## Simulationsmodule für die Entwicklung von Wasserstoff-Fahrzeugspeichern

## **HySIM**

# Schlussbericht ANSYS Germany

Version Version 1.0
Laufzeit des Vorhabens 01.09.2008 – 31.12.2011
Zuwendungsempfänger ANSYS Germany
Förderkennzeichen 0327813A
Verbreitung Öffentlich
Fälligkeitsdatum 30.06.2012
Erstellungsdatum 31.12.2011

Gefördert durch:



aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages

Förderkennzeichen: 0327813A

#### **Autoren**

Dieses Dokument wurde erstellt von ANSYS Germany GmbH, Otterfing

Beiträge wurden verfasst von:

Dominik Scholz

Pavel Smirnov

Thomas Frank

#### Gefördert durch:



aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages Dieses Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 0327813A wurde gefördert vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

#### Projektkoordinator

Dr.-Ing. Markus Kampitsch EK-34, KVA Clean Energy BMW AG Petuelring 130 80788 München

Tel: 176-601-37175

Mail: Markus.Kampitsch@bmw.de

© 2011 das HySIM Konsortium

### Inhaltsverzeichnis

l.	K	urze D	arstellungen	4
	1.1	Aufga	benstellung	4
	1.2	Vorau	ussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde	4
	1.3	Planu	ng und Ablauf des Vorhabens	4
	1.4	Wisse	enschaftlicher und technischem Stand, an den angeknüpft wurde	5
II.	Е	ingehe	nde Darstellungen	6
	II.1	V	erwendung der Zuwendung	6
	II.	.1.1	Physikalische Effekte (Methodenentwicklung und Validierung)	7
	II.	.1.1.1	Modellierung von Realgasen / Para-Ortho-Wasserstoff Konversion	7
	II.	.1.1.2	Natürliche Konvektion und Schichtenbildung	9
	II.	.1.1.3	Skalenauflösende Simulation (LES/SAS)	14
	II.	.1.1.4	Laminar-turbulente Transition	17
	11.	.1.1.5	Fluid-Struktur-Wärmekopplung und anisotrope Wärmeleitung in Festkör 23	perr
	II.	.1.2	Komponenten	25
	11.	.1.2.1	Modellierung des Innentanks (Tankkühlung)	25
	11.	.1.2.2	Konvektion im geneigten Rohr	30
	II.	.1.3	1D-3D-Kopplung	35
	II.	.1.4	HySIM Testfall	36
	11.	.1.4.1	Simulationen zur Kalibrierung der Korrelationen für den Wärmetauscher .	36
	II.	.1.4.2	Gekoppelte 1D-3D Simulation des HySIM-Testfalls	41
	11.2	Ν	otwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit	46
	II.3	V	oraussichtlicher Nutzen	47
	11.4	Е	rfolgte oder geplante Veröffentlichungen	47
Αı	han	g: Lite	raturverzeichnis	48

#### I. Kurze Darstellungen

#### I.1 Aufgabenstellung

Die zentrale Aufgabenstellung für ANSYS Germany innerhalb dieses Vorhabens ist die Entwicklung und Validierung von Werkzeugen zur Simulation von mit kryo-komprimiertem Wasserstoff (CcH2) gefüllten Tanksystemen mit Hilfe von CFD-Simulationen.

Dies umfasst u.a. die Modellierung physikalischer Effekte, wie z.B. die Beschreibung von CcH2 als Realgas im kryogenen, überkritischen Zustand, die Turbulenzmodellierung für natürliche Konvektion und Schichtbildung, die Modellierung laminar-turbulenter Transition und die Ermöglichung skalenauflösender Simulationen turbulenter Strömungen von kryo-komprimiertem Wasserstoff. Auch sind Werkzeuge zur Modellierung der Wärmeübertragung zwischen Fluid und Festkörper bereitzustellen, wobei auch anisotroper Wärmeleitung, z.B. bei geschichteten Materialien, zu berücksichtigen ist. Diese Werkzeuge müssen entsprechend validiert werden.

Die zu entwickelnden Simulationswerkzeuge sollen auf Komponenten des Tanksystems angewendet werden, wobei besonders die Modellierung des Innentanks und von Rohrleitungen von großem Interesse sind. Der Schwerpunkt der Simulationen liegt dabei auf der gekoppelten thermischen und strömungsmechanischen Simulation der zu untersuchenden Baugruppen.

Um das Tanksystem in seiner Gesamtheit abbilden zu können, ist eine Kopplungsmöglichkeit zwischen einer detaillierten 3D-CFD-Simulation (ANSYS CFX) für Komponenten mit 1D-System-Modellen (LMS AMESim) zu schaffen. Diese Kopplung dient zum Einen der Bereitstellung von durch 1d-Simulation gewonnenen genaueren Randbedingungen für die Strömungsmechaniksimulation und zum Anderen der Einbettung der detaillierten 3-dimensionalen CFD-Simulation für die detaillierter zu untersuchende Komponente des Tanksystems in eine Systemsimulation.

Mit der Simulation des Demonstrationstestfalls "Druckaufbau durch Wärmetauscherbetrieb" soll die Integration entwickelter Simulationswerkzeuge demonstriert werden.

Eine detaillierte Beschreibung der geleisteten Arbeiten findet sich in Abschnitt II.1.

#### I.2 Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde

Die Planung des Fördervorhabens wurde unter teils komplizierten fördertechnischen deutschfranzösischen Rahmenbedingungen geplant und sah ursprünglich eine Beteiligung von Air Liquid, Frankreich, LMS Imagine, Frankreich und Magna Steyr, Österreich vor. Auf Grund von Schwierigkeiten in der Abstimmung der verschiedenen nationalen Förderprogramme wurde letztendlich im Jahr 2007 entschieden, das Fördervorhaben "HySIM - Simulationsmodule für die Entwicklung von Wasserstoff-Fahrzeugspeichern" als ein ausschließlich vom Deutschen Ministerium für Wirtschaft (BMWi) gefördertes Forschungsvorhaben mit dem Projektkoordinator BMW AG und den Projektpartnern ANSYS Germany GmbH, LMS Imagine (Niederlassungen Deutschland und Frankreich) und dem Lehrstuhl für Kälte- und Kryotechnik der TU Dresden durchzuführen.

#### I.3 Planung und Ablauf des Vorhabens

Zum Beginn der Planungsarbeiten für das HySIM-Forschungsvorhaben im Sommer 2006 erschien die Speicherung von Wasserstoff im kryogenen flüssigen Zustand bei vergleichsweise geringem Druck noch als eine technische Option, die umfangreiche Forschungs- und Entwicklungsarbeiten für die CFD-Modellierung und Simulation für kryogene Mehrphasenströmungen erfordert hätte. Zum Ende 2007 wurden von Seiten der BMW AG jedoch die Weichen derart gestellt, dass die kryogen-flüssige Speicherung von Wasserstoff nicht länger als Option in Erwägung gezogen wurde und alle Planungen

und weiteren Arbeiten im Rahmen des HySIM-Projektes auf die Untersuchung der kryo-komprimierten Wasserstoffspeicherung im überkritischen Zustand bei hohen Drücken von bis zu 300bar ausgerichtet wurden. Unter Federführung des Projektkoordinators wurde ein Projektgesamtplan unter starker Verflechtung der Forschungsarbeiten aller am Projekt beteiligter Projektpartner erstellt, der eine gesamtheitliche und eng aufeinander abgestimmte Untersuchung aller Teilaspekte dieser Wasserstoffspeicherungs- und -entnahmetechnik für die automobile Anwendung im Rahmen des dreijährigen Forschungsvorhabens sicherstellte. Hervorzuheben wäre hierbei die enge Kooperation zwischen experimentellen Arbeiten im Labormassstab an der TU Dresden, technischen Versuchen an Wasserstofftank-Prototypen bei der BMW AG, Validierungs- und Auslegungssimulationen für Komponenten des Tanksystems seitens der ANSYS Germany GmbH und der BMW AG unter Verwendung von ANSYS CFX als Simulationssoftware und der Kopplung zu Systemsimulationen in Zusammenarbeit mit LMS Imagine und der BMW AG. Der Projektgesamtplan gliederte sich hierbei in die folgenden Hauptarbeitspakete:

- 1. WP1000: 3d-Modellierung Physikalische Effekte und Modellierung von Komponenten
- 2. WP2000: Transiente 1d-Modellierung
- 3. WP3000: Softwareintegration
- 4. WP4000: Experimentelle Verfahrens- und Modell-Verifizierung

Die in dem vorliegenden Bericht abschließend dargestellten Arbeiten und Projektergebnisse sind schwerpunktmäßig den Arbeitspaketen WP1000 und WP3000 zugeordnet.

#### I.4 Wissenschaftlicher und technischem Stand, an den angeknüpft wurde

Die seitens der ANSYS Germany GmbH im Rahmen des HySIM-Forschungsvorhabens ausgeführten Forschungs- und Entwicklungsarbeiten basierten auf dem CFD-Programmsystem ANSYS CFX im Versionsstand 10.0. Die entwickelten CFD-Modellansätze und CFD-Simulationsmethoden sind im Rahmen der im HySIM-Projekt ausgeführten Entwicklungsarbeiten in die Version 14.0 der Simulationssoftware ANSYS CFX eingeflossen bzw. Stehen als Erweiterung für diese Version zur Verfügung. Darüber hinaus wurde in Zusammenarbeit mit der TU Dresden von der öffentlich verfügbaren Fachliteratur auf dem Gebiet der Kryotechnik reger Gebrauch gemacht. Weitere verwendete Quellen finden sich im Literaturnachweis dieses Berichtes.

#### II. Eingehende Darstellungen

#### II.1 Verwendung der Zuwendung

Das Ziel des hier beschriebenen Vorhabens ist die Entwicklung von Werkzeugen zur Simulation von mit kryo-komprimiertem Wasserstoff (CcH2) gefüllten Tanksystemen für automobile Anwendungen [1]. Mit Hilfe dieser Werkzeuge soll es möglich sein, die vielfältigen physikalischen Effekte zu modellieren, die für kryogene Wasserstoffströmungen im superkritischen Bereich relevant sind. Diese erarbeiteten Modellierungsansätze sollen dann zum einen auf Komponenten des Systems anwendbar sein, wie z.B. auf thermo-hydraulische Prozesse im Innentank oder in Rohrleitungen. Zum anderen soll mit den Simulationswerkzeugen auch die Gesamtheit des Tanksystems unter Zusammenwirkung ihrer Komponenten in ihrem thermischen, strömungsmechanischen ud strukturmechanischen Verhalten beschrieben werden können.

Die Autoren dieses Berichts haben im Besonderen Methoden zur Modellierung physikalischer Effekte für detaillierte dreidimensionale CFD-Simulationen auf Komponentenebene und der Möglichkeiten der Interaktion der Komponenten mit dem gesamten Tanksystem erarbeitet.

Neben den teilweise stark nichtlinearen Materialeigenschaften des überkritischen Wasserstoffs (siehe Abschnitt II.1.1.1), die von Druck und Temperatur abhängen, haben besonders turbulente Effekte einen wesentlichen Einfluss auf die Strömung des Fluids und die Wärmeübertragung. Für CFD-Simulationen gibt es folgende industriell sinnvoll anwendbare Möglichkeiten die Turbulenz zu modellieren, siehe z.B. auch [23], [24] zur Übersicht:

- Industriell am häufigsten angewendet wird die Lösung der Reynolds-gemittelten Navier-Stokes Gleichungen (RANS) mit Modellgleichungen für die Turbulenz (häufig zwei Gleichungen, z.B. k-ω oder k-ε) und Verwendung von linearen Wirbelviskositätsmodellen zur Berechnung der Reynoldsspannungen bzw. skalaren Reynoldsflüssen (z.B. für die Enthalpie). Entsprechende Verfahren existieren auch für transiente Vorgänge (URANS);
- Eine weitere Möglichkeit zur Lösung der RANS-Gleichungen sind Reynoldsspannungsmodelle bzw. Reynoldsflussmodelle (RSM/RFM) mit Transportgleichungen für die Reynoldsspannungen bzw. Reynoldsflüsse. Vereinfachungen der Reynoldsspannungsgleichungen führen zu expliziten algebraischen Modellen für Reynoldsspannungen bzw. skalaren Reynoldsflüssen mit nichtlinearen Wirbelviskositätsmodellen (EARSM / EARFM).
- Bei skalenauflösenden Verfahren werden die großen turbulenten Strukturen mit dem Rechengitter aufgelöst und nur die Wirkung der kleineren turbulenten Strukturen unterhalb der Gitterfeinheit modelliert, wie z.B. die Large-Eddy-Simulation (LES) oder die Scale-Adaptive-Simulation (SAS). Da ein Großteil der turbulenten Strukturen aufgelöst werden muss, sind diese Verfahren allerdings auch um ein Vielfaches rechenintensiver als RANS-Verfahren.

CFD-Simulationen des CcH2-Tanksystems mit dessen Abmessungen, Strömungseigenschaften und insbesondere der großen Zeitskalen sind zunächst nur durch URANS-Verfahren zugänglich, wobei hauptsächlich Zweigleichungsmodelle mit linearen Wirbelviskositätsmodellen, wie z.B. das SST-Modell, verwendet werden. RSM/RFM könnten prinzipiell auch die langen Zeitskalen abdecken, sie sind aber numerisch sehr instabil. Auch EARSM und EARFM (z.B. [25]) sind zwar typischerweise in numerischer Hinsicht etwas stabiler als RSM/RFM, aber immer noch nicht als robust zu bezeichnen und in physikalischer Hinsicht schwer zu kalibrieren, um universell einsetzbar zu sein.

Deshalb sind Validierung von URANS-Methoden mit linearen Wirbelviskositätsmodellen, vor allem des SST-Modells, sowie geeignete Richtlinien für deren Anwendung auf verschiedene Komponenten bzw. Prozesse im Tankbetrieb wichtige Gesichtspunkte in dieser Arbeit, siehe Abschnitte II.1.1.2 und II.1.2.

Da im Gegensatz zu skalenauflösenden Methoden komplexe Effekte wie die Transition von laminarer Strömung zu turbulenter Strömung mit RANS-Modellen nicht "automatisch" erkannt werden, wurden Modellierungswerkzeuge für dieses Phänomen entwickelt, da sich beispielsweise laminare und turbulente Wärmeübergangskoeffizienten zwischen Fluid und Wand um ein Vielfaches unterscheiden können, siehe Abschnitt II.1.1.4.

Bei skalenauflösenden Verfahren müsste am wenigsten physikalisch modelliert werden, was diese Modelle genau und robust gegenüber Modellierungsannahmen macht. Leider sind sie selbst für eine isolierte Betrachtung von einzelnen Komponenten des Tanksystems enorm rechenaufwändig. Trotzdem ist eine skalenauflösende Simulation z.B. zu Validierungszwecken sehr wünschenswert. Um den großen Rechenaufwand auf maßgebliche Details lokal reduzieren zu können, wurde innerhalb dieses Forschungsprojektes ein zonal forciertes LES Modell (Zonal Forcing LES) entwickelt, in dem nur in vorgegebenen Bereichen skalenauflösend gerechnet wird, außerhalb des Bereichs wird automatisch auf RANS-Modelle umgeschaltet [14], siehe Abschnitt II.1.1.3.

Wie sich zeigen wird, ist neben der Turbulenz auch die Berücksichtigung von Wärmeübertragung zwischen Fluid (Wasserstoff) und Festkörpern (Rohrleitungen, Wärmetauscher, Tankwand, etc.) essentiell für thermo-hydraulische Simulationen. Um praktisch relevante Konfigurationen simulieren zu können, sind entsprechende Modellierungswerkzeuge notwendig, z.B. Möglichkeiten zur Modellierung anisotroper Wärmeleitung in Festkörpern, beispielsweise für geschichtete Materialien wie die CFK-Verstärkungsschicht, die im Rahmen dieses Vorhabens entwickelt wurden, siehe Abschnitt II.1.1.5.

Wie bereits mehrfach erwähnt können CFD-Anwendung äußerst rechenintensiv sein. Eine Möglichkeit der Reduktion der Rechenzeiten für die Simulation eines Systems kann auch erreicht werden, indem man CFD mit anderen Modellierungsmethoden kombiniert, beispielsweise mit Modellierung von Teilsystemen oder Komponenten durch Korrelationen, 1D-Systeme, etc. In diesem Rahmen wurde eine flexible Kopplungsschnittstelle entwickelt, die es erlaubt 1D-3D-gekoppelte Systeme berechnen. Somit können Details mit komplexen dreidimensionalen Effekten, wie z.B. der Tank, Ventile, etc., mit 3D-CFD berechnet werden, wobei andere Teilsysteme rechenzeitsparend aber mit hinreichender Genauigkeit mit reduziert dimensionalen Modellen oder mit Korrelationen berechnet Abschnitt II.1.3. dieser Kopplungsschnittstelle werden, siehe Mit wurde Wärmetauscherbetrieb zum Druckaufbau innerhalb des CcH2-Tanksystems als Demonstrationsfall berechnet (Abschnitt II.1.4).

#### II.1.1 Physikalische Effekte (Methodenentwicklung und Validierung)

Im Folgenden werden Möglichkeiten zur Beschreibung der oben bereits angesprochenen physikalischen Effekte aufgezeigt, die für die Simulation des CcH2-Tanksystems signifikant sind und deren Modellierung innerhalb dieses Projektes entwickelt bzw. validiert wurde.

#### II.1.1.1 Modellierung von Realgasen / Para-Ortho-Wasserstoff Konversion

Wasserstoff zeigt im kryo-komprimierten Zustand stark nichtlineares Materialverhalten, besonders in der Nähe des kritischen Punktes. Außerdem liegt Wasserstoff in den zwei Komponenten Para-bzw. Orthowasserstoff mit verschiedenen thermodynamischen Eigenschaften vor. Um diese Realgaseigenschaften (RGP) in der CFD-Simulation abzubilden, wurden mit Hilfe der Datenbank GASPAK [12] Eigenschaften wie Dichte, Wärmekapazität, Enthalpie, Entropie, etc., in Abhängigkeit von Temperatur und Druck tabelliert und für das Softwarepaket ANSYS CFX im Rahmen einer CFD-Simulation zugänglich gemacht.

Mit diesen RGP-Dateien wurden beispielhaft folgende Diagramme für Isobaren der spezifischen Wärmekapazität  $c_p$  und der Dichte von Para-Wasserstoff erzeugt, siehe Abbildung 1 und Abbildung 2. Die signifikante Spitze in  $c_p$  bzw. die starken Gradienten in der Dichte für p=14 [bar] sind durch die Nähe zum kritischen Punkt zu erklären. Es wird daher empfohlen, diese Tabellen mit Vorsicht in diesen Bereichen zu gebrauchen, da die starken Variationen der thermodynamischen Eigenschaften zu numerischen Rückwirkungen und eventuell verschlechterten Konvergenzeigenschaften bzw. für ausreichende Konvergenz zu erzwungenen kleineren Integrationszeitschritten führen können.

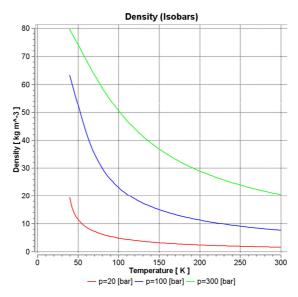


Abbildung 1: Dichte-Isobaren.

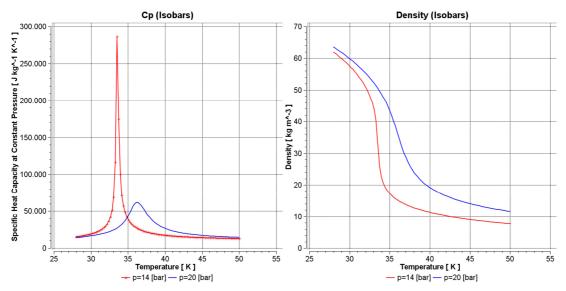


Abbildung 2: Isobaren für spezifische Wärmekapazität cp (links) und Dichte (rechts).

Als Para-Ortho-Konversion wird die spontane Umwandlung von Para-Wasserstoff in Ortho-Wasserstoff bezeichnet. Ein kinetisches Modell für diese Umwandlung wurde vom Lehrstuhl für Kälteund Kryotechnik der TU Dresden vorgeschlagen. Das Modell basiert auf den experimentellen Daten
aus der Literatur, die auch den für das Projekt relevanten Druck- und Temperatur-Bereich abdecken.
Dieses Modell wurde in ANSYS CFX implementiert und getestet. Der qualitative Effekt der
Umwandlung wird in Abbildung 3 gezeigt. Der Testfall besteht in einer transienten Simulation eines
geschlossenen Tanks, der mit den Druck- und Temperatur-Werten von 350 bar und 63 K initialisiert
ist. Die Ortho-Para-Zusammensetzung entspricht am Anfang dem Gleichgewicht bei T=63 K. Die
Tankwände sind nicht adiabat, sondern lassen eine langsame Aufheizung mit der konstanten Rate
von 1 Watt zu. Das Volumen des Tanks beträgt 151 Liter, was unter Berücksichtigung der
Anfangsbedingungen der Wasserstoff-Gesamtmasse von 10.66 kg entspricht.

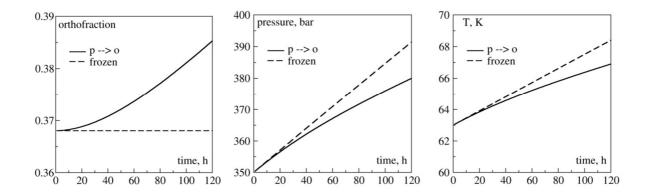


Abbildung 3. Transiente Entwicklung der Para-Ortho-Zusammensetzung, des Drucks und der Temperatur in einem geschlossenen aufgeheizten Tank:

- - ohne das Umwandlungsmodell (eingefrorenes Gleichgewicht bei der Anfangstemperatur).

#### II.1.1.2 Natürliche Konvektion und Schichtenbildung

Die physikalische Modellierung von natürlicher Konvektion und Schichtbildung ist essentiell um das Verhalten des CcH2-Tanksystems zu beschreiben. Die Vorhersage von Wärmeeinträgen durch natürliche Konvektion und der damit verbundene Druckaufbau ist wesentlich für das Langzeitverhalten des CcH2-Tanksystems. Dadurch wird die maximale Standzeit des Fahrzeugs ohne Verlust von Wasserstoff limitiert. Schichtenbildung von Fluiden verschiedener Dichten kann die Effizienz von thermischen Prozessen vermindern, beispielsweise wird die Effizienz des Wärmetauscherbetriebs zum Druckaufbau vermindert. Beim Tankkühlungsprozess können bei ungünstiger thermischer Schichtenbildung obere Bereiche des Tanks nicht hinreichend herabgekühlt werden. Es ist auch wichtig, die Durchmischung von Fluiden unterschiedlicher Dichte modellieren zu können, beispielsweise für die Eindüsung von kryogenem Wasserstoff in den Tank bei ambienter Temperatur.

Im Folgenden werden Testfälle beschrieben, die im Rahmen des HySIM-Forschungsvorhabens eingehend untersucht wurden, die vorhandenen Turbulenzmodelle hinsichtlich natürlicher Konvektion und geschichteter Konfigurationen bei unterschiedlichen Dichten validieren und Empfehlungen für den Einsatz der Modelle gegeben.

#### Strömung zwischen differenziell beheizten Platten

Die folgenden beiden experimentell und numerisch untersuchten Strömungen wurden als Testfälle für Modell-Validierungszwecke ausgewählt:

- Kavität 1: Kavität mit einem hohen Seitenverhältnis, H/W~30, nach dem Experiment von Betts und Bokhari [19],
- Kavität 2: Kavität mit einem moderaten Seitenverhältnis H/W=5, nach dem Experiment von Cheesewright et al. [20].

Das Strömungsgebiet ist auf Abbildung 4 schematisch dargestellt. Die Temperaturwerte an den senkrechten Wänden werden im Experiment konstant gehalten, und die horizontalen Wände oben und unten sind adiabat. Die beiden Fälle sind durch moderate Rayleigh-Zahlen gekennzeichnet, wobei die Konvektion voll turbulent aber im statistischen Sinne stationär verläuft. Eine für ein solches Strömungsregime typische Temperaturverteilung ist auf Abbildung 5 gezeigt. Die wichtigen Kenngrößen sind in Tabelle 1 gesammelt dargestellt.

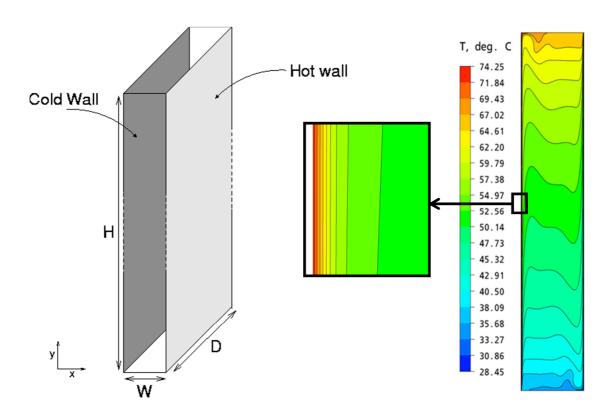


Abbildung 4. Schematische Darstellung einer Kavität mit unterschiedlichen seitlichen Wandtemperaturen

Abbildung 5. Typische Temperaturverteilung in einer Kavität bei stationärer turbulenter Konvektion (hier Simulationsergebnis für Kavität 2).

Tabelle 1. Die charakteristischen Kennzahlen für die zwei Kavitäten.

	H/W	Prandtl-Zahl	Rayleigh-Zahl
Kavität 1 (Luft)	28.7	0.71	0.86·10 <sup>6</sup>
Kavität 2 (Luft)	5	0.71	3.6·10 <sup>8</sup>

Die in Tabelle 1 angegebene Rayleigh-Zahl Ra verwendet die Breite W als den Längenmaßstab:

$$Ra = \frac{g\beta W^3 \cdot \Delta T}{v^2} \cdot Pr$$

Die übrigen in dieser Beziehung verwendeten Variablen kennzeichnen folgende physikalischen Größen:

 $\it g$  ist die Schwerkraft pro Masseneinheit;

 $\beta$  ist der volumetrische Wärmeausdehnungskoeffizient;

 $\nu$  ist die molekulare kinematische Viskosität;

Pr ist die Prandtl-Zahl;

 $\Delta T$  ist der Temperaturunterschied zwischen den senkrechten Wänden.

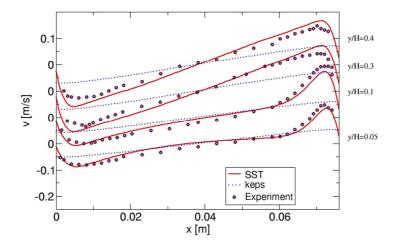


Abbildung 6. Kavität 1: Horizontale Profile der senkrechten Geschwindigkeitskomponente an unterschiedlichen Höhen. SST –  $k-\omega$  Shear Stress Transport Modell mit aufgelöster viskosen Unterschicht an der Wand; keps –  $k-\varepsilon$  Standardmodell mit Wandfunktionen.

Die Geschwindigkeitsprofile in der Abbildung 6 zeigen die Wichtigkeit einer feinen Auflösung der viskosen Unterschicht an den Wänden der Kavität, wenn die Strömung wesentlich von der – hier thermisch induzierten – Auftriebskraft angetrieben wird. Die mit dem SST-Modell erzielten Ergebnisse stimmen mit den Messdaten gut überein.

Die Kavität 1 wurde ebenfalls benutzt um das Umrechnungsverfahren zwischen einem Modellfluid und dem für das Projekt relevanten kryogenen überkritischen Wasserstoff zu demonstrieren. Bei einer solchen Umrechnung müssen alle dimensionslosen Kenngrößen nach Möglichkeit konstant gehalten werden. Die Auswahl dieser dimensionslosen Kennzahlen hängt von der Strömungsart ab. Für die natürliche Konvektion bei niedrigem Temperaturunterschied ist die Strömung komplett durch die Rayleigh-Zahl und die Prandtl-Zahl definiert. Ein Beispiel für die Umrechnung zwischen Luft bei Raumbedingungen und normalem überkritischen Wasserstoff bei 25 bar und 50 K ist in der Tabelle 2 gegeben. Für beide Fluide ergeben die dort angegebene Parameterwerte dieselbe Rayleigh-Zahl von  $0.86\cdot10^6$ . Der konvektive Geschwindigkeitsmaßstab  $U_c$  ist für freikonvektive Strömungen wie folgt berechnet:

$$U_c = \sqrt{g \cdot \beta \cdot \Delta T \cdot W}$$

Tabelle 2. Das Umrechnungsbeispiel für Luft als Modellfluid für den kryo-komprimierten nH2.

	Pr	Breite, W	β	ν	ΔΤ	U <sub>c</sub>
Luft, p=1 bar,T=300 K	0.71	7.6 cm	3.3·10 <sup>-3</sup> 1/K	1.6·10 <sup>-5</sup> m <sup>2</sup> /s	20 K	0.23 m/s
nH2, p=25 bar, T=50 K	0.92	0.76 cm	3.8·10 <sup>-2</sup> 1/K	2.0·10 <sup>-7</sup> m <sup>2</sup> /s	0.23 K	0.025 m/s

Da die Prandtl-Zahlen für Luft und kryo-H<sub>2</sub> leicht unterschiedlich sind, ist diese Umrechnung nicht exakt. Die entsprechend leichte Abweichung sieht man bei den Geschwindigkeitsprofilen in Abbildung 7. Die numerische Simulation für CcH2 wurde daher unter Bedingungen aus Tabelle 2 mit den Stoffeigenschaften von normalem Wasserstoffs durchgeführt.

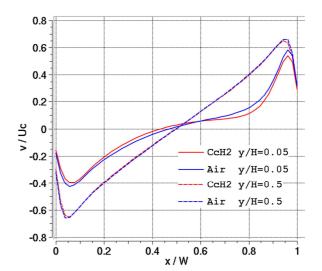
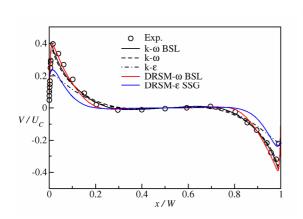


Abbildung 7. Dimensionslose horizontale Profile der senkrechten Geschwindigkeitskomponente:
Blaue Farbe – Luft in der Kavität 1;
Rote Farbe – kryo-H<sub>2</sub> in der skalierten Kavität 1 (siehe Tabelle 2).

Die Strömung in der Kavität 2 ist durch eine deutlich höhere Rayleigh-Zahl von  $3.6\cdot10^8$  gekennzeichnet, die näher zu den in HySIM betrachteten Anwendungen und zu dem praktisch wichtigen Bereich von einem höheren Turbulenzgrad liegt. Außerdem weist diese Strömung stärkere Mehrdimensionalität auf, weil das Seitenverhältnis nicht so groß wie bei Kavität 1 ist. Die horizontalen Profile der senkrechten Geschwindigkeitskomponente und der turbulenten Schubspannung  $\overline{u'v'}$  sind entsprechend in Abbildung 8 und Abbildung 9 dargestellt.



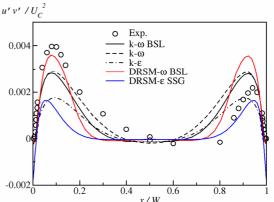


Abbildung 8. Kavität 2: Horizontales Profil der senkrechten Geschwindigkeits-komponente an der Mittelhöhe y/H=0.5. Heiße Wand ist links.

Abbildung 9. Kavität 2: Horizontales Profil der turbulenten Schubspannung  $\overline{u'v'}$  an der Mittelhöhe y/H=0.5. Heiße Wand ist links.

Abbildung 10 zeigt die Verteilung der Nusselt-Zahl entlang der heißen Wand. Dieser Wert ist ebenso wie die Wandreibung in besonderem Maße sensitiv hinsichtlich der Genauigkeit der Grenzschicht-Berechnung. Der Vergleich mit dem Experiment zeigt, dass in ANSYS CFX ω-basierte Modelle in Kombination mit Rechengittern, die die viskose Unterschicht an der Wand auflösen, die besten Ergebnisse liefern.

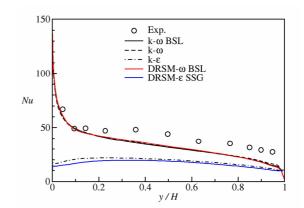


Abbildung 10. Kavität 2: Verteilung der Nusselt-Zahl entlang der heißen Wand.

#### Freie turbulente Mischungsschichten mit Dichteunterschied

Für diesen Fall von Strömungen mit Dichteunterschied wurde eine Mischungsschicht mit einem geringen Dichteunterschied, aber mit wesentlichem Einfluss der Auftriebskraft, nach dem Experiment von Uittenbogaard (1989) untersucht, siehe auch Abbildung 11.



Abbildung 11. Turbulente Mischungsschicht mit Dichteunterschied, entnommen aus der Veröffentlichung von Brown und Roshko (1974).

Die Mischungsschicht wurde experimentell von Uittenbogaard [21] in einem langen Wasserkanal untersucht. Eine stabile Dichteschichtung wurde durch unterschiedliche Salzkonzentrationen in den unteren und oberen Wasserströmungen erzeugt. Die Bedingungen des Experimentes sind in Tabelle 3 zusammengefasst.

Das Hauptziel diese Simulation war die Validierung des Zusatzmodells in ANSYS CFX, das den Auftriebseinfluss auf die Turbulenz ("Buoyancy Turbulence Model") modelliert und in der CFD-Simulation berücksichtigt. Die Wirkung von Auftrieb auf die Turbulenzintensität besteht darin, dass bei einer stabilen Schichtung die Turbulenz durch die Schwerkraft gedämpft wird, während bei einer instabilen Schichtung die Turbulenz verstärkt wird. Das Modell für den Auftriebseinfluss auf die Turbulenz muss diese beiden unterschiedlichen physikalischen Auswirkungen auf die Strömungsturbulenz berücksichtigen können. Wiederum dienen Ähnlichkeitsbetrachtungen dazu, Experimente unter Verwendung von Modellfluiden zur Validierung dieses Turbulenzmodells heranziehen zu können, da derartige Versuche für kryo-komprimierten Wasserstoff nicht verfügbar sind.

Tahalla 3 Dia	Strömungshadingunga	n fiir dia Mischungsschich:	t nach Uittenbogaard (1989).
I AUGIIG J. DIG	30 OH UHUHUSDEUH IUUHUE	i iui uie iviisciiuiiussciiiciii	. Hacii Ollicibouaalu (1303).

Kanallänge	über 40 m
Höhe des Wasserspiegels	560 mm
Grenzhöhe zwischen den Einlässen	323 mm
Messpunkte: Abstand hinter dem Einlass	5 m, 10 m, 40 m
Obere Strömung: Dichte und Geschwindigkeit	$\rho_1$ =1015 kg/m3, $U_1$ =0.5 m/s
Untere Strömung: Dichte und Geschwindigkeit	$\rho_2$ =1030 kg/m3, $U_2$ =0.3 m/s

Wie die Simulationsergebnisse in Abbildung 12 zeigen, spielt bei dieser Strömung die Wechselwirkung zwischen Auftrieb und Turbulenz die entscheidende Rolle. Ohne das Zusatzmodell für den Einfluss des Auftriebs auf die Turbulenzintensität der Strömung wird die Turbulenzintensität stark überschätzt, was zu einer nicht-physikalischen und zu schnellen Vermischung führt.

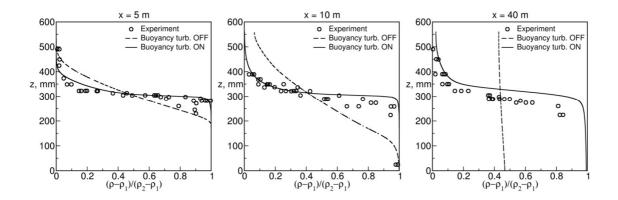


Abbildung 12. Senkrechte Profile der Dichte für drei unterschiedliche Abstände vom Trennplattenrand, Ergebnisse mit SST Turbulenzmodell: —— - mit dem Zusatzmodell für Auftriebs-Turbulenz, - - - ohne dieses Zusatzmodell.

#### II.1.1.3 Skalenauflösende Simulation (LES/SAS)

Wie bereits einleitend erwähnt, sind skalenauflösende Verfahren für Langzeitsimulationen des CcH2-Tanksystems beinahe prohibitiv rechenintensiv oder zumindest dem wissenschaftlichen Hochleistungsrechnen zuzurechnen. Trotzdem ist eine skalenauflösende Simulation z.B. zu Validierungszwecken sehr wünschenswert. Um den großen Rechenaufwand auf maßgebliche Details lokal reduzieren zu können, wurde innerhalb dieses Forschungsprojektes ein zonal forciertes LES Modell (Zonal Forcing LES) entwickelt, in dem nur in vorgegebenen Bereichen skalenauflösend gerechnet wird, außerhalb davon wird automatisch auf RANS-Modelle umgeschaltet.

In skalenauflösenden Turbulenzmodellen, wie z.B. im SAS-Modell, führen Instabilitäten zu transienten Strukturen. Solche Instabilitäten können durch die Umströmung von Hindernissen, wie Zylinder, Gebäude, Flügelprofile, Mixer, etc., bedingt sein. Es gibt aber auch viele Strömungskonfigurationen, in denen die Instabilitäten nicht ausreichen bzw. "zu wenig" transiente Strukturen erzeugt werden. Beispielsweise kann eine SAS-Simulation eine stationäre oder nur schwach transiente Lösung erzeugen, wobei sämtliche transienten Fluktuationen durch die turbulente kinetische Energie k modelliert wird, siehe auch [28], [29].

Um beispielsweise den SAS-Ansatz auf Strömungen mit nur schwachen Instabilitäten zu erweitern, ist ein expliziter Transfer von k notwendig, siehe z.B. [14]. Dieser kann durch Quellterme in den Impulsgleichungen forciert werden, die die modellierte turbulente kinetische Energie k in aufgelöste

transiente Fluktuationen umwandeln. Ebenso wird eine Reduktion von k in den entsprechenden Turbulenzgleichungen berücksichtigt.

Ein solcher Ansatz wurde im Berichtszeitraum für die Implementierung in ANSYS CFX verfolgt, wobei es möglich ist, die entsprechenden Quellterme auf eine vordefinierte Zone ("LES-Zone") zu beschränken, in der skalenaufgelöste Ergebnisse geliefert werden sollen. Diese Zone wiederum kann eingebettet sein in eine umgebenden "RANS-Domäne". Dabei werden in dieser LES-Zone Quellterme in der k —Gleichung aktiviert, entsprechende Quellterme in der Momentengleichung werden am Interface zwischen RANS- und LES-Zone aufgeprägt. Dieser Ansatz wird als "Zonal Forcing LES" bezeichnet.

Abbildung 13 zeigt für einen Testfall mit abklingender Turbulenz, der mit Zonal-Forcing-LES berechnet wurde, die RANS-Zone mit modellierter turbulenter kinetischer Energie k, sowie die LES-Zone mit aufgelösten turbulenten Strukturen. In Abbildung 14 wird für den gleichen Testfall die modellierte und aufgelöste turbulente kinetische Energie k aus der Zonal-Forcing-LES-Simulation mit der modellierten turbulenten kinetischen Energie k für eine reine RANS-Simulation verglichen. In beiden Fällen ergeben sich die gleichen turbulenten kinetischen Energieniveaus, wobei in der reinen RANS-Simulation k komplett modelliert wurde, während k in der Zonal-Forcing-LES-Simulation teilweise durch die LES aufgelöst und teilweise durch das Subgrid-Scale-Modell modelliert wurde.

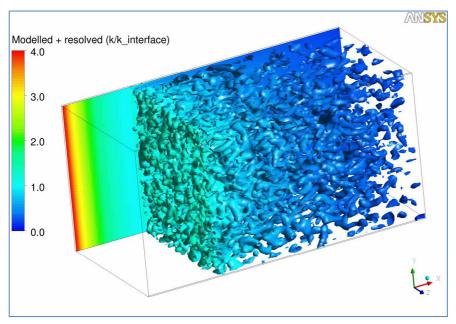


Abbildung 13: Modellierung von turbulenter kinetischer Energie in "RANS-Zone" (vorderer, linker Bereich) bzw. Auflösung turbulenter Strukturen in "LES-Zone" (hinterer, rechter Bereich) für Testfall mit abklingender Turbulenz.

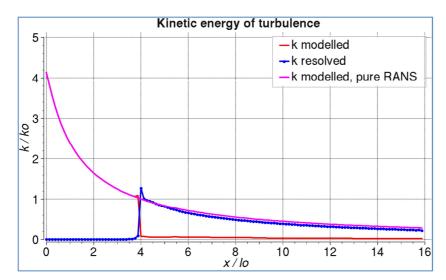


Abbildung 14: Modellierte und aufgelöste turbulente kinetische Energie k für Simulation mit "LES-Domäne" verglichen mit modelliertem k für reine RANS-Simulation.

Eine richtige Behandlung von Wänden, die in der LES-Forcing-Zone liegen bzw. daran angrenzen, ist essentiell für eine erfolgreiche Modellierung. Ein Grundproblem von Wänden im Zusammenhang mit skalenauflösenden Verfahren ist, dass die turbulenten Längenskalen zur Wand hin mit dem Wandabstand abnehmen. Um sinnvolle Werte für die Geschwindigkeit in Wandnähe bzw. die turbulente Wandschubspannung zu erhalten, müssten die turbulenten Längenskalen im Sinne einer LES mit entsprechend feinem Rechengitter aufgelöst werden, und zwar nicht nur in Wandnormalenrichtung, sondern auch parallel zur Wand. Anisotrope Gitter wie in Abbildung 15 würden dieser Anforderung nicht entsprechen. Deshalb wurde eine Möglichkeit zur Umschaltung auf ein RANS-Modell im wandnahen Bereich erarbeitet. Dieses Umschalten geschieht automatisch durch entsprechende Erhöhung der turbulenten kinetischen Energie k mit Hilfe von Quelltermen, die vom Wandabstand und der wandparallelen Gitterauflösung abhängen. Abbildung 15 zeigt für eine Plattengrenzschicht, wie turbulente Strukturen nur innerhalb der vorgegebenen LES-Zone und ab einem gewissen Wandabstand in der Größenordnung der wandparallelen Gitterweite aufgelöst werden.

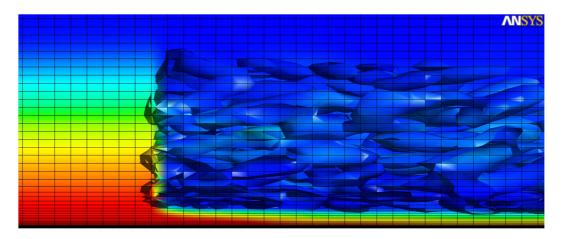


Abbildung 15: Zonal-Forcing-LES mit an LES-Zone angrenzender Wand.

Für eine Kanalströmung wurden Zonal-Forcing-LES-Simulationen durchgeführt, wobei wie oben beschrieben im wandnahen Bereich automatisch auf ein RANS-Modell umgeschaltet wurde. Abbildung 16 zeigt das Wirbelviskositätsverhältnis für verschiedene Reynoldszahlen. Deutlich ist jeweils das lokale Minimum des Wirbelviskositätsverhältnisses erkennbar, das sich in etwa beim Wandabstand des Umschaltens zwischen RANS und LES ergibt. Abbildung 17 zeigt die entsprechenden mittleren Geschwindigkeiten im Vergleich mit der analytischen Korrelation.

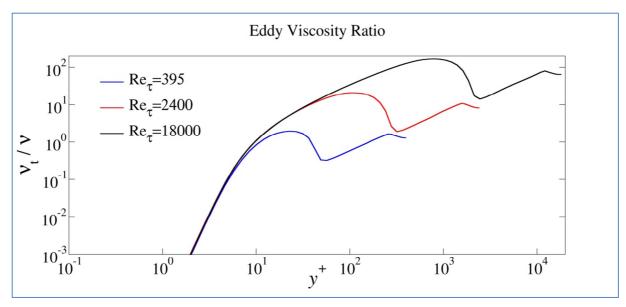


Abbildung 16: Wirbelviskositätsverhältnis für Zonal-Forcing-LES mit RANS-Wandbehandlung bei verschiedenen Reynoldszahlen (Kanalströmung)

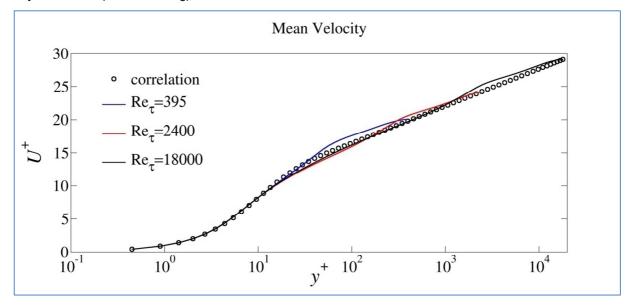


Abbildung 17: Mittlere Geschwindigkeit für Zonal-Forcing-LES mit RANS-Wandbehandlung bei verschiedenen Reynoldszahlen (Kanalströmung)

#### II.1.1.4 Laminar-turbulente Transition

Das Phänomen des laminar-turbulenten Umschlags ist in vielen auftriebsbeeinflussten Strömungen vorhanden. So bilden Naturkonvektionsströmungen entlang einer beheizten Oberfläche zunächst laminare Grenzschichten aus, die über einen größeren Teil der beheizten Oberfläche erhalten bleiben können. Da der Wärmeübergangskoeffizient in einer laminaren Grenzschicht aber deutlich geringer ist, als das für eine turbulente Grenzschicht der Fall ist, wird der summarische Wärmeübergang an der betrachteten beheizten Oberfläche direkt vom Flächenverhältnis derjenigen Oberflächenteile abhängen, die von laminaren bzw. turbulenten Grenzschichten bedeckt sind und somit in direkter Weise vom laminar-turbulenten Umschlag. Wenn man nun derartige Strömungskonfigurationen mit den Mitteln der CFD-Simulation berechnen möchte, so ist es für die Genauigkeit des Ergebnisses ausschlaggebend, wie genau man Transitionspunkt und -länge berechnen kann. Beides ist

ausschlaggebend für die hinreichend genaue Simulation und Berechnung z.B. der Charakteristik von Wärmetauschern oder dem Wärmeeintrag in den CcH2-Tank.

Im Rahmen der (U)RANS-Modellierung hängt die Berechnung des laminar-turbulenten Umschlages vollständig vom verwendeten Turbulenzmodell ab. Es ist daher wichtig zu verstehen, welche Möglichkeiten moderne Turbulenzmodelle für die Strömungs- und Wärmeübergangsberechnung in Strömungen mit freier Konvektion bereitstellen. Einen ersten Eindruck der bestehenden Möglichkeiten kann man z.B. aus der Simulation einer vereinfachten Testkonfiguration einer freien Konvektionsströmung entlang einer vertikalen beheizten Platte gewinnen, entlang derer sich die Strömung unter dem Einfluss der sich einstellenden Naturkonvektion entwickelt. In der zur Verfügung stehenden wissenschaftlichen Literatur wurden derartige Untersuchungen bereits vorgenommen, so z.B. in [3], [4] unter Verwendung von Wirbelviskositäts-Turbulenzmodellen einschließlich SST, Spalart-Allmaras und Durbin's v2-f Turbulenzmodell, sowohl unter Verwendung von verschiedenen Reynoldsspannungs-Turbulenzmodellen. In beiden zitierten CFD-Untersuchungen wurden die Simulationen für das anerkannte Experiment Tsuji & Nagano [5] durchgeführt, bei dem die freie Konvektion von trockener Luft entlang einer vertikalen Platte unter wohl kontrollierten Laborbedingungen untersucht und vermessen wurde. Die gemessenen Daten schließen dabei die Nusselt-Zahlen in den Bereichen mit laminaren, Übergangs- und voll turbulenten Grenzschichten ein. Um den Effekt der Transition in den CFD-Berechnungen abzubilden, haben die Autoren [3], [4] einen sogenannten "trip-term" verwendet, der in den Turbulenzmodellen die Turbulenzproduktion an zuvor manuell vorgegebenen Positionen entlang der beheizten Platte beginnt zu aktivieren. Die Ergebnisse zeigten, dass das SST- und das v2-f-Turbulenzmodell in der Lage waren, die Verteilung der Nusselt-Zahlen entlang der Platte mit sinnvoller Genauigkeit wiederzugeben, während andere Turbulenzmodelle diese deutlich unterschätzt haben.

Trotz der erzielten guten Ergebnisse mit dem SST-Turbulenzmodell bei der Berechnung des Testfalls nach [3] ist es jedoch nicht klar, was letztendlich für dieses gute Ergebnis verantwortlich zeichnet – das Turbulenzmodell selbst oder der eingeführte künstliche "trip-term" in [3]. Die Formulierung dieses Terms wird in [3] nicht wiedergegeben, aber es ist ohnehin klar, dass ein solches vereinfachtes Vorgehen auf reale Geometrien von beliebig geformten Wärmetauschern nicht übertragbar ist, da in diesem Fall die exakte Lage des Transitionspunktes von vornherein nicht bekannt ist. Um die Genauigkeit eines nicht modifizierten SST-Modells für die gleiche Strömungsanordnung ebenfalls einschätzen zu können, wurde die Berechnung für den Testfall [5] hier wiederholt.

Die Berechnungen wurden mit ANSYS CFX 13.0 ausgeführt. Die Strömung wurde stationär und 2-dimensional berechnet, auf einem Gitternetz mit einer Zelllage in der 3. Raumrichtung wie für ANSYS CFX in 2-dimensionalen Strömungskonfigurationen erforderlich. Die Strömung wurde mittels RANS unter Verwendung des Standard-SST-Turbulenzmodells [6] zur Berechnung der Wirbelviskosität berechnet. Der thermische Auftrieb wurde hierbei unter Verwendung der Boussinesq Approximation berücksichtigt.

Die Strömungskonfiguration, die dem Experiment nach [5] entspricht, ist die Folgende: Das in Abbildung 18 gezeigte Strömungsgebiet besteht aus einer rechteckigen Domain der Größe 5.09 [m] x 1.5 [m] in Richtung entlang der beheizten Platte (x) und in wandnormaler Richtung (y). Das Segment AE hat eine Länge von 4 [m] und repräsentiert die Oberfläche einer isotherm beheizten Oberfläche mit einer konstanten Oberflächentemperatur von 60.1° [C]. Der an der Wand aufsteigende und sich entwickelnde Wandstrahl setzt sich in das Gebiet oberhalb der beheizten Platte fort. Entlang des mit ED markierten Segments wird eine Symmetrierandbedingung verwendet. Um Rezirkulation am Austrittsquerschnitt zu gestatten, wird entlang des DC-Segments eine "Opening"-Randbedingung gesetzt. Das Segment CB ist der definierte Eintrittsquerschnitt mit einer hier gesetzten Totaldruck-Randbedingung (1 [atm]) und einer Temperatur von 16.6° [C]. Für den Eintrittsguerschnitt wurden des Weiteren die Werte der kinetischen Turbulenzenergie k und der Wirbelfrequenz ω aus der Bedingung abgeleitet, dass die Turbulenzintensität hier 1% beträgt und das Verhältnis von Wirbel- zu molekularer Viskosität gleich 1 beträgt. Diese Werte wurden vorgegeben um die Luft in Ruhe in der Umgebung der beheizten Platte zu spezifizieren. Das Segment AB wurde als eine adiabatische Wand mit free-slip Randbedingung definiert und schließlich wurden Symmetrierandbedingungen an den beiden Seiten des Rechengebietes in z-Richtung vorgegeben.

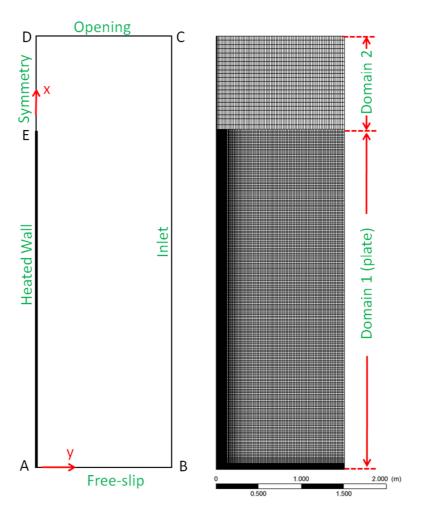


Abbildung 18: Rechengebiet und Gitterauflösung für die Simulation einer freien Konvektionsströmung entlang einer vertikalen beheizten Platte (Experiment von Tsuji & Nagano [5]).

Das ebenfalls in Abbildung 18 gezeigte Rechengitter besteht aus zwei mit einem GGI-Interface verbundenen Teilgitternetzen. Das untere sich in y-Richtung bis zum Ende der beheizten Wandlänge erstreckende Rechengebiet hat 223×192×2 Knoten in x, y und z-Richtung. An der Wandoberfläche hat der erste Gitterknoten einen Wandabstand in wandnormaler Richtung von 2.6×10<sup>-5</sup> [m], was mittlere Werte von y<sup>†</sup> entlang der beheizten Platte von gerade einmal 0.1 sicherstellt. Ein recht geringes Zellenexpansionsverhältnis von 1.05 wurde an der Platte verwendet, um eine hinreichend genaue Auflösung der sich entwickelnden Grenzschichten zu garantieren. Das Gitternetz weist ebenfalls eine Gitterverfeinerung entlang der unteren Domaingrenze AB auf, um auch hier eine gute Strömungsauflösung zu erzielen, da sich die Naturkonvektionsströmung in diesem Bereich beginnen wird zu entwickeln. Das obere vernetzte Rechengebiet oberhalb der beheizten Platte hat eine Auflösung von 23×85×2 Knoten.

Das in den CFD-Simulationen verwendete Fluid ist Luft mit konstanten physikalischen Eigenschaften, wie hier angegeben:

Dichte:  $\rho = 1.22 [kg/m^3]$ 

Dynamische Viskosität:  $\mu = 1.831 \cdot 10^{-5} [Pa \, s]$  Wärmeleitfähigkeit:  $\lambda = 0.0259 [W/m/K]$  Wärmekapazität:  $C_p = 1004.4 [J/kg/K]$ 

Thermischer Ausdehnungskoeffizient:  $\beta_T = 0.003356$  [1/K]

Die für das Boussinesq-Modell erforderliche Referenztemperatur wurde auf 16.6° [C] am Punkt mit den Koordinaten (1.5;0;0) gesetzt.

Das sich somit an der beheizten Platte herausbildende Strömungsbild ist in Abbildung 19 gezeigt. Der vergrößert dargestellte Bereich mit den Geschwindigkeitsvektoren zeigt eine gute numerische Auflösung der Gradienten, insbesondere im Bereich nahe der beheizten Oberfläche. Die Konturen des

Verhältnisses von Wirbel- zu molekularer Viskosität, die in derselben Abbildung dargestellt sind, zeigen, dass das SST-Turbulenzmodell beginnt einen gewissen Anteil an Wirbelviskosität zu produzieren, ohne dass es hierfür eines expliziten "trip-terms" bedarf. Diese Beobachtung wird ebenfalls gestützt, wenn man sich die Abhängigkeit der Nusselt-Zahlen von der lokalen Raleigh-Zahl veranschaulicht. Dies wird in Abbildung 20 im Vergleich mit den experimentellen Werten gezeigt. Die lokalen Werte der Nusselt- und Rayleighzahlen werden dabei durch die folgenden Formeln berechnet:

$$Ra = Gr \cdot Pr = \frac{g\beta_T \Delta T \ x^3}{v^2} \cdot Pr$$
 ,  $Nu = \frac{q_w x}{\Delta T \lambda}$ 

Hierbei ist x die Distanz vom unteren Ende der Platte,  $\Delta T$  – die Temperaturdifferenz zwischen der umgebenden (Inlet-)Temperatur und der Wandtemperatur,  $q_w$  – der Wandwärmestrom an der Wand. Analysiert man nun Abbildung 20, so kann man ein annähernd lineares Anwachsen der Nusseltzahl im Experiment bis ca. zu einer Rayleighzahl von  $Ra \approx 10^9$  beobachten, was mit dem laminaren Abschnitt der sich entwickelnden Grenzschicht korrespondiert. Ein wenig weiter stromab kommt es dann zu einem recht abrupten Übergang hin zu einem turbulenten Strömungsregime, der begleitet wird mit einem deutlichen Anstieg der gemessenen Nusselt-Zahl. Das SST-Turbulenzmodell erzeugt bis hin zu einer Rayleighzahl von annähernd  $Ra \approx 10^8$  keinerlei Wirbelviskosität, und reproduziert somit in recht guter Weise die Nusseltzahlen in diesem laminaren Bereich. Weiter stromab beginnt das Modell mit der Turbulenzproduktion, jedoch in einem zu geringen Umfang um für die im Experiment zu beobachtende ausgeprägte Transition oder für genügend hohe Nusseltzahlen in der CFD-Simulation im turbulenten Strömungsbereich sorgen zu können.

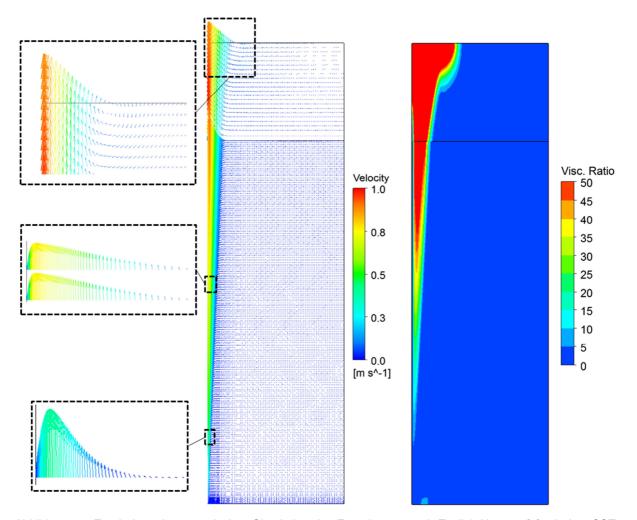


Abbildung 19: Ergebnisse der numerischen Simulation des Experiments nach Tsuji & Nagano [5] mit dem SST-Turbulenzmodell – Geschwindigkeitsvektoren und Verhältnis von Wirbel- zu molekularer Viskosität.

Schlussbericht Version 1.0 20

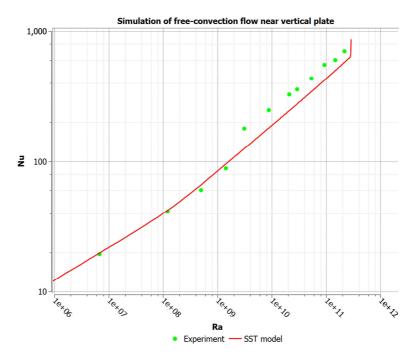


Abbildung 20: Ergebnisse der numerischen Simulation des Experiments nach Tsuji & Nagano [5] mit dem SST-Turbulenzmodell – Verteilung der lokalen Nusseltzahlen entlang der Platte.

Durch diese Simulationen ohne einen expliziten Mechanismus zum "Triggern" der Transition haben somit gezeigt, dass das SST-Turbulenzmodell in dieser Form den Wärmeübergang an der vertikalen beheizten Platte in ihrer Gesamtlänge nicht exakt berechnen kann. Diese Schlussfolgerung wurde auch in direkter Kommunikation mit den Autoren von [3] bestätigt. In Ergänzung teilten die Autoren des Weiteren mit, dass auch alle anderen bekannten Turbulenzmodelle den Wärmeübergang in dieser Strömungskonfiguration stark unterschätzen, wenn keine besonderen Vorkehrungen zur Einleitung der Transition getroffen werden.

Diese Tatsache hat ANSYS Germany darin motiviert und bestärkt, ein neues Turbulenzmodell bzw. Transitionsmodell auf Basis der in [26] gemachten Erfahrungen zu entwickeln, das für Naturkonvektions-Anwendungen geeignet ist. Als eine Minimalanforderung sollte das Modell die Beschränkung der bestehenden Transitionsmodelle überwinden, dass die Lage des Transitionspunktes vom Benutzer explizit vorzugeben ist und es sollte die Genauigkeit des vom Modell berechneten Wärmeübergangs in der Zone des turbulenten Strömungsregimes deutlich verbessert werden.

Ein logischer Ausgangspunkt für diese neue Modellentwicklung stellte das existierende YRe, Transitionsmodell dar, das ebenfalls mit dem SST-Turbulenzmodell gekoppelt ist. Diese bestehende Version eines Transitionsmodells ist jedoch im Wesentlichen auf experimentell ermittelten Korrelationen basierend, die für die Entwicklung von Grenzschichten unter dem Einfluss erzwungener Konvektion aufgestellt wurden. Es ist zu erwarten, dass derartige Korrelationen die Bedingungen einer sich unter Naturkonvektionsbedingungen entwickelnden Grenzschicht und die sich in der freien Anströmung entwickelnden Strömungsverhältnisse nicht wiedergeben kann, insbesondere nicht in den Fällen, bei denen die Geschwindigkeiten der freien Anströmung sich nahe bei Null bewegen, d.h. die Strömung ausschließlich durch die sich an der beheizten Oberfläche entwickelnde Naturkonvektion wird. Aus diesem Grund bestand das Erfordernis, Transitionsmodellierung zu verändern und ausschließlich auf innerhalb der Grenzschicht verfügbare Informationen zurückzugreifen. Mit dieser Einschränkung besteht auch keine Grundlage mehr dafür, die zusätzliche Transportgleichung für die kritische Reynoldszahl (Re<sub>θ</sub>) zu lösen, so dass das Transitionsmodell auf die Lösung der Transportgleichung für die Intermittency ( $\gamma$ ) reduziert werden kann.

Im Ergebnis der ausgeführten umfangreichen Untersuchungen wurde ein derartiges Transitionsmodell formuliert. Die Form der gelösten Transportgleichung für die Intermittency ( $\gamma$ ) wurde dabei gegenüber der im  $\gamma$ Re $_{\theta}$ -Transitionsmodell nicht verändert und lautet wie folgt:

$$\frac{\partial(\rho\gamma)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j \gamma)}{\partial x_j} = P_{\gamma} - E_{\gamma} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\gamma}} \right) \frac{\partial \gamma}{\partial x_j} \right]$$

Der Transitions-Quellterm in dieser Transportgleichung kann dann wie folgt definiert werden:

$$P_{\gamma 1} = F_{length} \rho S \gamma F_{onset} \left(1 - c_{e1} \gamma\right)$$

wobei hier S die Amplitude der Scherrate darstellt. Die Größe dieses Quellterms wird maßgeblich von der Funktion für die Transitionslänge ( $F_{length}$ ) bestimmt, die in der gegenwärtigen Modellformulierung als konstant angesehen wird. Der Destruktions- oder Relaminarisierungsterm ist dann wie folgt definiert:

$$E_{\gamma} = c_{a2} \rho \Omega \gamma F_{turb} (c_{e2} \gamma - 1)$$

wobei  $\Omega$  die Amplitude der Wirbelstärke ist. Der Einsatz der Transition wird dabei durch die folgenden Funktionen kontrolliert:

$$F_{onset1} = \frac{C_{\mu}^{1/4} \rho \sqrt{k} y}{22 \mu}$$

$$F_{onset 2} = \min(F_{onset 1}, 2)$$

$$F_{onset3} = \max\left(1 - \left(\frac{R_T}{2.5}\right)^3, 0\right)$$

$$F_{onset} = \max(F_{onset2} - F_{onset3}, 0)$$

$$R_T = \frac{\rho k}{\mu \omega}$$

$$F_{turb} = e^{-\left(\frac{R_T}{4}\right)^4}$$

$$F_{length} = 100$$

Die notwendigen Modellkonstanten in der Transportgleichung der Intermittency wurden wie folgt bestimmt:

$$c_{e1} = 1.0$$
;  $c_{e2} = 50$ ;  $c_{a2} = 0.06$ ;  $\sigma_{\gamma} = 1.0$ .

Nunmehr wird die Kopplung des Transitionsmodells mit dem Turbulenzmodell durch eine Modifikation der gelösten *k*-Gleichung erreicht, die für das Standard-SST-Modell die folgende Form annimmt:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_{i}}(\rho u_{j}k) = \tilde{P}_{k} - \tilde{D}_{k} + \frac{\partial}{\partial x_{i}}\left((\mu + \sigma_{k}\mu_{t})\frac{\partial k}{\partial x_{i}}\right)$$

$$\widetilde{P}_{k} = \gamma P_{k} + \rho S \max(k_{Tu} - k, 0) \max(1 - \gamma, 0) + \gamma |g| \mu_{t} \beta_{T} \frac{F_{1}}{\omega} \max(0, \nabla U_{s} \cdot \nabla T)$$

$$\widetilde{D}_k = \min(\max(\gamma, 0.1), 1.0)D_k$$

wobei  $P_k$  und  $D_k$  die Produktions- und Destruktionsterme aus der originalen Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie des SST-Turbulenzmodells darstellen. Der zweite Term in  $\tilde{P}_k$  ist dazu bestimmt, einen Einsatz der Transition bei sehr niedrigen Turbulenzgraden Tu einzuleiten, wobei die Funktion  $F_{onset1}$  eventuell noch nicht einmal beginnt anzuwachsen. Dieser zusätzliche Term enthält eine neue Größe,  $k_{Tu}$  – der minimale Betrag von turbulenter kinetischer Energie die das Modell benötigt, um an einem bestimmten Punkt die Transition einzuleiten. Die Lage dieses Punktes wird bei einem unteren Grenzwert von  $Tu_{lim}$  kontrolliert, das in den Wert von  $k_{Tu}$  wie folgt eingeht:

$$k_{Tu} = (Tu_{\lim} \widetilde{S} d_w)^2$$

wobei  $\widetilde{S}=\max(S,0.1\omega)$  und  $d_w$  für den Wandabstand steht. Der aus den derzeitigen Untersuchungen ermittelte Wert für  $Tu_{\lim}$  ist 0.11. Der dritte Term  $\widetilde{P}_k$  wurde hinzugefügt, um die Genauigkeit des SST-Turbulenzmodells im Bereich der turbulenten Grenzschichten zu verbessern und steht nicht in Beziehung zur eigentlichen Transitionsmodellierung. In diesem Term steht  $U_s$  für die Geschwindigkeit entlang der Wand und  $F_1$  ist die Blending-Funktion aus dem Standard-SST-Modell.

Das somit erzielte Ergebnis unter Anwendung des entwickelten Transitionsmodells auf den Versuch von Tsuji & Nagano [5] ist in Abbildung 21 dargestellt. Man kann sehen, dass das Modell den Transitionseinsatz und die Transitionslänge nunmehr sehr genau vorhersagen kann, ebenso wie die berechneten Nusseltzahlen im Gebiet turbulenter Grenzschichten nun ebenfalls gut mit den experimentellen Werten übereinstimmen.

Das hier vorgeschlagene Modell stellt somit einen sehr vielversprechenden neuen Ansatz für die CFD-Simulation von sich entwickelnden Strömungen mit Wandwärmeübergang unter den Bedingungen freier Naturkonvektion dar. Um die generelle Anwendbarkeit und Übertragbarkeit des Modells auf andere mögliche Strömungsanwendungen sicherzustellen, sind jedoch noch umfassende weitere Untersuchungen und weitere Validierungen anhand einer umfassenderen Datenbasis von Validierungstestfällen erforderlich.

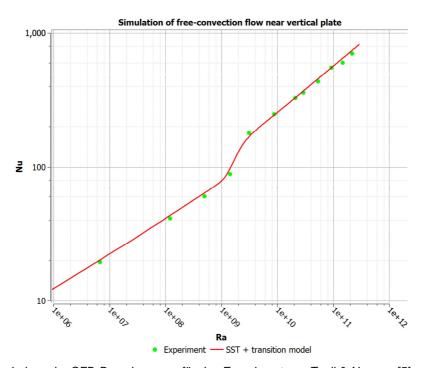


Abbildung 21: Ergebnisse der CFD-Berechnungen für das Experiment von Tsuji & Nagano [5] unter Verwendung des SST-Turbulenzmodells unter Hinzufügung des auf der Intermittency-Transportgleichung basierenden, neu entwickelten Transitionsmodells – Verteilung der berechneten Nusseltzahlen entlang der beheizten Platte im Vergleich mit dem Experiment.

#### II.1.1.5 Fluid-Struktur-Wärmekopplung und anisotrope Wärmeleitung in Festkörpern

Um die thermischen Prozesse in Tanksystemen realistisch abbilden zu können, ist es zwingend notwendig die thermischen Verhältnisse nicht nur im Fluid, sondern auch in den das Fluid begrenzenden Festkörpern beschreiben zu können. Mit ANSYS CFX kann die thermische Kopplung zwischen Fluid und Festkörpern, die sogenannten konjugierten Wärmeströme, simuliert werden.

Im CcH2 Tanksystem gibt es verschiedene Komponenten, deren thermisches Verhalten sich durch signifikante Anisotropie auszeichnet, z.B. die richtungsabhängigen Wärmeleitungseigenschaften bei gewickelten oder geschichteten Verstärkungen unter Verwendung von Faserverbundwerkstoffen, Isolierungen, etc. Um deren anisotrope Eigenschaften beschreiben zu können, wurde im Rahmen des

HySIM-Projektes die Möglichkeit geschaffen, den gesamten Wärmeleitungstensor  $\underline{\underline{k}}^{glob}$  in globalen Koordinaten für Festkörper in ANSYS CFX vorgeben zu können:

$$\underline{\underline{k}}^{glob} = \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ & k_{yy} & k_{yz} \\ sym. & & k_{zz} \end{bmatrix}$$

Damit können nun beispielsweise auch doppelt gekrümmte dünnwandige Strukturen mit unterschiedlicher Wärmeleitung in Dickenrichtung und tangentialer Richtung, wie die Kugelschale in Abbildung 22, simuliert werden.

Typischerweise werden die Wärmeleitungseigenschaften jedoch als  $\underline{\underline{k}}^{loc}$  in lokalen Koordinaten der Hauptrichtungen der Anisotropie vorgegeben

$$\underline{\underline{k}}^{loc} = \begin{bmatrix} k_{nn} & 0 & 0 \\ 0 & k_{t_I t_I} & 0 \\ 0 & 0 & k_{t_{II} t_{II}} \end{bmatrix},$$

wobei  $\underline{n}$  als Dickenrichtung und  $\underline{t}_I$  and  $\underline{t}_{II}$  als tangentiale Richtungen einer dünnwandigen Struktur angesehen werden können. Deshalb ist eine Transformation von  $\underline{\underline{k}}^{loc}$  nach  $\underline{\underline{k}}^{glob}$  notwendig:

$$\underline{\underline{k}}^{glob} = \underline{\underline{A}} \underline{\underline{k}}^{loc} \underline{\underline{A}}^{T}$$

mit

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} n_x & t_{Ix} & t_{IIx} \\ n_y & t_{Iy} & t_{IIy} \\ n_z & t_{Iz} & t_{IIz} \end{bmatrix}$$

In einem Testfall für die Wärmeleitung in einem Oktanten einer Kugelschale wurden die Effekte isotroper und anisotroper Wärmeleitung verglichen. Die Temperatur auf sämtlichen Oberflächen ist konstant gehalten, eine punktförmige Wärmequelle führt im Inneren der Kugelschale Wärme zu. Der Wandwärmefluss bei isotroper Wärmeleitung ist in Abbildung 22 (links) dargestellt. Bei anisotroper Wärmeleitung und einem Verhältnis der Wärmeleitungskoeffizienten in radialer und tangentialer Richtung von 1:50 wird ein Wandwärmefluss gemäß Abbildung 22 (rechts) erreicht, wobei der hohe Wandwärmefluss an den Schnittflächen der Kugelschale wegen des höheren tangentialen Wärmeflusses zu beachten ist.

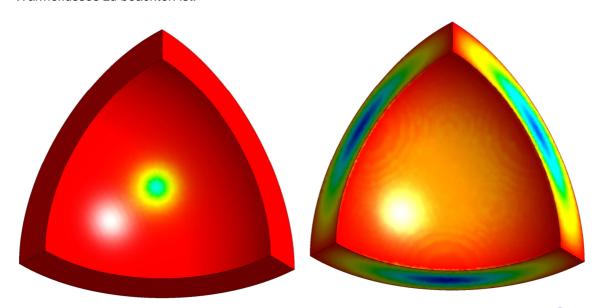


Abbildung 22: Beispielhafte Darstellung der Wandwärmeflüsse bei isotroper Wärmeleitung (links) und anisotroper Wärmeleitung (rechts).

Zwei Möglichkeiten zur Vorgabe der räumlich veränderlichen Hauptrichtungen der Anisotropie  $\underline{n}$ ,  $\underline{t}_I$  und  $\underline{t}_{II}$  wurden vorgeschlagen:

- o Vorgabe von  $\underline{n}$ ,  $\underline{t}_{J}$  und  $\underline{t}_{JI}$  als explizite Ausdrücke in der CFX-Expression-Language (CEL, [16]) durch den Software-Anwender;
- Vorgabe von n, t<sub>I</sub> und t<sub>II</sub> durch Definition eines Potentials Φ zwischen Festkörperoberseite und Festkörperunterseite, siehe Abbildung 23. Dabei wird Gebrauch gemacht von ANSYS CFX-Standardfunktionalität zur Lösung der Laplace-Gleichung. Die Dickenrichtung (im Fall der Kugelschale: radiale Richtung) ergibt sich als Gradient des Potentials. Von der Dickenrichtung können die tangentialen Richtungen abgeleitet werden.

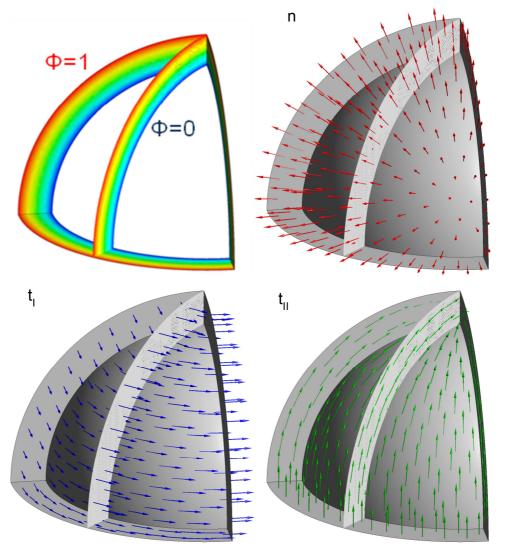


Abbildung 23: Definition eines Potentials zwischen Festkörperoberseite und Festkörperunterseite und daraus abgeleitete Dickenrichtung und Tangentialrichtungen.

#### II.1.2 Komponenten

#### II.1.2.1 Modellierung des Innentanks (Tankkühlung)

Um die in ANSYS CFX implementierten physikalischen und numerischen Modelle (siehe Abschnitt II.1.1) für kryogene, thermo-hydraulische Problemstellungen zu validieren, wurde beim Projektpartner BMW ein Experiment zur Tankkühlung durchgeführt. In diesem Experiment wird kryogener Wasserstoff durch den Tank mit anfänglicher Umgebungstemperatur gespült und das thermische Verhalten des Tanks über die Zeit gemessen.

Da eine Platzierung von Temperatursensoren innerhalb des mit Wasserstoff unter kryo-komprimierten Bedingungen gefüllten Tanks nicht möglich ist, wurden die Temperatursensoren an der Außenseite der Aluminiumtankhülle (Liner) angebracht, siehe Abbildung 24.

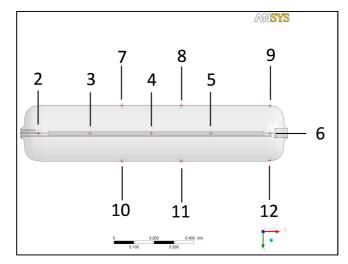


Abbildung 24: Lage der Temperatursensoren auf dem Tank-Liner.

Zu Beginn des Experiments hatte der Tank Umgebungstemperatur (300K) und einen Druck von 25 bar. Daraufhin wurde kalter Wasserstoff mit einer Temperatur von 35 K in den Tank am rechten Ende des Zuleitungsrohres auf der rechten Seite des Tanks eingedüst, wobei versucht wurde, sowohl Tankdruck als auch Wasserstoffmassenstrom konstant zu halten. Der Massenstrom in den Tank konnte nicht direkt gemessen werden, dafür aber der Massenstrom aus dem Tank (20kg/h) durch das Auslassrohr auf der linken Seite des Tanks. Zur Validierung des Simulationsmodells wurden im Wesentlichen die transienten Temperatursensoren des Experiments mit denen der Simulation verglichen. Für weitere Details zum Experiment siehe [13].

Im Folgenden werden Merkmale des für die Tankkühlungssimulation entwickelten CFD-Modells erläutert und damit erzeugte Simulationsergebnisse werden experimentellen Daten gegenübergestellt. Für ausführliche Beschreibungen und Details wird auf das HySIM-Deliverable D1.1 [11] verwiesen. Darin wird beispielsweise auf Vereinfachungen des CFD-Modells hinsichtlich der Originalgeometrie, Modellierung der Eindüsung, Sensitivitätsstudien bezüglich Gitterauflösung, Zeitschrittweite und Turbulenzmodellierung detailliert eingegangen.

Wie bereits angedeutet wurde die Originalgeometrie des Tanks für das CFD-Modell in Teilen vereinfacht, z.B. wurde der im Kühlungsprozess nicht aktive Wärmetauscher und dessen Rippen als Zylinder angenähert, Versorgungsleitungen abgeschnitten, etc. Da der Tank symmetrisch ist wurden für eine Hälfte dieser vereinfachten Geometrie zwei blockstrukturierte Rechengitter mit ca. 2.0·10<sup>6</sup> bzw. 16.0·10<sup>6</sup> Knoten im Fluidvolumen erstellt.

Einstellungen innerhalb der Fluid	d Domain	Wert / Einstellung	
Material		Para-Wasserstoff (RGP-Tabelle)	
Initialdruck	[bar]	25	
Initialtemperatur	[K]	300	
Auftrieb in y – Richtung [m/s²]		-9.81	
Turbulenzmodell		SST	
Wandbehandlung		Automatische Wandbehandlung	
Auftriebsturbulenz		Produktion und Dissipation	

Tabelle 4: Simulationseinstellungen für den Fluidraum der Tanksimulation

Tabelle 4 zeigt Einstellungen des CFD-Modells, die die physikalische Modellierung betreffen. Es sei herauszuheben, dass entsprechend der Empfehlungen in Abschnitt II.1.1.2 turbulente Auftriebseffekte berücksichtigt werden, da die auftretenden Minimal- und Maximaltemperaturen einen

Dichteunterschied des superkritischen Wasserstoffs von annähernd einem Faktor von 10 bewirken und damit starke Auftriebsphänomene auslösen. Wie im Folgenden gezeigt wird, wird auch die in dem zitierten Deliverable formulierte Empfehlung eines nichtdimensionalen Wandabstandes in der Größenordnung von 1 auf dem feinen Gitter erreicht.

Für alle Festkörperteile werden entsprechende von der jeweiligen Temperatur abhängige thermische Materialeigenschaften angenommen: Stahl für die Endstücke, Wärmetauscher und Einlassrohr, Aluminium für den Liner und Teflon für den Puffer für freie Bewegung der Einbauten auf der rechten Tankseite. In den Simulationen wird konjugierter Wärmeaustausch an den Kontaktflächen zwischen Fluid und Festkörpern berücksichtigt.

Die Einlassdüsen für den kryogenen Wasserstoff befinden sich am Ende des Einlassrohres am rechten Ende des Tanks. Um die aufwendige Vernetzung der sehr kleinen Düsen am Ende des Einlassrohrs zu umgehen, werden die Düsen mit Hilfe von Punktquellen modelliert. Diese wurden in geringem Abstand von ihrer eigentlichen Position an der Einlassrohroberfläche (siehe Abbildung 25) im Rechengebiet positioniert.

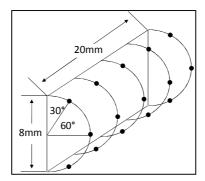


Abbildung 25: Anordnungsschema der Düsen am Ende des Einlassrohrs

Die Punktquellen werden durch Massenstrom  $\dot{m}$ , Geschwindigkeitskomponenten (u, v, w), Temperatur T und die Turbulenz beschreibende Größen definiert. Basierend auf der experimentellen Einlasstemperatur in das Zuleitungsrohr wurde durch Wärmeeinträge bis zu den Düsen eine Eindüsungstemperatur von 50 K angenommen. Im Falle des verwendeten SST-Modells werden die turbulente kinetische Energie k und die turbulente Wirbelfrequenz  $\omega$  vorgegeben. In Tabelle 5 sind die Werte zur Definition der Punktquellen enthalten.

		Experiment	Simulation
Wasserstofftemperatur beim Eindüse	n [K]	50	50
Absolutdruck im Tank	[bar]	25	25
Massenstrom $\dot{m}$	[kg/s]	0.0061 (gesamt)	0.000204 pro Düse
Wasserstoffdichte ρ beim Eindüsen	[kg/m³]	11.55	11.55
Düsendurchmesser d	[m]	0.001	0.001
Radialgeschwindigkeit U	[m/s]	-	$f(\dot{\boldsymbol{m}}, d, \boldsymbol{\rho})$
Turbulenzintensitaet I	[%]	-	3.7
Turbulente kinetische Energie k	$[m^2/s^2]$	=	f( <b>I</b> , <b>u</b> , <b>v</b> , <b>w</b> )
Wirbelfrequenz ω	[1/s]	•	f( <b>k</b> , <b>d</b> )

Tabelle 5: Einlassrandbedingungen mit Quellendefinition

Das Auslassrohr, durch das der Wasserstoff den Tank verlässt, befindet sich am in axialer Richtung gegenüberliegenden Ende der Einlassdüsen. Am Auslassrohr wurde eine Druckrandbedingung von 25 bar angenommen.

Als thermische Randbedingungen werden alle Oberflächen des Tanks, die Kontakt mit der Umgebung haben, als adiabate Wände angenommen.

Tabelle 6 zeigt die gewählten numerischen und algorithmischen Einstellungen.

Simulations Parameter	Einstellung / Wert	
Advection Scheme	High Resolution	
Transient Scheme	Second Order Backward Euler	
Time Step Initialisation	Automatisch	
Turbulence Numerics	1st Order	
Konvergenzkriterium [RMS Residuum]	0.002	
Max. Anzahl Iterationsschritte je Zeitschritt	10	
Zeitschrittweite [s]	0.4	

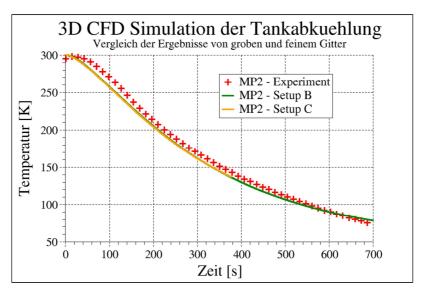
Tabelle 6: Darstellung der numerischen und algorithmischen Einstellungen.

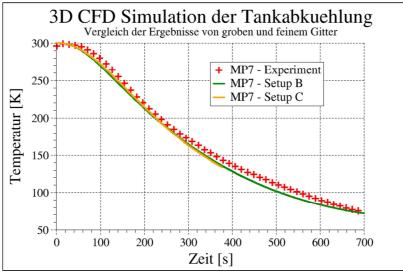
Damit die Simulation mit dem von BMW durchgeführten Experiment verglichen werden kann, müssen die Temperaturen an der Tankwand über die Simulationsdauer gemessen werden. Dafür werden in ANSYS CFX sog. "Monitorpunkte" an den in Abbildung 24 dargestellten Positionen definiert, die den jeweiligen Temperatursensorstellen aus dem Experiment entsprechen. So kann an diesen Stellen der Temperaturverlauf während der Simulation transient aufgezeichnet werden und am Ende mit den experimentellen Daten verglichen werden.

Die Temperaturtransienten für Experiment, Grob- und Feingittertemperaturkurven sind in Abbildung 26 exemplarisch für die Monitorpunkte 2, 7 und 9 zu sehen. Die Abweichungen zwischen den Grob- und Feingitterergebnissen sind an den Monitorpunkten 2 und 7 vernachlässigbar klein. Nur an Monitorpunkt 9 zeigen sich v.a. in der Zeit zwischen 60 und 110s für beide Gitter unterschiedliche Temperaturen im Liner. Dieser Monitorpunkt liegt im Bereich des Liners, an dem der nach oben gerichtete Wasserstoffstrahl die Tankwand trifft. Die unterschiedlich starke räumliche Auflösung der Strahlen in diesem Bereich ist der Grund für die Abweichung an Monitorpunkt 9. Über die gesamte Simulationsdauer gesehen ist jedoch auch an dieser Stelle der Unterschied zwischen beiden Gittern vernachlässigbar.

Gemäß der Ausführungen in II.1.1.2 wurde für diese Strömung mit Auftriebseffekten auf dem feinen Gitter ein dimensionsloser Wandabstand in der Größenordnung von 1 erzielt.

Für beide Gitter ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation.





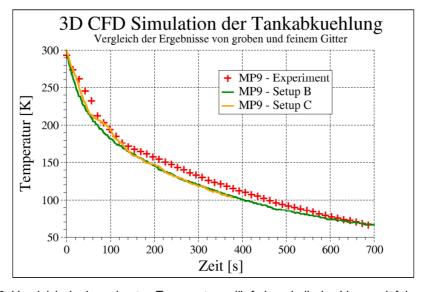


Abbildung 26: Vergleich der berechneten Temperaturverläufe innerhalb des Liners mit feinem und groben Fluidgitter (Δt=400ms)

Weitere Details zur Simulation der Tankkühlung, z.B. weitere Studien zur Sensitivität der Ergebnisse bezüglich numerischen Parameter wie der Zeitschrittweite, des angewendeten Konvergenzkriteriums oder hinsichtlich der physikalischen Modellierung (z.B. Wahl des Turbulenzmodells) können dem Deliverable D1.1 [11] entnommen werden.

#### II.1.2.2 Konvektion im geneigten Rohr

Beim Projektpartner von der TU Dresden wurde ein Versuchsstand aufgebaut, mit dessen Hilfe in einer Reihe von Experimenten Konvektionsströmungen in geneigten Rohren bei verschiedenen Neigungswinkeln untersucht werden sollten. Darin wird das Kühlungsmittel R125 als Modellfluid bei moderaten Drücken p=1bar bzw. p=3bar einer Temperaturdifferenz an den Rohrenden von 80K (warme Seite: 100°C, kalte Seite: 20°C) ausgesetzt. So werden ähnliche Rayleigh-Zahlen erreicht, wie sie bei für das HySIM-Projekt typischen Betriebspunkten vorherrschen. Die experimentellen Ergebnisse sollen der Validierung der eingesetzten Simulationsmodelle dienen. Die Testmatrix der Validierungsexperimente wurde wie folgt definiert:

Druck	Neigung der Rohrachse
	zur Horizontalen
3 bar	45 °
3 bar	30 °
3 bar	10 °
3 bar	0 °
1 bar	45 °
1 bar	30 °
1 bar	10 °
1 bar	0 °

Es wurden 3D-CFD-Modelle zur Simulation des Versuchsstandes erstellt. Abbildung 27 zeigt einen Querschnitt durch das Simulationsmodell des Versuchsstands mit dem Fluidvolumen (R125), die innere und äußere Glasröhre, zwischen denen zur thermischen Isolation ein Vakuum erzeugt wird, sowie die beheizte und die gekühlte Endplatte aus Stahl. Abbildung 28 zeigt die beiden Rohrenden in Detailansicht.

Das Fluid R125 wurde mit Realgaseigenschaften modelliert die wiederum aus der GASPACK-Software für die Verwendung in ANSYS CFX entnommen wurden, siehe Abschnitt II.1.1.1. Zur Modellierung der Turbulenz wurde das SST-Modell verwendet. Terme zur Produktion und Dissipation von turbulenter kinetischer Energie aufgrund von Auftriebseffekten wurden berücksichtigt, siehe entsprechende Untersuchungen in Abschnitt II.1.1.2. Der Energieaustausch zwischen Festkörpern und dem Fluid wird durch konjugierte Wärmeübertragung modelliert.

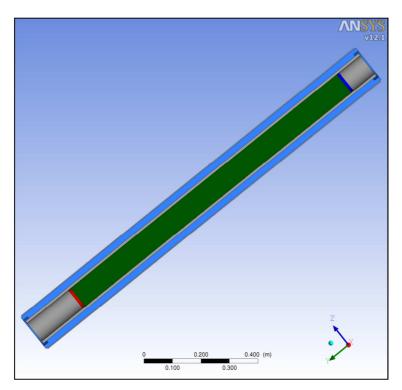
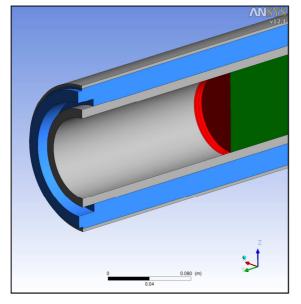


Abbildung 27: Querschnitt durch das geneigte Rohr: Fluidvolumen (R125, grün), innere und äußere Glasröhren (grau), Vakuum zwischen Glasröhren (hellblau) sowie gekühlte (dunkelblau) und beheizte (rot) Stahlplatten an den Rohrenden.



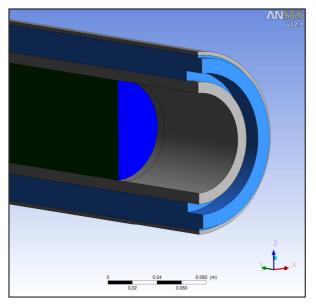


Abbildung 28: Detailansicht der beiden Rohrenden.

Eine Hierarchie von Rechengittern wurde erstellt, um eine Beurteilung der Sensitivität der Simulationsergebnisse hinsichtlich der räumlichen Diskretisierung zu erlauben, siehe Tabelle 7. Es wurde darauf geachtet, dass gemäß der Erkenntnisse aus den grundlegenden physikalischen Modellierungsuntersuchungen aus Abschnitt II.1.1.2 die Randschicht möglichst nicht durch Wandfunktionen modelliert wird, sondern durch numerische Integration mit entsprechender Gitterauflösung erfolgt. Dazu wurde darauf geachtet, dass der durchschnittliche dimensionslose Wandabstand y+ des ersten Integrationspunktes innerhalb des Fluidvolumens in der Größenordnung von 1 liegt.

Netzfeinheit	grob ("coarse")	mittel ("baseline")	fein ("fine")
Knotenanzahl	555 170	4 339 467	14 532 412
y+ (Durchschnitt)	3.1	1.8	1.3

Tabelle 7: Knotenanzahlen für die verwendeten Rechengitter und deren durchschnittliche dimensionslose Wandabstände y+.

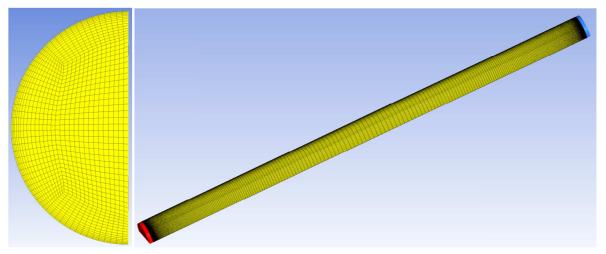


Abbildung 29: Netz des Fluidrechengebietes mit 555 170 Knotenpunkten.

Zunächst wird der Testfall bei p=3bar und einer Neigung von 30° gezeigt. Die stationären Simulationen konvergierten nur auf dem feinen Rechengitter hinreichend, siehe die entsprechenden Geschwindigkeitsprofile in Abbildung 31. Auf dem groben und mittleren Rechengitter konnte wegen oszillierendem Verhalten keine Konvergenz erreicht werden. Deshalb wurden auf diesen Gittern ausgehend von der stationären Rechnung transiente Simulationen mit einer Zeitschrittweite von 0.1 s durchgeführt. Die entsprechenden in Abbildung 31 gezeigten Geschwindigkeitsprofile ergaben sich durch Mittelung über einen Zeitraum von 132 s. Abbildung 31 zeigt beinahe Gitterunabhängigkeit für das mittlere und feine Rechengitter, lediglich das grobe Gitter zeigt deutlichere Abweichungen. Eine sehr gute Übereinstimmung der simulierten und experimentell ermittelten Geschwindigkeitsprofile kann beobachtet werden. Auch für die Neigungswinkel 10° und 45° werden gute Übereinstimmungen zwischen Experiment und Simulation erzielt, siehe Abbildung 32 und Abbildung 33. Deutliche Abweichungen müssen bei 0° verzeichnet werden, was der physikalisch instabilen Konfiguration geschuldet ist, da sich hier keine einzelne stabile Konvektionswalze bilden kann, sondern diese beispielsweise in mehrere horizontal nebeneinander angeordnete Walzen zerfallen kann.

Analoge Beobachtungen können auch für den Vergleich von Experimenten und Simulationen bei einem Druck von p=1 bar bei verschiedenen Neigungswinkeln gemacht werden, siehe Abbildung 35 bis Abbildung 38. Weitere Untersuchungen der Sensitivität der Simulationsergebnisse hinsichtlich Numerik (z.B. Zeitschrittweite) bzw. physikalischer Modellierung (z.B. Turbulenzmodellierung) können in [22] gefunden werden.

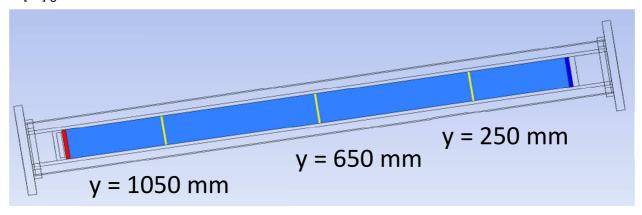


Abbildung 30: Lage der experimentell gemessenen Geschwindigkeitsprofile.

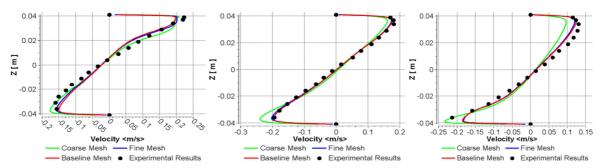


Abbildung 31: Geschwindigkeitsprofile für p=3 bar und Neigung von 30°bei y=1050mm, y=650mm, y=250 (sie he Lage der Messlinien in Abbildung 30).

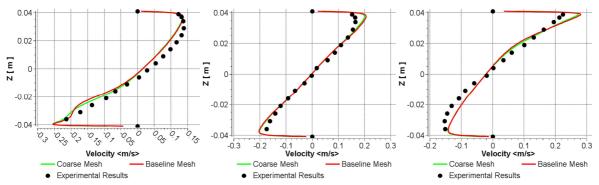


Abbildung 32: Geschwindigkeitsprofile für p=3 bar und Neigung von 45°bei y=1050mm, y=650mm, y=250 (sie he Lage der Messlinien in Abbildung 30).

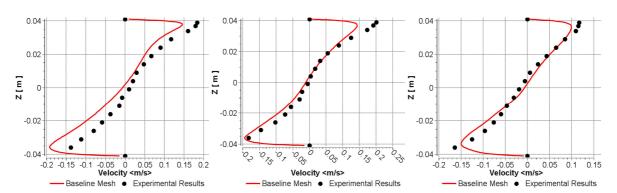


Abbildung 33: Geschwindigkeitsprofile für p=3 bar und Neigung von 10°bei y=1050mm, y=650mm, y=250 (sie he Lage der Messlinien in Abbildung 30).

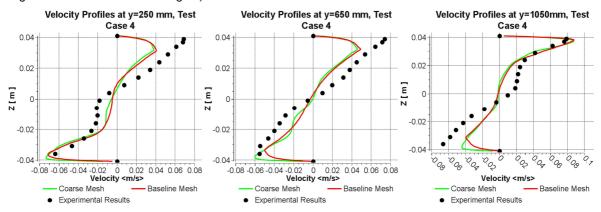


Abbildung 34: Geschwindigkeitsprofile für p=3 bar und Neigung von 0° bei y=1050mm, y=650mm, y=250 (sieh e Lage der Messlinien in Abbildung 30).

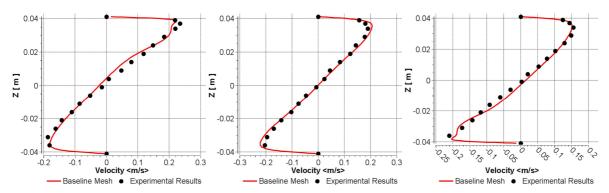


Abbildung 35: Geschwindigkeitsprofile für p=1 bar und Neigung von 30°bei y=1050mm, y=650mm, y=250 (sie he Lage der Messlinien in Abbildung 30).

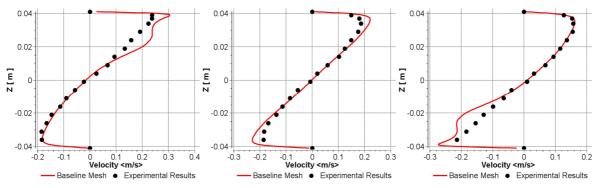


Abbildung 36: : Geschwindigkeitsprofile für p=1 bar und Neigung von 45°bei y=1050mm, y=650mm, y=250 (s iehe Lage der Messlinien in Abbildung 30).

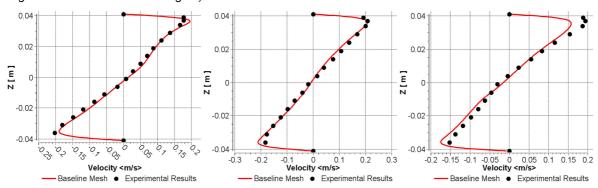


Abbildung 37: Geschwindigkeitsprofile für p=1 bar und Neigung von 10°bei y=1050mm, y=650mm, y=250 (sie he Lage der Messlinien in Abbildung 30).

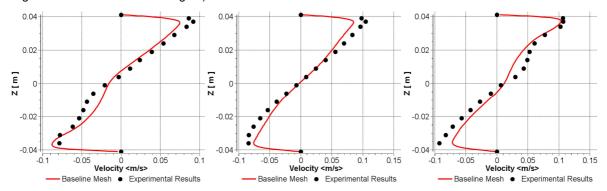


Abbildung 38: Geschwindigkeitsprofile für p=1 bar und Neigung von 0° bei y=1050mm, y=650mm, y=250 (sieh e Lage der Messlinien in Abbildung 30).

#### II.1.3 1D-3D-Kopplung

Um komplexe physikalische Systeme und die vielfältigen Interaktionen ihrer Systemkomponenten untereinander beschreiben zu können, werden Systeme oft mit multiphysikalischen Systemcodes modelliert und simuliert. Innerhalb des HySIM-Projektes wurde beispielsweise das gesamte kryokomprimierte (CcH2) Wasserstoffspeichersystem für automobile Anwendungen in den verschiedenen Betriebsmodi, z.B. beim Betanken inklusive Betankungsanlage, mit dem multiphysikalischen Systemcode LMS AMESim modelliert, siehe z.B. [1].

Solche Systemcodes basieren gewöhnlich auf reduziert dimensionalen Annahmen, z.B. auf 1D-Modellen, beispielsweise für die Strömung in Rohren und den Wärmefluss in Dickenrichtung durch flächenartige Strukturen, oder auf 0D-Korrelationen, z.B. für den Druckverlust der Strömung in Krümmerkomponenten. Im Folgenden werden solche Systemmodelle bzw. reduziert-dimensionale Modelle vereinfachend auch 1D-Modelle genannt.

Andererseits kann das physikalische Verhalten solcher Komponenten beliebig komplex, d.h. nicht mit 1D-Modellen hinreichend beschreibbar sein. Beispiele hierfür sind komplexe 3D-Strömungen in Ventilen oder das strömungsabhängige Abkühlverhalten des CcH2-Tanks beim Betankungsvorgang, bei dem es zu ausgeprägt dreidimensionalem Konvektionsverhalten und zu damit in Zusammenhang stehendem Wärmetransport kommt. Zur physikalisch korrekten Beschreibung derartig komplexer Vorgänge sind daher Simulationen mit höher-dimensionalen Modellen, z.B. mit 3D-CFD-Verfahren, notwendig.

Deshalb ist es wünschenswert, einzelne Komponenten im Simulationssystem mit komplexem Verhalten durch 3D-CFD-Modelle zu ersetzen, die entsprechende physikalische Effekte beschreiben können. Für die 3D-CFD-Simulation wird innerhalb dieses Projektes ANSYS CFX verwendet. Das übrige System bestehend aus Komponenten, die mit 1D-Modellen abgebildet werden können, soll aus Effizienzgründen weiterhin mit dem Systemcode AMESim beschrieben und berechnet werden. Dieser Ansatz macht einen Austausch von Kopplungsbedingungen zwischen AMESim- und CFX-Modell notwendig. Dieser Austausch wird im Sinne einer Kosimulation zeitschrittweise zur Laufzeit erfolgen.

Zwischen 3D-CFD- und 1D-Modell muss also eine Liste skalarer Daten ausgetauscht werden können. In der CFD-Simulation errechnete 3D-Felder müssen durch Integration oder Durchschnittsbildung auf einen skalaren Wert reduziert werden. Beispielsweise hierfür sind der Durchschnittsdruck an einem Kopplungsrand oder der integrale Massenstrom durch eine Kopplungsfläche. Auf der anderen Seite müssen skalare Werte, die vom 1D-Modell berechnet werden, zur Definition von Randbedingungen für Feldgrößen der 3D-CFD-Simulation verwendet werden können. So soll es z.B. möglich sein eine skalare Durchschnittsgeschwindigkeit aus dem 1D-Modell zusammen mit einem normalisierten, räumlich veränderlichen Geschwindigkeitsprofils als Randbedingung in der CFD-Simulation verwenden zu können, siehe auch Abbildung 39.

Dafür wurde eine sehr generische Kopplungsschnittstelle implementiert, die Gebrauch macht vom CFX-Konstrukt der CEL-Ausdrücke (CFX Expression Language, siehe [16], um eine transparente und vom Nutzer leicht interpretierbare/lesbare Kopplung zu ermöglichen. Im Einzelnen erlaubt die Schnittstelle

 eine beliebige Anzahl beliebiger einwertiger (reduzierter) CEL-Ausdrücke an von ANSYS CFX nach LMS AMESim zu senden, wie z.B. den durchschnittlichen Druck an der Randfläche "patch1":

```
areaAve(Pressure)@patch1
```

o und die skalaren Resultate von LMS AMESim überall dort im ANSYS CFX verwenden zu können, wo CEL-Ausdrücke erlaubt sind (als Randbedingungen, Massen-, Impuls- und Energiequellen, Modellparameter, etc.). So kann z.B. das Produkt aus der vom 1D-Modell vorgegebenen durchschnittlichen Geschwindigkeit uSYS und einem von der Koordinate R abhängigen, normalisierten turbulenten Geschwindigkeitsprofil als Geschwindigkeitsrandbedingung verwendet werden:

```
Normal Speed = uSYS * turbProfile(R)
```

Für ausführlichere Erläuterungen, Details zur Implementierung, und verschiedene Anwendungsbeispiele sei auf das Deliverable D3.1 [18] sowie die Veröffentlichungen [30], [31]

verwiesen. In II.1.4.2 wird die Verwendung dieser 1D-3D-Kopplungsschnittstelle für den mit den Projektpartnern definierten HySIM-Demonstrations-Testfall beschrieben.

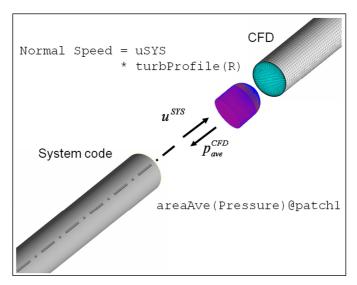


Abbildung 39: Prinzipdarstellung der Kopplung zwischen CFD und System Codes mit beispielhafter Darstellung der Kopplungsbedingungen.

#### II.1.4 HySIM Testfall

Zur Demonstration verschiedener physikalischer Modellierungsansätze und der Integration von 3D-CFD- und 1D-Modellierung wurde als Anwendungsfall die Aktivierung des Innentankwärmetauschers zum Druckaufbau gewählt. Sobald der Betriebsdruck im Tank einen bestimmten Schwellenwert unterschreitet, wird ein Innentank-Wärmetauscher mit warmem Wasserstoffgas beschickt und bewirkt durch Wärmeeintrag in den Haupttank einen Druckanstieg, der eine weitere Entnahme von überkritischem Wasserstoff aus dem Tank ermöglicht. Hierbei besteht eine direkte Kopplung zwischen der übertragenen Wärmemenge und dem Temperatur- und Strömungsfeld des den Wärmetauscher umgebenden Strömungsmediums (überkritischer Wasserstoff). Die dem Wärmetauscher entzogene Wärme bestimmt wiederum den Verlauf der Abkühlung des zu Beginn warmen Wasserstoffs beim Durchlaufen des Wärmetauschers. Eine 3D Strömungsrechnung zur Ermittlung des lokalen Wärmeübergangs an jeder Stelle der über 2m langen Wärmetauscherschleife (Innen- wie Außenströmung) einschließlich der Wärmetauscherrippengeometrie ist aufgrund der hohen erforderlichen Auflösung und dem damit verbundenen hohen Rechenaufwand, der für eine vollständige Berechnung erforderlich wäre, nicht praktikabel. Es bietet sich daher an, das Verhalten des Wärmetauschers in einem zu vereinfachenden 1D-Modell mit der CFD-Rechnung zu koppeln.

#### II.1.4.1 Simulationen zur Kalibrierung der Korrelationen für den Wärmetauscher

Das oben erwähnte 1D-Modell wird im Wesentlichen durch Korrelationen beschrieben, die zu einem vorgegebenen Massenstrom im Wärmetauscher, der H2-Temperatur im Wärmetauscher und der H2-Temperatur im Tank einen entsprechenden Wärmestrom vom Wärmetauscher in den Tank liefern. Zur Kalibrierung dieser Korrelationen wurde eine Reihe systematischer CFD-Simulationen durchgeführt.

Für diese CFD-Simulationen ist es vorgesehen, die reale Geometrie des im CcH2-Wasserstoffspeicher eingebauten Wärmetauschers durch einen vereinfachten zylindrischen Körper zu ersetzen, um einen beherrschbaren CFD-Berechnungsumfang bzw. eine beherrschbare Gittergröße zu erhalten. Um diese Ersetzung vornehmen zu können, ist ein hinreichend genaues Modell erforderlich, das den Wärmestrom des realen Wärmetauschers mit hinreichender Genauigkeit auf der Grundlage der Differenz zwischen der Temperatur des Fluids im Wärmetauscherrohr und der Tankumgebungstemperatur, dem Druckniveau und dem Massenstrom im Wärmetauscherrohr berechnet. Ein solches vereinfachtes aber hinreichend genaues Modell wurde vom Projektpartner TU Dresden vorgeschlagen und es kann herangezogen werden, um eine 1-dimensionale Modellierung

des Wärmetauschers in LMS AMESim mit einer 3-dimensionalen CFD-Simulation der Konvektionsströmung und des Druckaufbaus im Tanksystem im Rahmen einer Gesamtsimulation zu verknüpfen. Das Modell basiert dabei auf konventionellen empirischen Korrelationen für die Abschätzung des Wärmeübergangskoeffizienten für Rohrleitungen mit und ohne Wärmetauscherrippen. Da die Korrelationen selbst als auch die Art und Weise wie sie miteinander verkoppelt werden gewisse Unsicherheiten in das Gesamtmodell einbringen können, ist es ein angestrebtes Ziel, eine Methode zur Validierung dieser verwendeten Korrelationen zu entwickeln. Das vorliegende Kapitel dieses Zwischenberichtes beschreibt den auf detaillierten CFD-Simulationen basierenden Ansatz, der von ANSYS Germany im Berichtszeitraum entwickelt wurde, um die Modellkorrelationen der TU Dresden einer physikalischen Überprüfung unterziehen zu können und im Bedarfsfall gezielte Korrekturen an den Korrelationen vornehmen zu können.

Zum gegenwärtigen Zeitpunkt wurden für den Vergleich mit dem auf Korrelationen basierenden Wärmetauschermodell eine Reihe von CFD-Ergebnissen bereitgestellt, die auf CFD-Simulationen basieren, die für eine isolierte Teilkonfiguration des Wärmetauschers für verschiedene mittlere Wasserstofftemperaturen im Wärmetauscherrohr  $T_{H2.stream}$ , verschiedene Massenströme m im

Wärmetauscherrohr und für eine bestimmte Temperatur  $T_{\!\scriptscriptstyle H2,tank}$  und einen bestimmten Druck im

Wasserstofftank erzielt wurden. Die mit ANSYS CFX berechnete Teilkonfiguration, die ein Segment der realen Wärmetauschergeometrie darstellt, ist in Abbildung 40 dargestellt. Dieselbe Abbildung zeigt auch den in der gegenwärtigen CFD-Simulation berechneten Wärmetauscherabschnitt, bestehend aus nur einer Wärmetauscherrippe und den beiden jeweils links und rechts angrenzenden Zwischenräumen mit dem halben Abstand zwischen den Wärmetauscherrippen. Dieses Rechengebiet ist auch in Abbildung 41 zu sehen. Um die Gittergenerierung zu vereinfachen und Singularitäten im Gitternetz zu vermeiden, wurde die Originalgeometrie des Wärmetauschers dahingehend geringfügig verändert, dass der innere Zylinder in Richtung des Rippenmittelpunktes um 1mm verschoben wurde (Vermeidung der tangentialen Berührung der Rippenkörper). Somit enthält das Rechengebiet 4 Teilgebiete: die den Tank repräsentierende Fluidzone, der Aluminium-Körper des Wärmetauschers (in Abbildung 41 mit HE bezeichnet), das innere Stahlrohr und das innere Fluid-Durchströmungsgebiet innerhalb des Stahlrohres, das letztlich den Wärmeträger enthält und zur Erwärmung der Konfiguration führt. Die verschiedenen Teilgebiete sind mit Fluid-Solid- bzw. Solid-Solid-Interfaces miteinander verbunden, um in der CFD-Simulation den Wärmeübergang zu gewährleisten. Die Wärmeleitung in den Festkörpern wird in der CFD-Simulation mittels des CHT-Modells in den Festkörperteilgebieten berechnet. Die Wahl der übrigen Randbedingungen ist im Folgenden erläutert.

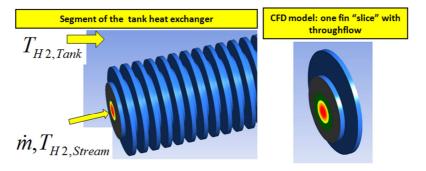


Abbildung 40: Segment des Wärmetauschers und daraus abgeleiteter Sektor des Wärmetauschers, der in der CFD-Simulation berechnet wurde.

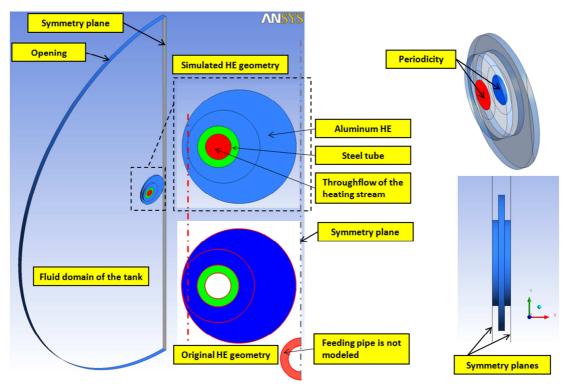


Abbildung 41: Rechengebiet und Randbedingungen für die CFD-Simulation zur Validierung des auf Korrelationen basierenden Wärmetauschermodells.

Für jede Kombination der bereits erwähnten Einflussgrößen wurde eine stationäre CFD-Simulation mit ANSYS CFX 13.0 ausgeführt und eine stationäre Lösung für den Wärmeübergang erzielt. Es ist klar, dass eine solche stationäre Lösung für die Anwendung des Wärmetauschers im geschlossenen Tank nicht existiert, da der Betrieb desselben zum Druckanstieg im Tank führt. Somit wäre die Wahl einer transienten Simulation für den geschlossenen Tank zunächst die natürlichere aber auch deutlich aufwändigere Wahl. Wenn man so wie in diesem Fall aber zunächst nur an der Verifikation des auf Korrelationen basierenden Wärmetauschermodells interessiert ist, so ist die Anwendung einer stationären Simulation akzeptabel und in diesem Fall sogar die genauere Lösung, da sowohl das Korrelations-Modell als auch die stationäre Simulation für die Umgebung des Wärmetauschers voraussetzen, dass die Umgebungstemperatur des Wärmetauschers in der freien Anströmung konstant ist. In der transienten Simulation für ein geschlossenes Tanksystem wäre das jedoch nicht der Fall, da der Betrieb des Wärmetauschers über einen gewissen Zeitraum hinweg zu einer stetigen Erwärmung des eingeschlossenen Wasserstoffs führen würde. Für die Ermöglichung einer stationären CFD-Simulation wurde die Tankwandung aus CFK durch eine Opening-Randbedingung ersetzt, die es dem Wasserstoff erlaubt, am selben Rand ein- und auszuströmen. Der einströmende Wasserstoff hat dabei die erwähnte konstante Temperatur und die eingebrachte thermische Energie wird mit dem ausströmenden Wasserstoff aus dem Rechengebiet abtransportiert.

Die Verwendung einer stationären Simulation erlaubte des Weiteren eine verbesserte Technik für die Strömungsverhältnisse und des Wärmeübergangs im Wärmetauscher-Simulation der Versorgungsrohr (Zentralrohr). Hierfür wurden an beiden Seiten des in Abbildung 41 dargestellten Rechengebietes für das Zentralrohr des Wärmetauschers periodische Randbedingungen angenommen, wobei der Impuls- und Wärmeverlust über die berechnete Strömungslänge des Zentralrohres durch geeignete Quellterme ausgeglichen wird. Für die Impulsgleichung wurde ein konstanter in Strömungsrichtung wirkender Druckgradient angenommen um den durch die viskosen Wandreibungskräfte verursachten Impulsverlust zu kompensieren. Auf ähnliche Weise wurde für die Energietransportgleichung eine volumetrische Energiequelle spezifiziert, die den Wärmeverlust auf Grund der Wärmeleitung durch die Stahlrohrwandung und den Wärmetauscher-Aluminiumkörper kompensiert. Dieser Wärmestrom ist auf der anderen Seite stark mit der durch Naturkonvektion beeinflussten Wärmeübertragung auf der Tankseite verkoppelt und realisiert den Wärmeeintrag in den Tank. Der korrekte Wert für diese Wärmequelle kann direkt aus dem vorgegebenen Wert des axialen Wärmeabfalls über die Wärmetauscher-Zentralrohrlänge berechnet werden. Im Ergebnis dieses CFD-Setups sind die Geschwindigkeitsprofile und Temperaturprofile innerhalb des Wärmetauscher-Zentralrohres ihrerseits ein Berechnungsergebnis der CFD-Simulation und müssen nicht auf Annahmen basierend durch den Benutzer vorgegeben werden. Diese Vorgehensweise reduziert

deutlich mögliche Fehlerquellen in der beabsichtigten Validierungssimulation und erhöht deren Belastbarkeit in Bezug auf die zu erzielende Genauigkeit.

Alle ausgeführten CFD-Simulationen wurden für die folgenden Bedingungen innerhalb des CcH2-Tanks vorgenommen: Druck 20 [bar], Tanktemperatur  $T_{H2,tank}=80$  [K]. Um diese Bedingungen im Tank im Rahmen der CFD-Simulation abzubilden, wurde der Referenzdruck für die Tank-Fluid-Domain auf 20 [bar] gesetzt und an der Opening-Randbedingung wurde eine Totaldruck-Randbedingung mit einer Totaltemperatur von 80 [K] spezifiziert.

Im Wärmetauscher-Zentralrohr entsprach der Druck dem Tankinnendruck von 20 [bar]. Die Werte der volumetrischen Quellterme für Impuls und thermische Energie wurden variiert, der Massenstrom  $\dot{m}$  variiert von 1 bis 8 [kg/h],  $T_{H2.stream} \equiv T_{bulk}$  variiert von 120 bis 300 [K].

Für die Vorgabe der Turbulenzcharakteristiken wurden Abschätzungen der dimensionslosen Parameter für die Regime der Naturkonvektion und der Zwangskonvektion vorgenommen. Dabei wurde festgestellt, dass unter den gegebenen Bedingungen die Rayleigh-Zahlen im Tank (basierend auf dem Durchmesser der Wärmetauscher-Hauptrippen) in der Größenordnung von  $10^8$  liegen. Berücksichtigt man, dass für eine freie Konvektionsströmung die turbulente Transition bei Rayleigh-Zahlen von ca.  $10^9$  einsetzt (siehe Abbildung 21), so ist es gerechtfertigt, dass die Strömung im Tank als laminare Strömung modelliert wurde. Im Wärmetauscher-Zentralrohr liegen die erreichten Reynolds-Zahlen bei  $10^4$  bis  $10^5$  in Abhängigkeit vom Massenstrom. Da diese Reynoldszahlen deutlich über der kritischen Reynoldszahl für Rohrleitungen von ca. 2000 liegen, wurde die Strömung im Wärmetauscher-Zentralrohr mit dem Standard-SST-Turbulenzmodell berechnet.

Das verwendete Rechengitter ist in Abbildung 42 dargestellt. Das Gitter wurde in ICEM CFD als reines Hexaedernetz erstellt. Die Anzahl der Gitterelemente beträgt 564 900 mit der folgenden Verteilung über die Teilgebiete der CFD-Simulation: 279 510 für das Tank-Fluid-Rechengebiet, 121 644 für die Aluminium-Wärmetauscher-Rippe, 42 284 für das Stahlrohr (Solid) und 143 096 Elemente für das durchströmte Gebiet des Wärmetauscher-Zentralrohres. Es ist dabei zu erwähnen, dass das Rechengebiet nur 30 gleichmäßig verteilte Gitterzellen in der x-Richtung besitzt. Dies ist jedoch ausreichend, da auf Grund der laminaren Umströmung trotzdem ein y<sup>+</sup> in der Größenordnung von 1 an den Wärmetauscher-Rippenoberflächen erreicht wird. Die gleiche Größenordnung von y<sup>+</sup>-Werten wird auch an den Innenwänden des Wärmetauscher-Zentralrohres eingehalten, wobei jedoch die turbulente Strömung hier eine feinere Netzauflösung erfordert.

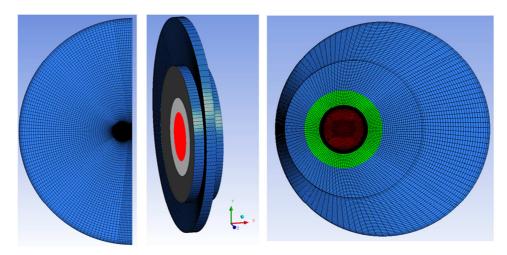


Abbildung 42: Das Rechengitter.

Abbildung 43 zeigt ein in der CFD-Simulation erzieltes typisches Strömungsbild innerhalb des Tanks in der Umgebung der Wärmetauscher-Rippe und innerhalb des Wärmetauscher-Zentralrohres. Klar lässt sich der durch die Naturkonvektion angetriebene warme aufwärts gerichtete Fluidstrahl erkennen, der sich an den Wärmetauscher-Rippen ausbildet und dann das Rechengebiet durch ein eng begrenztes Teilgebiet der Opening-Randbedingung verlässt. In der Nähe der Wärmetauscher-Rippe werden zwei gegenläufig rotierende Wirbel aufgelöst. Das Geschwindigkeitsprofil im Wärmetauscher-Zentralrohr zeigt das konvexe Aussehen eines gut entwickelten turbulenten Geschwindigkeitsprofils einer Rohrströmung.

Abbildung 44 zeigt die entstehenden typischen Temperaturverteilungen in den Fluid- und Solid-Teilgebieten. Wiederum ist auch in dieser Abbildung der nach oben gerichtete warme Wasserstoffstrahl, ausgelöst durch die Wärmeübertragung und die einsetzende Naturkonvektion, zu erkennen. Die übrigen Bereiche des Tanks außerhalb dieses eng begrenzten Strahlbereichs behalten die gesetzte Tanktemperatur weitgehend bei, da in diesem Szenario beabsichtigter Weise die innere Tank-Rezirkulation und die dadurch bedingte Wasserstofferwärmung fehlt. Stärkere Temperaturgradienten treten in diesem Strömungsregime in der Durchströmung der Wärmetauscher-Rippen an den Seitenwänden der Rippen auf, was die Notwendigkeit der entsprechend feinen Vernetzung in diesem Bereich unterstreicht.

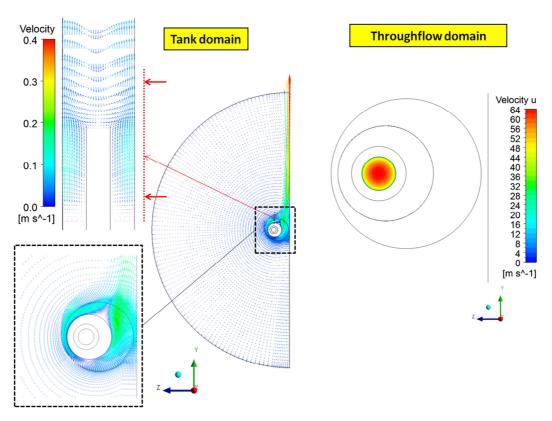


Abbildung 43: Geschwindigkeitsvektoren im Tank-Rechengebiet und Strömungsprofile der axialen Durchströmung des Wärmetauscher-Zentralrohres berechnet für den Fall mit einem Massenstrom von 6.48 [kg/h] und einem axialen Wärmestrom von 3000 [W/m].

Schließlich zeigt Abbildung 45 die mit diesen CFD-Simulationen berechnete mittlere Wasserstofftemperatur im Wärmetauscher-Zentralrohr und die mittlere Wandtemperatur an der inneren Wand des Edelstahl-Wärmetauscher-Zentralrohres in Abhängigkeit vom vorgegebenen Massenstrom und dem axialen Wärmestrom entlang des Wärmetauscher-Zentralrohres. Vergleichbare Darstellungen können direkt aus dem korrelationsbasierten Wärmetauscher-Wärmeübergangsmodell der TU Dresden gewonnen werden, womit die angestrebte Kalibrierung und Validierung der verwendeten Korrelationen für den Wärmeübergang an der Wärmetauscher-Zentralrohrinnenwand und für die Wärmetauscherrippen ermöglicht wird. Die hier ermittelten und als sehr genau angesehenen CFD-Simulationsergebnisse dienen dabei als Referenzwerte. Weitere Vergleichsgrößen können je nach Bedarf für die Weiterentwicklung des korrelationsbasierten Wärmetauscher-Modells bereitgestellt auf der Grundlage der CFD-Daten werden.

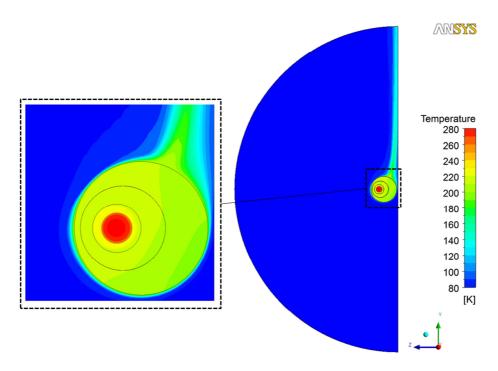


Abbildung 44: Temperaturverteilung in der mittleren Querschnittsebene des Rechengebietes berechnet für den Fall mit einem Massenstrom im Wärmetauscher-Zentralrohr von 6.48 [kg/h] und einem axialen Wärmestrom von 3000 [W/m].

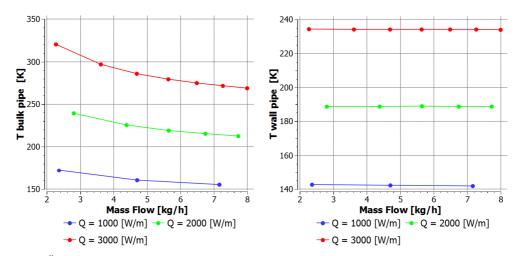


Abbildung 45: Änderung der mittleren Wasserstoff-Vorlauftemperatur im Wärmetauscher-Zentralrohr und der über die Innenoberfläche des Wärmetauscher-Zentralrohres gemittelten Wandtemperatur in Abhängigkeit vom realisierten Massenstrom und vorgegebenem axialen Wärmestrom im Wärmetauscher-Zentralrohr.

### II.1.4.2 Gekoppelte 1D-3D Simulation des HySIM-Testfalls

Aus den in Abschnitt II.1.4.1 beschriebenen systematischen Untersuchungen wurden von den Projektpartnern vom Lehrstuhl für Kälte- und Kryotechnik der TU Dresden Korrelationen für den Wärmeeintrag bei verschiedenen Temperaturen bzw. Temperaturdifferenzen und Massenströmen abgeleitet. Diese parametrisierten Korrelationen wurden von den Partnern bei BMW in ein LMS AMESim Systemmodell für den Wärmetauscherbetrieb implementiert. Das Wärmetauschersystemmodell wiederum wurde von ANSYS Germany mit Hilfe der in Abschnitt II.1.3 beschriebenen Kopplungsschnittstelle in eine gekoppelte 1D-3D-Simulation integriert. Die

grundlegende Idee hierbei ist die geometrische Vereinfachung des Wärmetauschers im 3D-CFD-Modell zu einem Zylinder, um nicht die feinskaligen Rippen des Wärmetauschers mit Gitterpunkten des CFD-Gitternetzes auflösen zu müssen und somit durch diese Vereinfachung für die CFD-Berechnung handhabbare Rechengitter zu erhalten. Trotzdem sollte die physikalische Wirkung der nicht aufgelösten Skala auf den Wärmeübertrag berücksichtigt werden, in dem dieser mit Hilfe der Korrelation modelliert wird.

Für die gekoppelte 1D-3D-Simulation wurde zu Demonstrationszwecken eine vereinfachte Geometrie des CcH2-Tanks verwendet. Die wesentliche Vereinfachung besteht in der Reduktion des Tankvolumens auf eine zylindrische Form und in der Vernachlässigung der für dieses Anwendungsszenario nicht relevanten Rohrleitungen, wie in Abbildung 46 gezeigt. Außerdem wurde der 180°-Krümmer des Wärmetauschers nicht im 3D-CFD -Modell berücksichtigt, lediglich die beiden geraden parallelen Wärmetauscherrohre wurden, wie oben bereits angeführt, als Zylinder abgebildet.

Die beiden Wärmetauscherrohre sind im 3D-CFD-Modell also nicht direkt miteinander verbunden, die physikalische Verbindung entsteht indirekt durch die Kopplung zum in LMS AMESim implementierten 1D-Wärmetauschermodell. Das Kopplungsschema ist in Abbildung 47 illustriert. Das 1D-Modell hat eine Gesamtlänge von 2 [m] und ist mit 22 gleichmäßig verteilten Elementen diskretisiert. Jedes 1D-Element entspricht einem Element im 3D-CFD-Modell des Wärmetauschers. Dabei gehören die Segmente 1-11 zum ersten, mit dem Einlass verbundenen Wärmetauscherrohr, während die Segmente 12-22 zum zweiten, mit dem Auslass verbundenen Wärmetauscherrohr gehören, siehe Abbildung 47. Die beiden Rohre sind im 1D-Modell miteinander verbunden, wobei auch hier die physikalische Wirkung des 180°-Krümmers (Druckverlu st, thermischer Widerstand) zwar in dieser Konfiguration vernachlässigt wird, aber durch einfache Korrelationen berücksichtigt werden könnte.

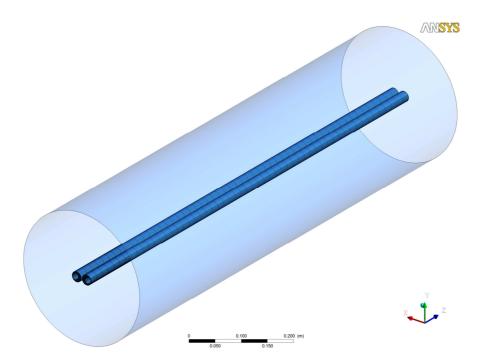


Abbildung 46. 3D-Rechengebiet der vereinfachten Konfiguration des CcH2-Tanks.

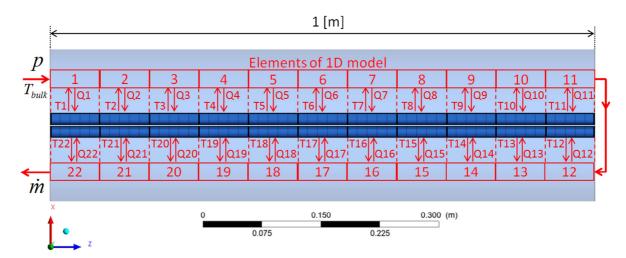


Abbildung 47. Kopplungsschema zwischen Segmenten des 1D-Modells und zylindrischen Subvolumen des 3D-Modells für den Wärmetauscher.

Trotz der geometrischen Vereinfachungen kann dieser Testfall die Mächtigkeit des Kopplungsansatzes zwischen 1D- und 3D-Modellen für die Berechnung des Druckaufbaus im CcH2-Tank demonstrieren.

Der Kopplungsmechanismus kann wie folgt beschrieben werden: Zu Beginn jedes physikalischen Zeitschrittes werden im 3D-Modell die Temperaturen an den Monitorpunkten unterhalb jedes Wärmetauscher-Subvolumens (siehe Abbildung 48) ausgewertet und an das 1D-Modell geschickt. Daraufhin wird das 1D-Wärmetransportproblem unter Berücksichtigung des H2-Massenstoms am Einlass zum Wärmetauscher, der Einlasstemperatur und des –drucks gelöst, wobei die Wärmeströme an das Tankvolumen mit den maßgeschneiderten Korrelationen ermittelt werden. Diese Korrelationen hängen wiederum ab von den vom 3D-Modell vorgegebenen Tanktemperaturen, siehe Abschnitt II.1.4.1.

Die 1D-Verteilung der Wärmeströme wird daraufhin an das 3D-Modell zurückgeschickt und als thermische Volumenquellen in jedem Subvolumen des 3D-Modells aufgebracht. Beispielhaft wird in Abbildung 50 die Wärmeleistung in W des Wärmetauschers in jedem Subvolumen nach 10 s gezeigt.

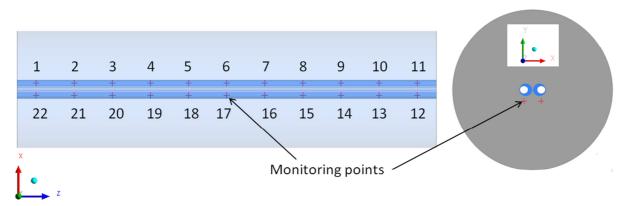


Abbildung 48. Monitorpunkte zur Auswertung der lokalen Tanktemperaturen im 3D-Modell, die im 1D-Modell als Eingangsgrößen für die Korrelationen dienen.

Die CFD-Simulationen wurden auf einem Rechengitter mit 300 080 Hexaederelementen berechnet. Abbildung 49 zeigt einen Schnitt durch das Gitter in der XY-Ebene. Zwei zylindrische Subvolumen (blau) umschließen den Raum, der in der realen Konfiguration von den Rippen des Wärmetauschers eingenommen wird. Die Isometrie in Abbildung 46 zeigt das Oberflächennetz dieser Subvolumen. In Tankachsenrichtung ist das Netz uniform und hat 55 Schichten. Daraus folgt eine räumliche Diskretisierung in Z-Richtung von 5 3D-CFD-Schichten pro 1D-Segment, siehe auch Abbildung 47.

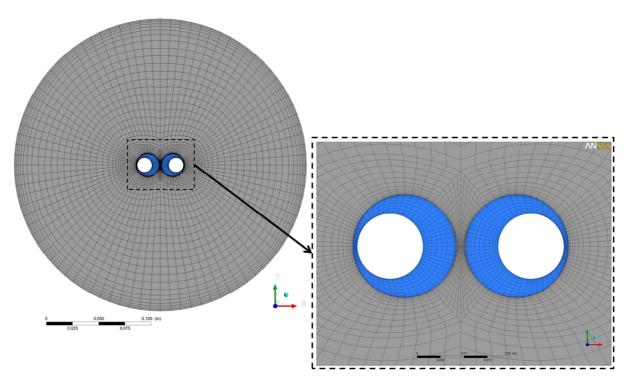


Abbildung 49. Rechengitter des 3D-CFD-Modells in der XY-Ebene.

Es sollte betont werden, dass die Wärmetauscher-Subvolumen als voll permeabel angenommen werden und somit keinen zusätzlichen Strömungswiderstand erzeugen. Eine etwas realistischere Modellierung könnte einfach durch Annahme eines porösen Körpers erreicht werden. Momentan dienen diese Subvolumen lediglich der Spezifikation der Lage der volumetrischen Wärmequellen. Dies wird mit Hilfe von entsprechenden CEL-Ausdrücken (siehe auch Abschnitt II.1.3) bewerkstelligt, die die vom 1D-Modell gelieferten Wärmeströme als abschnittsweise konstante Wärmequellen gemäß Abbildung 47 verteilen. Abbildung 50 zeigt beispielhaft die Leistung in Watt pro Wärmetauschersegment; die Gesamtleistung ergibt sich aus der Summation der 22 Segmentleistungen.

Die Tankwände wurden als adiabate Wände mit Haftrandbedingung angenommen. Symmetrierandbedingungen wurden für die Ebenen verwendet, die das Rechengebiet in Z-Richtung begrenzen.

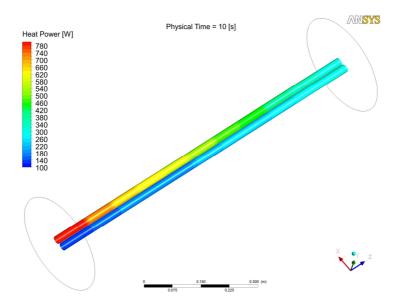


Abbildung 50: Verteilung der axialen Wärmeleistung der Wärmetauschersegmente. Die Wärmeleistung der einzelnen Segmente wird im 1D-Code berechnet und als volumetrische Wärmequelle im CFD-Modell des Wärmetauschers berücksichtigt.

Im 1D-Modell wurden die folgenden Parameter zur Definition der Wasserstoffströmung im Inneren des Wärmetauschers spezifiziert: Der Referenzdruck in der Durchströmung beträgt 20 bar, der Massenstrom 10 kg/h, die Durchschnittstemperatur  $T_{H2,stream} \equiv T_{bulk}$  am Einlass des Wärmetauschers wurde zu 350 K angenommen.

Es wurden transiente Simulationen mit dem 2nd Order Backward Euler Zeitschrittverfahren mit einer Zeitschrittweite von 0.1 s für ein Zeitintervall von 180 s durchgeführt. Als Initialbedingungen im 3D-CFD-Modell des Tanks wurde ein Druckniveau von 20 bar und eine Temperatur von  $T_{H2,tank} = 80 \text{ K}$  verwendet

Abbildung 51 zeigt die Entwicklung der Temperaturen in den Monitorpunkten und die Leistung der Wärmetauschersegmente über die Simulationszeit. Die Wärmeleistung erreicht kurz nach Beginn der Simulation ein Maximum und nimmt danach kontinuierlich mit dem Aufheizen des Tanks ab. Aufgrund der Auftriebseffekte in der Umgebung der Wärmetauschersegmente ist das Strömungsverhalten lokal transient, was die zeitlichen Schwankungen in den transienten Temperaturverläufen erklärt.

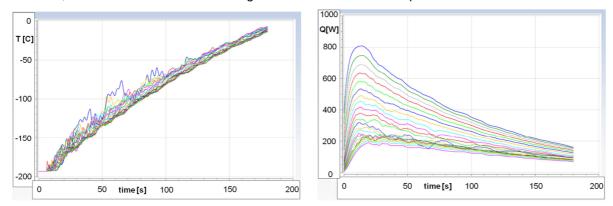


Abbildung 51. Entwicklung der Tanktemperaturen (links) in den Monitorpunkten und Wärmeleistung pro Wärmetauschersegment (rechts).

Abbildung 52 zeigt eine Momentaufnahme des Strömungsbildes bei 100 s innerhalb des Tanks. Man kann deutlich den heißen Strahl erkennen, der am Wärmetauscher entsteht. Dieser Strahl bildet zwei gegenläufige Wirbel oberhalb beinahe der gesamten Wärmetauscherlänge. Auf der vom Einlass und Auslass entfernten Seite des Tanks zerbrechen diese Wirbelstrukturen und eine komplexe dreidimensionale Strömung entsteht im unteren Teil des Tanks.

Schließlich zeigt Abbildung 53 die Entwicklung des volumengemittelten statischen Drucks im Tank. Das Druckniveau steigt kontinuierlich an und beträgt ca. das Dreifache des Anfangswertes nach 180 s Simulationszeit.

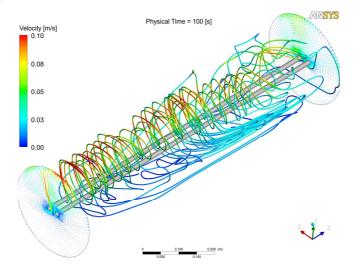


Abbildung 52. Momentaufnahme der Stromlinien im Tank bei 100 s, entsprechend dem Geschwindigkeitsbetrag eingefärbt.

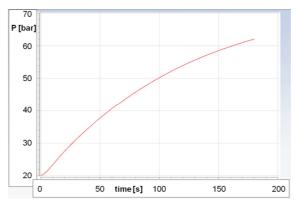


Abbildung 53. Vorhersage des Druckaufbaus: Entwicklung des volumengemittelten statischen Drucks.

## II.2 Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit

Die Hauptarbeiten von ANSYS Germany im HySIM-Projekt konzentrierten sich auf die Weiterentwicklung und die Validierung von dreidimensionalen Simulationswerkzeugen für komplexe gekoppelte Fluiddynamik-, Wärmeleitungs- und Strukturmechanik-Simulationen in Anwendungen der kryo-komprimierten Wasserstoffspeicherung an Bord von emissionsfreien Automobilen. In enger Kooperation mit der BMW AG, LMS Imagine und der TU Dresden arbeitete ANSYS Germany an der mathematisch-physikalischen Modellbeschreibung aller relevanten fluiddynamischen und Wärmeleitungsprozesse in den Komponenten (Tank, Rohrleitungen, Ventilen, Wärmetauschern) von CcH2 Wasserstoff-Speichersystemen. Im Projektzeitraum wurden von ANSYS Germany umfangreiche Modellimplementierungen in die ANSYS CFX Software vorgenommen und anschließend einer Validierung gegenüber experimentellen Daten unterzogen. Diese Arbeitsschritte schließen die Untersuchung und Verbesserung der numerischen Stabilität und der Robustheit der eingesetzten Lösungs- und Simulationsverfahren ein. Die im Rahmen von HySIM untersuchten Modelle und physikalischen Prozesse sind:

- Realgas-Eigenschaften von CcH2 und Gemischen von Ortho- und Para-Wasserstoff
- Auftriebsströmungen im Wasserstofftank und Ausbildung thermischer Stratifikation
- Wärmeübergangsprozesse innerhalb einer CcH2-Wasserstoff-Strömung an der Grenzfläche mit festen Wänden (CHT) und gekoppelte thermische Berechnungen in angrenzenden Festkörpern.
- Modellierung von Turbulenzbeeinflussung bei temperatur- und dichtegetriebenen Auftriebsströmungen; Validierung der Auftriebs-Turbulenzmodellierung
- Entwicklung eines neuen Transitionsmodells für Naturkonvektionsströmungen an beheizten Wänden
- Entwicklung eines zonalen LES-Modells mit automatischer Wandbehandlung
- Bereitstellung von Materialparametern in Konsistenz mit anderen Simulationsmodulen und von Modellen zur Beschreibung der Umwandlung von Ortho- in Para-Wasserstoff im Rahmen der CFD-Simulationssoftware ANSYS CFX

Des Weiteren arbeitete ANSYS Germany an der Entwicklung und Erprobung von genauen, zuverlässigen und nutzerfreundlichen Verfahren zur gekoppelten Verwendung Datenkommunikation zwischen verschiedenen Simulationsmodulen, insbesondere für die 1-Wegeund 2-Wege-gekoppelte Simulation von strömungsmechanischer, strukturmechanischer und Wärmeleitungsberechnung (FSI, Fluid-Struktur-Interaktion), z.B. zur Berechnung von strömungsbeeinflussten thermischen Spannungen Komponenten CcH2in des Wasserstofftanksystems und dessen Zuleitungskomponenten (Rohrleitungen, Kryo-Ventil).

Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeiten von ANSYS Germany war die Entwicklung von Algorithmen und Software-Schnittstellen zur gekoppelten Berechnung des Wasserstoffspeichersystems und seiner Komponenten mittels 3-dimensionaler CFD-Simulation in Kombination mit 1-dimensionalen Simulationsmodulen (LMS AMESim). In Kooperation mit LMS Imagine entwickelte ANSYS Germany die zur Code-Kopplung notwendigen Schnittstellen mit dem Ziel, ANSYS CFX als 3-dimensionale Strömungsmechaniksoftware auf ausgewählte Komponenten des Wasserstoffspeichersystems

anzuwenden, während LMS AMESim als 1-dimensionale Simulationssoftware für die übrigen Teile des Gesamtsystems verwendet wird. Diese gekoppelte Vorgehensweise ermöglicht die CFD-Detailanalyse von Komponenten des Gesamtsystems, die ausgeprägte 3-dimensionale Strömungsphänomene aufweisen. Die 1-dimensionale Simulation des Gesamtsystems mit LMS AmeSIM ermöglicht die Bereitstellung genauerer Randbedingungen für die CFD-Simulation und eine genauere Berücksichtigung der Rückwirkung der Komponentendurchströmung auf das Gesamtsystem.

Im Ergebnis der mehr als dreijährigen Forschungs- und Entwicklungsarbeiten im HySIM-Projekt stellte ANSYS Germany den HySIM Projektpartnern regelmäßig und zu frühen Zeitpunkten Prototypen der entwickelten Simulationsmodule zur Verfügung, um weitere Modellentwicklungen und -validierung seitens der Projektpartner bestmöglich zu unterstützen. ANSYS Germany unterstützte die Projektpartner in der Anwendung der ANSYS Softwarepakete für die in HySIM ausgeführten Detailuntersuchungen, u.a. im Rahmen von bei ANSYS Germany stattgefundenen Software-Schulungen und individuellen Beratungen mit den Projektpartnern. Des Weiteren erstellte ANSYS Germany die technische Dokumentation für die implementierten physikalischen Modelle, deren Verifikation und Validierung. Die aus den Validierungsuntersuchungen resultierenden Datensätze einschließlich der verwendeten Gitternetze, CFD-Setupdaten und CFD-Ergebnisse wurden den HySIM-Projektpartnern zur Verfügung gestellt.

Im Ergebnis des HySIM-Forschungsvorhabens entstand mit ANSYS CFX ein für die Berechnung von CcH2-Strömungen und damit in Verbindung stehende gekoppelte thermische, Strömungsmechanikund Strukturmechanik-Untersuchungen ertüchtigtes und validiertes Berechnungsverfahren.

#### II.3 Voraussichtlicher Nutzen

Bei der ursprünglichen Konzeption der Gesamtziele des HySIM-Projektes wurde bereits darauf abgezielt, dass die kommerzielle ANSYS CFX und ANSYS Mechanical Software bewusst als Basis der Entwicklungen gewählt wurde, da ANSYS Germany dann nach Abschluss des Projekts die Software und die neu entwickelten Module zur Marktreife bringen und weiterpflegen wird. Dadurch ergibt sich eine wissenschaftliche und wirtschaftliche Anschlussfähigkeit, die über die reine Anwendung der Softwaremodule in Wasserstoffanwendungen in der Automobilindustrie hinausgeht. Durch Verwendung eines kommerziellen Verfahrens als Basis lassen sich Entwicklungskosten sparen, da Module wie Geometrie- und Netzgenerierung, Pre- und Post-Prozessing, Versionsverwaltung und Dokumentation mit geringfügigen Änderungen übernommen und weiter verwendet werden können. Für die HySIM-Projektpartner und potentiellen Anwender der entwickelten, implementierten und validierten mathematisch-physikalischen Modelle resultiert daraus die Sicherheit einer langfristig gegebenen Verfügbarkeit der Simulationsmodule, deren Wartung und kontinuierlichen Weiterentwicklung sowie der Anwenderunterstützung seitens ANSYS Germany.

## II.4 Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen

Die folgenden Veröffentlichungen wurden innerhalb dieses Forschungsprojektes getätigt:

- Langtry R. and Menter, F.R., "A Correlation-Based Transition Model using Local Variables for Unstructured Parallelized CFD codes", AIAA Journal, Vol. 47, No.12, 2009.
- Menter, F.R. and Egorov, Y., "Scale-Adaptive Simulation Method for Unsteady Flow Predictions. Part 1: Theory and Model Description", Journal Flow Turbulence and Combustion, Vol. 85, No. 1, pp 113-138, 2010.
- Egorov, Y, Menter, F.R. and Cokljat D., "Scale-Adaptive Simulation Method for Unsteady Flow Predictions. Part 2: Application to Aerodynamic Flows", Journal Flow Turbulence and Combustion, Vol. 85, No. 1, pp. 139-165, 2009.
- D. Scholz, M. Kuntz, T. Frank, Generic Coupling Interface between ANSYS CFX and the 1D System Code LMS AMESim, ANSYS Conference & CADFEM Users' Meeting, Leipzig, 2009.
- D. Scholz, ANSYS CFD Coupling to 1D Codes AMESim & GT-Power and Examples of 1D-3D Coupling, NAFEMS Seminar: Coupling 1D and 3D CFD, Gaydon, UK, 2010.

# **Anhang: Literaturverzeichnis**

- [1] HySIM (2008) Simulationsmodule für die Entwicklung von Wasserstoff-Fahrzeugspeichern, Teil 1: Vorhabensbeschreibung, HySIM, 2008.
- [2] Neuplanungen, wie dem Projektträger am 25.06.2010 kommuniziert.
- [3] Bassina, I. A., Lomakin, S. A., Nikulin, D. A., Strelets, M. Kh. and Shur, M. L. (1998) Assessment of Applicability of Modern Models of Turbulence for Calculation of Natural-Convection Flows and Heat Transfer, J. of High Temperature, 36(2), 230-238.
- [4] Tieszen, S., Ooi, A., Durbin, P. and Behnia, M., (1998), Modeling of natural convection heat transfer, Proceedings of the Summer Program 1998, Center for Turbulence Research.
- [5] Tsuji, T., Nagano, Y. Characteristics of a turbulent natural convection boundary layer along a vertical flat plate // Int. J. Heat Mass Transfer. 1988. Vol. 31, No. 8. P. 1723-1734.
- [6] Menter, F.R., Langtry, R., Kuntz, M. (2003) Ten years of Industrial Experience with the SST turbulence model // Turbulence, Heat and Mass Transfer 4 (CD-ROM Proceedings), Begell House, Inc.
- [7] HySIM (2008) Simulationsmodule für die Entwicklung von Wasserstoff-Fahrzeugspeichern, Teil 1: Vorhabensbeschreibung, HySIM, 2008.
- [8] HySIM (2009) Zwischenbericht Nr. 2, 01.01.2009-31.06.2009, Beitrag ANSYS Germany, HySIM, 2010.
- [9] HySIM (2010) Zwischenbericht Nr. 3, 01.07.2009-31.12.2009, Beitrag ANSYS Germany, HySIM, 2010.
- [10] ANSYS (2009) ANSYS CFX, Release 12.1, Solver theory guide, ANSYS, 2009.
- [11] Y. Egorov, Th. Frank, J. Goldberg, D. Scholz: Modeling of thermo-hydraulic effects in inner tank, HySIM Deliverable D1.1, ANSYS Germany, 2010.
- [12] GASPAK, <a href="http://www.htess.com/gaspak.htm">http://www.htess.com/gaspak.htm</a>.
- [13] Pavlov, A.: Cold Refuelling of cryocompressed tank. BMW Internal Report, 2008.
- [14] Menter F.R., Garbaruk A., Smirnov P., (2009), "Scale adaptive simulation with artificial forcing", Proc. 3rd Symposium on Hybrid RANS-LES Methods, Gdansk.
- [15] ANSYS (2009): ANSYS CFX, Release 12.1, Solver theory guide, ANSYS, 2009.
- [16] ANSYS (2009b): ANSYS CFX, Release 12.1, Solver modeling guide, ANSYS, 2009.
- [17] ANSYS (2009c): ANSYS CFX, Release 12.1, Tutorials, ANSYS, 2009.
- [18] Scholz, D., Frank, T., Gleisenstein, H.: Physical analysis, software implementation and validation report of a CFD/1D strong coupling supervisor, HySIM-Deliverable D3.1, 2010.
- [19] Betts, P. L., Bokhari, I. H. (2000) Experiments on turbulent natural convection in an enclosed tall cavity, Int. J. Heat & Fluid Flow, Vol. 21, pp. 675-683.
- [20] Cheesewright, R., King, K. J., Ziai, S. (1986) Experimental data for the validation of computer codes for the prediction of two-dimensional buoyant cavity flows, ASME Winter Annual Meeting, HTD-60, Anaheim, 1986, pp. 75–81.
- [21] Uittenbogaard, R. E. (1989) Stably stratified mixing layer: Data report for the 14th Meeting of the IAHR working group on refined flow modelling, March, 1989.
- [22] Simion, C., Numerical Simulation of Density-Driven and Temperature-Driven Buoyancy Flow, Master's Thesis, TU München, 2011.
- [23] Wilcox, D.C., Turbulence Modeling for CFD, 3rd Ed., DCW Industries, Inc., (2006).
- [24] Durbin, P.A. and Reif, B.A., , Statistical Theory and Modeling for Turbulent Flows, John Willey&Sons, 2001.

- [25] Wallin, S. and Johansson, A.V., "An explicit algebraic Reynolds stress model for incompressible and compressible turbulent flows", J. Fluid Mech., 403, pp. 89–132, 2000.
- [26] Menter, F.R., Langtry, R., Völker, S., "Transition Modelling for General Purpose Codes", Journal Flow Turbulence and Combustion, Vol. 77, No. 1-4, pp. 277-303, 2006.
- [27] Langtry R. and Menter, F.R., "A Correlation-Based Transition Model using Local Variables for Unstructured Parallelized CFD codes", AIAA Journal, Vol. 47, No.12, 2009.
- [28] Menter, F.R. and Egorov, Y., "Scale-Adaptive Simulation Method for Unsteady Flow Predictions. Part 1: Theory and Model Description", Journal Flow Turbulence and Combustion, Vol. 85, No. 1, pp 113-138, 2010.
- [29] Egorov, Y, Menter, F.R. and Cokljat D., "Scale-Adaptive Simulation Method for Unsteady Flow Predictions. Part 2: Application to Aerodynamic Flows", Journal Flow Turbulence and Combustion, Vol. 85, No. 1, pp. 139-165, 2009.
- [30] D. Scholz, M. Kuntz, T. Frank, *Generic Coupling Interface between ANSYS CFX and the 1D System Code LMS AMESim*, ANSYS Conference & CADFEM Users' Meeting, Leipzig, 2009.
- [31] D. Scholz, ANSYS CFD Coupling to 1D Codes AMESim & GT-Power and Examples of 1D-3D Coupling, NAFEMS Seminar: Coupling 1D and 3D CFD, Gaydon, UK, 2010.