruppe. f_i^c wird konservative Size Fraction genannt. Mit der Einführung dieser neuen Variablen sehen die Gleichung für die konservative Size Fraction des MUSIG-Modelles wie folgt aus:

$$\frac{\partial(\rho_i r_\alpha f_i^c)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_i r_\alpha U_i^j f_i^c) = S_{i\alpha} \quad (2.47)$$

Abhängig von der Art des Verfahrens, d.h. homogenes oder inhomogenes MUSIG-Modell, ist das Geschwindigkeitsfeld für alle Klassen gleich ($U_i^j = U_d^j$) oder unterschiedlich. Im homogenen Fall sind die konservative und die nicht-konservative Size Fraction identisch.

In beide Fällen betreffen die Quellterme S_i die Stoffübertragung zwischen Blasengrößenklassen auf Grund der Blasenkoaleszenz und des Blasenzerfalls. Die Standard Formulierung in ANSYS CFX für Blasenkoaleszenz und -zerfall basieren auf dem Luo & Svendsen Modell (Luo, et al., 1996) bzw. dem Prince & Blanch Modell (Prince, 1990). Die Quellterme entsprechen dann der folgenden Formulierung:

$$\begin{aligned}
S_{\alpha_i} &= B_{i,B} - D_{i,B} + B_{i,c} - D_{i,c} \\
&= \rho_d r_d \sum_{j>i} B_{ij} f_i - \rho_d r_d f_i \sum_{j>i} B_{ij} \\
&+ (\rho_d r_d)^2 \frac{1}{2} \sum_{j \leq i} \sum_{k \leq i} C_{jk} f_j f_k \frac{m_j + m_k}{m_j m_k} X_{j \ k \rightarrow i} - (\rho_d r_d)^2 \sum_j C_{jk} f_i f_j \frac{1}{m_j}
\end{aligned} \tag{2.48}$$

Hierbei ist $B_{i,B}$ die Produktionsrate auf Grund des Zerfalls von größeren Blasen zu Blasen mit einem der Blasengrößensklasse i zuzuordnenden Blasendurchmesser, $D_{i,B}$ die Blasenzerfallsrate auf Grund von Blasenzerfall von Blasen aus der Blasengrößensklasse i zu kleineren Blasen, $B_{i,c}$ die Blasenentstehungsrate für die Blasengrößensklasse i auf Grund von Koaleszenzprozessen kleinerer Blasen die zur Entstehung von Blasen der Blasengrößensklasse i führen und $D_{i,c}$ ist die Destruktionsrate auf Grund von Blasenkoaleszenz von Blasen der Größenklasse i mit Blasen anderer Blasengrößensklassen zu Blasen einer höheren Blasengrößensklasse. B_{ij} stehen hier für die Blasenzerfallsraten von Blasen der Blasengrößensklasse i in Blasen anderer Größenklassen j . C_{jk} sind die Koaleszenzraten von Blasen aus den Größenklassen j und k wobei eine Blase der Größenklasse i resultiert. m_i ist die Masse der dispersen Phase, die der Blasengrößensklasse i zugeordnet ist und $X_{j \ k \rightarrow i}$ steht für den Massenanteil der bei Koaleszenz zweier Blasen der Größenklassen j und k der Größenklasse i zuzurechnen ist. Unter Rückgriff auf die Originalveröffentlichungen (Luo, et al., 1996) und (Prince, 1990) können alle diese Terme in Abhängigkeit von den Eigenschaften (Geschwindigkeiten, Blasendurchmesser, Blasengrößensanteile, usw.) der Geschwindigkeitsgruppen und Blasengrößensklassen der dispersen Phase sowie in Abhängigkeit von der Fluidturbulenz definiert und berechnet werden.

2.1.4.2 Die Erweiterung des MUSIG-Modells für Mehrphasenströmungen mit Wärme- und Stoffübertragung

Die Standardversion des MUSIG-Modells, sowohl homogenem als auch inhomogenem MUSIG-Modell, berücksichtigte bis zur Version ANSYS CFX 12.0 nur die Umverteilung von Massenanteilen an Blasengrößensklassen bezüglich Blasenkoaleszenz und -zerfall. Allerdings ist diese Formulierung nicht geeignet für Anwendungen mit Wasser/Wasserdampf Strömungen mit starkem Stoffübergang (Verdampfung und Kondensation). Aus diesem Grund war eine Erweiterung des MUSIG-Modelles nötig, um die Stoffübertragung auf Grund von Phasenübergang in Betracht zu ziehen. Das bedeutet, dass ein neuer Quellesterm in den Size Fraction Gleichungen eingefügt werden muss. Aber auch eine Modifikation in der Kontinuitätsgleichung der kontinuierlichen Phase ist notwendig. Die Erweiterung wurde so implementiert, dass die verdampfende Masse der kontinuierlichen Phase den Größenklassen der Blasen in der polydispersen Gasphase entsprechend des Anteils ihrer Zwischenphasengrenzfläche zugeführt wird. Die Quellterme berücksichtigen daher nicht nur eine relative Umverteilung der Blasengrößensanteile untereinander sondern berücksichtigen in globaler Weise die Änderung der Blasengrößensverteilung auf Grund von Verdampfungs- und Kondensationsprozessen zwischen der kontinuierlichen fluiden Phase und der Gasphase, wobei alle Blasengrößensklassen entsprechend ihrer spezifischen Zwischenphasengrenzfläche an diesen Prozessen beteiligt sind.

Um dieses Ziel zu erreichen, wird Gl. (2.41) wie folgt umgeschrieben:

$$\frac{\partial}{\partial t} n(m, \vec{r}, t) + \frac{\partial}{\partial \vec{r}} (U(m, \vec{r}, t), n(m, \vec{r}, t)) + \frac{\partial \mathbf{n}(m, \vec{r}, t)}{\partial m} \frac{\partial m(\vec{r}, t)}{\partial t} = S_i \quad (2.49)$$

Der neue rote Term beinhaltet die Veränderung der Blasenanzahl auf Grund der Stoffübertragung. Wenn man die gleiche Diskretisierung und Integrationsverfahren wie für Gl. (2.42) ausführt, wird dieser Term wie folgt aussehen

$$\int_{m_{i-1/2}}^{m_{i+1/2}} \frac{\partial n(n, \vec{r}, t)}{\partial m} \frac{\partial m(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[\frac{\partial m(\vec{r}, t)}{\partial t} n(n, \vec{r}, t) \right]_{m_{i-1/2}}^{m_{i+1/2}} = (\tilde{S}_{i+1/2} + \tilde{S}_{i-1/2}) \quad (2.50)$$

Die Terme \tilde{S} hängen von der Richtung der Stoffübertragung ab, also ob es sich um einen Fall mit Verdampfung oder Kondensation handelt. Für ein fixiertes Vorzeichen der Stoffübertragungsrate in einer Klasse sehen die Terme wie folgt aus:

- Verdampfung $\left(\frac{\partial m(\vec{r}, t)}{\partial t} \Big|_i > 0 \right)$

$$\tilde{S}_{i-1/2} = - \frac{\partial m(\vec{r}, t)}{\partial t} \Big|_{i-1} \frac{N_{i-1}(\vec{r}, t)}{m_i - m_{i-1}} \quad \tilde{S}_{i+1/2} = \frac{\partial m(\vec{r}, t)}{\partial t} \Big|_i \frac{N_i(\vec{r}, t)}{m_{i+1} - m_i} \quad (2.51)$$

- Kondensation $\left(\frac{\partial m(\vec{r}, t)}{\partial t} \Big|_i < 0 \right)$

$$\tilde{S}_{i-1/2} = - \frac{\partial m(\vec{r}, t)}{\partial t} \Big|_i \frac{N_i(\vec{r}, t)}{m_i - m_{i-1}} \quad \tilde{S}_{i+1/2} = \frac{\partial m(\vec{r}, t)}{\partial t} \Big|_{i+1} \frac{N_{i+1}(\vec{r}, t)}{m_{i+1} - m_i} \quad (2.52)$$

Wie in der Standardformulierung des MUSIG-Modelles wird die Populationsbilanzgleichung Gl. (2.44) mit m_i multipliziert, und die Beziehung $m_i N_i = \rho_i r_i$ eingeführt. Die Terme, die sich auf Koaleszenz und Zerfall beziehen, bleiben unverändert und der neue Quellterm, im Verdampfungsfall kann dann wie folgt geschrieben werden:

$$\begin{aligned} S_i &= -m_i \left(\tilde{S}_{i+1/2} + \tilde{S}_{i-1/2} \right) \\ &= -m_i \left(\frac{\partial m(\vec{r}, t)}{\partial t} \Big|_i \frac{\rho_i r_i / m_i}{m_{i+1} - m_i} + \frac{\partial m(\vec{r}, t)}{\partial t} \Big|_{i-1} \frac{\rho_{i-1} r_{i-1} / m_{i-1}}{m_{i+1} - m_i} \right) \\ &= - \frac{\partial m(\vec{r}, t)}{\partial t} \Big|_i \frac{\rho_i r_i}{m_{i+1} - m_i} + \frac{\partial m(\vec{r}, t)}{\partial t} \Big|_{i-1} \frac{\rho_{i-1} r_{i-1}}{m_{i+1} - m_i} \frac{m_i}{m_{i-1}} \end{aligned} \quad (2.53)$$

Dieser Term kann umformuliert werden, indem man die volumetrische (spezifische) Stoffübertragungsrate Γ_i benutzt.

$$\Gamma_i = \left. \frac{\partial m(\vec{r}, t)}{\partial t} \right|_i \frac{1}{V} = \left. \frac{\partial m(\vec{r}, t)}{\partial t} \right|_i \frac{r_i}{V_i} = \left. \frac{\partial m(\vec{r}, t)}{\partial t} \right|_i \frac{\alpha_i \rho_i}{m_i} \quad (2.54)$$

Dadurch vereinfacht sich Gl. (2.53) zu:

$$S_i = -\frac{m_i}{m_{i+1} - m_i} \Gamma_i + \frac{m_i}{m_i - m_{i-1}} \Gamma_{i-1} \quad (2.55)$$

Analog gilt für den Kondensationsfall:

$$S_i = -\frac{m_i}{m_{i+1} - m_i} \Gamma_{i+1} + \frac{m_i}{m_i - m_{i-1}} \Gamma_i \quad (2.56)$$

Ein Ziel von dieser Erweiterung war, dass diese Quellterme sowohl die Stoffübertragungsrate (Lucas, et al., 2009) zwischen den verschiedenen Klassen als auch die zwischen der kontinuierlichen Phase und der polydispersen Phase berücksichtigen. Das kann einfach überprüft werden. Die Netto-Stoffübertragungsrate zwischen der kontinuierlichen fluiden Phase und der dispersen Dampfphase ist die Summe von allen Quelltermen S_i über alle Klassen i . In einem Verdampfungsfall wäre das zum Beispiel

$$\sum_i S_i = \sum_i -\frac{m_i}{m_{i+1} - m_i} \Gamma_i + \frac{m_i}{m_i - m_{i-1}} \Gamma_{i-1} = \sum_i \Gamma_i = \Gamma \quad (2.57)$$

Somit ist der Massenerhalt über den gesamten Bereich aller Blasengrößenklassen gewährleistet.

2.1.5 Das RPI-Wandsiedemodell in ANSYS CFX 12.0

Unter Wandsieden versteht man einen wandbasierten Verdampfungsvorgang, der auftritt, wenn die Wandtemperatur höher wird als die lokale Sättigungstemperatur des Fluids. Wandsieden ist von Volumensiedevorgängen zu unterscheiden, die z.B. bei Druckentlastungsvorgängen auftreten können und lokales Sieden im Strömungsvolumen des Fluids auftritt, weil z.B. durch einen abnehmenden Systemdruck lokal die Sättigungstemperatur des Fluids überschritten wird. Wandsieden kann hingegen bereits einsetzen, wenn das Fluid im Großteil des Strömungsvolumens immer noch bezüglich der Sättigungstemperatur unterkühlt ist. Man spricht dann auch von unterkühltem Blasensieden bzw. subcooled wall boiling.

Wandsieden beginnt wenn die Wandtemperatur hoch genug ist, um die Keimstellen des Wandmaterials, die sogenannten Nucleation Sites, zu aktivieren. Diese Temperatur ist normalerweise etwas höher als die Sättigungstemperatur. Trotzdem ist die Temperatur des Fluids in der Nähe der Wand noch etwas niedriger als die Sättigungstemperatur. Die Verdampfung beginnt auf diesen Nucleation Sites (normalerweise kleine Spalte, Kerbstellen, Korrosionsstellen an der Wand). Das Fluid wird übersättigt und Dampfblasen fangen auf diesen Keimstellen an zu wachsen. Wenn diese Blasen groß genug sind, lösen sie sich von der Wand ab. Als nächstes werden sie vom umgebenden Fluid aufgenommen und

abtransportiert, und die Nucleation Sites sind bereit, neue Blasen zu erzeugen. In dem Wandbereich, wo keine Blasen vorhanden sind, wird die Wärmeübertragung in das Fluid anhand der einphasigen üblichen konvektiven Wärmeübertragung beschrieben. Die Physik des Wandsiedeprozesses an der beheizten Wand ist in der Regel zu kompliziert und läuft auf einem geometrischen Mikromassstab ab, der deutlich unter dem Längensmassstab der Strömungsgeometrie liegt, so dass es nicht möglich ist auf diesen Siedeprozess das phasengemittelte Eulerische Mehrphasenmodell als CFD-Simulation anzuwenden. Ebenfalls ungeeignet oder nicht praktikabel für ingenieurtechnische Anwendungen wäre die Verwendung von einem ultrafeinen Gitternetz, um die kleinen Längenskalen des Siedevorganges genau aufzulösen. Deswegen wird ein mechanistisches Modell gewählt, das versucht, die wesentlichen physikalischen Vorgänge beim Wandsieden zu beschreiben und in geeigneter Form für die CFD-Simulation makroskopisch zu modellieren. Dies ist ein sogenanntes „Subgrid-scale Model“, weil es voraussetzt, dass die Wandsiede-Phänomene nur in einem sehr kleinen Bereich in der Nähe von der Wand stattfinden und dieser Geometriemassstab der Schicht in der das Wandsieden stattfindet deutlich kleiner als die Gitternetzauflösung ist.

Das erste und bekannteste derartige Modell wurde von Kurul und Podowski (Kurul, et al., 1991) am Rensselaer Polytechnic Institute (RPI) entwickelt. Dieses wird daher auch RPI-Modell genannt, und beinhaltet eine Reihe von Submodellen anderer Autoren, die die verschiedenen Teilprozesse des Wandsiedens auf mechanistische bzw. makroskopische Weise beschreiben. Das originale Modell benutzt vielfach Korrelationen, die aus einem eindimensionalen thermohydraulischen Ansatz stammen. Manche von diesen Korrelationen führen im Kontext einer CFD-Simulation mit höherer wandnaher Gitternetzauflösung zu sehr stark gitternetzabhängigen Lösungen und bedürfen daher der Neubetrachtung. Aus diesem Grund wurden für die Implementierung des Modells in ANSYS CFX (ANSYS Inc., 2009) Modellerweiterungen vorgenommen, die dieses Problem der Gitternetzabhängigkeit weitgehend vermeiden sollen.

Die Hauptaufgabe des Wandsiedemodells besteht in der mechanistischen Aufteilung der Wärmestromdichte auf konvektive Aufheizung des Fluids, Quenching-Wärmestrom und Verdampfungs-Wärmestrom. Wie bereits erwähnt sind hierfür eine Reihe weiterer Schließungs-Submodelle erforderlich. Diese werden im Einzelnen in den folgenden Abschnitten beschrieben.

2.1.5.1 Der „Heat Flux Partitioning Algorithm“ des RPI-Wandsiedemodells und dessen Untermodelle

Die Besonderheit in dem Wandsiede-Modell ist die mechanistische Verteilung der Wärmestromdichte an der Wand. Dort, wo keine Nucleation Sites vorhanden sind, wäre es zweckmäßig die Wärmestromdichte ausschließlich als einphasige konvektive Wärmeübertragung (Q_c) zu modellieren. Dieses Verfahren ist jedoch nicht ausreichend in den Bereichen, wo sich aktive Nucleation Sites befinden. In diesem Fall wird ein Teil der wandseitig aufgeprägten Wärmestromdichte für die Verdampfung der kontinuierlichen fluiden Phase (Q_e) benötigt. Des Weiteren führt das Ablösen der gebildeten Dampfblasen durch die dadurch hervorgerufene lokale Konvektionsströmung zum Heranführen von unterkühltem Fluid an die überhitzte Wand und somit zu einem zusätzlichen Quenching-Wärmestrom (Q_q), der in der Wärmestrombilanz an der Wand zusätzlich zu berücksichtigen ist.

Die Wärmestromdichteverteilung an der Wand sieht somit wie folgt aus:

$$Q_w = Q_c + Q_e + Q_q \quad (2.58)$$

Das RPI Modell setzt voraus, dass der Dampf sich immer bei Sättigungstemperatur befindet und somit keine Wärmestromdichte benutzt wird, um ihn über Sättigungstemperatur weiter zu erhitzen.

Wie beschrieben, basiert das Modell auf der Teilung der Wand in zwei Bereiche.

$$1 = A_1 + A_2 \quad (2.59)$$

wobei A_2 der Bereich ist, wo die Blasen an den Keimstellen die Wärmestromdichte beeinflussen, und A_1 ist die Fläche der übrigen Wand.

Auf der A_1 Zone spielen die Dampfblasen für den Wärmeübergang somit keine Rolle, und die Wärmestromdichte kann wie in einem einphasigen Fall als reiner konvektiver Wärmeübergang modelliert werden. Das bedeutet, dass die konvektive Wärmestromdichte wie folgt formuliert werden kann:

$$Q_c = h_c(T_w - T_l) \quad (2.60)$$

Hierbei ist T_w die Wandtemperatur, T_l die Temperatur der Flüssigkeit und h_c der turbulente Wärmeübergangskoeffizient. Dieser ist von Geschwindigkeit und Gitterauflösung abhängig. In der ANSYS CFX Implementierung wird h_c durch eine Temperaturwandfunktion berechnet.

Der übrige Teil der Wand nimmt Bezug auf die Wandoberfläche, wo die Wärmeübertragung in den zwei Phasen stattfindet. Die Wärmestromdichte in Bezug auf die Verdampfung ist auf folgende Weise modelliert:

$$Q_e = \dot{m}(h_{g,sat} - h_l) \quad (2.61)$$

\dot{m} repräsentiert die volumetrische Verdampfungsrate, und $h_{g,sat}$ und h_l sind die spezifische Enthalpie für den gesättigten Dampf und das unterkühlte Fluid.

Der letzte zu modellierende Teil ist die Quenching-Wärmestromdichte. Zwischen der Ablösung einer Blase und der Bildung der Nächsten wird ein Teil der Wärmestromdichte in die Flüssigkeit transferiert. Durch die von der ablösenden Blase induzierte Konvektion ist dieser Wärmestrom höher als bei reiner turbulenter konvektiver Wärmeübertragung an einer glatten Wand. Die in ANSYS CFX angenommene Formulierung für die Modellierung dieses zusätzlichen Quenching-Wärmestromes ist die Folgende:

$$Q_q = A_2 h_q (T_w - T_l) \quad (2.62)$$

Aus den bereits aufgeführten Gleichungen kann man den Einfluss der Flächenaufteilung der Wand in die Flächenanteile A_1 und A_2 abschätzen. Die Größen von A_1 und A_2 sind von der Nucleation Site Dichte (n) und von dem Einflussgebiet einer einzelnen Dampfblase abhängig. Dieser Wert wird mittels des Blasenablösedurchmessers (d_w) berechnet. Das RPI-Modell nimmt hierfür an, dass das Einflussgebiet einer einzelnen sich an der Wand bildenden Dampfblase ein Kreis ist, dessen Durchmesser zweimal d_w groß ist. Dadurch kann man den von der Verdampfung beeinflussten Flächenanteil wie folgt schreiben

$$A_2 = \min(\pi d_w^2 \cdot n, 1) \quad (2.63)$$

Die schon genannten Parameter A_1 , A_2 , n und d_w werden gebraucht, um das Modell zu vervollständigen und im mathematischen Sinne zu schließen. Allerdings sind ein noch weitere Parameter dazu erforderlich. Diese sind im Einzelnen die Blasenablösefrequenz (f), die Wartezeit zwischen zwei Blasenzyklen (t_w), der konvektive Wärmegangsbeiwert (h_c), der Quenching-Beiwert (h_q), und die Verdampfungsrate (\dot{m}).

RPI Untermodelle:

- **Keimstellendichte (Nucleation Site Density)**

Das vom RPI-Modell hierfür verwendete Submodell wurde von Lemmert und Chawla vorgeschlagen (Lemmert, et al., 1977)

$$n[m^{-2}] = \left(m(\Delta T_{sup}[K]) \right)^p \quad m = 210, \quad p = 1.805 \quad (2.64)$$

ΔT_{sup} darf hier nicht negativ sein. Dies würde nämlich bedeuten, dass die Wandtemperatur niedriger als die Sättigungstemperatur wäre, und deswegen gäbe es in diesem Fall kein Wandsieden. Die in ANSYS CFX implementierte Version des Modelles wurde von Menter und Egorov (Egorov, et al., 2004) daher umformuliert. Die geänderte Modellformulierung lautet:

$$n = n_{ref} \left(\frac{\Delta T_{sup}}{\Delta T_{ref}} \right)^2 \quad n_{ref} = 0.8 \times 9.9922 \cdot 10^5 [m^{-2}], \quad \Delta T_{ref} = 10[K] \quad (2.65)$$

Diese Normierung der Unterkühlungstemperatur führt zur Vermeidung von gebrochenen Potenzen dimensionsbehafteter Größen. Kocamustafaogullari und Ishii (Kocamustafaogullari, et al., 1983) entwickelten auch hiervon noch abweichende Korrelationen.

- **Blasenablösedurchmesser**

Das RPI-Modell benötigt den Blasenablösedurchmesser für die Berechnung der verschiedenen Wandoberflächenanteile, aber auch für die Berechnung der Verdampfungsrate. Das angenommene Modell wurde von Tolubinski und Kostanchuk (Tolubinski, et al., 1970) zum ersten Mal beschrieben.

$$d_w = \left(d_{ref} \cdot e^{\frac{\Delta T_{sub}}{\Delta T_{ref}}}, d_{max} \right) \quad (2.66)$$

Diese Korrelation wurde für Druckwasser-Reaktor-Bedingungen entwickelt. Deswegen sollte sie für andere Druckverhältnisse (z.B. BWR) angepasst werden. In dieser Korrelation sind negative Werte der Unterkühlungstemperatur zulässig. Gl. (2.66) ist stark abhängig von der lokalen Temperaturverteilung in Wandnähe aus der CFD-Simulation. Das ursprünglich vom RPI entwickelte Verfahren benutzt für die Berechnung der Unterkühlungstemperatur an der Wand die Werte der Fluidtemperatur im Zentrum des Rohres T_f . In einer CFD-Simulation ist ein lokaler wandnaher Zugriff auf diesen Wert im Innern der Strömung algorithmisch nicht möglich und die Verwendung einer lokalen wandnahen Fluidtemperatur würde zu sehr stark gitternetzabhängigen Lösungen führen. Egorov und Menter (Egorov, et al., 2004) verwenden stattdessen eine logarithmische Temperatur-Wandfunktion zur

Berechnung der Fluidtemperatur an einer Position bei konstantem dimensionslosem Wandabstand y^+ .

- **Blasenablösefrequenz**

Das RPI Modell benötigt des Weiteren die Blasenablösefrequenz sowohl für die Berechnung der Wandoberflächenanteile als auch für die Berechnung der Verdampfungsrates. Kurul und Podowski verwendeten an dieser Stelle die Korrelation von Cole (Cole, 1960):

$$f = \sqrt{\frac{4g(\rho_l - \rho_g)}{3C_D d_w \rho_l}} \quad (2.67)$$

Diese Korrelation stammt eigentlich aus Untersuchungen zu Pool-Siedevorgängen und beinhaltet daher die Gravitationsbeschleunigung. Der Ansatz geht von der Division einer geschätzten Blasesgeschwindigkeit durch den Blasendurchmesser aus.

- **Wartezeit zwischen zwei Blasenzyklen**

Die Blasenwartezeit kommt als Unbekannte in der Berechnung des Quenching – Wärmeübertragungsbeiwertes vor. Kurul und Podowski (Kurul, et al., 1991) stellten fest, dass die Zeit zwischen zwei aufeinander folgenden Blasenablösungen in etwa 80% der Ablösungsperiode entspricht. Das wäre:

$$t_w = \frac{0.8}{f} \quad (2.68)$$

- **Blaseneinflussgebiet-Faktoren**

Wie schon beschrieben, setzt das Modell voraus, dass ein Wandelement in zwei Flächenanteile aufgeteilt wird: A_1 ($= \pi d_w^2 \cdot n$) der Flächenanteil, auf dem nur einphasige konvektive Wärmeübertragung stattfindet; und A_2 ($= 1 - A_1$), der Flächenanteil, wo die entstehenden Dampfblasen die Wärmeübertragung beeinflussen. Die entsprechenden Ausdrücke sind in ANSYS CFX wie folgt implementiert:

$$A_1 = \max(10^{-4}, 1 - A_2), A_2 = \min\left(\frac{\pi F_2^2 d_w^2}{4} \cdot n, 1\right) \quad (2.69)$$

- **Konvektive Wärmeübertragung**

Wie bereits erwähnt wird für die Berechnung der Temperatur der Flüssigkeit in Gl. (2.60) eine turbulente Temperatur-Wandfunktion verwendet. Die Berechnung der Fluidtemperatur entsprechend dieser Wandfunktion erfolgt bei einem konstanten dimensionslosen Wandabstand Y^+ .

- **Wärmeübertragung durch Quenching**

Dieser Teil der Wärmestromdichte wird durch Gl. (2.62) berechnet. Die Temperatur T_l wird wie für den konvektiven Term kalkuliert. Zusätzlich ist noch eine Berechnungsvorschrift für den Wärmeübertragungsbeiwert bereitzustellen. Diese ist

von der Wartezeit zwischen der Ablösung einer Blase und der Bildung einer neuen Dampfblase abhängig.

$$h_q = 2\lambda_l f \sqrt{\frac{t_w}{\pi a_l}} \quad (2.70)$$

Hierbei ist $a_l = \lambda_l / (C_{pl} \rho_l)$ die Wärmeleitfähigkeit der Flüssigkeit (Mikic, et al., 1969).

- **Verdampfungsrate**

Wenn die Blasenablösefrequenz, der Blasenablösedurchmesser und die Nucleation Site Dichte bekannt sind, kann man die Verdampfungsrate wie folgt berechnen:

$$\dot{m} = \frac{\pi d_w^3}{6} \rho_g f n \quad (2.71)$$

Diese Formulierung stammt ursprünglich originale von Kurul und Podowski. Auch diese Korrelation wurde von Menter und Egorov (Egorov, et al., 2004) umformuliert, und wird nun in der folgenden Form verwendet:

$$\dot{m} = \min\left(\frac{\pi F_2^2 d_w^2}{4}, 5\right) \frac{1}{6} d_w \rho_g f \quad (2.72)$$

3 Validierung der Mehrphasenmodelle und Vergleich mit experimentellen Daten

3.1 Die Anwendung von CFD Best Practice Guidelines

Die in den vorangegangenen Abschnitten dargelegten Mehrphasenmodelle wurden im Berichtszeitraum einer eingehenden Validierung anhand von ausgewählten zwei- und dreidimensionalen Testfällen unterzogen. Die Grundlage aller folgenden Validierungsuntersuchungen stellen die Untersuchung der an den Versuchsanlagen MT-Loop und TOPFLOW gewonnenen experimentellen Daten dar. Auf der Basis der von Menter(Menter, 2002) **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.Error! Reference source not found.**im EU-Projekt ECORA formulierten Best Practice Guidelines³ dienen diese Testfälle insbesondere der eingehenden Untersuchung der sogenannten Fehlerhierarchie, d.h. der Differenzierung von numerischen Fehlern und dem Modellfehler. Die numerischen Fehler bestehen im Wesentlichen aus:

- Fehler des iterativen Lösungsverfahrens – Unterschied zwischen der vollständig auskonvergierten Lösung und der Lösung nach N Iterationen des Lösungsverfahrens; Einfluss des Abbruch-/Konvergenzkriteriums
- räumlichem Diskretisierungsfehler – Gitterunabhängigkeit der Lösung bei Untersuchung auf hierarchisch verfeinerten Gitternetzen
- bei transienten Strömungen auch dem zeitlichen Diskretisierungsfehler – Zeitschrittstudien zu dessen Quantifizierung
- Rundungsfehlern – einfache vs. doppelte Zahlgenauigkeit
- Fehlern der numerischen Lösung – Unterschied zwischen der mathematisch exakten Lösung der Modellgleichungen und der Lösung, die das eingesetzte Lösungsverfahren bei vollständig auskonvergierter Lösung auf einem beliebig verfeinerten Gitternetz liefert; dieser Fehler kann durch sogenannte Richardson-Extrapolation (Vergleich von Lösungsverfahren 1. und 2. Ordnung auf hierarchischen Gitternetzen) abgeschätzt werden.

Eine weitere Einflußgröße sind Benutzerfehler und Fehler in der Software, d.h. in der Implementierung des mathematisch-physikalischen Modells sowie des numerischen Lösungsalgorithmus. Gelingt die Isolierung und Quantifizierung dieser Fehlerquellen mittels der in den Best Practice Guidelines für CFD-Simulationen niedergelegten Untersuchungsstrategien für CFD-Berechnungen, so ist schließlich eine Quantifizierung des Modellfehlers möglich, d.h. der verbleibenden Abweichung einer möglichst exakten CFD-Lösung für ein bestimmtes aufgestelltes mathematisch-physikalisches Modell von den zu beschreibenden realen Strömungsvorgängen, hier repräsentiert durch Experimente mit höchstmöglicher Meßgenauigkeit und bestmöglicher Instrumentierung.

³ BPG – Best Practice Guidelines

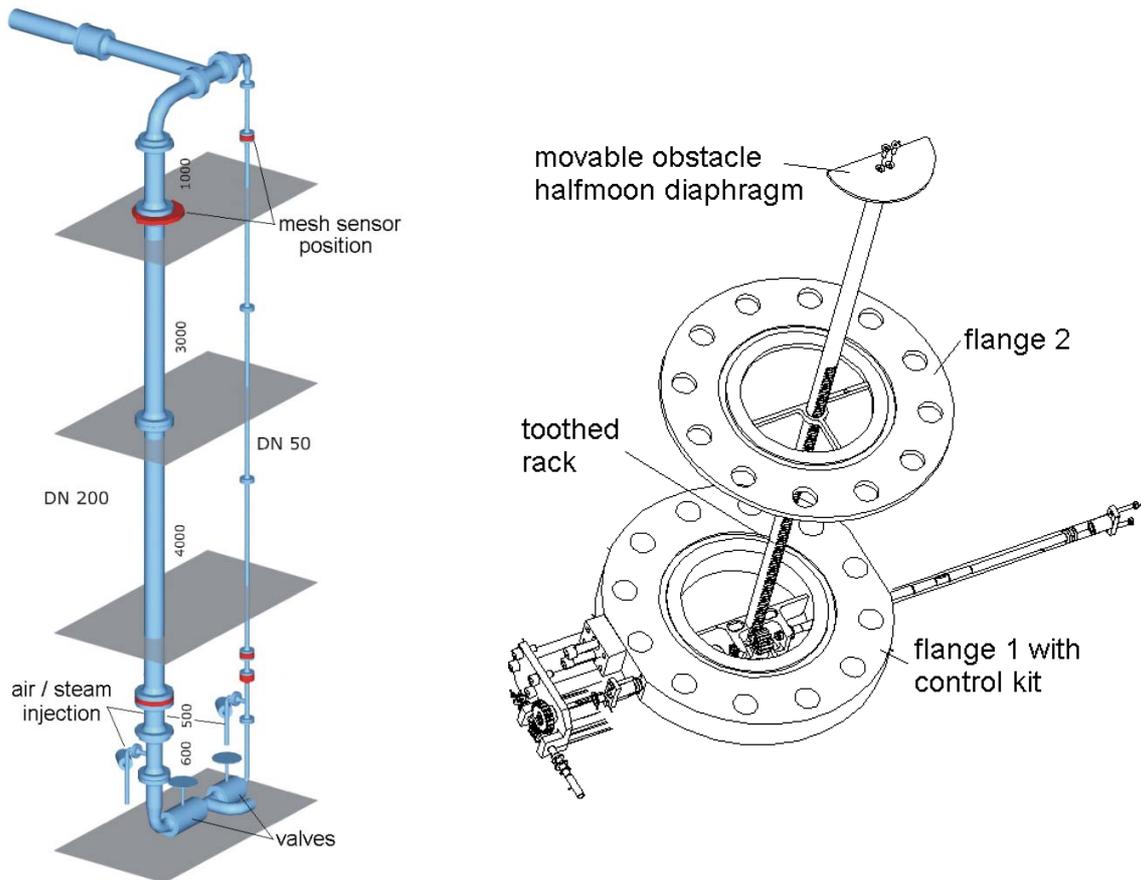


Abb. 2 : Anordnung der TOPFLOW-Versuchsanlage am FZ Dresden-Rossendorf mit vertikal verschiebbarer, halbmond-förmiger Hubblende.

3.2 Mehrphasenströmungen mit ausgeprägt 3-dimensionalem Charakter

3.2.1 TOPFLOW: Das Hubblenden-Experiment 074

3.2.1.1 Beschreibung der Versuchseinrichtung

An der TOPFLOW-Versuchsanlage am FZD wurden in der Vergangenheit eine große Zahl von Versuchen an vertikalen Luft-Wasser- und Dampf-Wasser-Zweiphasenströmungen ausgeführt, die zur Validierung und Weiterentwicklung von Mehrphasenmodellen in CFD-Verfahren (hier ANSYS CFX) benötigt und dafür verwendet wurden. In einer weiteren Etappe der TOPFLOW-Versuche wurde nun ein Experiment zur Validierung der bisher entwickelten CFD-Modelle durchgeführt, der ein ausgeprägt dreidimensionales Strömungsfeld für eine Zweiphasenströmung aufweist und daher eine entsprechend höhere Komplexität mit sich bringt – sowohl für das Experiment als auch für die CFD-Simulation. In die vertikale Rohrleitung von TOPFLOW mit DN200 wurde zu diesem Zweck eine vertikal verschiebbare, halbmond-förmige Hubblende eingebracht (siehe Abb. 2). Die gerade Kante des Hindernisses liegt in der Mittelebene der Rohrströmung, während die gekrümmte Kante des Hindernisses einen Abstand von 10mm zur Rohrwand aufweist. Mit den bereits

bekannten Gittersensoren wurden sowohl vor als auch nach der Hubblende die Gasgehalts- und Wassergeschwindigkeitsverteilungen als Feldgrößen ermittelt und für einen Vergleich mit Validierungsergebnissen aus CFD-Simulationen bereitgestellt. Die erhöhten Anforderungen an die CFD-Modelle resultieren dabei nicht nur aus der Dreidimensionalität der Strömung. Gekrümmte Stromlinien, die eine signifikante Neigung zur Gravitationsrichtung aufweisen, eine Rezirkulationszone im Nachlauf der Hubblende und Strömungsablösung an den Kanten des umströmten Hindernisses sind Strömungsphänomene, wie sie in vielen industriellen Anwendungen anzutreffen sind und bieten eine Validierungsmöglichkeit für eine Vielzahl von Untermodellen des CFD-Verfahrens (Mehrphasenmodelle, Turbulenz, etc.).

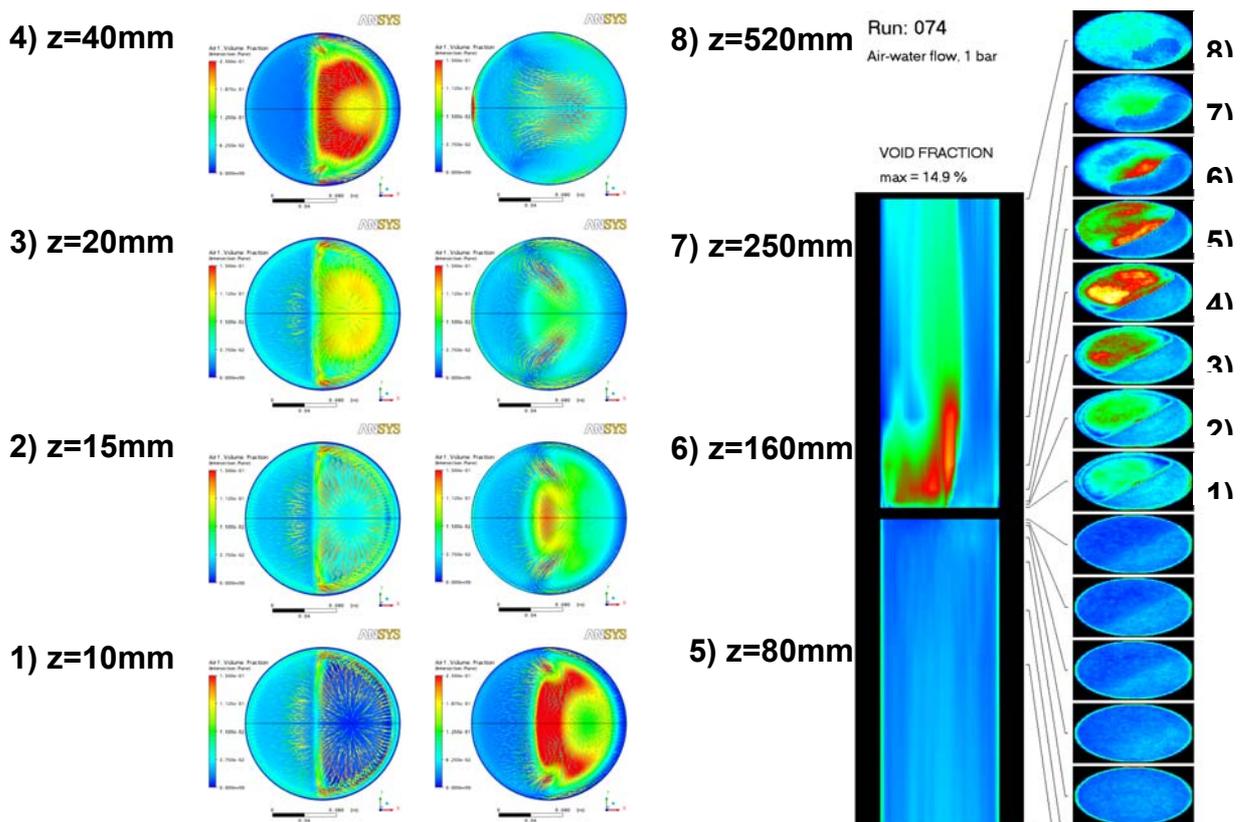


Abb. 3: Vergleich der Gasgehaltsverteilung in den Messquerschnitten stromab der Hubblende für die Messquerschnitte bei $z=+10\text{mm}$ bis zu $z=+520\text{mm}$. Die CFD-Ergebnisse sind links dargestellt, während sich auf der rechten Seite die experimentellen Daten befinden. Die CFD-Daten enthalten zusätzlich die Vektoren der normalisierten Geschwindigkeit der Luftphase in den horizontalen Schnittebenen.

Bevor die Experimente ausgeführt wurden, wurde in 2005 bereits mit ANSYS CFX eine blinde Vorausrechnung der Hubblendenumströmung unter den Bedingungen des Testfalls TOPFLOW-074 und unter der Annahme einer monodispersen Luft-Wasser-Zweiphasenströmung durchgeführt. Die Ergebnisse dieser blinden Vorausrechnung sind bereits im Abschlußbericht des Vorläufer-Forschungsvorhabens enthalten (Frank, 2006). Die experimentellen Ergebnisse des Hubblenden-Versuchs TOPFLOW-074 standen jedoch zu dem damaligen Zeitpunkt nicht für eine ausführliche Analyse der Ergebnisse im direkten

CFD-Experiment-Vergleich zur Verfügung. Die CFD-Simulationen für dieses Validierungsexperiment wurden daher im Rahmen dieses Forschungsvorhabens fortgesetzt. Die Ergebnisse der CFD-Simulationen sind im Vergleich mit den Messwerten in einer detaillierten Publikation auf der Int. Conf. Multiphase Flow, 2007 (Frank, et al., 2007) veröffentlicht worden und sollen daher hier nur auszugsweise dargestellt werden. Die Veröffentlichung enthält die vollständige Beschreibung der Testgeometrie, der Gitternetze, des CFD-Setups, der Auswertemethodologie und den vollständigen CFD-Experiment-Vergleich. Weiterführende Untersuchungen für den Versuch TOPFLOW-074 und eine gewisse Anzahl weiterer Versuchsreihen sind in enger Absprache mit unseren Projektpartnern am Forschungszentrum Dresden-Rossendorf auch unter Anwendung des inhomogenen MUSIG-Modells unter Berücksichtigung von Blasenzerfall und -koaleszenz insbesondere im Rezirkulationsgebiet stromab der Hubblende ausgeführt worden und in (Krepper, et al., 2009) publiziert worden.

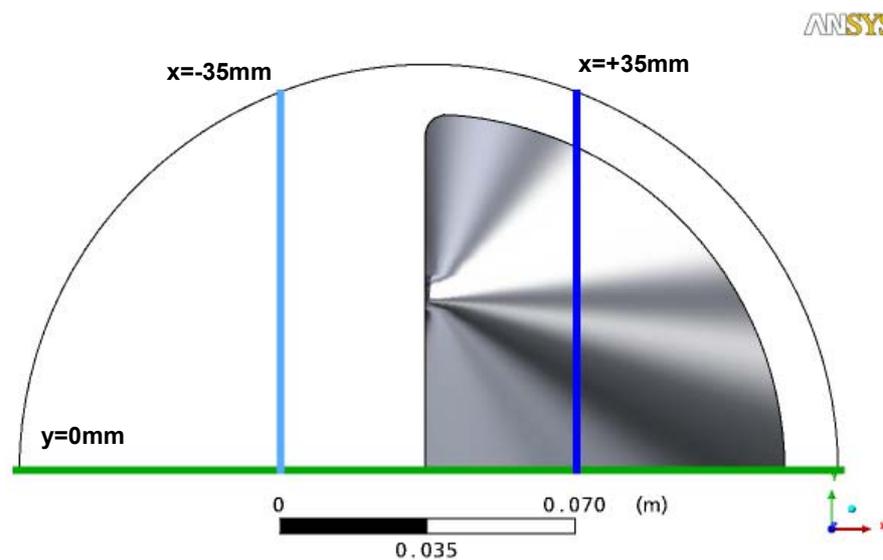
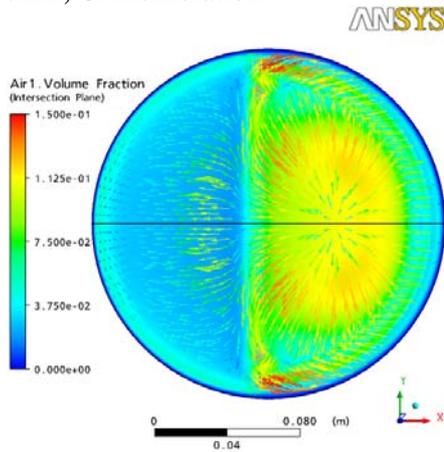
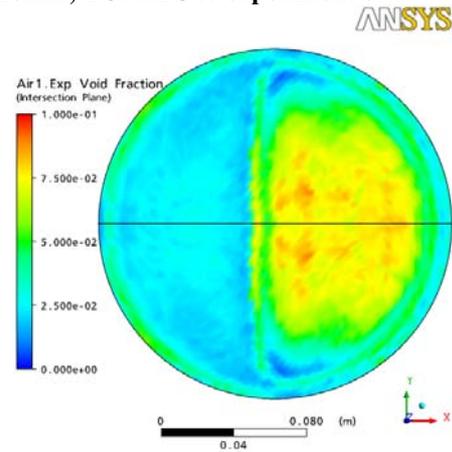


Abb. 4: Definierte Querschnitte für einen detaillierteren CFD-Experiment-Vergleich für das Hubblenden-Experiment TOPFLOW-074.

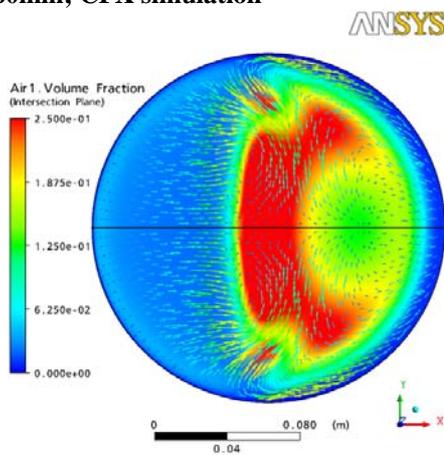
a) $z=+20\text{mm}$; CFX simulation



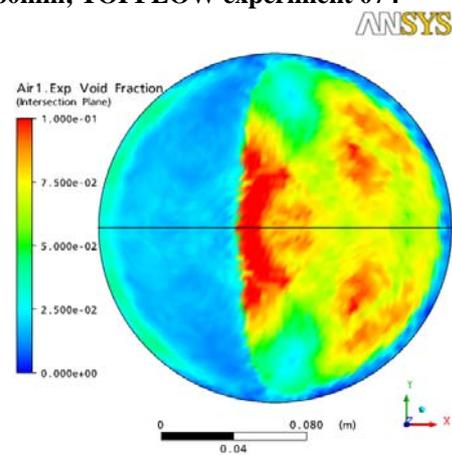
d) $z=+20\text{mm}$; TOPFLOW experiment 074



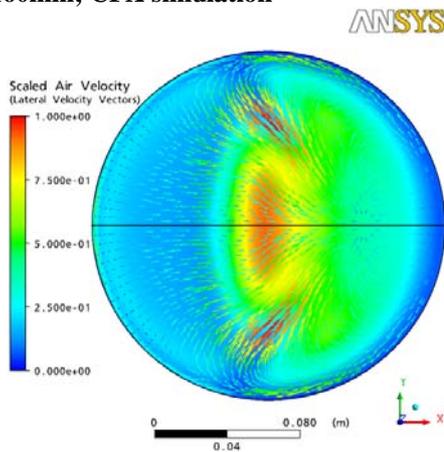
b) $z=+80\text{mm}$; CFX simulation



e) $z=+80\text{mm}$; TOPFLOW experiment 074



c) $z=+160\text{mm}$; CFX simulation



f) $z=+160\text{mm}$; TOPFLOW experiment 074

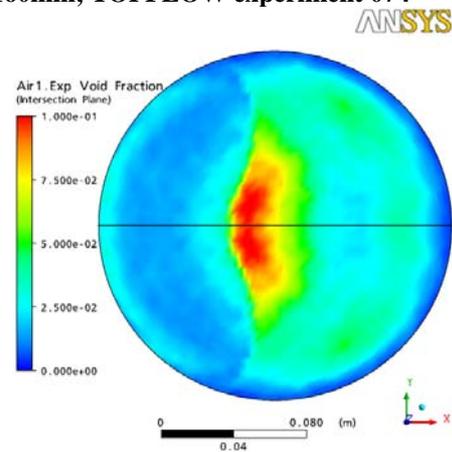
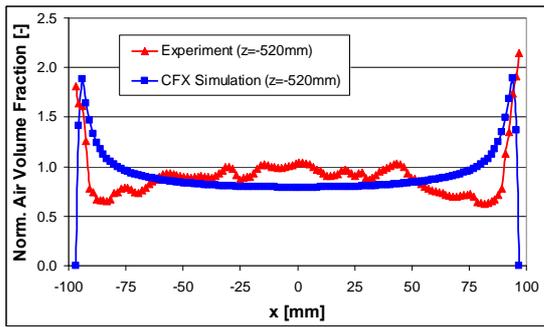
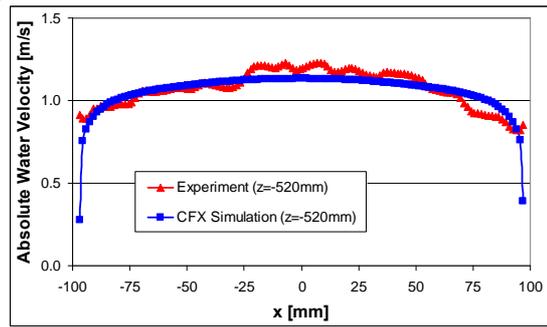


Abb. 5: Verteilung des Gasgehaltes und Vektoren der Horizontal-Komponenten der Geschwindigkeiten der Gasphase (x-y-Komponenten) exemplarisch für die Messquerschnitte bei a) $z=+20\text{mm}$, b) $z=+80\text{mm}$ und c) $z=+160\text{mm}$. Die linke Spalte der Bilder a)-c) zeigen die Simulationsergebnisse mit ANSYS CFX während die Abb. der rechten Seite d), e) und f) die Messergebnisse der Wire-Mesh-Sensoren an den gleichen Messquerschnitten zeigen (Man beachte die unterschiedliche farbliche Skalierung in den einzelnen Abb.).

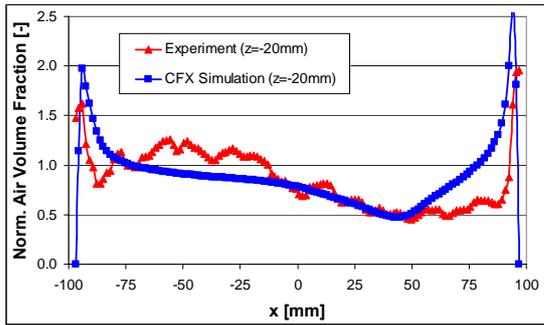
a) $z=-520\text{mm}$:



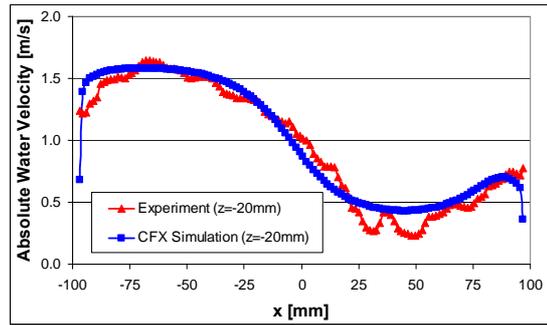
b) $z=-520\text{mm}$:



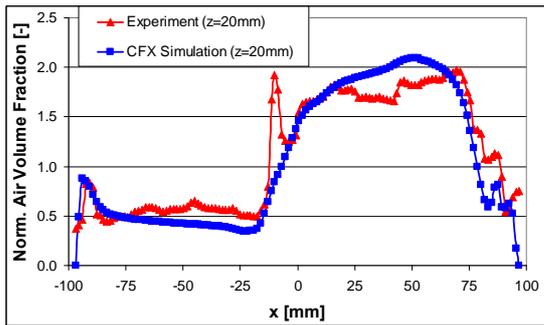
c) $z=-20\text{mm}$:



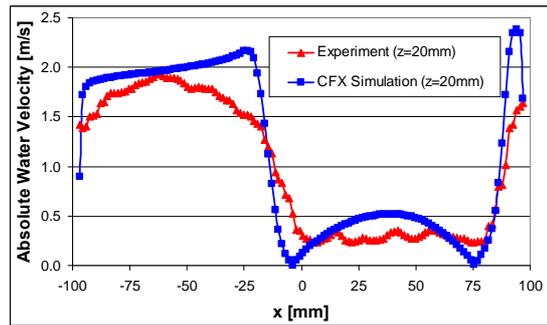
d) $z=-20\text{mm}$:



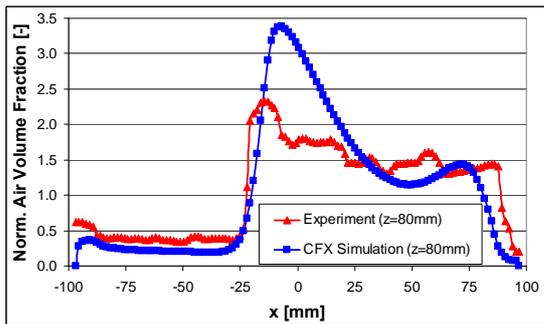
e) $z=+20\text{mm}$:



f) $z=+20\text{mm}$:



g) $z=+80\text{mm}$:



h) $z=+80\text{mm}$:

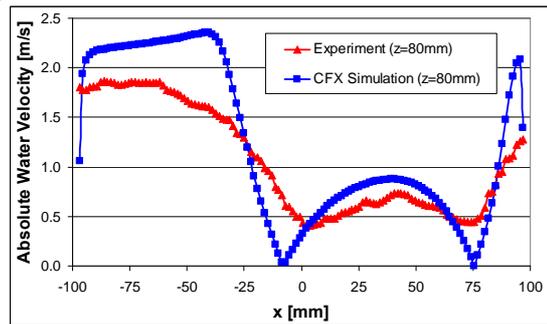
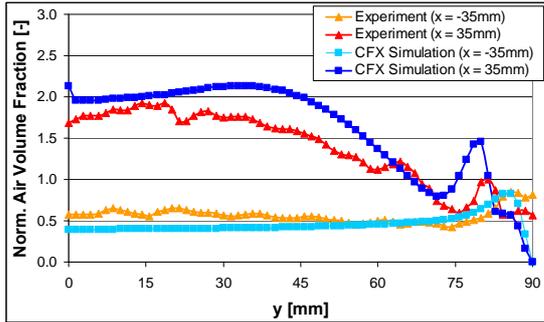
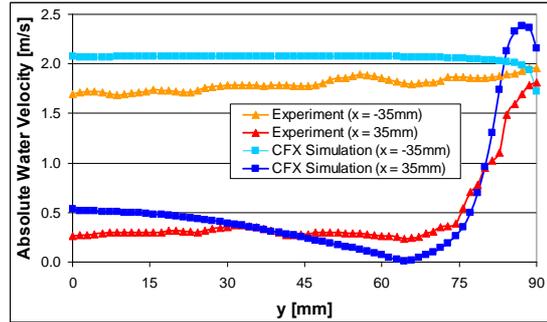


Abb. 6: Vergleich von normalem Gasgehalt und Absolutbetrag der vertikalen Wassergeschwindigkeiten an den definierten Profilquerschnitten in der Symmetrieebene ($z=0\text{mm}$) und für verschiedene vertikale Messquerschnitte.

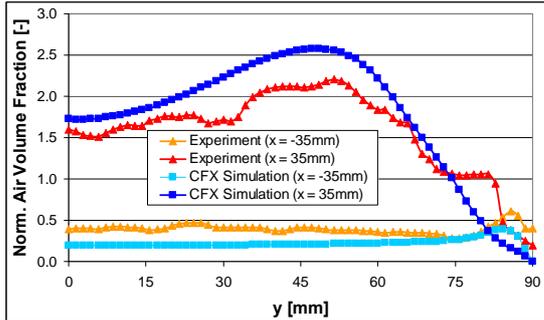
a) $z=+20\text{mm}$:



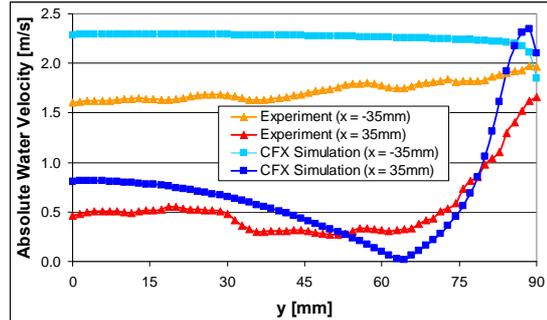
b) $z=+20\text{mm}$:



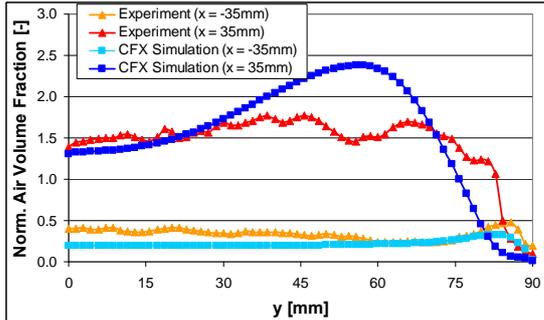
c) $z=+40\text{mm}$:



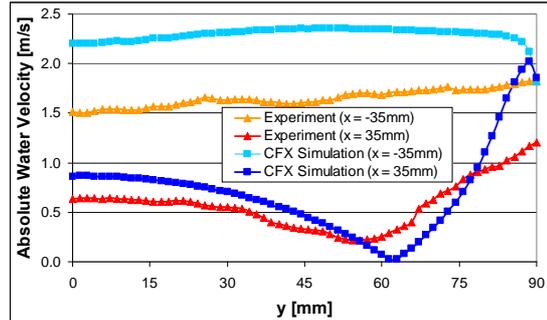
d) $z=+40\text{mm}$:



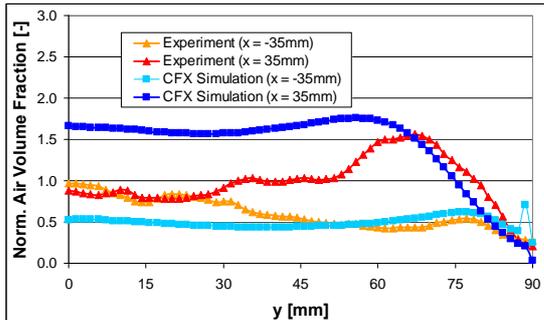
e) $z=+80\text{mm}$:



f) $z=+80\text{mm}$:



g) $z=+160\text{mm}$:



h) $z=+160\text{mm}$:

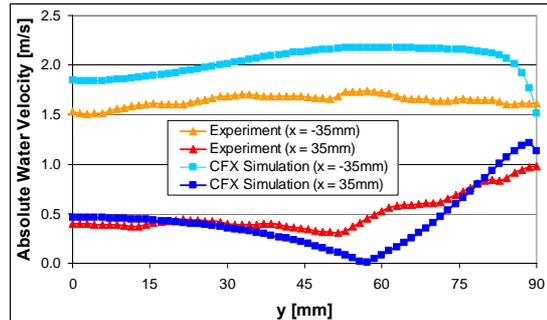


Abb. 7: Vergleich von normalem Gasgehalt und Absolutbetrag der vertikalen Wassergeschwindigkeiten an den definierten Profilquerschnitten bei $x=\pm 35\text{mm}$ und für verschiedene vertikale Messquerschnitte.

3.2.1.2 CFD-Simulationsergebnisse und Vergleich mit dem Experiment

Aus den Experimenten standen die mit den Wire-Mesh-Sensoren gemessenen dreidimensionalen Feldgrößen für Gasgehalt und Wassergeschwindigkeit zur Verfügung. Zur besseren quantitativen Vergleichbarkeit wurden diese als dreidimensionale Felder in den grafischen Postprozessor von ANSYS CFX (CFX-Post) eingelesen. Die räumliche Auflösung der Gittersensordaten ist hierbei in x-y-Richtung sehr gut. Jedoch stehen aus messtechnischen Gründen die Daten nur an den Messebenen bei $z=-520, -250, -160, -80, -40, -20, -15, -10, 10, 15, 20, 40, 80, 160, 250$ und $z=520$ mm Abstand zur Position der Hubblende zur Verfügung. Um den Vergleich mit den CFD-Daten zu verbessern, wurde von Dr. H.-M. Prasser (damals noch FZD, jetzt ETHZ) ein Werkzeug zur Zwischeninterpolation der Messdaten mit einem Ebenenabstand von 1mm in z-Richtung zur Verfügung gestellt. Die Vorgehensweise der Darstellung beider Datensätze im selben Postprozessor erlaubt die Anwendung gleicher Auswerteschritte (Stromlinien zur Sichtbarmachung von Wirbelgebieten, beliebige Schnittebenen, Isoflächen gleichen Gasgehaltes, etc.) und Farbskalierungen sowohl auf die CFD-Ergebnisse als auch auf die experimentellen Daten und somit einen direkteren Vergleich der dreidimensionalen Daten. Entsprechende Vergleiche der CFD-Ergebnisse und experimentellen Daten sind in den Abb. 3 und Abb. 5 für die Gasgehaltsverteilung in verschiedenen Messquerschnitten des Testfalls dargestellt, die eine qualitativ sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse zeigen. Darüber hinaus geben die aus der CFD-Simulation bekannten Geschwindigkeitsvektoren der horizontalen Gasrezirkulation weiteren Aufschluss, warum die Gasphase diese z.T. auf den ersten Blick nur schwer verständliche Verteilung in den einzelnen Querschnitten annimmt. Die Form der Gasansammlung im turbulenten Nachlauf und in der Rezirkulationszone stromabwärts von dem umströmten Hindernis wird im Wesentlichen gerade durch diese horizontalen Rezirkulationsströmungen bestimmt.

Im vorliegenden Forschungsvorhaben wurde nun des Weiteren eine detailliertere Auswertung der CFD-Simulationsrechnung und der nun vorliegenden experimentellen Daten anhand von definierten Profilschnitten durch die 3-dimensionale Strömungsgeometrie geführt. Abb. 4 zeigt zunächst die Anordnung der auf jeder Sensor-Messebene definierten Auswerte-Querschnitte. Die weiteren Abb. 6 und Abb. 7 zeigen den detaillierten Vergleich der berechneten und gemessenen normalisierten Gasgehalte sowie der Absolutbeträge der berechneten und gemessenen vertikalen Wassergeschwindigkeiten an den definierten Auswertequerschnitten in x- und y-Richtung an verschiedenen horizontalen Messquerschnitten. Die Übereinstimmung der experimentellen Ergebnisse mit dem CFD-Modell in ANSYS CFX für diesen Fall einer ausgeprägt dreidimensionalen, in erster Näherung noch monodispersen Blasenströmung ist mit den gewählten Ansätzen für Widerstandskraft, laterale Auftriebskraft, Wandabstoßungskraft und turbulente Dispersionskraft sowie unter Verwendung von SST-Turbulenzmodell für die flüssige Phase, Nullgleichungsmodell sowie Sato-Modell für die disperse gasförmige Phase außerordentlich gut, womit diese Ansätze für disperse Blasenströmungen auch in diesem komplexen dreidimensionalen Fall erfolgreich validiert werden konnten.

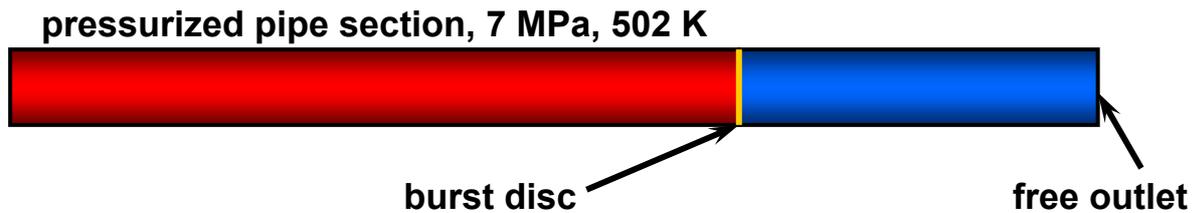


Abb. 8: Versuchsanordnung des Edwards-Tests (Edwards, et al., 1970).

3.3 Polydisperse Mehrphasenströmungen bei hohen Drücken und Volumenanteilen der gasförmigen Phase

3.3.1 Der Edwards-Test – Schockverdampfung bei momentaner Druckentlastung

Bei dem sogenannten Edwards-Test (Edwards, et al., 1970) handelt es sich ebenfalls um einen Testfall, der bereits im Vorläufer-Forschungsvorhaben mit ANSYS CFX untersucht wurde (Frank, 2006). Hierbei handelt es sich um einen Standardtest, der häufig zur Validierung von Systemcodes eingesetzt wird. In einem Rohr (siehe Abb. 8) mit einer an einem der Rohrenden positionierten Berstscheibe befindet sich Wasser unter einem Druck von 7 MPa bei einer Temperatur von 502K. Im Experiment hat das Rohr bis zur Berstscheibe eine Länge von $L = 4.096m$ und einen Durchmesser von $D = 0.0732m$. Zum Zeitpunkt $T=0.0s$ wird die Berstscheibe zerstört und es setzt von dem nun der freien Atmosphäre ausgesetzten Rohrende her die schlagartige Verdampfung (Flashing) ein, da das Wasser nunmehr bezüglich der Sättigungstemperatur stark überhitzt ist. Dieser Prozess breitet sich frontartig in dem Rohr aus, bis das Rohr vollständig mit Wasserdampf gefüllt ist. Zum Vergleich stehen aus den Experimenten (Edwards, et al., 1970) und (Takata, et al., 2003) Druck-, Dampfgehalt und Temperaturmessungen an verschiedenen axialen Messorten entlang des Rohres zur Verfügung. Hier wurde zum Vergleich exemplarisch die Messposition bei $x=1.469m$ vom linken Rohrende herangezogen.

Mit ANSYS CFX 11.0 stehen nunmehr neben den in den CFD-Simulationen aus (Frank, 2006) verwendeten Zustandsgleichungen eines Redlich-Kwong-Gases (RGP-Tabelle für Drücke zwischen 1-30 MPa und Temperaturen von 450-900 K) für den Wasserdampf auch die Wasser-Wasserdampf-Zustandsgleichungen nach IAPWS-IF97-Standard (siehe Abschnitt 2.1.3) zur Verfügung. Die erneute Untersuchung des Edwards-Tests diene vor allem der Validierung der Implementierung dieser Wasser-Wasserdampf-Zustandsgleichungen nach IAPWS im Vergleich mit den experimentellen Daten und den früheren Berechnungen.

3.3.1.1 Strömungsgebiet, Gittergenerierung, CFD-Setup und Randbedingungen der CFD-Simulation

Die CFD-Simulation des Edwards-Test wurde auf zwei quasi-eindimensionalen Gitternetzen aus 1000 bzw. 4000 Hexaeder-Gitterelementen ausgeführt. Das unter Druck stehende Rohrsegment wurde mit 99.9% Wasser und 0.01% Wasserdampf bei Sättigungsbedingungen initialisiert. Beide Phasen befinden sich zum Zeitpunkt $T=0.0s$ in Ruhe. Es wird angenommen, dass beide Phasen eine monodisperse Zweiphasenströmung mit einem charakteristischen Blasendurchmesser von 1mm bilden. Die Initialisierung mit einem sehr

geringen Dampfvolumenanteil dient im Wesentlichen dazu, von Beginn der Simulation an ein kompressibles Zweiphasengemisch vorliegen zu haben. Das 2m Rohrsegment rechts von der Berstscheibe wurde mit gesättigtem Wasserdampf unter Bedingungen der freien Atmosphäre initialisiert.

Die ausgeführte Berechnung mit ANSYS CFX erfolgte für die Dampfphase in jedem Fall voll kompressibel. Unter Verwendung einer Redlich-Kwong-Gleichung (RGP-Tabelle für Drücke zwischen 1-30 MPa und Temperaturen von 450-900 K) als Zustandsgleichung für den Wasserdampf wird lediglich die gasförmige Phase als kompressibles Fluid modelliert, während die flüssige Wasserphase als inkompressibles Fluid mit konstanten Stoffeigenschaften angenommen wurde. Die Kompressibilität von Wasser kann dabei unter den Bedingungen des Edwards-Tests durchaus als vernachlässigbar gering angenommen werden. Die Sättigungstemperatur wurde über eine Antoine-Gleichung in Form einer CCL-Expression in der CFD-Simulation spezifiziert (Frank, 2006).

Mit der Verfügbarkeit von Wasser-Wasserdampf-Zustandsgleichungen nach IAPWS-IF97 ist das CFD-Setup für den Edwards-Test deutlich vereinfacht. Sowohl für den Wasserdampf als auch für die Wasserphase stehen bei Verwendung von IAPWS als Stoffdaten die Druck- und Temperatur-abhängigen Stoffdaten direkt zur Verfügung, wobei beide Phasen als kompressible Fluide behandelt werden. Über eine sogenannte Homogeneous Binary Mixture stehen darüber hinaus auch direkt die Daten für Mehrphasengemisch-abhängige Stoffdaten wie z.B. Sättigungstemperatur und Oberflächenspannung aus den IAPWS-Daten zur Verfügung, so dass die Spezifikation über eine Antoine-Gleichung entfallen kann. So kann innerhalb eines CFD-Setups für ANSYS CFX nunmehr sehr einfach über den CCL-Ausdruck:

TSat=Water | Water Steam.Saturation Temperature

auf die Sättigungstemperatur aus den IAPWS-Zustandsgrößen zugegriffen werden, wobei der hier gezeigte CCL-Ausdruck die vergebenen Namen beider beteiligten Fluide enthält, der User-spezifisch variieren kann. Für die CFD-Simulationen unter Verwendung von IAPWS-Stoffdaten wurde eine IAPWS-Tabelle im Druckbereich von 0.1-8.0 MPa, im Temperaturbereich von 373-600 K und mit 250 Zustandsgrößen (Punkten) in der RGP-Tabelle erzeugt und verwendet. Für die Modellierung des Wärme- und Stoffübergangs zwischen beiden Phasen kam in allen Simulationen eine Ranz-Marschall-Korrelation zur Anwendung. Die CFD-Simulationen wurden zunächst mit ANSYS CFX in der Version 11.0 ausgeführt und zu einem späteren Zeitpunkt des Forschungsvorhabens mit der Version 12.1 zum Zwecke der Validierung und nochmaligen Überprüfung noch einmal wiederholt.

Die CFD-Berechnungen für den Edwards-Test mit ANSYS CFX zeigen auch unter Verwendung von IAPWS-IF97-Stoffdaten für Wasser und Wasserdampf eine sehr gute Übereinstimmung für den zeitlichen Druck-, Temperatur- und Dampfgehaltsverlauf an einer in der Literatur definierten Messstelle ($x=1.469\text{m}$), für die experimentelle Werte aus (Edwards, et al., 1970) vorlagen. Zum weiteren Vergleich wurden auch Resultate von RELAP-5 und einem japanischen CFD-Code (SERAPHIM) herangezogen (Takata, et al., 2003). Auf Grund des sehr schnell ablaufenden transienten physikalischen Prozesses war in der Simulation mit ANSYS CFX ein Integrationszeitschritt von 10^{-6}s notwendig, der durch den Einsatz adaptiver Zeitschrittverfahren jedoch noch vergrößert werden kann.

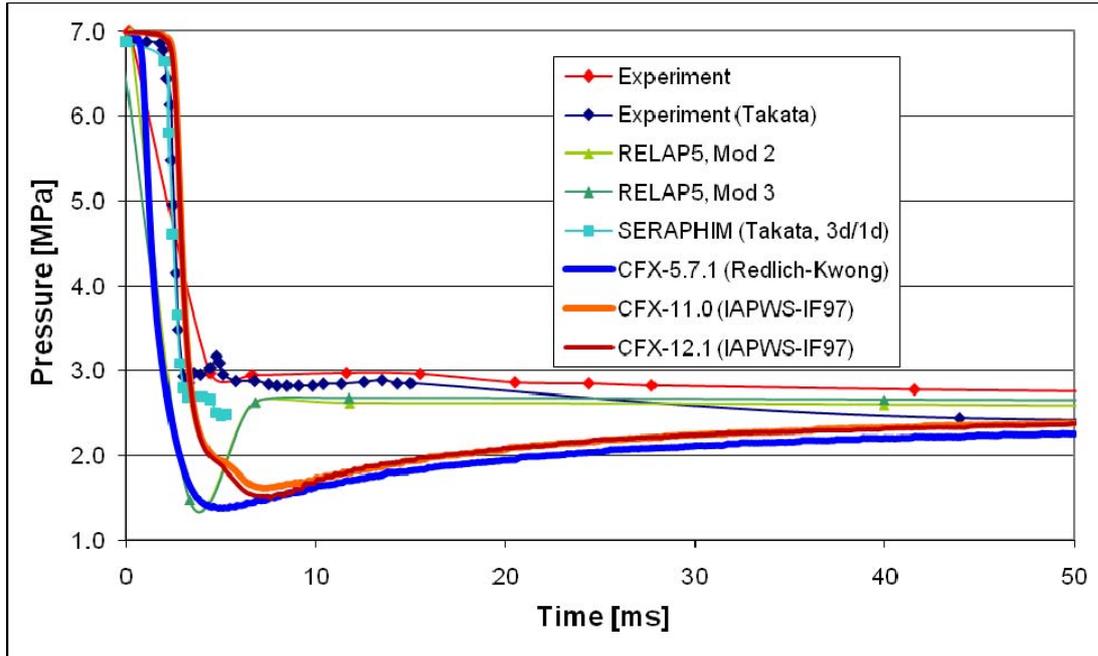


Abb. 9: Berechneter Druckverlauf für die ersten 50ms des Edwards-Tests.

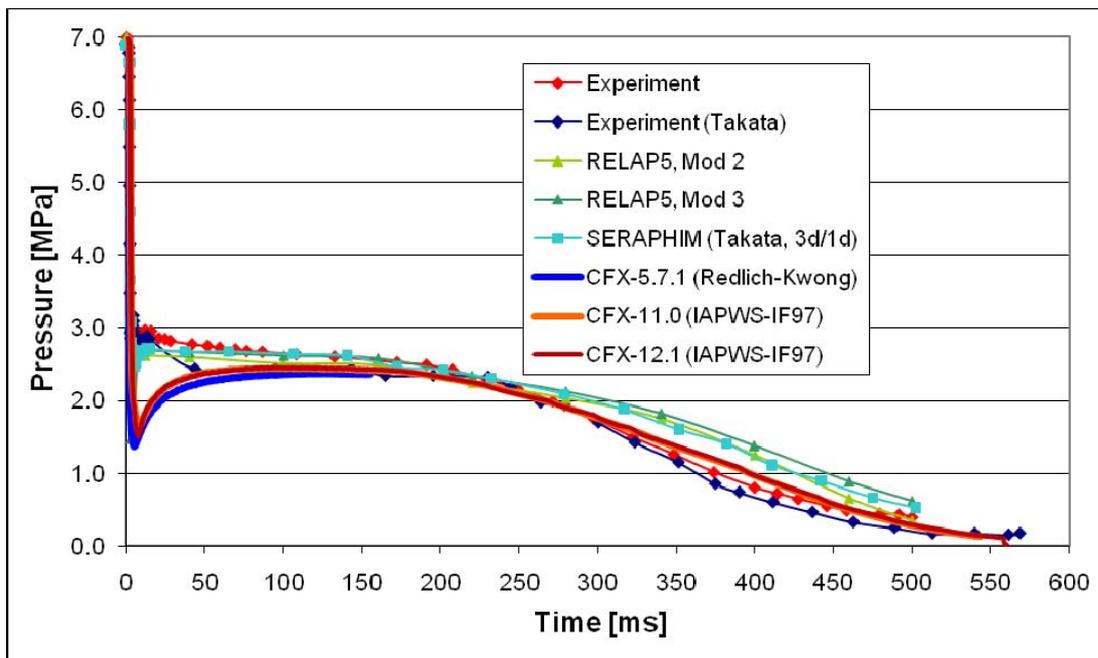


Abb. 10: Berechneter Druckverlauf für die gesamte 600ms währende Transiente des Edwards-Tests bis hin zur fast vollständigen Verdampfung der Wasserphase.

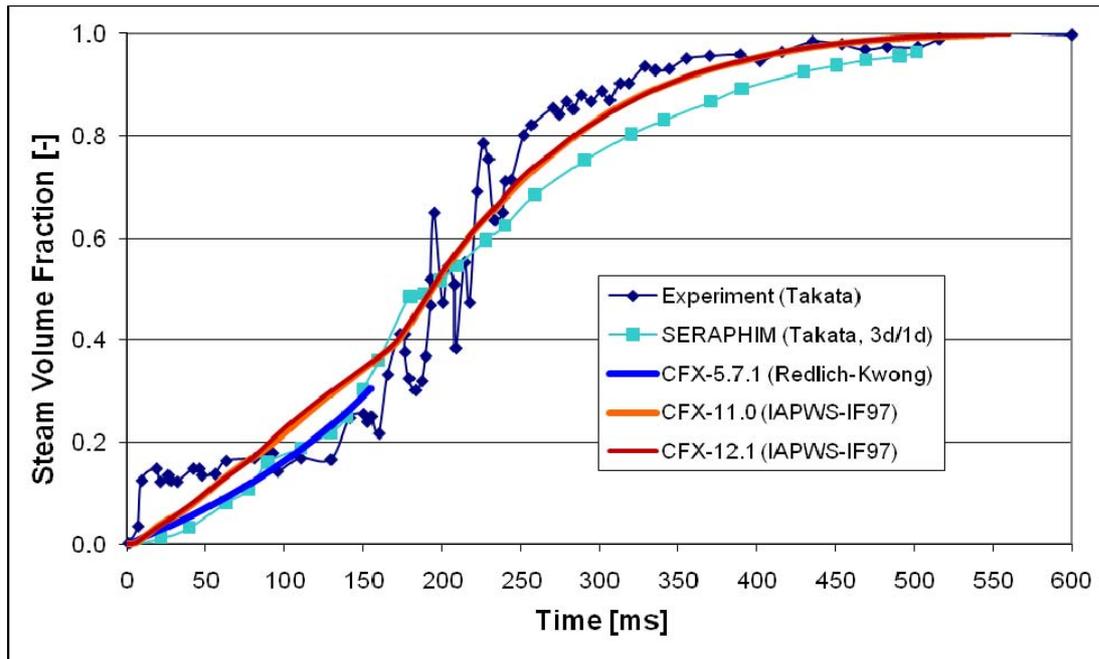


Abb. 11: Berechneter Verlauf der Dampfgehaltsentwicklung für die gesamte 600ms währende Transiente des Edwards-Tests an der Messstelle bei $x=1.469\text{m}$.

3.3.1.2 CFD-Simulationsergebnisse und Vergleich mit dem Experiment

Abb. 9, Abb. 10 und Abb. 11 zeigen die berechneten Druck- und Dampfgehaltverläufe über der Zeit an der angegebenen Messstelle im Vergleich zu den experimentellen Daten, im Vergleich zu den mittels Verwendung von Redlich-Kwong-Gleichung in ANSYS CFX 5.7.1 erzielten Ergebnissen sowie im Vergleich zu den Berechnungsergebnissen mit den Codes RELAP-5 und SERAPHIM. Die Übereinstimmung ist generell als sehr gut zu bewerten. Der Druckabfall nach Zerstörung der Berstscheibe wird unter Verwendung von Redlich-Kwong-Zustandsgleichungen in ANSYS CFX 5.7.1 ähnlich wie mit RELAP-5 Mod3 berechnet, während die Berechnung unter Berücksichtigung der Kompressibilität beider Phasen mit iAPWS-IF97-Stoffdaten eher dem Experiment von Takata und den Ergebnissen des SERAPHIM-Codes entspricht. Dies betrifft insbesondere die kleine zeitliche Verzögerung von wenigen Millisekunden, bis der Druckabfall am Messort einsetzt. Im weiteren Verlauf kommt es in den Rechnungen mit IAPWS zu einem etwas zu starken lokalen Druckabfall bis auf ca. 1.5MPa am Messort und dieser niedrigere Druck hält auch etwas länger an, bis sich nach ca. 50ms wieder ein Druckniveau von $\sim 2.4\text{ MPa}$ am Messort einstellt. Der weitere zeitliche Druckverlauf entspricht in Folge wieder in sehr guter Übereinstimmung den Experimenten. Dieses Verhalten am Messort ist eventl. durch den angenommenen konstanten Dampfblasendurchmesser beeinflusst. Die Abhängigkeit der CFD-Ergebnisse von diesem Modellparameter wurde jedoch nicht untersucht. Der zeitliche Anstieg des örtlichen Dampfgehaltes auf Grund der Verdampfungsprozesse (Abb. 11) wird in sehr guter Übereinstimmung mit den Experimenten von Takata et al. und den Resultaten des japanischen Codes SERAPHIM (Takata, et al., 2003) berechnet, wobei auf Grund der Schwankungen und des offensichtlichen Messfehlers in den Experimenten nicht entschieden

werden kann, ob die Ergebnisse mit Redlich-Kwong- oder IAPWS-Zustandsgrößen von höherer Genauigkeit sind. Im Ergebnis dieser Untersuchungen kann jedoch festgestellt werden, dass mit der Implementierung von Wasser-Wasserdampf-Zustandsgrößen nach IAPWS-IF97-Industriestandard eine hohe Genauigkeit der CFD-Simulation gewährleistet ist. Darüber hinaus ermöglicht die Verwendung von IAPWS-Stoffdaten eine weitgehende Unabhängigkeit der Ergebnisse von Benutzerfehlern und einen deutlich höheren Komfort in der Erstellung des CFD-Setups in ANSYS CFX für Strömungen mit starken Änderungen der Zustandsgrößen Druck und Temperatur für die Fluide Wasser und Wasserdampf einschließlich von Phasenübergangsprozessen.

3.3.2 Massenbasierte Diskretisierung des MUSIG-Modells und Änderungen im Systemdruck

Die Diskretisierung des Blasengrößenspektrums mittels des MUSIG Modelles ist auf den Massen der Blasen basiert. Das bedeutet, dass jede Blasenklasse durch eine bestimmte und feste Blasenmasse charakterisiert ist. Der Wert dieser Massen wird am Anfang jeder Simulation durch die Referenzdichte und die gegebenen Durchmesser berechnet. Die Reihenfolge der ausgeführten Schritte ist folgende:

- sowohl minimale und maximale Durchmesser (d_{min} , d_{max}) als auch die Diskretisierungsregel (*Equal Mass*, *Equal Diameter*, *Geometric Mass*, usw.) eingeben
→ Anfangsdurchmesserverteilung ($d_i^{t_0}$)
- Massendiskretisierung berechnen nach Gl. (2.39)

$$m_i = \frac{\pi}{6} \rho_{ref} (d_i^{t_0})^3$$

- Ausführen der Simulation. Für jeden Zeitschritt werden die Durchmesser aktualisiert

$$d_i^{t_j} = \sqrt[3]{\frac{6}{\pi} m_i \frac{1}{\rho^{t_j}}} = \sqrt[3]{\frac{\rho_{ref}}{\rho^{t_j}}} d_i^{t_0} \quad (3.1)$$

Auf diese Weise kann das MUSIG-Modell auf z.B. Druckänderungen im System richtig reagieren. D.h. wenn es einen Druckverlust gäbe, würde man eine Expansion des Gases erwarten und folglich größere Blasen sehen. Umgekehrt würde man kleinere Blasen beobachten, wenn der Druck sich erhöhen würde. Die beschriebene auf den Massen basierende Durchmesserdiskretisierung (Gl. (3.1)) verhält sich gleichermaßen. Wenn der Druck z.B. abnehmen würde, würde die Gasdichte ebenfalls abnehmen und deswegen wäre das Verhältnis $\frac{\rho_{ref}}{\rho^{t_j}} > 1$, und deshalb $d_i^{t_j} > d_i^{t_0}$. Wie erwartet würden die Blasen expandieren.

3.3.3 Verifikation des MUSIG-Modells für starke Systemdruckänderungen

Um das im vorherigen Abschnitt beschriebene Verhalten zu überprüfen, wurde ein Testfall definiert, wo eine starke Systemdruckänderung stattfindet. In dem Testfall wird ein Druckanstieg um 10atm spezifiziert und in Folge wird eine Entwicklung der Blasendurchmesserverteilung wie die in Abb. 12 erwartet.

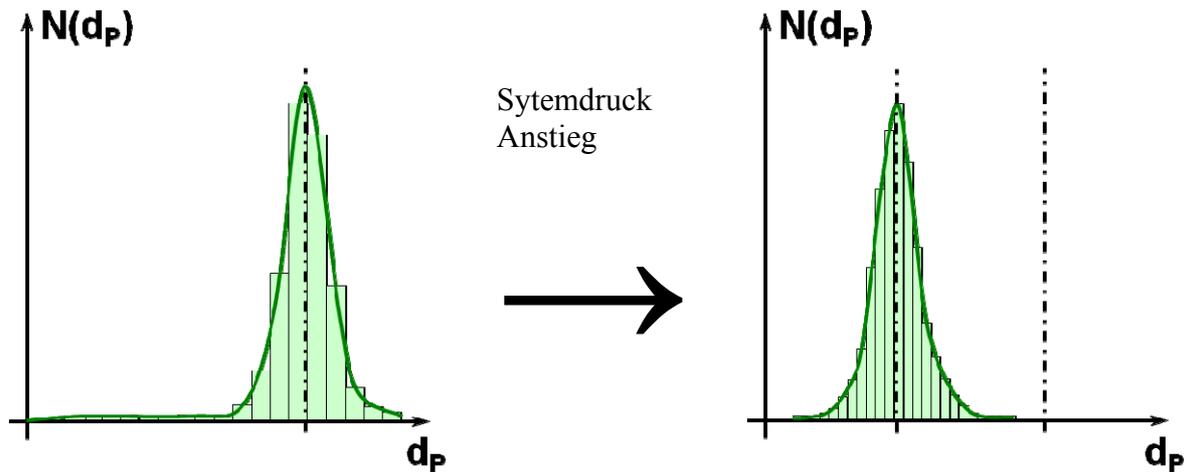


Abb. 12: Blasendurchmesserverteilung. Links: Vor dem Systemdruckanstieg. Rechts: Danach.

3.3.3.1 Beschreibung des Verifikationstest und CFD-Setup

Der ausgewählte Verifikationstestfall besteht aus einer zweidimensionalen viereckigen Kavität (Abb. 13), die zu 90 % des Geometrievolumens mit einer Luft/Wasser Mischung (0.3 Luft, 0.7 Wasser) gefüllt ist. Über dem Luft-Wasser-Gemisch befindet sich reine Luft (10% des Geometrievolumens). Am Anfang sind die Fluide in Ruhe. Das Wasser wurde inkompressibel gerechnet. Um den Fall zu vereinfachen und um eine durch Auftrieb verursachte Entmischung der beiden Phasen zu vermeiden, wurde der Testfall ohne Schwerkraft berechnet.

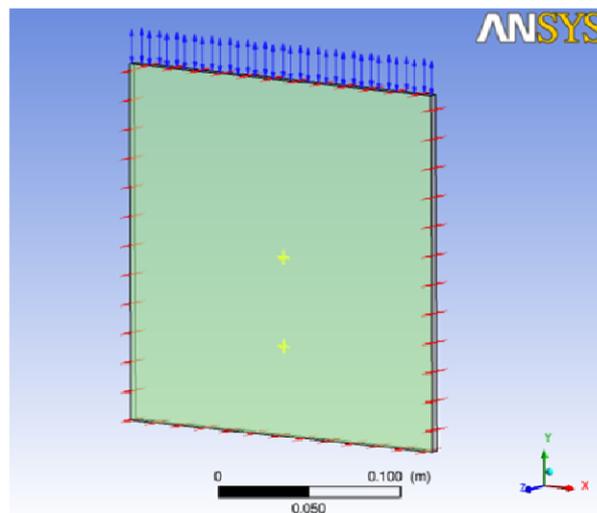


Abb. 13: 2D Kavität mit Luft und Wasser.

Die Randbedingungen wurden festen Wände für alle Seiten der Kavität außer für die Vorderseite und Rückseite spezifiziert. An Vorder- und Rückseite wurden Symmetrie-

Randbedingungen verwendet. Die Oberseite der Kavität wurde als Opening-Randbedingung spezifiziert um einen Volumenausgleich durch einströmende Luft zu gestatten.

Eine inhomogene MUSIG-Rechnung mit drei Geschwindigkeitsgruppen, jede mit fünf Blasenklassen (insgesamt 15), wurde durchgeführt. Der Systemdruck wurde am Anfang der Simulation auf $P_{abs}=1 \text{ atm}$ festgelegt, und durch eine Rampenfunktion bis auf 11 atm ansteigen lassen. Auf diese Weise sollte der Einfluss einer Systemdruckänderung auf die Blasengrößenverteilung deutlich erkennbar werden.

3.3.3.2 Vergleich mit analytischer Lösung

Auf der linken Seite der Abb. 14 kann man die Entwicklung des Druckes sehen. Simultan ist auf der rechten Seite die Entwicklung der mittleren Sauter-Durchmesser für jede Geschwindigkeitsgruppe über der Zeit aufgetragen. Wie erwartet, verkleinern sich die mittleren Blasendurchmesser solange der Druck ansteigt und bleiben anschließend konstant.

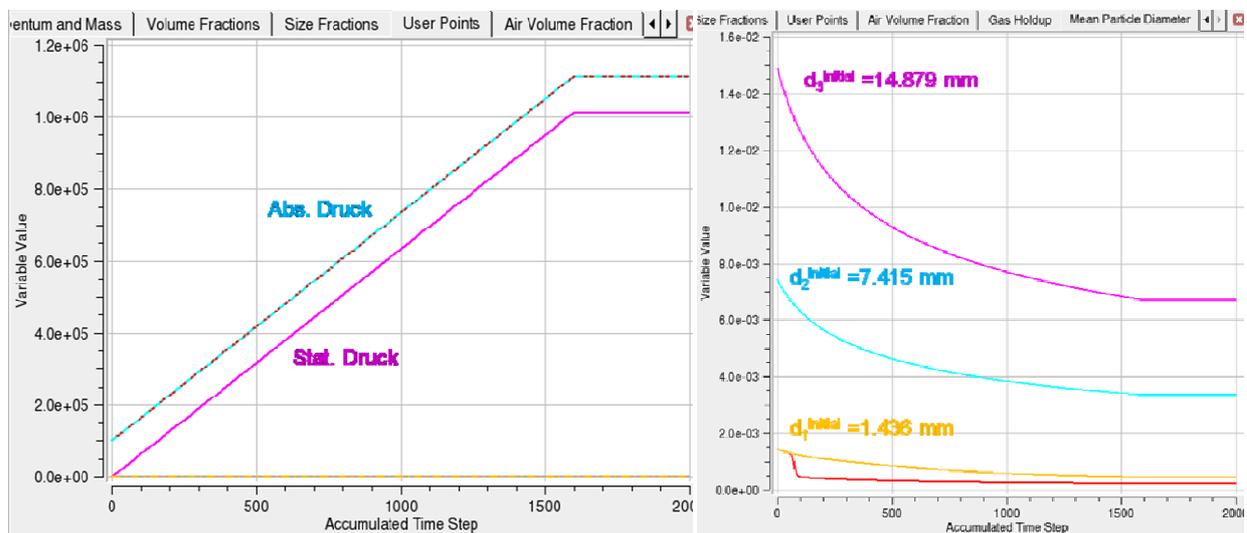


Abb. 14: Links: Systemdruck; Rechts: Mittlerer Sauter-Durchmesser Blasenklassen aller drei Geschwindigkeitsgruppen über der Zeit.

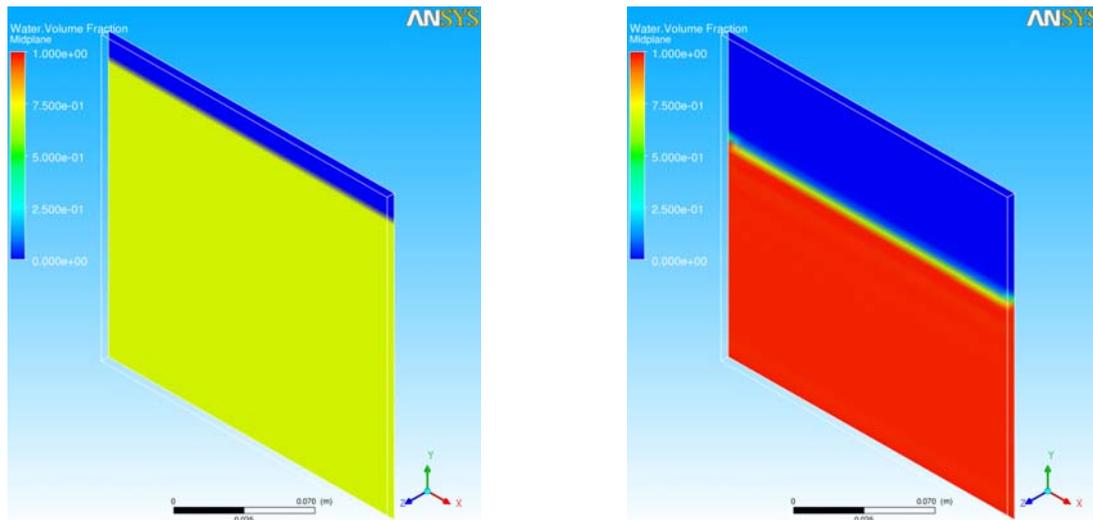


Abb. 15: Links: Wasservolumenanteil am Anfang der Simulation; Rechts: Wasservolumenanteil nach 5 Sekunden auf Grund der Kompression der Gasphase.

Dieser Effekt kann auch quantitativ analysiert werden. In der Tabelle 1 sind die mittleren Sauter-Blasendurchmesser jeder Geschwindigkeitsgruppe dargestellt. Die erste Spalte beinhaltet die Anfangsbedingungen. Die Zweite entspricht der numerischen Lösung nach 5 Sekunden Realzeit aus der Simulation. Die dritte Spalte ist eine analytische Berechnung der Blasendurchmesser unter der Annahme, dass sich die Zustandsänderung der Gasphase wie bei einem idealen Gas bei konstanter Temperatur vollzieht (isotherme Zustandsänderung). Die Übereinstimmung der Werte in den letzten zwei Spalten ist als sehr gut zu bewerten.

	CFD Simulation		Ideales Gas
	t=0.0 s	t=5.0 s	t=5.0 s
Air 1	1.436mm	0.433mm	0.646mm
Air 2	7.415mm	3.339mm	3.334mm
Air 3	14.879mm	6.699mm	6.690mm

Tabelle 1: Mittlerer Sauter-Blasendurchmesser.

Der Einfluss des Druckes ist auch in der Abb. 15 zu erkennen. Hier ist der Wasservolumenanteil dargestellt. Auf der linken Seite sieht man, dass dieser am Anfang 0.7 beträgt, während er am Ende der Simulation wegen der Systemdruckänderung und der damit einher gehenden Kompression der Gasphase bis 0.972 erhöht und das Volumen des Mehrphasengemisches nun einen deutlich kleineren Bereich der Kavität einnimmt.

3.3.4 Das Wandsiede-Experiment nach Bartolomej et al.

Der Bartolomej Testfall ist ein sehr bekannter Wandsiede-Testfall in der Literatur. Dieser wurde von Bartolomej et al (Bartolomej, et al., 1967) erst in 1967 in Detail experimentell

untersucht, und 1982 erweitert (Bartolomej, 1982). Die Veröffentlichungen von Bartolomej beinhalten verschiedene Untersuchungskonfigurationen und dienen als Referenz für die Validierung neuer Wandsiede-Modelle.

3.3.4.1 Beschreibung der Versuchseinrichtung

Bartolomej untersuchte unterkühltes Wandsieden in einem kreisförmigen Rohr, dessen Wände überhitzt waren. Eine Darstellung der Versuchseinrichtung ist in Abb. 16 zu sehen. Für das beheizte Rohr wurden zwei Edelstahlrohre mit Durchmesser 15.4 mm bzw. 24 mm benutzt. In Rot sieht man die Testsektion, wo die Experimente ausgeführt wurden.

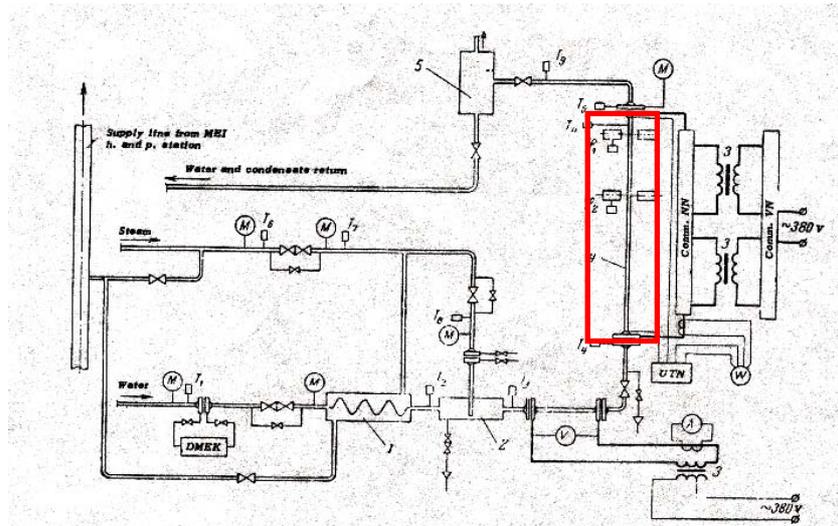


Abb. 16: Schematische Darstellung der experimentellen Anlage.

In den Veröffentlichungen finden sich sowohl gemessene Temperaturen als auch Gasgehaltswerte. Diese sind von der Wandwärmestromdichte, Druck, Unterkühlung des Fluides, und Massenstromdichte abhängig. Deswegen wurde dieser Satz von Parametern analysiert und variiert. Die in den Validierungsuntersuchungen berücksichtigten Parameterkombinationen sind in der Tabelle 2 aufgeführt.

Parameter	Untersuchtes Gebiet
P	15, 30, 45 bar
\dot{q}	$0.4, 0.6, 0.8 \times 10^6 \text{ W/m}^2$
ΔT_{sub}	20 \rightarrow 160 K
\dot{m}	900 $\text{ kg/m}^2\text{s}$

Tabelle 2: Untersuchte Strömungsparameter in (Bartolomej, et al., 1967) .

3.3.4.2 Strömungsgebiet, Gittergenerierung und Randbedingungen der CFD-Simulation

Um die in ANSYS CFX 12.0 implementierte Wandsiedemodellierung validieren zu können, wurden verschiedene Parameterkonfigurationen, die in der Arbeit von Bartolomej (Bartolomej, et al., 1967), (Bartolomej, 1982) beschrieben werden, betrachtet. Ein Grundfall wurde ausgewählt und Modifikationen von ihm wurden durchgeführt um den Einfluss von einigen Parametern zu untersuchen.

Lage	Randbedingungen
Einlass	$\dot{m} = 900 \text{ kg} / \text{m}^2 \text{ s}; \Delta T_{\text{sub}} = 58.2 \text{ K}$
Wand	$\dot{q} = 0.57 \times 10^6 \text{ W} / \text{m}^2$
Axis	Axialsymmetrie
Auslass	Average Static Pressure=

Tabelle 3: Randbedingungen des Grundfalles.

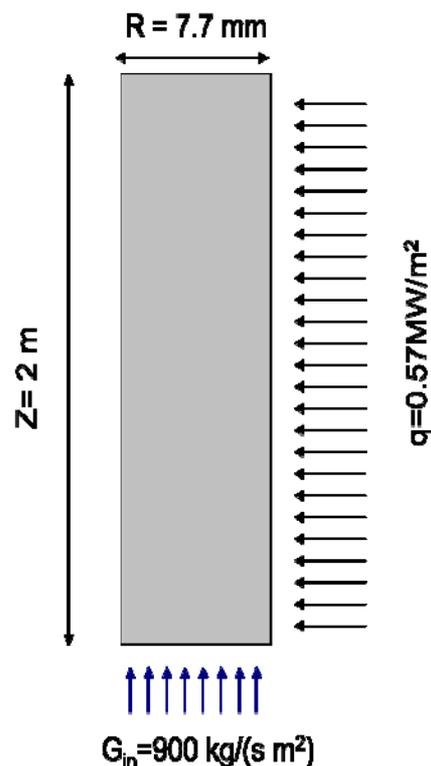


Abb. 17: Schematische Darstellung des Bartolomej-Testfalls.

Die Geometrie des Grundfalles ist ein 2 m hohes vertikales Rohr, dessen Durchmesser 15.4 mm breit ist. In diesem Fall tritt in das Rohr 58.2K unterkühltes Wasser ein. Die Massenstromdichte ist $900 \text{ kg}/\text{m}^2 \text{ s}$ „, und die Wärmestromdichte an der erhitzten Wand ist $0.57 \times 10^6 \text{ W}/\text{m}^2$. Das Druckniveau für diese Untersuchung ist auf 45 bar gesetzt. Diese

Werte charakterisieren die Randbedingungen des Falles (Tabelle 3). Um Rechenzeit zu sparen, wurde Axialsymmetrie vorausgesetzt und nur ein Sektor des Rohres von einem Grad Öffnung berechnet (quasi-zweidimensional).

Eine Gitternetzhierarchie wurde erstellt, um den CFD Best Practice Guidelines zu folgen und die erzielten Lösungen auf Gitterkonvergenz zu untersuchen. In allen Fällen wurden gleichförmige Gitternetze verwendet, die systematisch verfeinert wurden. Das größte Gitternetz beinhaltet 20x150 Knoten (Grid 1), und das Feinste 80x600 Knoten (Grid 3). Die entsprechenden y^+ Werte sind in der Tabelle 4 zusammengefasst.

Gitternetz	Knoten	y^+
Grid 1	20x150	264
Grid 2	40x300	133
Grid 3	80x600	69

Tabelle 4: Gitternetzhierarchie (Anzahl der Knoten und y^+).

3.3.4.3 Das Modell-Setup der CFD-Simulation

Die in dem Setup eingestellten wichtigsten numerischen Parameter sind die folgenden:

- Advektionsschema: High resolution
- Grace Modell für die Widerstandskraft
- Tomiyama Modell für die Auftriebskraft
- Favre Averaged Drag Modell für die turbulente Dispersionskraft
- Antal Modell für die Wandkraft
- Sato Modell für die Modellierung der blaseninduzierte Turbulenz
- RPI Modell für die Wandsiedemodellierung
- Stationäre Simulation

Wie im vorherigen Kapitel beschrieben, spielen die Zwischenphasenkräfte eine wichtige Rolle in einer Mehrphasenströmung. Aus diesem Grund werden die Widerstandskraft $\vec{F}_{\alpha\beta}^D$, die Auftriebskraft $\vec{F}_{\alpha\beta}^L$, die Wandkraft $\vec{F}_{\alpha\beta}^{WL}$ und die turbulente Dispersionskraft $\vec{F}_{\alpha\beta}^{TD}$ berücksichtigt, und nur die Kraft der virtuellen Masse $\vec{F}_{\alpha\beta}^{VM}$ wird vernachlässigt.

3.3.4.4 CFD-Simulationsergebnisse und Vergleich mit dem Experiment

Die wesentlichsten für diese Fälle zu analysierenden physikalischen Größen sind die Temperatur und der Dampfgehalt im Strömungsgebiet. In der Abb. 18 sind die Grundfall-Ergebnisse dargestellt. In der ersten Reihe sieht man die Temperaturverteilungen, die auf den drei verfeinerten Gitternetzen berechnet wurden. In allen Fällen gibt es einen erhitzten Bereich in der Nähe der Wand und eine fortschreitende Aufheizung des Wassers in axialer Richtung. Qualitativ gesehen sind die Ergebnisse sehr ähnlich, und nur eine kleine Verzögerung in der Aufheizung ist auf dem feinsten Gitternetz festzustellen.

In der zweiten Bilderfolge sind die korrespondierenden Ergebnisse für den Dampfgehalt dargestellt. Je feiner das Gitternetz, desto größer ist der Dampfgehalt in unmittelbarer

Wandnähe. Trotzdem ist eine deutliche monotone Konvergenz von Gitternetz 1 zu Gitternetz 3 zu erkennen.

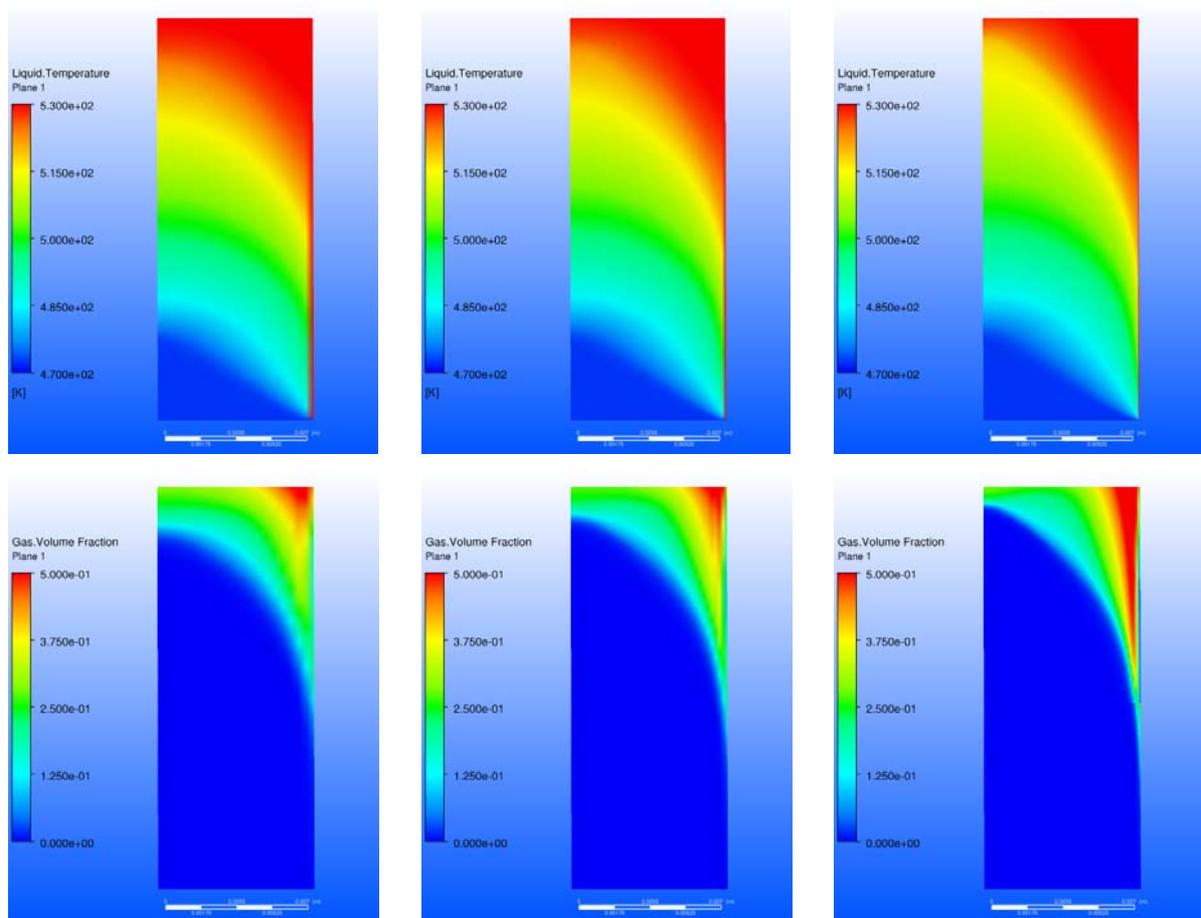


Abb. 18: Links: Grid 1; Mitte: Grid 2; Rechts: Grid 3. Oben: Wassertemperatur; Unten: Dampfgehalt.

Dieses Verhalten kann auch quantitativ analysiert werden. Der gesamte Dampfgehalt im Strömungsgebiet ist in Tabelle 5 gezeigt, wo eine Tendenz zu 0.082 Dampfvolumenteil festzustellen ist.

Gitternetz	Dampfgehalt
Grid 1	0.078
Grid 2	0.078
Grid 3	0.082

Tabelle 5: Dampfgehalt für die drei verfeinerten Gitternetze.

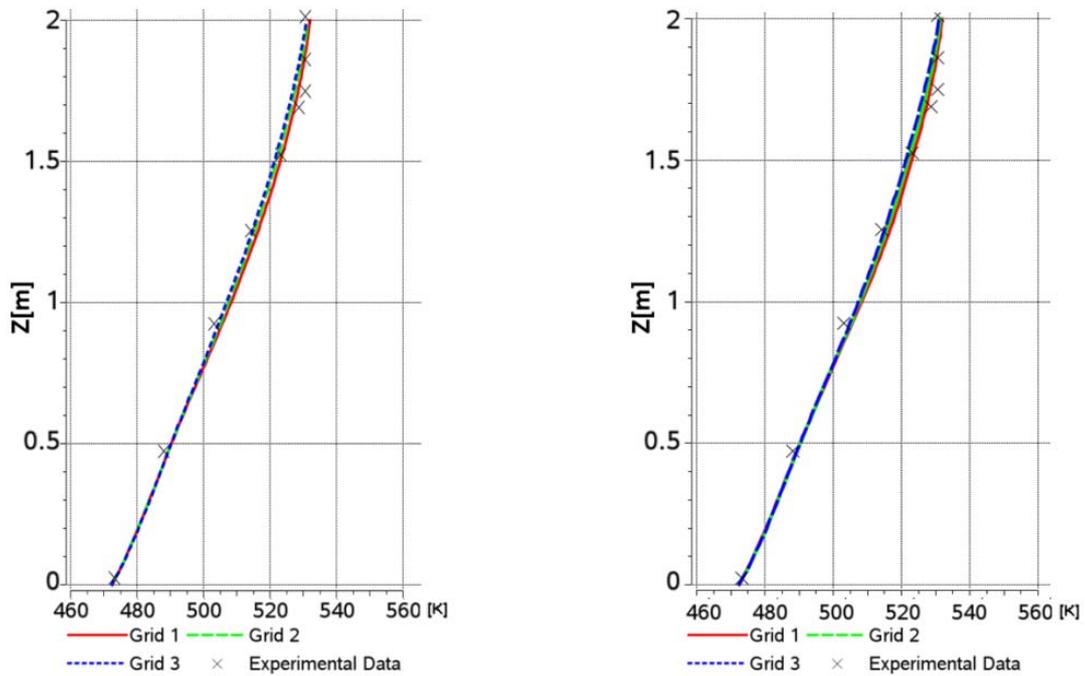


Abb. 19: Links: Durchschnittliche Temperatur auf verschiedenen Höhen mit verschiedener Wandkraftmodellierung. Links: Antal Modell. Rechts: Ohne Wandkraft.

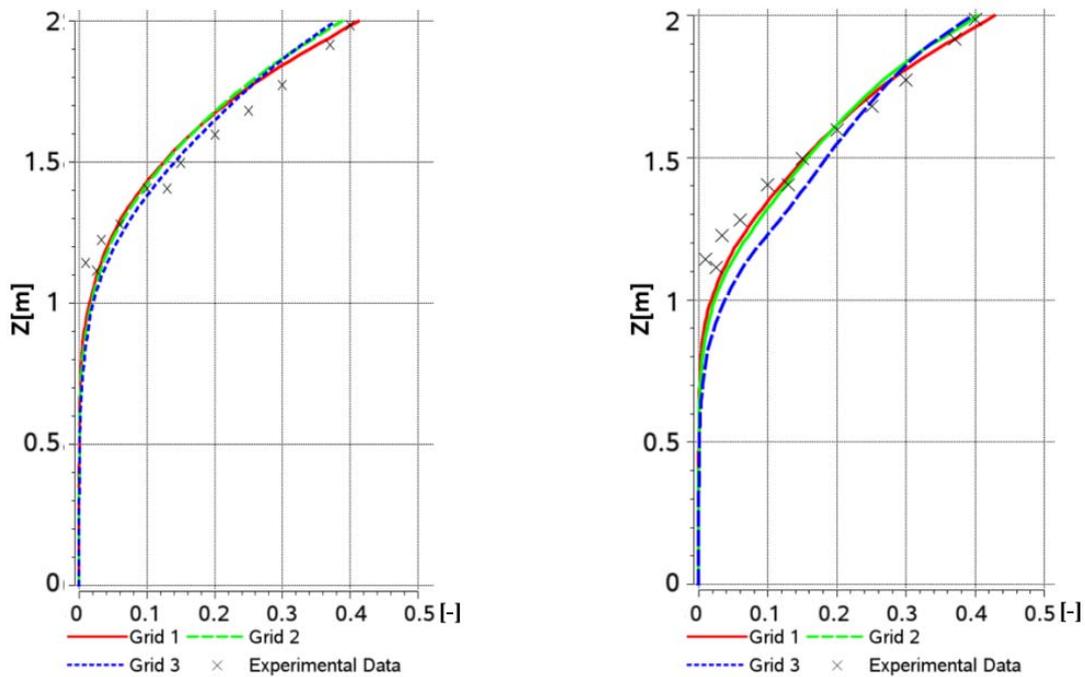


Abb. 20: Durchschnittlicher Dampfgehalt auf verschiedenen Höhen mit verschiedener Wandkraftmodellierung. Links: Antal Modell. Rechts: Ohne Wandkraft.

Die Gitternetzunabhängigkeit wurde mittels Temperaturprofilen und Dampfgehaltsprofilen untersucht. In Abb. 19 beinhaltet die Graphik auf der linken Seite die durchschnittlichen Temperaturen des Wassers auf verschiedenen Rohrhöhen. Die drei Profile liegen fast übereinander, und die Übereinstimmung mit den experimentellen Werten ist sehr gut. Auf der linken Seite der Abb. 20 sieht man den durchschnittlichen Dampfgehalt auf verschiedenen Höhen. Wieder sind die drei aus den Simulationsergebnissen auf 3 Gitternetzen resultierenden Kurven sehr ähnlich. Obwohl die Übereinstimmung mit den Experimenten hier nicht so gut wie bei den Temperaturen ist, ist diese immer noch sehr zufriedenstellend.

Diese Ergebnisse stammen aus einer ersten Reihe von durchgeführten Simulationen. In Folge wurden einige Parameter aus dem Grundfall verändert, damit ihr Einfluss untersucht werden konnte. Diese Parameter waren die Wandkraftmodellierung, die Wärmestromdichte und der Durchmesser der Geometrie entsprechend den Experimenten von Bartolomej.

Bezüglich der Wandkraftmodellierung wurden drei verschiedene Einstellungen angewendet: das Antal Modell (Grundfall), das Tomiyama Modell und der Verzicht auf die Wandkraft. Wieder wurden die Best Practice Guidelines in allen Fällen beachtet, und die drei verfeinerten Gitternetze zur Untersuchung verwendet (Abb. 19, rechts). In der Abb. 21 sind die Ergebnisse für den Grundfall (Antal Modell), für den Fall ohne Wandkraft und den Fall mit dem Tomiyama Modell dargestellt. Die Ergebnisse entsprechen den Simulationen auf dem dritten Gitternetz und es ist der spezifische Dampfgehalt dargestellt. Der wurde wie folgt berechnet:

$$\chi = \frac{r_g h_g + r_l h_l}{h_{g,sat} - h_l} \quad (3.2)$$

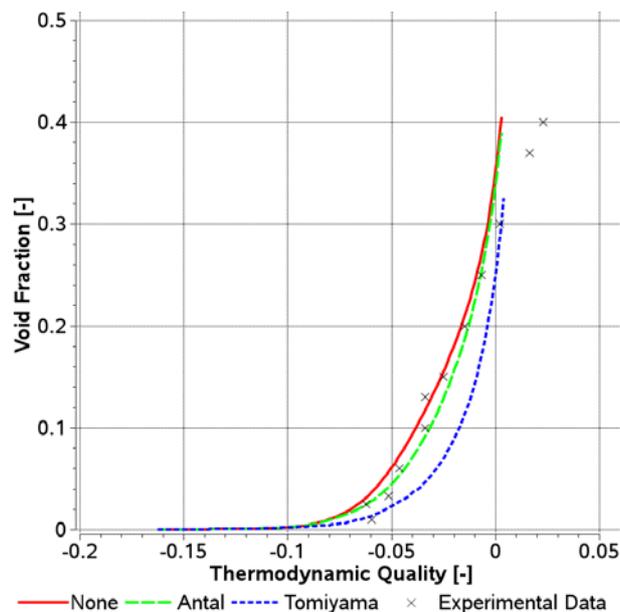


Abb. 21: Spezifischer Dampfgehalt für verschiedene Wandkraftmodellierung.

Die Abweichung von den experimentellen Werten ist bei den mit dem Tomiyama Modell berechneten Simulationen am größten. Am besten stimmen die Ergebnisse mit dem Modell von Antal mit den experimentellen Werten überein, obwohl im Vergleich zu der Simulation ohne Berücksichtigung der Wandkraftmodellierung keine große Veränderung zu sehen ist.

Der zweite modifizierte Parameter ist die Wärmestromdichte. Der Grundfall wurde mit einem Wert von $\dot{q} = 0.57 \text{ MW/m}^2$ berechnet (rote Kurve in Abb. 22). Eine niedrigere Wärmestromdichte wurde auch untersucht und mit den entsprechenden Experimenten verglichen. Der spezifische Dampfgehalt stimmt sehr gut auch für die veränderte Wärmestromdichte mit den Werten von Bartolomej überein. Im Vergleich sagt die numerische Lösung für die niedrigere Wärmestromdichte auch einen niedrigeren spezifischen Dampfgehalt voraus (grüne Kurve in Abb. 22), was im Vergleich mit dem Grundfall auch zu erwarten ist.

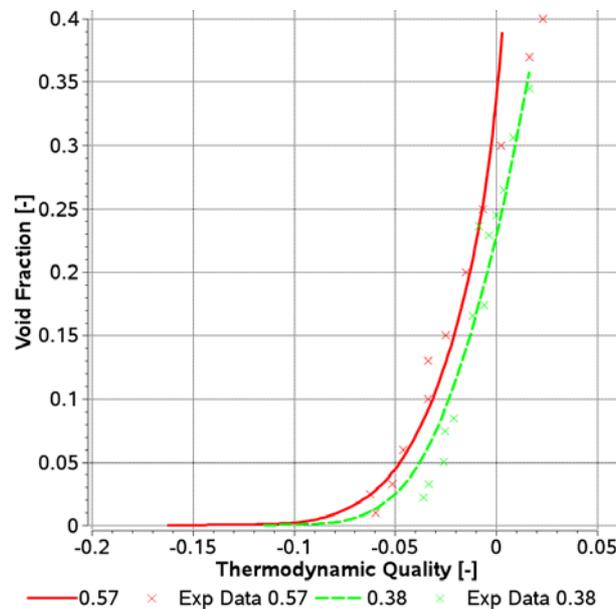


Abb. 22: Spezifischer Dampfgehalt für verschiedene Wärmestromdichten an der Wand.

Die dritte untersuchte Konfiguration nimmt Bezug auf den Einfluss des Rohrdurchmessers. In diesem Fall wird ein neuer deutlich größerer Rohrdurchmesser angenommen: $D = 24 \text{ mm}$. Die neuen Randbedingungen, die für diesen Fall angewendet wurden, sind in der Tabelle 6 zusammengefasst.

Lage	Randbedingungen
Einlass	$\dot{m} = 900 \text{ kg/m}^2\text{s}$, $\Delta T_{sub} = 24.87 \text{ K}$
Wand	$\dot{q} = 0.38 \times 10^6 \text{ W/m}^2$
Axis	Axialsymmetrie
Auslass	Average Static Pressure= 45 bar

Tabelle 6: Randbedingungen des modifizierten Testfalles.

Für diese Analyse wurde sogar ein viertes Gitternetz verwendet. Eine analoge Prozedur wurde nach den CFD Best Practice Guidelines und für verschiedene Wandkraftmodellierungen durchgeführt.

Die Abb. 23 zeigt das Temperaturfeld und den Dampfgehalt für die neue Geometrie, wobei wiederum die Ergebnisse von drei Gitternetzen dargestellt sind. Die gezeigten Simulationsergebnisse wurden mit dem Antal Wandkraftmodell berechnet.

Die Ergebnisse sind ähnlich, wie schon bei dem kleineren Rohr beobachtet, und mit dem Gitternetz 3 steht man unmittelbar vor der gitternetzunabhängigen Lösung. Dieses Mal ist auch die Aufheizung des Wassers bei dem feinsten Gitternetz etwas verzögert.

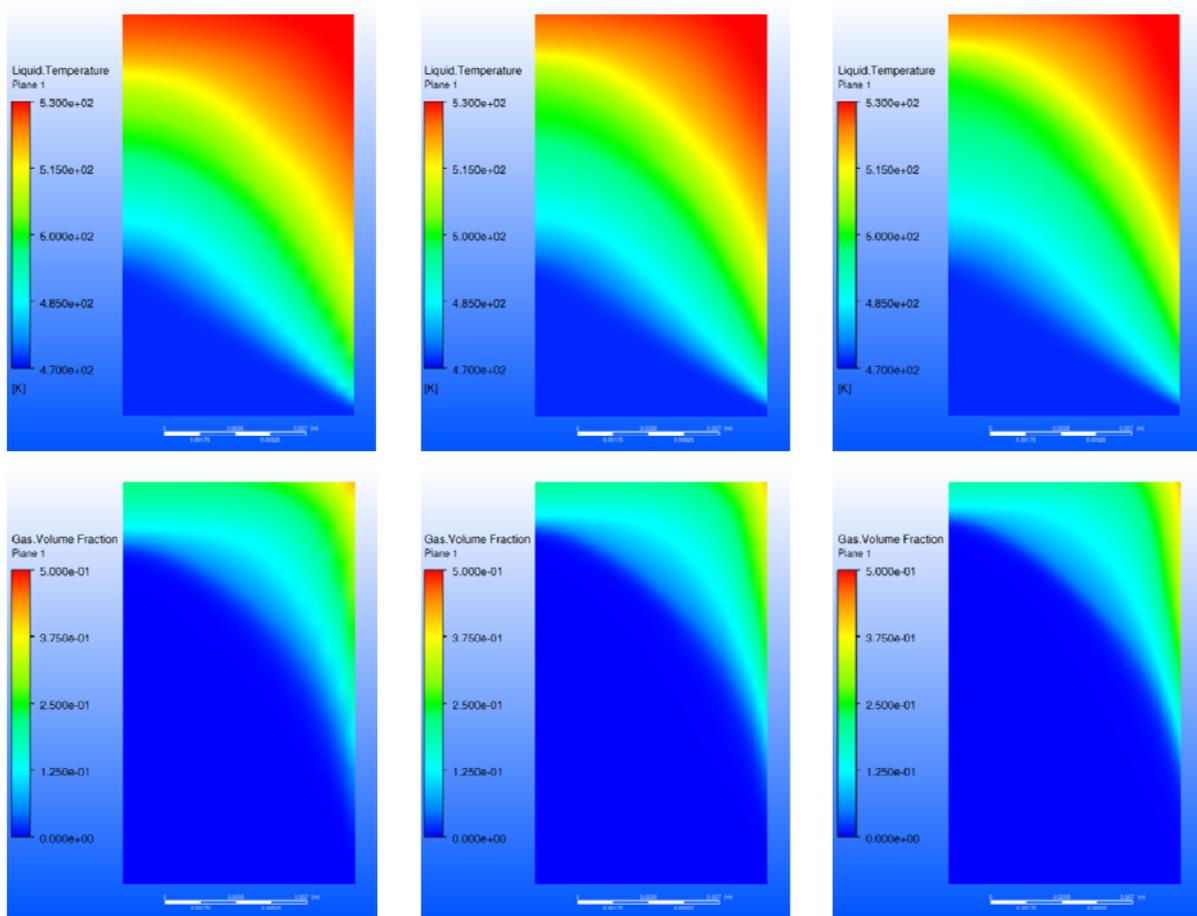


Abb. 23: Links: Grid 1; Mitte: Grid 2; Rechts: Grid 3. Oben: Wassertemperatur-Verteilung; Unten: Dampfgehalt.

In Abb. 24 ist der spezifische Dampfgehalt für alle Gitternetze mit den zwei untersuchten Wandkraftmodellierungen gezeigt. Die durchgezogenen Kurven entsprechen den Ergebnissen ohne Wandkraft, und die gestrichelten Kurven den mit dem Antal Modell berechneten Ergebnissen. Für diese neue Geometrie ist die Nutzung des Antal Modelles deutlich

vorteilhafter. Die Übereinstimmung der numerischen Ergebnisse mit den Experimenten ist dabei am höchsten und die Gitternetzunabhängigkeit ist offensichtlich am größten.

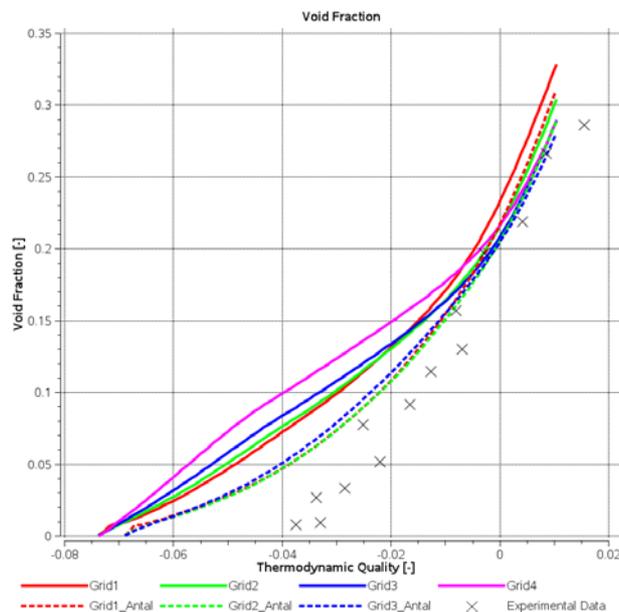


Abb. 24: Dampfgehalt für verschiedene Gitternetze und Wandkraftmodellierungen.

3.3.4.5 Schlussfolgerungen aus den Testfalluntersuchungen

Durch verschiedenartige Konfigurationen eines kreisförmigen Rohres mit überhitzten Wänden wurde die Anwendbarkeit und Genauigkeit des implementierten RPI-Wandsiede-Modelles für Wandsiedeanwendungen bei höheren Drücken bewiesen. Der Vergleich der numerischen Ergebnisse mit den von Bartolomej veröffentlichten Werten ist in allen Fällen gut, und man konnte sowohl die Temperatur der Fluide als auch den Dampfgehalt mit hoher Genauigkeit berechnen. Variationen der Wärmestromdichte oder Rohrgeometrie führten in den CFD-Simulationen zu den gleichen trendhaften Veränderungen wie in den Experimenten, wobei auch die quantitative Übereinstimmung in den beobachtbaren Veränderungen der Messgrößen als gut zu bewerten ist.

3.4 Polydisperse Mehrphasenströmungen mit Volumen Kondensation

Die Erweiterung des MUSIG-Modelles (wie in Sektion 2.1.4.2 beschrieben) wurde besonders für die Lösung der Anwendungen mit Kondensation oder Verdampfung in polydispersen Mehrphasenströmungen entworfen. Die Implementierung wurde zunächst an sehr einfachen Strömungskonfigurationen verifiziert, um mögliche Implementierungsfehler zu identifizieren. Hierzu wurde ein kurzes viereckiges Rohr mit nur zwei Blasenklassen untersucht. Der Vorteil dieses einfachen Falles war, dass in diesem Fall eine analytische Lösung zum Vergleich zur Verfügung stand. Verschiedene Einstellungen wurden verwendet (Lifante, et al., 2009): feste Stoffübertragungsrate (Kondensation und Verdampfung), Phase Change Model, homogene/inhomogene MUSIG-Modell-Simulationen usw. In allen Fällen stimmte die numerische Lösung mit der analytischen Lösung bis auf sehr kleine numerische Fehler

überein. Um diese Arbeit näher zu dokumentieren, sind die Ergebnisse von einem dieser Tests dargestellt (Lifante, et al., 2009). Die Size Fraction für eine Blasenklasse und für den gesamten Dampfgehalt im Strömungsgebiet sind in den Diagrammen über der Zeit dargestellt. Die schwarzen Symbole entsprechen der analytischen Lösung von diesem Kondensationsfall. Die numerischen Ergebnisse stimmen perfekt für beide Variablen mit ihnen überein.

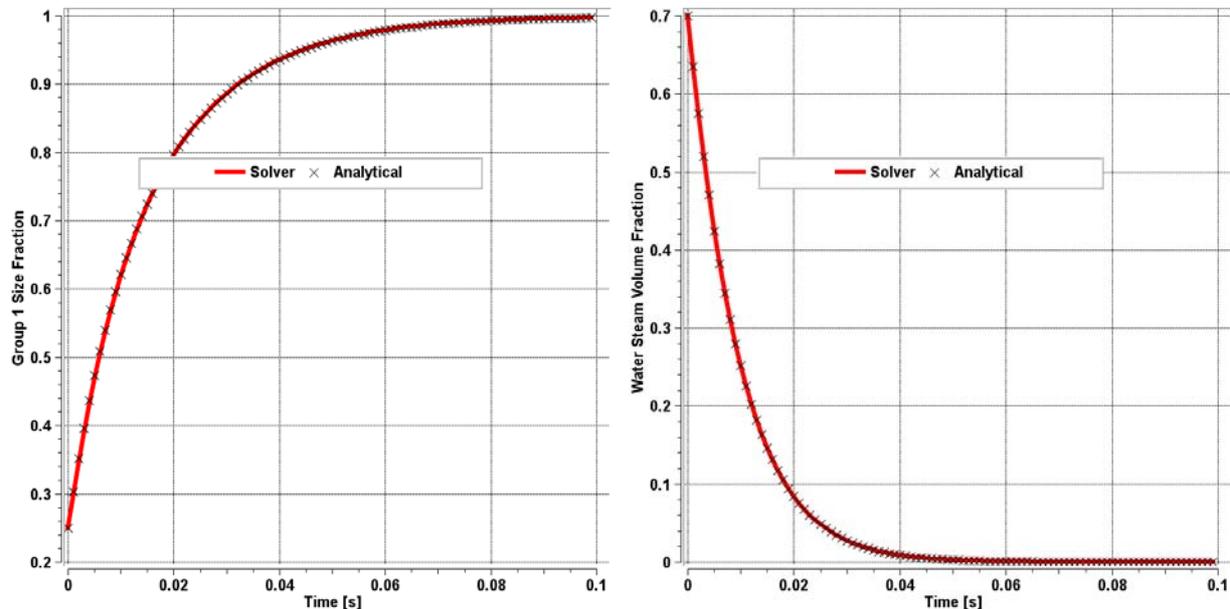


Abb. 25: Verifikationsfall. Links: Transiente Entwicklung der Size Fraction über der Zeit; Rechts: Transienter Dampfolumanteil.

Nach diesen ersten Untersuchungen mit einer kleinen Geometrie und vereinfachten Einstellungen/Randbedingungen sollte in Folge ein geeigneter Testfall gewählt werden, um die neue Implementierung gegenüber experimentellen Daten und unter anwendungsrelevanten Bedingungen validieren zu können. Dies ist z.B. der Fall, wenn man Rohrleitungen grösseren Durchmessers untersucht, durch welche unterkühltes Wasser fließt und gleichzeitig Dampf eingespeist wird. Detaillierte experimentelle Untersuchungen sind erforderlich, um die Daten mit den numerischen Ergebnissen vergleichen zu können und eine kompetente Validierung durchzuführen. Solche Experimente wurden in der Versuchseinrichtung des Projektpartners FZ Dresden-Rossendorf realisiert und ANSYS Germany für die Validierungsuntersuchungen zur Verfügung gestellt. Die TOPFLOW Einrichtung war für dieses Ziel gut geeignet. An dieser Anlage wurden in der Vergangenheit schon viele Experimente durchgeführt, die für die Validierung anderer Module von ANSYS CFX verwendet wurden (Frank, 2006) (Frank, et al., September 2006). Trotzdem ist diese Anwendung sehr kompliziert, und um Erfahrung mit dieser Anwendung sammeln zu können, wurden im Vorfeld der eigentlichen TOPFLOW-Versuche zunächst Vorausrechnungen an einer vereinfachten Geometrie durchgeführt. Hierfür wurde die Geometrie der früher am FYD betriebenen Versuchsanlage MT-Loop verwendet. Ihre Abmessungen sind deutlich kleiner, was die Simulationszeiten in der Testphase verkürzt, und auch die Menge des eingespeisten Dampfes wurde in diesen ersten Testsimulationen deutlich verringert. Trotzdem ist die Anwendung in Bezug auf die relevanten physikalischen Phänomene noch vergleichbar und die dabei gesammelten Erfahrungen in der CFD-Simulation konnten später

für die Validierungsuntersuchung am eigentlichen TOPFLOW-Versuch gewinnbringend eingesetzt werden.

3.4.1 Erste CFD-Setup-Untersuchungen an der MT-Loop-Geometrie

Die MT-Loop Geometrie besteht auch aus einem vertikalen Rohr. Allerdings sind sein Durchmesser und die Höhe deutlich kleiner als in dem TOPFLOW-Fall. Das ermöglicht uns, ein geeignetes Setup für eine Volumenkondensations-Anwendung schneller zu erstellen und mit geringerem numerischen Aufwand zu berechnen. Dies erlaubt es, mit den numerischen und physikalischen Parametereinstellungen an einem Fall zu experimentieren, dessen Physik sehr ähnlich ist, dessen Rechenzeiten aber deutlich geringer ausfallen.

Der Durchmesser der MT-Loop Versuchseinrichtung ist 25mm groß, und seine Höhe beträgt 3m. Das benutzte Gitternetz beinhaltet zunächst 32000 Gitterelemente, wobei die Gitternetzauflösung aus vorangegangenen und an den CFD Best Practice Guidelines orientierten Untersuchungen an adiabaten Luft-Wasser-Gemischen in MT-Loop resultierte. Der Dampf wurde durch den ganzen Einlassquerschnitt des Rohres homogen verteilt eingespeist, was die Simulationsaufgabe zunächst gegenüber dem später zu untersuchenden TOPFLOW-Experiment deutlich vereinfacht. Auch die Lehrrohrgeschwindigkeit des Dampfes wurde zunächst deutlich niedriger als in dem TOPFLOW-Test angenommen: die Dampflehrrohrgeschwindigkeit betrug 0.1 m/s, und die Wasserlehrrohrgeschwindigkeit war zehnmal größer (10 m/s) als in dem TOPFLOW-Experiment. Alle diese Faktoren führen zu größeren möglichen Integrationszeitschritten, weniger notwendigen Iterationen in der numerischen Simulation und damit zu deutlich kürzeren Rechenzeiten während der Setup-Entwicklung.

Trotzdem waren die Haupteigenschaften der Anwendung in dem Setup bereits enthalten. Sowohl die in dem Abschnitt 2.1.3 beschriebenen IAPWS-Stoffdaten als auch das Thermal Phase Change Model (ANSYS Inc., 2009) wurden verwendet. Die Rolle der verschiedenen Zwischenphasenkräfte konnte dadurch bereits an diesem Testfall untersucht werden.

Die Simulationen wurden transient ausgeführt. Der Durchmesser der Blasen wurde in diesen Simulation zunächst noch lokal monodispers berechnet, also noch nicht unter Verwendung des inhomogenen MUSIG-Modells. Je nach lokal vorliegendem Dampfvolumenteil in einer Gitterzelle berechnet man einen repräsentativen Blasendurchmesser, der die Blasen in dieser Zelle charakterisiert. Dabei wurde angenommen, dass die Blasenanzahldichte während der ganzen Simulation und im gesamten Strömungsgebiet konstant bleibt. Den Autoren ist bewusst, dass es sich dabei um eine sehr grobe Näherung handelt, da insbesondere die lateral wirkende Auftriebskraft zu einer lokalen Entmischung oder Aufkonzentration von Blasen führt. Dieser Effekt kann jedoch nicht ohne ein mit den Bewegungsgleichungen gekoppeltes Populationsbilanzmodell erfasst werden. Unter diesen sehr vereinfachenden Annahmen kann die Blasenanzahldichte auf Grundlage der vorgegebenen Inletparameter und in Folge der lokale Blasendurchmesser dann wie folgt berechnet werden:

$$N_p = \frac{6 r_d|_{inlet} d_p|_{inlet}^3}{\pi}, d_p = \sqrt[3]{6 r_d / N_p \pi} \quad (3.3)$$

Dieses Verfahren wurde anfänglich auch in den TOPFLOW Simulationen verwendet und später dann mit den erzielten Ergebnissen unter Verwendung der entwickelten MUSIG-Modell-Erweiterung verglichen.

Als Beispiel der erzielten Ergebnisse ist der Dampfvolumenteil für die MT-Loop Geometrie im stationären Zustand in Abb. 26 dargestellt. Sein Maximum liegt im Zentrum des Rohres, und die fortschreitende Dampfkondensation entlang des Rohres ist klar zu erkennen. Diese Arbeiten dienen im Wesentlichen zu numerischen Parameter- und Konvergenzstudien. Mit dem so entwickelten CFD-Setup und mit den ermittelten optimalen Solver-Einstellungen wurden die Untersuchungen an dem TOPFLOW-Testfall fortgeführt.

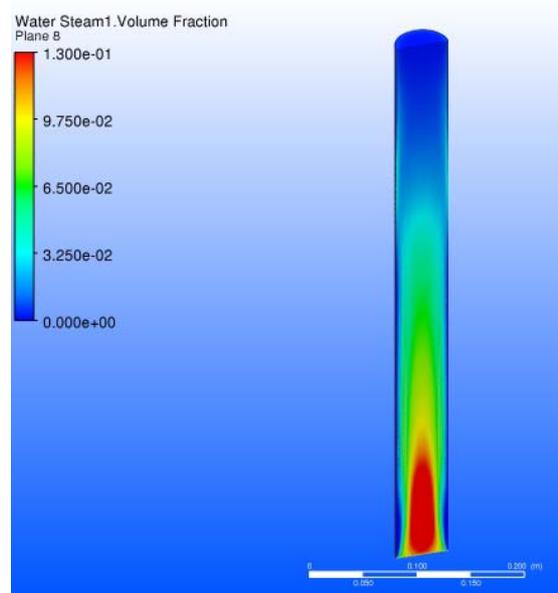


Abb. 26: Berechneter Dampfvolumenteil aus einer stationären CFD-Simulation des konstruierten MT-Loop-Testfalls.

3.4.2 TOPFLOW: Das Kondensationsexperiment nach Lucas & Prasser

Die Validierung des inhomogenen MUSIG-Modells unter Verwendung der Erweiterung für Strömungen mit Wärme- und Stoffübergang basiert auf den Experimenten von Lucas und Prasser (Lucas, et al., 2007) an der TOPFLOW-Versuchseinrichtung. Dieser Fall wurde aus zwei Gründen ausgewählt: zum einen wegen der Komplexität der untersuchten Physik und der Passfähigkeit des Experiments mit dem angestrebten Modell-Validierungsziel und zum zweiten wegen der hohen Qualität der bereitgestellten experimentellen Informationen und Messdaten.

Die TOPFLOW-Versuchseinrichtung besteht aus einem vertikalen Rohr mit großem Durchmesser (DN200). Die Rohrhöhe beträgt 9 m und der exakte Innendurchmesser beträgt 195mm (Abb. 27, links). Durch 6 Gasverteilungskammern (Abb. 27, rechts unten) wird der Dampf in die Rohrströmung eingedüst. Diese Kammern beinhalten 72 1mm-Durchmesser-Düsen, oder 32 4mm-Durchmesser-Düsen. Mittels eines Wire-Mesh Sensors (Abb. 27, rechts oben) (Prasser, et al., 1998), (Prasser, et al., 2005), (Pietruske, et al., 2005) wird auf verschiedenen Höhen der Versuchseinrichtung sowohl der Dampfvolumenteil als auch die Blasengrößenverteilung gemessen. Mit der bestehenden Variabilität der Veränderung des Abstandes zwischen dem Sensor und den Kammern (respektive den Dampf-Eindüsenstellen) kann man die Entwicklung der Dampfverteilung über die gesamte Rohrhöhe beobachten. Die Strömungsstruktur wird von Blasenkoaleszenz, -zerfall und

Kondensation beeinflusst, die drei berücksichtigten Hauptkomponenten im homogenen und inhomogenen MUSIG-Modell inklusive der im Rahmen dieses Projektes vorgenommenen Modellerweiterung. Die verschiedenen Versuchs-/Messebenen sind zur Identifikation mit Buchstaben versehen. Die Ebene A weist den geringsten Abstand von Dampfinspeisung und Messebene auf, die Ebene R den größten Abstand. Die Entfernung zu den Düsen ist logarithmisch skaliert (Abb. 26, links).

Verschiedene detaillierte experimentelle Untersuchungen wurden an diesem Versuch durchgeführt. Zwei Druckniveaus (1MPa und 2MPa) wurden unter äußeren adiabaten Randbedingungen betrachtet. Die Unterkühlung des Wassers wurde in diesen Versuchen zwischen 0.7K und 6.2K variiert. Die Wasser- und Dampfrohrgeschwindigkeit blieben konstant 1m/s bzw. 0.54m/s in allen untersuchten Testfällen. Das bedeutet, dass bezogen auf den Rohrquerschnitt der mittlere Dampfgehalt dieser Experimente an der Einspeisungsstelle bei ca. 30% Dampf liegt, wobei der lokal in der Nähe der Einspeisungsstelle vorliegende Dampfgehalt 100% erreicht. Dieser Wert ist sehr hoch und stellt eine Herausforderung für eine CFD-Simulation unter Berücksichtigung der einsetzenden Dampfkondensation dar. Der Dampf wurde durch die beschriebenen zwei Arten von Düsen-Ringsystemen eingedüst. Je nach Experiment wurden 1 mm bzw. 4 mm-Durchmesser-Düsen verwendet.

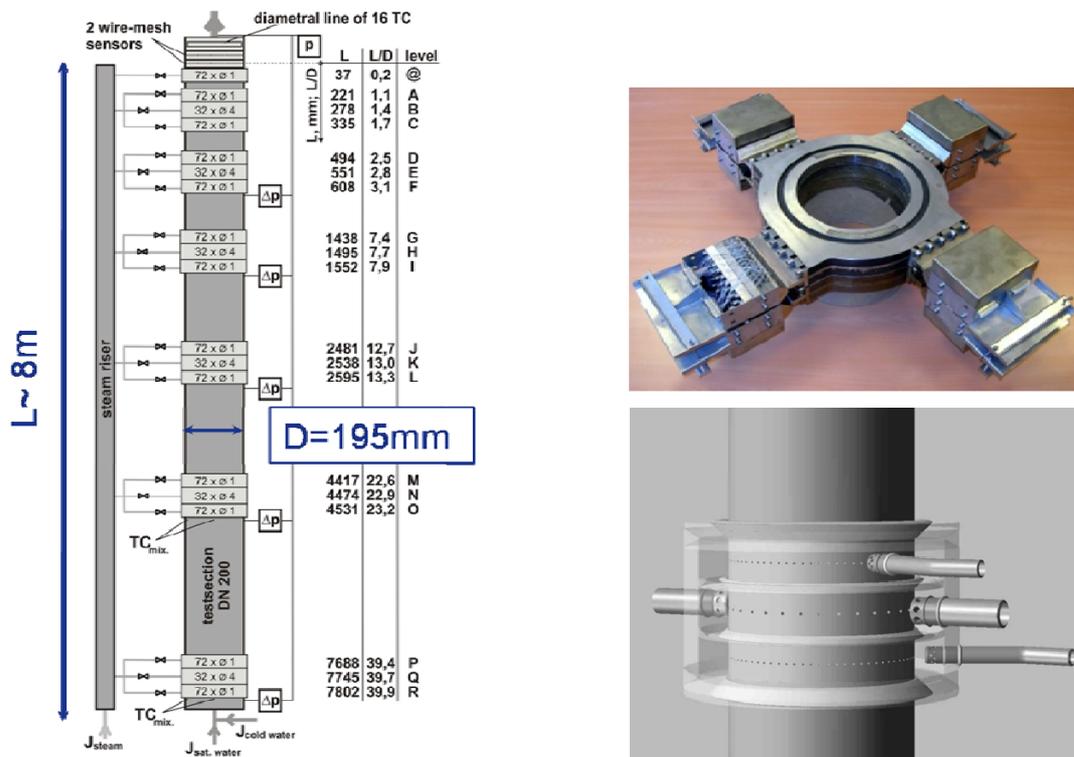


Abb. 27: Links: Schematische Darstellung der TOPFLOW-Versuchseinrichtung. Rechts oben: Wire-Mesh Sensor (WMS). Rechts unten: Einspeisungskammer.

3.4.2.1 Strömungsgebiet, Gittergenerierung und Randbedingungen der CFD-Simulation

Aus den verschiedenen Versuchs- und Parametereinstellungen in der Veröffentlichung von Lucas und Prasser (Lucas, et al., 2007) wurde für die Modellvalidierung der sogenannte Test

3 ausgewählt. Die Haupteigenschaften dieses Testfalls sind in der Tabelle 7 zusammengefasst.

<i>Druck</i>	2 Mpa
<i>Wasserlehrrohrgeschwindigkeit J_W</i>	1.0 m/s
<i>Dampflehrrohrgeschwindigkeit J_D</i>	0.54 m/s
<i>Wassertemperatur T_W</i>	210.5 K
<i>Dampfperatur T_D</i>	214.4 K
<i>Durchmesser der Dampfduisen an der Einspeisung D_{inj}</i>	1 mm

Tabelle 7: Die wichtigsten physikalischen Eigenschaften des Validierungstestfalls.

Die experimentellen Messwerte für radiale Dampfgehaltsverteilung und die Blasengrößenverteilungen sind für den ausgewählten Testfall in der Abb. 28 dargestellt. Auf der linken Seite sieht man den Dampfvolumenteil und auf der rechten Seite den Wert $\frac{dr_d}{dd_B}$. Dieser Parameter verbindet den Dampfvolumenteil mit den Blasen einer bestimmten Klasse. Das Integral von diesen Profilen ergibt den ganzen Dampfgehalt und charakterisiert den Anteil jeder Blasenklasse am Gesamtdampfgehalt.

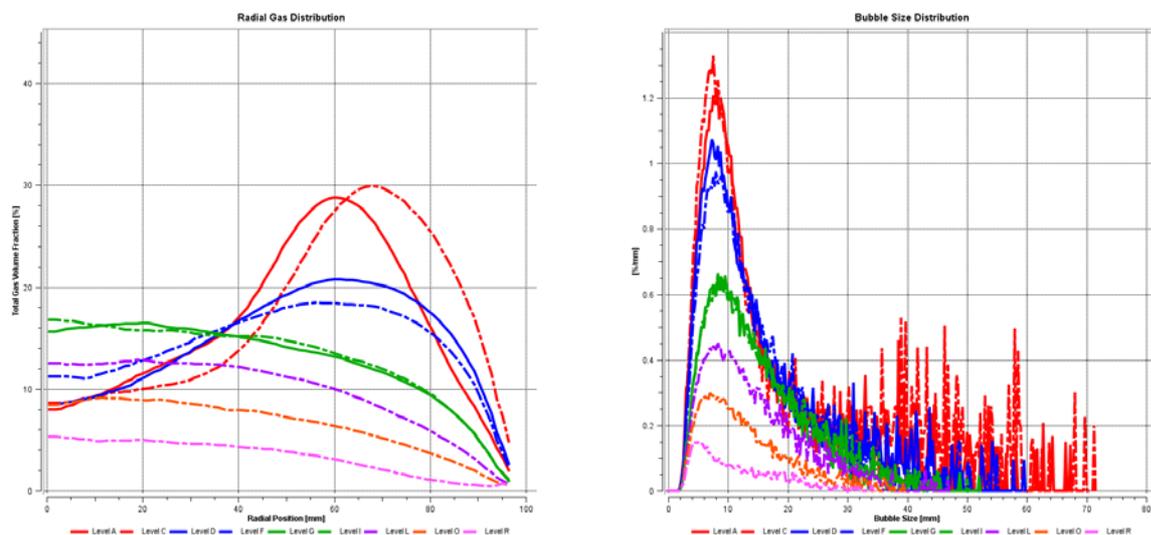


Abb. 28: Experimentelle Messwerte (FZD). Links: Radiale Verteilung des Dampfvolumenteil auf verschiedenen Höhen von TOPFLOW. Rechts: Blasendurchmesserverteilung auf verschiedenen Höhen

An den radialen Profilen des Dampfvolumentanteils erkennt man, dass dieser Testfall ein Kondensationstestfall ist: je weiter die Ebene von der Einspeisung entfernt liegt, desto niedriger ist der Dampfvolumentanteil. Die höchste Menge von Dampf konzentriert sich ca. 75 mm weit entfernt vom Zentrum des Rohres, und repräsentiert, wie erwartet, ca. 30% des Volumens. Auch bemerkenswert sind die Profile in der Abb. 28 rechts. Wie erwartet sind die Werte niedriger für die am weitesten von der Dampfeinspeisung entfernten Messebenen. Man würde allerdings denken, dass der Peak der Profile bei immer kleineren Durchmessern liegt. Das ist trotzdem nicht der Fall. Die Koaleszenz der Blasen verursacht, dass die Blasen sich trotz der Kondensation nicht verkleinern.

Das Gitternetz für den TOPFLOW-Versuchsstand wurde aus Arbeiten des vorhergehenden Projekts übernommen (Frank, 2006). Dieses enthält über 260.000 Elemente, wurde in Richtung Wand und in Richtung Düsenebene verfeinert und besteht aus einem Sechstel der Gesamtgeometrie. Aus den Erfahrungen mit polydispersen Luft/Wasser Simulationen für TOPFLOW-Versuche auf diesem Gitternetz ist bekannt, dass dieses Gitternetz für solche Anwendungen gut geeignet ist und einen guten Kompromiss im Hinblick auf Genauigkeit und Rechenzeit darstellt. Für polydisperse Luft/Wasser-Strömungen konnten mit dieser Gitternetzauflösung gitternetzunabhängige Lösungen erzielt werden. Eine Abbildung mit der Auflösung des Gitters ist in Abb. 29 zu sehen.

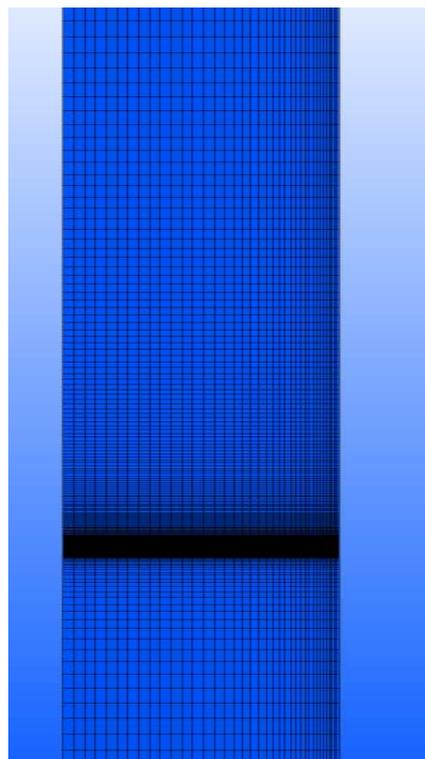


Abb. 29: Vergrößerte Darstellung des Gitternetzgebietes in der Nähe der Dampfeinspeisung.

Da nur ein Sechstel des Rohrquerschnittes bei der Gittergenerierung berücksichtigt wurde, wurden die vordere und hintere Geometrieschnittebene als Symmetrie-Randbedingungen spezifiziert. Die äußere Wand wurde als feste Wand definiert, und mittels der Wasserlehrrohrgeschwindigkeit wurde eine einphasige Einlass-Randbedingung für die

Wasserphase spezifiziert. Diese Einlassrandbedingung liegt 2m unterhalb des Dampfeinspeisungsquerschnittes, um in der Simulation an der Stelle der Dampfeinspeisung weitgehend ausgebildete Strömungsparameter vorliegen zu haben. Die verfügbaren experimentellen Werte nehmen Bezug auf Dampfgehalt und Blasendurchmesser-Verteilung, es liegen aber aus den Messungen keine Angaben über Turbulenzgrößen vor. In einer neuen Untersuchungskampagne am FZD werden auch Geschwindigkeitsprofile gemessen, die jedoch für die hier ausgewerteten Untersuchungen dieses Testfalles ebenfalls noch nicht zur Verfügung standen.

3.4.2.2 Das Modell-Setup der CFD-Simulation

Wie schon beschrieben, wurde nur ein Sechstel der Geometrie in die CFD-Simulation einbezogen. Der Dampf wurde in der Simulation durch 12 (72/6) sogenannte Source Points (ANSYS Inc., 2009) in die Geometrie eingespeist, d.h. die Düsen für die Dampfeinspeisung wurden nicht auf Gitternetzebene aufgelöst. Diese Massen- und Impulsquellen wurden in der Nähe der Wand an den Positionen der Düsen positioniert, um die nicht aufgelösten Inlet-Randbedingungen in dieser Weise zu substituieren. Obwohl im ursprünglichen Testfall der Dampf durch 1mm-Durchmesser-Düsen eingedüst wird, wurde zunächst für die ersten CFD-Simulationen angenommen, dass die 4mm-Durchmesser-Düsen zum Einsatz kamen. Die aus dem kleineren Düsendurchmesser resultierende Einspeisungsgeschwindigkeit bei gleichem Massenstrom wäre extrem hoch gewesen und würde große Konvergenzprobleme in der CFD-Simulation verursachen. Eine Abschätzung der realen Einspeisungsgeschwindigkeit der Dampfstrahlen bei 1mm Düsendurchmesser ergibt einen Geschwindigkeitswert, der nahe der Schallgeschwindigkeit liegt:

$$v_{inj} = \frac{1}{72} \frac{J_D R_{TOPFLOW}^2}{R_{inj}^2} = \frac{1}{72} 0.54 \frac{(0.195/2)^2}{(0.001/2)^2} = 285 \text{ m/s}$$

Für angenommene Düsendurchmesser von 4mm liegt der Geschwindigkeitswert für die Dampfeinspeisung um den Faktor 16 niedriger ($v_{inj}=17.8 \text{ m/s}$).

Die durchgeführte Analyse des Testfalles bestand aus mehreren Teilen. Zunächst wurden numerische Studien ausgeführt, um Schritt für Schritt ein mögliches CFD-Setup für diese komplexe Mehrphasenströmung mit Wärme- und Stoffübergang zu entwickeln, die Einstellungen des numerischen Lösungsalgorithmus zu testen und die Rechenzeit mit den zur Verfügung stehenden Ressourcen in Einklang zu bringen. Nach einer erfolgten ersten CFD-Simulation mit dem erweiterten MUSIG-Modell ergab der CFD-Experiment-Vergleich noch keine zufrieden stellende Übereinstimmung, weshalb mögliche Fehlerursachen und Verbesserungspotential im Hinblick auf die CFD-Simulation analysiert wurden. Im Ergebnis wurden in einem zweiten Schritt einige Parameter- und Modellstudien ausgeführt, die letztendlich zu einem recht zufrieden stellenden CFD-Experiment-Vergleich für diesen Kondensationstestfall führten.

In der Phase der numerischen Tests wurden zwei CFD-Setups verwendet, die starke physikalische Einschränkungen aufweisen und von denen erwartet wird, dass damit der TOPFLOW-Kondensationstestfall nicht berechnet werden kann. Zum einen wurde das CFD-Setup mit lokal monodisperser Modellierung des Blasendurchmessers nach Gl. (3.3) aus den MT-Loop-Untersuchungen auf die TOPFLOW-Geometrie übertragen. Zum anderen wurde für numerische Parameterstudien auch das Standard-MUSIG-Modell mit abgeschaltetem Wärme- und Stoffübergang auf die Testfall-Randbedingungen angewendet. Diese Untersuchungen dienten rein der Ermittlung von numerischen Lösungsparametern und sind

für einen erfolgreichen CFD-Experimentvergleich nicht relevant. Zum Teil finden sich Ergebnisse dieser Untersuchungen aber vergleichsweise in den folgenden Diagrammen.

Ziel der CFD-Simulation war jedoch eine Validierung der Erweiterung des inhomogenen MUSIG-Modells in Bezug auf Strömungen mit starkem Wärme- und Stoffübergang – in diesem Fall mit starker Volumen Kondensation. Im Folgenden wird daher hauptsächlich auf die ersten Ergebnisse dieser Simulation Bezug genommen und ein erster Vergleich mit den experimentellen Daten vorgenommen.

In den ausgeführten Simulationen wurde die Turbulenz der kontinuierlichen Phase mit dem SST Model (Menter, 1994) modelliert. Die Turbulenz der dispersen Phase wurde mit einem Nullgleichungsmodell für disperse Mehrphasenströmungen modelliert und die blaseninduzierte Turbulenz mit dem bekannten Sato-Modell beschrieben. Die berücksichtigten Zwischenphasenkräfte waren die Widerstandskraft, die laterale Auftriebskraft (lift force) und die turbulente Dispersionskraft. Für die Beschreibung der Wärmeübertragung zwischen beiden Phasen wurde die Ranz-Marschall-Korrelation verwendet.

Die Dampfphase bestand in allen polydispersen Simulationen (d.h. mit dem Standard-MUSIG-Modell ohne Wärme- und Stoffübertragung sowie mit dem erweiterten MUSIG-Modell) aus 25 Blasengrößenklassen eingeteilt in drei Geschwindigkeitsgruppen in Abhängigkeit vom Vorzeichen der lateralen Auftriebskraft nach dem Tomiyama-Modell. Der Blasenzerfall und die -koaleszenz wurden mit den Standardmodellen in ANSYS CFX simuliert, also nach den Modellen von Luo & Svendensen sowie Prince & Blanch. Ausgehend von den Ergebnissen in (Krepper, et al., 2008) wurden die Beiwerte für diese Modelle mit $F_B=0.025$ und $F_C=0.05$ ausgewählt. Das dritte Hauptphänomen, die Vergrößerung oder Verkleinerung der Blasen durch Stoffübertragung (Kondensation), wurde nur in CFD-Simulation unter Verwendung der Erweiterung des MUSIG-Modelles berücksichtigt.

3.4.2.3 CFD-Simulationsergebnisse und Vergleich mit dem Experiment

Auf die Simulationsergebnisse der CFD-Simulationen zur Einstellung der numerischen Lösungsparameter soll hier nicht weiter eingegangen werden. Daher liegt der Schwerpunkt in den folgenden Auswertungen auf den Ergebnissen der ersten CFD-Simulation unter Anwendung der neu entwickelten Erweiterung des MUSIG-Modells zur Berücksichtigung der Auswirkungen von Stoff- und Wärmeübergang auf die Blasengrößenverteilung. Die folgenden Abbildungen zeigen den Querschnitts-gemittelten volumetrischen Dampfgehalt in der TOPFLOW-Versuchseinrichtung dargestellt über der Höhe sowie radiale Profile des volumetrischen Dampfgehalts auf den verschiedenen Messebenen. Um die Visualisierung zu vereinfachen, werden die Ergebnisse der Voruntersuchungen mit dem lokal-monodispersen Ansatz für den Blasendurchmesser und mit dem Standard-MUSIG-Modell ohne Wärme- und Stoffübertragung in diesen Diagrammen ebenfalls gezeigt. In dem hier interessierenden Fall der CFD-Simulation mit der Erweiterung des MUSIG-Modells ist zunächst eine starke Ansammlung von Dampf in der Nähe der Düsen in der Abb. 30 (links) zu erkennen. Obwohl eine Überschätzung des Querschnitts-gemittelten Dampfgehalts mit dieser CFD-Simulation beobachtet werden kann (Abb. 30, rechts), ist die Übereinstimmung bei dieser Simulation qualitativ und quantitativ gesehen viel höher als mit den physikalisch zu stark vereinfachten Modellen.

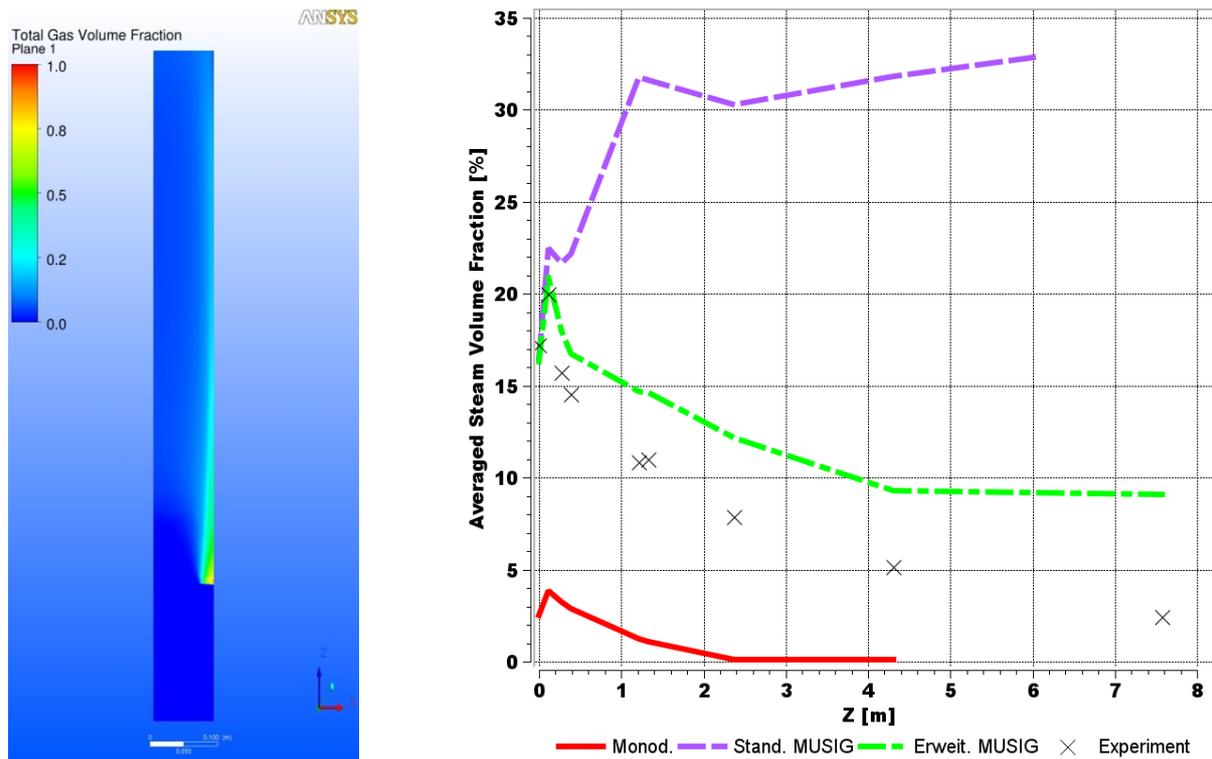


Abb. 30: Erweiterte MUSIG-Modell Simulation. Links: Verteilung des volumetrischen Dampfgehalts. Rechts: Querschnitts-gemittelter Dampf volumenanteil auf verschiedenen Höhen stromab der Dampf einspeisung.

Eine ausführliche Analyse der Dampfentwicklung in der Domain zeigt auch eine bessere Übereinstimmung mit den Experimenten auf allen Ebenen. Trotzdem liegt das Maximum in allen radialen Verteilungen des volumetrischen Dampfgehalts im Vergleich mit den experimentellen Daten noch zu sehr zur Rohrwand hin verschoben (Abb. 31) und das Maximum ist von der Amplitude her gegenüber den Messungen weit überhöht.

Der Vergleich des Verhaltens der Blasendurchmesserverteilung bezieht sich nur auf die polydispersen Simulationen. In der CFD-Simulation unter Anwendung des erweiterten MUSIG-Modells wird erstmalig eine annähernde Übereinstimmung der Blasengrößenklassenverteilung mit den Experimenten erzielt, wenngleich der überbestimmte Dampfgehalt auch hier zu einer zu hohen Amplitude in den Diagrammen für $\frac{dr_d}{dd_B}$ im Vergleich zum Experiment führt. Die Lage des Maximums und der asymptotische Trend für höhere Blasendurchmesser und höhere Messebenen wird jedoch schon recht gut vorausberechnet. So liegt das Maximum der Blasengrößenverteilung in annähernder Übereinstimmung mit dem Experiment zunächst bei ca. 9 mm Blasendurchmesser in der Nähe der Einspeisung, und die Blasen verkleinern sich bis zu den ca. 5mm Blasendurchmesser auf der Ebene O (Abb. 32).

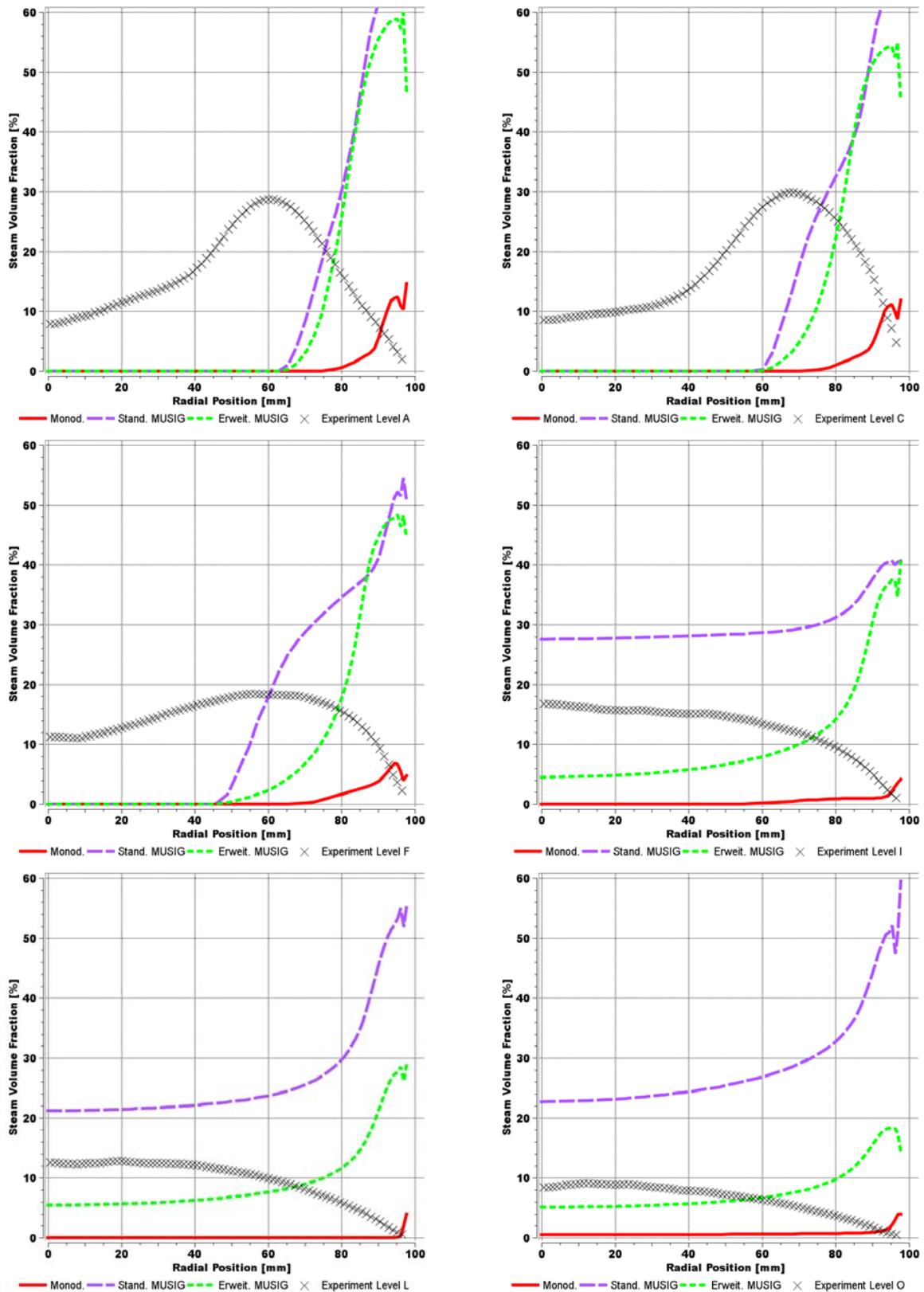


Abb. 31: Monodisperse/Standard-MUSIG/Erweiterte MUSIG Simulationen. Radiale Verteilung des Dampfvolumentanteils auf den Messebenen A, C, F, I, L, O.

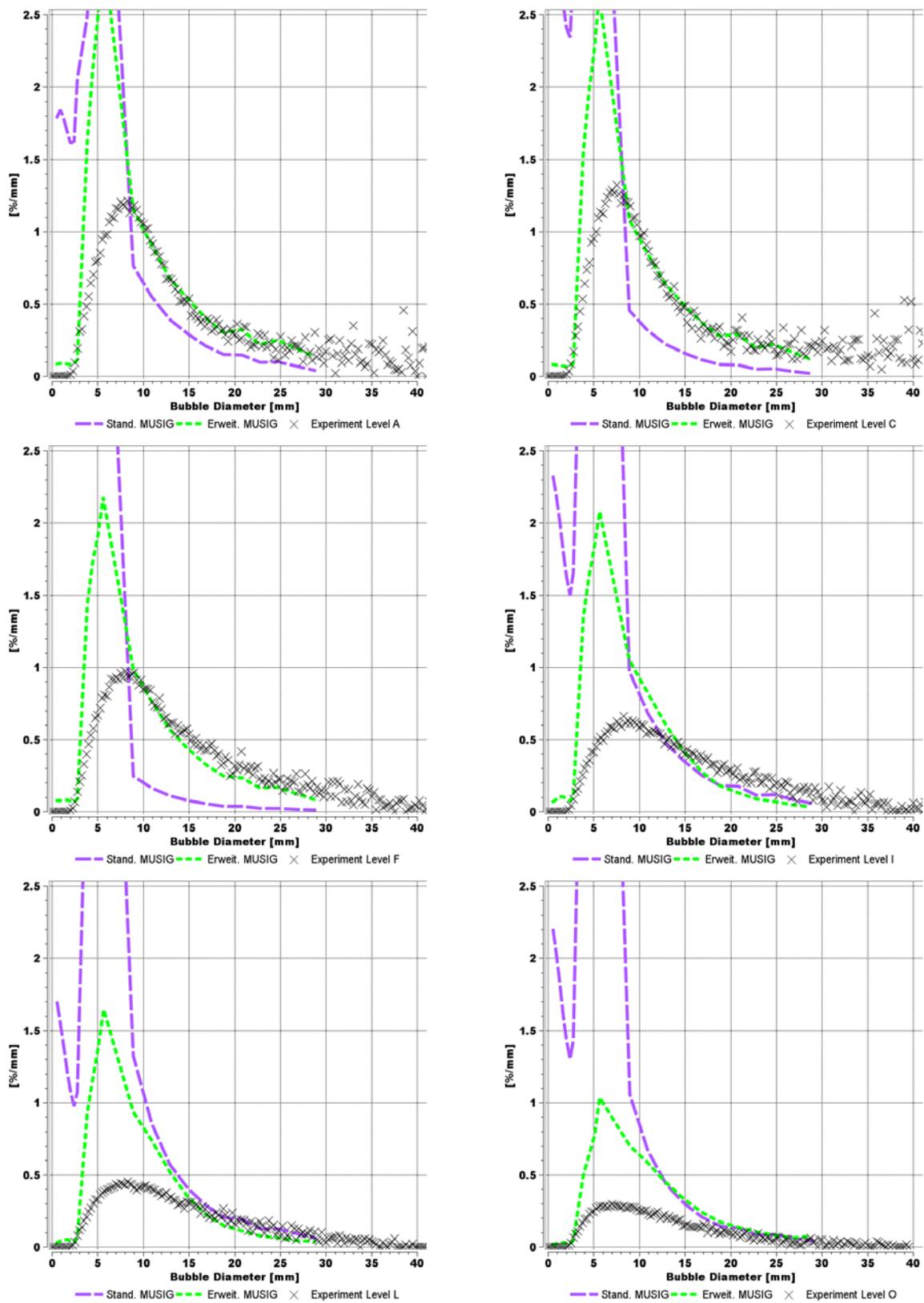


Abb. 32: Monodisperse/Standard-MUSIG/Erweiterte MUSIG Simulationen. Radiale Blasendurchmesserverteilung auf Ebene A, C, F, I, L, O.

Nach diesen ersten Simulationen wurde festgestellt, dass zwar eine erste annähernde Übereinstimmung mit der mittleren axialen Dampfgehaltsentwicklung für diesen TOPFLOW-Versuch erzielt werden konnte, jedoch weitere Verbesserungen in der CFD-Modellierung für diesen Kondensationstestfall notwendig sind, um einen zufriedenstellenderen Vergleich mit den experimentellen Daten zu erzielen. Wesentliche Punkte der Nichtübereinstimmung zwischen CFD und Experiment sind die Lage und die Amplitude des Maximums in der radialen Dampfgehaltsverteilung. Die beobachteten Maxima in den bisherigen Simulationen lagen zu sehr in Wandnähe, was darauf schließen lässt, dass in der CFD-Simulation der Dampf eine an der Wand anliegende Schicht ausbildete, die den Dampf im Wesentlichen von der unterkühlten Wasserströmung abschirmte und somit zu einer zu geringen Kondensationsrate beitrug. Wesentliche Ursache hierfür ist eine Unterschätzung des radial nach innen gerichteten Impulses der Dampfstrahlen aus der flexiblen Dampfeinspeisung, die in dieser CFD-Simulation aus den genannten Gründen nicht abgebildet werden konnte ($Ma > 0.5$ bei 1mm Düsendurchmesser mit daraus resultierenden Konvergenzproblemen des CFD-Solvers).

Aus einer Analyse der bis zu diesem Zeitpunkt erhaltenen Ergebnisse sowie auf Grund eingehender Diskussion mit den Projektpartnern vom FZD und Prof. A. Tomiyama selbst angelegentlich des Mehrphasen-Workshops im Sommer 2009 am FZD wurden die folgenden Einflussgrößen als für die noch existierenden Abweichungen von CFD und Experiment verantwortlich isoliert und für weitere Untersuchungen vorgemerkt:

- Die Lage der Massen- und Impulsquellen in unmittelbarer Wandnähe
- Die Berücksichtigung der Wandabstoßungskraft (wall lubrication force)
- Der Beiwert der turbulenten Dispersionskraft
- Die verwendete Korrelation für die Wärmeübertragung zwischen beiden Phasen
- Der in der Simulation berücksichtigte Durchmesser der Düsen

Der Einfluss aller dieser Parameter wurde untersucht und ist in der Abb. 33 dargestellt. Die grüne Kurve entspricht der schon in Abb. 30, Abb. 31, Abb. 32 analysierten ersten CFD-Simulation mit den initial gewählten Modelleinstellungen und -parametern. In der Diskussion mit den Experimentalisten vom FZD wurde festgestellt, dass im Experiment der Dampf auf der Messebene A eine Art Ring in dem gemessenen Dampfgehalt ausbildete. Ein Maximum in dieser ringförmigen Dampfgehaltsverteilung konnte dabei bei ca. einem Radius von 75 mm festgestellt werden. Aus dem gewählten CFD-Setup war klar, dass auf Grund des aus rein numerischen Gründen von 1mm auf 4mm erhöhten Düsendurchmessers für die Berechnung der Inlet-Dampfgeschwindigkeiten der radial zur Rohrmitte der TOPFLOW-Versuchsanlage gerichtete Impuls der Dampfstrahlen in den CFD-Simulationen stark unterschätzt wurde. Hierin wurde eine der Hauptursachen für die abweichende Ausbildung der Dampfschicht an der Rohrwandung gesehen. Deswegen bestand nun der erste Test aus einer Verschiebung der Massen- und Impulsquellen zu dieser aus dem Experiment bekannten Position von $r=75\text{mm}$. Im Ergebnis (braune Kurve) liegt das Maximum der radialen Dampfgehaltsverteilungen nun deutlich näher zu den Experimenten. Des Weiteren führt eine Lage dieses Maximums der Dampfgehaltsverteilung näher zur Rohrachse auch dazu, dass der eingedüste Dampf von allen Seiten von unterkühltem Wasser umströmt wird, was ebenfalls zu einer höheren – und damit besser mit dem Experiment übereinstimmenden – Kondensationsrate führt (siehe axiale Entwicklung des Dampfgehalts).

Die zweite Variation des ursprünglich verwendeten CFD-Setups bestand in der Berücksichtigung der Wandabstoßungskraft, die ebenfalls zu einer Verlagerung des

Maximums der radialen Dampfgehaltsverteilung hin zur Rohrmitte beitragen kann. Wie erwartet, wird der berechnete Dampfgehalt in Nähe der Rohrwand hierdurch weitgehend reduziert. Das in der CFD-Simulation berechnete Profil des Dampfgehaltes in der Nähe der Wand stimmt somit ebenfalls besser mit den Experimenten überein (lila Kurve). Die helle grüne Kurve entspricht einer CFD-Simulation, bei der zusätzlich der Einfluss der turbulenten Dispersionskraft vergrößert wurde. Dafür wurde der Beiwert der turbulenten Dispersionskraft von 1.0 auf 1.5 vergrößert. Dies entspricht durchaus den in der Literatur anzutreffenden Variationen und Unsicherheiten in der Formulierung dieser Kraftwirkung, wo sich je nach Autor bei Carrica, Simonin und anderen Kraftbeiwerte mit Werten von 0.5-2.0 in Bezug auf die hier verwendete mathematische Formulierung finden lassen. Diese Modellmodifikation führt zu einer weiteren Verschiebung des Dampfgehaltes in den radialen Dampfgehaltsverteilungen in Richtung Rohrmitte und in einer weiteren Abflachung des berechneten Maximums des Dampfgehaltes auf Grund der hierdurch verstärkten turbulenten Dispersion.

Die weitaus wichtigste Veränderung im angewendeten CFD-Modell-Setup bestand jedoch in einer Veränderung in Bezug auf die verwendete Korrelation für den Zwischenphasen-Wärmeübergang (blaue Kurve). Im ursprünglich eingesetzten CFD-Setup wurde die Ranz-Marshall-Korrelation verwendet, die in ANSYS CFX als Standard-Korrelation zur Verfügung steht. Diese hat jedoch bezüglich der Partikel-Reynoldszahlen einen recht eingeschränkten Gültigkeitsbereich und ist streng genommen nur für Blasendurchmesser bis zu ca. 0.5mm gültig. Auf dem Workshop Mehrphasenströmungen, der 2009 in Dresden-Rossendorf stattfand, schlug Professor Tomiyama (Tomiyama, 2009) daher eine Änderung dieser Korrelation vor, die für die in dem TOPFLOW-Versuch anzutreffenden Verhältnisse von Partikel-Reynoldszahlen und Blasendurchmessern eine verbesserte Gültigkeit besitzt. Die von Tomiyama entwickelte Korrelation lautet wie folgt:

$$Nu = 0.5Re_p^{0.8}Pr^{0.5} \quad (3.4)$$

Die aus den nachfolgend ausgeführten CFD-Simulationen resultierende blaue Kurve in den nachfolgend dargestellten Diagrammen passt mit den Experimenten im Ergebnis am besten überein. Sowohl die Form als auch das Maximum der radialen Profile der Dampfgehaltsverteilungen stimmen nun mit den Experimenten deutlich besser überein. Nur im Zentrum des Rohres ist der Dampf in den numerischen Ergebnissen unterschätzt, wobei kein physikalischer Transportmechanismus denkbar ist, der im Experiment die Dampfblasen derart schnell in die Rohrmitte hätte bringen können, dass hier über 10% Dampfgehalt bereits auf Messebene A zu messen wären. Es muss somit also auch die Möglichkeit von Messfehlern in Betracht gezogen werden.

Wie bereits diskutiert, wurden im ursprünglichen CFD-Setup zur Ermittlung der Eindüsgeschwindigkeit für die Dampfphase auf Basis des angegebenen Massenstromes zunächst 4mm Düsendurchmesser angenommen, um zu große resultierende Dampfgeschwindigkeiten und daraus resultierende Konvergenzprobleme zu vermeiden. Der TOPFLOW-Versuch wurde jedoch unter Verwendung des Düsenrings mit nur 1mm im Durchmesser messenden Düsen ausgeführt. Hierdurch wurde ein großer Teil des radial nach innen gerichteten Impulses der Dampfstrahlen aus der flexiblen Dampfeinspeisung in der CFD-Simulation nicht realisiert. Die Verschiebung der Massen- und Impulsquellen in radialer Richtung einwärts trägt diesen Gegebenheiten unter Ausnutzung der zur Verfügung stehenden experimentellen Informationen Rechnung. In einer letzten CFD-Simulation wurde nun der Düsendurchmesser von 4mm auf 1mm verkleinert, ohne dabei die Lage der Massen- und

Impulsquellen zu verändern. Auf Grund der hohen resultierenden Dampfgeschwindigkeiten an den Randbedingungen der Massen- und Impulsquellen und der dadurch notwendigen restriktiven numerischen Parameter zur Gewährleistung von Konvergenz der Lösung wurde die benötigte Rechenzeit enorm vergrößert. Zusätzlich musste eine zeitliche Rampenfunktion für den Massenstrom der Dampfphase verwendet werden, um die CFD-Simulation durchführen zu können. Mit dem somit stark vergrößerten numerischen Aufwand und der stark verlängerten Rechenzeit konnte aber letztendlich auch für diese originalen Versuchsbedingungen ein CFD-Ergebnis erzielt werden, das in den Diagrammen mit der roten Kurve eingezeichnet ist. Das Ergebnis zeigt den Einfluss des vergrößerten radialen Impulses der Dampfeinspeisung auf Grund des von 4mm auf 1mm verringerten Düsendurchmessers der flexiblen Gaseinspeisung von TOPFLOW. Die Dampfgehaltsprofile zeigen eine deutliche nach innen gerichtete Verschiebung in den Profilen und in der Lage der Dampfgehalts-Maxima. Aus Sicht der numerischen Simulation macht diese Wahl der Dampfeinspeisung die TOPFLOW-Experimente jedoch zu sehr aufwendigen Validierungsexperimenten, z.B. im Vergleich zu der über den Querschnitt verteilten und über ein Nadelsystem funktionierenden Gaseinspeisung in MT-Loop, bei der keine Einspeisungsgeschwindigkeiten von $Ma > 0.5$ auftraten.

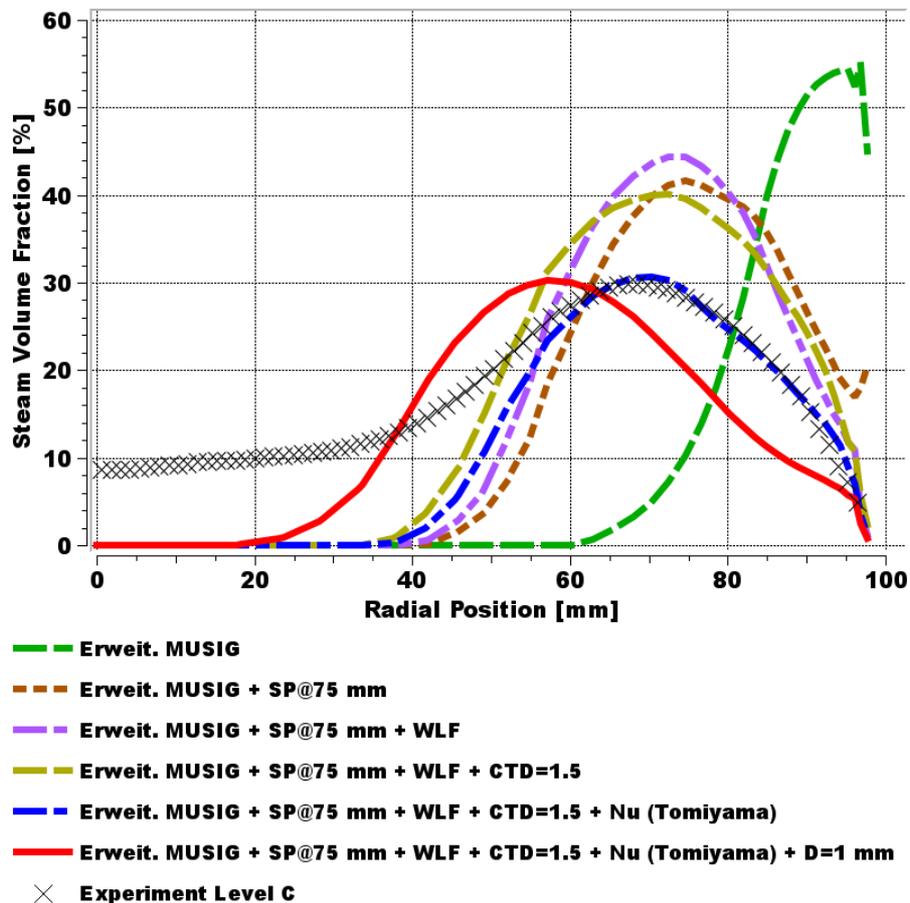


Abb. 33: Radiale Dampfverteilung auf der Messebene C in Abhängigkeit von der Variation der diskutierten CFD-Parameter.

Aus den zuvor diskutierten CFD-Setup-Variationen wurden nur die zwei am besten mit den Experimenten übereinstimmenden Fälle weiter im Detail untersucht: dies sind die mit der blauen und der roten Kurve in Abb. 27 dargestellten CFD-Simulationen. Zusätzlich wurden diese Ergebnisse mit der zuerst ausgeführten CFD-Simulation unter Verwendung des erweiterten MUSIG-Modells verglichen (grüne Kurve). Die drei CFD-Setup- und Parameter-Konfigurationen sind in der Tabelle 8 zusammengefasst und als „Config 1“ (grüne Kurve), „Config 2“ (blaue Kurve) und „Config 3“ (rote Kurve) bezeichnet.

Config 1	$D_{inj} = 4\text{mm}$	Source point @ Wall	-	-	-
Config 2	$D_{inj} = 4\text{ mm}$	Source point @ 75 mm	F_{WLF}	CTD=1.5	$Nu=2+0.15Re_p^{0.8}Pr^{0.5}$
Config 3	$D_{inj} = 1\text{ mm}$	Source point @ 75 mm	F_{WLF}	CTD=1.5	$Nu=2+0.15Re_p^{0.8}Pr^{0.5}$

Tabelle 8: Einstellungen der untersuchten CFD-Setup- und Parameter-Variationen.

In der Abb. 34 ist der Querschnitts-gemittelte Dampfgehalt auf verschiedenen Höhen von TOPFLOW für die drei untersuchten Konfigurationen dargestellt. Der zweite und der dritte Fall verhalten sich in der Nähe der Einspeisung ähnlich. Beide unterschätzen den Dampfgehalt und stimmen viel besser mit den experimentellen Ergebnissen überein als der erste Fall. Nach einem Meter Lauflänge stromab der Dampfeinspeisung weichen sie minimal von einander ab, wobei die dritte untersuchte Konfiguration den Dampfgehalt noch um ein Weniges besser vorhersagen kann.

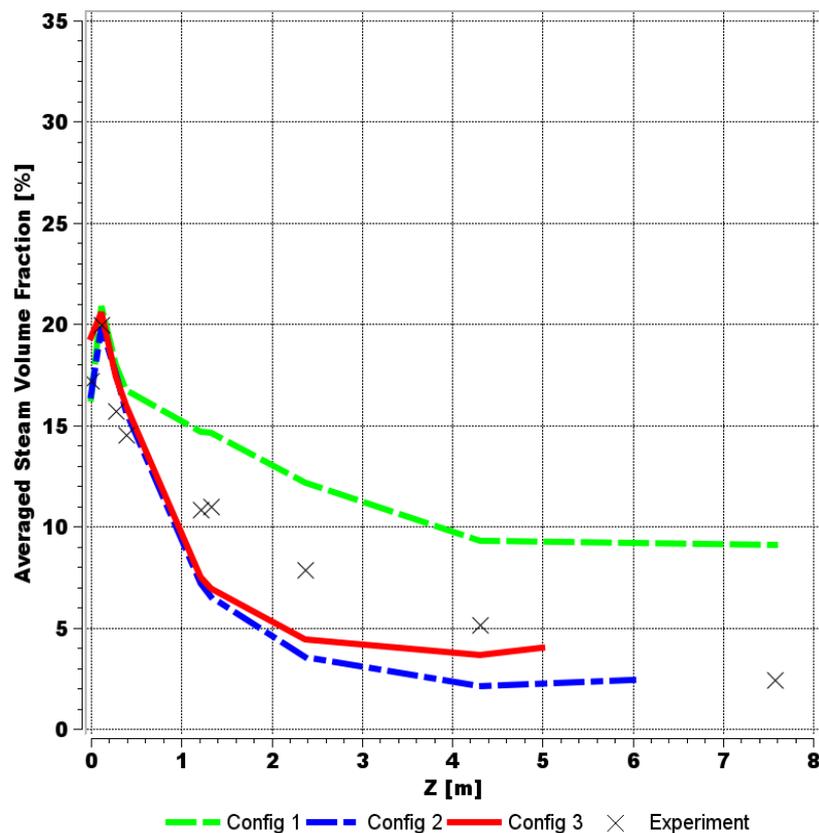


Abb. 34: Ergebnisse der drei untersuchten Variationen des ursprünglichen CFD-Setups für

den TOPFLOW-Kondensationsversuch. Querschnitts-gemittelter Dampfvolumenteil auf verschiedenen Höhen von TOPFLOW.

Die Diagramme in der Abb. 35 entsprechen den radialen Profilen der Dampfverteilung. In den sechs ausgewählten Messebenen von TOPFLOW sind die Ergebnisse mit den zweiten und dritten Parameter-Einstellungen deutlich besser zu bewerten als die mit der Konfiguration der ersten CFD-Simulation mit dem erweiterten MUSIG-Modell. Die Dampfgehaltsprofile der dritten Konfiguration haben ihr Maximum des Dampfgehaltes grundsätzlich in einer gewissen Entfernung zur Wand bzw. zeigen auf den oberen Messebenen eine weitgehende Vergleichmäßigung in der radialen Dampfgehaltsverteilung. Gleiches ist für die experimentellen Daten festzustellen. Der durch die dritte Konfiguration vorausberechnete Dampfgehalt liegt dabei höher im Vergleich zur zweiten Konfiguration, was auch der Aussage von Abb. 34 entspricht. Zu bemerken ist auch bei diesen Ergebnissen, dass die Dampfgehaltsverteilung in der Nähe der Einspeisung in den Ergebnissen mit Konfiguration 3 weiter in Richtung Zentrum verschoben ist. In den oberen Ebenen verhalten sich diese zwei Fälle der Konfigurationen 2 und 3 dagegen wieder sehr ähnlich, da der Einfluss des unterschiedlichen radialen Impulses bei der Dampfeinspeisung über die Höhe der Rohrleitung von TOPFLOW abnimmt. Die Ergebnisse der CFD-Simulation mit Konfiguration 2 stimmen hierbei für die niedriger gelegenen Messebenen besser mit dem Experiment überein, wogegen die CFD-Ergebnisse korrespondierend mit Konfiguration 3 auf Grund des leicht höheren berechneten Dampfgehaltes für die höher gelegenen Messebenen besser mit den Experimenten zu vergleichen sind.

In Abb. 36 sind die Blasendurchmesserverteilung für diese drei genannten Simulationen dargestellt. Auf allen Messebenen und für alle drei Simulationen sind wieder die Maxima und die Trends der Experimente recht genau reproduziert. Wie in den vorherigen Analysen ist der Einfluss des berechneten Dampfgehaltes auch aus diesen Diagrammen abzulesen. Die grünen Kurven (Config 1) haben zwar die richtige Form der Blasengrößenverteilung, haben aber zu hohe Amplituden im Vergleich zu den Experimenten auf Grund des zu hoch berechneten Dampfgehaltes bzw. der zu gering berechneten Kondensationsraten. Die anderen zwei Fälle ergeben sehr gleichartige Profile. Außer der Ebene F sind die Ergebnisse mit der dritten Konfiguration des CFD-Setups nur minimal genauer als mit der zweiten Konfiguration. Der CFD-Experiment-Vergleich zeigt jedoch abschließend eine grundsätzlich sehr gute Übereinstimmung der gemessenen und berechneten Blasengrößenklassenverteilungen, so dass die im Rahmen des vorliegenden Forschungsvorhabens entwickelte Erweiterung des MUSIG-Modells für Mehrphasenströmungen mit starkem Wärme- und Stoffübergang als validiert betrachtet werden kann. Der in seinem Aufbau recht komplexe TOPFLOW-Kondensationstestfall kann mit dieser Modellerweiterung mit zufrieden stellender Genauigkeit mit ANSYS CFX berechnet werden.

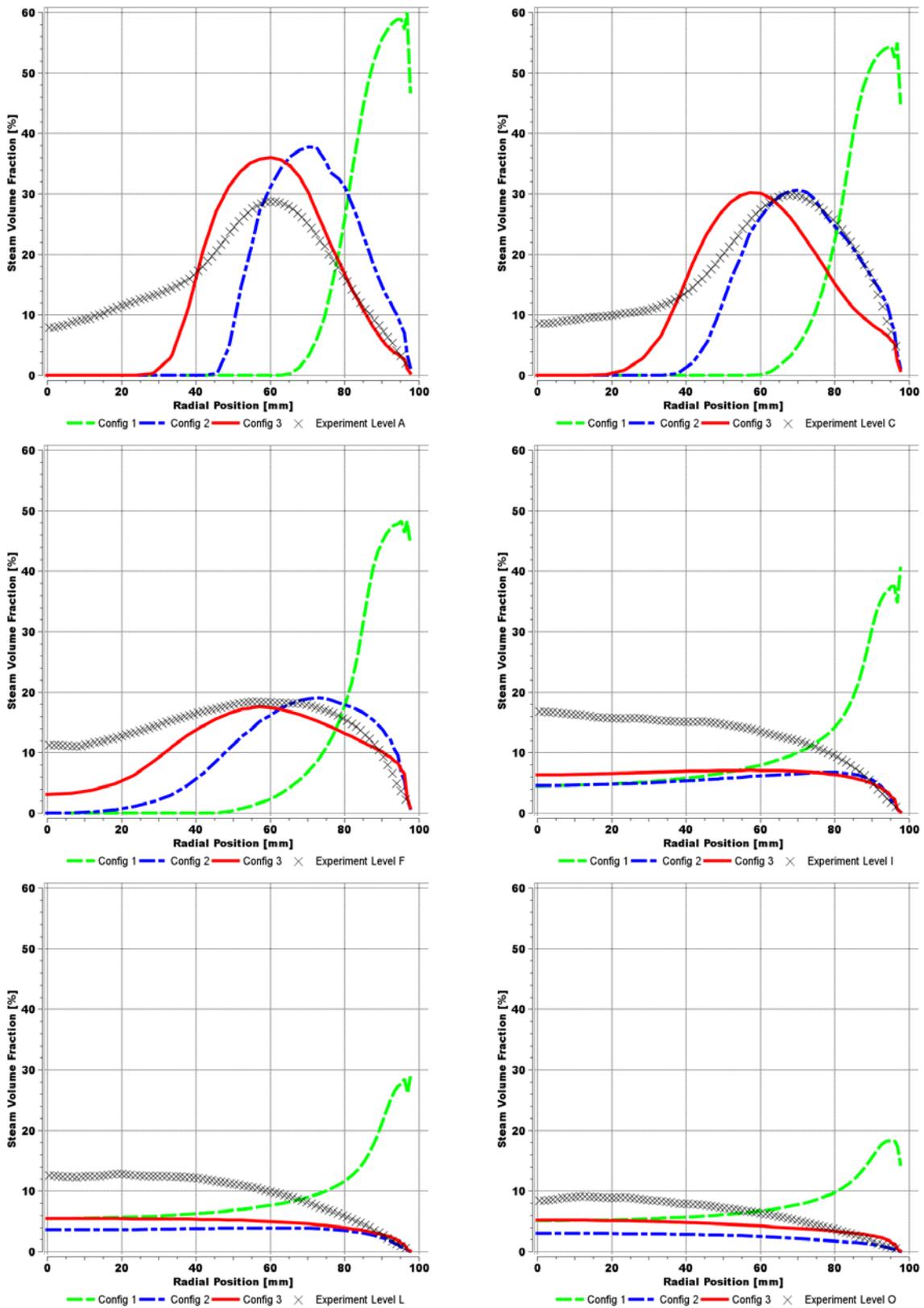


Abb. 35: Ergebnisse der drei untersuchten Variationen des ursprünglichen CFD-Setups für den TOPFLOW-Kondensationsversuch. Radiale Dampfvolumenanteilverteilung auf Ebene A, C, F, I, L, O.

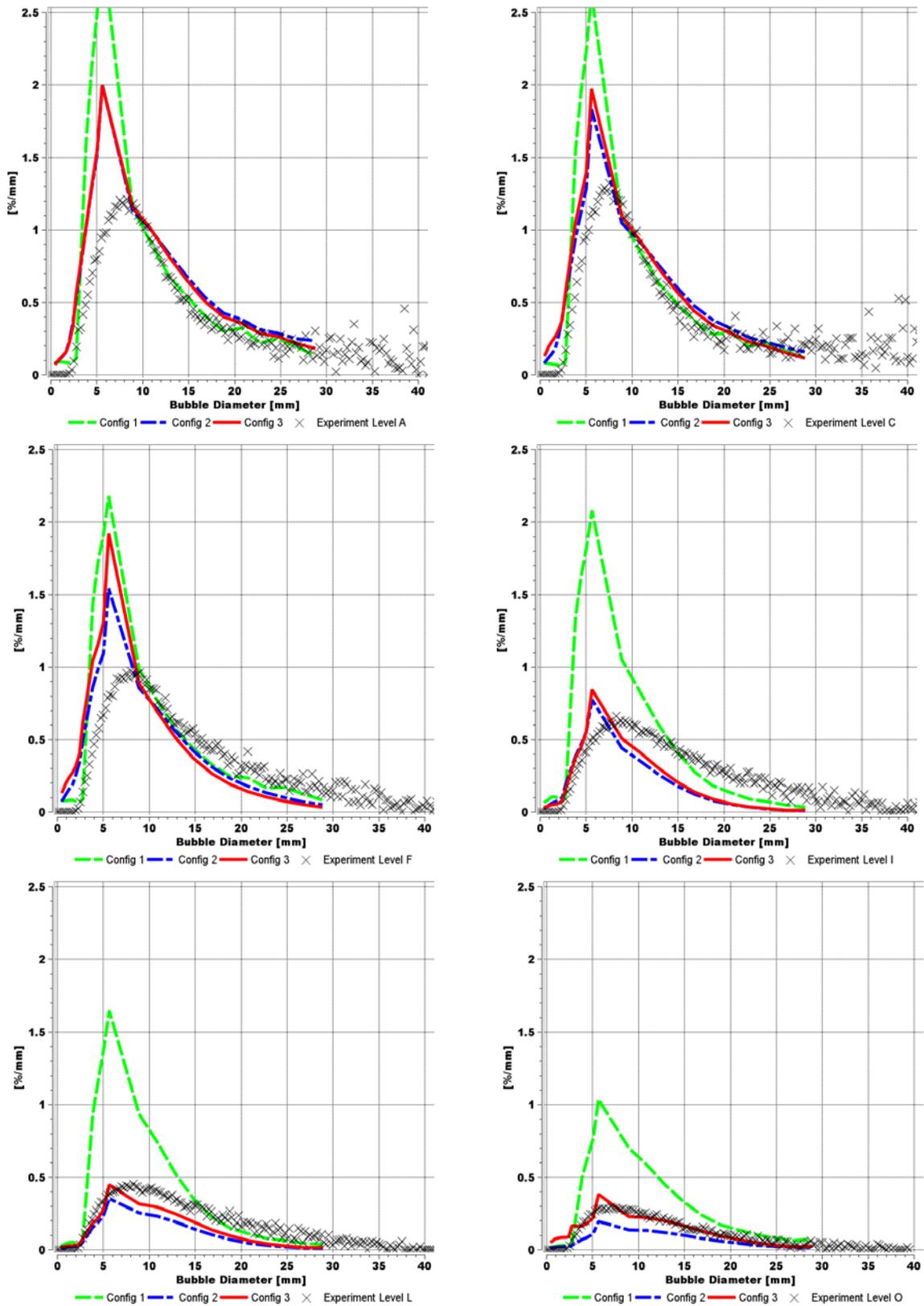


Abb. 36: Blasengrößenverteilungen auf den TOPFLOW-Messebenen A, C, F, I, L, O.

3.4.2.4 Schlussfolgerungen aus den Testfalluntersuchungen

Zwei ausführliche Untersuchungsreihen für den TOPFLOW-Kondensationstestfall nach Prasser & Lucas wurden mit ANSYS CFX durchgeführt. Die erste Analyse diente der Untersuchung numerischer Parameter des Lösungsalgorithmus, während die zweite Serie von CFD-Simulationen mit Variationen des Modellsetups für den Kondensationstestfall einer möglichst genauen Berechnung des Testfalls im Vergleich mit den experimentellen Daten vom FZ Dresden-Rossendorf diente. Wie die Simulationen gezeigt haben, ist eine CFD-Simulation in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten ohne ein polydisperses Populationsbilanzmodell und ohne Berücksichtigung des Wärme- und Stoffübergangs in den Populationsmodell-Bilanzgleichungen des MUSIG-Modells nicht möglich. Darüber hinaus wurden zwei weitere CFD-Setup-Konfigurationen untersucht, in denen wesentliche Einflussfaktoren auf das Experiment und auf das CFD-Ergebnis variiert wurden (radialer Strahlimpuls, Korrelation für den Zwischenphasen-Wärmeübergang, Wandabstoßungskraft, Beiwert der turbulenten Dispersionskraft). Im Ergebnis konnte mit der zweiten und dritten Konfiguration ein sehr guter Vergleich zwischen dem CFD-Ergebnis und den Messwerten erzielt werden. Das Ergebnis aus Konfiguration 3 ist dabei bei deutlich höherem Rechenaufwand nur marginal verbessert im Vergleich zur zweiten verwendeten Konfiguration, was im Nachhinein die aus numerischen Gründen getroffenen Vereinfachungen im CFD-Setup von Konfiguration 1 und 2 rechtfertigt. Die detaillierte Untersuchung des TOPFLOW-Kondensationstestfalls mit der neu entwickelten Erweiterung des MUSIG-Modells hat zu einer umfassenden Validierung dieser Modellerweiterung beigetragen.

4 Kopplung von Simulationstechniken

4.1 Kopplung von 3-dimensionalen CFD-Verfahren und 1-dimensionalen Systemcodes (ANSYS CFX \Leftrightarrow ATHLET)

4.1.1 Zielstellung

Zur Simulation von thermohydraulischen Vorgängen im Primär- und Sekundär-Kühlkreislauf von Kernreaktoren kommen in der Reaktortechnik thermohydraulische Systemcodes zum Einsatz, die über Jahrzehnte hinweg entwickelt und validiert wurden. So hat die GRS den thermohydraulische Systemcodes ATHLET⁴ (GRS, July 2006) für die Analyse der gesamten Bandbreite von Reaktortransienten und Störfallszenarien in BWR und SWR entwickelt. Der Code ist sowohl für das Design westlicher Reaktoren als auch für die russische Reaktorentypen VVER und RBMK einsetzbar. ATHLET besteht aus verschiedenen Modulen für die Simulation bestimmter Teilphänomene, die in Leichtwasserreaktoren auftreten:

- i) Thermo-Fluid-Dynamik (TFD)
- ii) Wärmeübergang und Wärmeleitung (HECU)
- iii) Neutronenkinetik (NEUKIN)
- iv) Reaktorsteuerung (GCSM)

ATHLET basiert numerisch auf der vollständig impliziten Zeitintegrationsmethode FEBE⁵. Weitere unabhängige Module wie 3d Neutronenkinetik oder ein Modul für Vorgänge im Sicherheitseinschluß (Containment) können mit ATHLET über ein allgemeines Codeinterface verbunden werden. Das TFD-Modul beinhaltet sowohl ein 5-Gleichungs-System (Mischungsimpulstransport mit Drift-Flux-Gleichung) und ein 6-Gleichungs-System eines 2-Phasen-Modells. Zusätzlich kann ATHLET eingesetzt werden, um den Transport nichtkondensierbarer Gase, gelöstem Stickstoff und Borsäure zu berechnen. Die zu berechnende Strömungskonfiguration wird modelliert, indem Basisobjekte von Thermo-Fluidodynamik und Wärmeleitung aneinander gefügt werden. Mehrdimensionale Prozesse können im Rahmen dieser Modelle nur durch parallele Kanäle mit definierter Querströmung abgebildet werden. Das 1-dimensionale Lösungsverfahren und Design in der Abbildung von Kernreaktorkomponenten in ATHLET ermöglicht dafür sehr kurze Rechenzeiten im Vergleich zu einem vollständigen CFD⁶-Verfahren.

Dem gegenüber ist ANSYS CFX (ANSYS Inc., 2009) eine vielfältig einsetzbare CFD-Software, die Vielzahl von physikalischen Modellen für CFD-Simulationen auf komplexen 3-dimensionalen Geometrien bereitstellt. ANSYS CFX löst hierfür partielle Differentialgleichungen für den Transport und Erhalt von Masse, Impuls und Energie in diskretisierter Form (zu weiteren Details der gelösten Erhaltungsgleichungen siehe (ANSYS Inc., 2009)). Die Lösung des physikalischen Modells bzw. der gelösten Transport- und Erhaltungsgleichungen ist dabei im idealen und asymptotischen Fall mit zunehmender Feinheit der räumlichen und Zeitdiskretisierung Gitterunabhängig. Somit stellt das CFD-

⁴ ATHLET - Analysis of Thermal-Hydraulics of LEak Transients

⁵ FEBE – Forward-Euler, Backward Euler time integration

⁶ CFD – Computational Fluid Dynamics

Verfahren ein Werkzeug zur detaillierteren 3-dimensionalen Analyse von Strömungsvorgängen zur Verfügung. Der dafür zu entrichtende Preis sind i.d.R. deutlich höhere Rechenzeiten.

Die Zielstellung des hier vorgestellten Arbeitspaketes bestand nunmehr in der Kopplung von ATHLET und ANSYS CFX. Ein gekoppeltes Berechnungsverfahren ist in der Lage, die Stärken beider Simulationsansätze miteinander zu verbinden. Zum einen könnte ein gekoppeltes Simulationsverfahren aus ATHLET und ANSYS CFX weiterhin für die Simulation eines vollständigen Reaktorkühlkreislaufs eingesetzt werden, während mit dem CFD-Verfahren ausgeprägt 3-dimensionale Strömungsvorgänge wie z.B. turbulente Vermischungsprozesse im Downcomer und im Unteren Plenum des RDB detailliert aufgelöst werden. Auf der anderen Seite kann ATHLET durch die Simulation des gesamten Kernreaktorkühlkreislaufes in der Genauigkeit und im Antwortverhalten verbesserte Randbedingungen für die CFD-Simulation der 3-dimensionalen Komponente liefern. Ein typisches mit dem gekoppelten Simulationsverfahren zu berechnendes Szenario wäre z.B. die 3-dimensionale Vermischung von Borsäurekonzentration in Störfallszenarien auf dem Weg vom Kalten Strang bis zum Eintritt in den Reaktorkern eine DWR's. Durch die Kopplung von 1d und 3d Simulationsverfahren in einem eng gekoppelten Simulationsverfahren könnte die Vorhersagegenauigkeit durch die detaillierte Simulation der 3-dimensionalen Strömungsprozesse in ausgewählten Komponenten des Systems und die Ankopplung der CFD-Simulation an die Gesamtkreislaufsimulation deutlich verbessert werden.

Die im Rahmen des Projektes vorgenommene Entwicklung eines Kopplungsinterfaces von ANSYS CFX und ATHLET basiert auf einem Vorläufer-Prototyp einer Kopplung von ANSYS CFX an 1-dimensionale Systemcodes. Mit diesem Prototyp wurden im Vorfeld bereits Kopplungen zu den Systemcodes LMS AMESim und GT-Power ausgeführt. Die hier auszuführenden Arbeiten beziehen sich somit hauptsächlich in der Weiterentwicklung dieser Kopplungsschnittstelle an die spezifischen aus der Reaktortechnik erwachsenden Anforderungen von ATHLET, die einen z.T. anderen Datenaustausch zwischen dem 1d-Systemcode und dem 3d-CFD-Verfahren erfordern.

In diesem Bericht wird die resultierende Kopplungsschnittstelle beschrieben. Ein ausführlicher Bericht in englischer Sprache ist ebenfalls verfügbar (Waata C.L., 2008). Zunächst wird auf die Softwareanforderungen für eine Kopplung von ANSYS CFX und ATHLET und deren spätere Umsetzung in der entwickelten Softwareschnittstelle eingegangen. Es werden die unterstützenden Kombinationen von Randbedingungstypen diskutiert, die an den Kopplungsrändern der 1d und 3d Software jeweils Verwendung finden. Im Weiteren geht der Bericht auf die untersuchten Testfälle ein, die zur Verifikation der Kopplungsschnittstelle definiert und untersucht wurden.

	Software Anforderungen
Art der Simulation	Transiente Strömungssimulation
Strömungsregime	Ein- und Mehrphasig
Fluide	Kompressible Fluide, Wasser & Wasserdampf
Betriebssysteme	Linux 32bit & 64bit
Parallelisierung	Serielle und parallele Ausführung
Ort der Kopplung mit ATHLET	2d Oberflächenelemente (boundary patches) mit Einlass- und Auslassrandbedingungen
ANSYS CFX Einlassrandbedingungen	Inlet (Massenstrom, Geschwindigkeit, Druck) & Opening Druckrandbedingung
ANSYS CFX Auslassrandbedingungen	Outlet & Opening Druckrandbedingung
Zusätzliche CCL⁷-Objekte in der ANSYS CFX CCL-Steuerung bei Kopplung mit ATHLET	Shared Library Simulation Type Mass and Momentum Heat Transfer

Tabelle 9: Software-Anforderungen für die Kopplung von ANSYS CFX und ATHLET

4.1.2 Spezifikation der Kopplungsschnittstelle – Softwareanforderungen

Tabelle 9 zeigt die Softwareanforderungen für ein gekoppeltes Softwaresystem aus ANSYS CFX und ATHLET. Der gekoppelte Code wird für die Simulation transienter Strömungsvorgänge in Kernreaktorkühlsystemen eingesetzt. Sowohl ein- als auch mehrphasige Strömungen sollen damit simuliert werden können. In dieser ersten

⁷ CCL – CFX Command Language

Untersuchung wurden die unterstützten Betriebssysteme auf Linux 32bit und 64bit eingeschränkt, was jedoch keine prinzipielle Einschränkung darstellt. Eine spätere Portierung auf andere von ANSYS CFX unterstützte Betriebssysteme ist möglich, sofern diese auch von ATHLET unterstützt werden.

Die Kopplung und damit der Datenaustausch zwischen beiden Softwaresystemen erfolgt an Oberflächensegmenten des 3-dimensionalen CFD-Gitternetzes, für die Einlass- oder Auslassrandbedingungen definiert sind. In ATHLET werden diese Kopplungselemente durch sogenannte Junction-Elemente repräsentiert. Betrachtet man den Typ der CFD-Randbedingung so kommt die Kopplung mit Massenstrom-, Geschwindigkeits- oder Druckrandbedingungen in Betracht. Hierbei unterscheiden sich in ANSYS CFX die Auslassrandbedingungen noch dahingehend, dass für normale Auslassrandbedingungen keine Rückströmung durch den Auslassrand erlaubt ist, während für eine sogenannte Opening-Randbedingung dies zulässig ist. Die unterstützten Kombinationen aus CFX und ATHLET-Randbedingungen werden in einem späteren Abschnitt noch detaillierter behandelt.

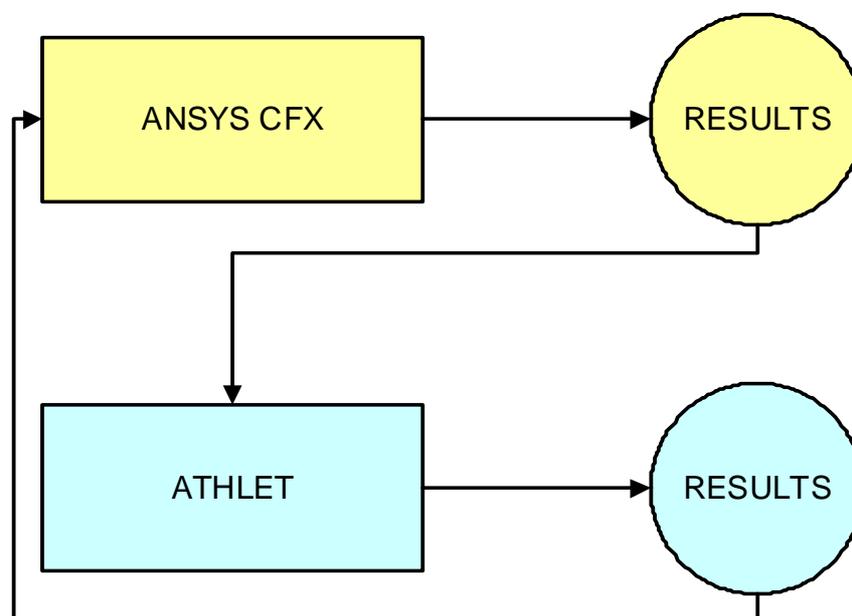


Abb. 37: Sequentielle Code-Kopplung von ANSYS CFX und ATHLET

4.1.3 Kopplungs-Randbedingungen und Softwaretechnische Umsetzung der Code-Kopplung

4.1.3.1 Sequentielle Code-Kopplung

Die Kopplung von ANSYS CFX und ATHLET erfolgt sequentiell (siehe Abb. 37), d.h. durch eine alternierende Ausführung beider Simulationsalgorithmen für einen jeweils vorgegebenen Zeitschritt der transienten Simulation. ANSYS CFX agiert hierbei als sogenannte Master-Software, die den Zeitschritt der CFD-Simulation vorgibt. Nach einem berechneten Zeitschritt erfolgt für diesen ein Aufruf von ATHLET, wobei diesem Aufruf die nun neu berechneten Werte an den Kopplungsschnittstellen mit ATHLET mit übergeben werden. ATHLET wiederum berechnet nun ausgehend von den Ergebnissen zum Zeitpunkt T_1 und

unter Berücksichtigung der neuen Randbedingungen mit einem oder auch mehreren Zeitschritten die Ergebnisse zum Zeitpunkt $T_1 + \Delta t$, was in Folge zu neuen aktualisierten Randbedingungen für die Fortsetzung der ANSYS CFX Simulation vom Zeitpunkt $T_2 = T_1 + \Delta t$ bis zum Zeitpunkt $T_2 + \Delta t$ führt. Diese sequentielle Ausführung beider Softwaresysteme setzt sich fort, bis ein Endzeitpunkt der transienten Simulation erreicht ist.

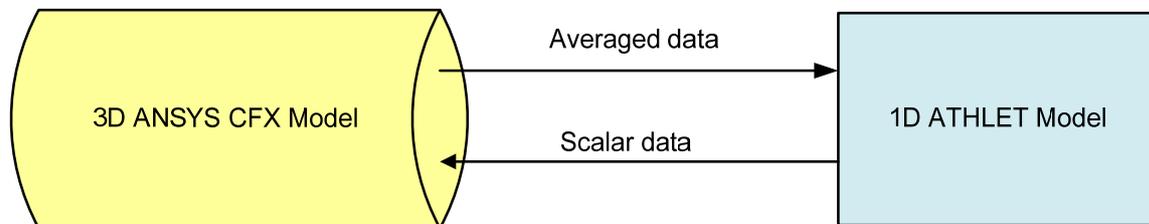


Abb. 38: Kopplung an Randbedingungen

4.1.3.2 Kopplung an Randbedingungen

Der Datenaustausch zwischen den beiden Codes findet an Oberflächenelementen des CFD-Modells statt, an denen Einlass- oder Auslass-Randbedingungen definiert sind und für die eine Kopplung mit ATHLET vorgesehen ist, somit die Geometriemodelle beider Codes also miteinander verbunden sind. ANSYS CFX exportiert an diesen Kopplungsrändern jeweils über die Randbedingungsfläche gemittelte (z.B. Druck) oder integrierte Werte (z.B. Massenstrom), die in einer ATHLET-Junction⁸ oder einem ATHLET-Kontrollvolumen⁹ weiterverarbeitet werden, dass mit dieser Randfläche verbunden ist. Andererseits werden skalare Austauschdaten aus den korrespondierenden ATHLET-Junctions oder ATHLET-Kontrollvolumen an ANSYS CFX übertragen werden und als spezifizierende Eigabegrößen für die Definition der CFD-Randbedingungen interpretiert werden. Das Blockdiagramm in Abb. 38 veranschaulicht diesen Datenaustausch.

4.1.3.3 Typen von Kopplungsrandbedingungen und Austauschgrößen

4.1.3.3.1 Hydraulische Randbedingungen

Für die Kopplung von hydraulischen Randbedingungen werden Randbedingungen für die Lösung der Kontinuitäts- und Impulsgleichungen ausgetauscht. Die benötigten Randbedingungen sind hierfür Informationen über Massenstrom, Geschwindigkeit bzw. Druck an den Randbedingungsflächen. Da die Größen nicht unabhängig sind, kann pro Kopplungsrandbedingung jeweils eine dieser Größen für die CFD-Simulation als Eingabegröße (also Austauschgröße mit dem Systemcode) definiert werden, die jeweils andere Größe (massenstrom oder Druck) ist dann die Rückgabegröße an den Systemcode. Massenstrom und Geschwindigkeit sind hierbei bei bekannter durchströmter

⁸ Eine ATHLET-Junction ist ein Basiselement der Nodalisierung, das zwischen Kontrollvolumen angeordnet werden kann, in denen Masse, Impuls und Energie bilanziert wird.

⁹ Ein ATHLET-Kontrollvolumen ist ein Basiselement der Nodalisierung, das einen räumlichen Teil der Strömungsgeometrie repräsentiert, für den Masse, Impuls und Energie bilanziert wird.

Querschnittsfläche und für inkompressible Fluide als äquivalent zu betrachten. Je nach definierter CFD-Randbedingung kann wahlweise entweder der Druck oder eine Massenstrom-äquivalente Information vorgegeben werden. Abb. 39 veranschaulicht die ausgetauschten Daten an hydraulischen Kopplungsrändern.

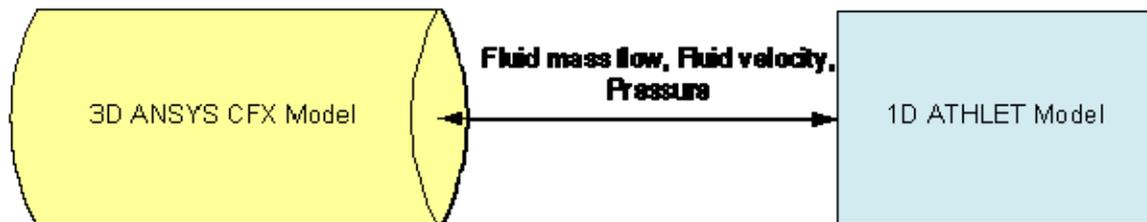


Abb. 39: Kopplung an hydraulischen Randbedingungen

4.1.3.3.2 Kopplung an thermischen Randbedingungen

An thermisch gekoppelten Randbedingungen werden typischer Weise die Fluidtemperatur, die Fluidenthalpie bzw. auf das Fluid wirkende Wärmequellen ausgetauscht. Ähnlich wie bei den hydraulischen Kopplungsrändern kann entweder die Fluidtemperatur oder die Fluidenthalpie vom Systemcode bereitgestellt werden. Die jeweils andere Größe ist dann der Rückgabeparameter vom CFD- und den Systemcode (siehe Abb. 40).

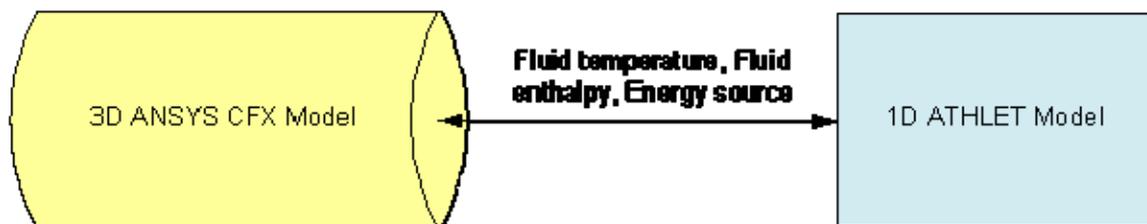


Abb. 40: Kopplung an thermischen Randbedingungen

4.1.3.3.3 Kopplungsrandbedingungen für Mehrphasen- und Mehrkomponentenströmungen

Kopplungsrandbedingungen für Mehrphasenströmungen wurden in diesem Forschungsvorhaben noch nicht behandelt. Die Behandlung bzgl. der Austauschgrößen erfolgt aber weitgehend analog zu den bereits vorgestellten Kopplungsrandbedingungen. Die Austauschgrößen für eine Zweiphasenströmung sind hierbei der Dampfgehalt x und der Volumengehalt der Gasphase. Analog wird im Fall einer Mehrkomponentenströmung der Massenbruch der betrachteten Komponenten (z.B. für die Borsäurekonzentration) zusätzlich ausgetauscht.



Abb. 41: Kopplungsrandbedingungen für Mehrphasenströmungen

4.1.4 Implementierung der Schnittstelle zur Code-Kopplung

Der Systemcode ATHLET der GRS ist in FORTRAN-90 geschrieben, während ANSYS CFX auf dem Standard von FORTRAN-77 basiert. Da die Datenstrukturen von ATHLET stark auf sogenannten MODULE-Konstrukten und Sprachelementen aufbauen, die in FORTRAN-77 noch nicht unterstützt werden, machte sich die Programmierung einer Programmzwischenschicht zur Kopplung beider Programme und zum Datenaustausch notwendig. In dieser Programmzwischenschicht werden die jeweiligen Austauschgrößen zwischen den Datenstrukturen von ANSYS CFX und den Datenstrukturen von ATHLET umgesetzt. Diese Programmzwischenschicht ist in einer einzelnen FORTRAN-Subroutine gekapselt, die von ANSYS CFX nach jedem Zeitschritt der Simulationsrechnung mit den Kopplungsparametern aufgerufen wird. Neben der Herstellung des Datentransfers zwischen den FORTRAN-77 und FORTRAN-90-Datenstrukturen erledigt die Programmzwischenschicht auch noch diverse Umrechnungen der übergebenen Datenwerte für das Variablen- und Einheitensystem des jeweils anderen Codes.

4.1.4.1 Die Junction-Box-Routine in ANSYS CFX

Um den Aufruf der Kopplungsroutine während der Strömungssimulation von ANSYS CFX auszuführen, wird auf die sogenannte Junction-Box-Funktionalität¹⁰ in ANSYS CFX zurückgegriffen. Die für die Kopplung verwendete Junction-Box-Routine ist in ANSYS User-FORTRAN geschrieben und erfüllt mehrere Aufgaben:

- Beim ersten Aufruf werden Informationen aus dem Strömungs-Setup des CCL extrahiert, so z.B. Strömungsparameter und Informationen, ob es sich um eine Einphasen- oder Mehrphasensimulation handelt.
- Extraktion der Austauschgrößen an den Kopplungsändern mit ATHLET, wobei es sich hierbei um einen einzelnen Datenwert, eine Oberflächenmittelung über den Kopplungsrand oder eine Integration z.B. eines Massenstroms handeln kann.
- Aufruf der Kopplungsschnittstelle und somit von ATHLET
- Entgegennahme der Kopplungsparameter vom ATHLET-Aufruf und Zuweisung der Kopplungsparameter zu den Kopplungsrandbedingungen entsprechend den im CCL-Setup getroffenen Vereinbarungen.

¹⁰ Eine Junction-Box-Routine in ANSYS CFX ist eine Stelle einer vordefinierten Programmverzweigung, die es dem Benutzer gestattet, an dieser vordefinierten Stelle im Programmablauf beliebigen FORTRAN-77-kompatiblen Code in einem Unterprogramm auszuführen.

Weitere Informationen über das Einbinden von ANSYS CFX Junction-Box-Routinen finden sich u.a. im Handbuch von ANSYS CFX-Pre (ANSYS Inc., 2009). Für die beabsichtigte Kopplung von ANSYS CFX und ATHLET wird als Aufrufstelle für die Junction-Box-Routine das Ende des CFX-Zeitschrittes der transienten Simulation (end-of-timestep) gewählt. Somit werden nach jedem CFX-Zeitschritt die Austauschdaten an den Kopplungsrändern ermittelt, an das Kopplungsinterface per Junction-Box-Aufruf übergeben, dann wird damit ein ATHLET-Aufruf initiiert wobei auch die Zeitschrittinformation mit an ATHLET kommuniziert wird, ATHLET führt eine Berechnung bis zur vorgegebenen Endzeit des CFX-Zeitschrittes aus und übergibt neue Werte für die Kopplungsrandbedingungen mit ANSYS CFX. Letztere werden innerhalb der Junction-Box-Routine weiterverarbeitet und über CFX-interne Datenstrukturen den Kopplungsrandbedingungen der CFD-Simulation zugewiesen, woraufhin ANSYS CFX bereit ist für den nächstfolgenden Zeitschritt. Ein Programmablaufschema der bei der Kopplung ausgeführten Schritte für die gekoppelte Simulation ist in Abb. 42 dargestellt.

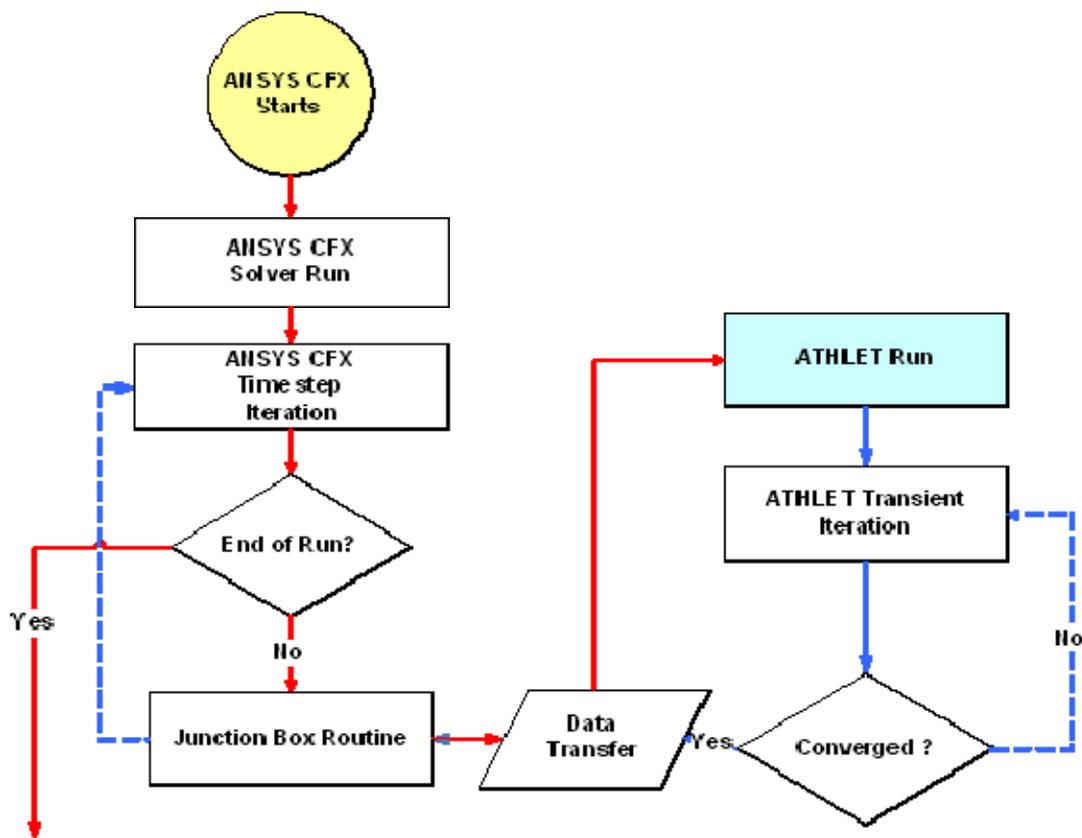


Abb. 42: Programmablaufschema der bei der Kopplung ausgeführten Schritte für die gekoppelte Simulation von ANSYS CFX und ATHLET

4.1.4.2 Code-Kopplung mittels Shared Library Technologie

Wie bereits erwähnt, wurde für den eingeschlagenen Weg der ANSYS CFX-ATHLET-Kopplung der Code von CFX als Master-Software ausgewählt. D.h. der Benutzer startet im Wesentlichen die ANSYS CFX-Software wie gewohnt und ANSYS CFX ruft dann seinerseits aus der Junction-Box-Routine heraus ATHLET auf. Damit das in der gewünschten Art und Weise funktioniert, wird der gesamte ATHLET-Quelltext mit einem kompatiblen FORTRAN-Compiler in eine Shared Library übersetzt, die auch den Code der Junction-Box-Routine und der Programmwischenschicht zur Adaption der ATHLET-Datenstrukturen an ANSYS CFX enthalten kann. Diese Shared Library kann dann von ANSYS CFX zu dessen Laufzeit dynamisch geladen werden und das Kopplungsinterface zusammen mit dem gesamten ATHLET-Code steht dann während der CFD-Simulation zur Verfügung. Diese Technologie erlaubt die Verwendung von benutzerdefiniertem Code innerhalb der Laufzeitumgebung von ANSYS CFX, ohne dass seitens des Benutzers ein Zugriff auf den CFX-Quelltext erforderlich ist oder bei Codeänderungen eine Übersetzung und Bereitstellung eines besonderen ANSYS CFX-Executables notwendig ist. Abb. 43 zeigt die Struktur der hier für die Code-Kopplung verwendeten Shared Library. Um eine Übersetzung von ATHLET in Form einer Shared Library zu ermöglichen, wurde hierfür durch Herrn Lerchl von der GRS die Hauptprogramm-Routine von ATHLET in einen geeigneten Subroutine-Aufruf mit Aufrufparametern umgearbeitet, da zur Laufzeit eines einheitlichen Programmsystems nur eine Hauptprogrammroutine existieren kann und das in diesem Fall diejenige von ANSYS CFX ist. Eine weitere Anpassung war erforderlich für die von ATHLET belegten I/O-Kanäle. Sämtliche I/O-Kanalnummern von ATHLET wurden in die Programmwischenschicht zwischen ANSYS CFX und ATHLET als Variablen herausgezogen und es wurde eine ANSYS CFX-Subroutine verwendet, die ATHLET von CFX unbelegte I/O-Kanäle für dessen Ein- und Ausgaben zur Verfügung stellt.

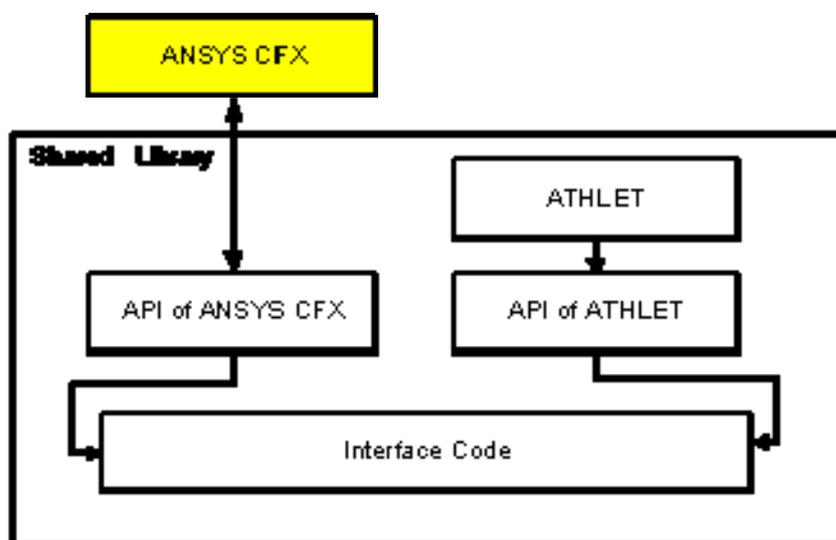


Abb. 43: Struktur der Shared Library für die Code-Kopplung

4.1.4.3 Programmablauf einer gekoppelten ANSYS CFX und ATHLET-Simulation

Der Programmablaufplan in Abb. 42 zeigt die ausgeführten Schritte während einer gekoppelten ANSYS CFX und ATHLET-Simulation. Die Simulation wird vom Benutzer mit dem Start von ANSYS CFX als Master-Code initiiert. Die im CFD-Setup definierten Randbedingungen dienen für den ersten Zeitschritt, für den noch keine ATHLET-Informationen vorliegen, als Randbedingungen der CFD-Simulation.

Im Laufe der gekoppelten Simulation werden dann die folgenden Schritte ausgeführt:

1. ANSYS CFX liest zunächst die Definition der CFD-Simulation aus dem CCL des DEF-Files ein, das darüber hinaus auch die Gitterinformation enthält. Gitter und CCL definieren die Randbedingungen der CFD-Aufgabe, das physikalische Setup und die numerischen Solverparameter und -einstellungen. Im Anschluss lädt ANSYS CFX die im CCL definierte Shared Library aus dem spezifizierten Pfad des Benutzers.
2. ANSYS CFX ruft ATHLET zu dessen eigener Initialisierung auf, u.a. um den File mit der Definition der ATHLET-Simulation einzulesen.
3. Dann startet der ANSYS CFX-Solver mit der iterativen Berechnung der CFD-Lösung für den ersten Zeitschritt.
4. Nach der Bewertung eines Konvergenzkriteriums erreicht der CFX-Solver den Aufrufpunkt der Junction-Box-Routine bei „end-of-timestep“, von wo aus direkt in diese Junction-Box-Routine verzweigt wird. Hierbei werden die für den Datenaustausch mit ATHLET vorgesehenen Daten bereitgestellt und an das Kopplungsinterface übergeben.
5. In der Programmwischenschicht zwischen ANSYS CFX und ATHLET werden die Kopplungsdaten den notwendigen Umrechnungen und Umspeicherung unterzogen worauf im Anschluss ATHLET aufgerufen wird.
6. Wenn ATHLET aufgerufen wird, führt ATHLET mit dem eigenen internen FEBE-Lösungsalgorithmus eine oder mehrere Zeitschritte aus, bis der vorgegebene Endzeitpunkt des ANSYS CFX Zeitschrittes erreicht ist.
7. Wenn dieser Endzeitpunkt erreicht ist, gibt ATHLET über die Kopplungsschnittstelle alle definierten Kopplungsparameter an ANSYS CFX zurück, die nach der notwendigen Datenbehandlung über ANSYS CFX-interne Datenstrukturen an die entsprechenden CFD-Randbedingungen übergeben werden.
8. Sofern nicht das Abbruchkriterium der gekoppelten Simulation erreicht ist, wird dann seitens ANSYS CFX die Berechnung des nächsten Zeitschrittes eingeleitet.
9. Diese Prozedur wird bis zum Erreichen des Abbruchkriteriums fortgesetzt.

Zum Abschluss der gekoppelten Berechnung führt ANSYS CFX noch die folgenden Schritte aus (siehe Abb. 44):

1. Für dem Schreiben eines RES-Files ruft ANSYS CFX eine weitere Junction-Box-Routine auf, die es auch ATHLET gestattet, die Simulation in geordneter Weise zu beenden, Ergebnisdaten zu schreiben und alle offenen I/O-Kanäle zu schliessen.
2. Nach der Rückkehr aus ATHLET beendet ANSYS CFX seinerseits die gekoppelte Simulation mit dem Schreiben des Ergebnisfiles.

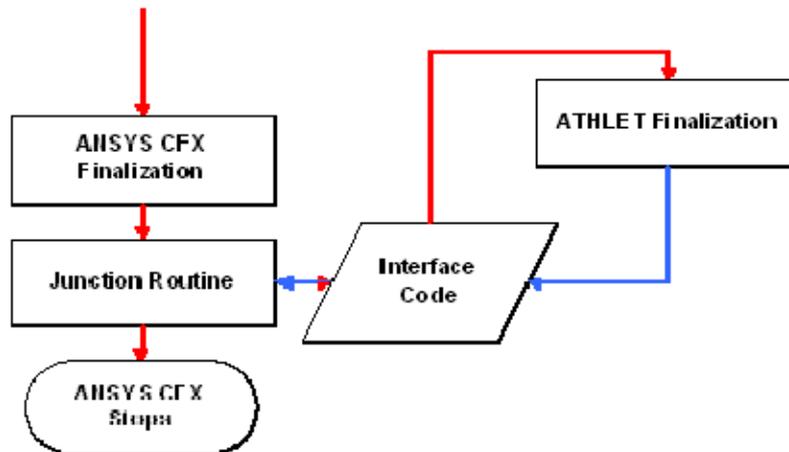


Abb. 44: Programmablaufplan für die Arbeitsschritte bei der Beendigung der gekoppelten Simulation

4.1.4.4 Ausgeführte Modifikationen am ATHLET-Code

Für die Kopplung mit ANSYS CFX musste der Standard-ATHLET-Code in einigen Teilen geeignet modifiziert werden. Des Weiteren wurden zusätzliche Steuerparameter eingeführt, die es ANSYS CFX erlauben, die Ausführung von ATHLET je nach Stand der Simulation von außen zu kontrollieren und zu steuern. Die ausgeführten Codemodifikationen an ATHLET sind in einem technischen Bericht der GRS dokumentiert (Lerchl, Mai 2007). So wurde für die externe Steuerung des ATHLET-Codes aus ANSYS CFX heraus ein Integer-Steuerparameter KCFX eingeführt, der je nach dessen Belegung steuert, in welcher partiellen Funktion der ATHLET-Code bei dessen Aufruf ausgeführt wird (d.h. Initialisierung, stationäre ATHLET-Simulation, transienter Zeitschritt von ATHLET, Beendigung der Simulation). Details zur Belegung der Steuerparameter für den zur Kopplung mit ANSYS CFX modifizierten ATHLET-Code finden sich in (Lerchl, Mai 2007) und (Waata C.L., 2008).

Weitere Änderungen am ATHLET-Code beziehen sich auf die Anpassung der I/O-Kanalnummern von ATHLET an die Laufzeitumgebung von ANSYS CFX, wo in der modifizierten ATHLET-Version freie I/O-Kanäle über den Aufruf einer internen ANSYS-CFX-Routine bezogen und ATHLET zur Verfügung gestellt werden.

4.1.4.5 Steuerung der Kopplung über CCL-Objekte und Definitionen in ANSYS CFX

Die Kopplung von ANSYS CFX und ATHLET wurde im Rahmen des vorliegenden Forschungsvorhabens als ein Prototyp implementiert. Somit ist die Kopplung von ANSYS CFX und ATHLET noch keine Eigenschaft der Release-Version von ANSYS CFX und bedarf daher der Steuerung der Kopplung von ANSYS CFX und ATHLET über Eingriffe in die Definition der CFD-Simulation auf der Basis von CCL¹¹. Die Definition einer gekoppelten Simulation von ANSYS CFX und ATHLET aus der GUI-Oberfläche des

¹¹ CCL – CFX Command Language

physikalischen Preprozessors CFX5Pre heraus ist momentan noch nicht realisiert. Ausgehend von einem ersten in ANSYS CFX5Pre zu erstellenden Setup der beabsichtigten CFD-Simulation exportiert der Benutzer die CCL-Definition der Strömungssimulation in ein Textfile, das im Anschluß vom Benutzer durch die kopplungsspezifischen CCL-Objekte zu ergänzen ist. Ein Beispiel eines solchen CCL-Setups ist in (Waata C.L., 2008) dokumentiert. Nach erfolgter Modifikation des CCL-Files wird die so geänderte Definition der CFD-Simulation wieder in den DEF-File der ANSYS-CFX-Simulation rückübertragen und die gekoppelte ANSYS CFX-ATHLET-Simulation kann gestartet werden. Die vom Benutzer im Einzelnen hinzuzufügenden CCL-Sektionen umfassen im Einzelnen:

1. CCL-Header: Deklarationen zum Pfad der verwendeten Shared Library und zum ATHLET-Input-File, die in Perl¹²-Variablen hinterlegt werden.
2. LIBRARY-Objekt: Hier werden die verwendeten Junction-Box-Routinen deklariert.
3. SIMULATION TYPE Objekt: Angabe mit welchem der unterstützten Systemcodes ANSYS CFX in dieser CFD-Simulation gekoppelt werden soll. Momentan unterstützt werden neben ATHLET auch LMS AMESim, GT-Power und nutzerdefinierter Programmcode. Des Weiteren sind hier für ATHLET bestimmte Eingaben zu treffen, wie die Angabe einer Programe-ID, einer Run-ID und die Übergabe des unter 1. definierten Pfades zum ATHLET-Input-File. Außerdem ist es möglich hier noch einen Symmetriefaktor des CFD-Modells zu übergeben, falls die Ein-/Ausgaberrandbedingungen der CFD-Simulation unter Ausnutzung von Symmetrien der Strömungsgeometrien nur einen bestimmten Bruchteil der in ATHLET abgebildeten Geometrie ausmachen.
4. INLET BOUNDARY Objekt: Angaben zu den Kopplungsrandbedingungen am Einlass der CFD-Geometrie für hydraulische und thermische Kopplungsrandbedingungen. Die benötigten Angaben für den Datenaustausch sind in ein SYSTEM CODE Objekt gekapselt.
5. OUTLET BOUNDARY Objekt: Gleiches gilt für den Variablen austausch am Auslassrand der CFD-Geometrie, wenn dieser mit einer korrespondierenden Randbedingung des ATHLET-Modells gekoppelt ist. Auch hier sind die benötigten Angaben für den Datenaustausch in ein SYSTEM CODE Objekt gekapselt. Ein Beispiel für die Syntax dieser CCL-Objekte findet sich in (Waata C.L., 2008).
6. SOLVER CONTROL Objekt: Hier sind lediglich noch die Namen der verwendeten Junction-Box-Routinen in einer Liste aufzuführen.

4.1.4.6 Modifikationen von ANSYS CFX für die Kopplung mit ATHLET

ANSYS CFX verwendet ASCII-Text-Files mit den Namen "RULES" und "tt.txt" im Unterverzeichnis \$ETC des ANSYS CFX Installationsverzeichnis um dem ANSYS CFX-Solver die gültige Syntax der CCL-Kommando- und Beschreibungssprache bekannt zu machen. Im Falle von Erweiterungen des Funktionsumfangs des Solvers und damit der CCL-Syntax zur Beschreibung und Definition einer CFD-Simulation sind diese beiden Files entsprechend zu ändern, was zur Einführung der in 4.1.4.5 erwähnten, erweiterten CCL-Objekte erforderlich war. Für die Kopplung von ANSYS CFX mit ATHLET sind somit also neben der erfolgreich übersetzten Shared Library mit dem Kopplungsinterface, den Junction-Box-Routinen und dem mitübersetzten ATHLET-Quelltext auch ein Paar von geänderten RULES und tt.txt-Dateien erforderlich, die von ANSYS bereitgestellt werden.

¹² Perl – Skripting-Sprache

Der RULES-File definiert die Struktur des CCL-Setups für jedes individuell zu verwendende CCL-Objekt und die darin möglichen bzw. erlaubten CCL-Optionen. Der RULES-File enthält aber keine Informationen über gegenseitige Abhängigkeiten von verschiedenen CCL-Objekten. Derartige, i.d.R. von der Strömungsphysik abhängige Informationen, werden während eines GUI-unterstützten Setupvorgangs innerhalb von ANSYS CFX5Pre überprüft um eine physikalisch und syntaktisch korrekte Strömungsdefinition für die CFD-Simulation zu erhalten. Im Falle von manuellen Eingriffen und Änderungen an CCL-Objekten ist es nunmehr Aufgabe des Benutzers, eine vollständige und fehlerfreie CCL-Definition der gekoppelten ANSYS CFX-ATHLET-Simulation bereitzustellen.

Um die neuen bzw. geänderten CCL-Objekte verwenden zu können wurde somit der RULES-File modifiziert. In dem File tt.txt befindet sich eine Übersetzungstabelle von der dem Benutzer zur Verfügung gestellten Syntax der CCL-Beschreibung der CFD-Simulation in die Solver-internen MMS¹³-Datenstrukturen, auf die innerhalb von CFX zugegriffen werden kann, wie z.B. die Benennung interner Solver-FORTRAN-Variablen und deren Entsprechung in der CCL-Syntax. Das Standard-tt.txt-File musste somit ebenfalls Änderungen erfahren, um die zusätzlich eingeführten Parameter und Optionen der kopplungsspezifischen CCL-Objekte in interne Solver-Datenstrukturen zu überführen. Der Benutzer des gekoppelten Simulationsverfahrens muss also auch diese beiden geänderten Files für die Simulation entsprechend der Dokumentation in (Waata C.L., 2008) bereitstellen.

Einphasenströmung	Mehrphasenströmung
<ul style="list-style-type: none"> • Normal velocity • Cartesian and cylindrical velocity • Mass flow rate • Total pressure(stable) • Static pressure • Stationary frame total pressure(stable) • Fluid velocity 	<ul style="list-style-type: none"> • Fluid dependent (inhomogeneous) • Normal Speed (homogeneous) • Cartesian Velocity Components (homogeneous) • Cylindrical Velocity Components (homogeneous) • Bulk Mass Flow Rate • Static Pressure • Total Pressure(Stable)

Tabelle 10: Unterstützte Einlassrandbedingungen in ANSYS CFX für hydraulische Randbedingungen (Masse & Impuls)

4.1.5 Unterstützte Typen von Randbedingungen

Wie bereits zuvor erwähnt, dienen die zwischen den beiden Solvern ATHLET und ANSYS CFX ausgetauschten Daten der wechselseitigen Bereitstellung von Randbedingungen für die

¹³ MMS – Memory Management System

Lösung der 1-dimensionalen bzw. 3-dimensionalen Transport- und Erhaltungsgleichungen auf der für das Strömungsgebiet gewählten Nodalisierung bzw. dem numerischen 3d Gitternetz. Die von beiden Solvern an Ein-/Auslassrändern bzw. an ATHLET Junctions und Kontrollvolumen unterstützten Randbedingungen werden im Folgenden näher betrachtet.

	Einphasenströmungen	Mehrphasenströmungen
Isothermal	<ul style="list-style-type: none"> • Fluid temperature 	<ul style="list-style-type: none"> • Fluid temperature
Thermal energy	<ul style="list-style-type: none"> • Static temperature • Total temperature 	<ul style="list-style-type: none"> • Static temperature • Total temperature • Fluid dependent
Total Energy	<ul style="list-style-type: none"> • Static temperature • Total temperature • Total enthalpy 	<ul style="list-style-type: none"> • Static temperature • Total temperature • Fluid dependent
Fluid dependent		<ul style="list-style-type: none"> • Static temperature • Total temperature • Total enthalpy • Fluid dependent¹⁴

Tabelle 11: Unterstützte Einlassrandbedingungen in ANSYS CFX für thermische Randbedingungen (Energie)

4.1.5.1 Von ANSYS CFX unterstützte Einlassrandbedingungen

Eine Einlassrandbedingung findet in der CFD immer dann Verwendung, wenn bekannt ist, dass die zu untersuchende Strömung an dieser Berandung des Strömungsgebietes in das Strömungsgebiet hinein gerichtet ist. Die hydraulischen und thermischen Randbedingungen an solchen Einlassrändern können in vielfältiger Weise definiert werden. Diese Definitionen

¹⁴ Die fluidabhängige Spezifikation von thermischen Randbedingungen ist nur für inhomogene Mehrphasenströmungen verfügbar. Für homogene Mehrphasenströmungen wird angenommen, dass sich die beiden Phasen lokal im thermischen Gleichgewicht befinden. Für weitergehende Informationen kann in (ANSYS Inc., 2009) nachgeschlagen werden.

können von der Art und Weise der Benutzervorgaben am Einlassrand (Massenstrom, Geschwindigkeit, Druck) und von der definierten Strömungsphysik (einphasig, mehrphasig, Mehrkomponenten-Strömung, Verbrennung, etc.) abhängig sein. Tabelle 10 und Tabelle 11 listen die derzeit in ANSYS CFX verfügbaren Typen und Optionen für Einlassrandbedingungen. Weitergehende Informationen zu diesen Randbedingungen sind in (ANSYS Inc., 2009) verfügbar.

4.1.5.2 Von ANSYS CFX unterstützte Auslassrandbedingungen

In CFD-Simulationen findet eine Auslassrandbedingung immer dann Verwendung, wenn bekannt ist, dass die Strömung an der jeweiligen Strömungsberandung nach außerhalb des Strömungsgebietes gerichtet ist. In diesem Fall erfordert die Spezifikation einer hydraulischen Auslassrandbedingung Vorgaben für den statischen Druck, die Geschwindigkeit oder den Massenstrom. Für alle anderen Transportgleichungen (Komponenten-Massenbrüche, Energie, passive Transportskalare, etc.) ist der Wert der jeweiligen Lösungsvariable am Auslassrand Teil der CFD-Lösung. Tabelle 12 zeigt eine Liste der in ANSYS CFX unterstützten Auslassrandbedingungen (siehe (ANSYS Inc., 2009)).

Einphasenströmung	Mehrphasenströmung
<ul style="list-style-type: none"> • Average Static Pressure • Normal Speed • Cartesian Velocity Components • Cylindrical Velocity Components • Mass Flow Rate • Static Pressure 	<ul style="list-style-type: none"> • Average Static Pressure • Fluid Velocity (inhomogeneous) • Normal Speed (homogeneous) • Cartesian Velocity Components (homogeneous) • Cylindrical Velocity Components (homogeneous) • Bulk Mass Flow Rate • Static Pressure • Degassing Condition (inhomogeneous) • Supercritical

Tabelle 12: Unterstützte hydraulische Auslassrandbedingungen in ANSYS CFX (Masse & Impuls)

Einphasenströmungen	Mehrphasenströmungen
<ul style="list-style-type: none"> • Cartesian Velocity Components • Cylindrical Velocity Components • Opening Pressure and Direction • Opening Pressure for Entrainment • Static Pressure and Direction • Static Pressure for Entrainment 	<ul style="list-style-type: none"> • Fluid velocity • Cartesian Velocity Components • Cylindrical Velocity Components • Opening Pressure and Direction • Opening Pressure for Entrainment • Static Pressure and Direction • Static Pressure for Entrainment

Tabelle 13: Unterstützte hydraulische Opening-Randbedingungen in ANSYS CFX

	Einphasenströmungen	Mehrphasenströmungen
Isothermal	<ul style="list-style-type: none"> • Fluid temperature 	<ul style="list-style-type: none"> • Fluid temperature
Thermal energy	<ul style="list-style-type: none"> • Static temperature • Opening temperature 	<ul style="list-style-type: none"> • Static temperature • Opening temperature • Fluid dependent
Total energy	<ul style="list-style-type: none"> • Static temperature • Opening temperature 	<ul style="list-style-type: none"> • Static temperature • Opening temperature • Fluid dependent
Fluid dependent		<ul style="list-style-type: none"> • Static temperature • Opening temperature • Fluid dependent¹⁵

Tabelle 14: Unterstützte thermische Opening-Randbedingungen in ANSYS CFX

¹⁵ Die fluidabhängige Spezifikation von thermischen Randbedingungen ist nur für inhomogene Mehrphasenströmungen verfügbar. Für homogene Mehrphasenströmungen wird angenommen, dass sich die beiden Phasen lokal im thermischen Gleichgewicht befinden. Für weitergehende Informationen kann in (ANSYS Inc., 2009) nachgeschlagen werden.

4.1.5.3 Von ANSYS CFX unterstützte Opening-Randbedingungen

Der Typ einer Opening-Randbedingung kann in CFD-Simulationen Verwendung finden, wenn an der Randbedingung sowohl Ausströmen als auch Einströmen in Bezug auf die betrachtete Strömungsgeometrie vorliegen kann. Dies kann sich sowohl auf verschiedene Positionen an der Randbedingung beziehen als auch einen Wechsel der Strömungsrichtung an der Randbedingung über die Zeit beinhalten. Die Tabelle 13 und Tabelle 14 zeigen die möglichen verschiedenen hydraulischen und thermischen Randbedingungen die in einem solchen Fall in ANSYS CFX gestellt werden können. Es ist zu beachten, dass die Art der thermischen Randbedingung auch abhängig ist von der gelösten Energietransportgleichung (Isotherme Fluide, Thermal Energy oder Total Energy).

4.1.5.4 Von ATHLET unterstützte Typen von Randbedingungen

Für die ATHLET-Simulation kann der Benutzer zwischen zwei verschiedenen physikalischen Modellen für die Simulation wählen:

- 5-Gleichungsmodell, bestehend aus separaten Kontinuitäts- und Energiegleichungen für beide Phasen und eine Gemisch-Impulserhaltungsgleichung
- vollständiges 2-Fluid-Modell mit 6 Erhaltungsgleichungen für Kontinuität, Impuls- und Energietransport für beide Phasen getrennt.

Die räumliche Diskretisierung von ATHLET entspricht einem Finite-Volumen-Verfahren für die Kontrollvolumen der ATHLET-Nodalisierung. Dabei werden die Kontinuitäts- und Energietransportgleichungen in den Knoten der Kontrollvolumen gelöst und die Impulserhaltungsgleichungen in den sogenannten Junctions, die die Verbindungen zwischen den Kontrollvolumen darstellen. In der CFD wäre das am ehesten mit einem Staggered-Grid-Verfahren mit räumlich versetzter Anordnung von Masse-/Energie- und auf der anderen Seite Impuls-Knoten zu vergleichen. Die erforderlichen Randbedingungen zur Lösung des resultierenden Gleichungssystems sind Massenstrom oder Druck für die Kontinuitäts- und Impulsgleichungen und Fluidtemperatur oder Enthalpie für die Energietransportgleichungen. Der in ATHLET verwendete Druck ist im Gegensatz zu ANSYS CFX der absolute Druck, während in ANSYS CFX ein auf einen Referenzdruck bezogener statische Druck verwendet wird.

Die Strömungsrichtung in den ATHLET-Objekten ist jeweils durch den Druckverlust über ds Element bestimmt. Tabelle 15 gibt eine Übersicht über die erforderlichen Randbedingungen und Lösungsgrößen in ATHLET. Die Lösungsgrößen sind der Druck, Dampf- und Wasser-Temperatur und der spezifische Dampfgehalt in den Kontrollvolumen sowohl der Massenstrom (5-Gleichungsmodell) oder die Massen und Geschwindigkeiten der jeweiligen Phasen (6-Gleichungsmodell) in den Junctions.

Der ATHLET-Code wurde speziell für die Berechnung von Mehrphasenströmungen und -systemen entwickelt. ATHLET enthält genaue Wasser-Wasserdampf-Tabellen und berechnet intern die Sättigungstemperatur. Wenn die Fluidtemperatur die Sättigungstemperatur überschreitet, werden die Strömungszustände als Mehrphasenströmung berechnet und die mehrphasigen Randbedingungen (insbesondere der spezifische Dampfgehalt) werden benötigt.

Detaillierte Informationen über die fluiddynamischen Modelle von ATHLET sind im ATHLET Users Manual dokumentiert (GRS, July 2006).

	Randbedingungen	Lösungsgrößen
Masse & Impuls	<ul style="list-style-type: none"> • Mass flow rate • Pressure 	<ul style="list-style-type: none"> • Liquid mass flow • Vapour mass flow • Liquid velocity • Vapour velocity • Pressure¹⁶
Energiegleichung	<ul style="list-style-type: none"> • Liquid Temperature • Enthalpy 	<ul style="list-style-type: none"> • Liquid temperature • Vapour temperature • Energy convected by liquid flow • Energy convected by vapour flow
	<ul style="list-style-type: none"> • Steam quality 	<ul style="list-style-type: none"> • Void fraction

Tabelle 15: Erforderliche Randbedingungen und Lösungsgrößen in ATHLET

4.1.6 Kombinationen von Kopplungsrandbedingungen von ANSYS CFX und ATHLET

In einer gekoppelten Simulation aus CFD- und Systemcode, also ANSYS CFX und ATHLET, müssen aus der Vielzahl der von beiden Codes unterstützten Randbedingungen (siehe vorangegangenes Kapitel) mögliche miteinander kompatible Kombinationen von Randbedingungstypen ausgewählt werden. In diesem Kapitel werden die möglichen Kombinationen von hydraulischen und thermischen Randbedingungen für gekoppelte Simulationen behandelt. Es ist dabei zum einen nicht ausgeschlossen, dass auch noch andere Kombinationen von ATHLET- und CFD-Randbedingungen möglich sind. Andererseits sind auch nicht alle im Folgenden aufgelistete Kombinationen von Randbedingungstypen im Rahmen des vorliegenden Prototypen realisiert worden, da der Entwicklungsaufwand die zur Verfügung stehende Zeit des Teilvorhabens bei weitem überstieg.

4.1.6.1 Kopplung an ANSYS CFX Einströmrändern

Für eine Kopplung von ANSYS CFX und ATHLET an CFX-Einströmrändern unter der Annahme von einphasigen Strömungsbedingungen wurden fünf verschiedene Kombinationen von Austauschparametern zwischen ATHLET und ANSYS CFX definiert, siehe hierzu auch Tabelle 16. So wird z.B. für die erste Parameterkombination der Massenstrom von ATHLET an CFX übergeben während der resultierende Druckwert am Interface von CFX an ATHLET übermittelt wird. Entsprechend sind die anderen Kopplungsoptionen für Geschwindigkeiten, Totaldruck und Statischen Druck definiert. Während der Laufzeit des Forschungsvorhabens

¹⁶ Static pressure in ATHLET includes the system pressure before the flow simulation.

wurde ein Kopplungsinterface für die Kopplungsparameterkombination 1 aus Tabelle 16 implementiert und anhand vereinfachter Testfälle validiert (siehe 4.1.7). Weitergehende Informationen hinsichtlich der Definition der einzelnen Kopplungsparameter an den Kopplungsinterfacen von ATHLET und ANSYS CFX sind in (Waata C.L., 2008) dokumentiert.

Kopplungsrandbedingungen	ANSYS CFX	ATHLET
1 ¹⁷	Mass flow rate, kg/s	Pressure, Pa
2	Cartesian velocity, m/s	Pressure, Pa
3	Total pressure, Pa	Mass flow rate, kg/s
4	Static Pressure, Pa	Mass flow rate, kg/s

Tabelle 16: Hydraulische Kopplungsbedingungen für Einströmrandbedingungen und Einphasenströmung

Kopplungsrandbedingungen	ANSYS CFX	ATHLET
1 ¹⁸	Static temperature, K	Total enthalpy , J/kg
2	Total temperature,	Total enthalpy , J/kg
3	Total enthalpy, J/kg	Static temperatre, °C

Tabelle 17: Thermische Kopplungsrandbedingungskombinationen für Einlassränder und einphasige Strömung

Für die thermischen Kopplungsrandbedingungen hängen in ANSYS CFX die benötigten Einlassrandbedingungen vom verwendeten Energietransportgleichungsmodell ab. In ATHLET steht dem Benutzer die Möglichkeit der Spezifikation der totalen Enthalpie oder von Temperaturrendbedingungen zur Verfügung. Mit diesen Möglichkeiten wurden die in

¹⁷ Für die Parameterkombination 1 wurde in diesem Forschungsvorhaben ein Kopplungsinterface entwickelt und getestet.

¹⁸ Für die Parameterkombination 1 wurde in diesem Forschungsvorhaben ein Kopplungsinterface entwickelt und getestet.

Tabelle 17 aufgeführten Kopplungsrandbedingungskombinationen für das sogenannte „total energy heat transfer model“ in ANSYS CFX definiert. Während der Laufzeit des Forschungsvorhabens wurde ein Kopplungsinterface für die Kopplungsparameterkombination 1 aus Tabelle 17 implementiert und anhand vereinfachter Testfälle validiert (siehe 4.1.7). Weitergehende Informationen hinsichtlich der Definition der einzelnen Kopplungsparameter an den Kopplungsinterfaces von ATHLET und ANSYS CFX sind in (Waata C.L., 2008) dokumentiert.

4.1.6.2 Kopplung an ANSYS CFX Ausströmrändern

Für Ausströmränder ist in ANSYS CFX die Strömungsrichtung festgelegt und nach ausserhalb des CFX-Strömungsgebietes gerichtet. Somit sind hydraulische Randbedingungen für Unterschall-Ausströmränder mit Randbedingungen auf statischen Druck, Geschwindigkeit oder Massenstrom erforderlich. Für alle anderen Variablen sind die Werte am Ausströmrand jedoch ein Teil der CFD-Lösung und erfordern keine Kopplung mit dem Systemcode (keine bidirektionalen thermischen Kopplungsrandbedingungen). Die ermittelten Werte dieser Variablen werden also lediglich in einer 1ßWegßKopplung an ATHLET übermittelt. Tabelle 18 zeigt unter diesen Voraussetzungen die möglichen Randbedingungskombinationen. Während der Laufzeit des Forschungsvorhabens wurde ein Kopplungsinterface für die Kopplungsparameterkombination 1 aus Tabelle 17 implementiert und anhand vereinfachter Testfälle validiert (siehe 4.1.7).

Kopplungsrandbedingungen	ANSYS CFX	ATHLET
1 ¹⁹	Mass flow rate, kg/s	Pressure, Pa
2	Average static pressure, Pa	Mass flow rate , kg/s
3	Cartesian velocity, m/s	Pressure, Pa
4	Static Pressure, Pa	Mass flow rate, kg/s

Tabelle 18: Hydraulische Kopplungsbedingungen für Ausströmrandbedingungen und Einphasenströmung

4.1.6.3 Kopplung an ANSYS CFX Opening-Randbedingungen

Wie in 4.1.5.3 beschrieben, stehen bei Verwendung von Opening-Randbedingungen in ANSYS CFX verschiedene hydraulische und thermische Randbedingungen zur Verfügung. Die Verwendung von Opening-Randbedingungen ist insbesondere attraktiv und erforderlich, wenn Strömungsprozesse mit möglicher vollständiger Strömungsumkehr betrachtet werden müssen. Randbedingungskombinationen mit ATHLET wurden für Druck- und Geschwindigkeitsrandbedingungen am Opening definiert, wie in Tabelle 19 aufgeführt. Die

¹⁹ Für die Parameterkombination 1 wurde in diesem Forschungsvorhaben ein Kopplungsinterface entwickelt und getestet.

Definitionen für die verschiedenen verwendeten Druckrandbedingungen am Opening sind in (ANSYS Inc., 2009) dokumentiert. Testfälle wurden in Kapitel 4.1.7 mit der Kopplungsrandbedingung 3 untersucht um die Kopplungsrandbedingungen unter der Bedingung von Strömungsumkehr zu verifizieren.

Kopplungsrandbedingungen	ANSYS CFX	ATHLET
1	Opening Pressure for Entrainment, Pa	Mass flow rate, kg/s
2	Opening Pressure and direction, Pa	Mass flow rate, kg/s
3 ²⁰	Cartesian velocity components, m/s	Static Pressure , Pa
4	Static Pressure for Entrainment, Pa	Mass flow rate, kg/s
5	Static Pressure and Direction, Pa	Mass flow rate, kg/s

Tabelle 19: Hydraulische Kopplungsbedingungen für Opening-Randbedingungen und Einphasenströmung

Kopplungsrandbedingungen	ANSYS CFX	ATHLET
1 ²¹	Opening temperature, K	Enthalpy, J/kg
2	Static temperature, K	Enthalpy, J/kg

Tabelle 20: Thermische Kopplungsbedingungen für Opening-Randbedingungen und Einphasenströmung

²⁰ Für die Parameterkombination 3 wurde in diesem Forschungsvorhaben ein Kopplungsinterface entwickelt und getestet.

²¹ Für die Parameterkombination 1 wurde in diesem Forschungsvorhaben ein Kopplungsinterface entwickelt und getestet.

Für die thermischen Kopplungsrandbedingungen am Opening kann die statische Temperatur nur in Kombination mit dem „total energy model“ von ANSYS CFX verwendet werden (siehe Tabelle 20).

4.1.7 Verifikation der ANSYS CFX \leftrightarrow ATHLET Kopplung

Für die in diesem Forschungsvorhaben entwickelte Kopplungsschnittstelle zwischen ANSYS CFX und ATHLET wurden eine Reihe von Verifikations- und Validierungstestfällen untersucht. Ziel dieser Untersuchungen war der Nachweis, dass die entwickelte Kopplungsschnittstelle den Datenaustausch und die algorithmische Kopplung beider Codes in der beabsichtigten Art und Weise ausführt und dass für eine gewisse Anzahl von einfachen Testfällen die erzielten Ergebnisse physikalisch richtig sind. Um Letzteres zu überprüfen wurden entweder Testfälle mit bekannter Lösung untersucht bzw. die Ergebnisse von gekoppelten Simulationen mit den Ergebnissen von mit jeweils nur einem der beiden Codes ausgeführten Simulationen verglichen.

Die verschiedenen in den folgenden Abschnitten 0 – 4.1.7.4 beschriebenen Testfälle wurden unter folgenden Bedingungen aufgesetzt und untersucht:

- Testfall mit einer Kopplungsrandbedingung an einer ANSYS CFX Einlassrandbedingung mit korrespondierender ATHLET Kopplungsbedingung
- Testfall mit einer Kopplungsrandbedingung sowohl an einer ANSYS CFX Einlass- als auch Auslassrandbedingung mit korrespondierender ATHLET Kopplungsbedingung; offenes System
- Testfall mit einer Kopplungsrandbedingung sowohl an einer ANSYS CFX Einlass- als auch Auslassrandbedingung mit korrespondierender ATHLET Kopplungsbedingung; geschlossenes System

Alle Testfälle wurden zunächst nur für Einphasenströmungen als transiente Strömungssimulation in ANSYS CFX und ATHLET untersucht.

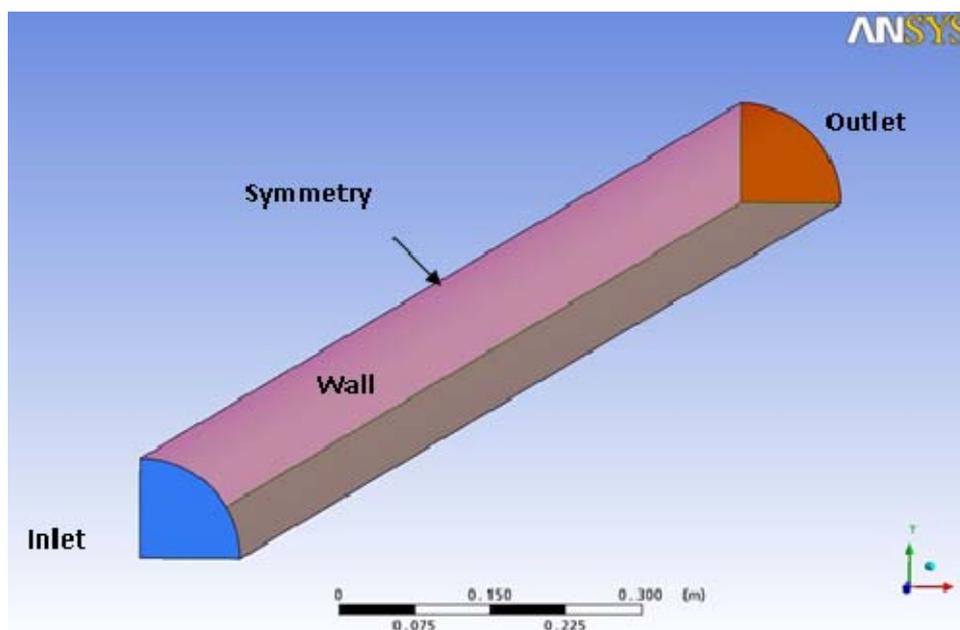


Abb. 45: 3d-Modell eines $\frac{1}{4}$ Symmetriesegments eines horizontalen Rohres

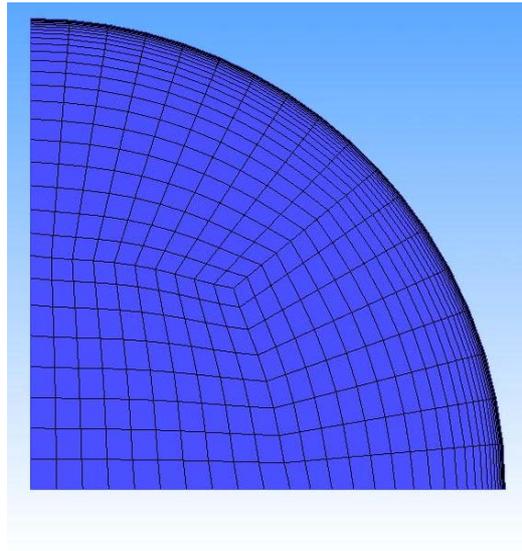


Abb. 46: Rohrquerschnitt der Testfallgeometrie mit dem 3d-Gitternetz der CFD-Simulation

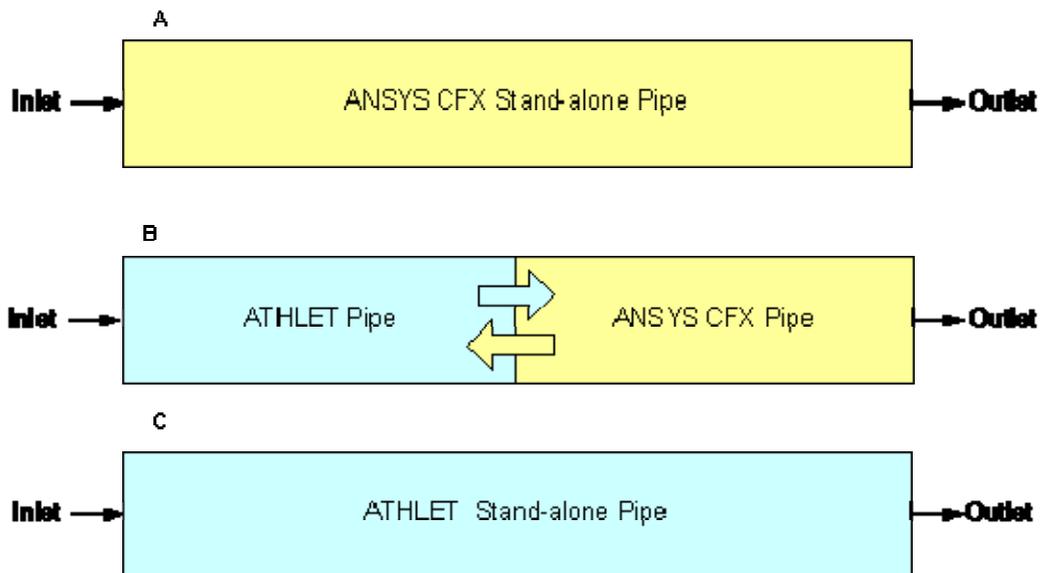


Abb. 47: Schematische Darstellung der drei ausgeführten und miteinander verglichenen Simulationsrechnungen

4.1.7.1 Testfall 1: Horizontales Rohr mit Kopplung an einer Einlassrandbedingung von ANSYS CFX

In dieser Testfalluntersuchung wird die Strömung durch ein gerades kreisrundes Rohr untersucht. Der Testfall dient der Verifikation und Validierung der entwickelten Kopplungsschnittstelle, speziell für die Kopplung mittels hydraulischer und thermischer Randbedingungen an Einströmrandern des ANSYS CFX Strömungsgebietes. Im

vorliegenden Testfall werden der Massenstrom und der Druck zwischen den beiden Codes ausgetauscht.

4.1.7.1.1 Das ANSYS CFX Modell

Für die Testsimulationen wird ein Rohr mit einer Gesamtlänge von 14m und einem Durchmesser von 0,20m betrachtet. Das ANSYS CFX Modell der Geometrie ist in Abb. 45 zu sehen. Auf Grund der höheren Rechenanforderungen von CFD-Verfahren ist es eine standardmäßige Herangehensweise, alle zur Verfügung stehenden Symmetriebedingungen für eine CFD-Simulation auszunutzen. Im vorliegenden Fall wird ein Viertel des Rohres mit angenommener 1/4-Symmetrie mit dem CFD-Verfahren berechnet. Beim Austausch des Massenstromes zwischen dem Systemcode und dem CFD-Verfahren muss dieser Symmetriefaktor berücksichtigt werden. Abb. 46 zeigt die Vernetzung des Rohrquerschnitts der CFD-Geometrie mit wandnaher Verfeinerung zur verbesserten Grenzschichtauflösung unter Verwendung eines in ANSYS ICEM/CFD erzeugten Hexaedergitters.

	eigenständige ANSYS CFX Simulation im 14m langen Rohr	gekoppelte ANSYS CFX Simulation im 7m langen Rohr
Hexahedral Mesh Elements	<ul style="list-style-type: none"> • 94,400 	<ul style="list-style-type: none"> • 47, 000
Inlet Boundary Condition	<ul style="list-style-type: none"> • Static Pressure : Pressure step function • Total enthalpy: $855 \times 10^3 \text{ J/kg}$ 	<ul style="list-style-type: none"> • Mass Flow Rate : $1.0 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$ • Total enthalpy : $855 \times 10^5 \text{ J/kg}$
Outlet Boundary Condition	<ul style="list-style-type: none"> • Average Static Pressure: 0.0 Pa 	<ul style="list-style-type: none"> • Average Static Pressure 0.0 Pa
Reference Pressure	<ul style="list-style-type: none"> • $98 \times 10^5 \text{ Pa}$ 	<ul style="list-style-type: none"> • $98 \times 10^5 \text{ Pa}$
Wall Boundary Condition	<ul style="list-style-type: none"> • No slip • Adiabatic wall 	<ul style="list-style-type: none"> • No slip • Adiabatic wall
Heat Transfer Model	<ul style="list-style-type: none"> • Total Energy 	<ul style="list-style-type: none"> • Total Energy
Turbulence Model	<ul style="list-style-type: none"> • Shear Stress Transport Model 	<ul style="list-style-type: none"> • Shear Stress Transport Model
Material	<ul style="list-style-type: none"> • Compressible water (from IAPWS Table) 	<ul style="list-style-type: none"> • Compressible liquid (from IAPWS Table)
Advection scheme	<ul style="list-style-type: none"> • Second order, High resolution 	<ul style="list-style-type: none"> • Second order, High resolution
Time step	<ul style="list-style-type: none"> • 0.01 s 	<ul style="list-style-type: none"> • 0.01s

Tabelle 21: ANSYS CFX Randbedingungen für die gekoppelte Rohrströmungs-Simulation

Für die gekoppelte Simulation wurden zwei jeweils 7m lange Rohrabschnitte in ATHLET und ANSYS CFX simuliert, die in der Mitte miteinander zu einem 14m langen Rohr gekoppelt wurden. Um das Ergebnis der gekoppelten Rechnung überprüfen zu können, wurden eigenständige Simulationen mit ANSYS CFX und ATHLET auch für die 14m lange Rohrgeometrie und gleiche Randbedingungen ausgeführt (siehe Abb. 47). Die betrachteten

Strömungsbedingungen sind für eine Einphasenströmung von Wasser, dessen Stoffeigenschaften in CFX mittels dem IAPWS-IF97 Standard berechnet werden. Die übrigen Randbedingungen, Materialdaten und das CFD-Setup bestimmende Turbulenzmodell-, Energietransportmodell- und Solvereinstellungen sind in Tabelle 21 für die eigenständige und gekoppelte ANSYS CFX Simulation zusammengefasst.

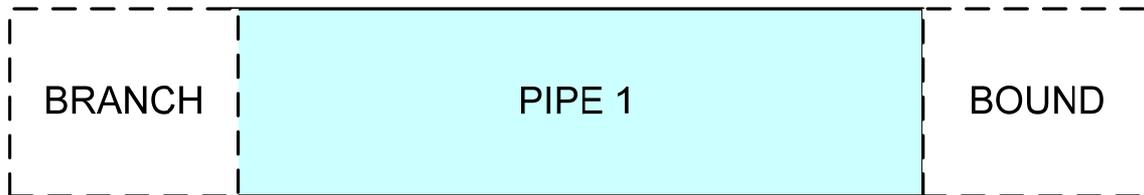


Abb. 48: Das ATHLET-Modell der Rohrströmungssimulation

	eigenständige ATHLET Simulation	Gekoppelte ATHLET Simulation
Number of objects	• 3	• 3
Number of nodes in thermal fluid object	• 14	• 7
BRANCH object (inlet)	<ul style="list-style-type: none"> • Static pressure : Pressure step function • Enthalpy: 855×10^3 J/kg • Fluid temperature: $200 \text{ }^\circ\text{C}$ 	<ul style="list-style-type: none"> • Static pressure Pressure step function) • Enthalpy 855×10^3 J/kg • Fluid temperature: $200 \text{ }^\circ\text{C}$
BOUND (outlet)	• 98×10^5 Pa	• Proved by ANSYS CFX
Friction factor	• 0.007215	• 0.007215

Tabelle 22: ATHLET Randbedingungen für den Rohrströmungs-Testfall

4.1.7.1.2 Das ATHLET-Modell

In ATHLET wird das horizontale Rohr lediglich durch 3 Objekte der Nodalisierung repräsentiert. Das BRANCH-Objekt wird in ATHLET verwendet, um zeitabhängige Größen am Einlassrand vorgeben zu können. Das zweite Objekt ist das „Thermal fluid Objekt“, hier mit PIPE1 benannt. Das dritte Objekt schließlich ist das BOUND-Objekt, das die Auslassrandbedingung repräsentiert. Es wird angenommen, dass die Durchströmung des Rohrs von links (BRANCH) nach rechts (BOUND) erfolgt und keine Strömungsumkehr stattfinden kann. Im Fall der gekoppelten Rechnung wird das BOUND-Objekt mit der Einlassrandbedingung von ANSYS CFX über die entwickelte Kopplungsschnittstelle gekoppelt. In Abb. 48 sind das BRANCH- und das BOUND-Objekt mit gestrichelter Umrandung gezeichnet um anzudeuten, dass es sich bei diesen Objekten um volumelose Objekte handelt, in denen keine Kontinuitätsgleichung gelöst wird. Der Rohrdurchmesser entspricht mit 0,20m dem Durchmesser im CFX-Modell. Für die eigenständige ATHLET-Simulation ist das PIPE1-Objekt 14m lang mit 14 internen Kontrollvolumen, während für die gekoppelte Simulation das PIPE1-Objekt 7m lang ist und dementsprechend nur 7

Kontrollvolumen aufweist. Tabelle 22 fasst die ATHLET-Randbedingungen für die ausgeführten Simulationen zusammen.

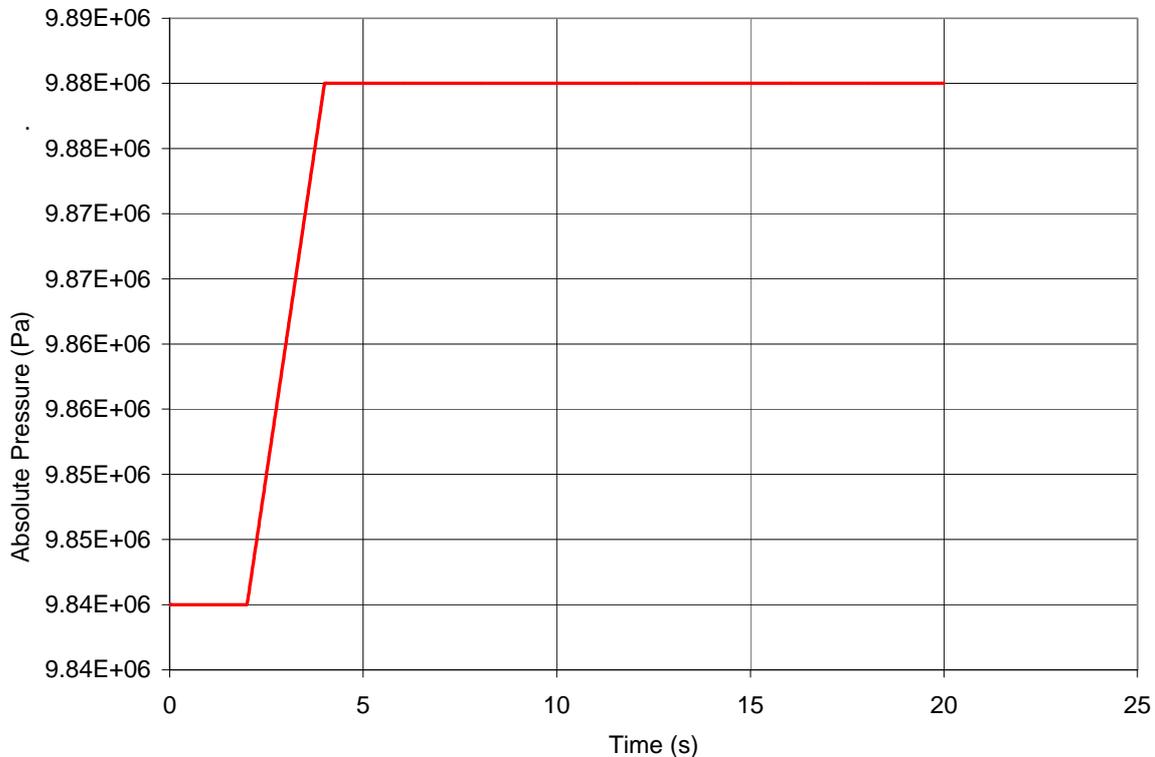


Abb. 49: Stufenfunktion für den Druck am Einlassrand

4.1.7.1.3 Vorgeschriebener Drucksprung am Einlass

Um eine transiente Strömungsänderung in der Zeit für den Testfall zu simulieren, wird eine stufenweise Änderung des Druckes am Einlassrand angenommen (siehe Abb. 49). Der hier definierte Druck ist der absolute Druck. Mit dem so vorgegebenen Druck am Einlassrand wird eine transiente Simulation über 20s Realzeit ausgeführt.

4.1.7.1.4 Ergebnisse der eigenständigen und gekoppelten Simulationsrechnungen

Abb. 50 und Abb. 51 zeigen den Konvergenzverlauf der maximalen Residuen für Massenerhaltung und Impulstransport für die eigenständige und die gekoppelte ANSYS CFX Simulation. In beiden Fällen kann eine konvergente Lösung mit maximalen Residuen kleiner als 1.0×10^{-3} über den gesamten Simulationszeitraum erreicht werden.

Die Abb. 52 und Abb. 53 zeigen die Geschwindigkeitsverteilung in einer Schnittebene durch das ANSYS CFX Simulationsgebiet sowohl für die eigenständige und die gekoppelte ANSYS CFX Simulation. hierbei wird ein 14m langes Rohr für die eigenständige Simulation mit einem 7m langen Rohrabschnitt für die gekoppelte Simulation verglichen. Die dargestellte Geschwindigkeitsverteilung ist die nach 20s Simulationszeit. Es ist zu sehen, dass in der eigenständigen CFX-Simulation beginnt die Rechnung mit einem Null-Massenstrom und mit ansteigendem Druckunterschied zwischen Einlass- und Auslassrand entwickelt sich eine ausgebildete Strömung. In der gekoppelten Simulation erhält die ANSYS

CFX Simulation den Massenstrom am Einlassrand aus der Kopplungsschnittstelle zu ATHLET. Dies ist ein integraler Wert, der in ein Blockprofil für die ANSYS CFX Simulation umgesetzt wird. Über die 7m Rohrlänge der CFX-Geometrie entwickelt sich dann in der gekoppelten Simulation wiederum ein ausgebildetes Strömungsprofil über den Rohrquerschnitt.

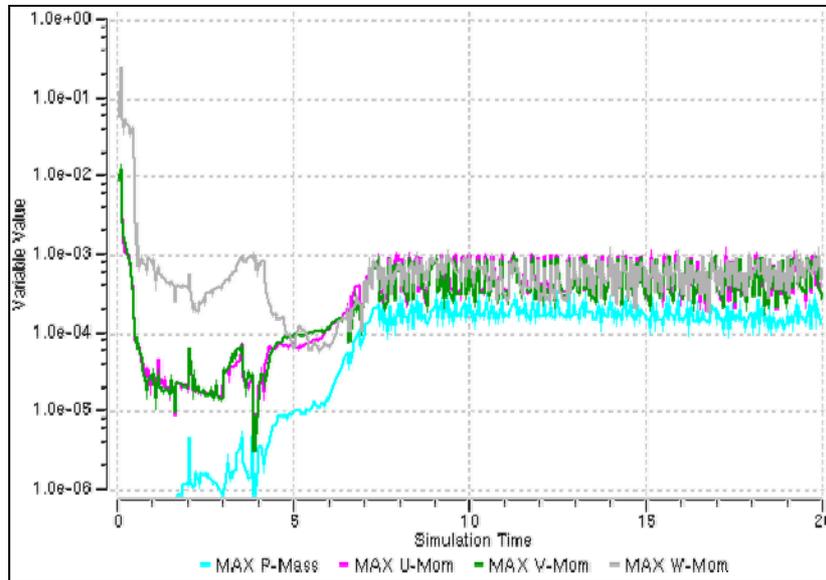


Abb. 50: Maximum Residual Plot für die eigenständige ANSYS CFX Simulation

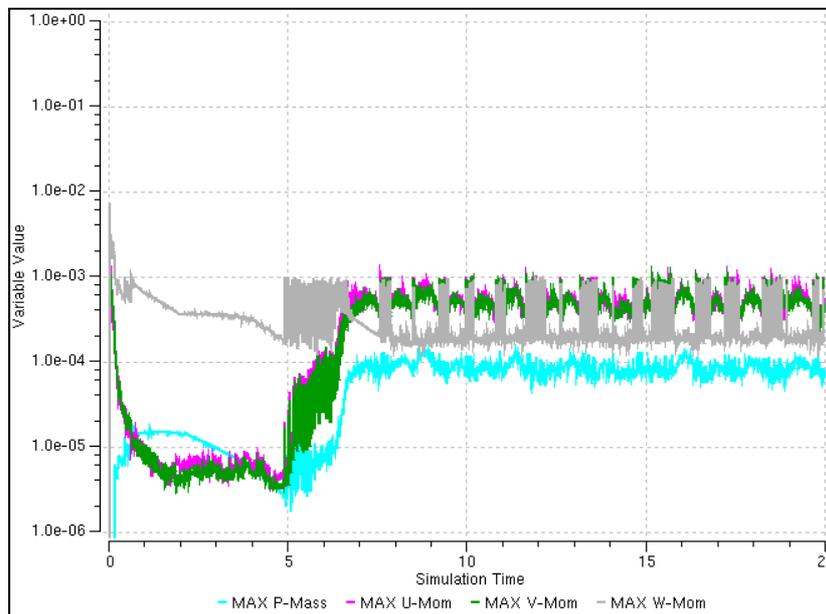


Abb. 51: Maximum Residual Plots für die gekoppelte Simulation

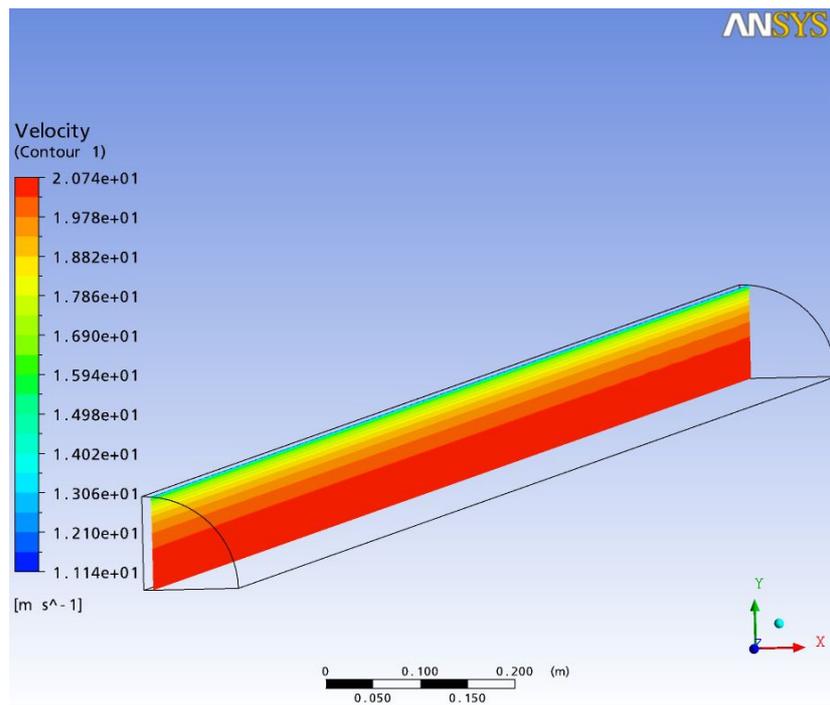


Abb. 52: Geschwindigkeits-Konturplot für die eigenständige ANSYS CFX Simulation

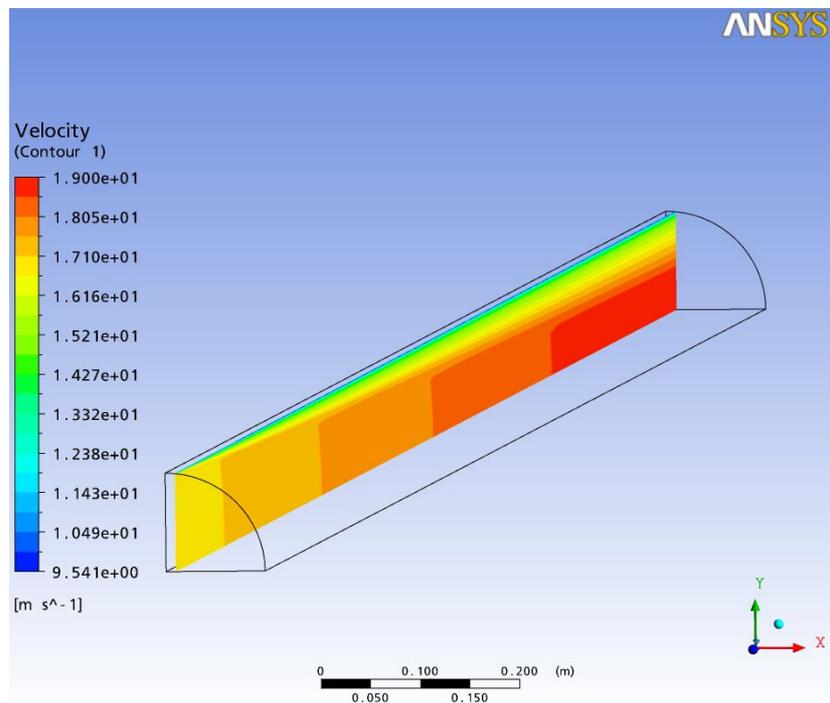


Abb. 53: Geschwindigkeits-Konturplot für die gekoppelte Simulation

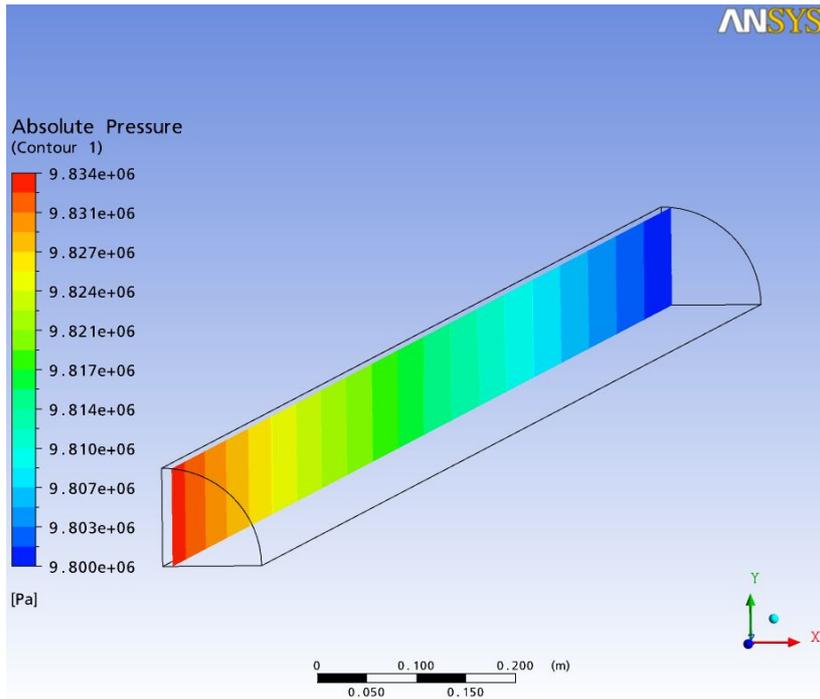


Abb. 54: Konturplot für die Verteilung des absoluten Drucks für die eigenständige ANSYS CFX Simulation

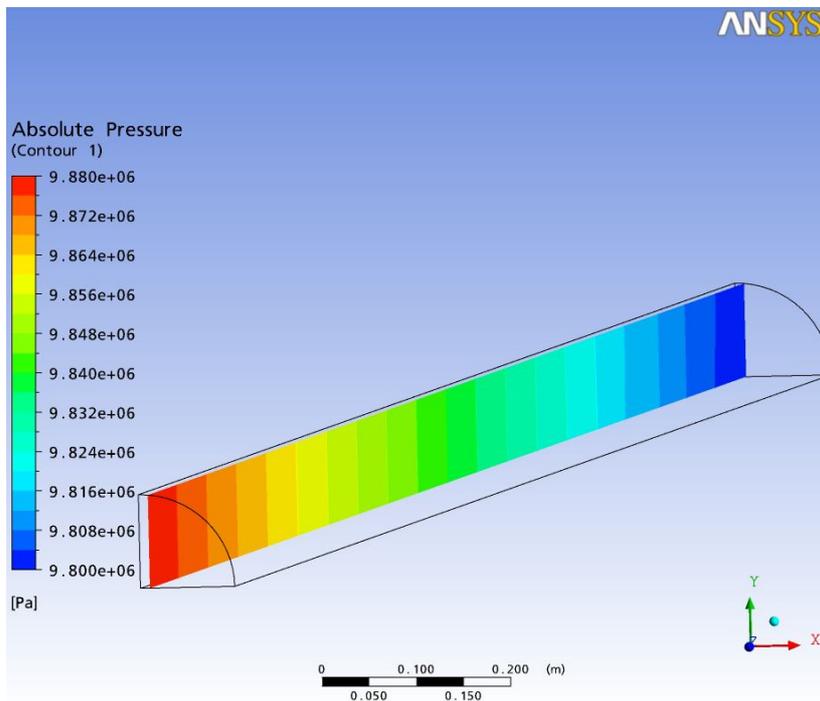


Abb. 55: Konturplot für die Verteilung des absoluten Drucks für die gekoppelte Simulation

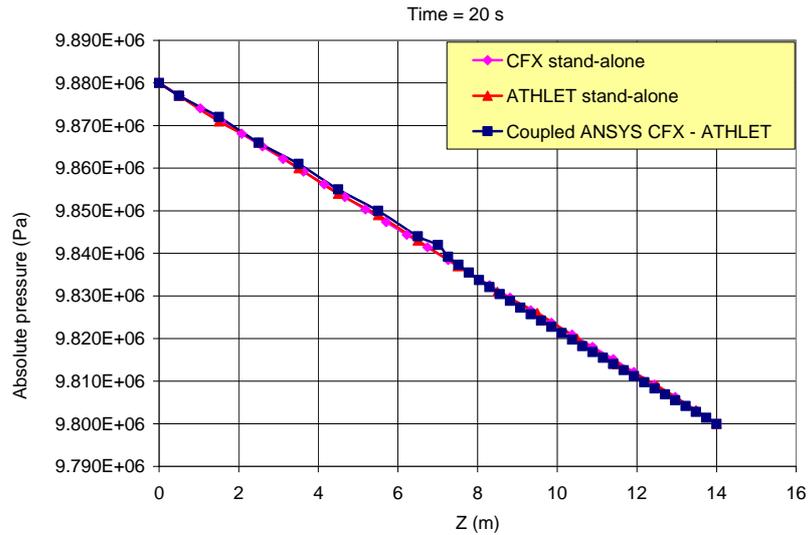


Abb. 56: Absoluter Druck über der Rohrlänge im Vergleich der eigenständigen und gekoppelten Simulationen

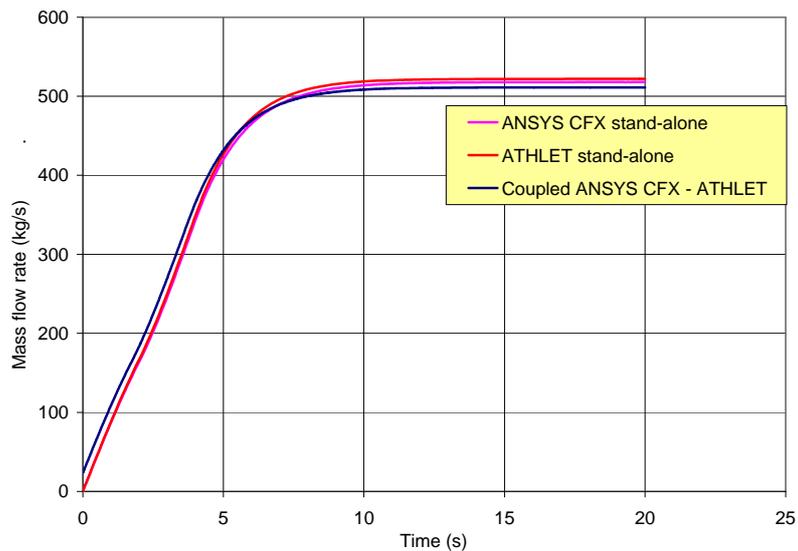


Abb. 57: Massenstrom am Einlassrand über der Zeit im Vergleich der eigenständigen und gekoppelten Simulationen

Abb. 54 und Abb. 55 zeigen die Druckverteilung für den absoluten Druck über die berechnete Rohrlänge von 14m respektive 7m in der eigenständigen bzw. gekoppelten Simulation mit ANSYS CFX. Wie zu erwarten ist der Druckverlust über das vollständige Rohr annähernd doppelt so hoch wie über das nur halb so lange Rohrsegment. In mehr quantitativer Weise ist das auch in Abb. 56 zu beobachten, in der der absolute Druck über der Rohrlänge nach 20s Simulationszeit aufgetragen ist und in diesem Diagramm auch die Werte aus den beiden ATHLET-Simulationen berücksichtigt sind. Die erkennbaren kleinen Abweichungen erklären sich aus der verschiedenen berechneten Wandschubspannung und damit den viskosen

Reibungsverlusten in der ANSYS CFX Simulation in Abhängigkeit davon, ob die Strömung bei L'7m bereits voll ausgebildet ist oder aus dem ATHLET-Massenstrom mit einem Blockprofil neu initialisiert wird und sich dann erst von dieser Position an anfängt neu zu entwickeln. Diese Unterschiede können in Zukunft durch heuristische Annahmen über die Geschwindigkeitsverteilungen an Kopplungsquerschnitten weiter reduziert werden.

Abb. 57 zeigt dann den resultierenden Massenstrom für die eigenständigen und gekoppelten Rohrsimulationen über der Zeit. Die Entwicklung des Massenstroms über der Zeit zeigt in dieser gekoppelten Simulation nur sehr geringe Abweichungen von den eigenständigen Rechnungen, was wiederum auf die leicht unterschiedliche Behandlung der viskosen Wandreibung in den Einzelsimulationen zurückgeführt werden kann.

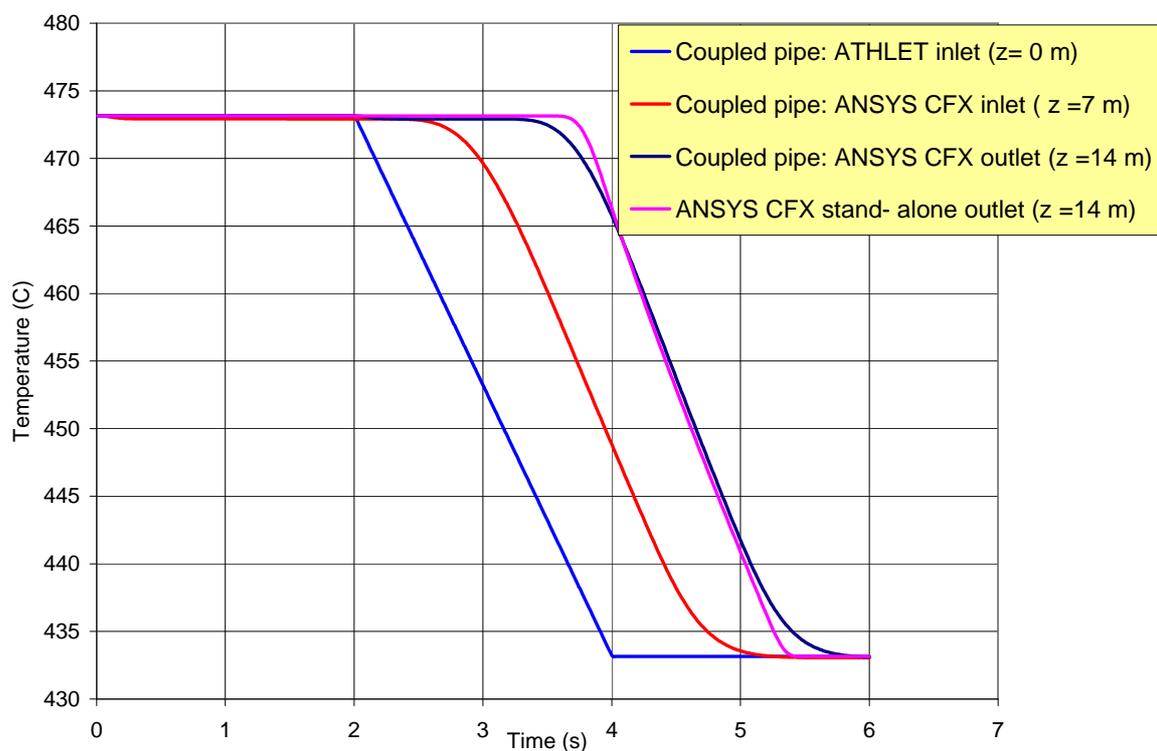


Abb. 58: Fluid-Temperatur-Profile über der Zeit für verschiedene Positionen und im Vergleich der eigenständigen und gekoppelten Simulationen

Zur Untersuchung der thermischen Kopplungs-Randbedingungen und diesbezüglichen Verifizierung des Kopplungsinterfaces wurde der Strömung am Einlass eine Temperaturtransiente aufgeprägt (Abb. 58, ATHLET Inlet). Es ist zu sehen, dass auf Grund der groben Nodalisierung in dem Rohrsegment von ATHLET das abschnittsweise lineare Temperaturprofil vom Einlassrand am BRANCH-Objekt bereits deutliche Anzeichen von numerischer Diffusion aufweist („Verrundung“ der zeitlichen Temperaturänderungen). Der am ANSYS CFX Einlassrand von ATHLET übergebene Temperaturwert wird auf dem anschließenden 7m langen Rohrsegment jedoch weitgehend ohne weitere Anzeichen numerischer Diffusion fast unverändert bis zum Auslassrand der CFX-Geometrie konvektiert.

Im Vergleich mit einer auf dem 14m langen Rohr ausgeführten eigenständigen ANSYS CFX Simulation kann man erkennen, dass die eigenständige ANSYS CFX Simulation deutlich geringere Spuren von numerischer Diffusion der abschnittsweise linearen, zeitlichen Temperaturänderung aufweist. Der für den Auslassrand der ANSYS CFX Geometrie berechnete Zeitversatz der zeitlichen Temperaturänderung ist für die eigenständige ANSYS CFX Simulation und für die gekoppelte ATHLET-ANSYS CFX-Simulation in guter Genauigkeit annähernd identisch.

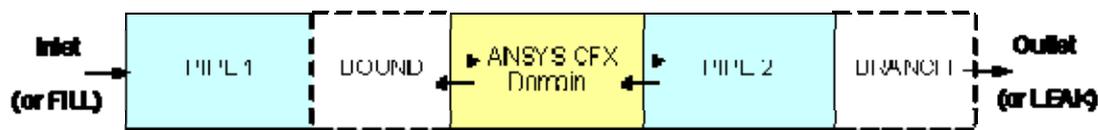


Abb. 59: Schematische Darstellung der gekoppelten Simulation eines offenen Systems

4.1.7.2 Testfall 2: Beispiel einer gekoppelten Simulation eines offenen Systems

Um den simultanen Datenaustausch an zwei Kopplungsschnittstellen zu testen, z.B. an einem Einlass- und einem Auslassrand einer CFX-Geometrie, wurde eine gekoppelte Simulation eines offenen Systems untersucht. Eine schematische Darstellung dieses Strömungssetups findet sich in Abb. 59. In diesem Fall sind die jeweils von ATHLET und ANSYS CFX berechneten Rohrsegmente 2m lang und haben einen Durchmesser von 0.20m. In diesem Testfall wurde wiederum eine Einphasenströmung von Wasser berechnet. Die Strömung durchfließt zuerst das von ATHLET berechnete PIPE1, dann die ANSYS CFX Strömungsgeometrie und anschließend das wiederum von ATHLET berechnete PIPE2. Dass es sich bei dem berechneten System um ein offenes System handelt, wird durch Verwendung der FILL- und LEAK-Randbedingungen von ATHLET gekennzeichnet. Mit dem FILL-Modell wird für ATHLET der Massenstrom vorgegeben und diese Masse wird mit dem LEAK-Modell wieder aus dem System abgeführt. In diesem Fall werden sowohl am CFX-Einlassrand als auch am CFX-Auslassrand Daten mit ATHLET ausgetauscht. Am CFX-Einlassrand werden Druck und Temperatur an das BOUND-Objekt von ATHLET weitergegeben und Massenstrom sowie die totale Enthalpie werden von dem letzten JUNCTION-Objekt von PIPE1 von ATHLET an ANSYS CFX als Inlet-Parameter übergeben. Auf der anderen Seite der ANSYS CFX Domain werden der von CFX berechnete Massenstrom an das erste JUNCTION-Objekt von PIPE2 übergeben und im Gegenzug übergibt ATHLET den dazu korrespondierenden Druckwert an ANSYS CFX. Das BRANCH-Objekt wird zur Kontrolle des Systemdrucks in dem offenen System verwendet. Die gekoppelte Simulation wurde als transiente Simulation über einen Zeitraum von 10s Realzeit ausgeführt. Die ATHLET-Segemente der Strömungsgeometrie wurden dafür jeweils in 5 Kontrollvolumen respektive 6 JUNCTIONS unterteilt.

In dieser gekoppelten Simulation konnte für ANSYS CFX eine sehr gute Konvergenz erzielt werden, bei der die Kontinuitätsgleichung mit maximalen Residuen von 10^{-7} auf ein sehr niedriges Niveau auskonvergierte (siehe Abb. 60). Die Entwicklung des massenstroms über der Zeit in Abb. 61 zeigt auch, dass die Kopplungsparameter an den Kopplungsschnittstellen richtig ausgetauscht werden. Der Massenstrom an dem Einlass- und Auslassrand des ANSYS CFX Strömungsgebietes entwickelt sich entsprechend der mit dem FILL-Modell am

Einlassrand der ATHLET PIPE1-Geometrie vorgegebenen Rampenfunktion für den Massenstrom.

Auf Grund der expliziten Kopplung mit dem daraus resultierenden Versatz in der transienten Simulation von ANSYS CFX und ATHLET um einen Zeitschritt kommt es zu einem kleineren Fehler in der integralen Massenbilanz zwischen dem Einlass- und dem Auslassrand von 0.3% zu Beginn der Simulation und von 0.003% zum Zeitpunkt der rampenartigen Massenstromänderung.

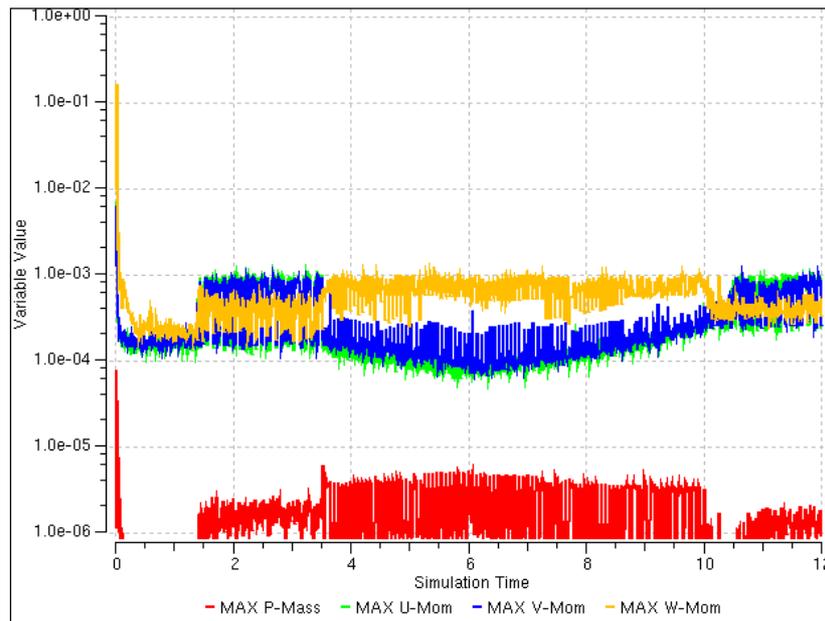


Abb. 60: Maximale Residuen von Masse und Impuls während der gekoppelten Simulation des offenen Systems

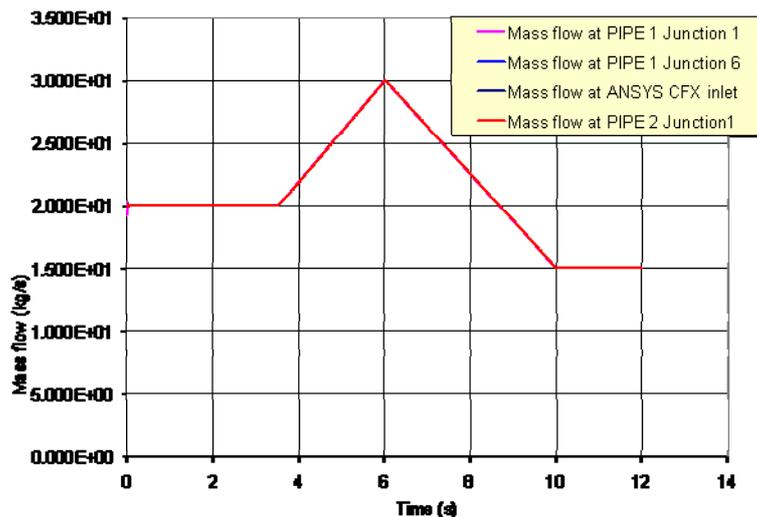


Abb. 61: Entwicklung des Massenstroms über der Zeit, aufgezeichnet an den verschiedenen Kopplungsschnittstellen der Simulation

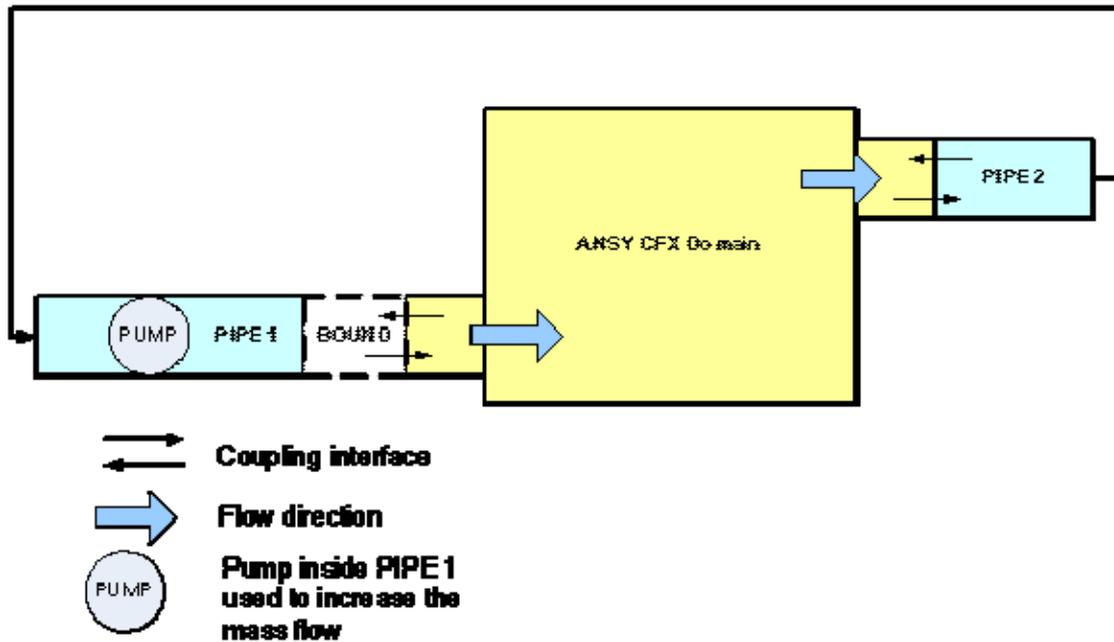


Abb. 62: Schematische Darstellung der untersuchten gekoppelten Simulation eines geschlossenen Strömungskreislaufs

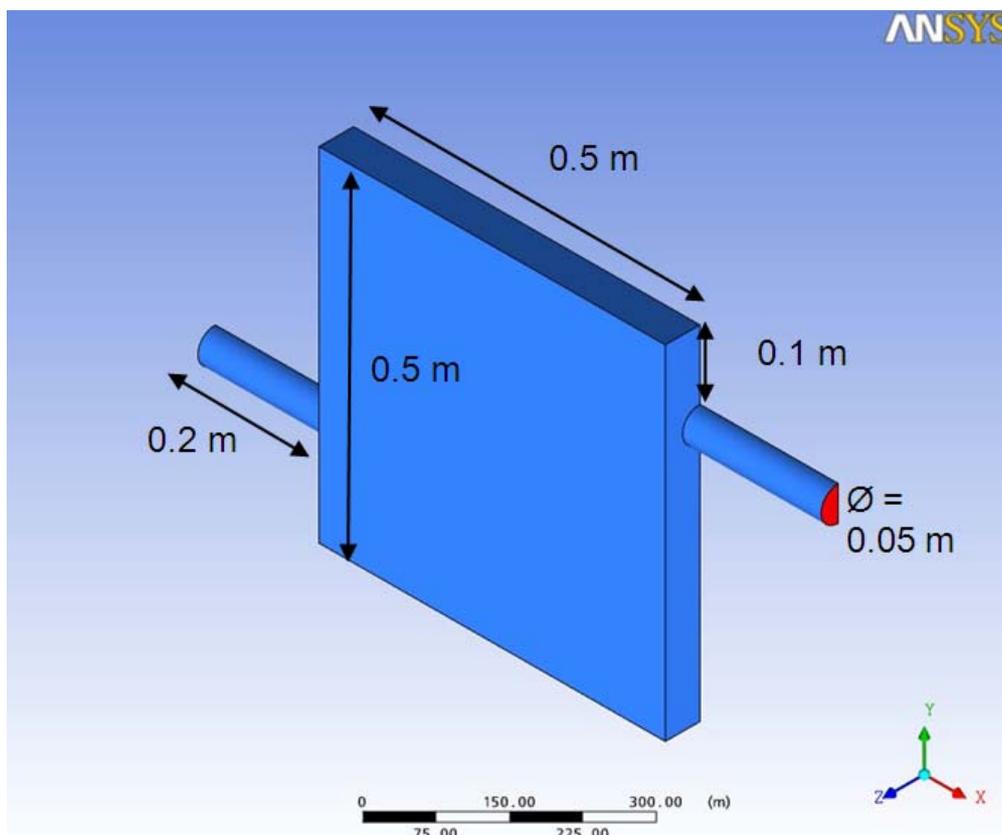


Abb. 63: Die ANSYS CFX Strömungsgeometrie

4.1.7.3 Testfall 3: Beispiel einer gekoppelten Simulation für ein geschlossenes System

In diesem Testfall wird nun ein geschlossener Strömungskreislauf untersucht. Eine schematische Darstellung des Strömungssystems ist in Abb. 62 dargestellt. Das von ANSYS CFX berechnete Strömungsgebiet ist in diesem Fall kein Rohrsegment, sondern eine 3-dimensionale Kavität mit Inlet- und Outlet-Rohrstutzen, die wiederum über Einlass- und Auslass-Kopplungsrandbedingungen mit einer ATHLET-Simulation für die übrigen Komponenten des geschlossenen Strömungskreislaufs verbunden sind. Am CFX-Einlassrand wird der absolute Druck und die Temperatur an das BOUND-Objekt von ATHLET übergeben und von ATHLET der Massenstrom und die totale Enthalpie an ANSYS CFX übermittelt. Von der ANSYS CFX Auslassrandbedingung wird nur der resultierende Massenstrom an das PIPE_2-Objekt, JUNCTION 1 weitergegeben und der Druck aus der Simulationsrechnung von ATHLET ist hier der Rückgabeparameter für den Datenaustausch.

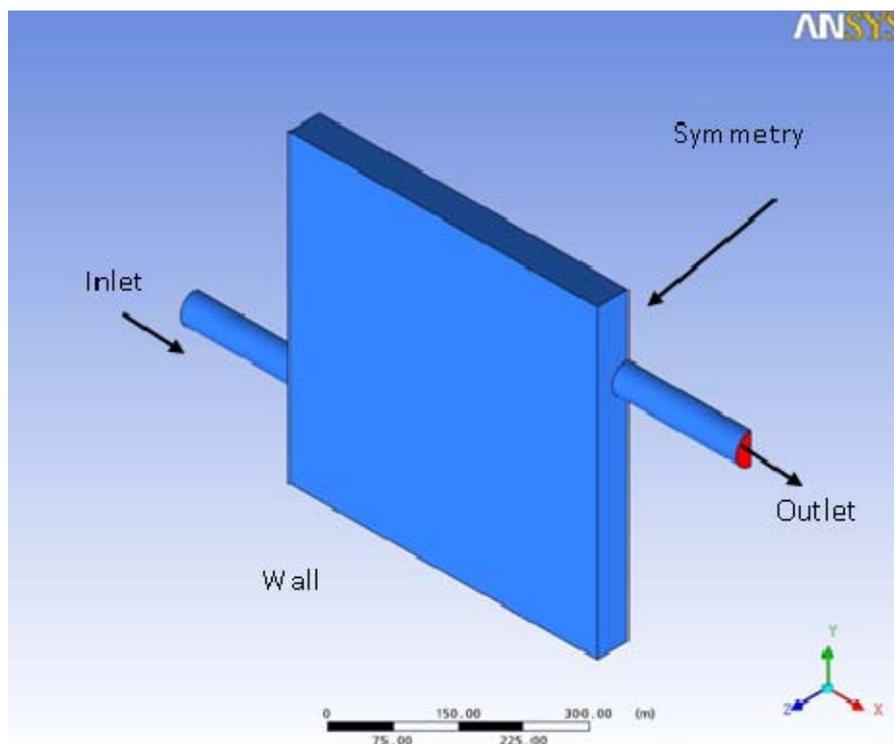


Abb. 64: Randbedingungen der ANSYS CFX Strömungsgeometrie.

Die Strömungsgeometrie mit den Abmessungen des ANSYS CFX Strömungsgebietes ist in Abb. 63 zu sehen, während Abb. 64 die Randbedingungen zeigt. Die ATHLET-Objekte PIPE_1 und PIPE_2 in Abb. 62 haben einen Durchmesser von jeweils 0.05m und eine Länge von 1.0m. Die beiden ATHLET-Objekte sind jeweils in 11 Kontrollvolumen, d.h. 12

Junctions, unterteilt. Die Tabelle 23 und Tabelle 24 fassen die Randbedingungen für die gekoppelte Simulation von ATHLET und ANSYS CFX im geschlossenen Strömungskreislauf zusammen.

	ANSYS CFX Strömungsgebiet und Randbedingungen
Hexahedral Mesh Elements	<ul style="list-style-type: none"> • 52,404
Inlet Boundary Condition	<ul style="list-style-type: none"> • Mass flow : 1.0×10^{-5} kg/s • Total enthalpy: 855×10^3 J/kg
Outlet Boundary Condition	<ul style="list-style-type: none"> • Average Static Pressure 0.0 Pa
Reference Pressure	<ul style="list-style-type: none"> • 98×10^5 Pa
Wall Boundary Condition	<ul style="list-style-type: none"> • No slip • Adiabatic wall
Heat Transfer Model	<ul style="list-style-type: none"> • Total Energy
Turbulence Model	<ul style="list-style-type: none"> • Shear Stress Turbulence Model
Material	<ul style="list-style-type: none"> • Compressible water (from IAPWS Table)
Advection scheme	<ul style="list-style-type: none"> • Second order, High resolution
Time step	<ul style="list-style-type: none"> • 0.01 s

Tabelle 23: ANSYS CFX Randbedingungen für die gekoppelte Simulation des geschlossenen Strömungskreislaufes

	ATHLET Randbedingungen		
Objects	PIPE 1	BOUND	PIPE 2
Number of nodes (CV)	11	-	11
Pressure	98.1×10^5 Pa	From CFX	
Fluid Temperature	200 °C	200 °C	200 °C
Mass flow	0	0	0
Enthalpy	855.0 kJ/kg	855.0 kJ/kg	855.0 kJ/kg
DPP	6.94×10^5 Pa		
Pump Operating Power (%)	Time % Power 0.0 0.0 1.0 0.4	-	-

Tabelle 24: ATHLET Randbedingungen für die gekoppelte Simulation des geschlossenen Strömungskreislaufes

Abb. 65 und Abb. 66 zeigen die für die gekoppelte Simulation des geschlossenen Strömungskreislaufes erhaltenen maximalen Residuen für Massenerhalt und Impulstransport für die ANSYS CFX Simulation. Die Residuen liegen dabei unterhalb von 10^{-3} und der integrale Massendefekt unter 0.1%, was akzeptable Konvergenzkriterien für eine ANSYS CFX Simulation sind.

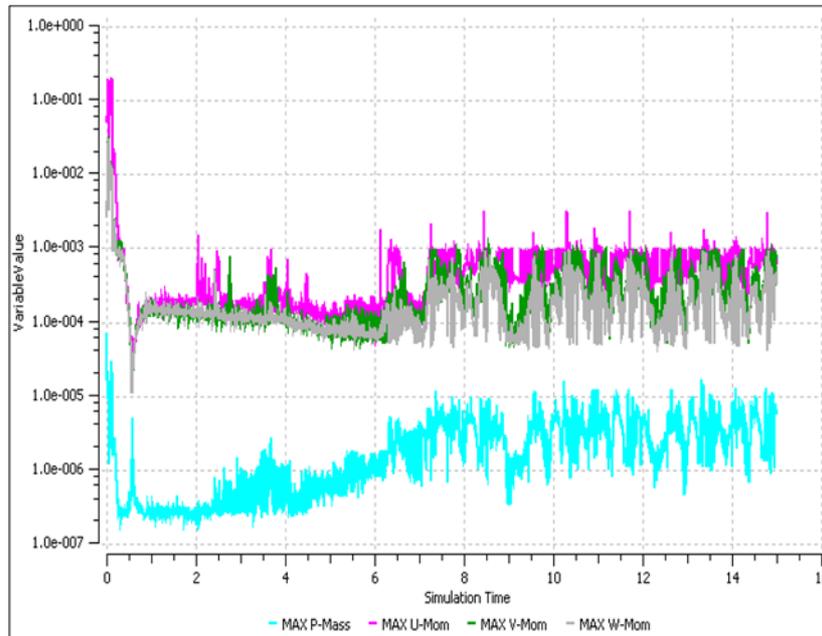


Abb. 65: Maximale Residuen für Massenerhalt und Impulstransport der ANSYS CFX Simulation für die Vermischungskammer in der gekoppelten Simulation

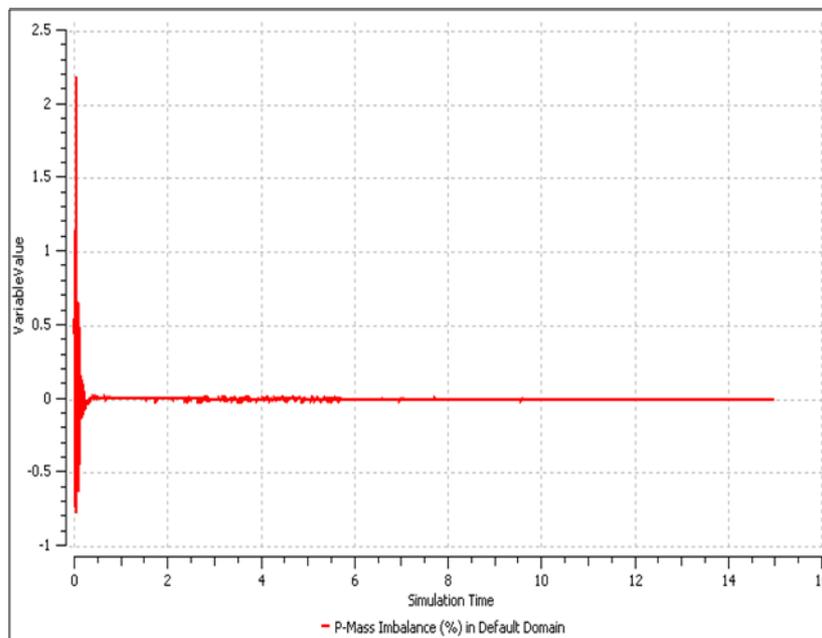


Abb. 66: Massendefekt über der Zeit in der ANSYS CFX Simulation für den geschlossenen Strömungskreislauf

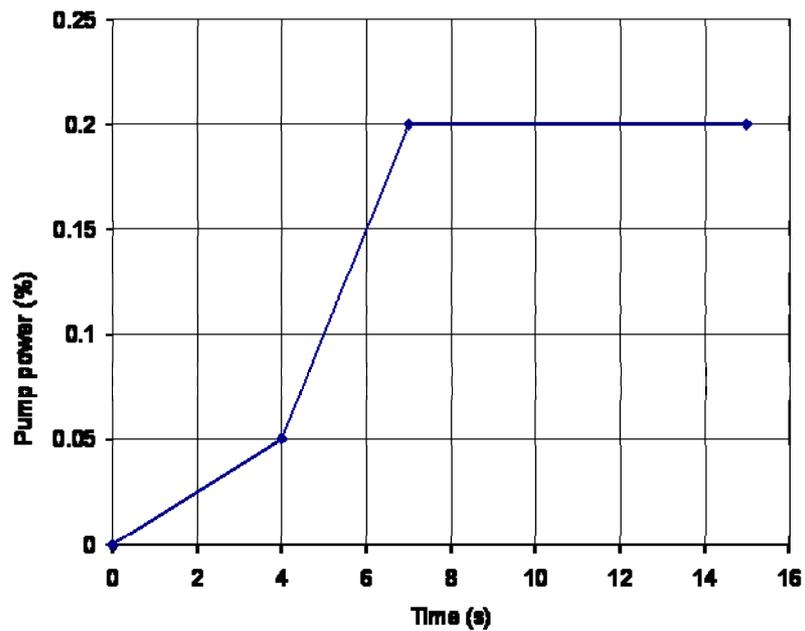


Abb. 67: In der ATHLET-Simulation vorgegebene prozentuale Pumpenleistung über der Zeit

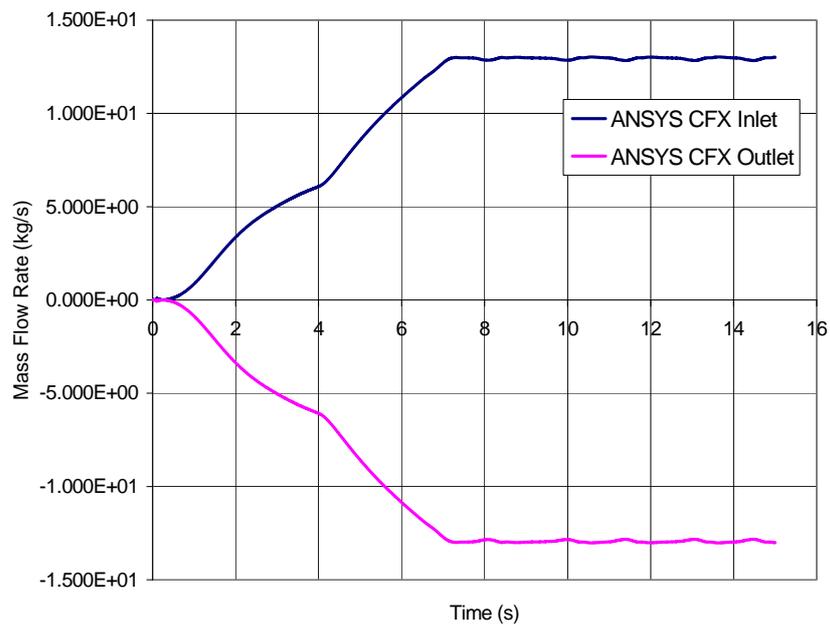


Abb. 68: Massenstrom über der Zeit am Einlass- und Auslassrand der ANSYS CFX Geometrie

Die Abb. 67 und Abb. 68 zeigen dann den in der ATHLET-Simulation vorgegebenen zeitlichen Anstieg der Pumpenleistung und den am Einlass- und Auslassrand der ANSYS CFX Simulation resultierenden Massenstrom über der Zeit. Die Pumpe im ATHLET-

Kreislauf steigert ihre Leistung linear von 0% auf 20% der Pumpenleistung. Nach 7s hat die Pumpe ihre im weiteren Verlauf konstante Leistung von 20% der definierten Pumpenleistung erreicht. Der resultierende Massenstrom an den Einlass- und Auslassquerschnitten des ANSYS CFX Strömungsgebietes folgt im Wesentlichen dem Verlauf dieser vorgegebenen Pumpencharakteristik. Der Massenstrom am Ausströmrand der ANSYS CFX Domain wird negativ aufgetragen, da er nach außerhalb des CFX-Strömungsgebietes gerichtet ist.

Abb. 69 zeigt den korrespondierenden Druck in Abhängigkeit von der Zeit für die Änderung des Massenstroms entsprechend Abb. 68. Es kann beobachtet werden, dass der Druck an den ATHLET-ANSYS CFX-Kopplungsrandern zunächst stark abnimmt von 98bar auf ca. 60bar, während der Massenstrom in dieser Zeit zunimmt. Nach einer kurzen Zeit der Druckkonstanz beginnt der Druck wieder leicht auf ca. 62bar zu steigen.

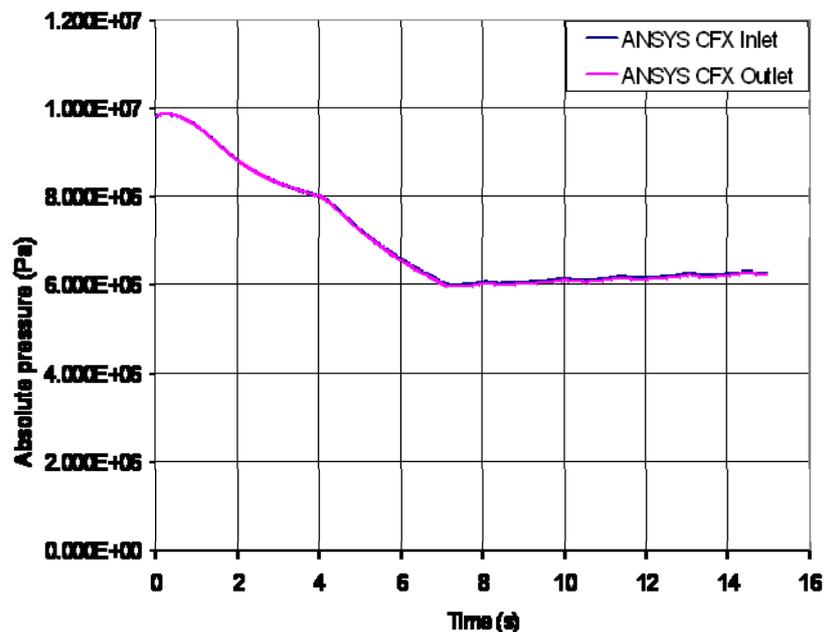


Abb. 69: Absoluter Druck an den Einlass- und Auslassrandbedingungen des ANSYS CFX Strömungsgebietes über der Zeit

Dieses Druckverhalten entspricht zunächst nicht dem erwarteten in einem geschlossenen System, für das man keine Druckänderung erwarten würde. Das Problem erwächst aus der Gesamtmassenerhaltung in dem geschlossenen Strömungskreislauf zusammen mit der Spezifikation von Wasser als nur sehr gering kompressiblen Fluid nach IAPWS-IF97. Damit verhält sich das Arbeitsfluid weitgehend wie ein inkompressibles Fluid mit nur sehr geringen Dichteänderungen. Ein minimaler Massendefekt in der numerischen Lösung der Transport- und Erhaltungsgleichungen führt zu einem vergleichsweise großen Druckabfall in dem geschlossenen System, weshalb bei derartigen Simulationen häufig auch ein Druckausgleichssystem eingesetzt wird. Dies wurde für diese Simulation bewusst nicht gemacht, um die Massenkonservativität des Systems zu analysieren. Für das gekoppelte System aus ATHLET und ANSYS CFX ergeben sich die leichten Massendefekte aus den nacheinander ausgeführten Zeitschritten und dem daraus resultierenden zeitlichen Versatz in der Aktualisierung der Randbedingungsdaten in ATHLET und ANSYS CFX auf Grund der

expliziten Kopplung. Eine Erzwingung eines derart genauen Massenerhalts würde zu extrem kleinen Simulationszeitschritten führen und ist daher nicht zielführend. Vielmehr ist für die Zukunft die Realisierung einer semi-impliziten Kopplung anzustreben, bei der durch Datenaustausch an den Kopplungsrandbedingungen innerhalb der Zwischeniterationen eines Zeitschritts auch die Einhaltung eines für ATHLET und ANSYS CFX identischen Massenstromes für den Zeitschritt erzwungen werden kann - und damit der integrale Massenerhalt im System.

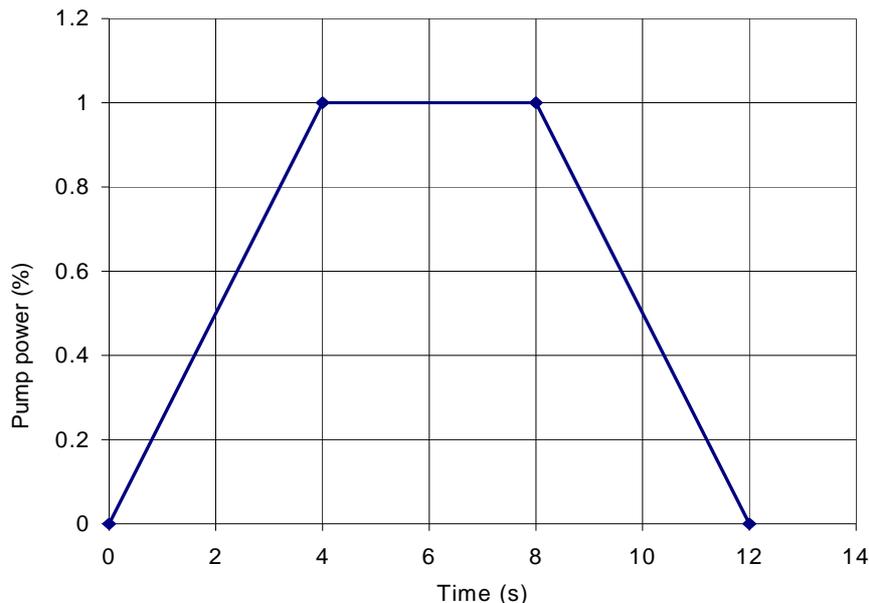


Abb. 70: Zeitliche Änderung der Pumpenleistung im zweiten Simulationsversuch

Um dieses Verhalten der Massenerhaltung in geschlossenen Systemen noch etwas eingehender zu untersuchen, wurde eine zweite Simulationsrechnung durchgeführt, in der die Pumpenleistung linear von 0% auf 100% gesteigert wurde und anschließend nach einer kurzen Zeitspanne der Konstanz wieder auf 0% abgesenkt wurde. Die damit verfolgte Fragestellung war, wie sich der Druck im System entwickelt, wenn die Pumpenleistung und damit der Massenstrom verringert wird. Abb. 70 und Abb. 71 zeigen die zeitliche Änderung der Pumpenleistung im ATHLET-Modell und die korrespondierende zeitliche Entwicklung des Massenstroms in den JUNCTION-Objekten der ATHLET-Simulation an den Kopplungsrandbedingungen zur ANSYS CFX Simulation. Hierbei sind das ATHLET PIPE?1-Objekt, Junction 12 und das PIPE_2-Objekt, Junction 1 mit der ANSYS CFX Einlass- und Auslassrandbedingung verbunden. Es ist zu beobachten, dass der Massenstrom in dem Maße wieder abnimmt, wie die Pumpenleistung zurückgefahren wird.

Abb. 72 und Abb. 73 zeigen den zeitlichen Verlauf des absoluten Drucks korrespondierend mit der transienten Änderung der Pumpenleistung sowie die transiente Änderung der Inventarmasse im ANSYS CFX Strömungsgebiet. Der Druckverlauf zeigt einen starken Druckabfall mit größer werdender Pumpenleistung. Druckpulsationen sind zu beobachten als die Pumpe die 100%-ige Leistung erreicht. Mit dem Abfall der Pumpenleistung steigt der Systemdruck auch wieder an, übersteigt aber letztendlich sogar das Ausgangsdruckniveau des geschlossenen Systems um ein Vielfaches.

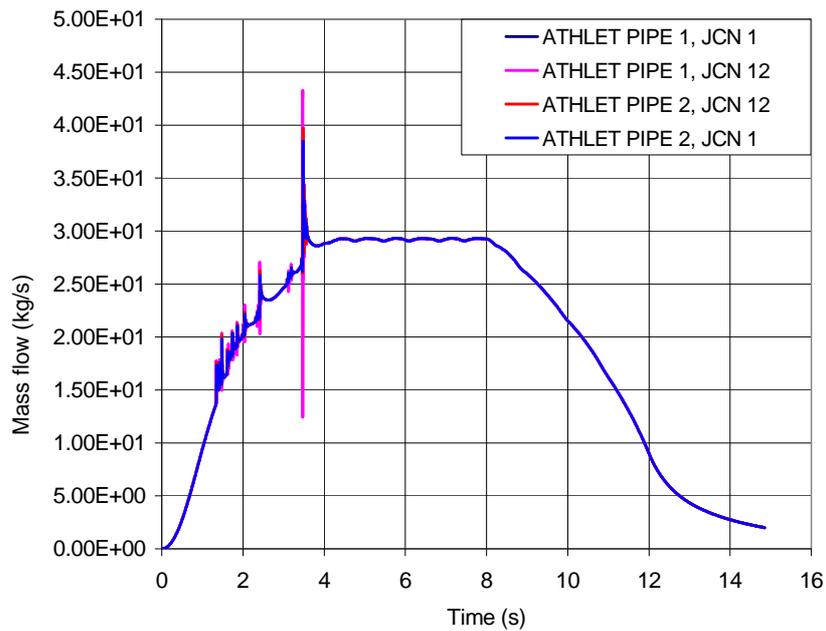


Abb. 71: Resultierender Massenstrom aus Änderung der Pumpenleistung entsprechend Abb. 70

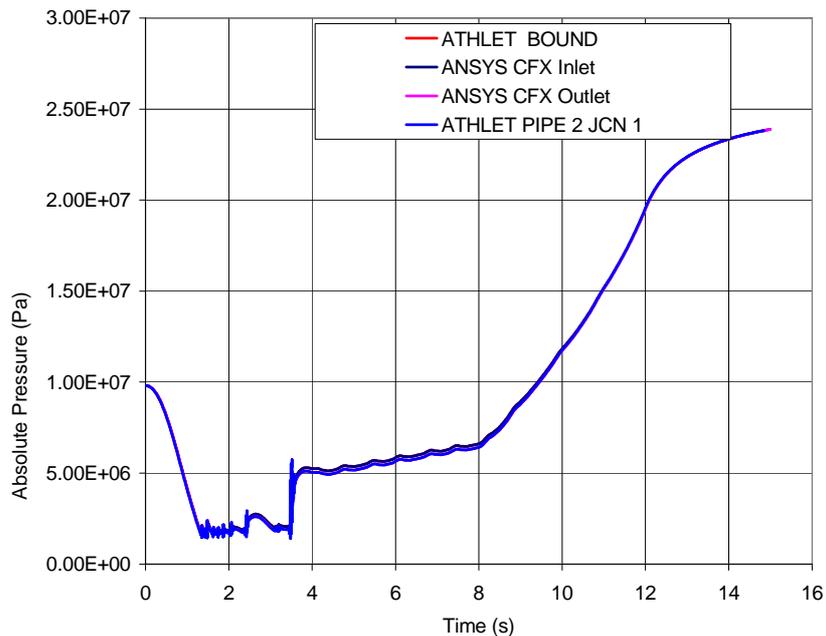


Abb. 72: Absoluter Druck über der Zeit an den Kopplungsrandbedingungen zwischen ATHLET und ANSYS CFX

Der Druckverlauf folgt dabei der im Strömungsgebiet von ANSYS CFX eingeschlossenen bzw. transportierten Gesamtfluidmasse, die in Abb. 73 über der Zeit aufgetragen ist. Die Gesamtfluidmasse erhöht sich dabei auf Grund von geringen Massendefekten (numerische Fehler, explizite Kopplung mit Zeitschrittversatz an den Kopplungsrandern) pro Zeitschritt

um insgesamt nur 0.08kg von ca. 11.225 kg auf 11.305 kg. Auf Grund des weitgehend inkompressiblen Verhaltens von Wasser in dem betrachteten Druckbereich hat diese geringe Massenänderung die zu beobachtenden Auswirkungen auf den berechneten Systemdruck.

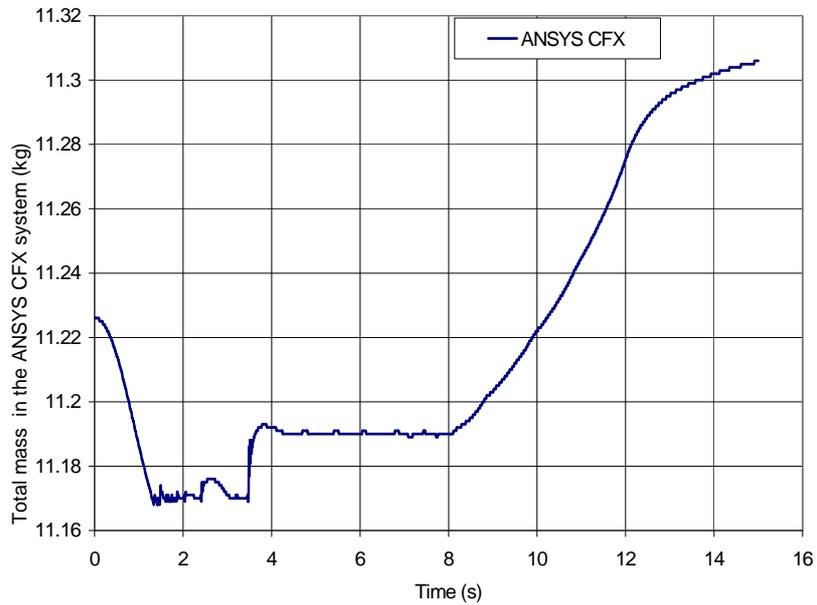


Abb. 73: Masse in der ANSYS CFX Strömungsgeometrie über der Zeit

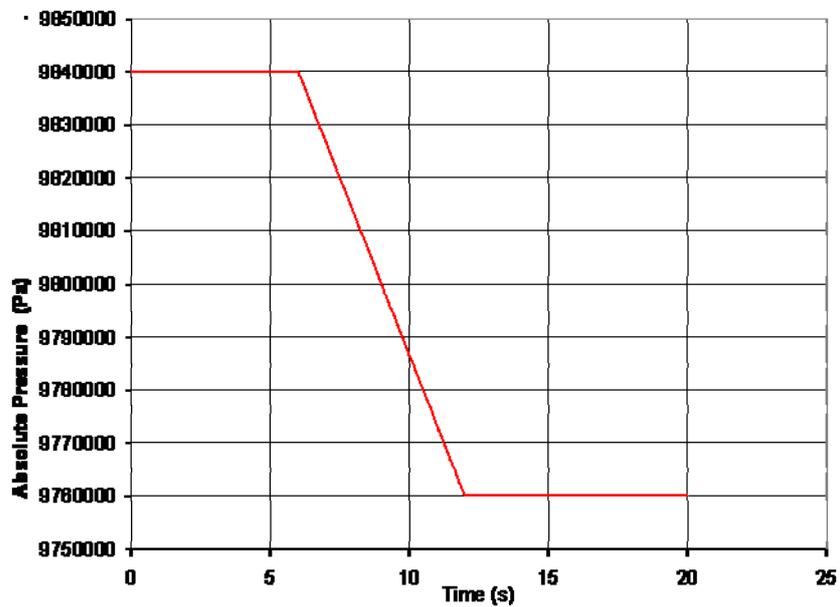


Abb. 74: Vorgeschriebene transiente Druckänderung an der ATHLET Einlassrandbedingung zur Herbeiführung von Strömungsumkehr

4.1.7.4 Testfall 4: Beispiel einer gekoppelten Simulation mit Strömungsumkehr

Zur Untersuchung von Strömungsumkehr über der Zeit wurde ein weiterer gekoppelter Testfall untersucht. In diesem Fall ist die Verwendung von Einlass- und Auslassrandbedingungen in ANSYS CFX nicht länger möglich, da die Richtung der Strömung apriori nicht bekannt ist. Stattdessen müssen Opening-Randbedingungen verwendet werden. Die entsprechenden Kopplungsparameterkombinationen sind in Abschnitt 4.1.6.3 eingehend diskutiert worden. Am Kopplungsrand werden demnach Geschwindigkeit und Druck für hydraulische Randbedingungen sowie totale Enthalpie und Temperatur für thermische Randbedingungen zwischen den beiden Codes ausgetauscht.

Die Anordnung und die Gitternetze des horizontalen Rohres aus Abschnitt 4.1.7.1 wurden für diesen Testfall wieder verwendet. Es wurden für diesen Simulationsversuch die gleichen Randbedingungen wie in Tabelle 23 verwendet. Lediglich am Einlassrand der ATHLET-Geometrie wurde der transiente Druckabfall aus Abb. 74 definiert. Der Druck an der Auslassrandbedingung von ANSYS CFX wurde über die gesamte Simulationszeit konstant bei 98.0bar gehalten. Somit strömt das Arbeitsfluid während der Simulation von 0.0s bis 6.0s vom Inlet der ATHLET-Geometrie (ATHLET BRANCH-Objekt) zur ANSYS CFX Auslassrandbedingung. Nach 6.0s kehrt sich die Strömungsrichtung auf Grund des definierten Druckunterschiedes um.

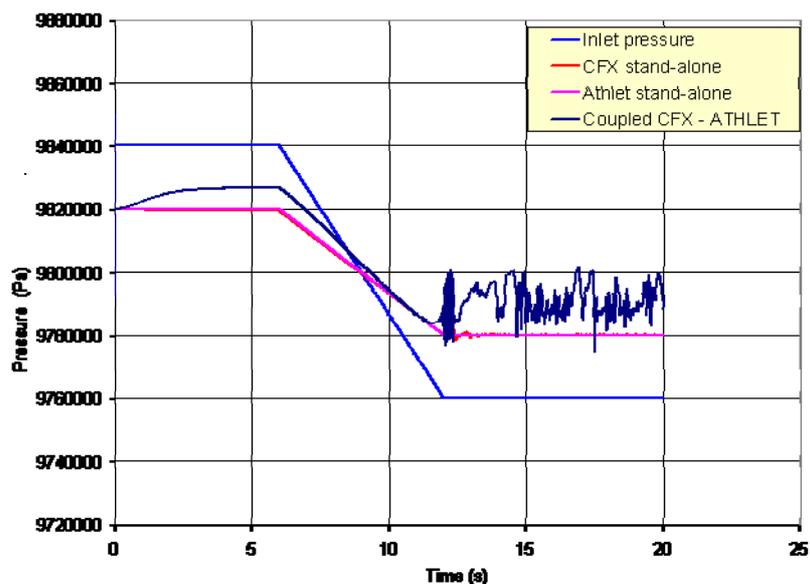


Abb. 75: Druckverlauf über der Zeit für die gekoppelte und eigenständigen Simulationen mit Strömungsumkehr

In Abb. 75 ist der Druckverlauf an der Position des Kopplungsinterfaces im Vergleich der gekoppelten und eigenständigen Simulationen und im Vergleich zum vorgegebenen Druckverlauf an der Einlassrandbedingung gezeigt. In der eigenständigen ANSYS CFX-Simulation wurde ein kleiner Zeitschritt von $\Delta t=0.01s$ verwendet um stärkere Druckoszillationen – insbesondere nach erfolgter transienter Druckabsenkung am Inlet – zu verhindern. Der gleiche Zeitschritt wurde schließlich auch für die gekoppelte Simulation

eingesetzt. Der Vergleich der eigenständigen ANSYS CFX- und ATHLET-Simulationen zeigt eine gute Übereinstimmung. Demgegenüber lassen sich in der gekoppelten Simulation große Druckabweichungen schon während der Phase anfänglich noch konstanten Druckes am Inlet beobachten. Nach der transienten Druckabsenkung am Inlet treten starke Druckschwankungen im ANSYS CFX-Strömungsgebiet an der Kopplungsschnittstelle auf.

Um diese Druckoszillationen und Unterschiede in den ausgeführten Rechnungen zu verstehen, muss man wissen, dass bei einer Kopplung mittels Opening-Randbedingungen der Druck und die Geschwindigkeit an der Kopplungsrandbedingung ausgetauscht wird. Somit ist die Information über die lokale Fluidichte kein direkter Kopplungsparameter. Vielmehr verwendet jeder der beiden Codes am Kopplungsrand für die Berechnung von Massenströmen die aus lokalem Druck und Temperatur sowie den hinterlegten IAPWS-Stoffdaten resultierende Fluidichte. Gleiches gilt für andere thermodynamische Fluideigenschaften. Aus diesem Grund ist der thermodynamische Zustand des Fluides auf beiden Seiten der Kopplungsrandbedingung nicht derselbe, da sich die in ANSYS CFX und ATHLET implementierten IAPWS-Standards derzeit unterscheiden. Wie in Tabelle 25 gezeigt wird, ist die in ANSYS CFX berechnete Fluidichte größer als die in ATHLET auf der anderen Seite des Kopplungsinterfaces verwendete. Die momentan für die Druckoszillationen somit gegebene Erklärung ergibt sich aus der expliziten Kopplung beider Codes und den auf beiden Seiten der Kopplungsrandbedingung unterschiedlich berechneten thermodynamischen Fluidgrößen. Testfälle mit möglicher Strömungsrichtungsumkehr bedürfen aber noch einer weiteren eingehenden Untersuchung.

Time (s)	ρ_{CFX} (kg/s)	ρ_{ATHLET} (kg/s)
10	878.181	871.509
11	878.192	871.515
12	878.355	871.546
13	880.148	871.543
20	907.55	871.541

Tabelle 25: Fluid-Dichte in ANSYS CFX und ATHLET zu verschiedenen Simulationszeitpunkten der gekoppelten Simulation

4.1.8 Zusammenfassung des erreichten Entwicklungsstandes einer Kopplung von ANSYS CFX mit ATHLET

Das Hauptziel des vorliegenden Forschungsprojekt-Teilvorhabens zur ATHLET-ANSYS CFX Kopplung war die Entwicklung eines Prototypen einer Kopplungsschnittstelle zwischen dem kommerziellen CFD-Code ANSYS CFX und dem 1-dimensionalen Systemcode ATHLET. Die Notwendigkeit für derartige Code-Kopplungstechniken für die genaue Simulation von transienten Strömungsvorgängen in der Kernreakortertechnik ist zunehmend.

Typische ausgeprägt 3-dimensionale, turbulente Strömungsvorgänge wie die thermische und Konzentrations-Vermischung im Downcomer und unteren Plenum (Borvermischungsszenarien (z.B. ROCOM) oder ECC-Einspeisungs-Szenarien (z.B. UPTF)) können durch die Anwendung von CFD-Verfahren genauer analysiert werden, während die Wechselwirkung mit dem Gesamtkühlkreislauf der Ankopplung an die heutzutage verwendeten Systemcodes erfordert.

Im Rahmen des vorliegenden Forschungsvorhabens wurde daher ein Prototyp einer Kopplungsschnittstelle entwickelt, die den Datenaustausch zwischen ANSYS CFX und ATHLET an Kopplungsrandbedingungen realisiert. Für die Kopplung wurde eine serielle Art der Ausführung beider Codes gewählt, wobei der System- und der CFD-Code jeweils für einen vom CFD-Code vorgegebenen Zeitschritt nacheinander ausgeführt werden und die Kopplungsdaten an den Kopplungsrandbedingungen nach jedem vollständig berechneten Zeitschritt in beiden Richtungen ausgetauscht werden. Zur programmtechnischen Umsetzung der Kopplung beider Codes wurde der ATHLET-Code zusammen mit dem Kopplungsinterface-Code in eine Shared Library übersetzt, die zur Laufzeit von ANSYS CFX dynamisch dazu gelinkt wird und somit ATHLET zur Ausführung in jedem Zeitschritt zur Verfügung steht. Der Datenaustausch erfolgt somit hochgradig effizient in Form der Übergabe von Subroutine-Argumenten beim ATHLET-Aufruf aus ANSYS CFX heraus. Hierzu waren eine Reihe von signifikanten Änderungen am Standard-ATHLET-Code notwendig, die mit Hilfe von Herrn Lerchl, GRS ausgeführt wurden und mittlerweile Bestandteil des ATHLET-Codes geworden sind. Des Weiteren war die Entwicklung einer Programmzwischenschicht in der Kopplungsschnittstelle notwendig, um die Datenstrukturen von FORTRAN-77- und FORTRAN-90-Code aufeinander abbilden zu können und die notwendigen Umrechnungen und Einheitenkonversionen zwischen beiden Codes vornehmen zu können.

Im Rahmen des Projektes wurden anhand der von beiden Codes standardmäßig unterstützten Randbedingungstypen Kombinationen von miteinander koppelbaren hydraulischen und thermischen Randbedingungen für Ein- und Mehrphasenströmungen identifiziert. Hierbei erfordern Strömungssimulationen mit möglicher Strömungsrichtungsumkehr ein besonderes algorithmisches Vorgehen und die Verwendung von sogenannten Opening-Randbedingungen in ANSYS CFX.

Im Rahmen des weiteren Arbeiten wurde der entwickelte Code für die Kopplungsschnittstelle von ANSYS CFX und ATHLET anhand von vereinfachten Geometrien für eine Reihe von Verifikationstestfällen untersucht, die gemeinsam von der GRS und ANSYS Germany definiert wurden. Das Ziel dieser Verifikationstestfälle ist es zu zeigen, dass die Kopplungsschnittstelle korrekt implementiert wurde, dass der Datenaustausch für die gewählte Kombination von ANSYS CFX und ATHLET-Randbedingungen korrekt erfolgt und dass die erhaltenen Ergebnisse der gekoppelten Strömungssimulationen physikalisch korrekt und vergleichbar sind mit den eigenständigen Simulationen mit ANSYS CFX und ATHLET (sofern die gewählten Testfälle nicht zu ausgebildet 3-dimensionalen Strömungsphänomenen führen, die eine Vergleichbarkeit mit den Ergebnissen eines 1-dimensionalen Systemcodes unmöglich machen). Für die untersuchten Testfälle wurde dabei i.d.R. eine recht gute Übereinstimmung der Simulationsergebnisse gefunden, wodurch die korrekte Implementation der Kopplungsschnittstelle weitgehend verifiziert werden konnte. Die verbliebenen Unterschiede in den Lösungen können durch die verwendete explizite Kopplung beider Codes, die verschiedenen Wasser-/Wasserdampf-Zustandsgleichungen in ANSYS CFX und ATHLET und das Auftreten von 3-dimensionaler Strömungsentwicklung

in Form von sich entwickelnden Wandgrenzschichten erklärt werden. Am Beispiel des Testfalls für ein offenes System konnte auch die gleichzeitige Kopplung von ANSYS CFX an mehreren Kopplungsschnittstellen demonstriert und verifiziert werden. Die abschließende Analyse eines geschlossenen Strömungskreislaufes zeigte jedoch weitergehenden Entwicklungsbedarf auf. Ohne die Verwendung eines Druckhalters in einem geschlossenen Strömungskreislauf führen minimale numerische Fehler im Massenerhalt bei der weitgehenden Inkompressibilität der untersuchten Strömung von Wasser unter hohem Druck zu beachtlichen und nicht tolerierbaren Druckschwankungen. Jeder der beiden Codes für sich gewährleistete dabei innerhalb seines Strömungsgebietes einen nahezu perfekten Massenerhalt, wobei jedoch der zeitliche Versatz von einem Zeitschritt im Austausch der Kopplungsgrößen an den Kopplungsrandbedingungen in Folge der expliziten Kopplungsmethodologie zu den beobachteten Massendefekten führte. Ein verbessertes Kopplungsverhalten beider Codes ist hier nur mit einer noch zu entwickelnden semi-impliziten Kopplungsiteration in Bezug auf die auszutauschenden Kopplungsparameter an den Kopplungsrandbedingungen innerhalb eines Zeitschrittes möglich. Kleine Unterschiede in den in beiden Codes verwendeten Zustandsgleichungen nach IAPWS tragen möglicherweise ebenfalls zu den beobachteten Massendefekten bei und daher sollten auch die verwendeten Zustandsgleichungen in zukünftigen gekoppelten Simulationen beider Codes weitgehend aneinander angeglichen werden.

4.1.9 Zukünftig notwendige Weiterentwicklungen des Kopplungsverfahrens und hierdurch mögliche Anwendungsszenarien

Das vorliegende Forschungsvorhaben hatte einen zeitlichen Rahmen von lediglich 9 Monaten Bearbeitungszeit für die Kopplung von ATHLET mit ANSYS CFX. Hauptziel der Arbeiten in diesem Zeitraum war daher auch die Entwicklung eines ersten Prototypen einer gekoppelten Simulationslösung, dessen Verifizierung an ausgewählten Testfällen, die Erprobung von verschiedenen Kopplungstechnologien und -algorithmen sowie die Untersuchung von deren numerischen Eigenschaften. in Bezug auf Stabilität, Robustheit und Genauigkeit der gekoppelten Strömungsberechnung gegenüber den eigenständigen Strömungsberechnungen mit ATHLET und ANSYS CFX.

Während der Projektbearbeitung wurden die in ATHLET und ANSYS CFX verfügbaren Randbedingungstypen analysiert und die Kombinationen von Randbedingungstypen identifiziert, für die eine Kopplungsschnittstelle entwickelt werden muss. Wie in den Abschnitten 4.1.3.3, 4.1.5 und 4.1.6 dargestellt, entsteht dabei unter Anwendung der gegenwärtig entwickelten Kopplungsschnittstelle und deren programmtechnischer Umsetzung ein recht großer Implementationsumfang, da für jede unterstützte Kombination von hydraulischen und thermischen Randbedingungen jeweils für einphasige und mehrphasige Strömungen programmtechnische Vorkehrungen und Implementationen in der Kopplungsschnittstelle vorzusehen sind. Hinzu kommt, dass bei Versionswechseln der einen oder anderen Softwarekomponente diese Kopplungsschnittstelle etwaigen Modifikationen Rechnung tragen muss und gewartet werden muss. Aus diesem Grund lag im vorliegenden Forschungsvorhaben die Konzentration auf der Implementation der wichtigsten Kombinationen von Randbedingungstypen, den Softwaretechnologischen Aspekten der Umsetzung der Beabsichtigten Kopplung von CFD-Code und 1-dimensionalem Systemcode, der Verifikation der Kopplungsschnittstelle und der praktischen Erprobung der gekoppelten Simulation an ausgewählten Testfällen für einphasige Strömungen.

Die Umsetzung einer Implementation, Verifikation und Validierung einer vollständig ausgestalteten Kopplungsschnittstelle von ATHLET und ANSYS CFX, die die transiente gekoppelte Simulation von einphasigen und mehrphasigen Strömungen, die Kopplung an hydraulischen und thermischen Randbedingungen, die Berechnung von Strömungen mit starkem Wärme- und Stoffübergang sowie den Transport von passiven Transportskalaren (wie z.B. Borsäurekonzentration in der flüssigen Phase und einen Anteil nicht-kondensierbarer Gase in der gasförmigen Phase) abdecken muss, wird einen Implementations- und Untersuchungsaufwand umfassen der weit über den 9-monatigen Bearbeitungszeitraum des vorliegenden Projekt-Teilvorhabens hinausgeht und bleibt daher einem Folgeprojekt vorbehalten. Der entwickelte Prototyp einer Kopplungsschnittstelle von ATHLET mit ANSYS CFX und die gesammelten Erfahrungen in deren Anwendung auf konkrete Strömungsszenarien stellt jedoch einen exzellenten Startpunkt für eine derartig weitergehende Entwicklung dar. Die ausgeführten Untersuchungen haben tiefere Einblicke in die Komplexität einer derart angestrebten Code-Kopplung gegeben und mit dem Prototyp der Kopplungsschnittstelle wurden wichtige Bausteine für eine erfolgreiche programmtechnische Umsetzung entwickelt.

Weitere Entwicklungsarbeiten sind notwendig, um in einer engen Zusammenarbeit zwischen ANSYS Germany und der GRS eine vollständig ausgestaltete und umfassend validierte Kopplungsschnittstelle zwischen ANSYS CFX und ATHLET entwickeln zu können. Für die Weiterarbeit an dieser angestrebten Code-Kopplung werden die folgenden Arbeitspunkte für ein zukünftiges Forschungsvorhaben als notwendig erachtet:

- Aus den Erfahrungen heraus, die im Rahmen des vorliegenden Forschungsvorhabens gesammelt wurden, wird momentan eingeschätzt, dass die entwickelte Kopplungsschnittstelle für die Kopplung von ANSYS CFX und ATHLET zwar den gestellten Anforderungen gerecht wird, in ihrer programmtechnischen Umsetzung aber nicht generisch genug und somit in der Entwicklung und Wartung zu komplex ist. Aus heutiger Sicht ist vielmehr anzustreben, dass der Datenaustausch zwischen der 1-dimensionalen Systemcode-Software und dem CFD-Verfahren auf einer höheren programmtechnischen Abstraktionsebene implementiert wird. D.h. im Speziellen dass eine Implementierung anzustreben ist, die nicht für jede einzelne Kombination von ANSYS CFX- und ATHLET-Randbedingungen eines Eingriffes und einer Implementation durch einen ANSYS CFX-Entwickler bedarf. ANSYS CFX stellt mit der CFX Command Language (CCL) und den darin möglichen CCL-Expressions ein sehr leistungsfähiges Werkzeug zur Verfügung. Erste Untersuchungen im Hinblick auf eine derart verallgemeinerte Kopplungsschnittstelle unter der Bezeichnung Generic Scalar Exchange (GSX, siehe auch (Scholz D., August 2009)) sind ein sehr viel versprechender Ansatz, der für die Kopplung von ANSYS CFX und ATHLET weiterverfolgt werden sollte.
- Die Erfahrungen aus dem vorliegenden Forschungsvorhaben haben gezeigt, dass eine explizite Kopplung von CFD-Verfahren und 1-dimensionalem Systemcode recht starken Beschränkungen sowohl hinsichtlich der einsetzbaren Zeitschrittweiten als auch hinsichtlich der erzielbaren Genauigkeit der gekoppelten Strömungslösung unterliegt. Hierbei ist insbesondere die Tendenz besonders schwerwiegend, dass bei einer expliziten Code-Kopplung und unter Gewährleistung einer hinreichenden Genauigkeit offenbar sehr kleine Zeitschritte im Bereich von Millisekunden erforderlich sein können. Da für ausgedehnte 3-dimensionale Komponenten wie z.B.

für die Berechnung der Strömung in einem Downcomer und unteren Plenum eines Kernreaktors schon ein hoher Berechnungsaufwand notwendig ist, würden derart kleine Zeitschritte zu einem zusätzlichen starken Anstieg des Berechnungsaufwandes führen. Schwerpunkt eines zukünftigen Forschungsvorhabens sollte daher die Realisierung einer robusten und effizienten semi-impliziten Kopplung von ANSYS CFX und ATHLET zum Gegenstand haben, bei der die Kopplungsrandbedingungen in Zwischeniterationen innerhalb eines ANSYS CFX-Zeitschrittes iterativ an einander angeglichen werden. Erste Voruntersuchungen von ANSYS Germany und der GRS in dieser Hinsicht sind sehr viel versprechend.

- Von einer derartigen semi-impliziten Kopplung von ANSYS CFX und ATHLET wird sich des Weiteren versprochen, dass die in dem Testfall für einen geschlossenen Strömungskreislauf zu Tage getretenen Probleme mit dem 100%-igen Massenerhalt im System und dem damit verbundenen Erhalt des vorgegebenen Systemdrucks zufriedenstellend gelöst werden können. Die Alternative der Untersuchung eines offenen Strömungskreislaufes unter Einsatz eines Druckausgleichssystems ist jedoch ebenfalls jederzeit gangbar und würde ebenfalls die notwendigen Ergebnisse liefern.
- In einem Folgevorhaben sind die Untersuchungen auf alle in Abschnitt 4.1.6 diskutierten Kombinationen von hydraulischen und thermischen Kopplungsrandbedingungen für einphasige und mehrphasige Systeme auszudehnen.
- Im vorliegenden Forschungsvorhaben wurde festgestellt, dass ANSYS CFX und ATHLET unterschiedliche, in den berechneten Wasser/Wasserdampf-Stoffeigenschaften voneinander abweichende Implementationen des IAPWS-Standards implementieren. Hierin wird für ein konsistentes gekoppeltes Simulationsverfahren ein potentieller Schwachpunkt gesehen, da es durch an beiden Seiten eines Kopplungsinterfaces unterschiedlich berechnete Stoffeigenschaften zu unterschiedlichen resultierenden Massenströmen und Enthalpieflüssen in beiden Softwaresystemen kommen kann. In zukünftigen Untersuchungen sollten diese Implementierungen des IAPWS-Standards aneinander angeglichen werden.
- Die umfassende Verifikation und Validierung der Kopplung von ANSYS CFX und ATHLET an einer größeren Anzahl von Testfällen mit ansteigender Komplexität und unter Abdeckung der Matrix der möglichen Kombinationen von Kopplungsrandbedingungen für offene und geschlossene Strömungskreisläufe sowie für ein- und mehrphasige Strömungen bleibt ebenfalls einem Folgeprojekt vorbehalten.
- Zielstellung der Entwicklung einer Kopplungsschnittstelle von ANSYS CFX und ATHLET ist schlußendlich die Anwendung dieser Code-Kopplungs-Technologie auf realistische Strömungsbedingungen in DWR und SWR unter normalen Betriebsbedingungen und für die Untersuchung von Störfallszenarien. In einem Folgevorhaben ist anzustreben, dass die Komplexität der untersuchten Validierungstestfälle bis hin zu komplexen Technologie-Demonstrationstestfällen ausgedehnt wird, z.B. der gekoppelten Berechnung eines Borsäure-Vermischungsszenarios im Downcomer und unteren Plenum eines Druckwasserreaktors unter Berücksichtigung der durch ATHLET bereitgestellten Randbedingungen aus der 1-dimensionalen Simulation des Reaktorkühlkreislaufes.

4.2 Entwicklung einer prototypischen Schnittstelle zur Kopplung von 3-dimensionaler CFD-Verfahren und Neutronenkinetik (ANSYS CFX \Leftrightarrow DYN3D)

4.2.1 Einleitung

Im Kern eines Kernreaktors laufen sehr unterschiedliche, aber miteinander eng gekoppelte Prozesse ab: Einzelne Kernspaltungen setzen schnelle Neutronen frei, die in der Wechselwirkung mit einem Moderator abgebremst und in thermische Neutronen verwandelt werden; diese können dann neue Kernspaltungen auslösen. Der Moderator ist in sehr vielen Fällen Wasser. Dieses Wasser dient gleichzeitig als Kühlmittel, das die entstehende Wärme aufnimmt und aus dem Reaktorkern abtransportiert. Die Wirksamkeit des Wassers als Moderator für die Neutronen hängt von seiner Dichte ab, die ihrerseits von Druck und Temperatur abhängig ist. Dadurch ist die Kernspaltungskettenreaktion von der Thermohydraulik abhängig, die sie durch ihre Wärmefreisetzung selbst wieder beeinflusst.

Die Untersuchung dieser miteinander gekoppelten Prozesse mit numerischen Simulationsmethoden ist seit vielen Jahren Stand der Technik. Computerprogramme wie z.B. DYN3D, CUBOX oder PARCS beschreiben Neutronenkinetik und Thermohydraulik – und deren gegenseitige Beeinflussungen – mit der numerischen Lösung physikalischer Erhaltungsgleichungen in räumlicher und zeitlicher Diskretisierung.

Eine gängige Vorgehensweise ist hierbei, zwei Diffusionsgleichungen für die Neutronendichte zu lösen, und zwar je eine für schnelle und für thermische Neutronen. Die räumliche Diskretisierung sieht dabei in horizontaler Richtung ein Bilanzkontrollvolumen je Brennelement vor; in vertikaler Richtung werden gewöhnlich zwischen zehn und zwanzig Schichten von Kontrollvolumina verwendet. Die Lösung der Diffusionsgleichungen in dieser räumlichen Diskretisierung geschieht z.B. mit der “nodal expansion method” (Knotenexpansionsmethode), die sich besonders für die regelmäßige, repetitive Geometrie des Berechnungsgitters eignet.

Am Forschungszentrum Dresden wird das Computerprogramm DYN3D zur Simulation von Reaktorkernen entwickelt, das die beschriebene Methodik verwendet. Eine besondere Eigenschaft ist von DYN3D, dass die Lösung der Neutronen-Diffusions-Gleichungen mit der “nodal expansion method” nicht nur auf (in der Ebene) quadratischen, sondern auch auf sechseckigen Geometrien implementiert wurde, wie sie in Kernreaktoren der russischen Bautypen „VVER-440“ und „VVER-1000“ vorkommen.

Die vollständige Simulation der Prozesse im Reaktorkern benötigt noch weitere Komponenten: Abhängig von der Zusammensetzung und der durchlaufenen Historie des Brennstoffs müssen vorab Wirkungsquerschnitte für z.B. den Neutroneneinfang ermittelt und der Simulation der Neutronenkinetik zugeführt werden. Weiterhin muss kontinuierlich der Wärmehaushalt der einzelnen Brennstäbe bilanziert werden, und abhängig von lokalen thermohydraulischen Gegebenheiten muss der Wärmeübergang von der Brennstabhülle ins Kühlmittel beschrieben werden. (Letzterer Zusammenhang ist beim Durchlaufen verschiedene Siederegime extrem nichtlinear.) Schließlich muß auch die räumliche Ausbreitung borhaltiger gelöster Verbindungen im Kühlmittel verfolgt werden. Für alle diese Aspekte enthält DYN3D entsprechende Module, die alle in geeigneter Weise miteinander verbunden sind.

4.2.2 Motivation

Die Berechnung der Thermohydraulik in DYN3D geschieht durch die Lösung physikalischer Transportgleichungen (Navier-Stokes-Gleichungen). Auch hierfür muss eine räumliche Diskretisierung eingeführt werden. Um der engen Kopplung der verschiedenen physikalischen Phänomene voll Rechnung tragen zu können, arbeitet das Thermohydraulik-Modul von DYN3D mit derselben räumlichen Auflösung wie das Neutronenkinetik-Modul. Weiterhin wird zur Berechnung der Thermohydraulik die vereinfachende Annahme gemacht, dass in jedem Brennelement die Strömung von Wasser und ggf. Dampf nur vertikal gerichtet sein kann, und somit also keinerlei lateraler Austausch von Wasser oder Dampf zwischen benachbarten Brennelementen existiert.

Gerade bei Störfällen ist aber diese vereinfachende Annahme häufig unzutreffend – inhomogene Einlaufbedingungen im unteren Plenum oder stark inhomogene Verhältnisse im Reaktorkern selbst verursachen hier in der Regel auch laterale Strömungen. Z.B. kann eine lokal sich aufblähende Dampfblase flüssiges Kühlmittel nach allen Seiten verdrängen. Weiterhin ist die geringe räumliche Auflösung in der Berechnung der Thermohydraulik in DYN3D u.U. unzureichend um die Vorgänge in stark inhomogenen Zuständen (z.B. Auswurf eines einzelnen Steuerstabes) realistisch zu beschreiben.

Mit heute üblichen und kommerziell verfügbaren Computerprogrammen zur numerischen Strömungssimulation lässt sich ohne weiteres eine viel höhere geometrische Detailtreue der berechneten Strömungen erreichen. Sie sind auch frei von so drastisch vereinfachenden Annahmen wie derjenigen, die Strömung verlaufe nur strikt vertikal. Daher liegt der Versuch nahe, das Thermohydraulikmodul in DYN3D (oder anderen, ähnlichen Reaktorkernsimulatoren) durch eine höher auflösende, dreidimensionale numerische Strömungssimulation zu ersetzen.

Damit ließen sich für die verschiedenen, miteinander gekoppelten physikalischen Phänomene, die das Verhalten eines Reaktorkerns bestimmen, jeweils die am besten geeigneten verfügbaren Simulationswerkzeuge einsetzen. So könnte dann die Aussagesicherheit der Simulationen erhöht werden, wodurch überflüssig große Sicherheitsmargen reduziert und entsprechend Kosten eingespart werden könnten.

4.2.3 Charakterisierung der Aufgabenstellung

Im hier zu berichtenden Projektteil wurde untersucht, inwieweit das Thermohydraulikmodul in DYN3D durch eine höher auflösende dreidimensionale numerische Strömungssimulation ersetzt werden kann. Hierfür mussten die Verbindungen zwischen den einzelnen Modulen von DYN3D derart geöffnet werden, dass das Thermohydraulikmodul durch das kommerzielle CFD-Programmpaket „ANSYS CFX“ ersetzt werden konnte. Alle anderen Module von DYN3D wurden beibehalten. Die notwendigen Veränderungen am Programmpaket DYN3D wurden von der Abteilung Störfallanalyse des Forschungszentrums Dresden (Rossendorf) vorgenommen.

Die numerische Strömungssimulation benutzt gewöhnlich eine erheblich feinere räumliche Diskretisierung als das Thermohydraulikmodul von DYN3D. Damit die Berechnung realer Störfallszenarien möglich und bezahlbar bleibt, kann die Strömungssimulation aber nicht einen geometrischen Detaillierungsgrad erreichen, in dem die Form und Anordnung einzelner Brennstäbe abgebildet werden könnte.

Statt dessen muss die Gegenwart der Brennstäbe in der Strömungssimulation über das Modell eines porösen Körpers abgebildet werden: Dem Fluid, dessen Strömung zu berechnen ist, steht nur ein bestimmter Anteil des Gesamtvolumens zur Verfügung; außerdem wird die Strömung des Fluides durch den porösen Körper gebremst, was über einfache Widerstandsgesetze, z.B. nach Darcy, mathematisch modelliert werden kann.

Kommerzielle Programmpakete für die numerische Strömungssimulation (CFD) erlauben die Erstellung und Verwendung nahezu beliebiger Rechennetze, die z.B. örtlich ausgewählte Details hoch räumlich auflösen und in anderen, weniger interessierenden Teilen des Rechengebietes erhebliche größere Maschenweiten aufweisen. Mit solch einem Netz könnte in der gekoppelten Simulation von Neutronenkinetik und Thermohydraulik z.B. der Effekt eines Drallerzeugers in einem Abstandsgitter genau untersucht werden.

Auch ohne solche räumlich hoch aufgelösten Details wird das CFD-Netz in der gekoppelten Rechnung aber fast immer erheblich feiner sein als die räumliche Auflösung der Neutronen-Kinetik-Berechnung. Somit müssen in der gekoppelten Simulation Rechnungen auf dreidimensionalen Volumen-Rechennetzen miteinander verbunden werden, die sich erheblich in ihrer räumlichen Auflösung unterscheiden.

Im Rahmen der Kopplung müssen also dreidimensionale, volumenfüllende Felder von verschiedenen Größen zwischen den beiden Berechnungswerkzeugen hin und her ausgetauscht werden. Dabei müssen die Daten jeweils in geeigneter Weise von ihrer ursprünglichen räumlich Auflösung auf die räumliche Diskretisierung des Empfängers übertragen werden.

Für konservative Größen dürfen dabei keine Bilanzfehler entstehen; außerdem kann es bei der Übertragung aus der gröberen in die feinere räumliche Auflösung wünschenswert sein, die räumlichen Datenfelder zu glätten, um den Strömungslöser nicht mit (in vielen Stufen) diskontinuierlichen Störgrößen (Quellterme) zu beaufschlagen.

4.2.4 Spezifikation der Kopplungsschnittstelle

Im folgenden soll zunächst analysiert werden, welche Größen zwischen dem Reaktorkernsimulator (DYN3D) und der Strömungssimulation (ANSYS CFX) hin und her übertragen werden müssen. Dazu ist zu betrachten, welches Berechnungsprogramm welche physikalischen Zusammenhänge zu beschreiben hat. Im weiteren wird dann der gesamte Ablauf der gekoppelten Simulation der beiden Programme miteinander entworfen.

4.2.4.1 Vorgänge im Kühlmittel

Das Computerprogramm zur Strömungssimulation, ANSYS CFX, wird seine Berechnung nur für das fluide (flüssige und/oder gasförmige) Kühlmittel im freien Raum zwischen den Brennstäben ausführen, der dem Kühlmittel zur Verfügung steht. Das verwendete Rechennetz wird zwar in Form und Größe dem gesamten betrachteten Reaktorkernvolumen entsprechen; die Volumenversperrung und Strömungswiderstände, die von den Brennstäben und anderen Einbauten herrühren, müssen über geeignete, ggf. auch lokal einzusetzende, mathematische Modelle in die Strömungsberechnung eingebracht werden.

Neben lokalen Geschwindigkeiten, Drücken und Temperaturen wird die Strömungssimulation auch lokale Borkonzentrationen und ggf. den Phasenvolumenanteil verdampften Kühlmittels vorhersagen. Es werden also Erhaltungs- und Transportgleichungen für Kontinuität (Gesamtmassenerhalt), Impuls (Geschwindigkeiten – drei Komponenten in

den drei kartesischen Raumrichtungen), Enthalpie (Temperaturen) und gelöstes Bor (Konzentration oder Massenanteil) gelöst. Im Falle des Auftretens von Dampf werden dieselben Gleichungen zusätzlich noch für Dampfphase gelöst; dabei beschreibt die separate Kontinuitätsgleichung den orts- (und zeit-) abhängigen Volumenanteil des Dampfes. Der Transport von Bor in die Gasphase und innerhalb derselben kann evtl. vernachlässigt werden.

Die numerische Strömungssimulation löst die Form und Größe der Ränder des vom Kühlmittel erfüllten Teilvolumens nicht auf. Deswegen macht sie keine Aussagen über die Randwerte der berechneten Größen genau an den Rändern des vom fluiden Kühlmittel erfüllten Volumens – also insbesondere genau an der Oberfläche der Brennstäbe. Statt dessen ergibt die Strömungssimulation nur Werte, die einer räumlichen Mittelung innerhalb des Zwischenraumes zwischen benachbarten Brennstäben entspricht.

Aus diesem Grund muss der Wärmeaustausch zwischen Brennstabhülle und Kühlmittel ohne eine räumliche Auflösung der Gradienten an der Brennstaboberfläche vorhergesagt werden. DYN3D besitzt hierfür spezielle Modelle, die den Wärmeaustausch an der Brennstaboberfläche abhängig von der lokalen mittleren (d.h. im Raum zwischen benachbarten Brennstäben gemittelten) Kühlmitteltemperatur vorhersagen. Diese Modelle berücksichtigen, dass abhängig von lokalen Temperaturen und Anströmgeschwindigkeiten verschiedene (unterkühlte, gesättigte oder auch überhitzte) Siedezustände sich einstellen können, die ganz unterschiedliche Wärmeübergangskoeffizienten bewirken.²²

ANSYS CFX übermittelt also an DYN3D die lokale mittlere Kühlmitteltemperatur und Strömungsgeschwindigkeit, und DYN3D sagt unter Berücksichtigung der Wärmebilanz des Brennstabes die lokale Wärmeflussdichte durch die Brennstaboberfläche ins Kühlmittel voraus. Die lokale Wärmeflussdichte durch die Brennstaboberfläche wird mit der – lokal auf das freie, von Kühlmittel erfüllte Volumen bezogenen – Brennstaboberfläche zu einem volumetrischen Wärmequellterm verrechnet, der von DYN3D zurück an ANSYS CFX übermittelt wird.

Beim Eintritt von oberflächlichem, unterkühltem Blasensieden wird es zunächst nicht zu einem Eintritt von Dampfblasen in den freien Flüssigkeitsraum zwischen den Brennstäben kommen; die Blasen werden über ihre gesamte Lebensdauer mit der Brennstaboberfläche verbunden bleiben oder sich höchstens minimal von ihr entfernen. Solange dies der Fall ist, wird diese Form der Dampfentstehung vernachlässigt und nur in ihrer Wirkung auf den Wärmefluss durch die Brennstaboberfläche berücksichtigt.

Eine höhere Verdampfungsrate an der Brennstaboberfläche wird dazu führen, dass Dampfblasen sich von der Staboberfläche lösen, in die freie Kühlmittelströmung eintreten und von dieser in andere Kontrollvolumina transportiert werden (um dann eventuell woanders wieder zu kondensieren oder das Berechnungsgebiet zu verlassen). Erst in diesem Fall muss eine lokale Dampfbildungsrate von DYN3D an ANSYS CFX mitgeteilt werden.

DYN3D wird in diesem Fall voraussagen, welcher Anteil der aus dem Brennstab austretenden Wärme direkt in das flüssige Kühlmittel übertritt (und dieses weiter aufheizt), und welcher Anteil an der Staboberfläche zur Verdampfung einer adäquaten Menge flüssigen Kühlmittels führt. Die Dampfbildungsrate wird als volumetrische Massenkonversionsrate von

²² Diese in DYN3D implementierten Modelle wurden unter der Annahme aufgestellt, dass die Anströmung strikt vertikal erfolgt. Sofern ihr Detaillierungsgrad und die verfügbare Datenbasis es zulassen, bietet sich evtl. eine Erweiterung dieser Modelle für die kombinierte parallele und orthogonale Anströmung an.

DYN3D an ANSYS CFX übermittelt; ANSYS CFX bilanziert dann Bildung, Transport und Kondensation von Dampf in jedem Bilanzkontrollvolumenelement.

4.2.4.2 Vorgänge im übrigen Reaktorkern

Aus Druck und Temperatur des Kühlmittels ergibt sich die lokale Dichte des Moderators. (Im Falle der Anwesenheit von Dampf muss dessen Volumenanteil, zusammen mit den Stoffeigenschaften für Flüssigkeit und Dampf beim vorherrschenden Druck und den jeweiligen Temperaturen, berücksichtigt werden, um eine Gesamtdichte des Moderators zu ermitteln.) Diese Dichte wird (orts aufgelöst) von ANSYS CFX an DYN3D übermittelt. Genauso liefert die Strömungssimulation auch die lokale Borkonzentration an die Reaktorkernsimulation. DYN3D kann dann mit seinen übrigen Eingabedaten die Neutronenkinetik (Kernspaltungskettenreaktion) berechnen. Dabei werden in gewöhnlicher Weise Brennstäbe, Kühlmittel, Steuerstäbe und ggf. alle anderen Einbauten berücksichtigt.

Die Neutronenkinetiksimulation ergibt lokale Wärmefreisetzungsraten, die beschreiben, wie die Brennstäbe (und durch direkte Wechselwirkung der Neutronen auch das Kühlmittel) aufgeheizt werden. Das in DYN3D implementierte Brennstabmodell berechnet laufend die Wärmebilanz der Brennstäbe; im Verbindung mit der Strömungsregimekarte für die verschiedenen Siedeströmungsregime werden schließlich lokale Wärmeübertragungsraten berechnet, die als Wärmequellterme an ANSYS CFX gehen. Dafür benötigt DYN3D, wie oben beschrieben, auch die Temperatur und die (lokal volumengemittelte) Geschwindigkeit des Kühlmittels von ANSYS CFX.

Abbildung 76 zeigt einen Überblick über die Aufgabenteilung und die Datenübermittlungen zwischen den beiden Simulationsprogrammen. Es ergibt sich ein Kreislauf von Informationen zwischen ANSYS CFX und DYN3D. Sämtliche ausgetauschten Größen können problemlos als *intensive* Größen dargestellt werden, deren Werte also nicht von der Größe des Simulationsgebietes oder einzelner Bilanzkontrollvolumina abhängen.

Wie oben im Abschnitt 4.2.2 bereits erklärt wurde, arbeiten viele gängige Reaktorkern-Simulations-Programme, darunter auch DYN3D, mit einer räumlichen Diskretisierung, die viel gröber ist als für numerische Strömungssimulation üblich. Sämtliche Datenübertragungen müssen also zwischen den sehr unterschiedlich räumlich auflösenden Simulationen vermitteln.

4.2.5 Algorithmen zum Datenaustausch von Volumendaten auf Gitternetzen/Nodalisierungen sehr unterschiedlicher räumlicher Auflösung

Der hier wiedergegebene Projektteil wurde als eine Machbarkeitsstudie für die Kopplung von DYN3D mit ANSYS CFX definiert. Für solche gekoppelten Rechnungen wird erwartet, dass die räumliche Auflösung der numerischen Strömungssimulation in ANSYS CFX typischerweise erheblich höher sein wird als diejenige der Neutronenkinetik- und übrigen Berechnungen in DYN3D. Im eng umschriebenen Rahmen der Machbarkeitsstudie wurde der erwartete typische Unterschied in der räumliche Auflösung als Grundannahme festgelegt.

Für die Übertrag dreidimensionaler Felder unterschiedlicher Größen zwischen verschiedenen räumlichen Diskretisierungen sind grundsätzlich mehrere Vorgehensweisen denkbar. Mit der gerade eingeführten Grundannahme (erheblich unterschiedliche räumliche Auflösungen) bietet sich die Wahl bestimmter, anschaulicher und leicht zu handhabender, Methoden an. Diese sollen im folgenden kurz beschrieben werden.

ANSYS CFX:

Im Kühlmittel:

Strömung, Wärme-,
Stoff- (Bor) und
Phasen- (Dampf) -transport

➤ benutzt:

- Wärmequellterme
- Dampfbildungsraten

➤ ergibt:

- Druck, Temperatur, Dichte
- Borkonzentration
- Geschwindigkeit

DYN3D:

Brennelemente und Kühlmittel:

Neutronenkinetik

➤ benutzt:

- Dichte, Borkonzentration

➤ ergibt:

- Wärmebildungsraten

Brennstabmodell

- Wärmebilanz im Brennstab

Strömungsregimekarte für
Wärmeübergangskoeffizienten

➤ benutzt:

- Temperatur, Geschwindigkeit

➤ ergibt:

- Wärmequellterme
- Dampfbildungsraten

Abb. 76: Übersichtsdarstellung der Aufgabenteilung und Datenübermittlungen zwischen ANSYS CFX und DYN3D in der gekoppelten Simulation

4.2.5.1 Zuordnung von Kontrollvolumina

Es wird also angenommen, dass die Kontrollvolumina des einen Netzes immer viel kleiner sein werden als diejenigen des anderen Netzes. Daher werden die meisten Kontrollvolumina des feinen Netzes jeweils vollständig innerhalb eines Kontrollvolumens des groben Netzes liegen. Nur eine Minderzahl der Kontrollvolumina des kleinen Netzes wird von Grenzen der Kontrollvolumina des groben Netzes durchschnitten werden.

Für die Datenübertragung zwischen den verschiedenen Netzen wird deswegen jedes Kontrollvolumen des feinen Netzes jeweils vollständig genau einem Kontrollvolumen des groben Netzes zugeordnet. Für die hier unternommene Machbarkeitsstudie wird diese Vorgehensweise auf *alle* Kontrollvolumina des feinen Netzes angewendet, also auch auf solche, die eigentlich von Grenzen der Kontrollvolumina des groben Netzes geschnitten werden.

Die räumliche Diskretisierung in DYN3D ist in den beiden horizontalen Raumrichtungen absolut gleichmäßig und einheitlich, d.h. alle Kontrollvolumina sind genau gleich breit und tief. (Bzw. in der hexagonalen Geometrievariante sind alle Seiten aller regelmäßigen Sechsecke immer genau gleich lang.) Deswegen kann die Zuordnung der Kontrollvolumina nach einem sehr einfachen Algorithmus erfolgen: Für jedes Kontrollvolumen im feinen Netz

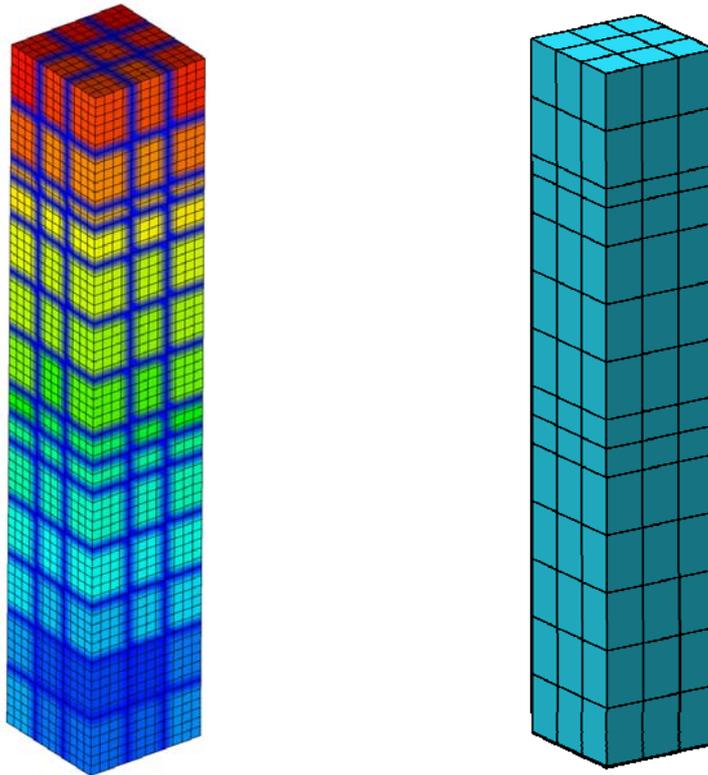


Abb. 77: Veranschaulichung der Zuordnung von Netzknoten des ANSYS-CFX-Netzes (links) zu Kontrollvolumina des DYN3D-Netzes (rechts). Einzelheiten im Text.

wird dasjenige Kontrollvolumen im groben Netz gesucht, für das der Abstand zwischen den Mittelpunkten der Kontrollvolumina so klein wie möglich wird.²³

In senkrechter Richtung können die Kontrollvolumina von DYN3D unterschiedlich hoch sein. Dies soll bei der Zuordnung einzelner ANSYS-CFX-Kontrollvolumina zu DYN3D-Kontrollvolumina berücksichtigt werden. Deswegen darf zu einem gegebenen ANSYS-CFX-Kontrollvolumen nicht einfach direkt der nächstgelegene Mittelpunkt eines DYN3D-Kontrollvolumens gesucht werden. Es genügt aber, in dieser Suche bei der Bestimmung des Abstandes die vertikale Entfernungskomponente gemäß der Höhe des DYN3D-Kontrollvolumens zu skalieren.

Abbildung 77 veranschaulicht an einem Beispiel die beschriebene Vorgehensweise: Gezeigt sind eine Visualisierung des DYN3D-Netzes und eine Darstellung des feineren ANSYS-CFX-Netzes. Die Visualisierung des DYN3D-Netz zeigt als Linien die Abdrücke der Kontrollvolumengrenzen auf den Außenflächen des Berechnungsgebietes. Die Darstellung des feineren ANSYS-CFX-Netzes zeigt die Linienelemente des Ausgangsnetzes. ANSYS

²³ Für die Kontrollvolumina in DYN3D sind die Koordinaten der Mittelpunkte jeweils genau bekannt. In ANSYS CFX werden eigentlich nicht Mittelpunkte sondern „Bezugspunkte“ verwendet: ANSYS CFX baut um jeden Netzknoten herum ein finites Kontrollvolumen auf, indem mittig zwischen jeweils benachbarten Netzknoten die Grenzen zwischen den finiten Kontrollvolumina eingeführt werden. In inhomogenen Netzen liegen die Netzknoten, deren Koordinaten hier als „Bezugspunkte“ verwendet werden, also nicht unbedingt genau in der Mitte der einzelnen finiten Kontrollvolumina.

CFX konstruiert um jeden Knotenpunkt herum ein Kontrollvolumen, indem Grenzen jeweils mittig zwischen benachbarte Knotenpunkte gelegt werden.

Die Einfärbung des ANSYS-CFX-Netzes in Abbildung 77 stellt dar, welchem DYN3D-Kontrollvolumen jeder einzelne Knoten des Ausgangsnetzes zugeordnet ist. Diese Zuordnung gilt genauso auch für die ANSYS-CFX-Kontrollvolumina, die um jeden einzelnen Knotenpunkt des Ausgangsnetzes aufgebaut werden. Man erkennt deutlich, wie sich das grobe DYN3D-Netz auf das feine ANSYS-CFX-Netz abbildet.

An den Grenzen der Abbilder der einzelnen DYN3D-Kontrollvolumina im ANSYS-CFX-Netz fallen Schichten von Knoten auf, die mit dunkelblauer Farbe markiert sind. Diese Knoten sind genau gleich weit von zwei oder mehr Mittelpunkten von DYN3D-Kontrollvolumina entfernt.²⁴ Damit keine Zuordnung nach beliebiger Willkür oder Zufall geschieht, wurden diese Kontrollvolumina jeweils zu gleichen Teilen allen gleich weit entfernten DYN3D-Kontrollvolumina zugeordnet.

4.2.5.2 Übertragung konservativer Größen

Nachdem die Netzzuordnung gemäß den Ausführungen im vorigen Abschnitt aufgestellt ist, erscheint die Übertragung von Volumenfeldgrößen zwischen den verschiedenen Netzen zunächst trivial: Für die Übertragung von grob auf fein kann der einzelne Wert vom DYN3D-Kontrollvolumen einfach allen zugeordneten ANSYS-CFX-Knoten und -Kontrollvolumina zugewiesen werden; in umgekehrter Richtung kann über alle ANSYS-CFX-Kontrollvolumina, deren Knoten einem DYN3D-Kontrollvolumen zugeordnet sind, volumengewichtet gemittelt werden.

Diese simple Vorgehensweise ist aber unzureichend: Es werde der Fall angenommen, dass die Grenzen der Kontrollvolumina im DYN3D-Netz *nicht* genau auf Grenzen von Kontrollvolumina im ANSYS-CFX-Netz fallen. In diesem Fall ist damit zu rechnen, dass das Gesamtvolumen aller ANSYS-CFX-Kontrollvolumina, die einem DYN3D-Kontrollvolumen zugeordnet sind, nicht immer genau dessen Größe entspricht. Manchen DYN3D-Kontrollvolumen wird also etwas zu viel vom ANSYS-CFX-Rechengebiet zugeordnet, anderen etwas zu wenig. Wenn nun eine übertragene Feldgröße z.B. hohe Werte in den ersteren DYN3D-Kontrollvolumina hat und niedrige Werte in den letzteren, so wird das Gesamtvolumenintegral der übertragenen Feldgröße durch die Übertragung verändert.

Um diese Verluste oder Überschüsse bei der Datenübertragung zwischen den verschiedenen Netzen zu verhindern, kann z.B. jeweils mit dem zu betrachtenden Volumen (DYN3D-Kontrollvolumen oder Summe aller zugeordneten ANSYS-CFX-Kontrollvolumina) skaliert werden. So würde *lokal* (für ein DYN3D-Kontrollvolumen und seine zugeordneten ANSYS-CFX-Kontrollvolumina) ein exakter Erhalt des Volumenintegrals der übertragenen intensiven Größe sichergestellt. Diese Vorgehensweise kann aber dazu führen, dass ein vorher streng monotoner räumlicher Verlauf nach der Übertragung ein lokales Maximum oder Minimum aufweist.

²⁴ Wie oben beschrieben wird dabei die vertikale Entfernungskomponente jeweils gemäß der Höhe des für die einzelne Entfernungsbestimmung betrachteten DYN3D-Kontrollvolumens skaliert.

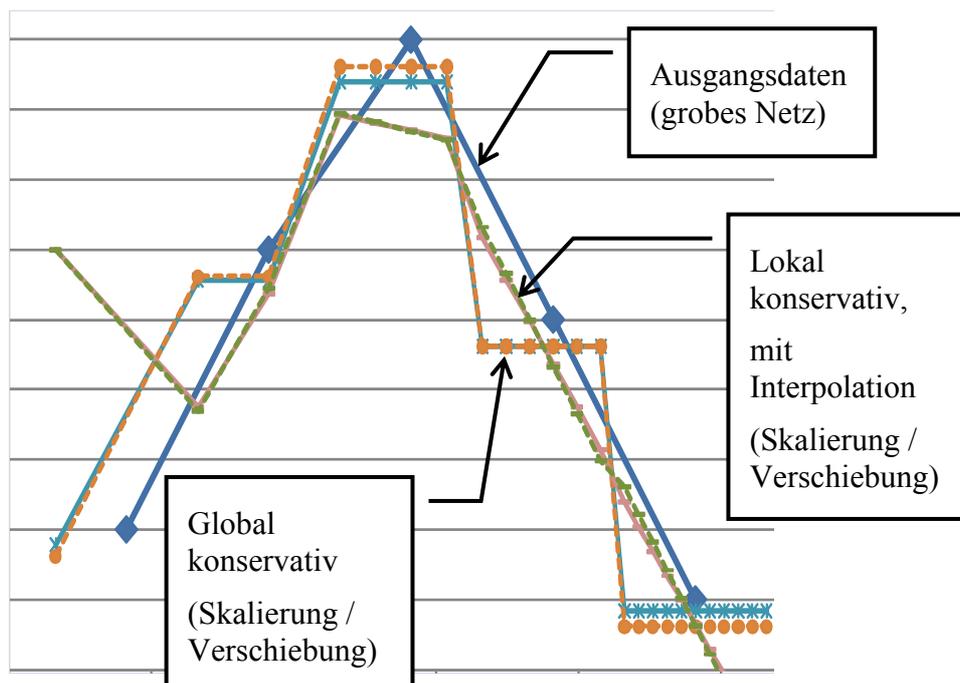


Abb. 78: Die Auswirkungen der verschiedenen Wahlmöglichkeiten auf die Ergebnisse einer eindimensionalen Datenübertragung von einem groben Netz auf ein inhomogenes Netz. Einzelheiten im Text.

4.2.5.3 Optionen für die Datenübertragung

Als Alternative zur *lokalen* Verhinderung von Verlusten und Überschüssen wurde deswegen die Möglichkeit geschaffen, nur *global* Verluste und Überschüsse auszugleichen. Dies geschieht, indem nach der Übertragung alle lokalen Werte in einheitlicher Weise so korrigiert werden, dass hinterher das Gesamtvolumenintegral genau demjenigen vor der Übertragung von einem Netz aufs andere entspricht. Die Einheitliche Korrektur kann entweder eine Skalierung (Multiplikation mit einem Korrekturfaktor) oder eine Verschiebung (Subtraktion einer mittleren Abweichung) sein.

Bei der Übertragung vom groben aufs feine Netz entstehen treppenförmige Profile für den Verlauf der übertragenen Größe im Raum. Verschiedenste Interpolationsmethoden wären hier denkbar. Aus Gründen, die mit Details der Implementierung in ANSYS CFX zusammenhängen (s.u.), wurde eine gradientenbasierte Methode gewählt: Vor der Übertragung wird der räumliche Gradient des zu übertragenden Feldes ermittelt. Bei der Übertragung wird der räumliche Abstand zwischen dem Ursprungspunkt (Mittelpunkt des Kontrollvolumens im groben DYN3D-Netz) und dem Zielpunkt (Netzknoten im ANSYS-CFX-Netz) ermittelt. Der lokale Gradient wird mit diesem Distanzvektor multipliziert, und das Ergebnis dem Zielwert für den einzelnen ANSYS-CFX-Knoten hinzugerechnet.

Abbildung 78 zeigt die Auswirkungen der verschiedenen Wahlmöglichkeiten auf die Ergebnisse einer eindimensionalen Datenübertragung von einem groben Netz auf ein inhomogenes Netz, das lokal (links im Diagramm) kaum feiner ist als das grobe Netz, während es am anderen Ende (rechts im Diagramm) viel feiner als das grobe Netz ist. Im

Falle einer *lokalen* Unterdrückung von Übertragungsverlusten (hier zusammen mit Interpolation) erkennt man nahe dem linken Rand ein ursprünglich nicht vorhandenes lokales Minimum; bei der *globalen* Korrektur von Verlusten zeigt sich klar der Unterschied zwischen Skalierung (blaue Sterne) und vertikaler Verschiebung (orangefarbene Vollkreise).²⁵

4.2.6 Implementierung der prototypischen Schnittstelle zur Code-Kopplung von ANSYS CFX \Leftrightarrow DYN3D

Die Verbindung zwischen ANSYS CFX und DYN3D wurde auf der Seite von ANSYS CFX vollständig über User-Fortran-Routinen implementiert. Dies sind ProgrammROUTINEN, die der geschulte Benutzer in der Programmiersprache FORTRAN selbst schreibt, in Maschinencode übersetzt und dann als dynamische Bibliothek (DLL) zur Laufzeit in den CFX-Programmprozeß einbindet. Über Benutzereingaben kann dann außerhalb des Programmquelltextes gesteuert werden, an welchen Stellen im Programmablauf die Routinen aufgerufen werden sollen (junction-box-Routinen) oder zur Ermittlung welcher Feldgrößen sie dienen und welche unabhängigen Variablen von CFX an sie übergeben werden sollen (User-CEL-Routinen).

Der FORTRAN-Quelltext von DYN3D wurde – nach entsprechender Anpassung durch Sören Kliem, Forschungszentrum Dresden / Rossendorf, Abg. Störfallanalyse – zusammen mit den User-Fortran-Routinen übersetzt und in dieselbe dynamische Bibliothek mit eingebunden. Innerhalb vom DYN3D-Quelltext war vorher von Herr Kliem eine spezielle Routine implementiert worden, die von den CFX-User-Fortran-Routinen mit unterschiedlichen Aufrufparametern aufgerufen werden konnte. Auf diesem Wege konnte der gesamte DYN3D-seitige Programmablauf in vordefinierten Schritten über wiederholte Aufrufe dieser DYN3D-Schnittstellenroutine geschehen.

4.2.6.1 DYN3D-Netz in CFX

Zur Verifikation der User-Fortran-Routinen für die Datenübertragung zwischen grobem und feinem Netz war es wünschenswert, Daten auf *beiden* Netzen in ANSYS CFX anlegen und auch nebeneinander im graphischen Postprozessor CFD-Post auswerten zu können. Deswegen wurde grundsätzlich vorgesehen, dass immer eine Repräsentierung des DYN3D-Netzes neben dem eigentlichen CFD-Rechengebiet in ANSYS CFX angelegt wird.

Für diesen Zweck wurde ein spezieller Netzgenerator auf der Grundlage von ANSYS Tgrid entwickelt; dieser liest eine DYN3D-Eingabedatei und produziert daraus vollautomatisch eine Netzdatei, die in ANSYS CFX eingelesen werden kann, um die Repräsentierung des DYN3D-Netzes in ANSYS CFX anzulegen.

Mit Hilfe dieser Repräsentierung des DYN3D-Netzes in ANSYS CFX konnten die User-Fortran-Routinen für die Datenübertragung zwischen grobem und feinem Netz vollständig entwickelt werden, bevor die spezielle Version von DYN3D überhaupt verfügbar wurde.

²⁵ Für die lokale Fehlerunterdrückung mit Interpolation ergeben sich nur minimale Unterschiede zwischen Skalierung und Vertikalverschiebung finden. Diese findet man beim Übergang vom vorletzten auf das rechte Kontrollvolumen des groben Netzes weiter rechts im Diagramm: Für die lokale Skalierung ist der Kurvenverlauf linear, während er für die lokale Verschiebung hier eine schwache S-Form zeigt.

4.2.6.2 Anschluß an CFX

In ANSYS CFX lassen sich zusätzliche, frei definierbare Feldvariablen anlegen, die u.a. von User-Fortran-Routinen ausgelesen und auch beliebig neu belegt werden können.²⁶ Für diese neuen Feldvariablen stehen im Postprozessor CFD-Post alle Arten graphischer und numerischer Auswertemethoden zu Verfügung. Diese Variablen wurden benutzt, um die Ergebnisse der Übertragung von Feldgrößen zwischen grobem und feinem Netz zu visualisieren und quantitativ zu prüfen.

Die User-Fortran-Routinen für die Datenübertragung zwischen feinem und grobem Netz benutzen ausschließlich eigene, selbst allozierte Speicherbereiche. Vor dem Schreiben der Ergebnisdatei ruft CFX eine User-CEL-Routine auf, die als Berechnungsvorschrift für eine bestimmte benutzerdefinierte Feldvariable eingetragen worden ist. Diese User-CEL-Routine stellt die zwischen den Netzen übertragenen Daten aus den selbst allozierten Speicherbereichen dem CFX-Löser zur Verfügung, der sie dann für die graphische Auswertung in die Ergebnisdatei schreibt.

Dort, wo in der Benutzeroberfläche von ANSYS CFX eingetragen ist, welche User-CEL-Routine zur Belegung einer bestimmten benutzerdefinierten Variablen für die graphische Auswertung verwendet werden soll, können auch noch zusätzliche Parameter übergeben werden. So wird z.B. an Hand eines solchen zusätzlichen Parameters jeweils eines von mehreren selbst allozierten Datenfeldern adressiert; dadurch kann für die Belegung aller benutzerdefinierten Variablen dieselbe User-CEL-Routine verwendet werden.

Dieselbe User-CEL-Routine kann außerdem verwendet werden, um Feldgrößen vom CFX-Löser an die User-Fortran-Routinen zu übergeben, d.h. sie in die selbst allozierten Datenfelder zu kopieren: Beim Aufruf der User-CEL-Routine wird ein weiterer zusätzlicher Übergabeparameter festgelegt; dieser ist eine in CEL formulierte Feldgröße, die als solche (d.h. separat für jeden Netzknoten) an die User-CEL-Routine übergeben wird. Die User-CEL-Routine kann dann die übergebenen Werte auslesen und in einen selbst allozierten Speicherbereich schreiben; zusätzlich sollte sie, wie es Standardaufgabe jeder User-CEL-Routine ist, auch eine Rückgabefeldgröße an den aufrufenden CFX-Löser zurückgeben. Letzterer wird damit dann wieder die benutzerdefinierte Feldvariable belegen, für die die User-CEL-Routine mit ihren speziellen Aufrufparametern als definierende Funktion eingetragen ist.

Somit geschieht das Einlesen von ANSYS-CFX-Datenfeldern (Temperatur,...) in die Übertragungsroutinen und das Auslesen der übertragenen Datenfelder in benutzerdefinierte Feldvariablen (für die graphische Auswertung) mit derselben User-CEL-Routine; außerdem wird beim Einlesen die benutzerdefinierte Feldvariable auch im feinen Netz mit genau den Daten belegt, die auch an die Übertragungsroutinen übergeben werden.

In der entgegengesetzten Richtung, d.h. in der Übertragung vom groben DYN3D-Netz auf das feinere ANSYS-CFX-Netz, wird eine ganz analoge User-CEL-Routine auf ganz analoge Art und Weise verwendet. Allerdings hat diese zweite User-CEL-Routine nicht die Aufgabe, auch Daten von ANSYS CFX (in Form eines in CEL formulierten, ortsabhängigen Aufrufparameters) entgegenzunehmen; auf der Seite des groben DYN3D-Netzes sorgt die Routine nur dafür, dass die für die Übertragung von grob nach fein eingesetzten Daten auf der Repräsentierung des DYN3D-Netzes im Postprozessor CFD-Post ausgewertet werden

²⁶ Hier sind sog. "additional variables" vom Typ "algebraic expression" gemeint.

können. Dies entspricht ganz der Aufgabe derselben User-CEL-Routine auf der Seite des feinen CFD-Netzes.

ANSYS CFX verwaltet und verwendet für bestimmte Zwecke seine Daten nicht nur an den Positionen der Netzknoten, sondern auch an anderen Orten im Raum – z.B. auf den Mittelpunkten von Flächenelementen von einzelnen Berandungen des Rechengebietes. Wenn bestimmte Größen, für die dies zutrifft, direkt oder indirekt vom Benutzer definiert werden müssen, bedeutet das u.U., dass der Benutzer diese Größen auch an allen in Frage kommenden Orten im Raum bereitstellen muss. Dies betrifft dann insbesondere Größen, die durch User-Fortran-Routinen (z.B. über die Datenübertragung vom DYN3D- aufs ANSYS-CFX-Netz!) definiert werden.

Wenn aber, wie in der oben beschriebenen Vorgehensweise, eine benutzerdefinierte Feldvariable verwendet wird, fordert ANSYS CFX vom Programmierer der diese Feldvariable definierenden User-Fortran-Routine nur Daten für die Positionen der Netzknoten. Daten an anderen Stellen im Raum werden von ANSYS CFX dann grundsätzlich selbständig durch geeignete Interpolation ermittelt. Dies reduziert deutlich den Programmieraufwand für die hier entwickelten User-Fortran-Routinen.

4.2.6.3 Frei und flexibel einstellbare Lösung

Die Übertragung der Daten zwischen feinem und grobem Netz sowie in entgegengesetzter Richtung geschieht also ausschließlich in eigenen, selbst allozierten Speicherbereichen. Für jede zu übertragende Feldgröße werden über Eingaben, die vom Benutzer außerhalb des Fortran-Quelltextes gemacht werden, alle Funktionen und Eigenschaften der eingesetzten Routinen ausgelöst und gesteuert. Dies beinhaltet insbesondere die Anzahl der in jeder Richtung zu übertragenden Größen und die Auswahl der Optionen zur Unterdrückung von Übertragungsverlusten und zur Interpolation für jede einzelne übertragene Größe.

Mit der hier nur grob umrissenen Vorgehensweise können, ganz ohne Änderungen am Quelltext der User-Fortran- und User-CEL-Routinen, beliebig neue Übertragungsgrößen hinzugefügt und wieder entfernt werden, und die gewählten Optionen für die Übertragung können für jede Größe einzeln den jeweiligen Bedürfnissen angepasst werden. Genauso wird die Herkunft der an DYN3D übergebenen Feldgrößen aus ANSYS CFX und die Verwendung der von DYN3D zurückgegebenen Größen in ANSYS CFX gänzlich auf der Ebene der Benutzereingaben (CCL, CEL) und somit ganz außerhalb des Fortran-Quelltextes gesteuert!

4.2.6.4 Anschluß an DYN3D

Das Einlesen der Daten für die Übertragung von grob nach fein aus DYN3D in die selbst allozierten Speicherbereiche geschieht direkt in einer "junction box"-Routine; dieselbe Routine ruft auch in jeder Iteration ("coefficient loop" oder Zeitschritt) die DYN3D-Interface-Routine auf. Dabei werden die vom feinen ANSYS-CFX-Netz auf das grobe DYN3D-Netz übertragenen Feldgrößen an DYN3D übergeben. In der Benutzeroberfläche kann der Benutzer steuern, ob diese regelmäßigen Aufrufe der DYN3D-Routine am Beginn oder Ende jeder Iteration oder jedes Zeitschritts passieren soll.

Dieselbe DYN3D-Interface-Routine, die zum Zweck dieser Kopplung im DYN3D-Quelltext eingerichtet wurde, wird auch zur Initialisierung des in die User-Fortran-Bibliothek integrierten DYN3D aufgerufen. Dabei stellt DYN3D der aufrufenden User-Fortran-Routine die Koordinaten der Mittelpunkte der Kontrollvolumina in DYN3D zur Verfügung. Diese

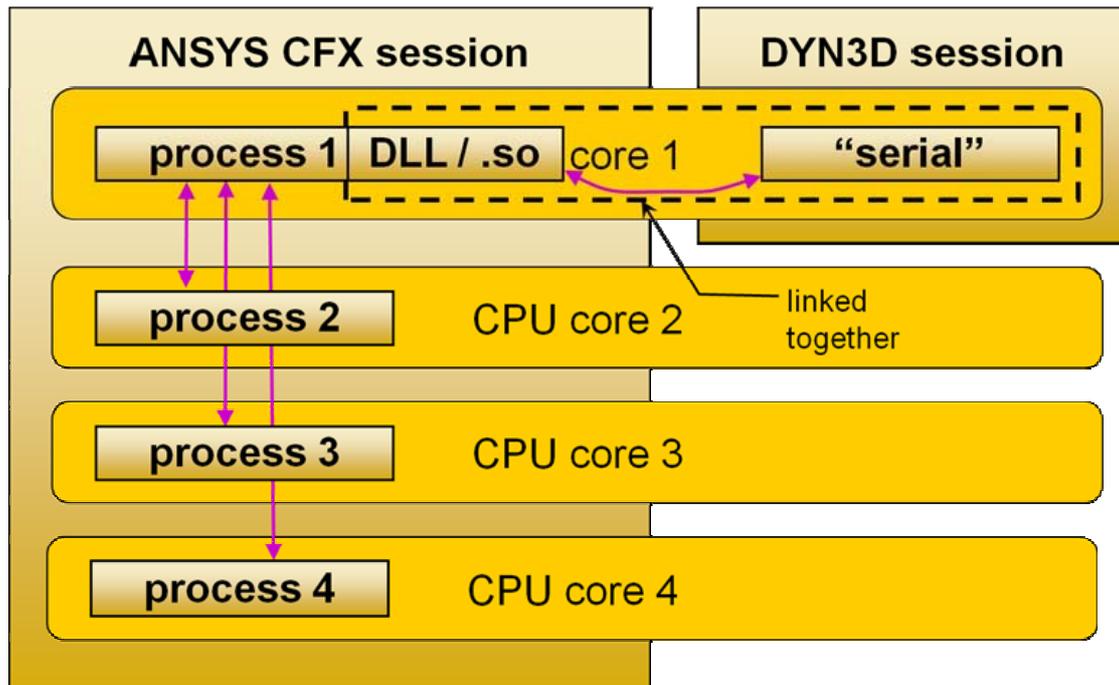


Abb. 79: Schematische Darstellung der Parallelisierung von ANSYS CFX und der Kopplung mit DYN3D.

werden verwendet, um eine eins-zu-eins-Zuordnung der DYN3D-Kontrollvolumina mit den Elementen der Datenfelder für Daten in der räumlichen Auflösung von DYN3D aufzustellen.

Schließlich wird dieselbe DYN3D-Interface-Routine ein letztes von den User-Fortran-Routinen in ANSYS CFX aufgerufen, bevor letzteres sich beendet. Dadurch erhält DYN3D vor allem die Gelegenheit, zum Schreiben geöffnete Dateien zu schließen und seinerseits Ergebnisdateien anzulegen.

In der Aufrufparameterliste der DYN3D-Interface-Routine gibt es für jede Feldgröße, die entweder an DYN3D übergeben oder von DYN3D zurückgeliefert wird, einen einzelnen Eintrag. Somit muss, wenn neue Größen für den Austausch in der einen oder anderen Richtung vorgesehen werden sollen, nicht nur der DYN3D-Quelltext sondern auch die eine User-Fortran-Routine angepasst werden, die die DYN3D-Interface-Routine aufruft.

Um Irrtümer so weit wie möglich auszuschließen, verlangt die aktuelle Implementierung, dass der Benutzer an einer bestimmten Stelle in den Eingabedaten für ANSYS CFX einen Klartextnamen für jede Übertragungsgröße definiert. Dieser wird im Quelltext der User-Fortran-Routine, die die DYN3D-Interface-Routine aufruft, überprüft. Dadurch ist gewährleistet, dass Eingabefehler außerhalb des Quelltextes nicht leicht dazu führen können, dass Datenfelder bei der Übergabe an, oder Übernahme von, DYN3D falsch zugeordnet werden.

Da die Datenfelder innerhalb der User-Fortran-Routinen dynamisch mit Hilfe des CFX-Memory-Management-System (MMS) verwaltet werden, kann der gesamte übrige Quelltext der User-Fortran-Routinen dabei unverändert bleiben. Somit lassen sich z.B. leicht zusätzliche Ergebnisgrößen von DYN3D an ANSYS CFX übergeben, damit diese im graphischen Postprozessor CFD-Post zusammen mit den Ergebnissen der numerischen Strömungssimulation betrachtet werden können.

4.2.6.5 Parallelverarbeitung

ANSYS CFX ist darauf ausgelegt, dass viele Mikroprozessorkerne gleichzeitig an ein und derselben numerischen Strömungssimulation arbeiten können. Dabei wird das Rechengebiet in räumlich umschriebene Teile unterteilt, und jedem Prozessorkern wird eine solche „Partition“ zugewiesen. Diese Möglichkeit muss auch in der gekoppelten Simulation mit DYN3D nutzbar bleiben.

DYN3D seinerseits ist bisher nicht für Parallelverarbeitung ausgelegt. Die auszutauschenden Daten müssen in ANSYS CFX also in jedem Fall von den einzelnen Rechenknotenprozessen, die jeweils eine Partition bearbeiten, an einer Stelle zusammengezogen werden, um dann an DYN3D übergeben zu werden. Umgekehrt müssen von DYN3D bereitgestellte Daten (Wärmequellterme) auf die einzelnen Partitionen, also an die einzelnen Rechenknotenprozesse, verteilt werden.

ANSYS CFX enthält zahlreiche Grundfunktionen, die genau für solche und ähnliche Zwecke implementiert worden sind. Auf diese konnte bei der Entwicklung der User-Fortran-Routinen im hier berichteten Projektteil zurückgegriffen werden. Abbildung 79 veranschaulicht die Parallelisierung von ANSYS CFX und die Kopplung mit DYN3D. Da die DYN3D-Routinen vollständig in der User-Fortran-Bibliothek des „master“-Prozesses eingebettet sind, wird DYN3D auf demselben Prozessorkern und in demselben Prozess ausgeführt wie der „master“-Prozess von ANSYS CFX.

Eine zusätzliche Erschwernis lag in der Tatsache, dass ANSYS CFX immer verlangt, dass jede Partition von jeder Netzzone immer mindestens jeweils einen Gitterknoten enthält. Somit muss auch die Repräsentierung des DYN3D-Netzes in ANSYS CFX partitioniert werden. Dies schien zunächst kein Problem zu sein, weil es sich erreichen lässt, dass *Kopien* aller Knoten, die eigentlich anderen Partitionen angehören, auch im „master“-Prozess vorgehalten werden, der seinerseits die Daten mit DYN3D austauscht. Diese Kopien werden von konstitutiven Mechanismen in ANSYS CFX immer auf dem neuesten Stand gehalten.

Wenn ANSYS CFX am Ende einer Rechnung die abschließende Ergebnisdatei schreibt, werden aber für diese Knoten die Werte nur von den „Originalen“ der Knoten in den jeweiligen Rechenknotenprozessen verwendet. Um diese Werte in der partitionierten Repräsentierung des DYN3D-Netzes in ANSYS CFX zunächst mit den von DYN3D gelieferten Werten zu belegen, war ein zusätzlicher Programmieraufwand nötig.

4.2.6.6 Kurzzusammenfassung

Wie in diesem Abschnitt beschrieben, wurde in User-Fortran-Routinen für ANSYS CFX eine generelle Methodik zur Kopplung einer numerischen Strömungssimulation mit einem – prinzipiell beliebigen – anderen Berechnungswerkzeug geschaffen. Dieses andere Werkzeug arbeitet auf demselben dreidimensionalen Rechengebiet, aber in einer erheblich größeren räumlichen Auflösung. Aus der Sicht der numerischen Strömungssimulation handelt es sich also um eine „zonale“ Kopplung.

Das externe Berechnungswerkzeug erhält hierbei regelmäßig im Volumen ortsabhängige Eingabedaten von ANSYS CFX und liefert Ergebnisse an ANSYS CFX zurück, die dann als Eingabedaten (Randbedingungen, Stoffeigenschaften, Quellterme etc.) in die numerische Strömungssimulation einfließen können. Das externe Berechnungswerkzeug kann außerdem eigene persistente Speicherbereiche anlegen und von Aufruf zu Aufruf (Iteration / Zeitschritt) weiterverwenden.

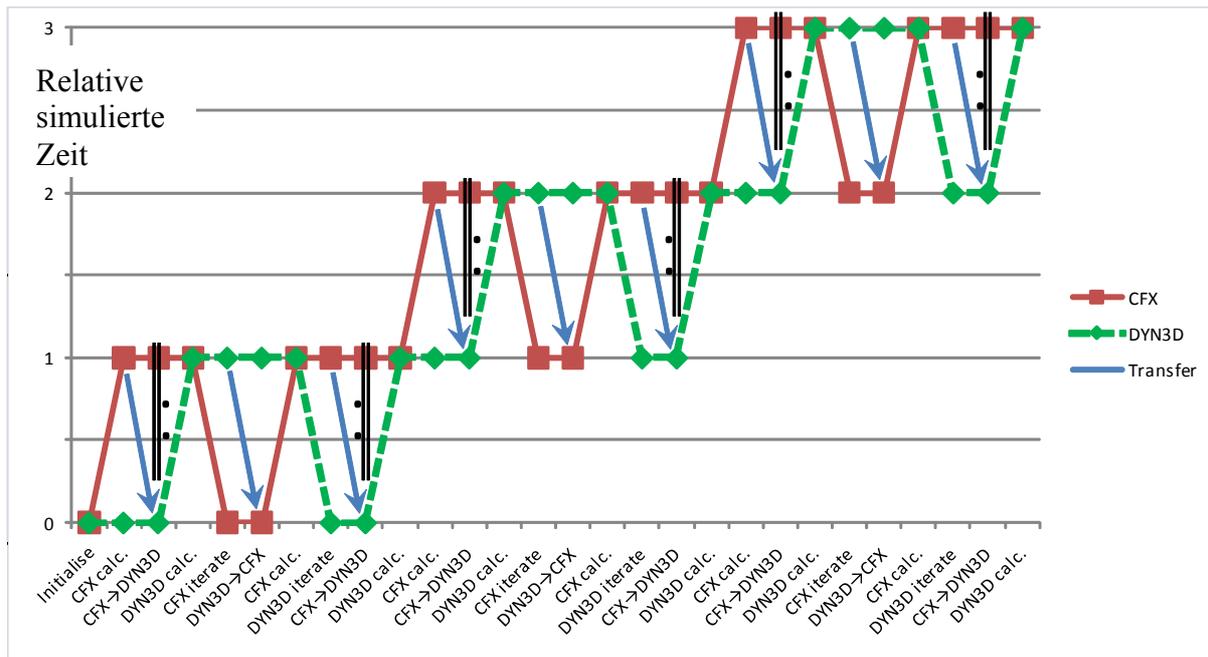


Abb. 80: Aktionssequenz für die ersten drei Zeitschritte einer transienten Simulation, wenn DYN3D ganz in den iterativen Lösungsablauf von ANSYS CFX eingekoppelt wäre.

Sämtliche Funktionalität wird von außerhalb der User-Fortran-Routinen gesteuert, so dass die Notwendigkeit zu Änderungen am Quelltext der User-Fortran-Routinen für den Benutzer kaum jemals aufkommen wird. Für diese Funktionalität wurden insgesamt 40 Routinen angelegt, die zusammen 4200 Zeilen Fortran-Quelltext und fast 4500 Zeilen Quelltextkommentare enthalten. Die Verwendung von ANSYS CFX in Parallel wurde ermöglicht, wobei angenommen wurde, dass das externe Berechnungswerkzeug nur seriell arbeitet.

4.2.7 Stationäres und instationäres Kopplungsverfahren

Kernreaktorsimulationen bestehen gewöhnlich aus zwei Teilen: zunächst wird ein stationärer Zustand berechnet; ausgehend von diesem wird dann in vielen kleinen Zeitschritten ein transienter Vorgang simuliert.

4.2.7.1 Simulation eines stationären Zustandes

Bei der Berechnung eines stationären Zustandes wird der Löser von ANSYS CFX iterativ dazu benutzt, von Iteration zu Iteration immer näher an das physikalisch korrekte Endergebnis heranzukommen. Dabei dient immer wieder das Ergebnis der vorigen Iteration als Ausgangszustand für die nächste Iteration. In diesen iterativen Ablauf wurde DYN3D eingekoppelt, d.h. nach jeder Iteration (“coefficient loop”), die ANSYS CFX ausführt, wird die DYN3D-Interface-Routine aufgerufen.

Da die Laufzeiten von DYN3D (insbesondere ohne das Strömungsmodul) um Größenordnungen kleiner sind als die von ANSYS CFX, vollzieht DYN3D bei jedem Aufruf eine vollständige, iterative Berechnung eines stationären Zustandes auf Basis der von ANSYS CFX bereitgestellten Daten – auch wenn diese, weil der ANSYS-CFX-Löser erst am Beginn seines Konvergenzweges steht, noch gar nicht physikalische sinnvoll sind.

4.2.7.2 Simulation eines transienten Vorgangs

Transiente Vorgänge werden bei der numerischen Simulation gewöhnlich in viele kleine, im einfachsten und häufigsten Fall gleich lange, Zeitschritte zerlegt. Für jeden Zeitschritt wird dann in ANSYS CFX wie für einen stationären Zustand der iterative Löser benutzt, um das korrekte Ergebnis für den aktuellen Zeitpunkt im simulierten Vorgang zu ermitteln. Zur Berücksichtigung zeitlicher Gradienten werden dabei im Gleichungssystem zusätzliche Zeitableitungsterme eingesetzt.

Idealerweise sollte nun auch DYN3D in diese zweistufig iterative Fahrweise (viele Zeitschritte, mehrere Löseriterationen je Zeitschritt) eingekoppelt werden. Abbildung 80 veranschaulicht die dabei zu durchlaufende Sequenz für die ersten drei Zeitschritte. Bis zum Ende der Projektlaufzeit stand allerdings auf Seiten des Forschungszentrums Dresden noch nicht die Arbeitszeit zur Verfügung, um die hierfür notwendigen Modifikationen am Quelltext von DYN3D vorzunehmen. Es wäre hierfür nämlich notwendig, dass DYN3D bei wiederholten Aufrufen sowohl den aktuellen Zeitschritt wiederholen als auch zum nächsten Zeitschritt fortschreiten könnte.

Aus diesem Grund wurde für die Machbarkeitsstudie eine vereinfachte Vorgehensweise gewählt: die DYN3D-Interface-Routine wurde genau ein einziges Mal für jeden Zeitschritt aufgerufen, und zwar jeweils nachdem ANSYS CFX die numerische Strömungssimulation für den Zeitschritt abgeschlossen hatte. Abbildung 81 veranschaulicht die vereinfachte Sequenz. Diese Vereinfachung hat zwei wichtige Konsequenzen: Zum einen „hinkt“ ANSYS CFX immer hinterher, weil ihm für die Berechnung eines neuen Zeitschrittes immer nur Ergebnisse von DYN3D für den bereits gerechneten Zeitschritt zur Verfügung stehen. Zum anderen bedeutet diese „explizite“, dass viel kleinere Zeitschritte notwendig sind, um Zeitschritt-Weiten-unabhängige Ergebnisse zu erhalten.

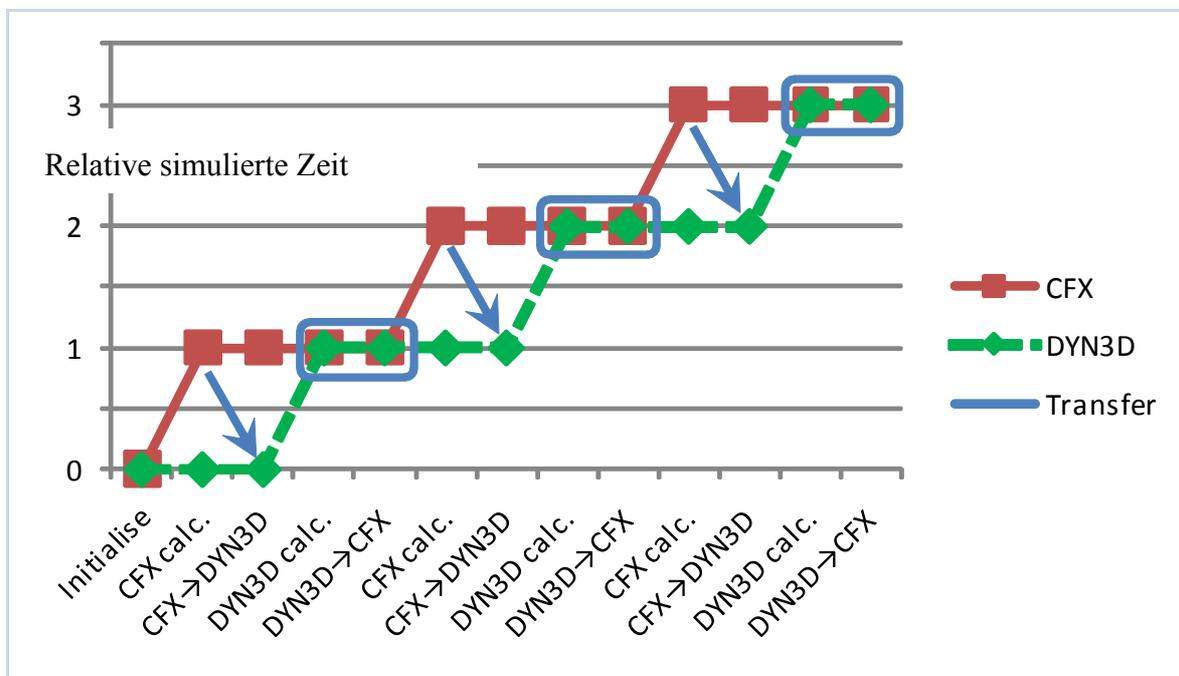


Abb. 81: Aktionssequenz für die ersten drei Zeitschritte einer transienten Simulation, wenn DYN3D nur jeweils einmal am Ende eines Zeitschrittes aufgerufen wird.

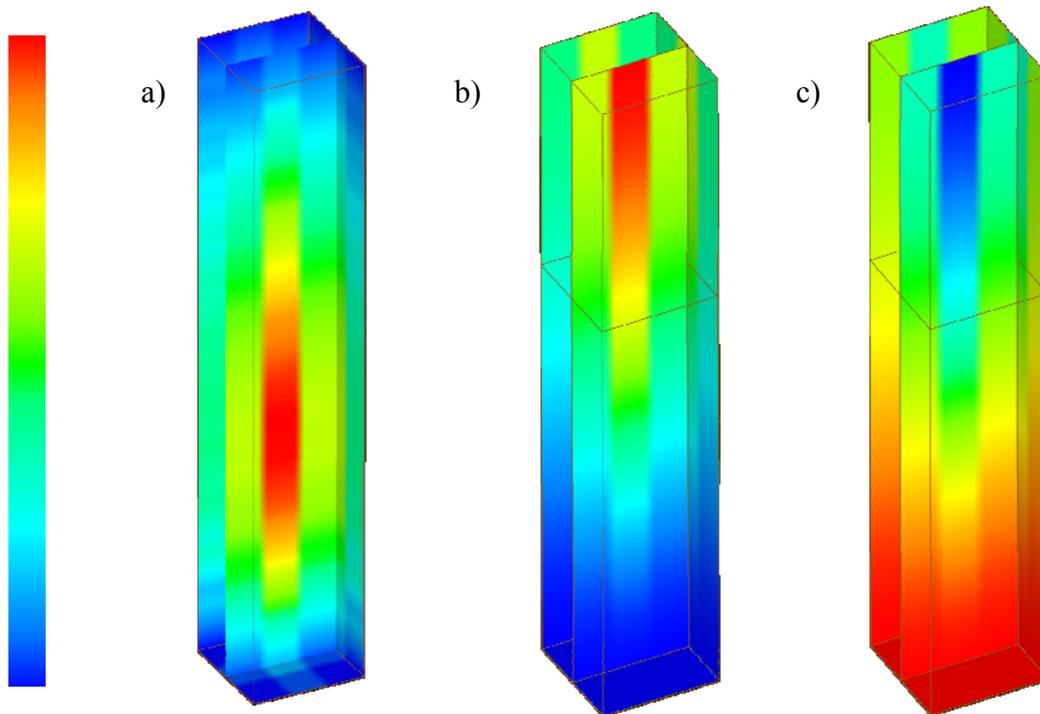


Abb. 82: Ergebnisse der stationären Simulation des hypothetischen Minimalreaktors bei voller Leistung: a) Wärmefreisetzungsrate 0-158 MW/m³; b) Kühlmitteltemperatur 285,98-307,19 °C; c) Kühlmitteldichte 711,34-753,75 kg/m³.

4.2.8 Verifikation der ANSYS CFX \Leftrightarrow DYN3D Kopplung

Das Strömungsberechnungsmodul in DYN3D hat gewisse limitierende Eigenschaften, die es wünschenswert machen, es durch eine höher auflösende, voll dreidimensionale numerische Strömungssimulation zu ersetzen. Genau diese Ersetzung ist der Inhalt des hier berichteten Projektteils. Zur Verifikation der korrekten Implementierung wurde die mit DYN3D gekoppelte numerische Strömungssimulation so eingestellt, dass sie möglichst vollständig die Eigenschaften des Strömungsberechnungsmoduls in DYN3D nachahmt.

Hierzu wurden z.B. in ANSYS CFX gewisse spezielle Einstellungen gemacht, die alle lateralen Strömungskomponenten wirksam unterdrückten. Weiterhin wurde das in der numerischen Strömungssimulation eingesetzte Netz geringfügig verändert: Dadurch lagen alle vertikalen Grenzen zwischen Kontrollvolumina im DYN3D-Netz auch genau auf vertikalen Grenzen zwischen Kontrollvolumina im ANSYS-CFX-Netz. In letzterem wurde allerdings eine erheblich feiner räumliche Auflösung realisiert, um realistisch die beabsichtigte Art der Verwendung dieser Technologie in der Praxis widerzuspiegeln.

Für die Verifikation wurden Rechnungen im Rechengelände ausgeführt, das in Abbildung 77 dargestellt ist. Es ist 3,6 m hoch und misst 0,63 m x 0,63 m im horizontalen Querschnitt. (Ein Brennelement hat eine Breite und Tiefe von jeweils 21 cm.) Die Abbildung zeigt auch die räumliche Diskretisierung in DYN3D. Das in ANSYS CFX verwendete Netz unterscheidet sich nur unmerklich von dem in Abbildung 77 dargestellten und wird deswegen nicht separat gezeigt.

Der dargestellte Aufbau aus nur neun Brennelementen stellt keinen wirklich realistischen Kernreaktor dar, weil die Brennstoffmasse unterkritisch ist. In der Simulation wurde die Albedo der um den Reaktorkern angeordneten Neutronenreflektoren auf unphysikalisch hohe Werte eingestellt, um in der Simulation eine normale Kernspaltungskettenreaktion zu erhalten. Da der Neutronenkinetikteil im Vergleich zwischen einerseits DYN3D mit seinem eigenen Strömungsmodul und andererseits DYN3D gekoppelt mit ANSYS CFX unverändert bleibt, ist dieser Kunstgriff legitim; er erlaubt es, für die Verifikationsrechnungen mit einem möglichst kleinen Rechengebiet und somit kürzesten Rechenzeiten zu agieren.

4.2.8.1 Stationärer Zustand – „Hot Full Power“

Abbildung 82 zeigt exemplarisch ausgewählte Simulationsergebnisse aus der gekoppelten Simulation eines stationären Zustands, in dem der Reaktor volle Leistung erbringt. Die Gesamtleistung wurde im Neutronenkinetiksimulator mit 50 MW fest vorgegeben. Trotz der erhöhten Albedo des umgebenden Neutronenreflektors verlassen viele Neutronen am Außenrand den Reaktorkern; deswegen ist die Neutronendichte, Spaltungsaktivität und somit Wärmefreisetzungsrate in der Mitte des Reaktors am höchsten.

Das Kühlmittel strömt von unten nach oben durch den Reaktor – im mittleren Bild in Abbildung 82 sieht man, wie es auf seinem Weg von unten nach oben kontinuierlich Wärme von den aufgeheizten Brennstäben aufnimmt. In der oberen Hälfte stellen sich dementsprechend höhere Temperaturen ein, die auch die Temperatur im Brennstoff selbst beeinflussen. Eine Aufheizung des Brennstoffs senkt seine Reaktivität, weshalb der Ort des Maximums der Wärmefreisetzung unterhalb der Höhenmitte liegt.

Ein für die Verifikation besonders signifikantes Ergebnis der Simulation ist der vorhergesagte globale Neutronenmultiplikationsfaktor k_{eff} . In der Simulation von DYN3D mit seinem eigenen Strömungsmodul ergab sich ein Wert von 1,002131, während die gekoppelte

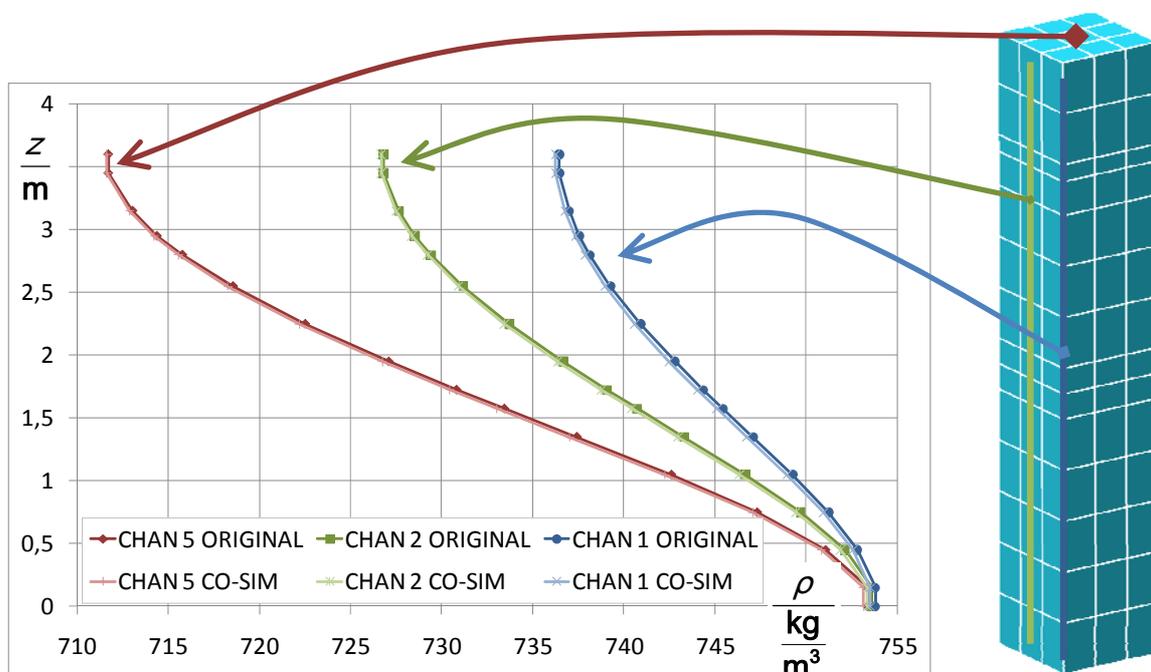


Abb. 83: Vertikale Kühlmitteltemperaturprofile in der Simulation des stationären Zustandes bei voller Reaktorleistung. Standard-DYN3D und gekoppelte Simulation.

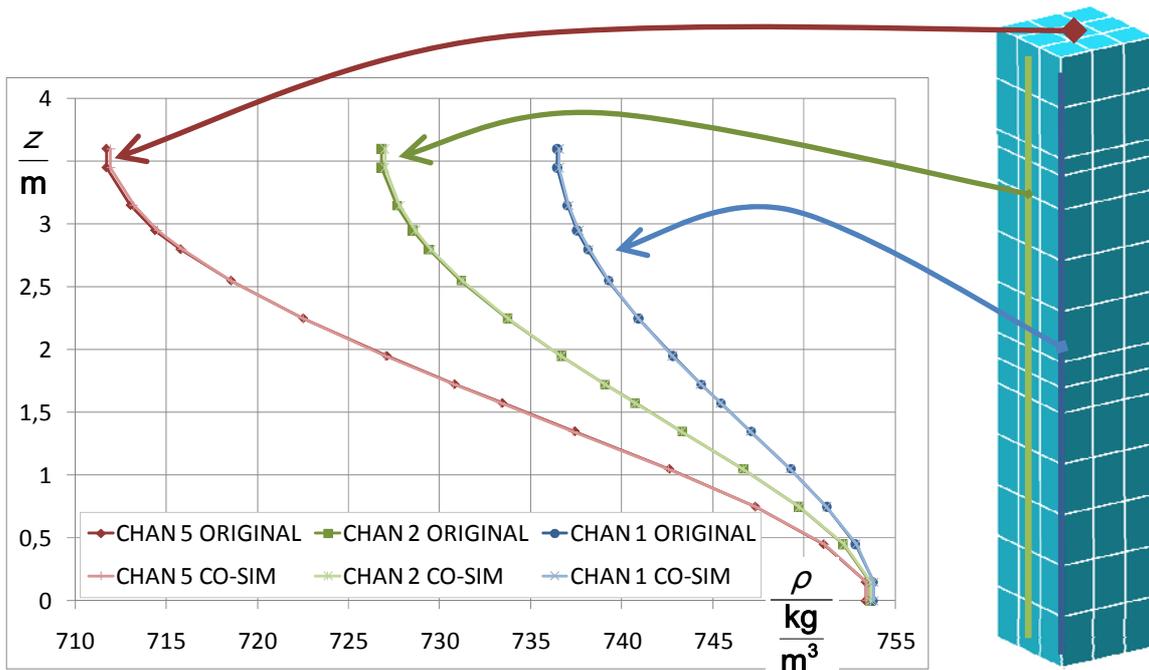


Abb. 84: Vertikale Kühlmitteltemperaturprofile in der Simulation des stationären Zustandes bei voller Reaktorleistung. Standard-DYN3D und gekoppelte Simulation, letztere mit einer um 0,1555 K reduzierten Kühlmittel-Einlaß-Temperatur.

Simulation einen um 9,8 pcm niedrigeren Wert von 1,002033 ergab. Dies kann nur daher rühren, dass ANSYS CFX andere Kühlmitteltemperaturen und -dichten vorhersagt als das DYN3D-Strömungsmodul.

Abbildung 83 zeigt die vertikalen Profile der vorhergesagten Kühlmitteldichte für die drei verschiedenen Orte, an denen ein Brennelement innerhalb der untersuchten Konfiguration liegen kann (Mitte, Kante, Ecke). Die Übereinstimmung zwischen reinen DYN3D-Rechnungen mit DYN3D-Strömungsmodul („ORIGINAL“, ausgefüllte Symbole, dunkle Farben) und gekoppelten Simulationen mit ANSYS CFX („CO-SIM“, Strichsymbole, hellere Farben) ist gut, aber nicht perfekt. Insbesondere fällt auf, dass sämtliche Dichtewerte tendenziell etwas zu niedrig sind.

Es ist bekannt, dass DYN3D und ANSYS CFX leicht unterschiedliche Formulierungen für die Stoffeigenschaften von Wasser verwenden: DYN3D verwendet „IAPWS IF-67“, während ANSYS CFX die neuere Ausgabe „IAPWS IF-97“ benutzt. Es wird vermutet, dass darin die sichtbaren Abweichungen in den Werten für die Dichte begründet liegen.

In weiteren gekoppelten Rechnungen wurde versucht, die Abweichungen in der Dichte durch eine geringfügige Veränderung der Kühlmitteltemperatur beim Eintritt in das Simulationsgebiet zu kompensieren. Die Kühlmitteltemperatur wurde so eingestellt, dass die Abweichung im globalen Multiplikationsfaktor k_{eff} verschwand. Es ergab sich eine Absenkung der Kühlmittel-Einlaß-Temperatur um 0,1555 K. Abbildung 84 zeigt die aus dieser Simulationsrechnung gewonnenen senkrechten Dichteprofile. Die Übereinstimmung ist größtenteils erheblich besser.

Mit diesen Ergebnissen wird es als erwiesen angesehen, dass der Ersatz des DYN3D-Strömungsmoduls durch ANSYS CFX gelungen ist und grundsätzlich erwartungsgemäß funktioniert.

4.2.8.2 Transienter Anfahrvorgang

Nach der erfolgreicher Verifikation der Kopplung für stationäre Zustände wurde ein erstes transientes Szenario betrachtet. Der Vorgang geht aus vom Zustand, in dem der Reaktor auf voller Betriebstemperatur ist, diese konstant hält, aber keine zusätzliche Leistung freisetzt („Hot Zero Power“). Der einzige Steuerstab in der hypothetischen Kernkonfiguration ist hierbei 1,5 m weit nach oben herausgezogen.

Während des Anfahrvorgangs wird der Steuerstab über einen Zeitraum von 20 s kontinuierlich ganz aus dem Reaktorkern herausgezogen. Nach 8,7 s, wenn das untere Ende des Steuerstabes erst bei zwei Drittel der Gesamthöhe ist, setzt plötzlich mit einem scharfen Impuls die Wärmeerzeugung in den Brennstäben ein. Der Impuls reicht etwa so hoch wie die später erreichte Dauerleistung im „hot full power“-Betrieb. Unmittelbar nach dem Impuls fällt die Leistung noch einmal auf $\frac{3}{4}$ dieses Endwertes ab, um sich ihm dann langsam wieder anzunähern. Abbildung 85 zeigt den zeitlichen Verlauf der integralen, momentanen Wärmeerzeugungsrate aus einer reinen DYN3D-Simulationsrechnung (Dies ist nicht die Rate, mit der Wärme aus den Brennstäben ins Kühlmittel übertritt!)

Zur Verifikation der Kopplung zwischen DYN3D und ANSYS CFX wurden wieder Vergleichsrechnungen zwischen DYN3D mit seinem eigenen Strömungsmodul und den gekoppelten Programmen ausgeführt. Da in der Kopplung mit ANSYS CFX nur eine *zeitexplizite* Fahrweise möglich war, wurde für den Vergleich auch die Einbindung des DYN3D-Strömungsmoduls *zeitexplizit* gemacht – d.h. das Strömungsmodul wurde nur einmal je Zeitschritt aufgerufen, genauso wie ANSYS CFX nur einmal je Zeitschritt das eingebundene DYN3D aufruft.

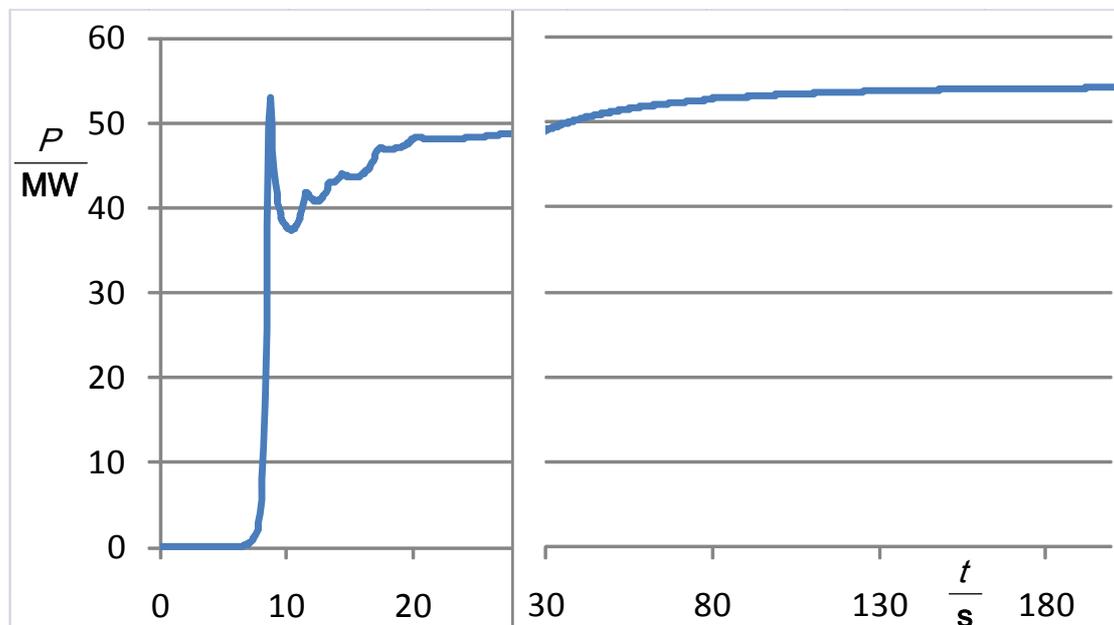


Abb. 85: Zeitlicher Verlauf der integralen, momentanen Wärmeerzeugungsrate in den Brennstäben während des untersuchten Anfahrvorgangs. Reine DYN3D-Simulation.

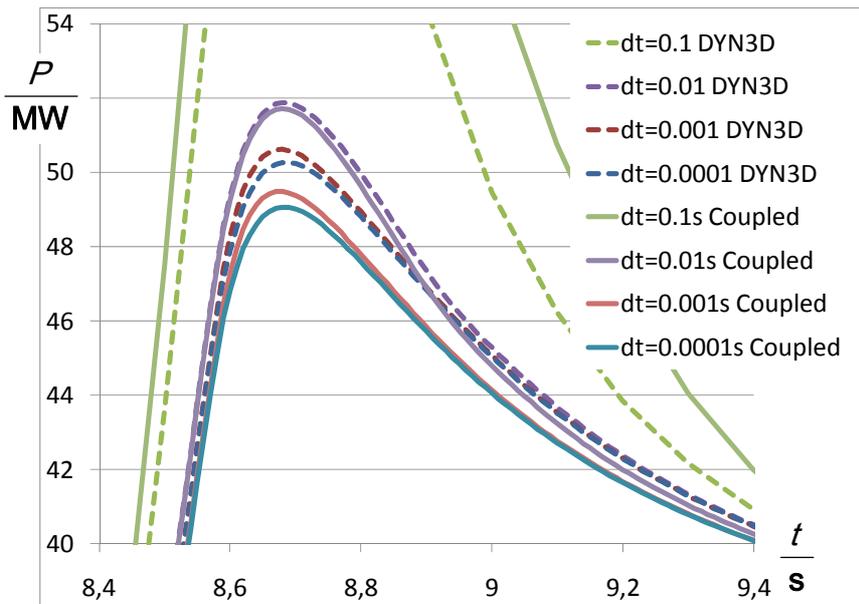


Abb. 86: Zeitlicher Verlauf der integralen, momentanen Wärmeerzeugungsrates in den Brennstäben während des untersuchten Anfahrvorgangs. Reine DYN3D- sowie gekoppelte Simulationen, jeweils bei vier verschiedenen Zeitschrittweiten..

Für den Vergleich der Simulationsergebnisse wird im folgenden nur der Gipfel der ersten Leistungsspitze in der Auftragung der momentanen, integralen Wärmeerzeugungsrates über der Zeit betrachtet. Wegen der *zeitexpliziten* Ankopplung der verschiedenen Strömungsvorhersagen an bzw. innerhalb von DYN3D musste zunächst eine von der Zeitschrittweite unabhängige Lösung gesucht werden. Für jede Alternative wurden vier verschiedene Zeitschrittweiten eingesetzt, die sich jeweils um den Faktor 10 voneinander unterscheiden.

Abbildung 86 zeigt die Kurvenverläufe der momentanen, integralen Wärmeerzeugungsrates über der Zeit aus Simulationsrechnungen mit DYN3D mit seinem eigenen Strömungsmodul (gestrichelte Kurven) sowie mit den miteinander gekoppelten Programmen DYN3D und ANSYS CFX (ausgezogene Kurven). Die Unterschiede zwischen den Ergebnissen für die zwei kleinsten Zeitschrittweiten unterscheiden sich für jede Alternative jeweils nur wenig voneinander – die zeitschrittweitenunabhängige Lösung ist also jeweils näherungsweise erreicht. Die Lösung aus DYN3D mit seinem eigenen Strömungslöser weicht aber markant von derjenigen für die Kopplung von DYN3D mit ANSYS CFX ab!

4.2.9 Detailvergleich der Strömungslöser

Offensichtlich verhält sich also ANSYS CFX in der Anbindung an DYN3D bei dieser transienten Simulation deutlich anders als der DYN3D-eigene Strömungslöser. Eine Erklärung der Unterschiede aus den simulierten Kurvenverläufen für diesen langsamen, transienten Anfahrvorgang war aber nicht möglich.

Zum weiteren Vergleich der Strömungslöser in einem transienten Vorgang wurde ein als Gedankenexperiment leicht nachvollziehbarer Vorgang untersucht: Ausgehend vom stationären Zustand wurde direkt am Beginn der transienten Rechnung eine sprunghafte Änderung der Zulauftemperatur auf einen um 5 K niedrigeren Wert eingeführt. In beiden

Simulation (DYN3D mit seinem eigenen Strömungslöser bzw. gekoppelt mit ANSYS CFX) wurde als Einlassrandbedingung der Massenstrom vorgegeben. Wegen der temperaturabhängigen und ergo nach dem Temperatursprung deutlich höheren Dichte musste sich also die Einlassgeschwindigkeit schlagartig verringern.

Da das Kühlmittel als weitgehend inkompressibel angesehen werden kann, muss die Verringerung der Geschwindigkeit sich schlagartig durch die gesamte strömende Flüssigkeitssäule hindurch fortsetzen. Binnen einer vernachlässigbar kurzen Zeit sollte also überall im Reaktorkern etwa die gleiche, nun gegenüber dem stationären Zustand geringere Strömungsgeschwindigkeit herrschen. (Lediglich dort, wo Wasser unterschiedlicher Temperaturen sich mischt, kann lokal ein minimaler Volumenschwund auftreten, so dass über der Mischungszone die Geschwindigkeiten vorübergehend einheitlich etwas kleiner sein können als darunter.)

Im beschriebenen Vergleich der Strömungslöser galt es, sicherheitshalber jeden möglichen Unterschied auf Grund unterschiedlicher räumlicher Diskretisierung auszuschließen. Deswegen wurden für diese Vergleichsrechnung neue Diskretisationsgitter in DYN3D und ANSYS CFX eingesetzt, die es erlaubten, in vertikaler Richtung identisch geteilte finite Bilanzkontrollvolumina in beiden Strömungslösern zu verwenden. Die Gesamthöhe des Reaktorkerns wurde hierbei, ähnlich der früheren DYN3D-Nodalisierung, in 14 ungleich hohe Schritte geteilt.

Die Ergebnisse des Vergleichs sind in Abbildung 87 zu sehen. Dargestellt ist auf der Ordinate die Höhenkoordinate und auf der Abszisse die axiale (vertikale) Strömungsgeschwindigkeit. Die Rechnung mit dem DYN3D-Strömungslöser zeigt eine erheblich größere Variationsbreite der vorhergesagten Strömungsgeschwindigkeiten. Der Kurvenverlauf sieht aus, als ob eine in vertikaler Richtung unveränderliche Massenflussdichte angenommen und daraus in jedem Punkt mit der lokalen (temperaturabhängigen) Dichte die Geschwindigkeit berechnet würde.

Auch ANSYS CFX sagt keine über die Höhe konstante axiale (vertikale)

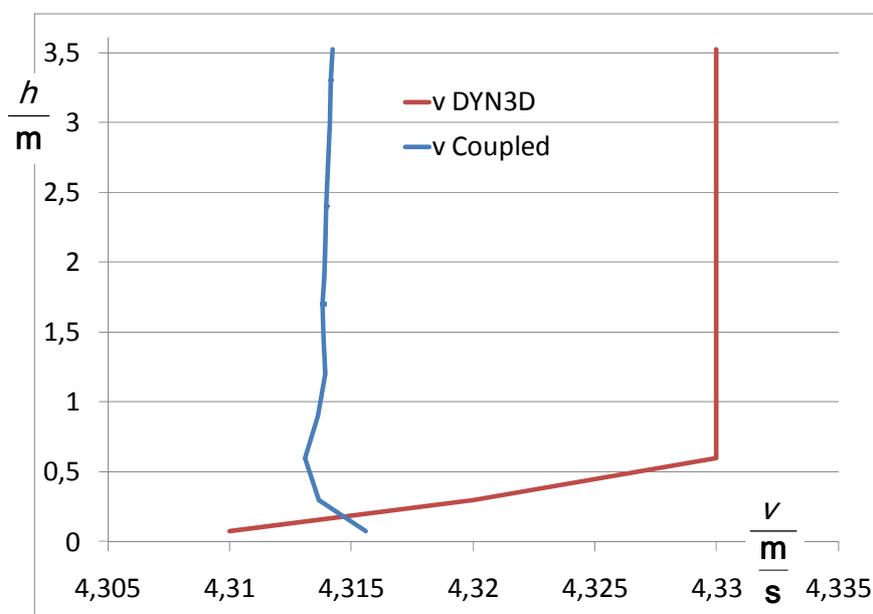


Abb. 87: Vergleich der Strömungslöser nach einem Sprung der Einlasstemperatur auf einen um 5 K niedrigeren Wert. Ergebnisse nach Berechnung genau eines Zeitschrittes.

Strömungsgeschwindigkeit voraus. Die Variationsbreite ist aber erheblich kleiner, und der Kurvenverlauf erscheint plausibler: Der Abfall der Geschwindigkeit im zweiten und dritten Bilanzkontrollvolumen von unten kann tatsächlich Folge einer voranschreitenden Vermischung von kälterem mit wärmerem Wasser und des damit verbundenen Volumenschwundes sein. Oberhalb dieser Temperaturmischungszone ist die Geschwindigkeit nahezu konstant über die Höhe des Reaktorkerns.

4.2.10 Zusammenfassung

Im hier berichteten Projektteil wurde im Rahmen einer prototypischen Untersuchung das eindimensionale Thermohydraulik-Modul des Kernreaktorsimulators DYN3D durch eine Kopplung mit dem kommerziellen Programm ANSYS CFX für die dreidimensionale numerische Strömungssimulation (CFD) ersetzt. Dabei wurde in User-Fortran-Routinen für ANSYS CFX eine Übertragung von dreidimensionalen Volumenfelddaten zwischen Diskretisierungsnetzen sehr unterschiedlicher räumlicher Auflösung implementiert.

Die Implementierung ist bisher auf einphasige Betriebszustände beschränkt – eine Erweiterung sollte technisch einfach sein, weil die Implementierung das Hinzufügen neuer Größen für den Austausch zwischen den gekoppelten Programmen bei minimalst möglichen Eingriffen in die Fortran-Quelltexte erlaubt. Für die Beschreibung mehrphasiger Zustände müssen allerdings noch Modelle gefunden werden, die die Mehrphasenströmung in porösen Körpern beschreiben und beim unterkühlten Wandsieden vorhersagen, wie sich der übergehende Wärmestrom auf Verdampfung und konvektive Erwärmung aufteilt. Ansätze hierfür können aus der konventionellen eindimensionalen Thermohydraulik- oder Unterkanal-Simulation entliehen werden, ohne dabei den Vorteil einer dreidimensionalen CFD-Simulation der Kühlmittelströmung im Reaktorkern aufzugeben.

Die Kopplung wurde anhand einer stationären und einer transienten Simulation im Vergleich mit dem ursprünglichen DYN3D (mit seinem eigenen internen Thermohydraulik-Modul) verifiziert. Dafür wurde die Strömungssimulation in ANSYS CFX entsprechend eingestellt, um die Eigenschaften des DYN3D-Strömungslösers nachzubilden. Die stationäre Verifikation zeigt minimale Abweichungen, die mit größter Wahrscheinlichkeit von unterschiedlichen verwendeten Stoffdatenbibliotheken (verschiedene Versionen von IAPWS) verursacht werden.

Die transiente Verifikation zeigt schwerer interpretierbare Unterschiede zwischen den gekoppelten Programmen und dem ursprünglichen DYN3D mit seinem eigenen Thermohydraulik-Modul. Ein detaillierterer Vergleich der transienten Strömungslöser hat markante Unterschiede aufgezeigt, die noch einer Stellungnahme von Seiten der Entwickler von DYN3D bedürfen.

4.2.11 Ausblick

Die Verifikationsrechnungen wurden mit einem minimalistischen, artifiziellen Reaktorkern ausgeführt. Weitere Verifikations- und Validierungsrechnungen in realistischen Reaktorkerngeometrien müssen folgen. Dafür ist bereits ein automatischer Netzgenerator programmiert worden, der DYN3D-Eingabedateien lesen und daraus Netzdateien für die Repräsentation der DYN3D-Nodalisierung als Netz in ANSYS CFX generieren kann. Dieser wird noch dahingehend erweitert werden, dass er auch eine genaue Umhüllung des für die numerische Strömungssimulation zu vernetzenden Gesamtvolumens generiert.

Mit diesen Werkzeugen wird es ohne weiteres möglich sein, zunächst beispielhaft verschiedene Störfallszenarien zu simulieren, wie z.B. einen Stabauswurf oder transiente Borvermischungs- und -verdünnungsvorgänge. Letztere profitieren besonders von der Fähigkeit der numerischen Strömungssimulation, die transiente, dreidimensionale Ausbreitung von Kühlmittelströmen mit unterschiedlicher Borkonzentration im „Downcomer“ vorherzusagen.

Für die transienten Simulationen sollte baldmöglichst eine semi-implizite Kopplung mit Iterationen zwischen Neutronenkinetik und Thermohydraulik (numerischer Strömungssimulation) innerhalb eines Zeitschrittes implementiert werden. Dies wird in der einfachsten Form auf Seiten der User-Fortran-Routinen für ANSYS CFX höchstens minimalste Eingriffe erfordern. Weitergehende Eingriffe werden allerdings nötig, wenn eine automatische Konvergenzerkennung und -auswertung zum Einsatz kommen soll.

Um den vollen Wert der Kopplung nutzbar zu machen, muss diese auf mehrphasige Strömungszustände mit unterkühltem Blasensieden in allen relevanten Siederegimen erweitert werden. Wie in der Zusammenfassung oben schon erwähnt, bedarf es hierfür allerdings noch weiterführender Arbeiten zur Modellbildung (bzw. Recherche und Modellauswahl). Zumindest für die Frage nach der Aufteilung des übergehenden Wärmestroms in Verdampfung und konvektive Erwärmung sollte man auf existierende Modelle in DYN3D zurückgreifen können. Hinsichtlich der Beschreibung von Blasenströmungen in porösen Körpern sollte zunächst geklärt werden, welche Detailtiefe im Modell tatsächlich benötigt wird.

5 Bereitstellung der CFD-Module für die Projekt-Verbundpartner

Im Berichtszeitraum wurden in ca. jährlichem Abstand drei Versionen von ANSYS CFX (10.0, 11.0 und 12.0) fertig gestellt und den Projektpartnern zur Verfügung gestellt. Mit der Version 12.0 konnte auch das zusammen mit dem FZ Rossendorf entwickelte inhomogene MUSIG-Modell und das RPI-Wandsiedemodell mit dazugehörigen graphischen Benutzerschnittstellen allgemein für Modellvalidierungen und Modellweiterentwicklung zugänglich gemacht werden. Interessierten Projektpartnern (FZD, GRS, Universität Stuttgart) wurden darüber hinaus in regelmäßigen Abständen Vorabversionen der Software (Preview-Versionen von ANSYS CFX) zur Verfügung gestellt, um bereits in einem frühen Entwicklungsstadium eigene Tests und Anpassungen an eigenen Modellentwicklungen vornehmen zu können sowie um neue Möglichkeiten der Software bereits frühzeitig für eigene Arbeiten und Untersuchungen nutzen zu können. Darüber hinaus wurden den Projektpartnern im CFD-Verbund Reaktorsicherheit User FORTRAN-Module für die Berechnung der Zwischenphasenkräfte und entsprechende Dokumentationen, Forschungsberichte und Konfigurationen für die ausgeführten Testfall-Simulationen zur Verfügung gestellt.

Insbesondere die beiden Arbeitspaketen zur Code-Kopplung von ANSYS CFX \Leftrightarrow ATHLET und ANSYS CFX \Leftrightarrow DYN3D verlangten nach einer sehr intensiven Zusammenarbeit mit den jeweiligen Projektpartnern bei der GRS und am FZD, da für eine erfolgreiche Entwicklung der jeweiligen Kopplungsschnittstellen auch Code-Modifikationen und Tests an den Institutionen der Projektpartner erforderlich waren. Zu diesem Zweck sind den Projektpartner jeweils bereits in frühen Stadien der Entwicklung entsprechende Prototypen der Kopplungsschnittstellen zusammen mit entsprechender Dokumentation und Testbeispielen zur Verfügung gestellt worden, um diese Entwicklungen auf Partnerseite zu ermöglichen und bestmöglich zu unterstützen.

Darüber hinaus ist ANSYS CFX Gegenstand von permanenten Bemühungen, die Robustheit der Mehrphasenmodelle und der Modelle für Strömungen mit freier Oberfläche auf der Ebene der numerischen Lösungsalgorithmen zu verbessern. Die an den numerischen Algorithmen vorgenommenen Verbesserungen werden unmittelbar für die im Forschungsverbund untersuchten Mehrphasenströmungen wirksam und äußern sich für den Benutzer z.B. in größeren Zeitschritten bei transienten Mehrphasenströmungen bei unverändert gegebener Konvergenz der Lösung. Die Stabilität und Robustheit von Strömungen mit freier Oberfläche konnte im Berichtszeitraum für viele Anwendungen verbessert werden, insbesondere durch die Verfügbarkeit des gekoppelten Lösungsalgorithmus für das System aus Druck, Geschwindigkeit und volumetrischem Gehalt beider Phasen auch für inhomogene Volume-of-Fluid-Verfahren (VOF) für Strömungen mit freier Oberfläche.

6 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Das Forschungsvorhaben ist integraler Bestandteil des unter Führung der GRS gebildeten CFD-Verbunds Reaktorsicherheit (<http://domino.grs.de/cfd/cfd.nsf>), an dem die GRS,

ANSYS Germany, das FZ Dresden-Rossendorf und das FZ Karlsruhe, die FH Görlitz-Zittau, die TU München und die Universität Stuttgart beteiligt sind. Die regelmäßig stattfindenden Arbeitstreffen des CFD-Verbunds Reaktorsicherheit haben ein breites nationales und internationales Interesse gefunden und werden von Vertretern des TÜV Süd, TÜV Nord, von AREVA, vom NRG in den Niederlanden, dem IRSN in Frankreich sowie von Vattenfall in Norwegen mit Beobachterstatus besucht. Darüber hinaus fand der CFD-Verbund Reaktorsicherheit Beachtung und großes Interesse bei den Projektpartnern des EU-Forschungsvorhabens NURESIM²⁷ (<http://www.nuresim.com>) / NURISP (<http://www.nurisp.eu>) und dem skandinavischen Forschungsverbund NORTHNET²⁸.

Die Arbeiten in dem vorliegenden Forschungsvorhaben wurden in enger Zusammenarbeit mit den folgenden Forschungsvorhaben bei der GRS und am FZ Rossendorf ausgeführt:

- 1501329: TOPFLOW-Experimente, Modellentwicklung und Validierung von CFD-Codes für Wasser-Dampf-Strömungen mit Phasenübergang, FZ Dresden-Rossendorf
- 1501348: Entwicklung und Validierung von Modellen für Blasenkoaleszenz und – zerfall, FZ Dresden-Rossendorf
- 1501358: Entwicklung einer Version des Reaktordynamikcodes DYN3D für Hochtemperaturreaktoren, FZ Dresden-Rossendorf
- RS1173: Validierung des Rechenprogrammsystems ATHLET/ATHLET-CD, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH
- RS 1162: Weiterentwicklung ATHLET / ATHLET-CD, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH

7 Zusammenfassung

Ein Schwerpunkt der Arbeiten im vorliegenden Forschungsvorhaben bestand zum Einen in der Untersuchung von für die Kernreaktorsicherheit relevanten Zweiphasenströmungen, der Modellbildung und der Modellvalidierung unter Verwendung von sowohl räumlich als auch zeitlich hoch aufgelösten experimentellen Daten und in enger Kooperation mit den Experimentalisten und zum Anderen in der prototypischen Implementierung von Kopplungsschnittstellen zwischen ANSYS CFX und ATHLET sowie zwischen ANSYS CFX und DYN3D.

Die Arbeiten im Berichtszeitraum im Hinblick auf eine fortschreitende Qualifizierung von ANSYS CFX und eine Weiterentwicklung und Validierung der implementierten Mehrphasenmodelle konzentrierten sich auf ausgeprägt dreidimensionale Luft-Wasser-Strömungen sowie auf Wasser-Wasserdampf-Strömungen bei hohem Druck und hoher Temperatur unter Berücksichtigung von Phasenübergangsprozessen (Kondensation und Verdampfung). Im Rahmen dieser Arbeiten konnten die Mehrphasenmodelle für monodisperse und polydisperse Blasenströmungen und Pfropfenströmungen anhand

²⁷ NURESIM – European Platform for NUclear REactor SIMulations

²⁸ NORTHNET – A Network for Reactor Thermohydraulics and Nuclear Reactor Safety

detaillierter Versuche an der TOPFLOW-Versuchsanlage umfassend validiert werden. In weiteren Arbeiten wurden Wasser-Wasserdampf-Zustandsgleichungen nach IAPWS-IF97-Industriestandard, das RPI-Wandsiedemodell und eine Erweiterung des homogenen und inhomogenen MUSIG-Modells für Strömungen mit starken Phasenwechselwirkungen und Phasenübergangsprozessen in ANSYS CFX implementiert und anhand geeigneter Testfälle validiert. Mit den nun zur Verfügung stehenden Modellen wird das Anwendungsspektrum von ANSYS CFX für viele typische Anwendungsfälle in der Reaktorsicherheitsforschung erweitert und die Benutzerfreundlichkeit der Software weiterhin entscheidend verbessert.

Ein weiterer Schwerpunkt im Rahmen des vorliegenden Forschungsvorhabens bestand in der Kopplung von Simulationstechniken. Im Rahmen des vorliegenden Forschungsvorhabens wurde ein erster Prototyp einer Kopplung von ANSYS CFX mit dem eindimensionalen Thermohydraulik-Code ATHLET der GRS implementiert. Die Kopplung wurde zunächst wegen des für diesen Arbeitspunkt zur Verfügung stehenden Zeitrahmens auf einphasige Strömungszustände beschränkt, um zunächst die Ausführbarkeit und numerischen Eigenschaften eines derart gekoppelten Programmsystems zu untersuchen. Die entwickelte Programmschnittstelle weist jedoch keine Einschränkungen für eine spätere Erweiterung der Kopplung auf mehrphasige System auf. Anhand einfacher Testfälle wurde sowohl die explizite als auch semi-implizite Kopplung beider Programmsysteme untersucht und die implementierte Kopplungsschnittstelle verifiziert. Die entwickelte Kopplungsschnittstelle wurde dem Projektpartner GRS für eigene Weiterentwicklungen und Validierungsuntersuchungen zur Verfügung gestellt.

Ein weiterer Anwendungsfall von Kopplung bestehender Simulationstechniken in der Reaktortechnik, der zunehmend an Interesse gewinnt, besteht in der Kopplung von Neutronenkinetik und CFD-Simulation der Kühlmittelströmung im Reaktorkern. Exemplarisch und in einer Prototyp-Implementation wurde ANSYS CFX mit dem Neutronenkinetik-Code DYN3D des Forschungszentrums Dresden-Rossendorf (FZD) gekoppelt und auf einen stationären und einen transienten Verifikationstestfall angewendet. Spätere Anwendungsszenarios einer derartigen Code-Kopplung beziehen sich z.B. auf transiente Borvermischungs-Störfälle in Reaktorgeometrien, die eine dreidimensionale Quervermischung zwischen Kühlmittel-Unterkänen im Reaktorkern zulassen. Für eine erfolgreiche Kopplung von ANSYS CFX und DYN3D mussten umfangreiche Algorithmus-Entwicklungsarbeiten für die konservative Interpolation und Restriktion von Austauschvariablen zwischen dem fein aufgelösten Gitternetz einer CFD-Simulation und der eher grob aufgelösten Nodalisierung einer Neutronenkinetik-Simulation geleistet werden. Die Ergebnisse dieser Programmschnittstellenentwicklung sind in einen gekoppelten ANSYS CFX-DYN3D-Prototypen eingeflossen, der dem Projektpartner FZD nunmehr für weiterführende Untersuchungen zur Verfügung steht. Weiterführende Programmentwicklungsarbeiten sind jedoch notwendig, um den aussichtsreichen Weg einer derartigen Programmkopplung auf realistische Störfallszenarien anwenden zu können.

Zusammenfassend kann eingeschätzt werden, dass die Zweiphasenmodelle im CFD-Simulationsverfahren ANSYS CFX durch die in enger Zusammenarbeit mit experimentell arbeitenden Forschungsgruppen ausgeführten Modellentwicklungen und die Modellvalidierung entscheidend in ihrer Genauigkeit, Robustheit und Vorhersagekraft für Anwendungen der Reaktorsicherheitsforschung verbessert werden konnten. Darüber hinaus sind die resultierenden Mehrphasenströmungsmodelle auf komplexere Anwendungsfälle und andere Anwendungsgebiete übertragbar. Die weiteren Entwicklungen werden sich auf Strömungen mit Phasenübergängen wie z.B. Wandsiedeprozessen in Reaktor-

Brennstabbündeln richten. Ein weiterer Schwerpunkt wird in der Weiterentwicklung und Validierung von Turbulenzmodellen für Mehrphasenströmungen insbesondere für Strömungen mit ausgeprägt dreidimensionalem Charakter gesehen. Und nicht zuletzt bedürfen die Ansätze zur Kopplung von CFD-Verfahren mit eindimensionalen Systemcodes und Neutronenkinetikcodes einer konsequenten Weiterverfolgung.

8 Danksagung

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben der ANSYS Germany GmbH wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) unter dem Förderkennzeichen 150 1328 gefördert. Für die erwiesene finanzielle und inhaltliche Unterstützung dieses Forschungsvorhabens bedanken wir uns hiermit beim BMWi und bei der GRS Forschungsbetreuung.

Wir möchten uns des Weiteren ausdrücklich für die gute Zusammenarbeit mit unseren Forschungskooperationspartnern bei der GRS und beim Forschungszentrum Dresden-Rossendorf, Institut für Sicherheitsforschung bedanken. Unser Dank gilt hierbei insbesondere:

- Prof. Dr. F.P. Weiß, Dr. D. Lucas, Dr. E. Krepper, Dr. Th. Höhne, Dr. M. Beyer, Dr. Ch. Vallee, S. al Issa, Dr. M. Schmittke sowie allen Mitarbeitern des TOPFLOW-Versuchsstand-Teams für die vielen tiefgreifenden und weiterführenden fachlichen Diskussionen, die Bereitstellung der detaillierten TOPFLOW-Versuchsdaten für die CFD-Modell-Validierung, den intensiven Meinungs- und Erfahrungsaustausch sowie den aktiven Anteil des FZD an der Weiterentwicklung der Mehrphasenmodellierung in der ANSYS CFD-Software.
- G. Lerchl und Dr. A. Papukchiev für ihre intensive Zusammenarbeit mit ANSYS Germany bei der Entwicklung der Kopplungsschnittstelle von ANSYS CFX und ATHLET sowie bei deren Erprobung und Validierung. Unser besonderer Dank gilt hier Herrn G. Lerchl für die Anpassung von ATHLET an die Kopplungsrahmenbedingungen innerhalb der ANSYS CFX-Software.
- Dr. U. Rohde und Dr. S. Kliem vom FZ Dresden-Rossendorf für die umfassende fachliche Unterstützung, die detaillierten Diskussionen, den intensiven Meinungs- und Erfahrungsaustausch, die umfangreichen am FZD ausgeführten Softwaretests und für die programmtechnischen Veränderungen und Anpassungen von DYN3D, die maßgeblich zum Erfolg der Implementierung einer ersten prototypischen Kopplungsschnittstelle von ANSYS CFX und des Neutronenkinetik-Codes des FZD DYN3D beigetragen haben.

Allen hier nicht explizit namentlich erwähnten Forschungs- und Kooperationspartnern des von der GRS koordinierten CFD-Verbunds Kernreaktorsicherheitsforschung danken wir ausdrücklich für die langjährige, intensive und erfolgreiche Zusammenarbeit bei der Weiterentwicklung der physikalischen Modellierung und der CFD-Verfahren zur Berechnung 3-dimensionaler Strömungen in der Reaktortechnik und Kernreaktorsicherheitsforschung.

9 Veröffentlichungen

1. **Frank Th., Zwart P.-J., Krepper E., Prasser H.-M., Lucas D. 2006:** "*Validation of CFD models for mono- and polydisperse air-water two-phase flows in pipes*", CFD4NRS Workshop on Benchmarking of CFD Codes for Application to Nuclear Reactor Safety, OECD/NEA International & International Atomic Energy Agency (IAEA) Workshop, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), Garching, Germany, 5.-7. September 2006, pp. 1-19. Selected for publication in a Special Issue of Journal Nuclear Engineering and Design.
2. **Frank Th. 2006:** "*Multiphase Flow Modeling & Simulation with Application to Water-Vapor Flows Through Fuel Rod Bundles of Nuclear Reactors*", Workshop on Modeling and Measurements of Two-Phase Flows and Heat Transfer in Nuclear Fuel Assemblies, Division of Nuclear Reactor Technology, School of Engineering Sciences, KTH, Stockholm, Sweden, 10-11 October 2006.
3. **Frank Th. 2006:** "*CFD modeling and simulation for nuclear reactor safety analysis and nuclear engineering applications using ANSYS CFX*", INSPECTA Symposium "Kärnteknik 2006: Mekaniska komponenter i kärntekniska anläggningar; Modernisering och utbyggnad av Kärnkraft i Norden", Stockholm, Sweden, November 29-30, 2006.
4. **Frank Th. 2007:** "*Simulation of Flashing and Steam Condensation in Subcooled Liquid using ANSYS CFX*", 5th Joint FZR & ANSYS Workshop "Multiphase Flows: Simulation, Experiment and Application", Dresden, Germany, April 26-27, 2007.
5. **Frank Th., Prasser H.-M., Beyer M., Issa S. Al. 2007:** "*Gas-Liquid Flow around an Obstacle in a Vertical Pipe - CFD Simulation & Comparison to Experimental Data*", 6th International Conference on Multiphase Flow, ICMF 2007, Leipzig, Germany, July 9-13, 2007, Paper No. 135, pp. 1-14. ISBN: 978-3-86010-913-7
6. **Krepper E., Beyer M., Frank Th., Lucas D., Prasser H.-M. 2007:** "*Application of a Population Balance Approach for Polydispersed Bubbly Flows*", 6th International Conference on Multiphase Flows, ICMF'2007, Leipzig, Germany, July 9-13, 2007, Paper No. 378, pp. 1-8. ISBN: 978-3-86010-913-7
7. **Krepper E., Frank Th., Lucas D., Prasser H.-M., Zwart P.J. 2007 :** "*Inhomogeneous MUSIG Model - A Population Balance Approach For Polydisperse Bubbly Flows*", The 12th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-12), Sheraton Station Square, Pittsburgh, Pennsylvania, U.S.A. September 30-October 4, 2007. Paper No. 60, pp. 1-19.
8. **Prasser H.-M., Beyer M., Frank Th., Issa S. Al, Carl H., Pietruske H., Schütz P. 2007:** "*Gas-liquid flow around an obstacle in a vertical pipe*", Submitted to J. Nucl. Eng. & Design (NED), accepted for publication. Vol. xx, pp. 1-25, 2007.

9. **Waata C.L., Frank Th. 2007:** *"Coupling of ANSYS CFX with ATHLET - Status Report"*, 12th CFD Network Meeting on Nuclear Reactor Safety, GRS, Garching, 17.-18. September 2007, pp. 1-38.
10. **Frank Th., Adlakha M., Lifante C., Menter F.: 2008** *"Simulation of thermal stratification in T-junctions using scale-resolving turbulence models in ANSYS CFX"*, BWR-OG Workshop on Thermal Stratification, Älvkarleby Laboratory, Vattenfall Research & Development AB, Sweden, June 3-4, 2008.
11. **Frank Th., Adlakha M., Lifante C., Prasser H.-M., Menter F. 2008:** *"Simulation of Turbulent and Thermal Mixing in T-Junctions using URANS and Scale-resolving Turbulence Models in ANSYS CFX"*, XCFD4NRS - Experiments and CFD Codes Application to Nuclear Reactor Safety, OECD/NEA & International Atomic Energy Agency (IAEA) Workshop, 10.-12. September 2008, Grenoble, France, pp. 23.
12. **Lifante C., Frank Th., Burns A.D. 2009:** *"Extension of the Multiple-Size Group (MUSIG) Model to Phase Change Effects"* .7th Joint FZD & ANSYS Workshop "Multiphase Flows: Simulation, Experiment and Application" . Dresden, Germany, 27-28 May 2009
13. **Lifante C., Frank Th., Burns A.D. 2009:** *"Wall boiling modeling and model validation in ANSYS CFD towards the prediction of wall boiling in nuclear fuel assemblies"*, NuFAME-2009 - Nuclear Fuel Assembly Modeling and Experiments, KTH, Stockholm, Sweden, July 9-10, 2009
14. **Frank Th., Lifante C., Waata C.L., J. Schütze, 2009:** *Entwicklung von CFD-Software zur Simulation mehrdimensionaler Strömungen in Reaktor-kühlsystemen. Abschlussbericht.ANSYS / TR-09-02.*
15. **Lucas D, Beyer M, Frank Th., Zwart P., Burns A.D. 2009:** *"Condensation of Steam Bubbles Injected into Sub-Cooled Water"*, The 13th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-13), Kanazawa City, Ishikawa Prefecture, Japan, September 27-October 2, 2009, pp. 1-13.
16. **Lifante C., Frank Th., Burns A.D. 2009:** *"Prediction of Polydisperse Steam Bubble Condensation in Subcooled Water using the Inhomogeneous MUSIG Model"*, ANSYS Conference & 27. CADFEM Users Meeting, Congress Center Leipzig (CCL), 18.-20. November 2009, pp. 1-30.
17. **Lifante C., Frank Th., Burns A.D., Lucas D., Krepper E. 2010:** *Prediction of Polydisperse Steam Bubble Condensation in Sub-Cooled Water using the Inhomogeneous MUSIG Model.* 7th International Conference on Multiphase Flow, ICMF 2010, Tampa, FL, 30,05,2010-04,06,2010
18. **Lifante C., Frank Th., Burns A.D., Lucas D., Krepper E. 2010:** *Prediction of Polydisperse Steam Bubble Condensation in Sub-Cooled Water using the Inhomogeneous MUSIG Model*, DECHEMA ProcessNet-Fachausschusssitzung CFD und Wärme- und Stoffübertragung, 8.3.-10.3.2010, Hamburg.

10 Literaturnachweis / Referenzen

- ANSYS Inc. 2009.** *ANSYS 12.0 Users Manual*. Canonsburg, USA : ANSYS Inc., 2009.
- Antal, S.P., Lahey, R.T. und Flaherty, J.E. 1991.** *Analysis of phase distribution in fully developed laminar bubbly two-phase flow*. 1991, Int. J. Multiphase Flow, Bd. 7, S. 635-652.
- Aungier, R.H. 1995.** *A Fast, Accurate Real Gas Equation of State for Fluid Dynamic Analysis Applications*. 1995, Journal of Fluids Engineering, Bd. 117, S. 277-281.
- Bartolomej, G.G. 1982.** *An experimental investigation of true volumetric vapour content with subcooled boiling in tubes*. 3, 1982, Thermal Engineering, Bd. 29.
- Bartolomej, G.G. und Chanturiya, V.M. 1967.** *Experimental Study of true void fraction when boiling subcooled water in vertical tubes*. 1967, Thermal Engineering, Bd. 14, S. 123-128.
- Behzadi, A., Issa, R.I. und Beyahdi, A. 2001.** New Orleans, USA : s.n., 2001. Internation Conference in Multiphase Flow. S. 1-12.
- Burns, A., et al. 2004.** *Double Averaged Turbulence Modeling in Eulerian Multi-phase Flows*. Dresden, Germany : s.n., 2004, FZR and ANSYS Germany joined Workshop on Multiphase Flows, S. 28-30.
- Carrica, P.M., Drew, D.A. und Lahey, R.T. 1999.** *A polydisperse model for bubbly two-phase flow around a surface ship*. 1999, Int. J. Multiphase Flow, Bd. 25, S. 257-305.
- Clift, R., Grace, J. R. und Weber, M.E. 1978.** *Bubbles, Drops and Particles*. New York, USA : Academic Press, 1978.
- Cole, R. 1960.** *A photographic study of pool boiling in the region of CHF*. 1960, AIChEJ, Bd. 6, S. 533-542.
- Drew, D.A. und Passman, S. L. 1998.** *Theory of Multicomponent flow*. New York : Springer Verlag, Applied Mathematical Sciences, 1998.
- Edwards, A. R. and O'Brien, T. P. 1970.** *Studies of phenomena connected with the depressurization of water reactors*. 1970, J. Br. Nucl. Energy Soc., Vol. 9, pp. 125-135.
- Egorov, Y. und Menter, F. 2004.** *Experimental implementation of the RPI boiling model in CFX-5.6*. Otterfing : Technical Report ANSYS / TR-04-10, 2004.
- Frank, Th. 2003.** *A Review on Advanced Eulerian Multiphase Flow Modelling for Gas-Liquid Flows. Research Report in the GRS-BMWA Project: Development of CFD software for the simulation of multidimensional flows in the reactor cooling system*. Otterfing : AEA Technology, 2003.
- Frank, Th. 2006.** *Entwicklung von CFD-Software zur Simulation mehrdimensionaler Strömungen im Reaktorkühlsystem*. Otterfing : ANSYS TR-06-01, 2006.
- Frank, Th. 2002.** *Parallele Algorithmen für die numerische Simulation dreidimensionaler, disperser Mehrphasenströmungen un deren Anwendung in der Verfahrenstechnik*. Aachen : Shaker Verlag, 2002.

- Frank, Th. 2005.** *Progres in the numerical simulation (CFD) of 3-dimensional gas-liquid multiphase flows.* Wiesbaden: NAFEMS CFD-Seminar "Simulation komplexer Strömungsvorgänge - Anwendungen und Entwicklungstendenzen, 2005, S. 1-18.
- Frank, Th., et al. 2007.** Leipzig, Germany, July 9-13, 2007 : s.n., 2007. 6th International Conference on Multiphase Flows, ICMF'2007. S. 1-14. Paper No. 135.
- Frank, Th., et al. September 2006.** Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), Garching, Germany : s.n., September 2006. CFD4NRS Workshop on Benchmarking of CFD Codes for Application to Nuclear Reactor Safety. S. 1-19.
- Frank, Th., Shi, J. und Burns, A.D. 2004.** *Validation of Eulerian multiphase flow models for nuclear safety applications.* Pisa, Italy : s.n., 2004, 3rd Symposium on Two-Phase Flow Modeling and Experimentation, S. 1-8.
- Gosman, A.D., et al. 1992.** *Multidimensional modeling of turbulent two-phase flows in stirred vessels.* 12, 1992, AIChE Journal, Bd. 38, S. 1946-1956.
- GRS. July 2006.** *ATHLET Mod 2.1 Cycle A, User's Manual, Report No. GRS - P - 1/ Vol. 1.* Garching, Germany : GRS, July 2006.
- Ishii, N. und Zuber, M. 1979.** *Drag Coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows.* 1979, AIChE J, S. 843-855.
- Kocamustafaogullari, G. und Ishii, M. 1983.** *Interfacial area and nucleation site density in boiling systems.* 1983, Int. J. Heat Mass Transfer, Bd. 26, S. 1377.
- Krepper, E., et al. 2009.** *CFD modelling of polydispersed bubbly two-phase flow around an obstacle.* 11, November 2009, Nuclear Engineering and Design (NED), Vol. 239, pp. 2372-2381.
- Krepper, E., et al. 2008.** *The inhomogenous MUSIG model for the simulation of polydispersed flows.* 2008, Nuclear Engineering and Design (NED), Bd. 238, S. 1690-1702.
- Kurul, N. und Podowski, M. Z. 1991.** *On the modeling of multidimensional effects in boiling channels.* 1991, 27th National Heat Transfer Conference.
- Lemmert, M. und Chawla, J. M. 1977.** *Influence of flow velocity on surface boiling heat transfer coefficient.* s.l.: Heat Transfer and Boiling (Eds. E. Hahne and U. Grigull), Academic Press, 1977.
- Lerchl, G. Mai 2007.** Technische Notiz; Kopplung von ATHLET mit dem CFD-Programm ANSYS CFX und Erstellung einer kopplungsfähigen ATHLET-Version. *Technischer Bericht TN-LER-04/07.* Garching : GRS mbH, Mai 2007.
- Lifante, C., Frank, Th. und Burns, A.D. 2009.** Dresden, Germany. : s.n., 2009. Multiphase Flow Workshop.
- Lucas, D und Prasser, H-M. 2007.** *Steam bubble condensation in sub-cooled water in case of co-current vertical pipe flow.* 5, March 2007, Nuclear Engineering and Design, Bd. 237, S. 497-508.
- Lucas, D., et al. 2009.** *Condensation of Steam Bubbles Injected into Sub-cooled Water.* 2009, 13th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics, S. 1-13.
- Luo, S.M. und Svendsen, H. 1996.** *Theoretical Model for Drop and Bubble Breakup in Turbulent Dispersions.* 1996, AIChE Journal, Bd. 42, S. 1225 -1233.

- Menter, F.R. 2002.** 2002. EC Project ECORA, Report EVOL-ECORA-D01. pp. 1-47.
- Menter, F.R. 1994.** *Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications*. 8, 1994, AIAA-Journal, Bd. 32, S. 1598 - 1605,.
- Mikic, B. B. und Rohsenow, W. M. 1969.** *A new correlation of pool boiling data including the fact of heating surface characteristics*. 1969, ASME J. Heat Transfer, Bd. 91, S. 1969.
- Moraga, F.J., et al. 2003.** *Assesment of turbulent dispersion models for bubbly flows in the low Stokes number limit*. 2003, Int. J. Multiphase Flow, Bd. 29, S. 655-673.
- Pietruske, H. und Prasser, H-M. 2005.** Avignon, France : s.n., 2005. NURETH-11. S. #533.
- Prasser, H-M., Böttger, A. und Zschau, J. 1998.** *A new electrode-mesh tomograph for gas-liquid flows*. 1998, Flow Meas. Instrum., Bd. 9, S. 111-113.
- Prasser, H-M., et al. 2005.** Avignon, France. : s.n., 2005. NURETH-11. S. #399.
- Prince, M. and Blanch, H. 1990.** *Bubble Coalescence and Break-Up in Air-Sparged Bubble Columns*. 1990, AIChE Journal, Bd. 36, S. Bubble Coalescence and Break-Up in Air-Sparged Bubble Columns.
- Redlich, O. und Kwong, J.N.S. 1949.** *On the Thermodynamics of Solutions - An Equation of State. Fugacities of Gaseous Solutions*. 1949, Chem Rev 44, S. 233.
- Scholz D., Frank Th. August 2009.** *Coupling of ANSYS CFX with LMS AMESim by Prototype of the Generic Scalar Exchange (GSX) Code Coupling Interface*. Otterfing, Germany : ANSYS Germany GmbH, August 2009. S. 38, Internal ANSYS Report.
- Takamasa, T. und Tomiyama, A. 1999.** San Francisco, USA : s.n., 1999. NURETH-9. S. 1-17.
- Takata, T. and Yamaguchi, A. 2003.** *Numerical approach to the safety evaluation of Sodium-water reaction*. 10, 2003, J. Nucl. Science & Technology, Vol. 40, pp. 708-718.
- Todreas N.E., Kazimi M.S. 1990.** *Nuclear System 1, Thermal Hydraulics*. 1990.
- Tolubinski, V. I. und Kostanchuk, D. M. 1970.** *Vapour bubbles growth rate and heat transfer intensity at subcooled water boiling*. Paris, France : s.n., 1970, 4th. International Heat Transfer Conference.
- Tomiyama, A. 2009.** Dresden : s.n., 2009. Workhsop on Multiphase Flows. S. 1-45.
- Tomiyama, A. 2002.** Dresden, Germany : FZR, 2002. Workshop on Measurement Technologz (MTWS5). S. 3-19.
- Tomiyama, A. 1998.** Lyon, France : s.n., 1998. International Conference in Multiphase Flow. S. 1-18.
- Waata C.L., Frank Th. 2008.** *Development of CFD Software for the Simulation of Multi-dimensional Flows in the Nuclear Reactor Cooling System - Coupling of ANSYS CFX with Id System Code ATHLET*. Otterfing, Germany : ANSYS Germany, 2008. ANSYS Technical Report TR-08-02.
- Wagner, W. und Kruse, A. 1998.** *The Industrial Standard IAPWS-IF97: Properties of Water and Steam*. Berlin : Springer, 1998.