

Abschlussbericht

Reaktorsicherheitsforschung-Vorhaben-Nr.: 150 1337

Vorhabenstitel:	Entwicklung von CFD-Software zur Simulation mehrdimensionaler Strömungen in Sicherheitseinschlüssen von Kernreaktoren
Autoren:	Dr. Christian Lübon
	Dr. Daniel Köster
	Dr. Guido Döbener
	Dr. Yuri Egorov
	PD DrIng. habil. Thomas Frank
Dienststelle des Auto	rs: ANSYS Germany GmbH
	Staudenfeldweg 12
	D-83624 Otterfing
	Germany
Berichtsdatum:	09. Dezember 2010
Berischtsnummer:	ANSYS / TR-10-01



Final Report

Reactor Safety Research Project No.: 150 1337

Project Title: Development of CFD Software for the Simulation of Multi-dimensional Flows in Nuclear Reactor Containments

Author:	Dr. Christian Lübon
	Dr. Daniel Köster
	Dr. Guido Döbener
	Dr. Yuri Egorov
	PD DrIng. habil. Thomas Frank

- Performing Organisation:ANSYS Germany GmbHStaudenfeldweg 12D-83624 OtterfingGermanyGermany
- Publication Date: 09. December 2010

Report-No.: ANSYS / TR-10-01

1. ISBN oder ISSN 2. Berichtsart Schlussbericht	
3a. Titel des Berichts Entwicklung von CFD-Software zur Simulation mehrdimensionale schlüssen von Kernreaktoren	er Strömungen in Sicherheitsein-
3b. Titel der Publikation	
4a. Autoren des Berichts (Name, Vorname) Lübon, Christian; Köster, Daniel; Döbener, Guido; Egorov, Yuri;	5. Abschlussdatum des Vorhabens 31.07.2010
Frank, Thomas	6. Veröffentlichungsdatum 09. Dezember 2010
4b. Autoren der Publikation (Name, Vorname)	7. Form der Publikation Broschüre
8. Durchführende Institution (Name, Adresse)	9. Ber.Nr. Durchführende Institution ANSYS / TR-10-01
ANSYS Germany GmbH Staudenfeldweg 12	10. Förderkennzeichen 150 1337
83624 Otterfing	11a. Seitenzahl Bericht 101 Seiten
	11b. Seitenzahl Publikation
13. Fördernde Institution (Name, Adresse)	12. Literaturangaben 40
Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi) 53107 Bonn	14. Tabellen 13
	15. Abbildungen 37
16. Zusätzliche Angaben	
17. Vorgelegt bei (Titel, Ort, Datum)	
18. Kurzreferat Im Rahmen des vorliegenden Projektes der Sicherheitsforsch Fortentwicklung eines allgemein anwendbaren CFD-Softwarepakets Sicherheitseinschlüssen von Kernreaktoren gearbeitet. Das Proje Universität Stuttgart, Institut für Kerntechnik, der GRSmbH in Kölr GmbH in Eschborn ausgeführt. Die CFD-Entwicklung basierte auf ANSYS CFX. Der Schwerpunkt lag dabei im vorliegenden Pr auftriebsbehafteten turbulenten Ein- und Mehrkomponenten-Str Validierung der in ANSYS CFX implementierten physikalischen Projektes drei an der ThAI-Testanlage von Becker Technologies au (Thai-18, ThAI20 sowie ThAI-21/22), die in aufsteigender Komp getriebene und temperatur-getriebene Strömungsszenarien i Kernreaktoren darstellen und mit der Strömungsmechanik-Software	ung des BMWi wurde an der s für die Strömungsberechnung in kt wurde in Kooperation mit der n sowie der Becker Technologies der kommerziellen CFD-Software ojekt auf der Modellierung von ömungen. Zur Bewertung und Modelle wurden im Laufe des isgeführte Experimente betrachtet blexität impulsgetriebene, dichte- n Sicherheitseinschlüssen von ANSYS CFX berechnet wurden.
CFD, Modellierung, Turbulenz, Auftrieb, ThAI, Sicherheitseinschluß,	Kernreaktor
ANSYS Germany GmbH	

Berichtsblatt

BMWA-Vordr. 3831/10.02

Document Control Sheet

1. ISBN or ISSN 2. Type of Report Final Report	
3a. Report Titel	sional Flows in Nuclear Peactor
Containments	sional flows in Nucleal Reactor
3b. Title of Publication	
4a. Autor(s) of the Report (Family Name, First Name)	5. End of Project 31 07 2010
Frank, Thomas	6. Publication Date
,	09. December 2010
4b. Autor(s) of the Publication (Family Name, First Name)	7. Form of Publication Booklet
8. Performing Organization(s) (Name, Address)	9. Originator's Report Number
	ANSYS / TR-10-01
ANSYS Germany GmbH	10. Reference Number
Staudenteldweg 12	150 1337
00024 Otterning	101 pages
	11b. No. of Pages Publication
13. Sponsoring Agency (Name, Address)	12. No. of References
	40
Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi)	14. No. of Tables
53107 BOIII	15 15 No. of Figures
	37
16. Supplementary Notes	I
17. Presented at (Titel, Place, Date)	
18. Abstract The main goal of this project in the area of safety research of th (BMWi) was the further development of a generally applicable prediction in the containment of nuclear reactors. The project has be the University of Stuttgart, Institute of Nuclear Energy and Energy S and the Becker Technologies GmbH, Eschborn. CFD developmer CFD package ANSYS CFX. The emphasis in the current project wa buoyancy-driven turbulent flows. For the assessment and validation in ANSYS CFX, the project was aimed to the investigation of three facility of Becker Technologies. These three experiments repre momentum driven, density driven and temperature driven flow scen reactors. The flow scenarios have been simulated with the CFD soft have been compared in detail with the available experimental data fr	he German Ministry of Economy CFD software package for flow een carried out in cooperation with Systems, the GRS mbH, Cologne nt was based on the commercial is on single- and multi-component of the underlying physical models e experiments from the ThAI test esent with increasing complexity narios in containments of nuclear ware ANSYS CFX and the results om the ThAI experiments.
CFD, modelling, turbulence, buoyancy, ThAI, containment, nuclear re	eactor
20. Publisher	21. Price

Inhalt

l	nhalt	5	
A	Abbildungsverzeichnis		
Т	Tabellenverzeichnis 10		
1	Einleitung	11	
2	Gliederung dieses Berichts	12	
3	 Physikalische Modellierung 3.1 Systematik und Grundlagen der Turbulenzmodellierung in ANSYS CFX 3.1.1 Exakte Transportgleichungen	14 14 14 15 15 15 17 18 21 21 23 32 rtem 34 36 37 34 34 34 36 37 34 34 34 34 36 37 34 34 36 37 34 34 37 34 37 34 37 34 37 34 37 34 37 34 37 34 37 34 37 37 34 37 34 37 37 34 37 34 37 37 37 34 37 37 37 37 34 37 37 37 37 37	
4	4.1 Die Anwendung von CFD Best Practice Guidelines	39 40 41	
	4.2 Impuisgeneoene suomungen 4.2 Der TH-18 Testfall	4 1 42	
	4.2.1.1 Beschreibung der ThAI-Versuchseinrichtung	42	
	4.2.1.2 Experimentelle Versuchsbedingungen von TH-18	43	
	4.2.1.3 Strömungsgebiet, Gittergenerierung und Randbedingungen der CFD-		
	Simulation	44	
	4.2.1.4 Das Modell-Setup der CFD-Simulation	45	
	4.2.1.5 CFD-Simulationsergebnisse und Vergleich mit dem Experiment	48	

	4.2.1.6 Diskussion und Schlussfolgerungen für TH-18	.48
4.3	Strömungen mit Stofftransport	.49
	4.3.1 Testfall einer stabilen Salzwasser-Mischungsschicht	.50
	4.3.1.1 Beschreibung des Experiments	.50
	4.3.1.2 Strömungsgebiet, Gittergenerierung und Randbedingungen der CFD-	
	Simulation	.50
	4.3.1.3 Das Modell-Setup der CFD-Simulation	.51
	4.3.1.4 CFD-Simulationsergebnisse und Vergleich mit dem Experiment	.51
	4.3.2 Testfall einer Helium-Stickstoff-Mischungsschicht (He-N ₂)	.55
	4.3.2.1 Beschreibung des Experiments	.55
	4.3.2.2 Strömungsgebiet, Gittergenerierung und Randbedingungen der CFD-	
	Simulation	.57
	4.3.2.3 Das Modell-Setup der CFD-Simulation	.57
	4.3.2.4 CFD-Simulationsergebnisse und Vergleich mit dem Experiment	.58
	4.3.3 Die TH-20 Testreihe	.59
	4.3.3.1 Beschreibung der modifizierten ThAI-Versuchseinrichtung	.60
	4.3.3.2 Experimentelle Versuchsbedingungen von TH-20	.61
	4.3.3.3 Strömungsgebiet, Gittergenerierung und Randbedingungen der CFD-	
	Simulation	.61
	4.3.3.4 CFD-Simulationen für TH-20 mit skalengemittelten Turbulenzmodelle	n
	63	
	4.3.3.5 CFD-Simulation für TH-20 mit dem LES-Verfahren	.64
	4.3.3.6 CFD-Experiment-Vergleich	.64
4.4	Strömungen mit Wärmetransport	.67
	4.4.1 Testfall einer differentiell beheizten Kammer	.67
	4.4.1.1 Beschreibung des Experiments	.67
	4.4.1.2 Strömungsgebiet, Gittergenerierung und Randbedingungen der CFD-	
	Simulation	.68
	4.4.1.3 Das Modell-Setup der CFD-Simulation	.68
	4.4.1.4 CFD-Simulationsergebnisse und Vergleich mit dem Experiment	.69
	4.4.2 Die TH-21-Testserie	.70
	4.4.2.1 Beschreibung der modifizierten ThAI-Versuchseinrichtung	.70
	4.4.2.2 72	
	4.4.2.3 Experimentelle Versuchsbedingungen von TH-21	.73
	4.4.2.4 CFD-Simulationen für TH-21 mit skalengemittelten Turbulenzmodelle	n
	73	
	4.4.2.5 CFD-Simulation für TH-21 mit skalenauflösenden Turbulenzmodellen	.75
	4.4.2.6 CFD-Experiment-Vergleich	.78
	4.4.2.7 Diskussion und Schlussfolgerungen für TH-21	.82
	4.4.3 Die TH-22-Testserie	.82
	4.4.3.1 Experimentelle Versuchsbedingungen von TH-22	.82
	4.4.3.2 Strömungsgebiet, Gittergenerierung und Randbedingungen der CFD-	
	Simulation	.83
	4.4.3.3 CFD-Simulation für TH-22 mit skalenauflösenden Turbulenzmodellen	.83
	4.4.3.4 CFD-Experiment-Vergleich	.85
	4.4.3.5 Diskussion und Schlussfolgerungen für TH-22	.89

5 Bereitstellung der CFD-Module

6	Zusammenarbeit mit anderen Stellen	92
7	Zusammenfassung	92
8	Danksagung	95
9	Veröffentlichungen	96
10	Literaturnachweis und Referenzen	97
11	Formelzeichen	99
La	teinische Symbole	99
Gr	iechische Symbole	100

Gefördert durch:



Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie

aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages

Das diesem Bericht zugrunde liegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie unter dem Förderkennzeichen 150 1337 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Links: Übersicht des ThAI-Versuchsbehälters. Rechts: Vertikaler Schnitt durch den ThAI-Behälter, Lage des Gebläses und der Meßpositionen von LDA, PIV, Anemometer und Differenzdrucksensor
Abbildung 2: Offene Flächen zwischen den Kondensatwannen. Links: Konfiguration H_klein_groß_D. Rechts: Konfiguration H_groß_klein_D43
Abbildung 3: Einlass und Austrittsrandbedingungen für die TH-18-Simulation44
Abbildung 4: Darstellung der Assymetrie des gemittelten vertikalen Geschwindigkeitsfeldes unterhalb der kleinen Öffnung
Abbildung 5: Vergleiche der zeitgemittelten Geschwindigkeit zwischen CFD-Rechnungen und Experiment an verschiedenen Meßprofilen. Zur Lage der Profile siehe Abbildung 647
Abbildung 6: Lage der in Abb. 5 dargestellten Meßprofile für TH-18
Abbildung 7: Versuchsaufbau für die saline Mischungsschicht. Die Strömungsrichtung verläuft von links nach rechts
Abbildung 8: Gitter 1 für die saline Mischungsschicht
Abbildung 9: Gitterstudie für vier Strömungsgrößen am Profil x=40 m. Linke Spalte:RS_BSL_BuoyancyTurbulence.RechteCustomSolver_RS_BSL_TSF_BuoyancyTurbulence.53
Abbildung 10: Vergleich der CFD-Rechnungen auf dem feinsten Gitter mit dem Experiment. Linke Spalte: vier Strömungsgrößen am Profil x=5 m. Rechte Spalte: analoge Resultate am Profil x=40 m
Abbildung 12: Oben: Darstellung von Gitter 1, Unten: Statistiken der benutzten Rechengitter
Abbildung 11: Skizze des experimentellen Aufbaus, sowie der Randbedingungen für die numerischen Rechnungen
Abbildung 13: Links: Versuchsanordnung für TH-20. Nicht dargestellt sind die festen Leitschaufeln des Axialgebläses zwischen Lüfterrad und Strömungsgleichrichter. Rechts: Übersicht aller Meßstellen für TH-20
Abbildung 14: Links: Geometrie-Modell für den TH-20.2-Versuch. Rechts: Lage der Meßpunkte der Heliumkonzentration für 1-Grad-Geometriemodelle, sowie die Anfangsverteilung der Heliumkonzentration im Versuch TH-20.2
Abbildung 15: Oben, von links nach rechts: Für TH-20 verwendete Rechengitter 1 bis 4, geeignet für RANS-Rechnungen. Detailansicht oberhalb der Düse. Unten: Anzahl der Knoten für jedes Gitter
Abbildung 16: LES-Simulation für TH-20.2. Helium-Volumenkonzentration in der xy-Ebene zu ausgewählten Zeitpunkten. Von links oben nach rechts unten: t=0,03 s; t=2,5 s; t=5 s; t=25 s; t=50 s; t=75 s; t=100 s; t=125 s; t=150 s; t=175 s; t=200 s; t=225 s65

Abbildung 17: Links: Vergleiche der Helium-Volumenkonzentration zwischen CFD- Rechnungen und Experiment an verschiedenen Meßpunkten. Rechts: Lage der Meßpunkte. 66
Abbildung 18: Aufbau und Randbedingung für differentiell beheizte Kammer
Abbildung 19: Differentiell beheizte Kammer: Vergleich der Profile auf dem feinsten Gitter für die eingesetzten numerischen Modelle und dem Experiment
Abbildung 20: Übersicht des Aufbaus und der Instrumentierung für die Versuchsreihe TH-21. 72
Abbildung 21: Detail des 180-Grad-Rechengitters für TH-2174
Abbildung 22: TH-21, stationäre Vorlaufsrechnung auf dem 2-dimensionalen Gitter 2. Links: Geschwindigkeit mit Stromlinien, rechts: Temperatur
Abbildung 23: Ergebnisse der transienten 180-Grad-SST-Rechnung für TH-21. Links: Schnitt durch Symmetrieebene, gemitteltes Temperaturfeld, unten zusätzlich die Stromlinien der mittleren Geschwindigkeit. Rechts: Temperatur, unten Stromlinien, hier Querschnitt durch die YZ-Ebene
Abbildung 24: Ergebnisse der transienten 180-Grad-SAS-Rechnungen für TH-21, dargestellt durch Isoflächen der Wirbelstärke (λ_2 Kriterium (Jeong, et al., 1995)) mit aufgelöster Turbulenz (μ_t/μ). Links: Transiente Anlaufrechnung nach 9,1 Stunden realer Zeit. Rechts: Isochore Initialisierung mit nachfolgender einstündiger transienter Rechnung
Abbildung 25: TH-21 Simulation – Kesseldruck
Abbildung 26: TH-21 Simulation – Temperatursensor im Sumpfraum
Abbildung 27: Überblendung der räumlichen Diskretisierung von einem Upwind- (schwarz) zu einem Zentrale-Differenzen-Verfahren (weiß)
Abbildung 28: TH-21 Simulation – Temperatursensor in der Konvektionsströmung80
Abbildung 29: TH-21 Simulation – Vertikalgeschwindigkeit im inneren Zylinder
Abbildung 30: TH-22 – Experimenteller Aufbau
Abbildung 31: TH-22 Simulation – Quasistationärer Endzustand – Wirbelstrukturen und aufgelöste Turbulenz (links), Temperaturverteilung (rechts)
Abbildung 32: TH-22 Simulation – Helium Verteilung (links 2s, rechts 8min nach der Injektion)
Abbildung 33: TH-22 Simulation – Kesseldruck
Abbildung 34: TH-22 Simulation – Vertikale Temperaturverteilung bei Radius r=1.15m87
Abbildung 35: TH22 – Fourier-Amplituden der Temperaturfluktuationen am oberen Ende des inneren Zylinders (Quelle (Fischer, et al., 2010))
Abbildung 36: TH22 – Temperaturverlauf am oberen Ende des inneren Zylinders (Quelle (Fischer, et al., 2010))
Abbildung 37: TH22 – Temperaturverlauf während der Helium Injektion

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Statistiken der drei Hexaedergitter für TH-18. Aufgeführt sind die Werte für die 180-Grad-Versionen. 44
Tabelle 2: Übersicht über ausgewählte Simulationen für den Versuch TH-1845
Tabelle 3: Übersicht der verschiedenen Turbulenzmodelle bei CFD-Rechnungen für diesaline Mischungsschicht.52
Tabelle 4: Übersicht der verschiedenen Testfälle für die Helium-Stickstoff-Mischungsschicht.
Tabelle 5: Übersicht der verschiedenen numerischen Modelle für die Helium-Stickstoff- Mischungsschicht
Tabelle 6: Oben: Ausbreitungsrate der Dichte für verschiedene Gitter, KEpsilon-Modell und Experiment. Unten: Ausbreitungsrate der horizontalen Geschwindigkeit, KEpsilon-Modell und Experiment
Tabelle 7: Oben: Ausbreitungsrate der Dichte für verschiedene Turbulenzmodelle undExperiment. Unten: Ausbreitungsrate der horizontalen Geschwindigkeit.59
Tabelle 8: Turbulenzmodelle für den Testfall der differentiell beheizten Kammer
Tabelle 9: Übersicht der verschiedenen experimentellen Phasen für TH-21
Tabelle 10: Statistiken der benutzen Gitter für skalengemittelte TH-21 Rechnungen73
Tabelle 11: Statistiken des benutzen Gitters für skalenaufgelöste TH-21 Rechnungen75
Tabelle 12: Initialisierungen f ür TH-21 und Rechenzeiten
Tabelle 13: TH-21 Simulation – Abweichungen zum Experiment 81

1 Einleitung

Das Ziel des vorliegenden Forschungsvorhabens, das von August 2007 bis Juli 2010 über einen Gesamtzeitraum von drei Jahren im Verbund mit dem Institut für Kernenergetik und Energiesysteme der Universität Stuttgart (IKE) ausgeführt wurde, bestand in der Weiterentwicklung und mittelfristigen Bereitstellung eines CFD-Softwarepakets, mit dem die in Sicherheitsbehältern von Kernreaktoren auftretenden mehrdimensionalen strömungsmechanischen, thermischen und thermodynamischen Vorgänge effizient und genau simuliert werden können. Als Validierungsexperimente dienten die bei Becker Technologies, Eschborn, ausgeführten ThAI-III-Versuche¹.

Das resultierende CFD-Modul wurde auf der Grundlage der CFD-Software ANSYS CFX entwickelt. Durch Verwendung dieses in der Reaktortechnik weit verbreiteten, kommerziellen Softwarepakets als Basis der Entwicklungen konnte auf vorliegende und getestete Verfahrenskomponenten in den Bereichen hybrider unstrukturierter Rechennetze, Diskretisierungsverfahren, Lösungsalgorithmen für Ein- und Mehrphasenströmungen und Parallelrechnen aufgebaut werden. Zusätzlich können durch dieses Vorgehen für den praktischen Einsatz und die spätere industrielle Akzeptanz der Software wichtige Komponenten wie Geometriemodellierung, Gittergenerierung, Postprozessing und graphische Benutzeroberflächen mit geringfügigen Anpassungen übernommen und genutzt werden. Über die Projektlaufzeit hinaus stellt ANSYS Germany die dauerhafte Softwarepflege der neu entwickelten Module nach Abschluss des Vorhabens sicher.

Im vorliegenden Forschungsvorhaben wurden schwerpunktmäßig physikalische Modelle und numerische Methoden für Strömungen und thermohydraulische Vorgänge entwickelt, die durch deutsche und europäische Expertengremien und im Rahmen von Internationalen Standardproblemen (zum Beispiel ISP-47) als wichtig für die Auslegung von Sicherheitsbehältern erachtet wurden. Dazu gehören die folgenden Phänomene bzw. Strömungsformen:

- Geschichtete, einphasige Strömungen aufgrund von Temperaturunterschieden in den Sicherheitseinschlüssen; die genaue Berechnung dieser Strömungen ist wichtig, um erhöhte Konzentrationen von Wasserstoff oder anderen gefährlichen Stoffen aufgrund der Schichtung zu erkennen und um geeignete Gegenmaßnahmen zum Abbau dieser Konzentrationen an den richtigen Orten einzuleiten (zum Beispiel durch katalytische Rekombinatoren).
- Geschichtete, einphasige Strömungen aufgrund von Konzentrationsunterschieden unterschiedlicher Gase in Sicherheitseinschlüssen; durch die unterschiedlichen Dichten von Luft und Wasserstoff kann es ebenfalls zu geschichteter bzw. stratifizierter Strömung mit einem entsprechenden Gefahrenpotential kommen. Auch in diesem Falle ist es wichtig, den örtlichen und zeitlichen Verlauf von Überkonzentrationen genau zu kennen.

Weitere wichtige, physikalische Phänomene in Sicherheitseinschlüssen sind Kondensation und Aerosolströmungen. Diese Phänomene wurden im vorliegenden Forschungsvorhaben

¹ ThAI – Thermohydraulics, Aerosols and Iodines; Versuchseinrichtung der Becker Technologies GmbH für die Nachbildung und experimentelle Untersuchung von Strömungsverhältnissen im Sicherheitseinschluss von Kernreaktoren

nicht behandelt. Dieses Forschungsvorhaben bildet aber eine wichtige Vorstufe, um auch diese Phänomene künftig besser berechnen zu können, da sowohl in der Realität als auch in den Simulationsmodellen die Turbulenz einen dominanten Einfluss auf die Kondensation, die chemischen Reaktionen und die Aerosol- bzw. Partikelströmungen besitzt. Es ist deshalb wichtig, die Simulationsgenauigkeit für einphasige, turbulente Strömungen zu verbessern und somit die Voraussetzungen für eine erfolgreiche Vorausberechnung von zweiphasigen Strömungen mit Phasenübergang zu schaffen.

Weitere wichtige Charakteristika der Strömungen in Sicherheitseinschlüssen (Containments) sind, dass sie instationär mit relativ langen Transienten verlaufen, dass die Reynoldszahlen der Strömungen mehrere Größenordnungen von der laminaren bis zur voll turbulenten Strömungsform umfassen, dass Temperatur- und Konzentrationsunterschiede zu einer komplexen Turbulenzstruktur führen und dass die Strömungen in großen und komplexen Geometrien mit vielen Einbauten ablaufen. Diese Eigenschaften stellen sowohl an die mathematischen Modelle als auch an die Numerik von CFD-Verfahren hohe Anforderungen.

Die in dem vorliegenden Forschungsvorhaben ausgeführten Arbeiten haben das Ziel, Schwachstellen von CFD-Methoden in Bezug auf diese Punkte zu beheben. Dazu gehören einerseits Entwicklungsarbeiten zur Turbulenzmodellierung, wie der Einsatz und die Weiterentwicklung von Reynoldsspannungs-Turbulenzmodellen, bei denen der Anisotropie der Turbulenzstruktur besser Rechnung getragen werden kann sowie die Anwendung neuer Ansätze zur Simulation instationärer, turbulenter Strömungen, bei denen statistische Turbulenzmodelle und LES²-Modelle in Kombination eingesetzt werden. Parallel zu diesen Modellierungsarbeiten wurde daran gearbeitet, die CFD-Software für die Berechnung instationärer Strömungen zu optimieren. Zu diesem Themenblock gehört die Verwendung und Optimierung von Verfahren zur adaptiven Zeitschrittsteuerung sowie die Erarbeitung von "Best Practice Guidelines" für die Berechnung instationärer Strömungen in Containments. Als abschließende Validierungsexperimente für das Projekt dienten jeweils die ThAI-III-Versuche von Becker Technologies, die parallel zu diesem Vorhaben ausgeführt wurden und in ihrer Untergliederung dem Arbeitsplan dieses Projekts und des Projekts des IKE angepasst waren. Das Vorhaben wurde als Teil eines Forschungsverbundes unter Koordination der GRS ausgeführt.

Das vorliegende Forschungsvorhaben ist Teil des "CFD-Verbunds für die Anwendung von CFD-Verfahren in der Reaktorsicherheit"³. Die Ziele des hier dargestellten Fortsetzungsvorhabens wurden auf Grundlage des Entwicklungsstands nach der ersten Antragsperiode mit den Partnern im Verbund, insbesondere aber mit dem IKE, der Becker Technologies und der GRS abgestimmt.

2 Gliederung dieses Berichts

Die Gliederung des vorliegenden Abschlußberichtes zum Forschungsvorhaben "Entwicklung von CFD-Software zur Simulation mehrdimensionaler Strömungen in Sicherheitseinschlüssen von Kernreaktoren" gliedert sich in zwei Hauptkapitel. Das erste dieser Hauptkapitel geht detailliert auf die den folgenden Validierungsuntersuchungen zu

² Large Eddy Simulation

³ <u>http://domino.grs.de/cfd/cfd.nsf</u>

Grunde liegende physikalische Modellierung der Turbulenz von impulsgetriebenen und auftriebsbehafteten Strömungen ein. Ausgehend von der Hierarchie der verfügbaren skalengemittelten und skalenauflösenden Turbulenzmodelle wird auf die Möglichkeiten und die Grenzen der Modellierung auftriebsinduzierter Turbulenz – sowohl in temperatur- als auch in dichte-induzierten Auftriebsströmungen – eingegangen. Hervorzuheben sind in diesem Zusammenhang die beiden Modellneuentwicklungen, die im Rahmen dieses Forschungsvorhabens abgeleitet und in die ANSYS CFX Software implementiert wurden. Es handelt sich dabei um zwei differentielle Modelle zur Berücksichtigung turbulenter Wärme- und Skalarflüsse im Rahmen der skalengemittelten Turbulenzmodellierung, siehe hierzu die Abschnitte 3.2.3 und 3.2.4.

Im Folgekapitel werden die Ausführung und die Ergebnisse der Validierungsuntersuchungen an den ThAI-III-Experimenten TH18, TH20 sowie TH21/22 detailliert dargestellt. Der Testfall TH18 diente zunächst der Validierung der Turbulenzmodelle in ANSYS CFX in einer rein impulsgetriebenen Behälterströmung ohne Dichtegradienten und ohne Wärmetransport. Anhand der experimentellen Daten aus dem TH18-Versuch wurden Wirbelviskositätsmodelle wie das SST-Modell, Reynoldsspannungs-Turbulenzmodelle wie das BSL RSM Modell und das skalenauflösende SAS-SST-Modell validiert (Abschnitt 4.2). In einem nächsten Untersuchungsschritt wurden anhand vereinfachter Testfälle und anhand des ThAI-III-Versuchs TH20 Strömungen mit Stofftransport und Auftrieb auf Grund von Dichtegradienten in der Strömung untersucht. Schwerpunt der Validierungsuntersuchungen waren hierbei das SST-Modell mit Auftriebstermen für die Produktion und Dissipation auftriebsinduzierter Turbulenz, das neu entwickelte und implementierte differentielle turbulente Skalarfluss-Modell und die Simulation des TH20-Testfalls mit einem LES-Verfahren (Abschnitt 4.3). Ein dritter Schwerpunkt des vorliegenden Forschungsvorhabens lag schließlich auf der Untersuchung von Strömungsszenarien in Sicherheitseinschlüssen von Kernreaktoren unter den Bedingungen von thermisch induzierter Naturkonvektion und die Kombination mit der Freisetzung einer Leichtgaswolke, für die im Rahmen des ThAI-III-Programms die Versuchsreihen TH21 und TH22 ausgeführt wurden. Die experimentellen Daten dieser Versuche wurden im Rahmen einer blinden Vorausrechnung (TH21) und einer Validierungsrechnung für den TH22-Versuch zur Validierung der entwickelten Turbulenzmodelle herangezogen, wobei der Schwerpunkt dieser Untersuchungen auf der Anwendung und dem Vergleich mit dem SAS-SST-Modell lag (Abschnitt 4.4).

Die folgenden Kapitel stellen die Bereitstellung der entwickelten Turbulenzmodelle sowie die Zusammenarbeit im Rahmen des von der GRS koordinierten Forschungsverbundes Kernreaktorsicherheitsforschung dar. Diesem Forschungsbericht ist des Weiteren eine Zusammenstellung der verwendeten Literaturreferenzen und der Veröffentlichungen nachgestellt.

3 Physikalische Modellierung

3.1 Systematik und Grundlagen der Turbulenzmodellierung in ANSYS CFX

Die mathematische Modellierung turbulenter Strömungen basiert in ANSYS CFX auf Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie des Fluids. Von besonderem Interesse im aktuellen Projekt ist die Berücksichtigung variabler Dichte in der Turbulenzmodellierung. Für Strömungen im Sicherheitseinschlußbehälter von Kernreaktoren sind Dichteänderungen entweder verursacht durch das Vorhandensein mehrerer Fluide unterschiedlicher molekularer Dichte in einer Mehrkomponentenströmungen oder für Einkomponentenströmungen auf Grund von starken Temperaturgradienten und den daraus resultierenden thermodynamischen Effekten. In beiden Fällen führen die lokalen Dichteunterschiede zu starken Auftriebswirkungen und zu Rückwirkungen auf die Fluidturbulenz.

In diesem Abschnitt werden ausgehend von den exakten Transportgleichungen die verschiedenen gemittelten Transportgleichungen vorgestellt, welche die Grundlage für skalengemittelte Turbulenzmodelle bilden. Abschließend wird eine Übersicht der in ANSYS CFX vorhandenen und im Rahmen des Projekts neu implementierten Turbulenzmodelle präsentiert.

3.1.1 Exakte Transportgleichungen

Hintergründe zu den physikalischen Grundlagen dieses Abschnitts finden sich beispielsweise in (Byron Bird, et al., 1960).

3.1.1.1 Massenerhaltung

Im aktuellen Projekt treten im kompliziertesten Fall einphasige Strömungen mit mehreren Komponenten und Temperaturunterschieden auf. Die unterschiedlichen Komponenten der Strömung, auch Spezies genannt, werden im Folgenden durch den Index I = 1,...,L unterschieden. Grundlegend für die Betrachtung ist dabei die Massenkonzentration der Spezies und ihr Geschwindigkeitsfeld:

$$\rho_{l}$$
: Masse von Komponente / pro Volumeneinheit,
 \mathbf{u}_{l} : Geschwindigkeitsfeld der Komponente / (1)

Die Massenerhaltung jeder Komponente der Strömung kann damit wie folgt ausgedrückt werden:

$$\frac{\partial \rho_{l}}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_{l} u_{l,j})}{\partial x_{j}} = S_{l}, \qquad (2)$$

mit einem Reaktionsterm S_i , welcher die volumetrische Umwandlung zwischen Komponenten beschreibt. Von den einzelnen Komponentengeschwindigkeiten und Dichten ausgehend wird die gesamte Dichte und massengemittelte Geschwindigkeit wie folgt definiert:

$$\boldsymbol{\rho} \equiv \sum_{l=1}^{L} \boldsymbol{\rho}_{l}, \quad \mathbf{u} \equiv \frac{\sum_{l=1}^{L} \boldsymbol{\rho}_{l} \mathbf{u}_{l}}{\boldsymbol{\rho}}.$$
 (3)

Mit diesen Definitionen lässt sich (2) wie folgt umschreiben:

$$\frac{\partial \rho_{I}}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_{I} u_{j})}{\partial x_{j}} = -\frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[\rho_{I} \left(u_{I,j} - u_{j} \right) \right] + S_{I}.$$
(4)

Durch Summierung dieser Gleichung über alle Komponenten erhalten wir schließlich die Gleichung für die Erhaltung der Gesamtmasse:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j)}{\partial x_j} = 0.$$
(5)

Hierbei wurde ausgenutzt, dass die Reaktionsraten sich zu Null summieren.

3.1.1.2 Impulserhaltung

Die Impulserhaltung wird durch folgende Gleichung beschrieben:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \rho_{abs}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} T_{ij} + S_{M.i}.$$
(6)

Hier wurde der molekulare Spannungstensor

$$\tau_{ij} \equiv \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right)$$
(7)

und die externe Kraft $S_{M,i}$. benutzt. Von speziellem Interesse im aktuellen Projekt ist Schwerkraft als externe Kraft, somit

$$S_{M,i} \equiv \rho g_i \tag{8}$$

mit der Schwerkraftbeschleunigung g_i .

3.1.1.3 Massenerhaltung einzelner Spezies

In ANSYS CFX wird die Konzentration der einzelnen Komponenten eines Fluides durch den Massenbruch beschrieben:

$$Y_{l} \equiv \frac{\rho_{l}}{\rho}.$$
(9)

Da die Summe der Massenbrücke nach Definition 1 ergeben muss, kann der Massenbruch einer ausgewählten Referenzkomponente durch folgende algebraische Relation angegeben werden:

$$Y_{L} = 1 - \sum_{I=1}^{L-1} Y_{I} \,. \tag{10}$$

Wir treffen im Rahmen des Projekts die Annahme, dass Diffusion zwischen Komponenten allein durch das Fick'sche Gesetz gegeben ist:

$$F_{I,j} \equiv \rho_I \left(u_{I,j} - u_j \right) = -\Gamma_I \frac{\partial Y_I}{\partial x_j}$$
(11)

wobei der molekulare Diffusionskoeffizient Γ_1 durch

$$\Gamma_{I} \equiv \rho D_{I},$$

$$D_{I} : \text{kinematische Diffusivität, } [\text{m}^{2}\text{s}^{-1}]$$
(12)

definiert wird. Durch Einsetzen von (11) in (4) und Ausnutzen der Definition des Massenbruchs erhält man *L-1* skalare Transportgleichungen:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_{i}) + \frac{\partial}{\partial x_{j}}(\rho u_{j}Y_{i}) = -\frac{\partial}{\partial x_{j}}F_{i,j} + S_{i}.$$
(13)

3.1.1.4 Energieerhaltung

Ein weiterer grundlegender Erhaltungssatz ist die Erhaltung der Energie, welcher in vielen verschiedenen Formen in der Literatur zu finden ist. Wir gehen von folgender Formulierung, basierend auf der statischen Enthalpie, aus:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j h) = -\frac{\partial}{\partial x_j}q_j + \tau_{ij}\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \rho_{abs}}{\partial t} + u_j\frac{\partial \rho_{abs}}{\partial x_j} + S_E, \quad (14)$$

wobei

h : spezifische statische Enthalpie,
$$[m^2 s^{-2}]$$
,
q : Wärmefluss, $[kg s^{-3}]$, (15)
 $S_{\mathcal{E}}$: Energiequellterm, $[kg m^{-1} s^{-3}]$.

Wir treffen die Annahme, dass Wärmeleitung vollständig durch das Fourier'sche Gesetz gegeben ist, d.h.

$$\boldsymbol{q}_{j} \equiv -\boldsymbol{k} \frac{\partial T}{\partial \boldsymbol{x}_{j}} \tag{16}$$

mit dem Wärmeleitkoeffizienten k und der Temperatur T.

Eine weitere, übliche Vereinfachung - in **ANSYS CFX** bekannt als "Thermal Energy Model" - vernachlässigt Druck- und viskose Dissipationsterme auf der rechten Seite. Als Resultat erhält man

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_{j}}(\rho u_{j}h) = -\frac{\partial}{\partial x_{j}}q_{j} + S_{E}.$$
(17)

3.1.1.5 Vollständiges System

Fassen wir die Gleichungen (5), (6), (13) und (17) zusammen, so erhalten wir

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j)}{\partial x_j} = 0,$$

$$\frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \rho_{abs}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} r_{ij} + S_{M,i}, \quad i = 1,...,3,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j Y_i) = -\frac{\partial}{\partial x_j} F_{I,j} + S_i, \quad I = 1,..., L-1,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j h) = -\frac{\partial}{\partial x_j} q_j + S_E.$$
(18a-d)

Gleichung (18d) für Enthalpietransport besitzt eine ähnliche Struktur wie die Komponententransportgleichung (18c). Daher wird im Folgenden bei der Herleitung von Gleichungen zur Beschreibung der Turbulenz allein mit (18c) gearbeitet.

3.1.2 Gemittelte Transportgleichungen

Für eine statistische Behandlung turbulenter Effekte werden die unbekannten Feldgrößen in (18) in einen gemittelten und einen fluktuierenden Anteil getrennt. Die allgemein übliche Methode ist die sogenannte Reynolds-Mittelung, welche theoretisch als Zeit-, Raum-, oder Ensemblemittelung definiert werden kann. Als Beispiel definieren wir für eine beliebige Größe F den zeitgemittelten Anteil durch

$$\overline{F}(\mathbf{x},\mathbf{x}) \equiv \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_{t}^{t+T} F(\mathbf{x}) \, \partial t'.$$
(19)

Als Alternative dient die massengemittelte, bzw. Favre-gemittelte Größe

$$\tilde{F} \equiv \frac{\rho F}{\overline{\rho}}.$$
(20)

Im Fall von Strömungen mit variabler Dichte erweist sich die Favre-Mittelung als vorteilhaft, da die entstehenden Gleichungssysteme die gleiche Struktur wie im Fall konstanter Dichte aufweisen, siehe dazu (Chassaing, et al., 2002) oder (Wilcox, 1993). Die physikalische Interpretation der Gleichungen ändert sich dadurch nicht. Ist im gegebenen Problem die Dichte konstant, so sind Favre- und Reynolds-gemittelte Größen gleich. Reynolds- und Favre-gemittelte Größen können mit den folgenden rein algebraischen Relationen für beliebige Größen F und G miteinander in Beziehung gesetzt werden:

$$F = \tilde{F} + F'' = \bar{F} + F',$$

$$\overline{\rho}F'' = 0,$$

$$\overline{\tilde{F}} = \tilde{F},$$

$$\overline{F}'' = -\frac{\overline{\rho'F'}}{\overline{\rho}} = -\frac{\overline{\rho'F}}{\overline{\rho}} = -\frac{\overline{\rho'F''}}{\overline{\rho}},$$

$$\overline{\rho}F''G'' = \overline{\rho}\overline{F'G'} + \overline{\rho'F'G'} - \frac{\overline{\rho'F'}\overline{\rho'G'}}{\overline{\rho}}.$$
(21)

In den folgenden Abschnitten werden beide Arten der Mittelungen auf das System (18) angewendet, um Transportgleichung für gemittelte Größen herzuleiten.

3.1.2.1 Reynolds-gemittelte Gleichungen

Die Feldgrößen der Strömung werden wie folgt zerlegt:

$$u_{i} = \overline{u_{i}} + u_{i}',$$

$$\rho = \overline{\rho} + \rho',$$

$$\rho_{abs} = \overline{\rho}_{abs} + \rho_{abs}',$$

$$Y_{i} = \overline{Y_{i}} + Y_{i}'.$$
(22)

Einsetzen der neuen Terme in Gleichung (13) liefert

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} + \rho' \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho} \overline{u}_j + \overline{\rho} u'_j + \rho' \overline{u}_j + \rho' u'_j \right) = 0.$$
(23)

Nach Anwendung der Reynolds-Mittelung erhält man

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho} \overline{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\rho' u'_j}.$$
(24)

Die Impulserhaltungsgleichung (6) wird ähnlich transformiert. Man erhält

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\overline{u}_{i})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho}\overline{u}_{i}\overline{u}_{j})}{\partial x_{j}} = -\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho'u'_{i}}) - \frac{\partial\overline{p}_{abs}}{\partial x_{i}} + \frac{\partial}{\partial x_{j}}(\overline{\tau}_{ij}-\overline{\rho}\overline{u'_{i}u'_{j}} - \overline{u}_{i}\overline{\rho'u'_{j}} - \overline{u}_{j}\overline{\rho'u'_{i}} - \overline{\rho'u'_{i}u'_{j}}) + \overline{S}_{M.i.}$$
(25)

Schließlich ergibt sich für die Massenerhaltung der einzelnen Komponenten

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \overline{Y_{I}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho} \overline{u}_{j} \overline{Y_{I}} \right) = -\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho' Y_{I}'} \right)
+ \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(-\overline{F}_{I,j} - \overline{\rho} \overline{u_{j}' Y_{I}'} - \overline{u}_{j} \overline{\rho' Y_{I}'} - \overline{Y_{I}} \overline{\rho' u_{j}'} - \overline{\rho' u_{j}' Y_{I}'} \right) + \overline{S}_{I}.$$
(26)

Kombiniert man (24), (25) und (26), so erhält man die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen mit Skalartransport:

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho}\overline{u}_{j})}{\partial x_{j}} = -\frac{\partial}{\partial x_{j}} (\overline{\rho'u'_{j}}),$$

$$\frac{\partial (\overline{\rho}\overline{u}_{i})}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho}\overline{u}_{i}\overline{u}_{j})}{\partial x_{j}} = -\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho'u'_{i}}) - \frac{\partial \overline{\rho}_{abs}}{\partial x_{i}}$$

$$+ \frac{\partial}{\partial x_{j}} (\overline{r}_{ij} - \overline{\rho} \overline{u'_{i}u'_{j}} - \overline{u}_{j} \overline{\rho'u'_{j}} - \overline{\rho'u'_{i}u'_{j}}) + \overline{S}_{Mi},$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho}\overline{Y_{i}}) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} (\overline{\rho}\overline{u}_{j}\overline{Y_{i}}) = -\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho'Y_{i}})$$

$$+ \frac{\partial}{\partial x_{j}} (-\overline{F}_{I,j} - \overline{\rho} \overline{u'_{j}Y_{i}} - \overline{u}_{j} \overline{\rho'Y_{i}} - \overline{Y_{i}} \overline{\rho'u'_{j}} - \overline{\rho'u'_{j}Y_{i}}) + \overline{S}_{I}.$$
(27)

Auf der rechten Seite treten durch die Mittelungsprozedur neue unbekannte Terme mit statistischen Korrelationen zweiter und dritter Ordnung auf. Für die wichtigsten Terme leiten wir weitere Transportgleichungen her. Die Gleichung für die sogenannten Reynoldsspannungen lautet

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \, \overline{u'_{i} u'_{j}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\overline{\rho} \, \overline{u}_{k} \, \overline{u'_{i} u'_{j}} \right) = P_{ij} - \overline{\rho} \varepsilon_{ij} + \Pi_{ij}
- \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left[\mathcal{T}_{ijk} \right]
- D_{ij} - \mathcal{K}_{ij} - \mathcal{L}_{ij} + \overline{u'_{j} \mathcal{S}_{M.i}} + \overline{u'_{i} \mathcal{S}_{M.j}},$$
(28)

wobei

$$P_{ij} \equiv -\overline{\rho} \overline{u'_{i}u'_{k}} \frac{\partial \overline{u}_{j}}{\partial x_{k}} - \overline{\rho} \overline{u'_{j}u'_{k}} \frac{\partial \overline{u}_{i}}{\partial x_{k}},$$

$$\Pi_{ij} \equiv \overline{\rho'_{abs}} \left(\frac{\partial u'_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial u'_{j}}{\partial x_{i}} \right),$$

$$\overline{\rho} \varepsilon_{ij} \equiv \overline{\tau'_{kj}} \frac{\partial u'_{i}}{\partial x_{k}} + \tau'_{ki} \frac{\partial u'_{j}}{\partial x_{k}},$$

$$T_{ijk} \equiv +\overline{\rho} \overline{u'_{i}u'_{j}u'_{k}} + \overline{\rho'_{abs}u'_{i}} \delta_{jk} + \overline{\rho'_{abs}u'_{j}} \delta_{ik} - \left(\overline{\tau'_{kj}u'_{i}} + \overline{\tau'_{ki}u'_{j}}\right),$$

$$D_{ij} \equiv \frac{\partial}{\partial x_{k}} (\overline{\rho} u_{k}) \left(\overline{u}_{i}u'_{j} + \overline{u}_{j}u'_{i}\right),$$

$$K_{ij} \equiv \left(\frac{\partial \overline{u}_{i}}{\partial t} + \overline{u}_{k} \frac{\partial \overline{u}_{i}}{\partial x_{k}} \right) \overline{\rho' u'_{j}} + \left(\frac{\partial \overline{u}_{j}}{\partial t} + \overline{u}_{k} \frac{\partial \overline{u}_{j}}{\partial x_{k}} \right) \overline{\rho' u'_{i}},$$

$$L_{ij} \equiv \frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho' u'_{i}u'_{j}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\overline{\rho' u'_{i}u'_{j}u_{k}} \right).$$
(29)

Gleichung (28) ergibt sich durch Multiplikation der Impulsgleichung (18b) mit der fluktuierenden Geschwindigkeit u_j ' und anschließender Mittelung des Systems. Daraufhin wird die dabei entstehende Gleichung zur analogen Gleichung mit *i* und *j* vertauscht hinzuaddiert. Die Terme D_{ij} , K_{ij} und L_{ij} verschwinden im Fall konstanter Dichte.

Eine Transportgleichung für die Reynolds-gemittelte turbulente kinetische Energie

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} \tag{30}$$

ergibt sich, indem man die Spur von Gleichung (28) bildet:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} k \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho} \overline{u}_{j} k \right) = P - \overline{\rho} \varepsilon$$

$$- \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[\frac{1}{2} \overline{\rho} \overline{u'_{i} u'_{j} u'_{j}} + \overline{\rho'_{abs} u'_{j}} - \overline{r'_{ji} u'_{i}} \right]$$

$$+ \overline{\rho'_{abs}} \frac{\partial u'_{i}}{\partial x_{i}} - D - K - L + \overline{u'_{i} S_{M.i}}.$$
(31)

Hier wurden folgende Größen eingeführt:

$$P = -\overline{\rho} \overline{u'_{i}u'_{j}} \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}},$$

$$\overline{\rho} \varepsilon = \overline{r'_{ij}} \frac{\partial u'_{i}}{\partial x_{j}},$$

$$D = \overline{u'_{i}} \frac{\partial}{\partial x_{j}} (\overline{\rho} u'_{j}) \overline{u}_{i},$$

$$K = \left(\frac{\partial \overline{u}_{i}}{\partial t} + \overline{u}_{j} \frac{\partial \overline{u}_{i}}{\partial x_{j}} \right) \overline{\rho' u'_{i}},$$

$$L = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \overline{\rho' u'_{i}u'_{j}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\frac{1}{2} \overline{\rho' u'_{i}u'_{j}} \right).$$
(32)

Eine ähnliche Prozedur liefert Transportgleichungen für den sogenannten Reynoldsfluss $\overline{u'_i Y'_i}$. Man addiert Gleichung (18b) mal Y'_i und Gleichung (18c) mal u'_i und mittelt wieder anschließend. Das Resultat lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \,\overline{u'_{i}Y_{i}'} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho} \,\overline{u}_{j} \,\overline{u'_{i}Y_{i}'} \right) = P_{Y_{I,i}} - \overline{\rho} \varepsilon_{Y_{I,i}} - \Pi_{Y_{I,i}} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[\overline{\rho} \,\overline{u'_{i}u'_{j}Y_{i}'} - \overline{\tau'_{ij}Y_{i}'} + \overline{F'_{I,j}u'_{i}} \right] - K_{Y_{I,i}} - L_{Y_{I,i}} + \overline{u'_{i}S_{i}} + \overline{Y'_{i}S_{M,i}},$$
(33)

mit

$$P_{YI,i} \equiv -\overline{\rho} \overline{u'_{i}u'_{j}} \frac{\partial \overline{Y_{i}}}{\partial x_{j}} - \overline{\rho} \overline{u'_{j}Y_{i}} \frac{\partial \overline{u_{i}}}{\partial x_{j}},$$

$$\overline{\rho} \varepsilon_{YI,i} \equiv \overline{\tau'_{ij}} \frac{\partial Y_{i}'}{\partial x_{j}} - F_{i,j}' \frac{\partial u'_{i}}{\partial x_{j}},$$

$$\Pi_{YI,i} \equiv \overline{Y_{i}'} \frac{\partial \rho'_{abs}}{\partial x_{i}},$$

$$K_{YI,i} \equiv \left(\frac{\partial \overline{u_{i}}}{\partial t} + \overline{u_{j}} \frac{\partial \overline{u_{i}}}{\partial x_{j}}\right) \overline{\rho'Y_{i}'} + \left(\frac{\partial \overline{Y_{i}}}{\partial t} + \overline{u_{j}} \frac{\partial \overline{Y_{i}}}{\partial x_{j}}\right) \overline{\rho'u'_{i}},$$

$$L_{YI,i} \equiv \frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho'u'_{i}Y_{i}'}\right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho'u'_{i}u_{j}Y_{i}'}\right).$$
(34)

Zum Schluss wird noch eine Transportgleichung für die Reynolds-gemittelte skalare Varianz $\overline{Y_i'Y_i'}$ angegeben:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \overline{Y_{i}'Y_{i}'} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho} \overline{u_{j}} \overline{Y_{i}'Y_{i}'} \right) = P_{YY,I} - \overline{\rho} \varepsilon_{YY,I} - \mathcal{K}_{YY,I} - \mathcal{L}_{YY,I} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[\overline{\rho} \overline{u_{j}Y_{i}'Y_{i}'} + 2\overline{F_{I,j}'Y_{i}'} \right] + 2\overline{Y_{i}'S_{I}},$$

$$(35)$$

mit den analogen Definitionen

$$P_{YY,I} \equiv -2\overline{\rho} \overline{u'_{j}Y'_{l}} \frac{\partial Y_{I}}{\partial x_{j}}$$

$$\overline{\rho} \varepsilon_{YY,I} \equiv -2\overline{F_{I',j}} \frac{\partial Y_{I'}}{\partial x_{j}},$$

$$K_{YY,I} \equiv 2\left(\frac{\partial \overline{Y_{I}}}{\partial t} + \overline{u_{j}} \frac{\partial \overline{Y_{I}}}{\partial x_{j}}\right) \overline{\rho'Y_{I'}},$$

$$L_{YY,I} \equiv \frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho'Y_{I}'Y_{I'}}\right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho'u_{j}'Y_{I}'Y_{I}}\right).$$
(36)

3.1.2.2 Favre-gemittelte Gleichungen

Alternativ zum Vorgehen entsprechend dem vorangegangenen Abschnitts können die Strömungsgrößen auch nach folgendem Schema zerlegt werden:

$$U_{i} = \widetilde{U}_{i} + U_{i}'',$$

$$\rho = \overline{\rho} + \rho',$$

$$\rho_{abs} = \overline{\rho}_{abs} + \rho'_{abs},$$

$$Y_{i} = \widetilde{Y}_{i} + Y_{i}''.$$
(37)

Einsetzen der Zerlegung in die Massenerhaltungsgleichung (5) liefert dann

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\rho \tilde{u}_{j} + \rho u_{j}'' \right) = 0, \qquad (38)$$

Die Anwendung der Reynolds-Mittelung eliminiert den fluktuierenden Anteil der Geschwindigkeit, und so ergibt sich

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho} \widetilde{u}_j)}{\partial x_j} = 0.$$
(39)

Die Mittelung der Impulsgleichung ergibt

$$\frac{\partial \left(\overline{\rho} \widetilde{\boldsymbol{u}}_{i}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho} \widetilde{\boldsymbol{u}}_{i} \widetilde{\boldsymbol{u}}_{j}\right)}{\partial \boldsymbol{x}_{j}} = -\frac{\partial \overline{\rho}_{abs}}{\partial \boldsymbol{x}_{i}} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_{j}} \left(\overline{\boldsymbol{\tau}}_{ij} - \overline{\rho} \boldsymbol{u}_{i}^{"} \boldsymbol{u}_{j}^{"}\right) + \overline{\boldsymbol{S}}_{M.i}.$$
(40)

Analog ergibt die Mittelung der skalaren Transportgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \widetilde{Y}_{I} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_{j} \widetilde{Y}_{I} \right) = \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(-\overline{F}_{I,j} - \overline{\rho} u_{j}^{"} \overline{Y}_{I}^{"} \right) + \overline{S}_{I}.$$

$$\tag{41}$$

Indem wir (39), (40) und (41) kombinieren erhalten wir das Favre-gemittelte Navier-Stokes-System mit skalarem Transport:

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho} \widetilde{u}_{j})}{\partial x_{j}} = 0,$$

$$\frac{\partial (\overline{\rho} \widetilde{u}_{i})}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho} \widetilde{u}_{j} \widetilde{u}_{i})}{\partial x_{j}} = -\frac{\partial \overline{\rho}_{abs}}{\partial x_{i}} + \frac{\partial}{\partial x_{j}} (\overline{r}_{ij} - \overline{\rho} u_{i}'' u_{j}'') + \overline{S}_{Mi},$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho} \widetilde{Y}_{i}) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} (\overline{\rho} \widetilde{u}_{j} \widetilde{Y}_{i}) = \frac{\partial}{\partial x_{j}} (-\overline{F}_{I,j} - \overline{\rho} u_{j}'' Y_{i}'') + \overline{S}_{I}.$$
(42)

Wie zuvor sind wir ebenso an Transportgleichungen für die Korrelationen zweiter Ordnung interessiert. Zuerst behandeln wir die Gleichung für die "Favre-Spannungen" $\overline{\rho u_i' u_j'}$. Man erhält

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \, \overline{\frac{\rho u_{i}^{"} u_{j}^{"}}{\overline{\rho}}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\overline{\rho} \, \widetilde{u}_{k}^{"} \, \overline{\frac{\rho u_{i}^{"} u_{j}^{"}}{\overline{\rho}}} \right) = \hat{P}_{ij} - \overline{\rho} \, \hat{\varepsilon}_{ij} + \hat{\Pi}_{ij} - \frac{\partial}{\partial x_{k}} \, \hat{T}_{ijk} + \hat{\Sigma}_{ij} + \overline{S}_{M.i} \, u_{j}^{"} + \overline{S}_{M.j} \, u_{i}^{"},$$

$$(43)$$

wobei

$$\hat{P}_{ij} \equiv -\overline{\rho} \frac{\overline{\rho u_i'' u_k''}}{\overline{\rho}} \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_k} - \overline{\rho} \frac{\overline{\rho u_j'' u_k''}}{\overline{\rho}} \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_k},$$

$$\overline{\rho} \hat{\varepsilon}_{ij} \equiv \overline{r'_{jk}} \frac{\partial u_i''}{\partial x_k} + r'_{ik} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k},$$

$$\hat{\Pi}_{ij} \equiv \overline{\rho'_{abs}} \left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial x_i} \right),$$

$$\hat{\tau}_{ijk} \equiv \overline{\rho u_i'' u_j'' u_k''} + \overline{\rho'_{abs}} u_i'' \delta_{jk} + \overline{\rho'_{abs}} u_j'' \delta_{ik} - \overline{r'_{jk}} u_i'' - \overline{r'_{ik}} u_j''}$$

$$\hat{\Sigma}_{ij} \equiv \overline{u_i'} \left(\frac{\partial \overline{\tau}_{jk}}{\partial x_k} - \frac{\partial \overline{\rho}_{abs}}{\partial x_j} \right) + \overline{u_j''} \left(\frac{\partial \overline{\tau}_{ik}}{\partial x_k} - \frac{\partial \overline{\rho}_{abs}}{\partial x_j} \right).$$
(44)

Gleichung (43) entsteht durch Multiplikation von (18b) mit u_i'' und anschließender Mittelung. Das Resultat wird auf die analoge Gleichung mit i und j vertauscht addiert. Eine wichtige Beobachtung ist, dass beim Vorgehen mit Favre-Mittelung die durch Schwerkraft entstehenden Quellterme in der Impulsgleichung identisch verschwinden: \overline{S}

$$\overline{S_{M,i}u_j''} + \overline{S_{M,j}u_i''} = g_i \overline{\rho u_j''} + g_j \overline{\rho u_i''} = 0.$$
⁽⁴⁵⁾

Eine Transportgleichung für Favre-gemittelte turbulente kinetische Energie

$$\overline{\rho}\hat{k} = \frac{1}{2}\overline{\rho}u_{j}''u_{j}'' \tag{46}$$

erhält man wiederum durch Verjüngung der Indizes in (43):

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \hat{k} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_{j} \hat{k} \right) = \hat{P} - \overline{\rho} \hat{\varepsilon} + \rho_{abs}' \frac{\partial u_{i}''}{\partial x_{i}}
- \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[\frac{1}{2} \overline{\rho u_{i}'' u_{i}'' u_{j}''} + \overline{\rho_{abs}' u_{j}''} - \overline{\tau_{ij}' u_{i}''} \right]
+ \overline{u_{i}''} \left(\frac{\partial \overline{\tau}_{ij}}{\partial x_{j}} - \frac{\partial \overline{\rho}_{abs}}{\partial x_{i}} \right) + \overline{S_{M,i} u_{i}''}.$$
(47)

Hier wurden folgende Produktions- und Dissipationsraten eingeführt:

$$\hat{P} \equiv -\overline{\rho} \frac{\rho u_i'' u_j''}{\overline{\rho}} \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j},$$

$$\overline{\rho} \hat{\varepsilon} \equiv \overline{\tau_{ij}' \frac{\partial u_i''}{\partial x_j}}.$$
(48)

Die Gleichung für den "Favrefluss" $\overline{\rho u_{i}'' Y_{i}''}$.erhält man, indem (18b) mal Y_{i}'' und (18c) mal u_i'' zusammenaddiert und gemittelt werden. Das Resultat lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \, \frac{\overline{\rho u_{j}'' Y_{l}''}}{\overline{\rho}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho} \, \widetilde{u}_{j} \, \frac{\overline{\rho u_{j}'' Y_{l}''}}{\overline{\rho}} \right) = \hat{P}_{Y,I,j} - \overline{\rho} \hat{\varepsilon}_{Y,I,j} - \hat{\Pi}_{Y,I,j} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \hat{T}_{Y,I,j} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \hat{T}_{Y,I,j}$$

$$+ \hat{\Sigma}_{Y,I,j} + \overline{Y_{l}'' S_{M,j}} + \overline{u_{l}'' S_{l}}$$

$$(49)$$

mit

$$\hat{P}_{Y,I,i} \equiv -\overline{\rho} \frac{\overline{\rho u_{i}^{"} u_{j}^{"}}}{\overline{\rho}} \frac{\partial \widetilde{Y}_{i}}{\partial x_{j}} - \overline{\rho} \frac{\overline{\rho u_{j}^{"} Y_{i}^{"}}}{\overline{\rho}} \frac{\partial \widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j}},$$

$$\overline{\rho} \hat{\varepsilon}_{Y,I,i} \equiv \overline{r_{ij}^{'}} \frac{\partial Y_{i}^{"}}{\partial x_{j}} - F_{I,j}^{'} \frac{\partial u_{i}^{"}}{\partial x_{j}},$$

$$\hat{\Pi}_{Y,I,i} \equiv -\overline{\rho_{abs}^{'}} \frac{\partial Y_{i}^{"}}{\partial x_{i}},$$

$$\hat{T}_{Y,I,ij} \equiv \overline{\rho u_{i}^{"} u_{j}^{"} Y_{i}^{"}} + \overline{\rho_{abs}^{'} Y_{i}^{"}} \delta_{ij} - \overline{r_{ij}^{'} Y_{i}^{"}} + \overline{F_{I,j}^{'} u_{i}^{"}},$$

$$\hat{\Sigma}_{Y,I,i} \equiv \overline{Y_{i}^{"}} \left(\frac{\partial \overline{r}_{ij}}{\partial x_{j}} - \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_{i}} \right) - \overline{u_{i}^{"}} \frac{\partial \overline{F}_{I,j}}{\partial x_{j}}.$$
(50)

Wie vorhin verschwinden Korrelationen zwischen Konzentrations- und Schwerkrafttermen. Als letzte Gleichung dieses Abschnitts wird noch die Transportgleichung der Favregemittelten skalaren Varianz $\overline{\rho Y_i^n Y_i^n}$ präsentiert:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \, \overline{\frac{\rho Y_{I}' Y_{I}''}{\overline{\rho}}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_{j} \, \overline{\frac{\rho Y_{I}' Y_{I}''}{\overline{\rho}}} \right) = \hat{P}_{YYJ} - \overline{\rho} \hat{\varepsilon}_{YYJ} - \overline{\rho} \hat{\varepsilon}_{YYJ} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \hat{\varepsilon}_{YYJ} + \hat{\Sigma}_{YYJ},$$
(51)

mit

$$\hat{P}_{YY,I} \equiv -2\overline{\rho} \, \overline{\frac{\rho u_{j}'Y_{l}''}{\overline{\rho}}} \frac{\partial \widetilde{Y_{l}}}{\partial x_{j}},$$

$$\overline{\rho} \hat{\varepsilon}_{YY,I} \equiv -2\overline{F_{I,j}'} \frac{\partial Y_{l}''}{\partial x_{j}},$$

$$\hat{T}_{YY,I,j} \equiv \overline{\rho u_{j}''Y_{l}''Y_{l}''} + 2\overline{F_{I,j}'Y_{l}''},$$

$$\hat{\Sigma}_{YY,I} \equiv -2\overline{Y_{l}''} \frac{\partial \overline{F_{I,j}}}{\partial x_{j}}.$$
(52)

3.1.3 Modellierung von Dichteschwankungen

Aufgrund der variablen Dichte treten in den Gleichungen des Abschnitts 3.1.2 eine Reihe neuer Terme auf, welche es in einem Turbulenzmodell zu schließen gilt. Dieser Abschnitt soll einige Methoden vorstellen. Hintergründe sind teilweise in (Chassaing, et al., 1982) zu finden.

In ANSYS CFX wird die Dichte eines Einphasen-Einkomponenten-Fluides durch eine Zustandsgleichung der Form

$$\boldsymbol{\rho} \equiv \boldsymbol{\rho} \; \boldsymbol{\wp}_{abs}, \boldsymbol{T} \; \boldsymbol{)} \; , \tag{53}$$

gegeben, dabei ist p_{abs} der Druck und T die Temperatur. Im aktuellen Projekt werden auch Mehrkomponentenfluide behandelt. Die übliche Modellierung besteht in der Annahme, dass die Komponenten eine ideale Mischung bilden. Dieses wird im Folgenden stets beibehalten. Die Zustandsgleichung für die Dichte der Mischung lautet nun

$$\frac{1}{\rho} \equiv \sum_{I=1}^{L} \frac{Y_I}{\langle \rho_I \rangle} = \sum_{I=1}^{L-1} \frac{Y_I}{\langle \rho_I \rangle} + \frac{1 - \sum_{I=1}^{L-1} Y_I}{\langle \rho_L \rangle},$$
(54)

mit den Massenbrüchen Y_1 und den "thermodynamischen Dichten"

$$\left\langle \boldsymbol{\rho}_{I} \right\rangle \equiv \frac{M_{I}}{V_{I}}.$$
(55)

Dabei ist M_1 die Masse der Komponente I, welche sich in einem gegebenen Volumen aufhält, während V_1 das *partielle Volumen* der Komponente I darstellt. Letzteres ist definiert als dasjenige Volumen, welche die Komponente bei der lokalen Temperatur und Dichte der Mischung als reines Fluid einnehmen würde. In **ANSYS CFX** werden die thermodynamischen Dichten durch eine Zustandsgleichung der Form (53) für die gegebene Komponente definiert. Wir können (54) wie folgt umschreiben:

$$\boldsymbol{\rho} = \sum_{I=1}^{L-1} \left[1 - \frac{\langle \boldsymbol{\rho}_L \rangle}{\langle \boldsymbol{\rho}_I \rangle} \right] \boldsymbol{\rho} \boldsymbol{Y}_I + \langle \boldsymbol{\rho}_L \rangle.$$
(56)

Nach Wahl eines konstanten Referenzzustandes

$$p_{abs.ref}, \ T_{ref}, \ Y_{1.ref} = 0, \ \dots, \ Y_{L-1.ref} = 0, \langle \rho_I \rangle_{ref} \equiv \langle \rho_I \rangle \langle \rho_{abs.ref}, T_{ref} \rangle , \rho_{ref} \equiv \rho \langle \rho_{abs.ref}, T_{ref}, Y_{1.ref} = 0, \dots, Y_{L-1.ref} = 0 \rangle = \langle \rho_L \rangle_{ref},$$

$$(57)$$

kann die Dichteformel wir folgt approximiert werden:

$$\rho = \sum_{I=1}^{L-1} \left[1 - \frac{\langle \rho_L \rangle}{\langle \rho_I \rangle} \right] \rho Y_I + \langle \rho_L \rangle$$

$$\approx \sum_{I=1}^{L-1} \left[1 - \frac{\langle \rho_L \rangle_{ref}}{\langle \rho_I \rangle_{ref}} \right] \rho Y_I + \langle \rho_L \rangle_{ref} + \left[\frac{\partial \langle \rho_L \rangle}{\partial T} \right]_{ref} (T - T_{ref})$$

$$= -\sum_{I=1}^{L-1} \alpha_I \rho Y_I + \rho_{ref} - \beta_L \rho (T - T_{ref})$$
(58)

wobei

$$\beta_{L} = -\frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial \langle \rho_{L} \rangle}{\partial T} \right]_{ref}$$
 thermaler Ausdehnung skoeffizient,

$$\alpha_{I} = \frac{\langle \rho_{L} \rangle_{ref}}{\langle \rho_{I} \rangle_{ref}} - 1 = \frac{\rho_{ref}}{\langle \rho_{I} \rangle_{ref}} - 1 = \frac{m_{L}}{m_{I}} - 1$$
 Ausdehnung skoeffizient durch (59)
Konzentrationsunterschiede.

Im Fall des Koeffizienten α_1 benutzen wir die molare Masse, da diese in ANSYS CFX. leicht als Materialparameter zugänglich ist. Dichteschwankungen, die durch Druckschwankungen bedingt sind, werden zum aktuellen Zeitpunkt vernachlässigt.

Im Folgenden behandeln wir beide Koeffizienten in Gleichung (59) als Konstanten. Ein wichtiger Punkt ist, dass Gleichung (58) im wichtigen Fall einer isothermen und isobaren idealen Mischung exakt ist.

Wir bilden nun das Reynolds-Mittel von Gleichung (58) und ziehen es von (58) ab. Zurück bleibt folgende Gleichung für Dichtefluktuationen:

$$\rho' \approx -\sum_{l=1}^{L-1} \alpha_l \left(\rho Y_l - \overline{\rho} \widetilde{Y}_l \right) - \beta_L \left(\rho T - \overline{\rho} \widetilde{T} - \rho' T_{ref} \right)$$
$$= -\sum_{l=1}^{L-1} \alpha_l \left(\rho Y_l'' + \rho' \widetilde{Y}_l \right) - \beta_L \left(\rho T'' + \rho' \widetilde{T} - \rho' T_{ref} \right)$$
(60)

Durch Einsetzen der Reynolds-gemittelten Gleichung (58) und Umformung erhält man die einfache Dichteschwankungsrelation

$$\rho' \approx \frac{\overline{\rho}}{\rho_{ref}} \left(-\sum_{l=1}^{L-1} \alpha_l \, \rho Y_l'' - \beta_L \rho T'' \right). \tag{61}$$

Diese kann nun ausgenutzt werden, um die folgenden Terme zu modellieren:

$$\overline{u_{i}''} = -\frac{\overline{\rho' u_{i}''}}{\overline{\rho}} \approx \frac{\overline{\rho}}{\rho_{ref}} \left(\sum_{l=1}^{L-1} \alpha_{l} \frac{\overline{\rho u_{i}'' Y_{l}''}}{\overline{\rho}} + \beta_{L} \frac{\overline{\rho u_{i}' T''}}{\overline{\rho}} \right),$$

$$\overline{Y_{m}''} = -\frac{\overline{\rho' Y_{m}''}}{\overline{\rho}} \approx \frac{\overline{\rho}}{\rho_{ref}} \left(\sum_{l=1}^{L-1} \alpha_{l} \frac{\overline{\rho Y_{m}'' Y_{l}''}}{\overline{\rho}} + \beta_{L} \frac{\overline{\rho Y_{m}'' T''}}{\overline{\rho}} \right),$$

$$\overline{T''} = -\frac{\overline{\rho' T''}}{\overline{\rho}} \approx \frac{\overline{\rho}}{\rho_{ref}} \left(\sum_{l=1}^{L-1} \alpha_{l} \frac{\overline{\rho T'' Y_{l}''}}{\overline{\rho}} + \beta_{L} \frac{\overline{\rho T'' T''}}{\overline{\rho}} \right).$$
(62)

In den folgenden zwei wichtigen Fällen

- Einkomponentenströmung mit konstanter Dichte und Wärmetransport
- Ideale Mischung mit konstanter Temperatur und Dichte

kann Gleichung (62) benutzt werden, um gemittelte Favre-Schwankungsterme durch bekannte Größen zu ersetzen und Turbulenzmodelle zu schließen.

3.1.4 Übersicht der Turbulenzmodelle in ANSYS CFX

ANSYS CFX stellt eine Reihe von Turbulenzmodellen zur Verfügung. Im aktuellen Projekt sind dazu einzelne Komponenten neu implementiert worden. Die folgende Auflistung stellt einen Überblick dar.

- **RANS-basierte Modellierung**: Diesen Methoden liegt der gemeinsame Ansatz zugrunde, dass die Reynolds- oder Favre-gemittelten Strömungsgleichungen (27) bzw. (42) gelöst werden. Sie unterscheiden sich in den Strategien zur Modellierung unbekannter Terme. Im aktuellen Projekt unterscheiden wir folgende Klassen:
 - Wirbelviskositätsmodelle: Die Modellierung der noch offenen Terme in den gemittelten Gleichungen (27) bzw. (42) geschieht im Wesentlichen durch Berechnung lokaler charakteristischer Skalen der Turbulenz, etwa turbulente kinetische Energie und turbulente Längen- bzw. Zeitskala. Man unterscheidet Modelle der Zahl diese oft anhand zusätzlich eingesetzter Transportgleichungen. Im aktuellen Projekt von besonderem Interesse ist das SST-Modell von Menter, (Menter, 1994), welches zwei zusätzliche Transportgleichungen für die turbulente kinetische Energie k und die turbulente Wirbelfrequenz ω löst.
 - Differentielle Zweite-Momenten-Modelle: Die Modellierung offener Terme in den gemittelten Gleichungen (27) bzw. (42) geschieht durch das Lösen kompletter Transportgleichungen für die statistischen Momente zweiter Ordnung. Da im Projekt Strömungen mit passivem oder aktivem Skalartransport im Vordergrund stehen, sind dieses die Gleichungen für Reynoldsspannungen (28) bzw. (43) und Reynoldsflüsse (33) bzw. (49). Zusätzlich wird auch hier eine Gleichung für eine turbulente Längen- oder Zeitskala gelöst. Der Aufwand in der Modellierung verschiebt sich dabei auf eine Modellierung der Transportgleichung für die statistischen Momente zweiter Ordnung. Gleichungen wie die Relation (62) können für die durch Dichteschwankungen zusätzlich auftretenden Terme benutzt werden. Von Interesse im aktuellen Projekt ist eine Turbulenzmodellierungs-Strategie, welche aus folgenden Komponenten besteht:
 - Reynoldsspannungen und Längen-/Zeitskala: Wahlweise LRR-IP (Launder, Reece, and Rodi-Isotropization of Production), SSG (Speziale, Sarkar, Gatski) oder Baseline-Reynoldspannungsmodell in ANSYS CFX
 - Reynoldsflüsse: Modellierung der turbulenten Wärmeflüsse nach (Lechner, 2003) bzw. Konzentrationsflüsse nach (Chassaing, et al., 2002)
 - **Explizite Algebraische Zweite-Momenten-Modelle**: Dieser sehr neue Ansatz vereinfacht die differentiellen Transportgleichungsmodelle für die Momente zweiter Ordnung zu expliziten algebraischen Relationen nach einer

etablierten Prozedur. Die Einsparung an Rechenaufwand muss gegen den möglichen Verlust an Genauigkeit aufgewogen werden. Aktuelle Ansätze gehen auf (Wallin, et al., 2000) und (Hellsten, 2004) zurück.

- Skalenaufgelöste und hybride Modellierung: Diese Methoden unterscheiden sich von den RANS-Modellen prinzipiell dadurch, dass der modellierte Bereich an turbulenten Zeit- und Längenskalen auf die kleinen Skalen eingeschränkt wird. Große Zeit- und Längenskalen der Turbulenz werden durch diese Methoden aufgelöst. Dadurch reduziert sich der Aufwand und die Unsicherheit in der Modellierung, zum Preis erhöhten Speicher- und Rechenaufwands für die Simulation. Wir unterscheiden LES und hybride Methoden (DES, SAS).
 - LES: Für diese Methoden werden die exakten Strömungsgleichungen (18) gefiltert, um den Bereich an Zeit- und Längenskalen einzuschränken, welcher in der numerischen Methode aufgelöst werden muss. Dieser Ansatz ist konzeptuell völlig anders als Reynolds- bzw. Favre-Mittelung. Details zur LES-Modellierung sind in (ANSYS Inc., 2010) nachzulesen.
 - Hybride Methoden (DES, SAS): Da die komplette Modellierung mittels LES in vielen Situationen zu kostspielig ist, greift man auf eine Kombination der RANS- und LES-Ansätze zurück. Die in diesem Projekt angestrebte Verbesserung der Modellierung von Turbulenz zusammen mit Dichte bezieht sich auf RANS-Auftriebseffekten, bzw. variabler Modellierung, und kann damit auch für die hybriden Methoden verwendet werden.

3.1.5 Turbulenzmodellierung für auftriebsbehaftete Strömungen

In diesem Abschnitt präsentieren wir den aktuellen Stand der Turbulenzmodellierung für auftriebsbehaftete Strömungen in **ANSYS CFX** Version 12.1, sowie im Rahmen dieses Projektes neu entwickelte Ansätze. Wir konzentrieren uns dabei hauptsächlich auf zwei Fälle:

- Isotherme, isobare Mehrkomponentenströmung
- Einkomponentenströmung mit Wärmetransport

In der Literatur für Turbulenzmodelle werden Dichteschwankungen häufig vernachlässigt, bzw. im Rahmen der Boussinesq-Näherung nur in ihrer Interaktion mit Schwerkraft berücksichtigt. Für viele physikalische Strömungen, auch im Rahmen des aktuellen Projekts, erscheint diese Näherung allerdings ungerechtfertigt. Entsprechend werden Turbulenzmodelle in der Literatur häufig auf der Basis der Reynolds-gemittelten Strömungsgleichungen, siehe Abschnitt 3.1.2.1, entwickelt. So müssen beispielsweise implementierte differentielle Reynoldsspannungs-Modelle in **ANSYS CFX** als angenäherte Transportgleichungen für die physikalischen Größen

$$\overline{u'_{i}u'_{j}} \text{ und } \varepsilon = \frac{1}{2}\varepsilon_{kk} = \frac{1}{\overline{\rho}}\overline{r'_{ki}\frac{\partial u'_{j}}{\partial x_{k}}}, \tag{63}$$

wie sie etwa in Gleichung (28) auftreten, gedeutet werden. Wir werden uns im Gegensatz dazu auf die Favre-gemittelten Gleichungen beziehen und diese als Grundlage der Modellierung benutzen. Die vergleichbaren Größen, die es nun beispielsweise zu modellieren gilt, sind daher

$$\frac{\overline{\rho u_i^{"} u_j^{"}}}{\overline{\rho}} \operatorname{und} \hat{\varepsilon} = \frac{1}{2} \hat{\varepsilon}_{kk} = \frac{1}{\overline{\rho}} \overline{r_{ki}^{'}} \frac{\partial u_i^{"}}{\partial x_k}, \qquad (64)$$

welche in Gleichung (43) auftreten. Ebenso werden wir als mittlere Geschwindigkeit, Druck oder Konzentration stets die Favre-gemittelten Größen benutzen, deren Transport durch (42) beschrieben wird:

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho} \widetilde{u}_{j})}{\partial x_{j}} = 0,$$

$$\frac{\partial (\overline{\rho} \widetilde{u}_{i})}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho} \widetilde{u}_{j} \widetilde{u}_{i})}{\partial x_{j}} = -\frac{\partial \overline{\rho}_{abs}}{\partial x_{i}} + \frac{\partial}{\partial x_{j}} (\overline{r}_{ij} - \overline{\rho} u_{i}'' u_{j}'') + \overline{S}_{M.i}, \qquad (65)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho} \widetilde{Y}_{i}) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} (\overline{\rho} \widetilde{u}_{j} \widetilde{Y}_{i}) = \frac{\partial}{\partial x_{j}} (-\overline{F}_{I.j} - \overline{\rho} u_{j}'' \overline{Y}_{i}'') + \overline{S}_{I}.$$

Dabei werden molekulare Diffusionsterme wie folgt modelliert:

$$\bar{\tau}_{ij} \approx \bar{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{u}_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial \tilde{u}_{j}}{\partial x_{i}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_{k}}{\partial x_{k}} \right),$$

$$\bar{\mu} : \text{ gegebene Funktion von } \bar{T}, \tilde{Y}_{1}, \dots, \tilde{Y}_{L-1},$$

$$\bar{F}_{I.j} \equiv -\bar{\rho} D_{I} \frac{\partial \tilde{Y}_{I}}{\partial x_{j}}, \quad (\text{keine Summation "uber } I !)$$

$$D_{I} : \text{ gegebene konstante kinematische Diffusion.}$$
(66)

Die Volumenkraft ist für die betrachteten Auftriebsströmungen die Schwerkraft, es wird ferner angenommen, dass keine chemischen Reaktionen stattfinden. Wie in **ANSYS CFX** üblich, wird die Druckvariable bei Auftriebsströmungen umdefiniert, um den hydrostatischen Anteil zu eliminieren:

$$\begin{aligned} \rho_{stat} (\mathbf{x}, t) &\equiv \rho_{abs} (\mathbf{x}, t) - \rho_{ref} - \rho_{ref} g_k (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{ref, k}), \\ S_{M,i} &\equiv \rho g_i, \\ S_i &\equiv 0. \end{aligned}$$
 (67a-c)

Die Konstante ρ_{ref} wird in diesem Zusammenhang in ANSYS CFX als *buoyancy reference density* bezeichnet, und kann vom Benutzer frei gewählt werden. Allerdings wählen wir hier zur Vereinfachung stets den Wert, welcher als Referenzdichte in Gleichung (57) dient.

3.1.6 Auftriebsmodellierung für Wirbelviskositäts-Modelle

Das SST-Modell (Menter, 1994) ist im aktuellen Projekt das Zwei-Gleichungs-Wirbelviskositätsmodell der Wahl. Zur besseren Übersicht geben wir hier die SST-Modellgleichungen im Fall variabler Dichte an:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \hat{k} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_{j} \hat{k} \right) = \hat{P}_{k} - \beta \overline{\rho} \hat{k} \hat{\omega} + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[\left(\overline{\mu} + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{k,3}} \right) \frac{\partial \hat{k}}{\partial x_{j}} \right] + \hat{P}_{k,b},$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \hat{\omega} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_{j} \hat{\omega} \right) = \alpha_{3} \frac{\hat{\omega}}{\hat{k}} \hat{P}_{k} - \beta_{3} \overline{\rho} \hat{\omega}^{2}$$

$$+ \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[\left(\overline{\mu} + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{\omega,3}} \right) \frac{\partial \hat{\omega}}{\partial x_{j}} \right] + (1 - F_{1}) \frac{2\overline{\rho}}{\sigma_{\omega,2} \hat{\omega}} \frac{\partial \hat{k}}{\partial x_{j}} \frac{\partial \hat{\omega}}{\partial x_{j}} + \hat{P}_{\omega,b},$$

$$\mu_{t} = \frac{a_{1} \overline{\rho} \hat{k}}{\max (a_{1} \hat{\omega}, \hat{S} F_{2})}, \quad \hat{S} \equiv \sqrt{2 \hat{S}_{ij} \hat{S}_{ij}}, \quad \hat{S}_{ij} \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial \widetilde{u}_{j}}{\partial x_{i}} \right),$$

$$\hat{P}_{k} = 2 \mu_{t} \frac{\partial \widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j}} \hat{S}_{ij} - \frac{2}{3} \frac{\partial \widetilde{u}_{k}}{\partial x_{k}} \left(3 \mu_{t} \frac{\partial \widetilde{u}_{k}}{\partial x_{k}} + \overline{\rho} \hat{k} \right),$$

$$\hat{P}_{k,b} \equiv -\frac{\mu_{t}}{\overline{\rho} \sigma_{\rho}} g_{i} \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_{i}}, \quad \hat{P}_{\omega,b} = \hat{P}_{\omega,b} (\hat{P}_{k,b}),$$
Konstanten: $\beta', \sigma_{k,3}, \alpha_{3}, \beta_{3}, \sigma_{\omega,2}, \sigma_{\omega,3}, a_{1}, \sigma_{\rho}$

$$(68)$$

Beim SST-Modell, und allgemeiner bei allen Wirbelviskositätsmodellen, wird im Falle von Mehrkomponentenströmungen die gemittelte Transportgleichung für die Konzentration (41) durch einen *Eddy-Diffusivity*-Ansatz geschlossen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \widetilde{Y}_{I} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_{j} \widetilde{Y}_{I} \right) = \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(-\overline{F}_{I,j} + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{t}} \frac{\partial \widetilde{Y}_{I}}{\partial x_{j}} \right) + \overline{S}_{I}, \qquad (69)$$

Konstante : $\sigma_{t} \approx 1.$

Analoges gilt für den Fall von Energietransport in der Strömung.

Das SST-Modell teilt die Strömung in zwei Bereiche auf, der erste Bereich ist die Freiströmung, in welcher das SST-Modell als k- ε -Modell wirkt, der zweite Bereich sind die Wandgrenzschichten, in denen das SST-Modell als k- ω -Modell wirkt. Die Terme F_1 und F_2 sind vom Wandabstand abhängig und wirken als Schalter um Teile des Modells zwischen beiden Bereichen umzuschalten. Konstanten mit Index 3 werden ebenfalls mittels F_1 zwischen den $k - \varepsilon$ – und $k - \omega$ – Werten interpoliert. Weitere Variationen in der Definition der turbulenten Viskosität, etwa Begrenzungsfaktoren und Krümmungskorrekturen sind ebenfalls einstellbar. Im aktuellen Projekt von Interesse ist die Produktion turbulenter kinetischer Energie durch Auftriebskräfte:

$$\hat{P}_{k.b} \equiv -\frac{\mu_t}{\overline{\rho}\sigma_{\rho}} g_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i},$$

$$\hat{P}_{\omega.b} = \hat{P}_{\omega.b} \hat{P}_{k.b})$$
(70a,b)

Für die Auftriebsproduktion der ω -Gleichung $\hat{P}_{\omega,b}$ sind verschiedene Einstellungen möglich, auf die hier nicht weiter eingegangen wird, da mangels Erfahrung mit passenden Testfällen die Form dieses Terms im aktuellen Projekt nicht verändert wurde. Die Auftriebsproduktion der k-Gleichung $\hat{P}_{k,b}$ ist somit im Fall variabler Dichte des Fluides proportional zur Schwerebeschleunigung g_i und zum Gradient der mittleren Dichte. Der Parameter σ_{ρ} ist eine turbulente Schmidtzahl für Dichte und besitzt den Standardwert 1.0. Die physikalische Deutung der Auftriebsproduktion ist, dass bei stabil geschichteter Strömung (Schwerkraftvektor parallel zum Dichtegradienten) die Produktion turbulenter kinetischer Energie unterdrückt wird, und umgekehrt.

3.1.6.1 Neuentwicklungen für Wirbelviskositäts-Modelle

Die Definition (70a) kann als Modell der folgenden Terme aus der exakten Transportgleichung (47) für die turbulente kinetische Energie aufgefasst werden:

$$\hat{P}_{k.b} \approx \overline{u_i''} \left(\frac{\partial \overline{r}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{\rho}_{abs}}{\partial x_i} \right) + \overline{S_{M.i} u_i''}$$
(71a,b)

In unserem Fall ist Schwerkraft als Volumenkraft $S_{M,i}$ anzunehmen, siehe Gleichung (67b), und der zweite Term verschwindet, siehe Gleichung (45). Vernachlässigen wir viskose Effekte in der Modellierung und benutzen wir die Zerlegung des Drucks in hydrostatischen und dynamischen Anteil, Gleichung (67a), so erhalten wir

$$\hat{P}_{k.b} \approx \overline{u_i''} \left(\frac{\partial \overline{r}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{\rho}_{abs}}{\partial x_i} \right) + \overline{S_{M.i} u_i''} \approx -\overline{u_i''} \frac{\partial \overline{\rho}_{abs}}{\partial x_i}$$

$$= -\overline{u_i''} \left(\frac{\partial \overline{\rho}_{stat}}{\partial x_i} + \rho_{ref} g_i \right).$$
(72a,b)

Die letzte Gleichung verdeutlicht, dass Auftriebseffekte nicht allein durch Schwerkraft, sondern auch durch starke Druckgradienten (etwa in einer Zentrifuge) entstehen können. Die gemittelte Favre-Fluktuation muss nun noch modelliert werden. Der einfachste Ansatz ist eine Gradientenhypothese für den Druck:

$$-\overline{\rho}\overline{u_i''} = \overline{u_i'\rho'} \approx -\frac{\mu_t}{\overline{\rho}\sigma_{\rho}}\frac{\partial\overline{\rho}}{\partial x_i}$$
(73)

Unter der Annahme, dass Schwankungen des statischen Drucks gegenüber dem hydrostatischen Gradienten sowie die Differenz zwischen Referenzdichte und gemittelter Dichte vernachlässigt werden können, lässt sich mit der Gradientenhypothese (73) die in **ANSYS CFX** 12.0 vorhandene Auftriebsproduktion herleiten:

$$\hat{P}_{k.b} \approx -\overline{u_i''} \rho_{ref} g_i = \frac{u_i' \rho'}{\overline{\rho}} \rho_{ref} g_i$$

$$\approx -\frac{\mu_t}{\overline{\rho}^2 \sigma_{\rho}} \rho_{ref} g_i \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_i} \approx -\frac{\mu_t}{\overline{\rho} \sigma_{\rho}} g_i \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_i}.$$
(74)

Alternativ zur Gradientenhypothese lassen sich die Relationen (62) ausnutzen. Ebenso kann auf die anderen Annahmen in (74) verzichtet werden. Als Resultat erhalten wir eine neue Formulierung der Auftriebsproduktion:

$$\hat{P}_{k.b.NEU-VOLL} \approx \overline{u}_{i}^{"} \left(\frac{\partial \overline{r}_{ij}}{\partial x_{j}} - \frac{\partial \overline{\rho}_{abs}}{\partial x_{i}} \right) + \overline{S_{M.i}} u_{i}^{"} \approx -\overline{u}_{i}^{"} \frac{\partial \overline{\rho}_{abs}}{\partial x_{i}} = -\overline{u}_{i}^{"} \left(\frac{\partial \overline{\rho}_{stat}}{\partial x_{i}} + \rho_{ref} g_{i} \right) \approx -\frac{\overline{\rho}}{\rho_{ref}} \left(\sum_{l=1}^{L-1} \alpha_{l} \frac{\overline{\rho} u_{i}^{"} Y_{l}^{"}}{\overline{\rho}} + \beta_{L} \frac{\overline{\rho} u_{i}^{"} T^{"}}{\overline{\rho}} \right) \left(\frac{\partial \overline{\rho}_{stat}}{\partial x_{i}} + \rho_{ref} g_{i} \right).$$
(75)

Offensichtlich ist die neue Formulierung deutlich komplizierter, und es ist zu erwarten, dass der Druckgradient wegen der zusätzlichen Kopplung die Stabilität der resultierenden Gleichungssysteme negativ beeinflussen kann. Als Gewinn erhält man aus den turbulenten Skalarflüssen, sofern sie aus dem Turbulenzmodell verfügbar sind, detailliertere Information über die Druckschwankungen. Im Fall des SST-Modells stehen die Skalarflüsse nicht als direkte Ausgabegröße zur Verfügung. Die vorgeschlagene und in der angepassten ANSYS CFX-Version implementierte Verbesserung des SST-Modells sieht daher folgenden Kompromiss zwischen der Druckschwankungs-Gradientenhypothese und der verbesserten Körperkraftmodellierung vor:

$$\hat{P}_{k.b.NEU} \approx -\overline{u_i''} \left(\frac{\partial \overline{\rho}_{stat}}{\partial x_i} + \rho_{ref} g_i \right) \\ \approx -\frac{\mu_t}{\overline{\rho}^2 \sigma_{\rho}} \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \overline{\rho}_{stat}}{\partial x_i} + \rho_{ref} g_i \right).$$
(76)

3.1.7 Auftriebsmodellierung mit Reynoldsspannungs-Turbulenzmodellen

In diesem Abschnitt präsentieren wir den bisherigen Zustand sowie die Neuentwicklungen der Auftriebsmodellierung für die Klasse der Reynoldsspannungsmodelle in **ANSYS CFX** 12.0. Wie bereits oben erläutert, bezieht sich der Großteil der Literatur zur Turbulenzmodellierung auf den Fall von vernachlässigbaren Dichteschwankungen und nutzt daher die Reynolds-gemittelten Gleichungen (28) als Grundlage.

Laut (Chassaing, et al., 2002) ist es im Fall von Ein- oder Mehrkomponentenströmung kleiner Machzahl prinzipiell gerechtfertigt, eine ähnliche Modellierungsstrategie wie für den Fall konstanter Dichte für diejenigen Terme in Gleichung (43) zu benutzen, die ein analoges Gegenstück in Gleichung (28) besitzen. Das betrifft insbesondere die Terme für turbulente Diffusion, Dissipation sowie die Druck-Scher-Korrelation. Offen ist damit noch die Modellierung jener Terme, die erst durch Dichtefluktuationen auftreten, etwa $\hat{\Sigma}_{ii}$,

Die neuen Entwicklungen im Rahmen dieses Projekts werden am Beispiel des einfachen ε – basierten *Launder-Reece-Rodi-Isotropization of Production*- (LRR-IP-) Modells dargestellt. In der Fassung für Favre-gemittelte Größen lautet dieses:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \, \overline{\frac{\rho u_{i}^{\prime\prime} u_{j}^{\prime\prime}}{\overline{\rho}}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_{k}^{\prime} \, \overline{\frac{\rho u_{i}^{\prime\prime} u_{j}^{\prime\prime}}{\overline{\rho}}} \right) = \hat{P}_{ij} + \hat{P}_{b,ij} + \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left[\left(\overline{\mu} + \frac{2}{3} \mu_{t} \right) \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\overline{\frac{\rho u_{i}^{\prime\prime} u_{j}^{\prime\prime}}{\overline{\rho}} \right) \right]
- \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{\rho} \hat{\varepsilon} - C_{i} \overline{\rho} \, \frac{\hat{\varepsilon}}{\hat{k}} \left(\overline{\frac{\rho u_{i}^{\prime\prime} u_{j}^{\prime\prime}}{\overline{\rho}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \hat{k} \right) - C_{2} \left(\hat{P}_{ij} - \frac{2}{3} \hat{P}_{kk} \delta_{ij} \right),
\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho} \hat{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_{k}} (\overline{\rho} \widetilde{u}_{k} \hat{\varepsilon}) = \frac{\hat{\varepsilon}}{\hat{k}} \left(C_{\varepsilon.1} \left(\hat{P} + \hat{P}_{b.\varepsilon} \right) - C_{\varepsilon.2} \overline{\rho} \hat{\varepsilon} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left[\left(\overline{\mu} + \frac{2}{3} \, \frac{\mu_{t}}{\sigma_{\varepsilon.RS}} \right) \frac{\partial \hat{\varepsilon}}{\partial x_{k}} \right]
\mu_{t} = C_{S} \, \frac{\overline{\rho} \hat{k}^{2}}{\hat{\varepsilon}}, \quad \hat{k} = \frac{1}{2} \, \frac{\overline{\rho} u_{k}^{\prime\prime} u_{k}^{\prime\prime}}{\overline{\rho}},
\hat{P}_{ij} = -\overline{\rho} \, \frac{\overline{\rho} u_{i}^{\prime\prime} u_{j}^{\prime\prime}}{\overline{\rho}} \frac{\partial \widetilde{u}_{j}}{\partial x_{k}} - \overline{\rho} \, \frac{\overline{\rho} u_{j}^{\prime\prime} u_{k}^{\prime\prime}}{\overline{\rho}} \frac{\partial \widetilde{u}_{j}}{\partial x_{k}}, \quad \hat{P} = \frac{1}{2} \, \hat{P}_{kk},
\hat{P}_{b.ij} = B_{ij} - C_{buo} \left(B_{ij} - \frac{1}{3} B_{kk} \delta_{ij} \right), \quad B_{ij} = g_{i} \overline{u_{j}} \rho' + g_{j} \overline{u_{j}} \rho',
\hat{P}_{b.\varepsilon} = \hat{P}_{b.\varepsilon} \, \hat{P}_{b.ij} \right)
Konstanten C_{S}, C_{1}, C_{2}, C_{\varepsilon.1}, C_{\varepsilon.2}, C_{buo}, \sigma_{\varepsilon.RS}$$
(77)

falls isotrope turbulente Diffusion in den Gleichungen benutzt wird. Die Modellierung des Terms B_{ij} , ist noch nicht vollständig beschrieben. In ANSYS CFX 12.1 wird dieser Term im Fall variabler Dichte analog zu Gleichung (73) mit der Gradientenhypothese für Dichte modelliert, d.h.

$$B_{ij} \equiv \overline{u'_i \rho'} g_j + \overline{u'_j \rho'} g_i \approx -\frac{\mu_t}{\overline{\rho} \sigma_{\rho}} \left(\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_i} g_j + \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_j} g_j \right).$$
(78)

3.1.7.1 Neuentwicklungen für Reynoldsspannungs-Modelle

Wir gehen im Folgenden etwas näher auf die Herleitung des Terms $\hat{P}_{b,ij}$ ein, um die Neuentwicklungen zu motivieren. Für den Fall konstanter Dichte siehe dazu auch (Launder, 1989).

Der erste Term B_{ij} in der Definition

$$\hat{P}_{b,ij} \equiv B_{ij} - C_{buo} \left(B_{ij} - \frac{1}{3} B_{kk} \delta_{ij} \right)$$
(79)

bezieht sich auf die direkte Turbulenzproduktion durch Auftriebskräfte und ist ein Modell des Terms $\hat{\Sigma}_{ij}$ in Gleichung (43). Analog zur obigen Herleitung für die Auftriebs-Turbulenzproduktion im SST-Modell erhalten wir:

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{ij} \equiv \overline{\boldsymbol{u}}_{i}^{\prime\prime} \left(\frac{\partial \overline{\boldsymbol{\tau}}_{jk}}{\partial \boldsymbol{x}_{k}} - \frac{\partial \overline{\boldsymbol{\rho}}_{abs}}{\partial \boldsymbol{x}_{j}} \right) + \overline{\boldsymbol{u}}_{j}^{\prime\prime} \left(\frac{\partial \overline{\boldsymbol{\tau}}_{ik}}{\partial \boldsymbol{x}_{k}} - \frac{\partial \overline{\boldsymbol{\rho}}_{abs}}{\partial \boldsymbol{x}_{i}} \right) \\
\approx -\overline{\boldsymbol{u}}_{i}^{\prime\prime} \left(\frac{\partial \overline{\boldsymbol{\rho}}_{stat}}{\partial \boldsymbol{x}_{j}} + \boldsymbol{\rho}_{ref} \boldsymbol{g}_{j} \right) - \overline{\boldsymbol{u}}_{j}^{\prime\prime} \left(\frac{\partial \overline{\boldsymbol{\rho}}_{stat}}{\partial \boldsymbol{x}_{i}} + \boldsymbol{\rho}_{ref} \boldsymbol{g}_{i} \right) \\
\approx \overline{\boldsymbol{u}}_{i}^{\prime} \overline{\boldsymbol{\rho}}^{\prime} \boldsymbol{g}_{i} + \overline{\boldsymbol{u}}_{i}^{\prime} \overline{\boldsymbol{\rho}}^{\prime} \boldsymbol{g}_{i} = \boldsymbol{B}_{ii},$$
(80)

wobei wiederum die Schwankung des statistischen Drucks und der Unterschied zwischen mittlerem Druck und Referenzdruck vernachlässigt wurde. Der zweite Term in Gleichung (79) besitzt keine Spur und trägt damit nicht zum Gesamtniveau der turbulenten kinetischen Energie bei, sondern bewirkt allein eine Umverteilung zwischen den Komponenten des Favre-Spannungstensor. Dieser indirekte Term tritt durch die Standard-Modellierung der Druck-Scher-Korrelation $\hat{\Pi}_{ij}$ in Gleichung (43) auf, wobei die Druckschwankungen mittels einer Poissongleichung für den exakten Druck durch Geschwindigkeitsschwankungen ersetzt werden.

Wie bereits im Fall der Wirbelviskositäts-Modelle sind zwei Verbesserungen der Modellierung möglich:

- Verzicht auf die Approximationen in Gleichung (80)
- Verbesserung der Modellierung des turbulenten Massenflusses $-\overline{\rho}\overline{u''_i} = \overline{u'_i\rho'}$

Die weiterentwickelte Version von ANSYS CFX enthält folgenden Auftriebsterm:

$$\hat{P}_{b.NEU,ij} \equiv B_{NEU,ij} - C_{buo} \left(B_{NEU,ij} - \frac{1}{3} B_{NEU,kk} \overline{\delta}_{ij} \right),$$

$$B_{NEU,ij} \equiv \frac{\overline{u'_i \rho'}}{\overline{\rho}} \left(\frac{\partial \overline{\rho}_{stat}}{\partial x_j} + \rho_{ref} g_j \right) + \frac{\overline{u'_j \rho'}}{\overline{\rho}} \left(\frac{\partial \overline{\rho}_{stat}}{\partial x_i} + \rho_{ref} g_j \right).$$
(81)

Die turbulenten Massenflussterme können ihrerseits wie bisher nach Gleichung (73) modelliert werden, oder, bei vorhandener Information über die turbulenten Skalarflüsse, nach Gleichung (62). Letzteres Vorgehen bietet sich bei einer vollständigen differentiellen Modellierung zweiter Ordnung an, in der sowohl turbulente Spannung wie auch turbulente Skalarflüsse mittels eigenen Transportgleichungen beschrieben werden.

3.1.8 Differentielles Wärmeflussmodell für Strömungen mit thermisch induziertem Auftrieb

In (Lechner, 2003) wird die Implementierung eines differentiellen Modells für den Transport des turbulenten Wärmeflusses sowie der Enthalpie-Varianz beschrieben. Dieses Modell besitzt Beta-Status und kann in **ANSYS CFX** 12.1 auf der CCL-Ebene aktiviert werden. Wir bezeichnen dieses Modell als *Turbulent Heat Flux*-Modell (THF-Modell).

Ausgehend von der exakten Gleichung (17) können zu (49) und (51) analoge Gleichung für turbulenten Wärmefluss und Enthalpie-Varianz hergeleitet werden.

Das Resultat lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \, \overline{\frac{\rho u_{i}^{"} h^{"}}{\overline{\rho}}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho} \, \widetilde{u}_{j} \, \overline{\frac{\rho u_{i}^{"} h^{"}}{\overline{\rho}}} \right) = \hat{P}_{\theta.i} - \overline{\rho} \hat{\varepsilon}_{\theta.i} - \hat{\Pi}_{\theta.i} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \hat{T}_{\theta.ij} + \hat{\Sigma}_{\theta.i} + \overline{h^{"} S_{M.i}} + \overline{u_{i}^{"} S_{E}}$$
(82)

_

mit

$$\hat{P}_{\theta,i} = -\overline{\rho} \frac{\overline{\rho u_i'' u_j''}}{\overline{\rho}} \frac{\partial \widetilde{h}}{\partial x_j} - \overline{\rho} \frac{\overline{\rho u_j'' h''}}{\overline{\rho}} \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j},$$

$$\overline{\rho} \hat{\varepsilon}_{\theta,i} \equiv \overline{r_{ij}'} \frac{\partial h''}{\partial x_j} - q_j' \frac{\partial u_i''}{\partial x_j},$$

$$\hat{\Pi}_{\theta,i} \equiv -\overline{\rho'} \frac{\partial h''}{\partial x_i},$$

$$\hat{T}_{\theta,ij} \equiv \overline{\rho u_i'' u_j' h''} + \overline{\rho' h''} \delta_{ij} - \overline{r_{ij}' h''} + \overline{q_j' u_i''},$$

$$\hat{\Sigma}_{\theta,i} \equiv \overline{h''} \left(\frac{\partial \overline{r}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_i} \right) - \overline{u_i''} \frac{\partial \overline{q}_j}{\partial x_j}.$$
(83)

Die Enthalpievarianz wird durch folgende Gleichung beschrieben:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \, \overline{\frac{\rho h'' h''}{\overline{\rho}}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho} \, \widetilde{\mathcal{U}}_j \, \overline{\frac{\rho h'' h''}{\overline{\rho}}} \right) = \hat{\mathcal{P}}_{\theta\theta} - \overline{\rho} \, \hat{\mathcal{E}}_{\theta\theta} - \frac{\partial}{\partial x_j} + \hat{\mathcal{E}}_{\theta\theta}, \tag{84}$$

mit

$$\hat{P}_{\theta\theta} \equiv -2\overline{\rho} \, \frac{\overline{\rho u_j'' h''}}{\overline{\rho}} \frac{\partial \widetilde{h}}{\partial x_j},$$

$$\overline{\rho} \hat{\varepsilon}_{\theta\theta} \equiv -2\overline{q_j'} \frac{\partial h''}{\partial x_j},$$

$$\hat{T}_{\theta\theta,j} \equiv \overline{\rho u_j' h'' h''} + 2\overline{q_j' h''},$$

$$\hat{\Sigma}_{\theta\theta} \equiv -2\overline{h''} \frac{\partial \overline{q}_j}{\partial x_j}.$$
(85)

Wir gehen im Folgenden von Strömung ohne interne Wärmequellen aus, d.h. $S_E = 0$. Das implementierte Modell, geeignet für Strömungen mit geringen Dichtefluktuationen und Auftrieb lautet

$$\begin{split} \frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \, \overline{\frac{\rho u_{i}^{"} h^{"}}{\overline{\rho}}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_{j}^{"} \, \overline{\frac{\rho u_{i}^{"} h^{"}}{\overline{\rho}}} \right) = \hat{P}_{\theta,i} + \hat{P}_{b,\theta,i} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\left(\overline{\mu} + \frac{2}{3} C_{\theta} \, \frac{\hat{k}^{2}}{\hat{\epsilon}} \, \overline{\rho} \right) \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\frac{\rho u_{i}^{"} h^{"}}{\overline{\rho}}} \right) \right) \\ &- C_{1\theta} \overline{\rho} \, \frac{\hat{\epsilon}}{\hat{k}} \, \overline{\frac{\rho u_{i}^{"} h^{"}}{\overline{\rho}}} - C_{2\theta} \overline{\rho} \, \overline{\frac{\rho u_{j}^{"} h^{"}}{\overline{\rho}}} \frac{\partial \widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j}} \\ &- C_{4\theta} \overline{\rho} \, \overline{\frac{\rho u_{i}^{"} h^{"}}{\overline{\rho}}} - C_{2\theta} \overline{\rho} \, \overline{\frac{\rho u_{i}^{"} h^{"}}{\overline{\rho}}} \frac{\partial \widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j}} \\ &+ \frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \, \overline{\frac{\rho h^{"} h^{"}}{\overline{\rho}}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_{j} \, \overline{\frac{\rho h^{"} h^{"}}{\overline{\rho}}} \right) = \hat{P}_{\theta\theta} - 2 C_{1\theta\theta} \overline{\rho} \, \frac{\hat{\epsilon}}{\hat{k}} \, \overline{\frac{\rho h^{"} h^{"}}{\overline{\rho}}} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[\left(\overline{\mu} + \frac{2}{3} C_{\theta\theta} \, \frac{\hat{k}^{2}}{\hat{\epsilon}} \, \overline{\rho} \right) \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\frac{\rho h^{"} h^{"}}{\overline{\rho}}} \right) \right] \\ \hat{P}_{b,\theta,i} = -(1 - C_{3\theta}) \overline{\rho} \, \frac{\beta}{C_{\rho}} \, \overline{\frac{\rho h^{"} h^{"}}{\overline{\rho}}} g_{i}, \\ \text{Konstanten}: \ C_{\theta}, C_{1\theta}, C_{2\theta}, C_{3\theta}, C_{4\theta}, C_{\theta\theta}, \sigma_{1\theta\theta}. \end{split}$$

In der letzten Gleichung tritt der thermale Ausdehnungskoeffizient β aus Gleichung (59), sowie die spezifische Wärmekapazität c_{ρ} auf. Als Randbedingung an Wänden mit Haftbedingung wird der Gradient des turbulenten Wärmeflusses gleich Null gesetzt.

3.1.8.1 Neuentwicklungen für das THF-Modell

Der Produktionsterm $\hat{P}_{b,\theta,i}$ im turbulenten Wärmeflussmodell (86) besteht auch hier aus einem direkten und einem indirekten Anteil, letzter bedingt durch die Modellierung der Druck-Enthalpiegradient-Wechselwirkung $\hat{\Pi}_{\theta,i}$ in Gleichung (82). Der direkte Anteil entsteht durch die Modellierung von $\hat{\Sigma}_{\theta,i}$. Für eine Einkomponenten-Strömung gilt etwa

$$\hat{\Sigma}_{\theta,i} \equiv \overline{h''} \left(\frac{\partial \overline{r}_{ij}}{\partial x_{i}} - \frac{\partial \overline{\rho}_{abs}}{\partial x_{i}} \right) + \overline{u''_{i}} \frac{\partial \overline{q}_{j}}{\partial x_{j}}$$

$$\approx -\overline{h''} \left(\frac{\partial \overline{\rho}_{stat}}{\partial x_{i}} + \rho_{ref} g_{i} \right) \approx -\overline{h''} \rho_{ref} g_{i}$$

$$\approx -\frac{\overline{\rho}}{c_{\rho} \rho_{ref}} \left(\beta \frac{\overline{\rho h'' h''}}{\overline{\rho}} \right) \rho_{ref} g_{i}.$$
(87)

Hierbei wurde Gleichung (62) für die gemittelte Temperaturschwankung eingesetzt. Nach $h'' = c_{\rho}T''$ kann die Temperaturschwankung schließlich in eine Enthalpieschwankung
übersetzt werden. Im aktuellen Projekt wurde als Erweiterung die Schwankung des statischen Drucks in den Auftriebsterm übernommen, somit:

$$\hat{P}_{b.NEU.\theta.i} \equiv -\frac{\overline{\rho}}{c_{\rho}\rho_{ref}} \left(\beta \frac{\overline{\rho h'' h''}}{\overline{\rho}}\right) \left(\frac{\partial \overline{\rho}_{stat}}{\partial x_{i}} + \rho_{ref}g_{i}\right).$$
(88)

3.1.9 Differentielles Skalarflussmodell für Strömungen mit Konzentrationsinduziertem Auftrieb

Im Rahmen dieses Projekts wurde das komplette Modell (86) für den turbulenten Wärmefluss und Enthalpievarianz in ein analoges Modell für den turbulenten Skalarfluss und Skalarvarianz, beschrieben durch die exakten Transportgleichungen (49) bzw. (51), übertragen. Eine Beschreibung eines derartigen differentiellen Transportmodells zusammen mit experimenteller Validierung findet sich etwa bei (Chassaing, et al., 1982).

Alle Konstanten wurden aus dem THF-Modell in einem ersten Schritt beibehalten. Das resultierende Modell wird im Folgenden als *Turbulent Scalar Flux*-Modell (TSF-Modell) bezeichnet, und lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \, \overline{\frac{\rho u_{i}^{\eta} Y_{i}^{\eta}}{\rho}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_{j} \, \overline{\frac{\rho u_{i}^{\eta} Y_{i}^{\eta}}{\rho}} \right) = \hat{P}_{Y,I,I} + \hat{P}_{b,Y,I,I} + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\left(\overline{\mu} + \frac{2}{3} C_{Y} \, \frac{\hat{k}^{2}}{\hat{\epsilon}} \, \overline{\rho} \right) \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\frac{\rho u_{i}^{\eta} Y_{i}^{\eta}}{\rho}} \right) \right) \\
- C_{IV} \overline{\rho} \, \frac{\hat{\epsilon}}{\hat{k}} \, \overline{\frac{\rho u_{i}^{\eta} Y_{i}^{\eta}}{\rho}} - C_{2V} \overline{\rho} \, \overline{\frac{\rho u_{i}^{\eta} Y_{i}^{\eta}}{\rho}} \frac{\partial \widetilde{u}_{j}}{\partial x_{j}} \\
- C_{4V} \overline{\rho} \, \overline{\frac{\rho u_{i}^{\eta} Y_{i}^{\eta}}{\rho}} \frac{\partial \widetilde{u}_{j}}{\partial x_{j}}, \\
\hat{P}_{b,Y,I,I} \equiv -(1 - C_{3V}) \, \overline{\frac{\rho}{\rho_{ref}}} \, a_{I} \, \overline{\frac{\rho Y_{i} Y_{i}^{\eta}}{\rho}} \left(\frac{\partial \overline{\rho}_{stat}}{\partial x_{i}} + \rho_{ref} g_{i} \right), \\
\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho} \, \overline{\frac{\rho Y_{i} Y_{i}^{\eta}}{\rho}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_{j} \, \overline{\frac{\rho Y_{i} Y_{i}^{\eta}}{\rho}} \right) = \hat{P}_{YV,I} \\
+ \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[\left(\overline{\mu} + \frac{2}{3} C_{VY} \, \frac{\hat{k}^{2}}{\hat{\epsilon}} \, \overline{\rho} \right) \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\frac{\rho Y_{i} Y_{i}^{\eta}}{\rho}} \right) \right] \\
- 2 C_{\eta V} \overline{\rho} \, \frac{\hat{\epsilon}}{\hat{k}} \, \overline{\frac{\rho Y_{i} Y_{i}^{\eta}}{\rho}}, \tag{89} \\
\text{Konstanten: } C_{V}, C_{VV}, C_{2V}, C_{2V}, C_{2V}, C_{VV}, \sigma_{VV}.$$

Die Modellierung des Auftriebsterms erfolgt wiederum mittels Gleichung (62). Korrelationen zwischen den Konzentrationen verschiedener Spezies, etwa $\overline{\rho Y''_m Y''_n}$ wurden dabei vernachlässigt. Wir verzichten an dieser Stelle auf eine genaue Herleitung. Als Randbedingung an Wänden mit Haftbedingung werden auch hier die Gradienten des turbulenten Wärmeskalarflusses gleich Null gesetzt.

3.1.10 Auftriebsmodellierung für skalenauflösende Turbulenzmodelle (DES, SAS)

Wie in Abschnitt 3.1.4 beschrieben, sind im aktuellen Projekt auch Verbesserungen für den RANS-Anteil der hybriden skalenauflösendenen Turbulenzmodelle implementiert worden. Wir konzentrieren uns im Folgenden auf das SAS-SST-Modell, siehe (Menter, et al., 2005) und (Egorov, et al., 2008).

Das SAS-SST-Modell ist eine verbesserte instationäre RANS-Formulierung, welche unter instabilen Strömungsbedingungen die Auflösung des turbulenten Energie-Spektrums erlaubt. Praktisch gesehen besteht das Modell aus dem SST-Modell, mit einem zusätzlichen Quellterm in der Gleichung der turbulenten Wirbelfrequenz ω :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\hat{k}) + \frac{\partial}{\partial x_{j}}(\overline{\rho}\widetilde{u}_{j}\hat{k}) = \hat{P}_{k} - \beta'\overline{\rho}\hat{k}\hat{\omega} + \frac{\partial}{\partial x_{j}}\left[\left(\overline{\mu} + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{k,3}}\right)\frac{\partial\hat{k}}{\partial x_{j}}\right] + \hat{P}_{k,b}, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\hat{\omega}) + \frac{\partial}{\partial x_{j}}(\overline{\rho}\widetilde{u}_{j}\hat{\omega}) = \alpha_{3}\frac{\hat{\omega}}{\hat{k}}\hat{P}_{k} - \beta_{3}\overline{\rho}\hat{\omega}^{2} \\ + Q_{SAS} + \frac{\partial}{\partial x_{j}}\left[\left(\overline{\mu} + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{\omega,3}}\right)\frac{\partial\hat{\omega}}{\partial x_{j}}\right] + (1 - F_{1})\frac{2\overline{\rho}}{\sigma_{\omega,2}\hat{\omega}}\frac{\partial\hat{k}}{\partial x_{j}}\frac{\partial\hat{\omega}}{\partial x_{j}} + \hat{P}_{\omega,b}, \\ Q_{SAS} = \max\left[\overline{\rho}\zeta_{2}\kappa\hat{S}^{2}\left(\frac{L}{L_{\nu K}}\right)^{2} - C_{SAS}\frac{2\overline{\rho}\hat{k}}{\sigma_{\Phi}}\max\left(\frac{1}{\hat{\omega}^{2}}\frac{\partial\hat{\omega}}{\partial x_{j}}\frac{\partial\hat{\omega}}{\partial x_{j}}, \frac{1}{\hat{k}^{2}}\frac{\partial\hat{k}}{\partial x_{j}}\frac{\partial\hat{k}}{\partial x_{j}}\right), 0\right], \quad (90)$$

$$L = \frac{\hat{k}^{1/2}}{C_{\mu}^{-1/4}\hat{\omega}}, \quad L_{\nu K} = \frac{\kappa\hat{S}}{\left[\sum_{i}\left(\frac{\partial^{2}\widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j}^{2}}\right)^{2}\right]^{1/2}}$$

Neue Konstanten im Vergleich zu SST: κ, ζ_2, C_{SAS}

Weitere Varianten, als *high wave number damping* bezeichnet, sind verfügbar, mittels derer die Definition des von-Karman-Längenmassstab $L_{\nu\kappa}$ angepasst werden kann. Für dieses Projekt wurde die verbesserte Definition der Auftriebsproduktion $\hat{P}_{k,b}$ aus Abschnitt 3.1.6.1 implementiert:

$$\hat{P}_{k.b.NEU} \equiv -\frac{\mu_t}{\overline{\rho}^2 \sigma_{\rho}} \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \overline{\rho}_{stat}}{\partial x_i} + \rho_{ref} g_i \right).$$
(91)

4 Modell-Validierung und Vergleich mit experimentellen Daten

Die neu entwickelten Turbulenzmodelle wurden im vorherigen Kapitel von ihrer Herleitung her theoretisch erläutert. Im Rahmen des aktuellen Projektes gibt es daraus resultierend die folgenden Neuentwicklungen in **ANSYS CFX**:

- Implementierung der differentiellen Transportmodelle für turbulenten Skalarfluss und dessen Variation nach Gleichung (89) zusammen mit passenden Anfangs- und Randbedingungen.
- Implementierung neuer Beziehungen für die Produktion turbulenter kinetischer Energie durch Auftrieb. Diese Implementierung erfolgte getrennt für Wirbelviskositäts-Modelle, Gleichung (76), und für Reynoldsspannungs-Modelle, Gleichung (81). Durch den modularen Aufbau des Codes von ANSYS CFX können skalenauflösende Methoden wie DES oder SAS automatisch die neu entwickelten Beziehungen ebenfalls verwenden.

Die Turbulenzmodelle in ANSYS CFX wurden des Weiteren im Rahmen des vorliegenden Forschungsvorhabens einer intensiven Validierung unterzogen. Hierfür wurden seitens der Becker Technologies GmbH vier Versuchsreihen in der ThAI⁴ - Versuchseinrichtung ausgeführt, die im halbindustriellen Maßstab Strömungsverhältnisse im Sicherheitseinschluss von Kernreaktoren unter Laborbedingungen nachstellen und deren experimentelle Untersuchung gestatten:

• TH-18 – Impulsgetriebene, instationäre und turbulente Strömung in komplexen Geometrien

• TH-20 – Instationäre, turbulente Mehrkomponentenströmungen mit Auftriebseffekten auf Grund von Dichteunterschieden verschiedener Gase/Fluide

• TH-21 – Instationäre, turbulente Ein- und Mehrkomponentenströmungen mit temperaturbedingten Auftriebseffekten

TH-22 – Auflösung einer Leichtgasschicht durch turbulente Ein- und Mehrkomponentenströmungen mit temperaturbedingten Auftriebseffekten

Über diese Testfälle und Experimente an der ThAI-Anlage hinaus wurden im Rahmen des Forschungsvorhabens noch weitere Testfälle herangezogen, da für eine Erstvalidierung und Modellentwicklung von Turbulenzmodellen deutlich einfachere und auch von der Meßtechnik her deutlich besser instrumentierte Versuche im Labormaßstab benötigt werden, für die umfangreiche Meßwerte für Turbulenzgrößen zur Verfügung stehen. Diese Testfälle wurden der internationalen Fachliteratur entnommen. Im Folgenden wird auf die Modellvalidierung anhand dieser Testfälle detailliert eingegangen.

⁴ ThAI – Thermohydraulics, Aerosols and Iodines; Versuchseinrichtung der Becker Technologies GmbH für die Nachbildung und experimentelle Untersuchung von Strömungsverhältnissen im Sicherheitseinschluss von Kernreaktoren

4.1 Die Anwendung von CFD Best Practice Guidelines

Als Grundlage für CFD-Best Practice Guidelines dienen (Menter, et al., 2002) sowie (Casey, 2000). Da die wesentliche Zielsetzung im aktuellen Projekt die Erstellung neuer Turbulenzmodelle in **ANSYS CFX** ist, wurden neben der theoretischen Modell-Entwicklung und -Implementierung auch Verifikations-, Validierungs- und Dokumentationsarbeiten ausgeführt.

Verifikation bedeutet hier die genaue Überprüfung, dass ein neu erzeugter Programmcode für ein physikalisches Modell das tut, wozu er entworfen wurde. Kurz gesagt: die entwickelten Gleichungen werden mathematisch und numerisch richtig gelöst. Unsere Strategie im aktuellen Projekt umfasst die folgenden Punkte:

- Überprüfung des Quellcodes durch andere Entwickler. Beim sogenannten "Walkthrough" wird der Code von einem erfahrenen **ANSYS CFX**-Entwickler vom Urheber des Programmcodes Zeile für Zeile erläutert und resultierende Kommentare und Verbesserungsvorschläge werden eingearbeitet.
- Erstellung einfacher Verifikationstestfälle. Diese dienen in erster Hinsicht der Überprüfung, dass der erzeugte Programmcode für sehr einfache und in ihrer strömungsmechanischen Lösung vorhersehbare Testfälle eine physikalisch plausible Antwort liefert. In Ausnahmefällen ist es auch möglich, Verifikationstestfälle mit einer überprüfbaren analytischen Lösung zu konstruieren. Für Verifikationstestfälle muss der Code auch bei Parameteränderungen die vorhersehbare Veränderung des berechneten Strömungsergebnisses liefern. Konkret wurden hierzu erstellt:
 - Vergleich der vom Code erzeugten diskreten Lösung mit einer analytischen Lösung der partiellen Differentialgleichung (89). Durch sukzessive Verfeinerung des Testgitters konnte die Konvergenz der diskreten Lösung gegen die exakte Lösung nachgewiesen werden.
 - Testfall zum direkten Vergleich der Modelle (86) und (89) für turbulenten Wärme- bzw. Skalartransport. Durch spezielle Wahl von thermodynamischen Eigenschaften, Materialdichten sowie numerischen Parametern können zwei Testfälle definiert werden, die zu numerisch gleichen Werten für Wärme- bzw. Skalarfluss führen. Die theoretische Grundlage dafür ist, dass das *Thermal Energy Model* in ANSYS CFX mathematisch analog zum Skalartransport ist, siehe Gleichungen (17) und (13). Auch hier lieferte der Code die erwarteten Ergebnisse.
 - Testfall für Coriolisterme. In rotierenden Bezugssystemen treten die Coriolisterme in der Impulsgleichung auf. Dieser Testfall dient zur Demonstration, dass die Resultate des Modells nicht vom Bezugssystem abhängen. Auch dieser Test verlief erfolgreich.

Validierung bedeutet hier und im Weiteren die Überprüfung, ob die Resultate der Simulation mit experimentellen Resultaten gut übereinstimmen. Die entwickelten Gleichungen sind zunächst lediglich ein mathematisches Modell für abzubildende physikalische Vorgänge. Die Validierung anhand von experimentellen Daten weist nach, dass das entwickelte und implementierte mathematische Modell auch tatsächlich die richtigen Gleichungen löst, um die Realität des zu beschreibenden Strömungsvorgangs genau abzubilden. Diese Aufgabe ist bei weitem die Schwierigste. Fehler, welche durch numerische Einflüsse entstehen, etwa Raum- und Zeit-Diskretisierungsfehler, Iterationsfehler sowie Rundungsfehler, müssen dafür kontrolliert, quantifiziert und zuvor nach Möglichkeit aus der numerischen Lösung des CFD-Gleichungssystems eliminiert werden, so dass im Vergleich zum Experiment idealerweise nur noch der Modellfehler festgestellt wird. Weitere mögliche Fehlerquellen, etwa durch Benutzer verursachte Anwendungsfehler, werden durch Präsentation, Erfahrungsaustausch, Dokumentation und Diskussion von Ergebnissen zwischen den Projektpartnern im CFD-Verbund Kernraktorsicherheitsforschung kontrolliert. Selbstverständlich sind beim CFD-Experiment-Vergleich letztlich auch die Genauigkeit der angewendeten Messverfahren und mögliche Unsicherheiten in den Anfangs- und Randbedingungen der Experimente (Wiederholbarkeit der Experimente und mögliche systematische Fehler) in Betracht zu ziehen, entziehen sich aber häufig der genaueren Quantifizierung durch den CFD-Anwender, sofern nicht zusammen mit den experimentellen Daten veröffentlicht.

Im aktuellen Projekt wurden zur Modellvalidierung eine Reihe einfacher Testfälle mit gut dokumentierten experimentellen Daten herangezogen. Nach Möglichkeit werden verschiedene physikalische Phänomene dabei getrennt behandelt, etwa Strömungen mit/ohne Auftrieb, Strömungen mit/ohne große Dichteunterschiede, Strömungen mit Stoff- bzw. Wärmetransport, Wandeffekten oder Freistrahlen, etc. Die vorhandenen Testfälle, die zur Modellvalidierung der Literatur entnommen wurden, werden in diesem Kapitel erläutert. Neben den einfachen Testfällen gibt es bereits eingangs erwähnten ThAI-Experimente, welche von der Firma Becker Technologies in Absprache mit den Projektpartnern geplant und durchgeführt wurden, siehe (Kanzleiter, et al., 2007), (Fischer, et al., 2007) sowie (Kanzleiter, et al., 2007). Diese Experimente dienen weniger zur Analyse und Kalibrierung physikalischer Modelle als vielmehr zur Demonstration der Leistungsfähigkeit der fertigen Programm-Module für strömungsmechanische Untersuchungen, die in ihrer Komplexität nahe an der beabsichtigten Anwendung der CFD-Methoden für Strömungen im Sicherheitseinschlußbehälter von Kernkraftwerken sind. Ziel der ThAI-Experimente ist es, physikalische Prozesse während eines Störfalls in einem Reaktor-Sicherheitseinschluss in einem kleineren Maßstab nachzubilden, der einer labortechnischen und meßtechnischen Untersuchung zugänglich ist. Im Rahmen dieses Projektes wurden die Experimentserien TH-18, TH-20 sowie TH-21/TH-22 untersucht.

Alle Simulationstestfälle, ob zur Verifikation, Validierung oder als Demonstrations-Testfall ausgeführt, sind in einem standardisierten Format archiviert, das alle erzeugten Gitternetze, CFD-Setups und das Post-Processing beinhaltet und sofern realisierbar auch automatische, Skript-gesteuerte Rechnung und Auswertung der Ergebnisse erlaubt. Auf diese Weise wurden die für die Simulationen verwendeten physikalischen Modelle, der verwendete Programmcode und die Testfälle sorgfältig dokumentiert.

4.2 Impulsgetriebene Strömungen

In der ersten Projektphase wurden die Untersuchungen auf rein impulsgetriebene Strömungen ohne Stoff- und Wärmetransport beschränkt. In dieser Projektphase wurde keine wesentliche Neuentwicklung von Turbulenzmodellen angestrebt. Vielmehr ging es um eine Validierung der in ANSYS CFX vorhandenen Turbulenzmodelle und um den Nachweis, dass diese in der Lage sind, die Ergebnisse des Testfalls TH-18 mit akzeptabler Genauigkeit vorherzusagen.

4.2.1 Der TH-18 Testfall

Die Details zum Versuchsaufbau und Instrumentierung von TH-18 sind im Fachbericht (Fischer, et al., 2007) dokumentiert. Wir präsentieren hier eine kurze Zusammenfassung, sowie die Details der numerischen Simulationen.



Abbildung 1: Links: Übersicht des ThAI-Versuchsbehälters. Rechts: Vertikaler Schnitt durch den ThAI-Behälter, Lage des Gebläses und der Meßpositionen von LDA, PIV, Anemometer und Differenzdrucksensor.

4.2.1.1 Beschreibung der ThAI-Versuchseinrichtung

Die ThAI-Versuchseinrichtung dient zur Nachbildung der Vorgänge in Reaktor-Sicherheitseinschlüssen im kleinen Maßstab. Sie befindet sich auf dem Gelände der Firma Becker Technologies in Eschborn. Die Hauptkomponente ist ein druckfester zylindrischer Stahlbehälter mit einer Höhe von 9,2 m und einem Durchmesser von 3,2 m. Das Innenvolumen beträgt 60 m³. Im Innenbereich befindet sich ein offener Innenzylinder auf Stützen, welcher den Behälter in einen Innenraum sowie einen Ringraum trennt. Für TH-18 enthält der Innenraum ein Gebläse mit gekapseltem Elektromotor. Weitere Einbauten sind umlaufende Kondensatrinnen im oberen Plenumsbereich, sowie im äußeren Ringraum auf der Höhe 4,0 m Kondensatwannen, die bis auf zwei spezifizierte Durchbrüche den oberen Behälterteil vom unteren abschließen. Abbildung 1 links zeigt eine Übersicht des Behälters.

4.2.1.2 Experimentelle Versuchsbedingungen von TH-18

Beim Versuch TH-18 wird mit das Gebläse im Innenzylinder mit einer geregelten Drehfrequenz von 40 Hz betrieben. Der Behälter ist dabei mit Luft unter Normalbedingungen (T=22 °C, p=1 bar) gefüllt. Zur Vermeidung eines vom Lüfter möglicherweise erzeugten Dralls in der Strömung wurden ein Strömungsgleichrichter und zusätzliche Leitbleche über dem Gebläse angebracht. Die Strömungsgeschwindigkeit wird dabei mit LDA⁵, PIV⁶ und zwei Flügelradanemometern gemessen, siehe Abbildung 1 rechts. Ebenso wird die Druckdifferenz oberhalb und unterhalb der großen Kondensatwannen gemessen. LDA-Geschwindigkeitsdaten existieren für eindimensionale Profile zu den Höhen 3,5 m und 4.9 m an der Winkelposition D (135°). Im oberen Plenumsbereich liegen darüber hinaus zweidimensionale PIV-Daten vor.

Die Kondensatwannen schließen im Versuch TH-18 den gesamten Ringraum bis auf zwei Öffnungen ab. Im Experiment wurden zwei Konfigurationen untersucht, bezeichnet durch H_klein_groß_D bzw. H_groß_klein_D, siehe Abb. 2. Um von einer Konfiguration zur anderen zu wechseln wurden die Kondensatwannen vertauscht. Die Asymmetrie im Verhältnis der Flächeninhalte der Öffnungen zwischen beiden Konfigurationen werden von den Experimentatoren durch Abweichungen der realen ThAI-Behältermaße von den ideal angenommenen begründet. Laut Fachbericht (Fischer, et al., 2007) unterscheiden sich die Strömungsfelder in beiden Konfiguration jedoch nur geringfügig. Für den Vergleich mit Simulationen werden die Ergebnisse von H_groß_klein_D verwendet, ergänzt durch LDA-Daten von H_klein_groß_D. Alle Meßpositionen liegen damit in der geometrischen Symmetrieebene.



Abbildung 2: Offene Flächen zwischen den Kondensatwannen. Links: Konfiguration H_klein_groß_D. Rechts: Konfiguration H_groß_klein_D.

⁵ LDA: Laser-Doppler-Anenometry

⁶ PIV: Particle-Image-Velocimetry

4.2.1.3 Strömungsgebiet, Gittergenerierung und Randbedingungen der CFD-Simulation

In den Simulationen wurde die Konfiguration H_groß_klein_D, siehe Abb. 2 rechts, untersucht. Die Geometrie wurde vereinfacht, indem Mannlöcher, Flansche und Helium-/Dampfleitungen im CFD-Modell weggelassen wurden. Ein Modell der Geometrie wurde mit **ANSYS DesignModeler** erstellt. Alle erzeugten Gitternetze basieren im Folgenden auf einem 180-Grad-Modell der Geometrie. Um 360-Grad-Gitter zu erstellen werden die 180-Grad-Modelle an der Symmetrieebene gespiegelt.

	Grob	Mittel	Fein
Elemente	1,63 Mio.	6,55 Mio.	26,24 Mio.
Knoten	1,57 Mio.	6,39 Mio.	25,83 Mio.
Minimalwinkel	27,8°	27,9°	27,8°
Max. Volumenänderung	13,4	12,1	9,96
Max. Längenverhältnis	122	91,3	197

Tabelle 1: Statistiken der drei Hexaedergitter für TH-18. Aufgeführt sind die Werte für die 180-Grad-Versionen.



Abbildung 3: Einlass und Austrittsrandbedingungen für die TH-18-Simulation.

Für die Gittergenerierung wurde ANSYS ICEM CFD eingesetzt. Ziel war die Erstellung von skalierbaren Gittern, die sowohl für RANS- wie auch für skalenauflösende Simulationen geeignet sind. Hinsichtlich der Gitterqualität wurde auf Einhaltung der Best Practice Guidelines (Menter, et al., 2002) geachtet. Es wurden drei Hexaedergitter generiert. Eine Übersicht der Gitter mit Statistiken der Gitterparameter ist in Tabelle 1 aufgeführt.

Hinsichtlich Best Practice Guidelines wurden Gitterstudien für die SST-Modelle durchgeführt. Das grobe Gitter erwies sich bereits als ausreichend um gitterunabhängige Lösungen der Geschwindigkeitsfelder mit RANS-Turbulenzmodellen zu erhalten.

Als Randbedingungen der Simulation wurden Einlassrandbedingungen direkt oberhalb der Leitbleche des Gebläses, sowie Austrittsrandbedingungen direkt unterhalb des Gebläses definiert, siehe auch Abbildung 3. Die Geschwindigkeit und die Turbulenzintensität am Einlass basieren auf experimentell gemessenen Profilen. Am Auslass wird ein durchschnittlicher statischer Druck spezifiziert.

4.2.1.4 Das Modell-Setup der CFD-Simulation

Für TH-18 wurden verschiedene RANS-Rechnungen, sowohl mit dem SST-Modell als auch mit ω-basierten Reynoldsspannungsmodellen durchgeführt. Letztere wurden vom Projektpartner IKE durchgeführt und brachten etwas genauere Vorhersagen im Vergleich mit dem Experiment. Die RSM⁷-Ergebnisse werden in diesem Bericht nicht präsentiert. Hier und in allen weiteren Versuchen des Projektes werden hydraulisch glatte Wände angenommen.

Erste Vorlaufrechnungen für stationäre Strömungssimulationen zeigten oszillierende Werte für die Residuen und die Strömungswerte an definierten Monitorpunkten. Eine Konvergenz konnte hierfür nicht erzielt werden. Für weitere Rechnungen wurden daher instationäre Simulationsverfahren eingesetzt. Die RANS-Simulationen wurden größtenteils auf 180-Grad-Gittern durchgeführt. Zudem wurde, gemäß dem Projektplan, eine länger angelegte skalenaufgelöste 360-Grad-Rechnung mit dem SAS-SST-Modell durchgeführt. Tabelle 2 zeigt eine Auswahl an durchgeführten Rechnungen, deren Ergebnisse im Folgenden präsentiert und diskutiert werden.

Bezeichnung	Gitter	Turbulenz- modell	Weitere Daten
coarse_180_deg_SST_bl0.50	grob, 180 Grad	SST	zeitliche Diskretisierung zweiter Ordnung, adaptive Zeitschrittweite, räumliche Diskretisierung mit <i>blending factor</i> 0.5
coarse_360_deg_SST_bl0.50	grob, 360 Grad	-	-
medium_360_deg_SAS- SST_bl1.00	mittel, 360 Grad	SAS-SST	zeitliche Diskretisierung zweiter Ordnung, Schrittweite τ =10 ms, ca. zwei Monate Rechenzeit auf 12 CPU's

Tabelle 2: Übersicht über ausgewählte Simulationen für den Versuch TH-18.

⁷ RSM: Reynolds Stress Model; Reynolds-Spannungs-Turbulenzmodell

Die Ergebnisse der instationären Simulationen wurden zum Vergleich mit dem Experiment über hinreichend lange Zeitintervalle gemittelt, um verlässliche Statistiken zu erhalten. Details zu den Rechnungen finden sich in den Zwischenberichten des Projekts.



Abbildung 4: Darstellung der Assymetrie des gemittelten vertikalen Geschwindigkeitsfeldes unterhalb der kleinen Öffnung.



Abbildung 5: Vergleiche der zeitgemittelten Geschwindigkeit zwischen CFD-Rechnungen und Experiment an verschiedenen Meßprofilen. Zur Lage der Profile siehe Abbildung 6.

4.2.1.5 CFD-Simulationsergebnisse und Vergleich mit dem Experiment

Die Abbildung 5 zeigt Vergleiche der zeitgemittelten vertikalen Geschwindigkeit für die in Tabelle 3 beschriebenen Modelle. Weiterhin werden in Abbildung 4 Profile der vertikalen Geschwindigkeit in der geometrischen Symmetrieebene (y=0 m), sowie links und rechts um $\Delta y = 10$ cm versetzt, verglichen. Letztere Daten stehen bedauerlicherweise nicht aus den Experimenten zur Verfügung. Sie wurden jedoch aus der CFD-Simulation zusätzlich herangezogen, um mögliche Fehler durch eine Messung leicht außerhalb der geometrischen Symmetrieebene abschätzen zu können und um die Geschwindigkeitsprofile an diesen Positionen daraufhin zu analysieren, inwiefern die Geschwindigkeiten an den Meßpositionen durch einen möglichen Drall der Strömung im ThAI-Behälter beeinflußt werden können. Insbesondere in der skalenaufgelösten Rechnung mit dem SAS-SST-Modell wurde eine sehr deutliche und stark ausgeprägte Asymmetrie der gemittelten Geschwindigkeitsfelder in y-Richtung festgestellt. In den Experimenten wurde eine Beeinflussung der Meßwerte durch eine solche mögliche Asymmetrie leider nicht untersucht.

4.2.1.6 Diskussion und Schlussfolgerungen für TH-18

Die experimentellen Daten des TH-18-Versuchs lassen sich für die Meßprofile oberhalb der Kondensatwannen bereits mit dem SST-Modell mit recht guter Genauigkeit reproduzieren. Für die Abweichungen zwischen den experimentellen Daten und den CFD-Simulationen unterhalb der Kondensatwannen konnte ohne zusätzliche Messungen keine abschließende und zufriedenstellende Erklärung gefunden werden.

Die Analyse der SAS-SST-Rechnung zeigt eine deutliche Verbesserung der Vorhersage der vertikalen Strömungsgeschwindigkeit im oberen Behälterbereich (Höhe 8m), leichte Verbesserung im Bereich oberhalb der kleinen Öffnung in den Kondensatwannen, jedoch keine Verbesserung unterhalb der kleineren Öffnung. Die SAS-SST-Rechnung lässt darauf schließen, dass wegen der starken Asymmetrie und Instationarität der Strömung auf jeden Fall ein volles 360-Grad-Modell für die numerische Simulation von TH-18 benötigt wird.

Als Kompromiss zwischen numerischem Rechenaufwand und erzielbarer Rechengenauigkeit kann aus dem TH-18-Versuch das SST-Turbulenzmodell mit Diskretisierung 2. Ordnung für die Turbulenzmodellgleichungen ausgewählt werden. Bei höherer zur Verfügung stehender Rechenleistung kann mit ω -basierten Reynoldsspannungs-Modellen eine weitere Erhöhung der Rechengenauigkeit erzielt werden.



Abbildung 6: Lage der in Abb. 5 dargestellten Meßprofile für TH-18.

Die Qualitätsverbesserung der CFD-Ergebnisse bei Einsatz der skalenauflösenden Methode SAS-SST geht mit einem um ein Vielfaches erhöhten numerischen Rechenaufwand im Vergleich zu einer SST-Simulation einher. Es bedarf der Abwägung im Einzelfall, ob die erzielbare Qualitätssteigerung den Einsatz der Rechenressourcen rechtfertigt.

4.3 Strömungen mit Stofftransport

In der zweiten Projektphase wurden die Untersuchungen auf impulsgetriebene Strömungen mit Stofftransport ausgedehnt. Dabei spielen Dichteunterschiede und Auftriebseffekte in der Strömung eine wesentliche Rolle. In dieser Phase wurden die neuen Turbulenzmodelle aus Kapitel 0 entwickelt und validiert.

4.3.1 Testfall einer stabilen Salzwasser-Mischungsschicht

Wie bereits oben erwähnt, wurden neben den ThAI-Experimenten im Rahmen des aktuellen Projektes mehrere einfache und gut instrumentierte Experimente zur Validierung der neuen Modelle herangezogen. Die ersten zwei Experimente betreffen Strömungen mit Dichteunterschieden aufgrund von Konzentrationsunterschieden.

4.3.1.1 Beschreibung des Experiments

Die Beschreibung und Durchführung des Versuches beruht auf (Uittenbogaard, 1989) und (Uittenbogaard, 1995). Der Testfall besteht aus einer zweidimensionalen stationären Mischungsschicht zwischen Frischwasser und etwas schwererem Salzwasser. Die Schichtung stabil. d.h. schweres Salzwasser unterhalb leichten Frischwassers. Beide ist Strömungskomponenten fließen mit unterschiedlicher Geschwindigkeit bei x=0 m von links in das Strömungsgebiet ein. Die Durchmischung erfolgt nach einer Trennscheibe in einem Kanal der Länge 40 m. Der Kanal ist im Experiment nach oben hin offen, nach vorne und hinten erlauben Glasscheiben Beobachtung und Messung von Strömungsgrößen. Siehe Abbildung 7 für eine Skizze des Aufbaus.

Die Reynoldszahl der Strömung, basierend auf der Kanalhöhe von 0,56 m und den Durchschnittswerten für Dichte und Geschwindigkeit, beträgt ca. $2,7 \cdot 10^5$.



AN<mark>SYS</mark>

Abbildung 7: Versuchsaufbau für die saline Mischungsschicht. Die Strömungsrichtung verläuft von links nach rechts.

4.3.1.2 Strömungsgebiet, Gittergenerierung und Randbedingungen der CFD-Simulation

Das Strömungsgebiet für die CFD-Rechnungen war ein einfacher Quader mit einer Einlassrandbedingung links bei x=0 m und Auslassrandbedingung rechts bei x=40 m. Anstelle der freien Oberfläche des Kanals im Experiment wurde in den CFD-Simulationen eine spannungsfreie Wandrandbedingung eingesetzt. Die Gitter wurden über ein Perl-Skript

erstellt. Insgesamt wurden vier Gitter in gleichmäßigen Verfeinerungsschritten erzeugt. Gitter *n* besitzt dadurch $8160 \cdot 2^{n-1}$ Hexaederelemente. Die Gitter sind am Kanalboden (y=0 m) sowie auf der Höhe der Mischungsschicht verfeinert. Siehe Abbildung 8 für eine Darstellung von Gitter 1.



Abbildung 8: Gitter 1 für die saline Mischungsschicht.

4.3.1.3 Das Modell-Setup der CFD-Simulation

Die CFD-Rechnungen zur salinen Mischungsschicht wurden mit skalengemittelten Turbulenzmodellen durchgeführt. Tabelle 3 zeigt eine Übersicht der eingesetzten CFD-Modelle. Sie unterscheiden sich im eingesetzten Turbulenzmodell.

Die CFD-Rechnung wurde als Einphasen/Zweikomponenten-Strömung aufgesetzt, mit Salzwasser als Komponente 1 und Frischwasser als Komponente 2. Es wird von einer idealen isothermen Mischung beider Komponenten ausgegangen.

4.3.1.4 CFD-Simulationsergebnisse und Vergleich mit dem Experiment

Für alle Turbulenzmodelle wurde eine Gitterstudie durchgeführt. Es zeigte sich, dass die statistischen Größen erster Ordnung wie mittlere Geschwindigkeit und Konzentration bereits auf groben Gittern gitterunabhängig sind, für die Größen zweiter Ordnung wie Reynoldsspannungen jedoch bis zum feinsten Gitter 4 aufgelöst werden musste. Resultate zu CFD-Rechnungen auf verschiedenen Gittern sind in Abbildung 9 dargestellt.

An drei Stellen, x=5 m, x=10 m sowie x=40 m, stehen vertikale Profile der folgenden Strömungsgrößen aus der experimentellen Untersuchung zur Verfügung:

• Relative Dichte

$$\rho_{rel} \equiv \frac{\rho - \rho_{frischwasser}}{\rho_{salzwasser} - \rho_{frischwasser}}$$
(92)

- Horizontale mittlere Geschwindigkeit \tilde{u}
- Favre-Schubspannung $\overline{\rho u''w''}/\overline{\rho}$, wobei für das SST-Modell die übliche Boussinesq-Approximation dieser Größe herangezogen wird:

$$\frac{\overline{\rho u'' w''}}{\overline{\rho}} \approx -\left(\frac{\mu_t}{\rho}\right) \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right)$$
(93)

• Vertikaler turbulenter Massenfluss $\overline{\rho'w'}$. Diese Größe wird in den CFD-Rechnungen für den Fall RS-BSL-TSF nach Gleichung (62) definiert, in den anderen Fällen wird sie nach Gleichung (73) über

$$\overline{\rho' w'} \approx -\left(\frac{\mu_t}{\rho \sigma_{\rho}}\right) \left(\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial z}\right)$$
(94)

approximiert.

Diese experimentellen Profile werden in Abbildung 10 mit den Resultaten der CFD-Rechnungen auf dem feinsten Gitter für alle Modelle verglichen.

Bezeichnung	Turbulenzmodell	Weitere Daten
SST_NoBuoyancy_ Turbulence	SST	deaktivierter Produktionsterm für Auftriebsturbulenz sowohl in der <i>k</i> - wie auch der ω-Gleichung
SST_Buoyancy Turbulence	SST	aktivierter Produktionsterm für Auftriebsturbulenz sowohl in der <i>k</i> - wie auch der ω-Gleichung
RS_BSL_Buoyancy Turbulence	Baseline-Reynoldsstress	-
CustomSolver_RS_ BSL_TSF_Buoyancy Turbulence	Baseline-Reynoldsstress und Transportgleichung für turbulenten Skalarfluss und Varianz	-, außerdem TSF-Modell nach Gleichung (89) aktiviert. Erfordert die im Projekt neu implementierte ANSYS CFX-Version

Tabelle 3: Übersicht der verschiedenen Turbulenzmodelle bei CFD-Rechnungen für die saline Mischungsschicht.



Abbildung 9: Gitterstudie für vier Strömungsgrößen am Profil x=40 m. Linke Spalte: RS_BSL_BuoyancyTurbulence. Rechte Spalte: CustomSolver_RS_BSL_TSF_BuoyancyTurbulence.



Abbildung 10: Vergleich der CFD-Rechnungen auf dem feinsten Gitter mit dem Experiment. Linke Spalte: vier Strömungsgrößen am Profil x=5 m. Rechte Spalte: analoge Resultate am Profil x=40 m.

Die Resultate auf dem feinsten Gitter sind offenbar gitterunabhängig. Die Übereinstimmung der CFD-Rechnungen mit dem Experiment ist zufriedenstellend, sofern die Auftriebsterme in der Turbulenzproduktion aktiviert werden. Die leichte systematische Verschiebung einiger Kurven nach oben bei x=40 m kann eventuell auf ein Absenken der im Experiment vorhandenen, aber in der CFD-Rechnungen nicht modellierten, freien Oberfläche zurückgeführt werden.

Allerdings zeigt sich bei Benutzung des neu implementierten TSF-Modells kaum eine wesentliche Verbesserung in der Vorhersage der experimentellen Ergebnisse. Man erkennt aber, dass das TSF-Modell, im Gegensatz zu Vorhersagen des turbulenten Skalarflusses basierend auf der Gradientenhypothese, prinzipiell einen Vorzeichenwechsel des vertikalen Flusses zulässt (*Counter-Gradient-Diffusion*). Dieser Effekt ist in Abbildung 10 unten rechts klar erkennbar.

4.3.2 Testfall einer Helium-Stickstoff-Mischungsschicht (He-N₂)

Das zweite einfache Experiment untersucht wiederum eine Mischungsschicht zwischen Fluiden, welche Dichteunterschiede aufgrund unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung aufweisen. Allerdings werden bei diesem Versuch Gase und nicht Flüssigkeiten eingesetzt und ferner Auftriebseffekte durch die vertikale Anordnung unterdrückt.

4.3.2.1 Beschreibung des Experiments

Der aktuelle Versuch geht auf die Untersuchung (Brown, et al., 1974) zurück. Der Testfall besteht hier aus einer zweidimensionalen stationären Mischungsschicht zwischen Helium (He) als leichtem und Stickstoff (N_2) als schwerem Gas. Beide Komponenten treffen nach einer Trennscheibe mit unterschiedlicher Geschwindigkeit aufeinander und erzeugen eine sich ausbreitende Mischungsschicht. Momentaufnahmen der Strömung in (Brown, et al., 1974) mittels des Schatten-Verfahrens demonstrieren deutlich eine Kelvin-Helmholtz-Instabilität.

Auftriebseffekte wurden in den Rechnungen nicht berücksichtigt, da die Schwerkraft senkrecht zur Richtung des Gradienten der mittleren Dichte wirkt und das Verhältnis zwischen Trägheitskräften und Schwerkraft groß ist. Durch hohen Druck in der Größenordnung von 7 atm erreicht man eine typische Reynoldszahl, basierend auf der halben Lauflänge des Strömungsgebiets, in der Größenordnung 10⁶. Abbildung 11 zeigt den experimentellen Aufbau.



Abbildung 11: Skizze des experimentellen Aufbaus, sowie der Randbedingungen für die numerischen Rechnungen.



	Elemente	Knoten
Gitter 1	4752	9800
Gitter 2	19502	39600
Gitter 3	79002	159200

Abbildung 12: Oben: Darstellung von Gitter 1, Unten: Statistiken der benutzten Rechengitter.

4.3.2.2 Strömungsgebiet, Gittergenerierung und Randbedingungen der CFD-Simulation

Das trapezförmige Strömungsgebiet reicht vom Einlassrand mit einem Durchmesser von 5 cm bis zum Auslassrand mit einem Durchmesser von 20 cm. Der Abstand zwischen Einlass und Auslass beträgt 25 cm. Die Seitenflächen wurden als Öffnungsrandbedingung mit der *Entrainment*-Option in **ANSYS CFX** definiert. Das Fluid wurde als einphasige isotherme ideale Zweikomponentenmischung aus Helium und Stickstoff definiert.

Für die CFD-Simulation wurden drei Gitter mit nahezu gleichförmigen Verfeinerungsstufen generiert. Abbildung 12 zeit das gröbste Gitter sowie Statistiken der anderen Gitter. Die Gitter wurden im Bereich der Mischungsschicht verfeinert.

4.3.2.3 Das Modell-Setup der CFD-Simulation

Untersucht wurden insgesamt fünf verschiedene Kombinationen der Mischungsgeschwindigkeit und des Dichteverhältnisses der beiden Gase. Diese sind in Tabelle 4 zusammengefasst.

Für die CFD-Simulationen wurden RANS-Rechnungen mit verschiedenen Turbulenzmodellen durchgeführt. Die Modelle sind in Tabelle 5 angegeben.

	$r=u_2/u_1$	$s=\rho_2/\rho_1$	u ₁	ρ ₁	Material 1	Material 2
Fall 1	1/7	1	10	7,96	N_2	N_2
Fall 2	$1/7^{1/2}$	1	10	7,96	N ₂	N ₂
Fall 3	1/7	7	10	1,14	Не	N ₂
Fall 4	1/7 ^{1/2}	7	10	1,14	Не	N ₂
Fall 5	$1/7^{1/2}$	1/7	10	7,96	N ₂	Не

Tabelle 4: Übersicht der verschiedenen Testfälle für die Helium-Stickstoff-Mischungsschicht.

Bezeichnung	Turbulenzmodell	Weitere Daten
SST	SST	
KEpsilon	k-ε	
KEpsilon_Sc01	-	Turbulente Schmidtzahl, siehe Gleichung (69), gesetzt auf $\sigma_t = 0,1$
RS_LRR	LRR-Reynolds Stress	
RS_LRR_TSF	LRR-Reynolds Stress und Transportgleichung für turbulenten Skalarfluss	

Tabelle 5: Übersicht der verschiedenen numerischen Modelle für die Helium-Stickstoff-Mischungsschicht.

4.3.2.4 CFD-Simulationsergebnisse und Vergleich mit dem Experiment

Für den Vergleich zwischen Experiment und CFD-Rechnungen wurden die Ausbreitungsraten der mittleren Geschwindigkeit und Dichte herangezogen. Für eine beliebige Eigenschaft A lässt sich die Ausbreitung δ_A wie folgt definieren:

$$\begin{split} \delta_{A} &\equiv \frac{\Delta Y}{0,8}, \\ \Delta y &\equiv |Y_{1} - Y_{2}|, \\ y_{1} &\equiv \max(Y; A \leq \max(A_{1}, A_{2}) - 0, 1|A_{1} - A_{2}|), \\ y_{2} &\equiv \min(Y; A \geq \min(A_{1}, A_{2}) + 0, 1|A_{1} - A_{2}|), \end{split}$$
(95)

Dabei sind A_1 und A_2 die Werte im Fernfeld der Strömung. Nimmt man zwei Werte der Ausbreitung an zwei verschiedenen x-Positionen, so lässt sich eine Ausbreitungsrate definieren:

$$\delta_{A}^{\prime} \equiv \frac{\delta_{A} - \delta_{A.alt}}{x - x_{alt}}.$$
(96)

Ausbreitungsrate der Dichte $\delta'_ ho$					
	KEpsilon Gitter 1	KEpsilon Gitter 2	KEpsilon Gitter 3	Experiment	
Fall 3	0,13960	0,14022	0,14020	0,45	
Fall 4	0,07883	0,07432	0,07430	0,21	
Fall 5	0,05854	0,05870	0,05869	0,10	

Ausbreitungsrate der horizontalen Geschwindigkeit ${oldsymbol{\mathcal{\delta}}}'_u$					
	KEpsilon Gitter 1	KEpsilon Gitter 2	KEpsilon Gitter 3	Experiment	
Fall 1	0,13625	0,13747	0,13747	0,14	
Fall 2	0,07902	0,07966	0,07965	0,08	
Fall 3	0,13217	0,13283	0,13282	0,19	
Fall 4	0,07862	0,07885	0,07883	0,11	
Fall 5	0,07430	0,07425	0,07424	0,06	

Tabelle 6: Oben: Ausbreitungsrate der Dichte für verschiedene Gitter, KEpsilon-Modell und Experiment. Unten: Ausbreitungsrate der horizontalen Geschwindigkeit, KEpsilon-Modell und Experiment.

Die Ausbreitungsraten für mittlere Dichte und horizontale Geschwindigkeit sind nahezu konstant. In den CFD-Rechnungen wurden die Raten an 25 gleichmäßig verteilten Positionen erfasst und gemittelt. Eine Gitterstudie zur Untersuchung der Auswirkung der Gitterfeinheit auf die Ausbreitungsraten wird in Tabelle 6 präsentiert. Der Vergleich der Auswirkung des Turbulenzmodells auf die Raten ist in Tabelle dargestellt.

Es zeigt sich, dass gitterunabhängige Ergebnisse auf dem feinsten Gitter erzielt wurden. Der Vergleich zwischen Experiment und CFD-Rechnung macht deutlich, dass die Ausbreitungsrate der Geschwindigkeit für die Testfälle 1 und 2 mit identischen Gasen und damit konstanter Dichte sehr gut von allen Turbulenzmodellen vorhergesagt werden. Dennoch versagen alle Modelle bei den Fällen mit variabler Dichte, vor allem im Fall 3, in dem die langsame, schwere und die schnelle, leichte Gasschicht jeweils den gleichen Impuls transportiert.

Ausbreitungsrate der Dichte ${\cal \delta}'_ ho$						
	SST Gitter 3	KEpsilon Gitter 3	KEpsilon_Sc01 Gitter 3	RS_LRR Gitter 3	RS_LRR_TSF Gitter 3	Experiment
Fall 3	0,15	0,14	0,17	0,13	0,14	0,45
Fall 4	0,08	0,07	0,11	0,07	0,08	0,21
Fall 5	0,07	0,06	0,13	0,06	0,06	0,10

Ausbreitungsrate der horizontalen Geschwindigkeit $oldsymbol{\delta}'_u$						
	SST Gitter 3	KEpsilon Gitter 3	KEpsilon_Sc01 Gitter 3	RS_LRR Gitter 3	RS_LRR_TSF Gitter 3	Experiment
Fall 1	0,15	0,14	0,14	0,12	0,12	0,14
Fall 2	0,09	0,08	0,08	0,07	0,07	0,08
Fall 3	0,16	0,13	0,14	0,12	0,12	0,19
Fall 4	0,10	0,08	0,08	0,07	0,07	0,11
Fall 5	0,09	0,07	0,09	0,07	0,06	0,06

Tabelle 7: Oben: Ausbreitungsrate der Dichte für verschiedene Turbulenzmodelle und Experiment. Unten: Ausbreitungsrate der horizontalen Geschwindigkeit.

4.3.3 Die TH-20 Testreihe

In der ThAI-Versuchsreihe TH-20 wird die Auflösung einer stabilen Helium-Luft-Schichtung im ThAI-Behälter durch einen von unten aufsteigenden, von einem Gebläse erzeugten Luftstrahl untersucht. Aus Explosionsschutzgründen wird im Versuch das Leichtgas Helium anstelle von Wasserstoff benutzt. Der Gebläsestrahl bildet in der Heliumschicht eine Fontänenströmung und fällt nach Erreichen einer maximalen Steighöhe seitlich ab. Dabei wird nach und nach Helium von der Strömung mitgerissen und vermischt sich mit Luft. Nach 10-20 Minuten, je nach Versuchsbedingungen, wird eine homogene Heliumkonzentration erreicht.

Das wesentliche Ziel der Untersuchung ist der Vergleich der Entwicklung der Heliumkonzentration über die Zeit zwischen Experiment und CFD-Rechnungen. Die Details

zum Versuchsaufbau und der Instrumentierung finden sich in den Fachberichten (Kanzleiter, et al., 2007) sowie (Kanzleiter, et al., 2007).

4.3.3.1 Beschreibung der modifizierten ThAI-Versuchseinrichtung

Eine Übersicht der Einbauten und der Instrumentierung für die Versuchsreihe TH-20 ist in Abbildung 13 dargestellt. Für die Vergleiche zwischen CFD-Rechnung und Experiment wurden die Einzelversuche TH 20.2 bzw. 20.8 ausgewählt. Sie unterscheiden sich lediglich dadurch, dass bei TH 20.8 zusätzlich Geschwindigkeitsfelder mittels PIV gemessen werden.



Abbildung 13: Links: Versuchsanordnung für TH-20. Nicht dargestellt sind die festen Leitschaufeln des Axialgebläses zwischen Lüfterrad und Strömungsgleichrichter. Rechts: Übersicht aller Meßstellen für TH-20

Im Vergleich zum oben beschriebenen Versuch TH-18 wurden bei TH-20 der Innenzylinder und die Kondensatwannen ausgebaut. Ein Axialgebläse mit Strömungsgleichrichter und aufgesetzter konischer Düse ist unten im ansonsten leeren ThAI-Behälter eingebaut. Das Gebläse erzeugt einen nach oben gerichteten Luftstrahl und saugt die Behälterluft von unten her an. Die Drehfrequenz des Gebläses wird im Versuch auf einen konstanten Wert geregelt.

Zu Anfang jedes Einzelversuchs wurde Helium durch ein seitlich angebrachtes Rohr eingespeist. Nach dem Ende der Einspeisung wird eine Pause eingelegt, so dass sich eine stabile und stationäre Heliumschichtung im oberen Bereich des Behälters einstellt. Zum Zeitpunkt t=0 s wird daraufhin das Gebläse gestartet. Die Heliumkonzentration wird an 15 Meßpunkten kontinuierlich erfasst. Die Lage der Meßpunkte ist in Abbildung 14 rechts dargestellt. Die Messung der Konzentration erfolgt durch Gasentnahme über feine Röhrchen anschließende Messung Leitfähigkeitssensoren. und an Ein Vergleich der Experiment und CFD-Simulation Geschwindigkeitsdaten zwischen wurde nicht vorgenommen.

4.3.3.2 Experimentelle Versuchsbedingungen von TH-20

In einem Vorversuch der TH-20-Versuchsreihe wurde das Axialgebläse mit Strömungsgleichrichter und aufgesetzter Düse außerhalb des ThAI-Behälters in einer Versuchshalle aufgebaut. Am Gebläse-Freistrahl wurden daraufhin LDA-Messungen des Geschwindigkeitsfeldes durchgeführt. Ziele dieser Messung waren

- Sammlung von Information über das Strömungsprofil im Auslaßquerschnitt der konusförmigen Düse. Erfasst wurden gemittelte Werte und gemittelte Schwankungen der vertikalen sowie der Umfangsgeschwindigkeit.
- Messung der Korrelation zwischen Gebläsedrehfrequenz und dem mittleren Volumenstrom am Auslaß der Düse. Es stellte sich heraus, dass der Zusammenhang linear ist.

Im Versuch TH 20.2 beträgt die maximale Volumenkonzentration von Helium in Luft 36 %. Das Gebläse wird mit einer Frequenz von 7 Hz betrieben, dieses entspricht einer maximalen Strömungsgeschwindigkeit am Auslass der Düse von ungefähr 2 m/s. Der Druck im Behälter zum Zeitpunkt des Einschaltens des Gebläses betrug 1,15 atm. Nach ca. 20 Minuten wurde eine homogene Heliumkonzentration im gesamten Behälter festgestellt.

4.3.3.3 Strömungsgebiet, Gittergenerierung und Randbedingungen der CFD-Simulation

Für den Versuch TH-20.2 wurden RANS-Rechnungen in **ANSYS CFX** durchgeführt, sowie gemäß dem Projektplan eine länger angelegte LES-Rechnung mit **ANSYS CFX**.

Das vorhandene Geometriemodell des TH-18-Versuches wurde für die CFD-Simulation von TH-20.2 angepasst. Dazu wurden die Kondensatwannen und der Innenzylinder entfernt, sowie die veränderte Position des Axialgebläses berücksichtigt. Die Stützen des Gebläses wurden wiederum vernachlässigt. Abbildung 14 links zeigt die grundlegende Geometrie für die CFD-Rechnungen.

Das Gebläse wurde in den CFD-Simulationen nicht detailliert aufgelöst. Stattdessen wurde mit einer Eintrittsrandbedingung die Strömungsgeschwindigkeit vorgeschrieben. Für RANS-Simulationen wurde eine Eintrittsrandbedingung am Auslassquerschnitt der Düse definiert, sowie eine Austrittsrandbedingung weiter unterhalb innen im Axialgebläse. Für die LES-Simulation wurde die Eintrittsrandbedingung nach unten, direkt oberhalb des Strömungsgleichrichters, verlegt, da hierfür die detaillierte Erzeugung turbulenter Strukturen am Düsenaustritt von Interesse war.



Abbildung 14: Links: Geometrie-Modell für den TH-20.2-Versuch. Rechts: Lage der Meßpunkte der Heliumkonzentration für 1-Grad-Geometriemodelle, sowie die Anfangsverteilung der Heliumkonzentration im Versuch TH-20.2.

Alternativ zu Austritts- und Einlassrandbedingungen lässt sich die Wirkung des Gebläses auch mit einer volumetrischen Impulsquelle modellieren. Diese Möglichkeit wurde in einigen vorläufigen Rechnungen erkundet, aber schließlich verworfen.

Bei der Verwendung von Austritts- und Einlassrandbedingungen trotz der physikalisch geschlossenen Geometrie muss allerdings sichergestellt werden, dass die gleiche Menge Helium am Einlass in das numerische Strömungsgebiet hineinfließt, wie am Auslass herausfließt. Dieses wurde durch speziellen Benutzercode (User Fortran und/oder CCL⁸ in Rechnungen mit **ANSYS CFX**, bzw. UDFs⁹ für **ANSYS Fluent**) sichergestellt. In beiden Fällen wird die gesamte Menge am Auslassrand ausgeflossenes Helium im vorangegangenen Zeitschritt erfasst und darauf basierend eine gleichmäßige Konzentration am Einlassrand vorgeschrieben. Da am Einlassrand die Geschwindigkeit bekannt und vorgeschrieben ist, kann so der gleiche Helium-Massenstrom im aktuellen Zeitschritt wieder in das Strömungsgebiet eingeführt werden. Die Verweilzeit des Heliums innerhalb des nicht berechneten Lüftervolumens auf dem Weg von der Auslass- zur Einlassrandbedingung wird dabei vernachlässigt (Transport über diese Distanz innerhalb von einem Zeitschritt).

Für die RANS-Rechnungen wurde die Rotationssymmetrie der Geometrie ausgenutzt um die Rechnungen auf ein zweidimensionales Gitter zu beschränken. Dabei wurde ein 1-Gradunterschiedliche vollen Geometrie benutzt. wurden Segment der Es vier Rechennetzauflösungen verwendet, siehe Abbildung 15. Da die lange Vermischungszeit im Experiment eine aufwendige transiente Simulation erfordert, wurde das Gitternetz nicht gleichmäßig verfeinert, sondern lediglich im entscheidenden Bereich des Freistrahls. Von Gitter 1 zu Gitter 2 wurde in Wandnähe verfeinert, in den weiteren Verfeinerungsschritten wurde das Gitter im Bereich des Freistrahls in z-Richtung um den Faktor 2 verfeinert. In einer Gitterstudie konnte bereits mit Gitter 3 ein gitterunabhängiges Ergebnis nachgewiesen werden.

⁸ CCL: CFX Command Language

⁹ UDF: User Defined Function

	Anzahl der Knoten
Gitter 1	32792
Gitter 2	34176
Gitter 3	37264
Gitter 4	60906

Abbildung 15: Oben, von links nach rechts: Für TH-20 verwendete Rechengitter 1 bis 4, geeignet für RANS-Rechnungen. Detailansicht oberhalb der Düse. Unten: Anzahl der Knoten für jedes Gitter.

Für die LES-Rechnung wurde vom Projektpartner IKE Stuttgart ein geeignetes 360-Grad-Gitter mit ca. 6 Millionen Elementen erstellt.

4.3.3.4 CFD-Simulationen für TH-20 mit skalengemittelten Turbulenzmodellen

Eine Serie von numerischen Experimenten wurde mit Gitter 3 durchgeführt. Dafür wurden die Versuchsbedingungen von TH20.2, TH20.7, TH20.8 (drei identische Versuche) ausgewählt. Das Fluid wurde als ein binäres Gemisch von zwei inkompressiblen Gasen, Luft und Helium, an der konstanten Temperatur von 21.5° betrachtet. Die Simulationszeit von 1000 bis 2000 Sekunden (ca. 16.5 bis 33 Minuten) wurde mit einem Zeitschritt von 0,1 s berechnet. Die folgenden Faktoren und deren Einfluss auf die Ergebnisse wurden untersucht:

- Radiale Geschwindigkeitskomponente an der Einlassgrenze (Düsenaustritt)
- Turbulente Schmidt-Zahl in der Transportgleichung für Helium
- Turbulenzmodell: unterschiedliche Variante des k-ɛ Modells
- Modell für die Turbulenzproduktion durch die Auftriebskraft

Radiale Geschwindigkeitskomponente an der Einlassgrenze

Dieser Faktor hat den stärksten Einfluss auf die Ergebnisse gezeigt.

Für den TH-20.2-Versuch wurden in **ANSYS CFX** RANS-Simulationen mit dem SST-Modell durchgeführt. Die abzubildende Realzeit nach Einschalten des Gebläses betrug 1200 Sekunden. In Vorlaufstudien wurde die optimale Zeitschrittweite von 0,01 s bestimmt, gerechnet wurde mit Gitter 3, siehe Abbildung 15. In den Rechnungen wurde das Fluid als ideale einphasige Zwei-Komponenten-Mischung unter isothermen Bedingungen angesetzt.

Weitere Vorlaufstudien zur Ermittlung optimaler Parameter des Turbulenzmodells führten zu folgenden Einstellungen:

- Aktivierter Produktionsterm für Auftriebsturbulenz und turbulente Schmidtzahl $\sigma_{\rho} = 0,1$, siehe Gleichung (70a)
- Aktivierte Krümmungskorrektur (*curvature correction*)
- Aktivierter Begrenzungsfaktor für turbulente kinetische Energie, *clip factor*=1

4.3.3.5 CFD-Simulation für TH-20 mit dem LES-Verfahren

Für den TH-20.2-Versuch wurde ebenfalls eine LES-Rechnung mit **ANSYS Fluent** durchgeführt. Zum Einsatz kam dabei das WALE¹⁰-LES-Verfahren. Die abgebildete Realzeit betrug 250 Sekunden, bei einer numerischen Zeitschrittweite von $\Delta t=2,5$ ms.

Abbildung 16 zeigt die momentane Helium-Volumenkonzentration in der xy-Ebene zu ausgewählten Zeitpunkten. In Abbildung 17 ist die zeitliche Entwicklung der Helium-Volumenkonzentration an ausgewählten Meßpunkten über die Zeit aufgetragen.

4.3.3.6 CFD-Experiment-Vergleich

Es stellte sich heraus, dass die Zeit zur Erreichung homogener Durchmischung der Behälteratmosphäre bei allen CFD-Rechnungen systematisch unterschätzt wird. Siehe dazu Abbildung 17. Dieses ist umso bemerkenswerter, da die Ergebnisse zwischen skalengemittelter Rechnung mit SST-Modell und skalenaufgelöster Rechnung mit LES-Modell gut übereinstimmen. Dieses gilt trotz der stark unterschiedlichen Gitter und Modelle in beiden Fällen.

¹⁰ WALE: Wall Adaptive Local Eddy viscosity



Abbildung 16: LES-Simulation für TH-20.2. Helium-Volumenkonzentration in der xy-Ebene zu ausgewählten Zeitpunkten. Von links oben nach rechts unten: t=0,03 s; t=2,5 s; t=5 s; t=25 s; t=50 s; t=50 s; t=75 s; t=100 s; t=125 s; t=150 s; t=175 s; t=200 s; t=225 s.



Abbildung 17: Links: Vergleiche der Helium-Volumenkonzentration zwischen CFD-Rechnungen und Experiment an verschiedenen Meßpunkten. Rechts: Lage der Meßpunkte.

Für die Abweichung zum Experiment kommen eventuell Faktoren wie ein für die LES nicht perfekt angepasstes Gitternetz und vom Lüfter erzeugte aber in der LES nicht berücksichtigte turbulente Wirbelstrukturen in Frage, da ja der eigentliche Lüfter nicht simuliert wurde. Da aus den Experimenten keine gemessenen Radialgeschwindigkeiten am Düsenaustritt vorlagen, bleibt auch diese Einflußgröße eine Unsicherheit in der Bewertung der CFD-Ergebnisse. Letztlich wären noch nicht berücksichtigte Einflüsse der Messapparatur zur Konzentrationsmessung auf das Strömungsfeld (und damit auf die Vermischung) oder Abweichungen in der Gebläsedrehzahl vom konstanten Wert 7 Hz in Betracht zu ziehen. In der LES-Rechnung wurde nach einem gewissen Zeitraum nach der Gebläseaktivierung trotz perfekt symmetrischer Initialisierungsbedingungen ein präzisieren des Gebläsestrahls um die Mittellage und eine im Behälter hin und her schwappende Anregung der Grenzfläche zwischen Luft und Helium beobachtet. Diese Bewegung der Fluidgrenzfläche trägt mit Sicherheit zu einer beschleunigten Durchmischung bei und kann im Experiment durch nicht der Idealisierung in der CFD entsprechende Anfangs- und Randbedingungen weiter verstärkt werden. eine weitere Aufklärung möglicher Ursachen für die beobachteten Abweichungen zwischen Experiment und CFD war aber im Projektzeitraum auf Grund der extrem hohen Rechenzeiten für diesen Vermischungsversuch nicht möglich.

Im Ergebnis der recht aufwändigen Untersuchungen muss leider festgestellt werden, dass die endgültige Ursache für die verbleibenden Unterschiede zwischen den experimentellen Daten und den CFD-Simulationen zur Erosion der Leichtgasschichtung im TH20-Versuch nicht aufgeklärt werden konnte. Die extremen Rechenzeiten für eine einzige Modell- und Parameterkombination, die im TH20-Versuch im Fall der LES-Simulation bei über 2 Monaten auf einem Hochleistungs-Cluster gelegen hat, ließ leider systematische Untersuchungen möglicher weiterer Einflußfaktoren nicht zu. Es wird daher für mögliche Folgeprojekte dringend empfohlen, zum Zweck der Modellbildung und Modell-Erstvalidierung auf kleinskalige, nach Möglichkeit stationäre Laborexperimente kleineren geometrischen Maßstabs und mit deutlich geringeren Versuchszeiten aufzusetzen und derart großskalige Experimente wie aus der ThAI-Versuchsserie als nachgelagerte Demonstrationstestfälle zu behandeln.

4.4 Strömungen mit Wärmetransport

In der dritten Projektphase wurden die Untersuchungen auf impulsgetriebene Strömungen mit Wärmetransport ausgedehnt.

4.4.1 Testfall einer differentiell beheizten Kammer

Dieser Testfall dient als einfache Validierungsstudie für thermisch induzierte Auftriebsströmung. Die experimentellen Daten stammen aus (Cheesewright, et al., 1986) und (King, 1989).

4.4.1.1 Beschreibung des Experiments

In einem luftgefüllten Hohlraum mit einem Verhältnis von Höhe zu Breite H/L=5 wird die linke Seitenwand beheizt und die rechte Seitenwand auf gekühlt. Die übrigen Wände sind isoliert und werden als adiabatisch behandelt. Die entstehende Konvektionsströmung ist annähernd zweidimensional.

Die im Experiment benutzten tatsächlichen Werte resultieren in einer Rayleighzahl (bezogen auf die Höhe H und die absolute Temperaturdifferenz) von $4,5 \cdot 10^{10}$ und einer Prandtlzahl

von 0,7. Die Einstellungen in der CFD-Simulation führten zu einer Rayleighzahl von $4,5 \cdot 10^{10}$ bzw. einer Prandtlzahl von 0,7. Verglichen werden in diesem Testfall skalierte Werte von mittlerer Geschwindigkeit, Temperatur, Reynoldsspannungen, lokale Nusseltzahl und turbulenter Wärmefluss.

Abbildung 18 zeigt eine Übersicht des experimentellen Aufbaus.



Abbildung 18: Aufbau und Randbedingung für differentiell beheizte Kammer.

4.4.1.2 Strömungsgebiet, Gittergenerierung und Randbedingungen der CFD-Simulation

Die Definition des Strömungsgebiets ist in diesem Versuch sehr einfach. Die Höhe wurde für die CFD-Rechnung auf 5 m gesetzt, die Breite L auf 1 m. An der beheizten bzw. gekühlten Wand wurde konstante Temperatur vorgeschrieben. Es wurden zwei Gitter definiert, ein Grobes mit 6272 Elementen und ein Feines mit 25088 Elementen. Die Gitterdichte im Bereich der Wände wurde konstant gehalten um für beide Gitter einen y⁺-Wert von ca. 1 zu erhalten. Die Ergebnisse waren alle nachweislich gitterunabhängig.

4.4.1.3 Das Modell-Setup der CFD-Simulation

Als Fluid in der Simulation wurde ein Material mit den Eigenschaften von Luft definiert. Die Zustandsgleichung entspricht einem Idealgas bei konstantem Druck, so dass die Dichte nur noch von der Temperatur abhängt. An der beheizten Wand wurde eine Temperatur T_{heiss} =74,4 °C vorgeschrieben, an der gekühlten Wand T_{kalt} =28,6 °C.

Es wurden drei verschiedene Turbulenzmodelle getestet, wobei hier allerdings die Auftriebseinflüsse auf die Produktionsterme für k und ω abgeschaltet wurden. Es konnte keine Konvergenz bei Rechnungen mit Auftriebsproduktion erreicht werden, ebenso wenig konnte Konvergenz mit dem SST-Modell erreicht werden. Anstelle von SST wurde auf das

Baseline-Turbulenzmodell in **ANSYS CFX** zurückgegriffen. Tabelle 8 zeigt eine Übersicht der benutzten Modelle.

Bezeichnung	Turbulenzmodell	Weitere Einstellungen
BSL_NoBuoyancyTurbulence	Baseline	
BSL_RS_ NoBuoyancyTurbulence	Baseline Reynolds Stress	
CustomSolver_RS_BSL_THF _NoBuoyancyTurbulence	Baseline Reynolds Stress zusammen mit Transportgleichungen für turbulenten Wärmefluss	Es wurde das THF- Modell nach Gleichung (86) eingesetzt.

Tabelle 8: Turbulenzmodelle für den Testfall der differentiell beheizten Kammer.

4.4.1.4 CFD-Simulationsergebnisse und Vergleich mit dem Experiment

Es werden folgende Größen zwischen CFD-Rechnungen und Experiment verglichen:

• Skalierte mittlere vertikale Geschwindigkeit auf halber Höhe y=H/2:

$$\frac{V}{U_C} \equiv \frac{V}{\sqrt{gL\beta(T_{heiss} - T_{kalt})}},$$
(97)

Dabei ist $\beta \equiv 1/(T_{heiss} - T_{kalt})$ der konstant gehaltene Koeffizient der thermischen Ausdehnung.

• Skalierte mittlere Temperatur auf halber Breite x=L/2:

$$T_{skaliert} \equiv \frac{T - T_{kalt}}{T_{heiss} - T_{kalt}}.$$
(98)

- Skalierte turbulente Schubspannung $\overline{\rho u'' v''} / (\overline{\rho} U_c^2)$ auf halber Höhe y=H/2.
- Skalierter vertikaler turbulenter Wärmefluss

$$\frac{\rho h'' v''}{c_{\rho} \overline{\rho} U_{C} (T_{heiss} - T_{kalt})}$$
(99)

auf halber Höhe y=H/2.

• Lokale Nusseltzahl an der heißen Wand x=0:

$$Nu = \frac{\dot{q}_{wand}L}{\lambda(T_{heiss} - T_{kalt})}$$
(100)

mit der Wärmeleitfähigkeit λ .

In Abbildung 19 sind detaillierte Vergleiche dieser Profile zwischen den eingesetzten numerischen Modellen und den experimentellen Werten dargestellt.

Es zeigt sich, dass die gemittelte Geschwindigkeit und Temperatur, ebenso die lokale Nusseltzahl, sehr gut mit allen Turbulenzmodellen vorhergesagt werden kann. Der wesentliche Unterschied zeigt sich beim turbulenten Wärmefluss: Alle Modellierungsansätze, bis auf CustomSolver_RS_BSL_THF_NoBuoyancyTurbulence, zeigen dagegen deutliche Abweichung zum Experiment. Die bei den anderen Modellen benutzte Modellierung des turbulenten Wärmestroms über die Gradientenhypothese, analog zu Gleichung (69), zeigt hier sogar ein falsches Vorzeichen.

4.4.2 Die TH-21-Testserie

In der TH-21-Testserie wird durch unterschiedliche Wandbeheizung Naturkonvektion innerhalb des ThAI-Behälters untersucht. Die Versuchsreihe besteht aus vier Einzelversuchen, in denen nominal gleiche Versuchsbedingungen herrschen, aber unterschiedliche Messung des Geschwindigkeitsfeldes stattfinden. Eine detaillierte Beschreibung der Experimente befindet sich im Fachbericht (Fischer, et al., 2009).

4.4.2.1 Beschreibung der modifizierten ThAI-Versuchseinrichtung

Im Vergleich zu TH-18 wurde für den TH-21-Testfall das Gebläse im Innenzylinder sowie die Kondensatwannen ausgebaut. Für TH-21 werden die Heizmäntel außerhalb des ThAI-Behälters aktiviert um eine freie Konvektionsströmung anzuregen. Der Innenzylinder wurde ferner auf der Außenseite thermisch isoliert, um an der Innenseite den Wärmeübergangskoeffizienten aus Meßdaten abschätzen zu können. Abbildung zeigt eine Übersicht des Versuchsaufbaus zusammen mit der benutzten Instrumentierung.



Abbildung 19: Differentiell beheizte Kammer: Vergleich der Profile auf dem feinsten Gitter für die eingesetzten numerischen Modelle und dem Experiment.



Abbildung 20: Übersicht des Aufbaus und der Instrumentierung für die Versuchsreihe TH-21.

4.4.2.2
4.4.2.3 Experimentelle Versuchsbedingungen von TH-21

Für alle vier Einzelversuche von TH-21 wird das folgende Programm ausgeführt:

1.	Schließen des Versuchsbehälters bei Normalbedingungen	
2.	Beheizung des unteren und mittleren Heizmantels mit voller Leistung, Kühlen des oberen Kühlmantels	
3.	Bei Erreichen einer Temperatur von 120 °C an den Heizmänteln Reduktion der Heizleistung und einregeln auf eine Temperatur von etwa 120 °C	Stunden)
4.	Konstante Heizleistung, verbunden mit einem nahezu stationären Zustand in der Temperaturverteilung an den Wänden und einem quasistationären Zustand im Versuchsbehälter	Phase 2

Tabelle 9: Übersicht der verschiedenen experimentellen Phasen für TH-21

4.4.2.4 CFD-Simulationen für TH-21 mit skalengemittelten Turbulenzmodellen

Es wurden zwei skalengemittelte CFD-Untersuchungen zu TH-21 durchgeführt.

- In einem Vorversuch wurden zweidimensionale stationäre und instationäre Rechnungen auf einem 1-Grad-Modell der Geometrie mit dem SST-Modell durchgeführt.
- Auf einem 180-Grad-Modell wurde eine dreidimensionale instationäre SST-Rechnung durchgeführt.

Im SST-Modell wurden dafür die Auftriebsproduktionsterme sowohl in der k- wie auch der ω -Gleichung aktiviert. Für die 2D-Rechnungen wurde zwei verschiedene Gitternetze erstellt, für die 3D-Rechnung ein weiteres, siehe Tabelle 10 bzw. Abbildung 21.

Anzahl der Knoten	Wert von y ⁺
60.986	0,50
321.506	0,12
6.896.828	
	Anzahl der Knoten 60.986 321.506 6.896.828

Tabelle 10: Statistiken der benutzen Gitter für skalengemittelte TH-21 Rechnungen.



Abbildung 21: Detail des 180-Grad-Rechengitters für TH-21

Das Fluid ist Luft als Idealgas. Für die 2D-Rechnungen wurde an den Heiz- und Kühlmänteln die Temperatur als Randbedingung vorgeschrieben und zeitlich konstant gehalten. Alle übrigen Wände sind als adiabatisch modelliert.

Für diese Rechnungen auf dem 1-Grad-Gitter wurde als Anfangsbedingung eine homogene Temperatur und Druck von 25 °C bzw. 1 atm vorgeschrieben. Die Energieerhaltung wird durch das *Total Energy*-Modell von **ANSYS CFX** sichergestellt. An den heißen Wänden wurde eine konstante Temperatur von 118,5 °C und an den kalten 24 °C vorgeschrieben. Für die transienten Rechnungen wurde auf Gitter 1 eine Zeitschrittweite von 0,1 s bzw. auf Gitter 2 eine Zeitschrittweite von 0.05 s.

Für die 3D-Rechnung wurden die Heiz- und Kühlmäntel als Festkörper (mit den Eigenschaften von Stahl) mit Wärmeleitung modelliert (*Conjugate Heat Transfer*). Die Temperatur wurde in diesem Fall an der äußersten Wand der Festkörper vorgeschrieben.

Abbildung 22 zeigt die resultierenden Geschwindigkeits- und Temperaturfelder für die stationäre Simulation. Es zeigte sich in den Untersuchungen, dass für die Simulation auf den 2-dimensionalen Gitternetzen eine stationäre Lösung existiert. Dies ist aber offensichtlich nur der Fall, da die aufgeprägten Symmetrierandbedingungen an Vorder- und Rückseite des 1-Grad-Sektors der Strömungsgeometrie Freiheitsgrade der Strömung in nicht zulässiger Weise einschränken. Eine ebenfalls ausgeführte transiente Simulation auf dem 2-dimensionalen Gitternetz 2 erbrachte dagegen ein periodisches Verhalten, bei dem auf Grund der instabilen thermischen Schichtung in periodischen Zeitabständen kalte Luft aus dem oberen Plenum des Behälters durch den Innenzylinder in den unteren Behälterraum gelangt. Die zeitlich gemittelten Temperatur- und Geschwindigkeitsverteilungen entsprachen dagegen wieder weitgehend den Ergebnissen der stationären Simulation. Dieses Simulationsergebnis ist ein deutlicher Hinweis auf einen inhärent instationären Charakter dieser Naturkonvektionsströmung, weshalb alle folgenden Untersuchungen ausschließlich als instationäre CFD-Simulationen ausgeführt wurden.



Abbildung 22: TH-21, stationäre Vorlaufsrechnung auf dem 2-dimensionalen Gitter 2. Links: Geschwindigkeit mit Stromlinien, rechts: Temperatur

Stationäre Rechnungen auf dem 180-Grad-Rechengitter ergaben keine konvergente Lösung für Geschwindigkeit oder Temperatur. Daraufhin wurden transiente Rechnung mit adaptiver Zeitschrittweite zwischen 0,01 s und 0,5 s durchgeführt. Die Anfangstemperatur wurde auf 13 °C und der Anfangsdruck auf 1,021 bar gesetzt.

Die resultierenden gemittelten Geschwindigkeits- und Temperaturfelder sind in Abbildung 23 dargestellt.

4.4.2.5 CFD-Simulation für TH-21 mit skalenauflösenden Turbulenzmodellen

Ein Nachteil der oben verwendeten skalengemittelten Modelle ist, dass turbulente Strukturen, die vom Gitter sehr wohl aufgelöst werden könnten heraus gedämpft werden. Skalenaufgelöste Turbulenzmodelle könnten hier zu einer realistischeren Vorhersage der relevanten physikalischen Phänomene führen.

Alle skalenauflösenden CFD-Untersuchungen wurden auf dem, aufgrund der hohen Rechenzeitanforderungen, ausgedünnten 180° Gitter der SST Rechnungen durchgeführt.

	Anzahl der Knoten	Wert von y ⁺
180-Grad-Gitter	1.737.182	15

Tabelle 11: Statistiken des benutzen Gitters für skalenaufgelöste TH-21 Rechnungen.

Als Fluid dient wiederum Luft als ideales Gas. Die Temperaturen an den Heiz- und Kühlmänteln wurden entsprechend der experimentellen Daten transient vorgeschrieben (Fischer, et al., 2009). Für den Kesselboden und Sumpfraum, sowie für die obere Kesselkuppel wurde diesmal, gemäß dem Fachbericht (Fischer, et al., 2009), ein Wärmeübergang zugelassen.

Eine Momentaufnahme der Wirbelstärke ist für beide Initialisierungen in Abbildung 24 dargestellt. Gut zu erkennen sind die länglichen Wirbelstrukturen, die sich innerhalb des entstanden Konvektionskreislaufes gebildet haben. Der Sumpfraum wird kaum durchmischt.



Abbildung 23: Ergebnisse der transienten 180-Grad-SST-Rechnung für TH-21. Links: Schnitt durch Symmetrieebene, gemitteltes Temperaturfeld, unten zusätzlich die Stromlinien der mittleren Geschwindigkeit. Rechts: Temperatur, unten Stromlinien, hier Querschnitt durch die YZ-Ebene.



1.	Die Anfangstemperatur entspricht dem homogenen Zustand beim Schließen des ThAI Behälters.	$p_{t0,Exp.} = 1,021 \text{ bar},$ $T_{t0,Exp.} = 13 ^{\circ}\text{C}$	Simulations- zeit = 7,5 h	80.000 CPUh
2.	Vorausgesetzt wird eine Isochore Zustandsänderung vom Anfangszustand beim Schließen zum quasistationären Endzustand. Damit erfolgt die homogene Initialisierung mit den Mittelwerten p _{t1} aus dem Experiment, bzw. T _{t1} aus der isochoren Zustandsänderung.	$p_{t1,Exp.} = 1,242 \text{ bar},$ $T_{t1,Calc.} = (p_{t1,Exp.}/p_{t0,Exp.})*T_{t0,Exp.}$ = 74,9 °C	Simulations- zeit = 1,0 h	15.000 CPUh

Tabelle 12: Initialisierungen für TH-21 und Rechenzeiten

4.4.2.6 CFD-Experiment-Vergleich

Der experimentelle Versuchsaufbau, sowie das CFD-Setup, sind mit einer großen Zahl von korrespondierenden Messaufnehmern bzw. Monitoring-Punkten ausgerüstet.

Abbildung 25 stellt den Verlauf des Druckes für das Experiment (blau) und die beiden Simulationen (grün und rot) dar. Der Druck wird in beiden Simulationen überbestimmt, leider ist eine endgültige Aussage im Vergleich zum Experiment nicht möglich, da in keinem der drei Fälle ein quasistationärer Endzustand erreicht wurde.



Abbildung 25: TH-21 Simulation – Kesseldruck.



Abbildung 26: TH-21 Simulation – Temperatursensor im Sumpfraum.



Abbildung 27: Überblendung der räumlichen Diskretisierung von einem Upwind- (schwarz) zu einem Zentrale-Differenzen-Verfahren (weiß) Abbildung 26 verdeutlicht diese Problematik noch einmal. Der Behälter befindet sich noch in der Aufheizphase, weshalb die im Experiment gemessene Endtemperatur im Sumpfraum leider nicht konstant ist. Darüber hinaus zeigt der Verlauf der grünen Kurve, also der transienten Anlaufrechung, dass in der CFD-Simulation die Durchmischung im unteren Bereich sehr gering ist. Im Wesentlichen wird hier die Initialtemperatur von ca. 14°C konserviert, auch begünstigt durch die gute Wärmeisolation im Sumpfraum. Zumindest die isochore Rechnung, die dunkelrote Kurve, liefert Werte in einem realistischen Bereich zwischen den beiden Wandtemperaturen. Allerdings ist auch hier die Durchmischung im Sumpfbereich außerordentlich gering.

Ein möglicher Grund könnte eine für das SAS Model implementierte Überblendung der räumlichen Diskretisierung von einem Upwind-Verfahren an der Wand auf ein Zentrale-Differenzen-Verfahren im Inneren des Rechengebiets sein, Abbildung 27.

Die Bereiche, die stark durch die dominierende thermische Konvektion beeinflusst werden, zeigen allesamt eine recht gute Übereinstimmung zwischen Experiment und CFD, Abbildung 26 und Tabelle 13.



Abbildung 28: TH-21 Simulation – Temperatursensor in der Konvektionsströmung.

Sensor	Experimen t (11.3 h)	Simulation (Init 0h)	Abweichun g zum Experiment	Simulation (Init 7.5h)	Abweichun g zum Experiment
DPA77H16	1,243 bar	1,276 bar	2,6 %	1,289 bar	3,7 %
STF07M00	43,3 °C	14,6 °C	66,3 %	47,8 °C	10,4 %
BTF21H11	88,8 °C	80,5 °C	9,3 %	86,19 °C	2,9 %
CTF28M00	87,8 °C	85,7 °C	2,4 %	87,2 °C	0,7 %
DTF63H11	90,9 °C	88,7 °C	2,4 %	90,0 °C	1 %
DTF63H15	96,6 °C	90,7 °C	6,1 %	92,7 °C	4 %
DTF70H11	85,5 °C	86,2 °C	0,8 %	88,7 °C	3,7 %
DTF70H15	82,3 °C	85,7 °C	4,1 %	85,7 °C	4,1 %
DTF84H11	85,8 °C	86,5 °C	0,8 %	88,8 °C	3,5 %
CTW28H07	81,3 °C	68,3 °C	16,0 %	77,4 °C	4,8 %

Tabelle 13: TH-21 Simulation – Abweichungen zum Experiment

Auch der Verlauf der Vertikalgeschwindigkeiten zeigt tendenziell eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment, Abbildung 29.



Abbildung 29: TH-21 Simulation – Vertikalgeschwindigkeit im inneren Zylinder.

Hier fällt allerdings zu Anfang der Messung auf, dass die Werte des Flügelrad-Anemometers konstant bei einem Wert ungleich Null verharren. Aufgrund der Trägheit des Flügelrads könnte erklärt werden warum erst nach zwei Stunden Abweichungen von diesem Anfangszustand gemessen wurden. Eine Abschätzung des Messfehlers seitens des Experimentators wäre hier, und auch für alle anderen Sensoren, durchaus wünschenswert.

4.4.2.7 Diskussion und Schlussfolgerungen für TH-21

Das Ergebnis der transienten 180-Grad-Rechnung für den Testfall TH-21 zeigt die erwartete Temperaturschichtung. Die Schnittstelle zwischen kalter und warmer Luft bildet sich in der Höhe der umlaufenden Kondensatrinne. An dieser Stelle löst die Strömung ab und bildet kalte und heiße Konvektionswalzen. Es zeigt sich jedoch ein stark instabiles und transientes Verhalten der Strömung, vor allem im Bereich des oberen Plenums und des Innenzylinders, wo unregelmäßige Durchbrüche von kalter Luft in warme Luft und umgekehrt auftreten. Statistische Mittelung der Ergebnisse über einen längeren Simulationszeitraum könnte wiederum im thermischen Beharrungszustand ein im statistischen Sinne stationäres Verhalten der Strömung ergeben. Dieser thermische Beharrungszustand wurde jedoch im TH-21-Versuch nicht erreicht du auf Grund der nur sehr geringen konvektiven Durchströmung des Sumpfraumes und dessen Verbleibens bei einer recht geringen Temperatur ist auch in der CFD-Simulation das Erreichen des thermischen Beharrungszustandes mit sehr langen Rechenzeiten verbunden, so dass es in der Praxis eher problematisch ist, eine solche statistische Mittelung für die skalenaufgelöste SAS-SST-Rechnung mit vertrauenswürdiger Mittelwertbildung tatsächlich durchzuführen.

4.4.3 Die TH-22-Testserie

Aufgrund der Erfahrungen mit dem Testfall TH-21 wurde von Becker Technologies, Eschborn, das Experiment unter sehr ähnlichen Versuchsbedingungen als Versuch TH-22 wiederholt und als blinder Benchmark ausgeschrieben. ANSYS Germany hat sich an diesem Testfall TH-22 beteiligt. Hierzu sei auch auf den entsprechenden an Becker Technologies übergebenen Testbericht verwiesen (Lübon, et al., 2010).

4.4.3.1 Experimentelle Versuchsbedingungen von TH-22

Der experimentelle Aufbau ist in Abbildung 30 dargestellt und entspricht weitestgehend der TH-21 Konfiguration. Die einzige Änderung war das Entfernen der Isolierung des Innenzylinders und die deutlich längere Laufzeit, die diesmal auch zu einem quasistationären Zustand führte.

Details können im Bericht zum TH22 Experiment nachgelesen werden (Fischer, et al., 2010).



Abbildung 30: TH-22 – Experimenteller Aufbau

4.4.3.2 Strömungsgebiet, Gittergenerierung und Randbedingungen der CFD-Simulation

Das Rechengebiet beinhaltete diesmal den kompletten Behälter (360°) ohne Symmetrie-Randbedingungen, was das Entstehen von realistischen dreidimensionalen turbulenten Strukturen ermöglichen soll. Das Gitter besteht aus 3,6 Millionen hexaedrischen Elementen.

4.4.3.3 CFD-Simulation für TH-22 mit skalenauflösenden Turbulenzmodellen

Aus den Erfahrungen mit dem Testfall TH-21 wurde auch hier eine Scale-Adaptive Simulation (SAS) durchgeführt.

Aufgrund des nochmals vergrößerten (annähernd verdoppelten) Gitters, der damit erhöhten Zellenzahl und den höheren Rechenkosten konnte keine komplette Aufheiztransiente berechnet werden. Stattdessen wurde der Behälter isochor mit konstanten Werten und in Übereinstimmung mit dem von Becker Technologies in den Benchmark-Daten mitgeteilten Behälterdruck im thermischen Gleichgewichtszustand initialisiert. Danach erfolgte aus diesem Zustand eine SAS-Rechnung die nach einer Stunde "Realtime"-Simulation für eine vollständige Durchmischung des Behälters aufgrund von thermischer Konvektion sorgte, Abbildung 31.



Abbildung 31: TH-22 Simulation – Quasistationärer Endzustand – Wirbelstrukturen und aufgelöste Turbulenz (links), Temperaturverteilung (rechts)

Daraufhin erfolgte eine Heliumeinspeisung im oberen Bereich des Behälters, die über eine Düse nach oben gerichtet eingebracht wird. Das Helium verteilt sich im Behälter, Abbildung 32, bleibt aber aufgrund seiner geringen Dichte im oberen Bereich des Kessels und unterdrückt deshalb nach kurzer Zeit die komplette thermische Konvektion.



Abbildung 32: TH-22 Simulation – Helium Verteilung (links 2s, rechts 8min nach der Injektion)

Die Heliumvermischung wurde bis zum Erreichen eines stabil geschichteten Zustands berechnet. Die darauffolgende Dissoziation dieser Heliumschichtung wurde nicht berechnet, da solch elementare Untersuchungen auch an deutlich einfacheren Geometrien untersucht werden können.

Die Simulationszeit betrug 4 Wochen auf 96 Cores eines Linux Clusters.

4.4.3.4 CFD-Experiment-Vergleich

Abbildung 33 stellt den Verlauf des Druckes für das Experiment (blau) und die Simulationen (grün) gegenüber. Zum Zeitpunkt t=23 h wird die Simulation, wie bereits oben geschildert, aus einer isochoren Zustandsänderung mit einem einheitlichem Druck und einer einheitlichen Temperatur im kompletten Behälter initialisiert. Im darauffolgenden Anfahrprozess von Δt =1.17 h wird dann der quasistationäre Gleichgewichtszustand erreicht, bei welchem der Druck etwas über dem initialisierten Druck liegt, aber doch eine gute Übereinstimmung zeigt. In diese jetzt voll ausgebildete Strömung, dominiert durch thermische Konvektion, wird zum Zeitpunkt t=24.17 h Helium injiziert, was einen deutlichen Druckanstieg zur Folge hat. Auch

dieser Druckanstieg zeigt eine bemerkenswerte Übereinstimmung zum Experiment. Aus der Messung liegen ab etwa 23.8 h Daten mit höheren Abtastraten vor. Unklar ist hier leider ob die zu sehenden Schwankungen durch den Messfehler hervorgerufen wurden, oder physikalisch bedingt sind.



Abbildung 33: TH-22 Simulation – Kesseldruck

Eine weitere interessante Größe stellt die Temperaturverteilung im Kessel dar, die in Abbildung 34 dargestellt ist. Die blaue Kurve entspricht dem Experiment, die grüne der Simulation. Auffallend sind zwei Dinge, zum einen ein Versatz zwischen den Kurven von zirka 4°C und zum anderen ein Temperatursprung beider Kurven an exakt der gleichen Stelle. Bei der Simulation wurde großes Augenmerk auf vergleichbare Randbedingungen gelegt, so wurde beispielsweise der Wärmübergang durch die Wände, die Isolierung des Sumpfraums oder auch die Gebäudeaußentemperatur mit modelliert. Bei solch einer komplexen Geometrie wie dieser lassen sich allerdings etwas unterschiedliche Randbedingungen kaum vermeiden, die dann zu einem geringfügig anderen Gleichgewichtszustand führen und auch den Versatz zwischen Experiment und Simulation erklären könnten. Im Experiment verwundert der recht große Versatz zwischen den Messpunkten von zirka 2°C im unteren Bereich des Kessels, der bei zeitlich gemittelten Daten so nicht zu erwarten war.



Abbildung 34: TH-22 Simulation – Vertikale Temperaturverteilung bei Radius r=1.15m

Die einzigen gemessenen instationären Daten sind die Temperaturfluktuationen an diesem Punkt, Abbildung 35 und Abbildung 36. Bei genauem hinsehen fällt auf, das die hier gezeigten Ergebnisse (CFXANS), ähnlich dem Experiment, keine dominanten tieffrequenten Fluktuationen beinhalten. Die Simulationen der Projektpartner, die entweder zweidimensional oder mit deutlich einfachen Modellen berechnet wurden, beinhalten allesamt tieffrequente Anteile, deren Ursprung die damit verbundenen unzulässigen Vereinfachungen sind. Für eine weitere Analyse, beispielsweise die Berechnung und der Vergleich eines turbulenten Energiespektrums, ist die Datenmenge leider nicht geeignet.



Abbildung 35: TH22 – Fourier-Amplituden der Temperaturfluktuationen am oberen Ende des inneren Zylinders (Quelle (Fischer, et al., 2010))



Abbildung 36: TH22 – Temperaturverlauf am oberen Ende des inneren Zylinders (Quelle (Fischer, et al., 2010))

Vergleicht man nun die Temperaturen im Kessel während der Helium Injektion, wie hier exemplarisch für den Sensor DTF84M00 im oberen Plenum, so ergibt sich Abbildung 37.



Abbildung 37: TH22 – Temperaturverlauf während der Helium Injektion

Auch hier ist beim quasistationären Endzustand (Dunkelgrün - ANSYS CFX: Init 23h) eine Differenz zum Experiment (Hellblau - Experiment) zu erkennen, die durch die Randbedingungen verursacht wurde. Aus diesem Grund und Aufgrund besserer Vergleichbarkeit wurde die Temperaturkurve um 4°C angehoben (Hellgrün - ANSYS CFX: Init 23h shifted). Hier ist erkennbar, dass der Temperaturabfall im oberen Plenum etwas überbestimmt wird, die Tendenz aber recht gut übereinstimmt.

4.4.3.5 Diskussion und Schlussfolgerungen für TH-22

Die Ergebnisse der Rechnung zeigen, dass alle relevanten physikalischen Phänomene korrekt bestimmt wurden.

Die außerordentlich lange Anheizphase konnte durch eine isochore Zustandsänderung angenähert werden, was den Rechenzeitbedarf deutlich verringerte. Der danach bestimmte quasistationäre Kesselzustand stimmt im Wesentlichen mit dem Experiment überein. Die Differenzen hierbei können an unterschiedlichen Randbedingungen liegen. Eine bessere Instrumentierung des Experiments wäre hier wünschenswert, insbesondere die Bereitstellung von instationären Daten mit hoher zeitlicher Auflösung und die Bereitstellung von Geschwidigkeitsfelddaten und Turbulenzgrößen im Hinblick auf den Vergleich mit skalenauflösenden Turbulenzmodellen. Es hat sich außerdem gezeigt, dass die Verwendung eines 360-Grad Netzes empfehlenswert ist. Die Heliumausbreitung, mit dem damit verbundenen Zusammenbruch des gesamten thermischen Konvektionsprozesses, wurde simuliert. Allerdings wurde auf eine Simulation der Heliumdissoziation verzichtet.

Aus der Simulation der weiteren Auflösung der Leichtgaswolke im oberen Plenum von ThAI durch andere Projektpartner ist bekannt, dass die Simulationsergebnisse hierfür – ähnlich wie im Fall des TH20-Experiments – wiederum stärker von den experimentell gemessenen Vermischungszeiten abwichen. In der Tendenz werden die Vermischungszeiten und die Zeit bis zum Wiedereinsetzen eines Naturkonvektionsprozesses im TH22-Versuch durch die CFD-Simulationen deutlich zu lang vorhergesagt bzw. berechnet. Ein wesentlicher Faktor ist dabei die Unterbrechung der Naturkonvektion durch den Innenzylinder von TH21/TH22 in dem Moment, wenn die untere Grenze der Dichteschichtung der Leichtgaswolke bei ihrer Ausbreitung im Behälter die Oberkante des Innenzylinders erreicht. In dieser Situation wirkt der dichtegetriebene Auftrieb in der Leichtgaswolke der abwärts gerichteten Konvektion im Innenzylinder entgegen und unterbricht diese Konvektionsbewegung. Nun ist allerdings die Konzentration des Heliums in der Leichtgaswolke nicht bei 100% sondern vielmehr bei deutlich niedrigeren Werten. Der Heliumgehalt in der Leichtgaswolke ist dabei neben der absolut eingedüsten Menge Helium von diffusiven Prozessen abhängig. Zum einen von der turbulenten Vermischung des Heliumfreistrahls aus der Düse mit der umgebenden kalten Luft im oberen Plenum, von molekularer Diffusion des Heliums in Luft (die deutlich geringer und vermutlich in der zunächst noch konvektiv dominierten Strömung zu vernachlässigen ist) und von Effekten der numerischen Diffusion, die durch z.B. die Gitterauflösung und die numerische Diffusion des verwendeten Advektionsschemas bestimmt ist. So konnte beobachtet werden, dass die räumliche Lage der Unterkante der Leichtgaswolke auf sehr groben Gitternetzen deutlich niedriger lag als auf fein aufgelösten Gitternetzen, was auf den Einfluss der numerischen Diffusion auf den groben Gitternetzen und eine stärkere diffusive Vermischung des Heliums im oberen Plenum in diesen Simulationen hindeutet. In gleichem Masse würde ein weniger breit auffächernder Heliumfreistrahl mit geringer Vermischung mit der umgebenden kalten Luft im oberen Plenum tendenziell zu höheren lokalen Heliumkonzentrationen und damit zu einer geringeren räumlichen Ausbreitung der Leichtgaswolke, somit zu einer höher liegenden Unterkante, die die Oberkante des Innenzylinders eventl, sogar nicht vollständig überdeckt und somit ein Wiederanlaufen der thermischen Konvektion begünstigt. Die tiefere Lage der Unterkante der Leichtgaswolke verhinderte in den Simulationen mit hoher numerischer Diffusion auf Grund grober Gitternetze aber sogar dauerhaft ein Wiederanlaufen der Naturkonvektion in dieser TH22-Simulation, während CFD-Simulationen mit geringerer numerischer Diffusion das Wiedereinsetzen der thermischen Konvektion durchaus berechnen konnten, wenn auch bei deutlich zu langen Zeiten bis zur Wiederaufnahme der Umlaufströmung durch den Innenzylinder und tendenziell bei deutlich zu langen Vermischungszeiten bis zur Auflösung der Leichtgaswolke.. Überlagert wird dieser durch die Geometrie des TH22-Versuchs und den Innenzylindereinbau bedingte qualitative Effekt mit Gittereinflüssen (numerischer Diffusion) und den bereits in TH20 festgestellten tendenziell stets zu langen Vermischungszeiten für eine Leichtgaswolke in den **CFD-Simulationen** mit Wirbelviskositäts-basierten bzw. skalen-aufgelösten Turbuklenzmodellen. Eine detailliertere Untersuchung dieser Phänomene und komplexen Physik-, Modell- und Numerik-Wechselwirkungen war wiederum auf Grund der extrem langen CFD-Simulationszeiten für die ThAI-III-Versuche nicht möglich, weshalb auch hier empfohlen wird, das ThAI-Versuchsprogramm durch kleinskalige, sehr gut instrumentierte Laborexperimente für derartige Detailphänomene zu ergänzen.

5 Bereitstellung der CFD-Module

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. Im November 2010 wurde darüber hinaus auch ANSYS CFX 13.0 für die Kunden und Projektpartner verfügbar. Diese Version von ANSYS CFX enthält nunmehr auch die für Containment-Simulationen relevanten Wandkondensations- und Thermal Heat Flux Turbulenz-Modelle.

Interessierten Projektpartnern (GRS, Universität Stuttgart) wurden darüber hinaus in regelmäßigen Abständen Vorabversionen der Software (Customized Solver bzw. 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. Dies betrifft insbesondere die Bereitstellung des Turbulent Scalar Flux Turbulenzmodells (TSF) für die Universität Stuttgart für Detailuntersuchungen an dem Testfall TH-20.

Darüber hinaus ist ANSYS CFX Gegenstand von permanenten Bemühungen, die Robustheit der physikalischen Modelle 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 Strömungsberechnungen bei unverändert gegebener Konvergenz der Lösung. Die Stabilität und Robustheit von Strömungen die mit dem EARSM¹¹ Turbulenzmodell berechnet werden, konnte im Berichtszeitraum für viele Anwendungen verbessert werden. Die durch die detaillierten Untersuchungen an den vereinfachten Testfällen im vorliegenden Forschungsvorhaben bekannt gewordenen Fehler in der Implementierung der Produktionsund Dissipationsterme für die auftriebsinduzierte Turbulenz im Zusammenwirken mit Reynoldsspannungs-Turbulenzmodellen sind in der aktuellen Version ANSYS CFX 13.0 korrigiert worden und somit steht den Projektpartnern auch hierfür eine validierte Softwarelösung zur Verfügung.

¹¹ EARSM – Explicit Algebraic Reynolds Stress Model

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, die Becker Technologies GmbH, das FZ Dresden-Rossendorf und das FZ Karlsruhe, die Universität Stuttgart, die FH Görlitz-Zittau, die Universität Darmstadt und die TU München 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, der Universität Pisa sowie von Vattenfall in Norwegen mit Beobachterstatus besucht. Darüber hinaus fand der CFD-Verbund Reaktorsicherheit Beachtung und großes Interesse bei den Projektpartnern des EU-NURESIM¹² Forschungsvorhabens (http://www.nuresim.com) NURISP / http://www.nurisp.eu) und dem skandinavischen Forschungsverbund NORTHNET¹³.

Die Arbeiten in dem vorliegenden Forschungsvorhaben wurden in enger Zusammenarbeit mit den folgenden Forschungsvorhaben an der TU Stuttgart und bei der GRS ausgeführt und sind eng mit den experimentellen Untersuchungen an der ThAI-Versuchsanlage bei Becker Technologies GmbH koordiniert:

- 1501339: Turbulenzmodellierung für CFD-Methoden zur Simulation von Strömungen im Sicherheitsbehälter, Institut für Kernenergetik und Energiesysteme (IKE), Universität Stuttgart
- RS1181 Qualifizierung von CFX für die Simulation der Thermohydraulik im Sicherheitseinschluss, GRS mbH, Köln
- 1501325: ThAI-Phase III (national)), Becker Technologies GmbH, Eschborn
- 1501326: Versuchsprogramm zum Spaltprodukt- und Wasserstoffverhalten im Containment (ThAI Phase III national 2), Becker Technologies GmbH, Eschborn
- 1501361 Versuchsprogramm zu quelltermrelevanten Phänomenen im Containment sowie zur weiteren Entwicklung und Validierung von Rechenmodellen, THAI IV, Becker Technologies GmbH, Eschborn

7 Zusammenfassung

Ein Schwerpunkt der Arbeiten im vorliegenden Forschungsvorhaben bestand zum Einen in der Untersuchung von für die Kernreaktorsicherheit relevanten turbulenten und auftriebsbeinflussten Ein- und Mehrkomponentenströmungen, der Modellbildung und der Modellvalidierung unter Verwendung von an der ThAI-Versuchseinrichtung von Becker Technologies GmbH, Eschborn gewonnenen experimentellen Daten in enger Kooperation mit den Experimentalisten und zum Anderen in der Entwicklung und prototypischen Implementierung von Turbulenzmodellen für Strömungen mit temperatur- und dichte-induziertem Auftrieb.

¹² NURESIM – European Platform for NUclar REactor SIMulations

¹³ NORTHNET – A Network for Reactor Thermohydraulics and Nulear Reactor Safety

Die Arbeiten im Berichtszeitraum im Hinblick auf eine fortschreitende Qualifizierung von ANSYS CFX und eine Weiterentwicklung und Validierung der implementierten Turbulenzmodelle in Containment-relevanten Strömugnsszenarien konzentrierten sich auf ausgeprägt dreidimensionale Ein- und Mehrkomponentenströmungen mit ansteigender Komplexität. Die Reihe der untersuchten Experimente aus der ThAI-III und ThAI-IV-Versuchsserie reichten von rein impulsgetriebener Luftsträmung im ThAI-Behälter mit Innenzylinder und eingebauten Kondensatwannen (TH-18), über einen Versuch im ThAI-Behälter mit Innenzylinder zur impulsgetriebenen Erosion einer Leichtgasschichtung (Helium-Schichtung, TH-20) bis hin zu den sowohl temperatur- als auch dichte-beeinflussten Versuchsszenarios der TH-21 und TH-22-Versuche.

Für den Vergleich von Simulationsrechnungen mit ANSYS CFX für den TH-18-Versuch wurde im Bereich des oberen Plenums der ThAI-Veruchsanlage in überwiegend allen Simulationen eine recht gute Übereinstimmung festgestellt. Die Austrittsprofile des Lüfterfreistrahls in verschiedenen Abständen zum Austrittsquerschnitt und die Geschwindigkeitsprofile im oberen Plenum soweit vermessen konnten mit den eingesetzten Turbulenzmodellen (SST, BSL RSM, SAS-SST) mit guter Genauigkeit berechnet werden. Die Genauigkeit nimmt mit zunehmender Modellkomplexität zu (BSL RSM genauer als SST, SAS-SST genauer als BSL RSM), wobei jedoch auch der numerische Berechnungsaufwand entsprechend ansteigt, so dass es dem Modellanwender überlassen bleibt, welchen rechentechnischen Aufwand er für welchen Gewinn an Berechnungsgenauigkeit bereit ist zu investieren. Die höchste Genauigkeit lieferten die skalenauflösenden SAS-SST-Simulationen, die jedoch voll transient und 3-dimensional erfolgen müssen und einen nicht unerheblichen Aufwand für eine statistische Mittelung der Simulationsergebnisse über einen statistisch relevanten Zeitraum erfordern. Im Bereich unterhalb der Kondensatwannen und im Bereich unterhalb des Innenzylinders wurden größere Abweichungen zwischen Messung ud CFD-Simulationen in allen untersuchten Fällen festgestellt. Die SAS-SST-Simulationen erbrachten hierbei den Hinweis, dass trotz der vorliegenden Symmetrie der ThAI-Geometrie, die Strömung statistisch nicht symmetrisch ist. Dies wurde leider in den Experimenten nicht meßtechnisch für den Berecih unterhalb der Kondensatwannen verifiziert. Die als Linienmessung lediglich über einen als repräsentativ angenommenen Querschnitt der Durchlassöffnungen in den Kondensatwannen ausgeführten Geschwindigkeitsprofil-Messungen weisen größere Differenzen zu den CFD-Simulationsergebnissen auf. Die CFD-Simulationen sind hierbei bezüglich der Massenstromverhältnisse zwischen den Kondensatwannendurchbrüchen plausibler. Eine Ursache der gefundenen Abweichungen konnte leider nicht weiter aufgeklärt werden, da das TH-18-Experiment im Zeitraum des Forschungsvorhabens leider nicht mit verstärkter Instrumentierung des Versuchs durchgeführt werden konnte.

In einer weiteren Turbulenzmodell-Validierungsstudie wurden anhand von TH-20 Strömungen mit dichte-getriebenem Auftrieb untersucht. Die mit wirbelviskositätsbasierten statistischen Turbulenzmodellen (SST mit Auftriebstermen) vorgenommenen CFD-Simulationen wiesen hierfür leider größere Abweichungen in den berechneten Zeiten für die Erosion der Leichtgasschichtung im TH-20-Versuch auf. Die Überschätzung der Erosionszeiten bewegte sich je nach Annahmen für die turbulenten Randbedingungen des für die Erosion eingesetzten Gebläses bei einem Faktor von 1.5-3.0. Bei den Untersuchungen zeigte sich aber auch insbesondere, dass die turbulente kinetische Energie und die leider nicht gemessene Radialgeschwindigkeitskomponente am Lüfteraustritt einen recht bedeutenden Einfluss auf die Erosionszeit haben. Des Weiteren wurde der Lüfter nur im ausgebauten Zustand, also nicht innerhalb der Zwangsströmung innerhalb der ThAI-Anlage, vermessen, was zu weiteren Differenzen zwischen dem Versuch und den in der CFD angenommenen Strömungsrandbedingungen führen kann. Zur Gewinnung weiterer detaillierter Erkenntnisse wurde für den TH-20-Versuch mit großem rechentechnischen Aufwand eine LES ausgeführt. Es konnte dabei festgestellt werden, dass sich die Umfangs-gemittelten Ergebnisse der LES-Übereinstimmung den Simulation in einer recht guten mit SST-Modell-Simulationsrechnungen befanden, was jedoch auch bedeutete, dass sich die Abweichungen in der berechneten Erosionsgeschwindigkeit der Leichtgasschichtung in etwa in gleicher Größenordnung befinden. Wegen des extrem hohen rechentechnischen Aufwandes für die Nachrechnung der transienten und vollständig 3-dimensionalen ThAI-Versuche war eine systematische Variation möglicher Einflußfaktoren leider nicht möglich. Es ist somit weder auszuschließen, dass es im Versuch einen in der CFD-Simulation bisher nicht reflektierten Einfluß gegeben hat, der zu einer beschleunigten Heliumvermischung geführt hat, oder dass es in der in der CFD-Simulation eingesetzten Turbulenzmodellierung noch eine unzureichende Modellierung des dichte-getriebenen Auftriebs und dessen Einflusses auf die Fluidturbulenz gibt. Hierbei ist jedoch auch anzumerken, dass zumindest für die LES-Simulation der Anteil der modellierten turbulenten Skalen sich auf die Skalen unterhalb der Gitterskalen (subgrid-scale turbulence) beschränkt und das eingesetzte Gitternetz bereits recht fein aufgelöst war, somit der Einflu- von Turbulenzmodellierung gegenüber der direkt aufgelösten Turbulenz in der ausgeführten CFD-Simulation bereits recht gering war.

In einer weiteren Validierungsuntersuchung beteiligte sich ANSYS Germany an dem von Becker Technologies GmbH ausgeschriebenen blinden TH-21 und TH-22 Benchmarks. Für TH-21 wurde die gesamte Aufheiztransiente für den TH-21 Versuch bis zur Erreichung des quasi-stationären thermischen Gleichgewichtszustandes für den ThAI-Behälter mit seinen Kühl- und Heizmänteln berechnet. Der in der auf einem 180-Grad-Gitter mit dem SST-Turbulenzmodell erreichte Behälterdruck, das zeitlich gemittelte Geschwindigkeits- und Temperaturfeld sowie Vergleichsgrößen an verschiedenen Behälterpositionen waren überwiegend in guter Übereinstimmung mit den Experimenten. Lediglich der Sumpfraum des ThAI-Behälters zeigt in der CFD-Simulation eine zu geringe konvektive Durchströmung und nimmt an der thermischen Vermischung im Behälter kaum teil. Ein Grund könnte in den überwiegend laminaren Strömungsverhältnissen in diesem Teilvolumen und in dem Einsatz Turbulenzmodells für den Gesamtbehälter liegen eines (lokal überbestimmte Turbulenzviskosität). Der Rechenzeiteinsatz für die zeitliche Transiente betrug über 80.000 CPU-Stunden auf einem Cluster mit 32 bis 64 CPU-Rechenkernen. In Absprache mit Becker Technologies wurde der Rechenaufwand für den TH-22-Versuch durch eine isochore Initialisierung des ThAI-Behälters im thermischen Gleichgewichtszustand deutlich reduziert. Nach der CFD-Simulation von lediglich 1 Stunde Realzeit wurde ein gut ausgeprägter thermischer Beharrungszustand für den TH-22-Versuch in der Simulation erreicht, der in recht guter Übereinstimmung mit den experimentellen Befunden ist. Im Anschluß wurde auch die Phase der Heliumeinspeisung simuliert und es konnte die durch die Ausprägung der Leichtgaswolke vollständige Unterdrückung der Naturkonvektion erfolgreich berechnet werden. Wie bereits diskutiert, ist die erneute Auflösung der Leichtgaswolke von vielen unterschiedlichen Faktoren abhängig und die CFD-Simulation dafür mit den gleichen Unsicherheiten behaftet wie im Fall des TH-20-Versuchs. Eine systematische Untersuchung dieser Einflußfaktoren ist anhand der ThAI-Experimente wegen der großen Skalen, der langen Versuchszeiten und des daraus resultierenden unbeherrschbaren Simulationsaufwandes für eine Parameteruntersuchung leider nicht möglich gewesen.

Abschließend ist zu erwähnen, dass im Rahmen des vorliegenden Forschungsvorhabens zwei neuartige Turbulenzmodelle zur direkten Berücksichtigung der gemischten Korrelationen von Geschwindigkeitsschwankungen einerseits und Temperatur- respektive Konzentrationsschwankungen andererseits entwickelt und in ANSYS CFX implementiert wurden. Die sogenannten Turbulent Heat Flux (THF) und Turbulent Scalar Flux (TSF) Modelle wurden den Projektpartnern als Beta-Modelle bzw. Software-Prototypen für eigene Untersuchungen und Validierungen zur Verfügung gestellt. Durch die erweiterte Reznoldsmittelung der Transportgleichungen enthalten diese erweiterten differentiellen Reynoldsspannungsturbulenzmodelle jedoch eine Vielzahl neuer Modellkonstanten und –parameter, deren abschließende Bestimmung und Kalibrierung im vorliegenden Forschungsvorhaben mangels geeigneter kleinskaliger und meßtechnisch gut instrumentierter Experimente nicht möglich war.

Zusammenfassend kann eingeschätzt werden, dass die Turbulenzmodelle 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 Turbulenzmodelle auf komplexere Anwendungsfälle und andere Anwendungsgebiete übertragbar. Die weiteren Entwicklungen werden sich auf Strömungen mit kombinierter Leichtgas- und Dampfeinspeisung mit Dampfrekondensation an der Behälterwand und auf die Simulation der Wirkungsweise und Effizienz von katalztischen Rekombinatoren im Sicherheitseinschluss von Kernkraftwerken richten. Ein weiterer Schwerpunkt wird in der Weiterentwicklung und Validierung von Verbrennungsmodellen für die Simulation von Wasserstoff-Deflagration im Containment in Luft und bei Anwesenheit einer Wasserdampfkonzentration liegen.

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 1337 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 beim Institut für Kernenergetik und Energiesysteme (IKE) der Universität Stuttgart, bei der GRS Köln und bei der Becker Technologies GmbH, Eschborn für die Zusammenarbeit und Unterstützung bei der Ausführung des vorliegenden Forschungsvorhabens bedanken.

Allen hier nicht explizit namentlich erwähnten Forschungs- und Kooperationspartnern des von der GRS koordinierten CFD-Verbunds Kernreaktorsicherheitsforschung danken wir 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) G. Döbbener : "CFD Simulation of momentum driven flows in the ThAI test facility", Status-Presentation on ThAI Containment Project, Meeting at ANSYS Germany, 17. December 2007, ANSYS Germany, December 2007, 89 slides.
- A. Zirkel, G. Döbbener, E. Laurien: "CFD Simulation of Forced Flow Within the ThAI Model Containment", 17th International Conference on Nuclear Engineering, Bruessel, Belgium, July 12-16 2009, pp. 1-8, Paper No. ICONE 17-75070
- G. Döbbener, G. Scheuerer : "Nuclear Reactor Safety Simulation of Nuclear Reactor Containment Flows", 1. Milestone-Workshop, German CFD-Network on Nuclear Reactor Safety Research, Stuttgart, Germany, 16. July 2008, 76 slides.
- 4) G. Kalitzin, G. Döbbener : "Nuclear Reactor Safety Simulation of Nuclear Reactor Containment Flows: The ThAI-20 Testcase", 14th Meeting of CFD Network on Nuclear Reactor Safety Research, Stuttgart, Germany, 17. July 2008, 20 slides.
- 5) P.S.P. Da Silva, D. Köster, Th. Frank: "CFD Simulation Results for Test cases for variable density flow affected by buoyancy", Final presentation of Students Internship, ANSYS Germany, 13. June 2009, 162 slides
- D. Köster, Th. Frank, F. Menter : "Nuclear Reactor Safety Simulation of Nuclear Reactor Containment Flows", 2. Milestone-Workshop, German CFD Network on Nuclear Reactor Safety Research, FZ Dresden-Rossendorf, Germany, 29. July 2009, 57 slides.
- 7) Th. Frank, Y. Egorov, D. Köster, F. Menter : "Nuclear Reactor Safety Simulation of Nuclear Reactor Containment Flows", 16. Meeting German CFD Network on Nuclear Reactor Safety Research, GRS, Garching, Germany, 07. October 2009, 57 slides.
- 8) Th. Frank, Conxita Lifante, Paulo da Silva, D. Köster : "(U)RANS SST Simulations of Natural Convection in TH-21 Testcase", 16. Meeting German CFD Network on Nuclear Reactor Safety Research, GRS, Garching, Germany, 07. October 2009, 24 slides.
- 9) Beitrag von ANSYS Germany zu dem Vergleichsbericht: K. Fischer: Vergleichsbericht für blinde Simulationen der THAI-Versuchsreihe TH21 "Naturkonvektion bei unterschiedlicher Wandbeheizung", Becker Technologies, Januar 2010, Berichtsnr. 1501325-TH21-VB, pp. 97.
- 10) Ch. Lübon, Th. Frank: "Blind Simulation Test Report of THAI Test TH22", ANSYS Germany, ANSYS Technical Report, May 2010, pp. 23
- 11) Ch. Lübon, Th. Frank : "Scale-Resolving SAS-SST Simulations for the TH21 and TH22 Experiments", 17. Meeting, German CFD-Network on Nuclear Reactor Safety Research, FZJ, Jülich, Germany, 21.-22. July 2010, 28 slides.
- Ch. Lübon, Th. Frank : "Nuclear Reactor Safety Simulation of Nuclear Reactor Containment Flows", 3. Milestone-Workshop, German CFD-Network on Nuclear Reactor Safety Research, ANSYS Germany/Grosshartpenning, Germany, 23. September 2010, 46 slides.
- 13) Th. Frank, Ch. Lübon : "TH-22 Simulation of Natural Convection and He Injection in the ThAI Test Facility Using SAS-SST Model", Summary Meeting on blind and open TH-21/TH-22 Containment Flow Benchmarks, Becker Technologies GmbH, Eschborn, Germany, 28. Oktober 2010, 26 slides.

10Literaturnachweis und Referenzen

ANSYS Inc. 2010. ANSYS CFX 13.0 Documentation. 2010.

Brown, L. G. and Roshko, A. 1974. On Density Effects and Large Structure in Turbulent Mixing Layers. 1974, Vol. 64, 4, pp. 775-816.

Byron Bird, R., Stewart, W. E. and Lightfoot, E. N. 1960. *Transport Phenomena.* s.l.: Wiley International Edition, 1960.

Casey, M., Wintergerste, T. 2000. *Best Practice Guidelines.* s.l.: ERCOFTAC Special Interest Group on "Quality and Trust in Industrial CFD", 2000.

Chassaing, P. and Ha Minh, H. 1982. Some problems of second order modelling of mass transfer in a turbulent gas mixture. [book auth.] Z. P. Zaric. *Structure of turbulence in heat and mass transfer*. Washington, D.C. : Hemisphere Publ., 1982, pp. 509-528.

Chassaing, P., et al. 2002. *Variable Density Fluid Turbulence*. Dordrecht / Boston / London : Kluwer Academic Publishers, 2002.

Cheesewright, R., King, K. and Ziai, S. 1986. Experimental Data for the Validation of Computer Codes for the Prediction of Two-Dimensional Cavity Flows. 1986, pp. 75-81.

Egorov, Y. and Menter, F. R. 2008. Development and Application of SST-SAS Turbulence Model in the DESIDER Project. *Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design.* January 24, 2008, Vol. 97, pp. 261-270.

Fischer, K. and Gupta, S. 2009. Auslegungsbericht für blinde Simulationen der ThAI-Versuchsreihe TH21 "Naturkonvektion bei unterschiedlicher Wandbeheizung". Eschborn : Becker Technologies GmbH, 2009.

-... 2010. Comparison Report for Blind Simulations of THAI Test TH22 "Dissolution of a Light Gas Stratification by Natural Convection". Eschborn : Becker Technologies GmbH, 2010. p. 49. 150 1361 – TH22 – VB.

-... 2010. Specification Report for Blind Simulations of THAI Test TH22 "Dissolution of a Light Gas Stratification by Natural Convection". Eschborn : Becker Technologies GmbH, 2010. p. 26. 150 1361 – TH22 – AB.

Fischer, K., Heitsch, M. and Franke, M. 2007. *Technischer Fachbericht Simulationen des ThAI-Gebläseversuchs TH-18*. Becker Techonologies, Eschborn, GRS, Köln, ANSYS, Otterfing. 2007. 150 1325 - TH 18.1.

Hellsten, A. 2004. New advances k-omega turbulence model for high-lift aerodynamics. Reno, Nevada : s.n., 2004.

Jeong, J. and F., Hussain. 1995. On the identification of a vortex. 1995, Vol. 285, pp. Bd. 285, S. 69-94.

Kanzleiter, G., et al. 2007. Abschlussbericht Versuchsanlage und Programm zur Untersuchung offener Fragen zum Spaltproduktverhalten im Sicherheitsbehälter, ThAI Phase II. Becker Technologies, Eschborn, Areva NP, Erlangen, GRS, Köln und München. 2007. 150 1272 - S1.

Kanzleiter, T., et al. 2007. *Technischer Fachbericht ThAI-Gebläseversuch TH-20*. Becker Technologies, Eschborn, JRC, Pettern, GRS, Köln. 2007. 150 1325 - TH20.

King, K. J. 1989. *Turbulent natural convection in rectangular air cavities*. London University. 1989. Ph.D. thesis.

Launder, B. E. 1989. Second-moment closure: present ... and future? 1989, Vol. 10.

Lechner, R. 2003. Implementation of Transport Equations for the Turbulent Heat Fluxes in CFX-5. ANSYS. Otterfing : ANSYS Germany, 2003. Technical Report. TR-03-05.

Lübon, Ch. and Frank, Th. 2010. Blind Simulation Test Report of THAI Test TH22. *Technical Report ANSYS*. Otterfing : ANSYS Germany, 2010, p. 23.

Menter, F. R. and Egorov, Y. 2005. A Scale Adaptive Simulation Model using Two-Equation Models. 2005.

Menter, F. R. 1994. Two-equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications. 1994, Vol. 32, pp. 1598-1605.

Menter, F. R., et al. 2002. CFD Best Practice Guidelines for CFD Code Validation for Reactor-Safety Applications. 2002. ECORA. FIKS-CT-2001-00154.

Uittenbogaard, R. E. 1989. *Stably Stratified Mixing Layer.* s.l. : Data Report for the 14th meeting of the IAHR Working Group on Refined Flow Modelling, 1989.

—. **1995.** *The Importance of Internal Waves for Mixing in a Stratified Estuarine Tidal Flow.* Delft, Netherlands : Ph.D. thesis at the Technical University of Delft, 1995.

Wallin, S. and Johansson, A. 2000. A complete explicit algebraic Reynolds stress model for incompressible and compressible flows. 2000, pp. 89-132.

Wilcox, D. C. 1993. *Turbulence Modeling for CFD*. La Canada, CA : DCW Industries, Inc., 1993.

11 Formelzeichen

Lateinische Symbole

B_{ij}	$[kg/(m s^3)]$	anisotrope Produktion von k durch Auftrieb	33
Cp	$[m^2/(K s^2)]$	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck	36
D,K,L	[kg/(m s ³)]	weitere Quellterme für <i>k</i> bei variabler Dichte	20
D_{ij}, K_{ij}, L_{ij}	[kg/(m s ³)]	weitere Quellterme für $\overline{u'_i u'_j}$ bei variabler Dichte	19
$oldsymbol{D}_\ell$	$[m^2/s]$	kinematische Diffusivität	16
$F_{_{\ell}j}$	$[kg/(m^2s)]$	Diffusionsstrom der Komponente l	16
\boldsymbol{g}_i	$[m/s^2]$	Schwerkraftbeschleunigung	15
h	$[m^2/s^2]$	spezifische statische Enthalpie	16
k	$[m^3/(K s^2)]$	Wärmeleitkoeffizient	16
k	$[m^2/s^2]$	turbulente kinetische Energie bei Reynoldsmittelung	20
ƙ	$[m^2/s^2]$	turbulente kinetische Energie bei Favremittelung	23
$K_{Y_{\ell},\ell},L_{Y_{\ell},\ell}$	$[kg/(m^2s^2)]$	weitere Quellterme für $\overline{u'_j Y'_l}$ bei variabler Dichte	21
$K_{YY.,}L_{YY.,}$	$[kg/(m^3s)]$	weitere Quellterme für $\overline{Y_{l}'Y_{l}'}$ bei variabler Dichte	21
Р	[kg/(m s ³)]	Produktionsterm für k	20
p_{abs}	[Pa]	(momentanes) absolutes Druckfeld des Fluides	15
P_{ij}	$[kg/(m s^3)]$	Produktionsterm für $\overline{u'_i u'_j}$	19
p _{stat}	[Pa]	(momentanes) statisches Druckfeld des Fluides	15
$P_{Y_{\cdot,\ell}i}$	$[kg/(m^2s^2)]$	Produktionsterm für $\overline{u'_j Y'_l}$	21
P _{YY.}	$[kg/(m^3s)]$	Produktionsterm für $\overline{Y_{I}'Y_{I}'}$	21
\hat{P}_{ij}	[kg/(m s ³)]	Produktionsterm für $\overline{\rho u_i'' u_j''}$	23
Ŷ	$[kg/(m s^3)]$	Produktionsterm für \hat{k}	23
$\hat{P}_{Y.I.j}$	$[kg/(m^2s^2)]$	Produktionsterm für $\overline{\rho u_j'Y_l''}$	24
$\hat{P}_{_{ heta.j}}$	$[kg/s^4]$	Produktionsterm für $\overline{\rho u''_j h''}$	35
$\hat{P}_{k.b}$	[kg/(m s ³)]	Produktion von k durch Auftrieb	30
$\hat{P}_{YY,I}$	[kg/(m ³ s)]	Produktionsterm für $\overline{\rho Y_{l}' Y_{l}'}$	24

$\hat{P}_{_{ heta heta }}$	$[\text{kg m/s}^5]$	Produktionsterm für $\overline{\rho h'' h''}$	35
q	[kg/s ³]	Wärmefluss	16
S _E	$[kg/(m s^3)]$	Energiequellterm in der Energietransportgleichung	16
S	[1/s]	Reaktionsterm in der Transportgleichung für Massenbruch	14
S _{M.i}	$[kg/(m^2s^2)]$	externer Kraftterm in der Impulstransportgleichung	15
Т	[K]	(momentanes) Temperaturfeld des Fluides	16
T _{ijk}	$[kg/s^3]$	turbulenter Diffusionsterm für $\overline{u'_i u'_j}$	19
$\hat{\mathcal{T}}_{Y.I.ij}$	$[kg/(m s^2)]$	turbulenter Diffusionsterm für $\overline{\rho u_j'' Y_l''}$	24
$\hat{\mathcal{T}}_{_{ijk}}$	[kg/s ³]	turbulenter Diffusionsterm für $\overline{\rho u_i'' u_j''}$	23
$\hat{\mathcal{T}}_{ heta.ij}$	[kg m/s ⁴)]	turbulenter Diffusionsterm für $\overline{\rho u_j'' h''}$	35
$\hat{\mathcal{T}}_{YY.I.j}$	[kg/(m ² s)]	turbulenter Diffusionsterm für $\overline{\rho Y_{I}'Y_{I}''}$	24
$\hat{\mathcal{T}}_{_{ heta heta . j}}$	$[\text{kg m}^2/\text{s}^5]$	turbulenter Diffusionsterm für $\overline{\rho h'' h''}$	35
U _i	[m/s]	(momentanes) Geschwindigkeitsfeld des Fluides	14
\boldsymbol{U}_{ℓ}	$[kg/m^3]$	Geschwindigkeitsfeld der Komponente l	14
\mathbf{Y}_{ℓ}	[]	Massenbruchfeld der Komponente ℓ	15

Griechische Symbole

α_{ℓ}	[]	Ausdehnungskoeffizient durch Konzentrationsunterschied	26
β	[1/K]	thermaler Ausdehnungskoeffizient	26
Γ_{ℓ}	[kg/(m s)]	dynamische Diffusivität, molekularer Diffusionskoeffizient	16
ε _{ij}	$[m^2/s^3]$	Dissipationsterm für $\overline{u'_i u'_j}$	19
3	$[m^2/s^3]$	Dissipationsterm für turbulente kinetische Energie k	20
ε _{Υ.ℓ} i	$[m/s^2]$	Dissipationsterm für $\overline{u'_j Y'_l}$	21
ε γγ. _ℓ	[1/s]	Dissipationsterm für $\overline{Y_i'Y_i'}$	21
Ê	$[m^2/s^3]$	Dissipationsterm für \hat{k}	23
$\hat{m{arepsilon}}_{ij}$	$[m^2/s^3]$	Dissipationsterm für $\overline{\rho u''_i u''_j}$	23
$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{Y.I.j}$	$[m/s^2]$	Dissipationsterm für $\overline{\rho u_j'' Y_l''}$	24
$\boldsymbol{\hat{arepsilon}}_{ heta.j}$	$[m^{3}/s^{4}]$	Dissipationsterm für $\overline{\rho u''_i h''}$	35

$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{\gamma}\boldsymbol{\gamma},l}$	[1/s]	Dissipationsterm für $\overline{\rho Y_i' Y_j''}$	24
$\hat{m{arepsilon}}_{ heta heta}$	$[m^4/s^5]$	Dissipationsterm für $\overline{\rho h'' h''}$	35
μ	[Pa s]	dynamische Viskosität des Fluides	15
μ_t	[kg m/s]	Wirbelviskosität	30
Π _{ij}	[kg/(m s ³)]	Druck-Scher-Korrelationsterm für $\overline{\rho u_i'' u_j''}$	23
Π _{ij}	[kg/(m s ³)]	Druck-Scher-Korrelationsterm für $\overline{u'_i u'_j}$	19
$\Pi_{Y_{.\ell}i}$	$[kg/(m^2s^2)]$	Druck-Konzentration-Korrelationsterm für $\overline{u'_j Y'_l}$	21
$\boldsymbol{\hat{\Pi}}_{Y.I.j}$	$[kg/(m^2s^2)]$	Druck-Konzentration-Korrelationsterm für $\overline{\rho u_j'' Y_i''}$	35
$\mathbf{\hat{\Pi}}_{ heta.j}$	[kg/s ⁴]	Druck-Enthalpie-Korrelationsterm für $\overline{\rho u''_j h''}$	35
ρ	$[kg/m^3]$	(momentane) Dichte des Fluides	14
$oldsymbol{ ho}_\ell$	$[kg/m^3]$	Masse von Komponente l pro Volumeneinheit	14
σ_t	[]	turbulente Schmidtzahl	30
$\sigma_{ ho}$	[]	turbulente Schmidtzahl für Dichte	30
$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{Y.l.j}$	$[kg/(m^2s^2)]$	weiterer Quellterm für $\overline{\rho u_j'' Y_l''}$ bei variabler Dichte	24
Σ _{ij}	[kg/(m s ³)]	weiterer Quellterm für $\overline{\rho u''_i u''_j}$ bei variabler Dichte	23
$\hat{\Sigma}_{YY,I}$	$[kg/(m^3s)]$	weiterer Quellterm für $\overline{\rho Y_i' Y_j''}$ bei variabler Dichte	24
$\mathbf{\hat{\Sigma}}_{\theta.j}$	[kg/s ⁴]	weiterer Quellterm für $\overline{\rho u''_j h''}$ bei variabler Dichte	35
$\hat{\Sigma}_{_{ heta\! heta\! heta}}$	$[\text{kg m/s}^5]$	weiterer Quellterm für $\overline{\rho h'' h''}$ bei variabler Dichte	35
Tij	[Pa]	(momentaner) molekularer Spannungstensor des Fluides	15
ω	[1/s]	turbulenter Frequenzmaßstab	30
Indizes, Ke	nnzeichnunge	n, weitere Symbole	
Ā		Reynolds-gemittelte Größe A	17
Ã		Favre-gemittelte Größe A	17
Α'		Schwankung der Größe A bez. Reynoldsmittel \overline{A}	17
<i>A</i> ″		Schwankung der Größe A bez. Favremittel \widetilde{A}	17
A _{ref}		Referenzwert der Größe A	26