

CFD-Simulationen turbulenter konvektiver Strömungen bei überkritischen Drücken

Zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Ingenieurwissenschaften
der Fakultät für Maschinenbau
des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)

genehmigte

Dissertation

von

Dipl.-Math. techn. Claus Kunik

aus Oberhausen-Rheinhausen

Hauptreferent: Prof. Dr.-Ing. X. Cheng
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

Koreferent: Prof. Dr.-Ing. T. Schulenberg
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

Tag der mündlichen Prüfung: 10.07.2012

Fakultät für Maschinenbau des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)
Institut für Fusions- und Reaktortechnik (IFRT)
Institut für Kern- und Energietechnik (IKET)

2012

Vorwort

Diese Arbeit entstand im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Kern- und Energietechnik des Karlsruher Institut für Technologie (KIT).

Herrn Prof. Dr.-Ing. X. Cheng, Leiter des Instituts für Fusions- und Reaktortechnologie am KIT, danke ich herzlich für die Übernahme des Hauptreferendariats und für die Unterstützung während meiner Zeit am IFRT.

Insbesondere möchte ich an dieser Stelle dem Leiter des Instituts für Kern- und Energietechnik am KIT und Koreferenten dieser Dissertation, Herrn Prof. Dr.-Ing. T. Schulenberg, für die Ermöglichung dieser Arbeit und seinen fachlichen Beistand meinen herzlichsten Dank aussprechen.

Mein aufrichtiger Dank gilt Herrn Dr. I. Otic für die Übernahme der Betreuung dieser Arbeit und für die vielen wertvollen Ratschläge und Anregungen, welche maßgeblich zum Gelingen dieser Arbeit beitrugen.

Des Weiteren möchte ich mich bei meinem Gruppenleiter Herrn Prof. A. Class und allen Mitarbeitern des IKET für die fachliche Hilfe bedanken, welche ich in meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter erfahren durfte.

Herrn Dipl.-Ing. M. Brandauer danke ich für seinen wertvollen Beitrag zu dieser Arbeit im Rahmen einer Diplomarbeit, die vielen fruchtbaren Diskussionen und das unterhaltende Arbeitsklima am IFRT.

Allen Doktoranden, insbesondere meinen langjährigen Weggefährten Herrn Dr.-Ing. M. Schlagenhauser, Herrn Dr.-Ing. H. Herbell, Dipl.-Ing. M. Raque, Dipl.-Ing. M. Stokmaier und Dipl.-Ing. C. Bruzzese danke ich für die tolle Arbeitsatmosphäre, den fachlichen Austausch und die heiteren Kaffeepausen.

Mein größter Dank gilt meiner Familie, die mich während des gesamten Studiums und der Promotion uneingeschränkt unterstützte. Abschließend möchte ich meiner Freundin Wiebke danken, sie stand mir auch in schwierigen Zeiten bei und half mir zudem bei der Korrektur dieser Arbeit.

Karlsruhe, im Mai 2012

Claus Kunik

Kurzfassung

Im Jahr 2000 wurden vom Generation IV International Forum (GIF) sechs innovative Reaktorkonzepte vorgeschlagen, welche intensiver untersucht werden sollten. Eines davon ist das sogenannte Supercritical Water Reactor (SCWR) Konzept, welches Wasser bei überkritischen Druckbedingungen als Kühlmedium verwendet. Im allgemeinen Betriebszustand wird hierdurch eine wesentliche Verbesserung des Wärmeübergangs erreicht. Fluide bei Drücken um den thermodynamisch kritischen Punkt unterliegen jedoch starken Änderungen der Stoffeigenschaften in einer sehr kleinen Temperaturspanne. Diese Stoffwertänderungen interagieren mit der Turbulenzproduktion in unmittelbarer Wandnähe, was lokal zu einer deutlichen Verschlechterung des Wärmeübergangs führen kann. In Folge dessen können starke Überhitzung von Komponenten bis hin zu Materialschäden auftreten. Um dieses sicherheitsrelevante Phänomen des verschlechterten Wärmeübergangs näher zu untersuchen wurden in der Vergangenheit bereits einige Experimente durchgeführt, die jedoch sehr teuer sind und nur eingeschränkte Daten bzgl. der Turbulenz liefern können. Deshalb werden im Folgenden numerische Grundlagenuntersuchungen durchgeführt, um dieses Phänomen näher zu analysieren.

Erster Schritt dieser Untersuchung ist die Entwicklung einer an überkritische Druckbedingungen angepassten numerischen Methode, welche auf der Approximation für niedrige Mach-Zahlen und der vollständigen Kopplung des temperaturabhängigen Gleichungssystems beruht. Dieser Ansatz wird zunächst auf die weniger rechenintensive RANS Methode angewendet werden. Nach der Verifikation anhand einer stark beheizten Luftströmung, erfolgt die Anwendung des Ansatzes auf Zwangs- und Mischkonvektionsbedingungen bei überkritischen Drücken. Die Ergebnisse werden hierbei mit Daten einer direkten numerischen Simulation (DNS) aus der Literatur verglichen. Auf Basis dieser Analyse erfolgt die Entwicklung ein an überkritische Druckbedingungen angepasstes Turbulenzmodell.

Im zweiten Teil dieser Arbeit erfolgt die Anwendung des Ansatzes auf die sogenannte Large Eddy Simulationmethode (LES), welche die Auflösung von turbulenten Strukturen zulässt. Nach einer ersten Verifikation anhand einer einfachen beheizten Kanalströmung erfolgt abermals die Anwendung der Methode auf Zwangs- und Mischkonvektionsbedingungen. Als Benchmark stehen wiederum Daten der bereits erwähnten direkten numerischen Simulation zur Verfügung. Ziel dieser Untersuchung ist die Ermittlung der Haupteinflüsse auf den Wärmeübergang, wie etwa die Turbulenz in direkter Wandnähe. Somit spielt die Analyse verschiedener Feinstrukturmodelle und Netzauflösungen eine zentrale Rolle in diesem Abschnitt. Abschließend erfolgt die Entwicklung und Anwendung eines Ansatzes einer variablen Feinstruktur Prandtl-Zahl und eine Diskussion der erreichten Verbesserungen.

Abstract

CFD-simulations of turbulent convective flows at supercritical pressure

In the year 2000, six innovative reactor concepts have been proposed by the Generation IV International Forum (GIF) for a detailed investigation. One of those concepts is the so-called Supercritical Water Reactor (SCWR), which uses water at supercritical pressure conditions as coolant. Accordingly, there is a significant improvement of heat transfer at standard operation conditions. Fluids at pressure conditions around the thermodynamic critical point exhibit strong variations of fluid properties, which occur suddenly in a narrow temperature range. Those changes interact with the production of turbulence in the near wall area and can cause an deterioration of heat transfer. Consequently, this can lead to overheating of components and material problems. To analyse this safety-related phenomena, several experiments are performed in the past, which usually are very expensive and restricted with respect to turbulence data. Therefore, fundamental numerical investigations on fluid flow and heat transfer at supercritical pressure are required.

In the first step, a numerical method, which is adapted on supercritical pressure conditions, is developed. This method bases on the so-called low Mach-number approximation and on a system of equations, which is coupled by the temperature dependent thermo-physical properties. Because of lower computational costs, this approach will be applied on the Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) method at first. After the verification with help of a strongly heated air flow, the approach will be applied on forced and mixed convection conditions at supercritical pressure. The results are compared with direct numerical simulation (DNS) data from the literature. Based on this analysis, an adapted turbulence model, is developed.

In the second step of this work, the approach will be applied on the Large Eddy Simulation (LES) method, which allows the resolution of turbulent structures. After verification with help of an externally heated channel flow, once again the approach will be applied on forced and mixed convection conditions at supercritical pressure. As benchmark, the same DNS data are used compared to the RANS analysis. Aim of this investigation is the evaluation of the main influences on the heat transfer, for example the turbulence in the near wall area. Therefore, the analysis of different subgrid scale (SGS) models and mesh resolution plays an important role in this section. At least, the development and application of a variable SGS Prandtl number approach will be carried out, including a discussion of the gained results.

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	i
Kurzfassung	iii
Abstract	v
1 Einleitung	1
1.1 Stoffeigenschaften von Fluiden bei überkritischen Druckzuständen und deren Anwendungen	1
1.2 Reaktorkonzepte für überkritische Druckzustände	4
1.3 Grundlagen der Wärmeübertragung für Fluide bei überkritischen Drücken - Stand der Forschung	7
1.3.1 Übersichtsartikel	9
1.3.2 Experimentelle Untersuchungen	10
1.3.3 Numerische Untersuchungen	14
1.3.4 Vorhersage des Wärmeübergangs (Korrelationen)	18
1.3.5 Kriterien für das Auftreten des DHT	19
1.4 Zielsetzung und Aufbau der Arbeit	21
2 Turbulente Strömungen	23
2.1 Turbulenz	23
2.2 Grundlegende Erhaltungsgleichungen der Strömungsmechanik	26
2.2.1 Angepasste Methodik für überkritische Druckzustände	28
2.3 Turbulenz in Wandnähe	29
2.4 Verfahren der Turbulenzmodellierung	33
2.5 Reynolds Averaged Navier Stokes Methode (RANS)	35
2.5.1 Turbulenzmodelle	37
2.5.2 Zweigleichungsmodelle	40
2.6 Large-Eddy Simulation - LES	44
2.6.1 Räumliche Filterung	44
2.6.2 Erhaltungsgleichungen der LES	46
2.6.3 Feinstrukturmodelle	47
2.6.4 Herleitung eines variablen Feinstruktur Prandtl Zahl Ansatzes	50
3 Numerischer Lösungsansatz	55
3.1 Das Numerische Verfahren	55
3.2 Diskretisierungsverfahren	56
3.2.1 Räumliche Diskretisierungsverfahren	57
3.2.2 Zeitliche Diskretisierungsverfahren	59
3.3 Der Lösungsalgorithmus PISO	61

4	RANS-Simulationen turbulenter konvektiver Strömungen bei überkritischen Drücken	65
4.1	Stark beheizte turbulente Luftströmung	65
4.1.1	Numerisches Setup	66
4.1.2	Ergebnisse	68
4.2	Turbulente Rohrströmung bei überkritischen Druckbedingungen	70
4.2.1	Numerisches Setup	72
4.2.2	Ergebnisse - Zwangskonvektion	73
4.2.3	Ergebnisse - Mischkonvektion	77
5	LES-Simulationen turbulenter konvektiver Strömungen bei überkritischen Drücken	81
5.1	Turbulente Luftströmung in einem ebenen Kanal	81
5.1.1	Numerisches Setup	83
5.1.2	Ergebnisse	85
5.2	Turbulente Rohrströmung bei überkritischen Druckbedingungen	88
5.2.1	Numerisches Setup	88
5.2.2	Ergebnisse - Inflow Generator (IG)	90
5.2.3	Ergebnisse - Zwangskonvektion	92
5.2.4	Ergebnisse - Mischkonvektion	101
5.2.5	Fazit der LES-Untersuchungen	111
6	Zusammenfassung und Ausblick	113
	Nomenklatur	117
	Literaturverzeichnis	123

1 Einleitung

Die Grundlage einer nachhaltigen wirtschaftlichen Entwicklung eines Landes ist die sichere Energieversorgung. Einen wesentlichen Beitrag liefert hierfür die Kernenergie. Diese weitestgehend CO₂ freie Art der Energiegewinnung wird bereits in über 60 Staaten genutzt um deren Bedarf an Energie zu decken. Ende des Jahres 2010 waren nach Angaben der internationalen Atomaufsichtsbehörde IAEA 441 Reaktoren in Betrieb und weitere 66 im Bau. Der Nettobeitrag an elektrischer Leistung belief sich dabei auf über 375 Gigawatt. Durch den stetig steigenden Energiebedarf und der gleichzeitigen Verpflichtung zur Minderung des CO₂ Ausstoßes, wird die Kernenergie auch in Zukunft weltweit eine wichtige Rolle spielen.

Mit dem Ziel der Verbesserung der Sicherheit der Anlagen, der Minimierung des radioaktiven Abfalls, der Nachhaltigkeit und Reduktion der wirtschaftlichen Kosten schlossen sich im Jahre 2000 neun Nationen unter der Führung der USA zusammen [181], um die Forschung und Entwicklung von neuartigen Reaktorkonzepten voranzutreiben. Die Systeme dieser sogenannten Generation IV Konzepte basieren dabei auf den drei allgemeinen Grundtypen, den gasgekühlten, den wassergekühlten und den flüssigmetallgekühlten Reaktoren.

Das weltweit vielversprechendste untersuchte Konzept ist der sogenannte „Supercritical Water Cooled Reactor“ (SCWR), welcher Wasser bei überkritischen Druckbedingungen als Kühl- und Moderatormedium verwendet. Er bildet den Ausgangspunkt und die Grundlage dieser Arbeit. Um die Besonderheiten dieses Reaktorkonzeptes nachzuvollziehen, soll zunächst näher auf die Eigenschaften von Fluiden bei überkritischen Drücken eingegangen werden.

1.1 Stoffeigenschaften von Fluiden bei überkritischen Druckzuständen und deren Anwendungen

Bei unterkritischen Druckzuständen verdampft beheizte Flüssigkeit beim Erreichen der sogenannten Sättigungstemperatur und es existieren Flüssigkeit und Dampf nebeneinander. Weitere Zufuhr von Wärme führt zu einer vollständigen Verdampfung und anschließend zu überhitztem Dampf, wie in Abb. 1.1 für Wasser gezeigt. Im Gegensatz dazu gibt es für Flüssigkeiten bei überkritischen Druckzuständen keinen Phasenübergang bei einer bestimmten Temperatur, jedoch einen stetigen Übergang von flüssigkeits- in dampfförmiges Fluid. Somit können Fluide bei überkritischen Drücken als einphasig betrachtet werden, deren Stoffeigenschaften sehr stark abhängig von Temperatur und Druck variieren. Abb. 1.2 - Abb. 1.6 zeigen dies am Beispiel für CO₂ in Abhängigkeit von Temperatur und vier verschiedenen Drücken. Die Stoffdaten weisen dabei vergleichbar hohe Gradienten im Vergleich zu Wasser auf.

Insbesondere ist dies für die spezifische Wärmeleitfähigkeit c_p der Fall. Es fällt auf, dass abhängig vom Druck ein lokales Maximum existiert, welches im sogenannten kritischen

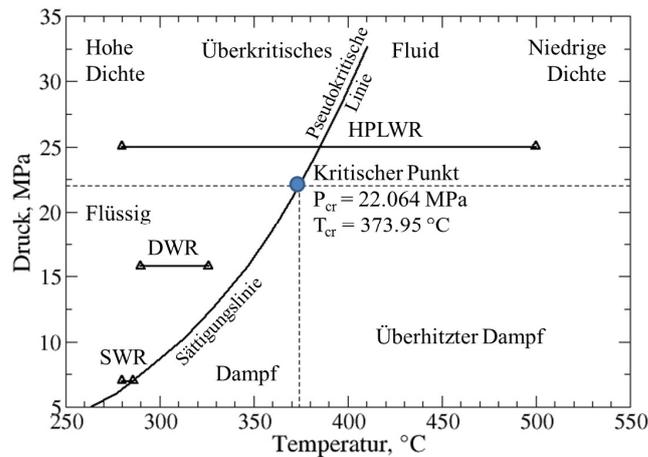


Abbildung 1.1: Druck-Temperatur Diagramm von Wasser und Betriebszustände von verschiedenen Reaktortypen

Punkt ($p=7.38$ MPa, $T_{cr}=31^\circ\text{C}$) sein absolutes Maximum erreicht. Bei überkritischen Drücken wird die Linie, welche alle lokalen Maxima verbindet als pseudokritische Linie bezeichnet. Mit steigenden Drücken fallen die maximalen Werte von c_p und die pseudokritische Temperatur steigt. Für Wasser liegt der kritische Punkt bei einem Druck von etwa $p=22.1$ MPa und einer Temperatur von $T_{cr}=374^\circ\text{C}$. Die enormen Änderungen der Stoffwerte haben auch sehr große Auswirkungen auf den Wärmeübergang, welcher indirekt über die Prandtl Zahl wiedergegeben werden kann. Diese beschreibt das Verhältnis von Impulstransport infolge von Reibung und Wärmetransport infolge von Leitung und ist definiert als

$$Pr = \frac{\nu}{a} \quad \text{mit} \quad a = \frac{\lambda}{\rho c_p}. \quad (1.1)$$

Sie besitzt somit ebenfalls ein lokales Maximum. Die Auswirkungen der Stoffänderungen auf den Wärmeübergang sollen in den nachfolgenden Kapiteln noch genauer diskutiert werden. Die Werte für Dichte ρ , dynamische Viskosität μ , Wärmeleitfähigkeit λ und Enthalpie h variieren ebenfalls in einem bestimmten Temperaturbereich sehr stark, vgl. Abb. 1.4 - 1.6 [128]. Der Gradient verringert sich jedoch mit steigenden Drücken. Ähnlich zur spezifischen Wärmekapazität besitzt die Wärmeleitfähigkeit auch einen Peak in der Nähe des pseudokritischen Punktes. Dieser verschwindet jedoch wieder mit steigendem Druck.

Die frühesten Arbeiten zur Untersuchung des Wärmeübergangs bei überkritischen Druckzuständen begannen anfangs der 30er Jahre. Erste erwähnenswerte Untersuchungen wurden 1946 von Schmidt et al. [156] durchgeführt mit dem Ziel, neuartige Kühlsysteme für Turbinenschaufeln zu entwickeln. Es wurde festgestellt, dass der Wärmeübergangskoeffizient von Fluiden bei freier Konvektion in der Nähe des pseudokritischen Punktes sehr groß war. Basierend auf diesen Erkenntnissen konnten Thermosiphons, also Systeme zum Wärmeaustausch unter Ausnutzung der Naturkonvektion, weiterentwickelt werden [155].

Um den Wirkungsgrad von fossil befeuerten Kraftwerken zu steigern, entwickelte sich Anfang der 50er Jahre die Idee überkritisches Wasser für die Dampferzeugung zu verwenden.

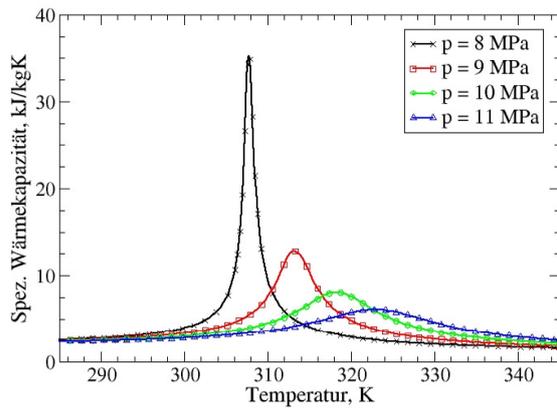


Abbildung 1.2: Spez. Wärmekapazität bei überkritischen Drücken (CO₂)

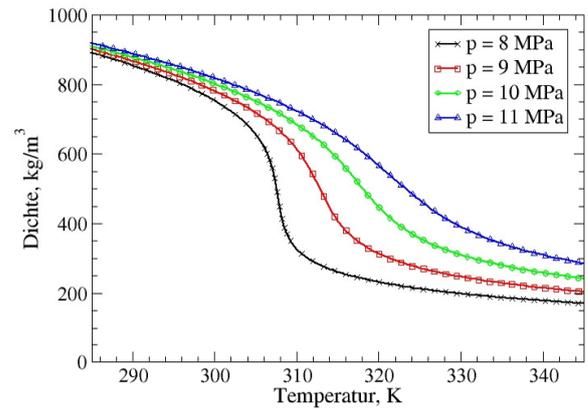


Abbildung 1.3: Dichte bei überkritischen Drücken (CO₂)

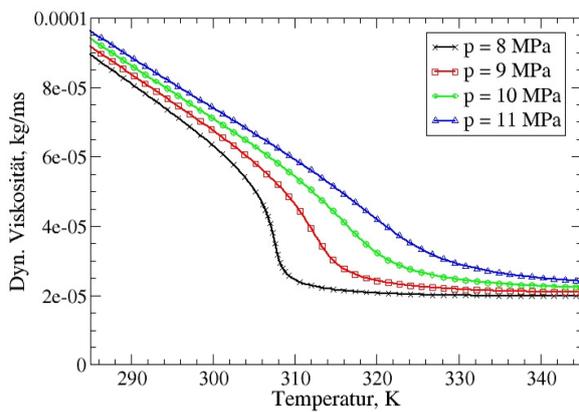


Abbildung 1.4: Dyn. Viskosität bei überkritischen Drücken (CO₂)

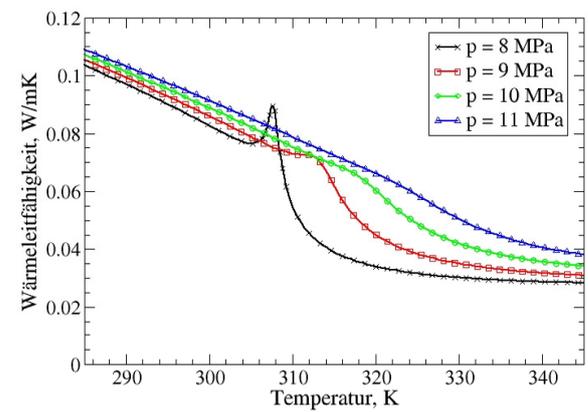


Abbildung 1.5: Wärmeleitfähigkeit bei überkritischen Drücken (CO₂)

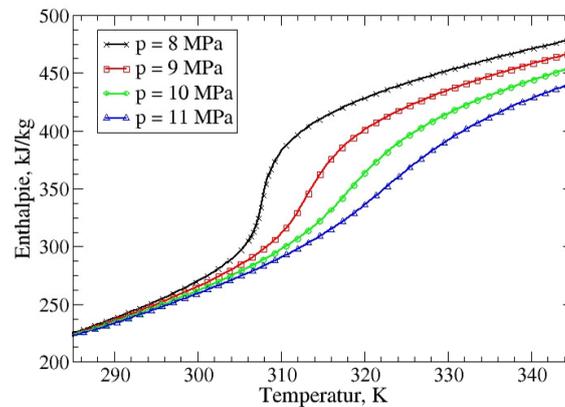


Abbildung 1.6: Enthalpie bei überkritischen Drücken (CO₂)

Durch den Vorteil der Einphasigkeit des Fluids wird ein Dryout, also das Austrocknen der Wände beim Filmsieden, vermieden. Es wurde erkannt, dass die Verschlechterung des Wärmeübergangs nur in einer sehr begrenzten Parameterspanne möglich war. Daraufhin begannen intensive Untersuchungen, die hauptsächlich in der ehemaligen Sowjetunion und den USA von 1950 -1980 durchgeführt wurden [140].

Ebenfalls Ende der 50er Jahre begannen die ersten Untersuchungen überkritisches Wasser als Kühlmedium auch in Nuklearanlagen einzusetzen. Hierzu wurden mehrere Reaktorkonzepte, ebenfalls von den UdSSR und den USA, entwickelt, jedoch nie fertiggestellt. Allerdings wurde diese Idee über 30 Jahre später wieder aufgegriffen um Effizienz und Wirkungsgrad von Kernreaktoren zu steigern.

Hauptanwendungsgebiet von überkritischem Wasser war und ist bis heute die Nutzung bei fossil befeuerten Kraftwerken. Aktuelle Forschungs- oder Einsatzgebiete, in denen überkritische Fluide eine tragende Rolle spielen, sind u.a.:

- Leistungsgradsteigerung von überkritischen Dampferzeugern
- Entwicklung von Kernreaktoren, gekühlt mit überkritischem Wasser
- Verwendung von überkritischem Wasserstoff als Raketentreibstoff
- Verwendung von Methan als Kühlmittel und Treibstoff für Überschallflugzeuge
- Verwendung von überkritischem Kohlenstoffdioxid als Kältemittel für Klima- und Kälteanlagen
- Verwendung von überkritischen Fluiden für die Umwandlung von geothermischer Energie in Strom
- Verwendung von überkritischen Fluiden in der chemischen und pharmazeutischen Industrie

Auf die verschiedenen Reaktorkonzepte, welche Fluide bei überkritischen Druckzuständen als Kühlmedium verwenden, soll im folgenden Unterkapitel näher eingegangen werden.

1.2 Reaktorkonzepte für überkritische Druckzustände

Der Supercritical Water Cooled Reactor (SCWR) ist ein Reaktorkonzept der 4. Generation [181], welches überkritisches Wasser als Arbeitsmedium verwendet. SCWR-Systeme sind im wesentlichen Leichtwasserreaktoren (LWR), welche bei sehr hohen Temperaturen und Drücken oberhalb des thermodynamisch kritischen Punktes von Wasser betrieben werden. Ähnlich zu einem Siedewasserreaktor (BWR) gibt es nur einen einzigen Wasser - Dampfkreislauf, das Kühlmedium im Reaktorkern bleibt jedoch einphasig. Durch den Einsatz von überkritischem Wasser wird der Wirkungsgrad im Vergleich zu herkömmlichen Leichtwasserreaktoren um ein Drittel gesteigert. Des Weiteren können durch die Einphasigkeit des Kühlmediums und die direkte Kopplung mit dem Turbinenstrang wesentliche Vereinfachungen an der Anlage vorgenommen werden. Darüber hinaus kann ein SCWR im thermischen oder auch im schnellen Spektrum betrieben werden. Der vorgeschlagene Brennstoff ist dem eines herkömmlichen LWR ähnlich. Die Brennelemente eines SCWR unterscheiden sich bei der Verwendung eines thermischen Spektrums von

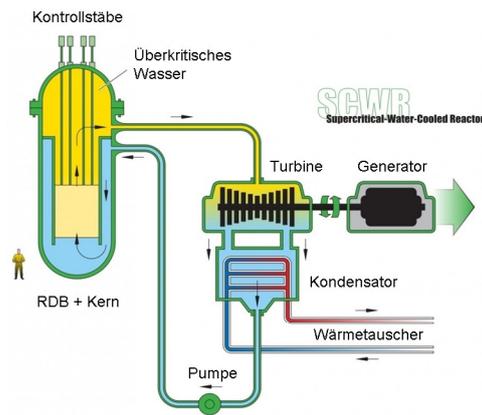


Abbildung 1.7: SCWR-Schema [78]

Parameter	Referenzwerte
Leistung	bis 1500 MWe
Betriebsdruck	25 MPa
Eintrittstemp.	bis 350°C
Austrittstemp.	bis 600°C
Wirkungsgrad	≥ 45%
Abbrand (therm.)	bis 60 GWd/tHM
Abbrand (schnell)	bis 120 GWd/tHM
Spektrum	therm. oder schnell
Brennstoff	UO ₂ , MOX, Thorium

Tabelle 1.1: SCWR Referenzparameter [78]

denen eines herkömmlichen LWR durch die Verwendung von Moderatorkanälen. Ähnlich zu den heutigen BWR sind ebenfalls passive Sicherheitssysteme vorgesehen. Der Betriebsdruck eines SCWRs liegt bei etwa 25 MPa und die Reaktoraustrittstemperatur bei etwa 500 - 600°C [131], vgl. Abb. 1.1.

Einer der größten Vorteile des SCWR ist, dass das System auf existierenden Leichtwassertechnologie beruht. Hierbei kann auf eine langjährige Erfahrung beim Bau und Betrieb dieser Reaktoren zurückgegriffen werden. Zusätzlich kann die Erfahrung vom Betrieb fossil befeuerter Anlagen, welche bei überkritischen Druckbedingungen arbeiten, genutzt werden. Die Vorteile eines SCWR sind zusammengefasst [143]:

- Erhöhung des thermischen Wirkungsgrades auf bis zu 40-45%
- Keine Verwendung von Dampftrocknern, Dampfabscieder, Umwälzpumpen und Dampferzeuger
- Gestattet die Produktion von Wasserstoff, da die Austrittstemperatur des Kühlmittels sehr hoch ist
- Verminderung der Reibungsverluste
- Kein Austrocknen der Wände verursacht durch Filmsieden
- Die Verwendung eines schnellen Spektrums erlaubt Recycling des Brennstoffs

Dem gegenüber steht die Tendenz der schnellen Reaktoren für einen positiven void Koeffizienten und dem starken Entwicklungsbedarf von Materialien um die Integrität, Stabilität und Sicherheit des Reaktorkerns beim Anfahren, Normalbetrieb und anormalen Transienten zu gewährleisten. Weitere Herausforderungen sind die Entwicklung des Designs des Reaktorkerns und die Bestimmung des Wärmeübergangskoeffizienten. Ein Schema eines SCWR bzw. dessen wichtigsten Betriebsparameter sind in Abb. 1.7 und Tabelle 1.1 zusammengefasst.

Durch die überwiegenden Vorteile besteht ein großes internationales Interesse an der Entwicklung dieses Reaktorkonzepts. Es existieren weltweit mehrere Designkonzepte, welche

alle auf den in Tabelle 1.1 erwähnten Parametern beruhen und im Folgenden kurz beschrieben werden:

- Japan: Die ersten Forschungen und Entwicklungen neuartiger Konzepte begannen 1989 an der Universität von Tokyo. Mehrere Designstudien wurden dabei berücksichtigt, sowohl eine thermische Version, der sogenannte Super LWR, und eine schnelle Version, der sogenannte Super Fast Reactor (SFR). Dabei standen die Untersuchungen des Reaktordesigns bezüglich Wärmeübergangsanalysen, Design des An- und Abfahrssystems, gekoppelten Neutronik/Thermohydraulik Untersuchungen des Kerns, Brennelementuntersuchungen bezüglich Aufheizung bzw. Festigkeit und Sicherheitsanalysen im Vordergrund. Diese wurden zunächst für den Super LWR durchgeführt und 2005 für den SFR fortgesetzt. Eine sehr gute Zusammenfassung der Arbeiten findet sich in [131] wieder.
- Europa: In Europa begannen erste Studien hinsichtlich der Entwicklung eines SCWR, basierend auf einem thermischen Spektrum, im Jahr 2000 im Rahmen des von der Europäischen Union geförderten High Performance Light Water (HPLWR) Projekts. Hierbei beteiligten sich ein Konsortium aus mehreren Forschungseinrichtungen und Industriepartnern unter Führung des Forschungszentrums Karlsruhe (FZK). Ziel war es eine Machbarkeitsstudie zu erstellen und das Potential dieses Konzeptes zu beurteilen, vgl. [64], [174], [175]. Nach der erfolgreichen Durchführung des Projekts begann im September 2006 die 2. Phase. Hierbei sollten insbesondere das Design des Kerns, das Sicherheitskonzept, Materialien und der Wärmeübergang bei überkritischen Drücken näher untersucht werden. Die Hauptunterschiede des HPLWR Designs gegenüber dem des Super LWR waren das sogenannten Three Pass Core Konzept und die Verwendung von Drahtwendeln als Abstandshalter der Brennelemente. Alle Ergebnisse des Projektes wurden in einem Abschlussbericht [177], welcher im Internet frei verfügbar ist, zusammengefasst.
- Canada: Als Weiterentwicklung des bereits existierenden CANDU Reaktors, erforscht und entwickelt die AECL (Atomic Energy of Canada Limited) seit 2006 den sogenannten CANDU-SCWR. Dieser Druckröhrenreaktor verwendet Thorium als Brennstoff, schweres Wasser als Moderator und zeichnet sich durch sein verbessertes Sicherheitskonzept aus. Übersichten bezüglich dieses Projektes und erste Forschungsergebnisse finden sich in [16] und [17] wieder.
- Korea: Weitreichende Forschungen an überkritischen Reaktorkonzepten werden in Korea insbesondere vom Korean Atomic Energy Research Institute (KAERI) und dem Korean Electric Power Research Institute (KEPRI) vorangetrieben. Hierbei konzentrieren sich die Studien ebenfalls auf eine Machbarkeitsanalyse, das Reaktorkernkonzept, Experimente betreffend den Wärmeübergang und die Erforschung von Materialien bezüglich Korrosion und Strahlung [6], [10]. Ein Hauptaugenmerk galt den Wärmeübergangsexperimenten, welche mit CO₂ an der Versuchsanlage SPHINX durchgeführt wurden, vgl. u.a. [80], [9].
- China: Die ersten chinesischen Forschungen bezüglich eines SCWR Reaktors wurden von der Shanghai Jiao Tong Universität (SJTU) im Jahr 2005 durchgeführt mit dem Ziel einer Machbarkeitsstudie. Daraufhin wurde Anfang 2006 die chinesische SCWR Technical Working Group (CSTWG), welche sieben Partner enthielt und unter der

Führung der SJTU geleitet wurde, gegründet um die Aktivitäten nocheinmal zu verstärken. Ein Reaktorkonzept der SJTU, welches auf einem gemischten Spektrum beruht, war von besonderem Interesse, da es beide Vorteile des thermischen und schnellen Spektrums vereinte [22], [24].

- USA: Mehrere Programme für die Forschung und Entwicklung eines SCWR Reaktors wurden in den USA zwischen 1999 und 2006 durchgeführt [19], [120]. Das Reaktordesign, welches als Referenz diente, war hierbei der japanische SCWR. Es wurden sehr viele Grundlagenuntersuchungen durchgeführt, welche aus Mangel an finanzieller Unterstützung 2006 eingestellt werden mussten. Insbesondere sollte hierbei die Arbeit der Universität von Wisconsin-Madison hervorgehoben werden, welche viele Grundlagenuntersuchungen bezüglich Thermohydraulik, Werkstoffkunde, Radiolyse von Wasser und Design des Reaktorkerns durchführten [108], [3].

In dieser Arbeit stehen die thermohydraulische Untersuchungen im Vordergrund worauf im Folgenden näher eingegangen werden soll.

1.3 Grundlagen der Wärmeübertragung für Fluide bei überkritischen Drücken - Stand der Forschung

Der Wärmeübergang für Fluide bei überkritischen Druckbedingungen ist sehr stark geprägt von den großen Änderungen der Stoffwerte. Unter der Voraussetzung, dass das Verhalten des Wärmeübergangskoeffizienten ausschließlich durch diese Stoffwertänderungen und nicht durch andere Faktoren beeinflusst wird, spricht man gemeinhin von einem „normalen“ Wärmeübergang. Diese Faktoren können etwa eine verminderte Produktion der Turbulenz, verursacht durch Auftriebseffekte, sein oder eine Abhängigkeit des Wärmeübergangskoeffizienten von der Fließrichtung des Fluids (horizontal bzw. vertikal). Des Weiteren nimmt bei „normalem“ Wärmeübergang die Wandtemperatur monoton zu. Die Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten kann hierbei, vergleichbar zu niedrigeren, unterkritischen Druckbedingungen, mit Hilfe der sogenannten Dittus-Boelter Korrelation erfolgen:

$$Nu = 0.023 \cdot Re^{0.8} \cdot Pr^{1/3} \quad (1.2)$$

Hierbei kennzeichnet Nu die sogenannte Nusselt-Zahl, welche den Wärmeübergang an strömenden Fluiden beschreibt. Deren Definition lautet

$$Nu = \frac{\alpha \cdot L}{\lambda} \quad (1.3)$$

wobei α den sogenannten Wärmeübergangskoeffizienten an das strömende Fluid darstellt, L eine charakteristische Länge und λ die Wärmeleitfähigkeit des Fluids. Die Reynoldszahl Re beschreibt hingegen das Verhältnis von Trägheitskräften zu Reibungskraften, und ist somit etwa ein Maß für den Turbulenzgrad einer Strömung. Sie ist definiert als

$$Re = \frac{uL}{\nu} \quad (1.4)$$

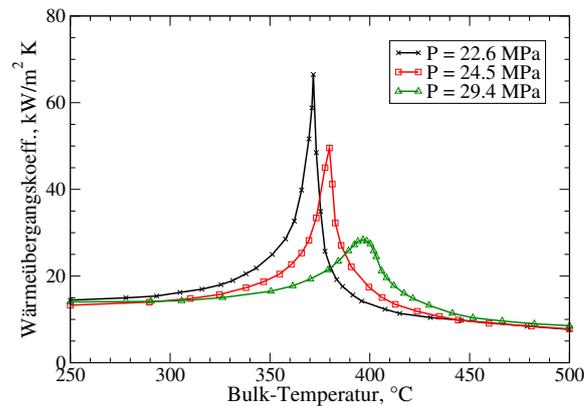


Abbildung 1.8: Wärmeübergangskoeffizient bei aufwärtsgerichteter Rohrströmung für Wasser bei überkritischen Drücken [191]

wobei u die Geschwindigkeit in Hauptströmung und ν die kinematische Viskosität des Fluids kennzeichnet. Abb. 1.8 zeigt beispielhaft die Entwicklung des Wärmeübergangskoeffizienten bei einer aufwärtsgerichteten Rohrströmung für Wasser bei „normalem“ Wärmeübergang für überkritische Druckbedingungen [191]. Hierbei wird ein Maximum kurz vor dem Erreichen der pseudokritischen Temperatur erreicht, was auf das folgende Phänomen zurückzuführen ist: Durch das Ansteigen der Bulk-Temperatur verringert sich beim Erreichen der pseudokritischen Temperatur die Wärmeleitfähigkeit in Wandnähe sehr deutlich, wodurch ein sogenannter Wärmewiderstand erzeugt wird. Jedoch zur selben Zeit wird dieser durch die Verringerung der Viskosität wieder reduziert und infolge der hohen Werte der spezifischen Wärmekapazität steigt die turbulente Wärmediffusion. Da diese Effekte wesentlich stärker sind als der Erstgenannte ist der Wärmeübergang stark verbessert. Somit fällt auch bei steigenden Drücken das Maximum des Wärmeübergangskoeffizienten, da der Höchstwert der spezifischen Wärmekapazität mit steigenden Drücken abnimmt. Zudem sinkt der Wärmeübergangskoeffizient bei steigender Aufheizung, vgl. [191].

Der sogenannte verschlechterte Wärmeübergang (DHT - deteriorated heat transfer) ist eine Konsequenz aus dem Einfluß der Auftriebseffekte auf die Turbulenzproduktion. Die Intensität dieses Phänomens ist dabei abhängig von Wärmezufuhr, Massenstrom und vorliegender Geometrie. Im Vergleich zu „normalem“ Wärmeübergang zeichnet sich der verschlechterte Wärmeübergang durch niedrigere Werte des Wärmeübergangskoeffizienten aus, auch im Vergleich zu den von der Dittus-Boelter Korrelation Vorhergesagten. Somit kann die Wandtemperatur etwa in bestimmten Bereichen einer Teststrecke sehr stark ansteigen. Dieses Verhalten ist sehr gut an den experimentellen Daten von Shitsman [167] zu erkennen, welcher eine einfache Rohrströmung näher untersuchte. Dieser variierte bei seinem Experiment die Wärmezufuhr bei einer konstanten Massenstromdichte des untersuchten Fluids Wasser von $430 \text{ kg/m}^2\text{s}$ bei einem Druck von 24.3 MPa. Hierbei korrelieren die Maxima der Wandtemperatur mit den Extremwerten des Wärmeübergangskoeffizienten, vgl. Abb. 1.9.

Das Gegenteil ist beim letzten Wärmeübergangsphänomen bei überkritischen Drücken der Fall, dem sogenannte verbesserten Wärmeübergang (EHT - Enhanced Heat Trans-

fer). Dieser ist gekennzeichnet durch höhere Werte des Wärmeübergangskoeffizienten im Vergleich zu „normalen“ Wärmeübergang bzw. im Vergleich zu den von der Dittus-Boelter Korrelation vorhergesagten. Zusammenfassend kann gesagt werden, dass der verschlechterte Wärmübergang bei hoher Wärmezufuhr und niedrigen Massenstromdichten auftritt und der verbesserte Wärmeübergang bei niedrigerer Wärmezufuhr und hohen Massenstromdichten. Die hier genannten Erkenntnisse wurden aus sehr vielen Experimenten gewonnen, welche im Folgenden kurz beschrieben werden sollen.

Für das Design eines SCWR besteht ein besonderes Interesse an der Erforschung der

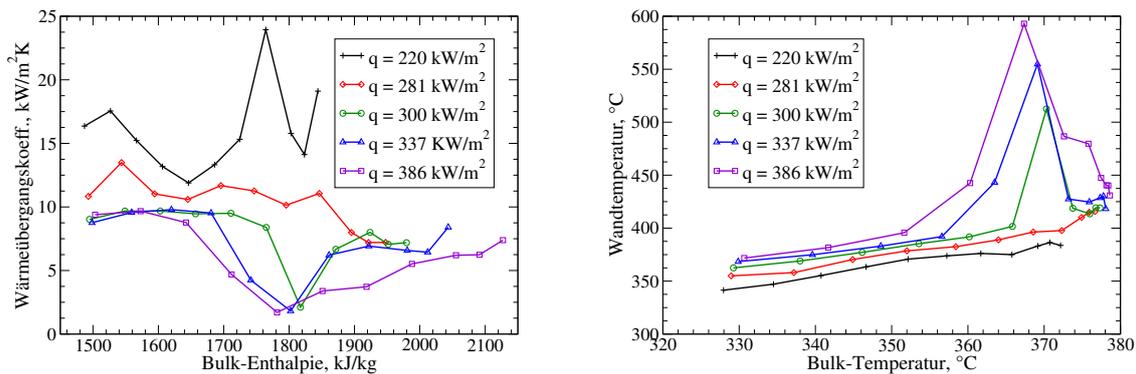


Abbildung 1.9: Wärmeübergangskoeffizienten und zugehörige Wandtemperaturverteilungen bei konstanter Massenstromdichte [167]

genannten Wärmeübergangsphänomene und an der Entwicklung von Verfahren zur Vorhersage des Wärmeübergangskoeffizienten. Hierfür wurden seit den 50er Jahren sehr viele Experimente durchgeführt. Diese waren und sind bis heute immer noch sehr aufwändig und kostenintensiv.

Die meisten Studien verwenden zur Untersuchung des Wärmeübergangs Fluide wie Wasser oder Kohlenstoffdioxid in einfachen runden Rohrgeometrien. Einige wenige Experimente beschäftigen sich jedoch auch mit Ringströmungen, rechteckigen Kanälen oder Rohrbündeln.

Um den Wärmeübergang von Fluiden bei überkritischen Druckbedingungen besser verstehen zu können, soll in dieser Arbeit zunächst eine Zusammenfassung aller bereits geleisteter Arbeiten gegeben werden. Die hierfür gewählten Veröffentlichungen werden dabei wie folgt in vier Kategorien eingeteilt: Übersichtsartikel, Experimente, numerische Untersuchungen und theoretische Studien bzw. empirische Korrelationen.

1.3.1 Übersichtsartikel

Bereits Ende der 60er Jahre wurden wichtige Erkenntnisse der Wissenschaft bezüglich des Wärmeübergangs bei überkritischen Druckbedingungen gesammelt und zusammengefasst. Einen sehr wichtigen Beitrag liefern bis heute die Werke von Jackson et al. [71], [69] und [70]. Er beschreibt detailliert die Eigenschaften von Fluiden bei überkritischen Drücken und klärt die Rolle der Stoffvariationen in Bezug auf den Wärmeübergang. Eine Analyse einer großen Anzahl von Beispielen, welche den verbesserten Wärmeübergang (EHT), den verschlechterten Wärmeübergang bei hohen Wärmestromdichten (DHT), den

Author	Jahr	Schwerpunkt
Jackson [71]	1967	Wärmeübergang, Experimente, Korrelationen
Petukhov1 [137]	1970	Wärmeübergang, Experimente CO ₂ und H ₂ O, Korrelationen
Jackson [69], [70]	1979	Wärmeübergang, Experimente CO ₂ und H ₂ O, Korrelationen
Kirilov [86]	2000	Wärmeübergang, Russische Experimente und theoretische Untersuchungen, Korrelationen
Xu Cheng [25]	2001	Wärmeübergang, Experimente, Korrelationen
Pioro, Duffey [143]	2004	Wärmeübergang, Korrelationen
Pioro, Duffey [142]	2004	Wärmeübergang, Hydraulischer Widerstand
Duffey, Pioro [36]	2005	Wärmeübergang, Experimente CO ₂
Pioro, Duffey [140]	2005	Wärmeübergang, Experimente H ₂ O
Löwenberg, 2007 [111]	2007	Wärmeübergang, Experimente, Korrelationen, Look-up Table

Tabelle 1.2: Übersichtsartikel

Einfluß des Auftriebes und thermoakkustische Effekte untersuchten, tragen zum verbesserten Verständnis bei. Ebenfalls in der Literatur vorgeschlagene Korrelationen werden diskutiert, weiterentwickelt und eine Theorie für das Einsetzen des DHT vorgestellt.

Ähnlich von Bedeutung sind die Werke der Autoren Petukhov [137] und Kirillov [86]. Petukhov verfasste schon im Jahr 1970 einen Bericht zum aktuellen Stand der Technik in Bezug auf den Wärmeübergang bei überkritischen Drücken. Er fasste Arbeiten, welche vornehmlich mit Wasser und CO₂ durchgeführt wurden, als auch theoretische Überlegungen bzw. Korrelationen von mehrere russischen Kollegen zusammen. Einen aktuelleren Stand der Technik bezogen auf russische Experimente und Theorien liefert das zweitgenannte Werk. Es diskutiert des Weiteren einen aktuellen Ansatz einer russischen Version eines SCWRs.

In Canada gelang Pioro und Duffey in den Jahren 2004/05 die Zusammenstellung der bis dahin bedeutendsten Experimente für Wasser und CO₂, den theoretischen Arbeiten hinsichtlich Wärmeübergangskorrelationen und dem hydraulischen Widerstand. Alle Ergebnisse wurden in den Übersichtsartikeln [143], [142], [36] und [140] zusammengefasst. Am Forschungszentrum in Karlsruhe wurden von Cheng et al. [25] und Löwenberg [111] Literaturlauswertungen bezüglich des HPLWR Projektes durchgeführt. Es wurde zusätzlich eine Wärmeübergangstabelle erstellt, welche eine sehr große Anzahl an gesammelten Daten vereint.

Die ausführlichsten Beschreibungen des Wärmeübergangs bei überkritischen Fluiden sind in den Büchern von Pioro [141] und Oka [131] zu finden. Alle genannten Übersichtsartikel wurden in Tabelle 1.2 zusammengefasst.

1.3.2 Experimentelle Untersuchungen

Wie bereits erwähnt wurden seit den 50er Jahren eine große Anzahl an Experimenten durchgeführt, welche zum Ziel hatten, den Wärmeübergang bei überkritischen Druckbedingungen näher zu untersuchen. Eine kleine Auswahl wichtiger älterer Experimente ist in Tabelle 1.3, und aktuelle Experimente in Tabelle 1.4 zusammengefasst.

Author	Fluid	Schwerpunkte der Untersuchung
Shitsman, 1963 [167]	H ₂ O	Wärmeübergang, DHT, Druckoszillationen
Swenson, 1965 [180]	H ₂ O	Wärmeübergang, Einfluß des Druckes
Bishop, 1965 [14]	H ₂ O	Wärmeübergang, DHT, Pfeifton, Korrelation
Shitsman, 1968 [168]	H ₂ O	Wärmeübergang, DHT, erstmalige Vermutung der Turbulenzabhängigkeit, Relaminarisierung
Ackerman, 1970 [1]	H ₂ O	Wärmeübergang, DHT, Druck-, Masse- und Wärmestromdichtabhängigkeiten
Ornatskii, 1971 [133]	H ₂ O	Wärmeübergang, DHT
Glushchenko, 1972 [48]	H ₂ O	Wärmeübergang, Variation Durchmesser des Rohres (klein), Untersuchung bekannter Korrelationen
Yamagata, 1972 [191]	H ₂ O	Wärmeübergang, DHT, horizontale und vertikale Rohre
Lee und Haller, 1974 [104]	H ₂ O	Wärmeübergang, große Rohrdurchmesser, berippte Rohre
Watts und Chou, 1982 [186]	H ₂ O	Wärmeübergang, Mischkonvektion, Auftriebseffekte
Griem, 1995, 1996 [52], [53]	H ₂ O	Wärmeübergang, DHT, berippte Rohre, Korrelation
Petukhov, 1961, 1972 [138]	CO ₂	Wärmeübergang, DHT, Korrelation
Krasnoshchekov, 1964, 1967 [92], [93]	CO ₂	Wärmeübergang, DHT, Korrelation
Hall und Jackson, 1969 [56]	CO ₂	Wärmeübergang, DHT, Auftriebs- und Turbulenzeinflüsse
Bourke, 1970 [15]	CO ₂	Wärmeübergang, DHT
Shiralkar and Griffith, 1970 [166]	CO ₂	Wärmeübergang, DHT, Einfluss künstlicher Wirbeleffekte
Kurganov und Kaptil'ny, 1992-93 [97], [98]	CO ₂	Wärmeübergang, DHT, Strömungs- und Turbulenzuntersuchungen, hydraulischer Widerstand
Komita, 2003 [91]	Freon-22	Wärmeübergang, DHT

Tabelle 1.3: Ausgewählte ältere Experimente

Der zunächst wichtigste Beitrag lieferte M. Shitsman [167] im Jahre 1963. Er untersuchte aufwärtsgerichtete Strömungen mit Wasser und stellte dabei eine plötzliche lokale Verschlechterung des Wärmeübergangs fest. Dieser wurde näher untersucht und mit bekannten Siedephänomenen bei unterkritischen Druckbedingungen in Beziehung gesetzt. Durch eine Steigerung der Wärmezufuhr konnte ein enormer Anstieg der Wandtemperatur festgestellt werden, welcher mit Erhöhung des Massenstroms wieder abnahm. Ebenso konnten bei Versuchen, bei denen der verschlechterte Wärmeübergang auftrat, Druckschwankungen festgestellt werden, welche nach Ansicht von Shitsman durch die starken Stoffwertänderungen verursacht wurden.

Die 1963 begonnenen Experimente wurden 1968 fortgesetzt [168]. Hierbei zeigte eine Variation der Wärmezufuhr eine Veränderung der Intensität aber auch eine Veränderung der Position des verschlechterten Wärmeübergangs. Zusätzlich wurde in dieser Testreihe das Verhalten bei abwärtsgerichteter Strömung näher untersucht und keine außergewöhnlichen Temperaturüberhöhungen festgestellt. Daraus wurde gefolgert, dass Auftriebseffekte eine Turbulenzreduktion bzw. Relaminarisierung verursachen könnten, welche die starken Überhöhungen der Wandtemperaturen hervorrufen.

Ziel der Untersuchungen von Swenson 1965 [180] war es, den Wärmeübergangskoeffizienten bei überkritischen Druckbedingungen mit Hilfe einer angepassten Korrelation beschreiben zu können, da bereits bekannte Korrelationen ungenügende Ergebnisse lieferten. Experimente mit unterschiedlichen Drücken ergaben eine genügend große Basis, für welche die entwickelte Korrelation eine Genauigkeit von 95% erreichte. Zudem wurde festgestellt, dass sie ebenso erfolgreich für CO_2 angewendet werden konnte.

Bishop et al. [14] untersuchten unterschiedliche Rohrgeometrien bei überkritischen Drücken. Als Fluid wurde hierbei ebenfalls Wasser verwendet. Unter bestimmten Strömungszuständen wurde ein Pfeifton festgestellt, der mit einer Überhöhung der Wandtemperatur einherkam. Ähnliche akustische Phänomene wurden bei verschlechtertem Wärmeübergang schon von Goldmann et al. [49] im Jahre 1961 festgestellt. Aufgrund der Geometrieabhängigkeit konnte eine neuartige Korrelation entwickelt werden, welche für ebenfalls 95% der gemessenen Werte übereinstimmte.

Bei den Experimenten von Ackerman et al. [1], welche nachfolgend zu den Untersuchungen von Shitsman 1968 durchgeführt worden waren, wurde ebenfalls das Phänomen des verschlechterten Wärmeübergangs festgestellt, falls die Bulk-Temperatur niedriger und die Wandtemperatur höher wie die pseudokritische Temperatur waren. Fortan wurde dieses Phänomen als Pseudofilmsieden bezeichnet. Eine große Anzahl an Experimenten mit Variation der Wärmezufuhr, des Massenstroms, des Rohrdurchmessers, des Druckes und der Bulk-Temperaturen wurden durchgeführt, um Bedingungen für das Auftreten und die Eigenschaften des Pseudofilmsiedens zu finden. Des Weiteren wurde der Einfluß von berippten Rohren auf den Wärmeübergang untersucht.

Glushchenko et al. [48] führten ebenfalls Experimente durch und verglichen anschließend ihre Daten mit bereits existierenden Korrelationen. Es wurde festgestellt, dass keine der bekannten Korrelationen zufriedenstellende Ergebnisse lieferte. Somit wurde postuliert, dass keine der existierenden Wärmeübergangskorrelationen allgemeingültig waren.

Ebenfalls unter Variation der Parameter Druck, Bulk-Temperatur, Wärmezufuhr und Massenströme wurden 1972 Experimente von Yamagata et al. [191] durchgeführt. Es wurde eine Korrelation für den verbesserten Wärmeübergang entwickelt, welcher sich durch das ungewöhnliche Verhalten des Wärmeübergangskoeffizienten auszeichnet. Ebenfalls das Auftreten des verschlechterten Wärmeübergangs wurde diskutiert.

Viele fossil befeuerten Dampferzeuger wurden auf überkritische Drücke ausgelegt. Deswegen wurden 1974 von Lee und Haller [104] Experimente bezüglich des Wärmeübergangs bei größeren Rohrdurchmessern für glatte und berippte Rohre durchgeführt. Ebenfalls wurden die Bedingungen für das Auftreten des verschlechterten Wärmeübergangs diskutiert und neue Designs für Dampferzeuger vorgeschlagen.

Watts und Chou [186] legten besonderen Wert auf die Untersuchung von Mischkonvektion, wohingegen Griem [52], [53] den Einfluß von Rippen- und Noppenrohren näher untersuchten. Beide stellten eine neue Korrelation auf, welche ihre Ergebnisse repräsentierte.

Ebenfalls sehr wichtige Erkenntnisse lieferten Untersuchungen unter Verwendung anderer Fluide, wie z.B. CO₂ oder Freon-22, vgl. Tab. 1.3. Da diese bei wesentlich niedrigeren Drücken durchgeführt werden konnten, war der (Kosten-) Aufwand wesentlich niedriger im Vergleich zu Experimenten mit Wasser. Auch für diese wurden erfolgreich Korrelationen entwickelt und auf Wasser übertragen. Da die sich daraus ergebenden Erkenntnisse ähnlich zu denen der Wasserexperimente waren, soll im weiteren Verlauf auf eine detaillierte Beschreibung verzichtet werden. Es soll lediglich die Spanne der untersuchten Parameter der Experimente aufgezeigt werden.

- Parameterspanne der wichtigsten Experimente für Wasser nach [140]:

p: 22.5 - 41.3 MPa
G: 50 - 10000 kg/m²s
 \dot{q} : 0.1 - 9.4 MW/m²
D: 1.2 - 38 mm
 T_b : \leq 580 °C

- Parameterspanne der wichtigsten Experimente für CO₂ nach [36]:

p: 7.25 - 12 MPa
G: 1.9 - 7520 kg/m²s
 \dot{q} : 0.5 - 2600 kW/m²
D: 2.0 - 29 mm
 T_b : \leq 212 °C

Die wichtigsten Schlussfolgerungen können wie folgt zusammengefasst werden:

- Die Mehrheit der Experimente, welche die Untersuchung des Wärmeübergangs für Fluide bei überkritischen Druckbedingungen zum Ziel hatten, wurden für Strömungen in runden, vertikal oder horizontal ausgerichteten Rohren, durchgeführt. Nur wenige Studien berücksichtigten andere Geometrien, wie etwa Ringspalte, eckige Rohre oder Rohrbündel.
- Es gibt drei Arten des Wärmeübergangs: Zum Einen den „normalen“ Wärmeübergang, ferner den verschlechterten Wärmeübergang (DHT), charakterisiert durch kleinere Wärmeübergangskoeffizienten in Teilen der Teststrecke im Vergleich zu

„normalen“ Wärmeübergang und den verbesserten Wärmeübergang (EHT), welcher sich durch höhere Werte des Wärmeübergangskoeffizienten im Vergleich zu „normalem“ Wärmeübergang auszeichnet.

- Das Phänomen des DHT tritt bei hohen Wärmestromdichten und niedrigen Massenstromdichten auf und steht direkt mit der Turbulenzproduktion in Wandnähe in Zusammenhang.
- Der Wärmeübergang wird maßgeblich von der Strömungsrichtung beeinflusst.
- Unter bestimmten Bedingungen entstehen Strömungsinstabilitäten bzw. Druckoszillationen.
- Es gibt noch keine allgemeingültige Korrelation, welche alle Phänomene des Wärmeübergangs berücksichtigt.

Aktuell werden international starke Anstrengungen unternommen um die vorhandene Datenbasis zu erweitern und zuverlässige Daten für ein Design eines SCWR zu Verfügung zu stellen, vgl. Tab. 1.4. Insbesondere sei auf die Experimente von Licht et al. [109] hingewiesen, da hier besonderer Wert auf die Auswertung der Geschwindigkeitsfelder gelegt wurde. Somit konnte dieses Experiment als Datenbasis für weitergehende numerische Untersuchungen genutzt werden, welche ebenfalls von Licht et al. durchgeführt wurden. Im nächsten Kapitel wird noch intensiver auf die bisher erlangten Ergebnisse solcher numerischer Studien eingegangen.

Land	Author	Fluid	Schwerpunkte der Untersuchung
USA	Licht [109], [108]	H ₂ O	Wärmeübergang, DHT, Vergleich mit existierenden Korrelationen und numerischen Untersuchungen
Russland	Kirillov [87], [88]	H ₂ O, Freon-22	Wärmeübergang, DHT
Japan	Oka [132], Mori [124], [123]	Freon-22	Wärmeübergang, DHT, Rohr bzw. Rohrbündeluntersuchungen
Korea	Kim [79], [81]	CO ₂	Wärmeübergang, DHT, Druckverlust, Vergleich existierender Korrelationen
	Bae [8], [9]	CO ₂	Wärmeübergang, DHT, Vergleich existierender Korrelationen
Großbritannien	Fewster [41]	CO ₂	Wärmeübergang, DHT
China	Jiang [74], [73]	CO ₂	Wärmeübergang bei kleinen Reynoldszahlen

Tabelle 1.4: Ausgewählte aktuelle Experimente (2004 - 2011)

1.3.3 Numerische Untersuchungen

Experimentelle Studien des turbulenten Wärmeübergangs bei überkritischen Drücken sind sehr aufwendig und eine Auflösung der Grenzschicht, welche für das Verständnis des Phänomens des verschlechterten Wärmeübergangs eine große Rolle spielt, kann nicht

vollständig gewährleistet werden. Des Weiteren werden keine bzw. nur sehr wenige Daten bezüglich Turbulenzproduktion und Dissipation bereit gestellt. Direkte Numerische Simulationen bieten hingegen die Möglichkeit detaillierte Informationen des Strömungs- und Temperaturfeldes zur Verfügung zu stellen um den Wärmeübergang bei überkritischen Druckbedingungen besser zu verstehen. Hierbei werden alle Skalen der turbulenten Schwankungen numerisch in Raum und Zeit aufgelöst, und nicht modelliert.

Bae et al. [4] wandte diese Methode an, um speziell die Eigenschaften der Turbulenz in Strömungen bei überkritischen Druckbedingungen mit Wärmeübergängen in vertikalen Rohren unter Zwangs- und Mischkonvektionsbedingungen zu untersuchen. Es wurde gezeigt, dass starke Änderungen des Turbulenzgrades für lokale Überhöhungen der Wandtemperatur verantwortlich sind. Des Weiteren wurde durch die statistische Auswertung von Turbulenz- und den entsprechenden Auftriebsdaten ein Zusammenhang hergestellt, um deren Rolle für Strömungen bei überkritischen Drücken zu klären. Insbesondere die turbulente Wärmestromdichte wurde als Größe ausgemacht, welche die stärkste Abhängigkeit unter Einfluß des Auftriebes aufweist, und somit die starken Änderungen der Wandtemperatur hervorruft. In den darauffolgenden Untersuchungen [5] wurden die Geschwindigkeitsfelder einer Ringspaltströmung bei überkritischen Drücken näher untersucht und signifikante Änderungen bei verschlechtertem Wärmeübergang festgestellt. Darüberhinaus wurden die Ergebnisse mit der Korrelation von Krasnoshchekov und Protopopov [92] verglichen und gute Übereinstimmungen festgestellt. Innerhalb des Bereiches, für welchen gilt $T_b \leq T_{pc} \leq T_w$, überschätzte die Korrelation jedoch die Wandtemperatur. Eine direkte numerische Simulation liefert die detailliertesten Informationen, jedoch der Aufwand für solch eine Simulation ist extrem hoch und bisher nur auf sehr einfache Geometrien beschränkt.

Weitaus weniger aufwendig sind Grobstruktursimulationen oder auch Large Eddy Simulationen (LES) genannt, welche ebenfalls detaillierte Daten der Turbulenz bereitstellen können. Durch den wesentlich niedrigeren Berechnungsaufwand ist für ingenieurtechnische Anwendungen jedoch die sogenannte Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) Methode von größerem Interesse. Diese ist sehr viel weniger aufwändig im Vergleich zu den zwei erst genannten und zeichnet sich zusätzlich durch ihre Stabilität aus.

Die Anwendung dieser Methode auf Strömungen bei überkritischen Drücken ist jedoch problematisch, da die gesamte Turbulenz, sowohl Produktion als auch Dissipation, modelliert wird. Durch die starken Stoffwertänderungen und den daraus resultierenden starken Auftriebs- und Beschleunigungseffekten in Wandnähe, versagen die meisten Modelle. Des Weiteren ist die Anwendung einer konstanten turbulenten Prandtl Zahl, wie sie gewöhnlich angewendet wird, sehr fragwürdig, da auch die molekulare Prandtl Zahl stark variiert. Im folgenden sollen nun Erkenntnisse zusammengefasst werden, welche durch die Anwendung der unterschiedlichen Modelle erzielt wurden.

In Korea simulierten Kim et al. [85] eine aufwärtsgerichtete Strömung in einem beheizten Rohr bei überkritischen Druckbedingungen mit Hilfe des kommerziellen Codes FLUENT. Als Referenz wurde hierbei das Experiment von Yamagata [191] gewählt. Es wurden unterschiedliche Turbulenzmodelle getestet, um ihre Anwendbarkeit auf Strömungen bei überkritischen Drücken zu untersuchen. Es wurde festgestellt, dass bei hohen Wärmestromdichten die Low Reynolds Modelle, bei denen der wandnahe Bereich aufgelöst wird, die Wandtemperaturen sehr stark überschätzten und die High Reynolds Modelle, welche Wandfunktionen zur Beschreibung des wandnahen Gebietes verwenden, die Wandtemperaturen unterschätzten. Es wurde gefolgert, dass Anpassungen der Transportgleichungen

vorgenommen werden müssen, um die Vorhersage der Wandtemperaturen zu verbessern. Die Arbeiten an numerischen Studien wurden 2005 von Seo et al. [160] fortgesetzt. Unter Verwendung des standard $k-\epsilon$ Modells mit Hilfe der Wandfunktion von Launder und Spalding [102] wurden gute Übereinstimmungen bei hohen Massenstromdichten erreicht, bei denen Auftrieb keine Rolle spielt. Jedoch konnte das Phänomen des verschlechterten Wärmeübergangs nicht erfasst werden.

In Bezug auf das chinesische SCWR Projekt an der Jiao Tong Universität in Shanghai, wurden erste numerische Simulationen von Cheng et al. [23] mit Hilfe des kommerziellen Codes CFX 5.6 durchgeführt. Ziel war es erste Erfahrungen bezüglich des Wärmeübergangs bei überkritischen Drücken zu sammeln. Innerhalb der Simulationsreihe wurden der Einfluss verschiedener Geometrien, unterschiedlicher Netze und Turbulenzmodelle näher untersucht. Die zugrundeliegenden experimentellen Daten stammten ebenfalls von Yamagata [191]. Das Resultat dieser Studien war die Empfehlung des SSG Reynolds Stress Modells [173], da es am besten die anisotropen Eigenschaften der Turbulenz erfasste. Auf Basis dieser Arbeit wurde von Gu et al. [55] der Wärmeübergang in verschiedenen Unterkanalgeometrien untersucht. Ziel war die Analyse des Einflusses der turbulenten Durchmischung bei unterschiedlichen p/d (Abstand zu Durchmesser) Verhältnissen. Wen et al. [188] stellte bei weiteren Simulationen und unter Verwendung verschiedener Low Reynolds Modelle fest, dass das V2F von Behnia et al. [13] und das SST Modell von Menter [116] zwar die Verschlechterung des Wärmeübergangs überschätzten, aber die qualitativ besten Resultate lieferte. Diese Erkenntnisse wurden ebenfalls durch Untersuchungen von Zhao et al. [197] bestätigt, welche ein Wärmeübergangsexperiment [74] nachrechneten, das an der Universität von Peking durchgeführt worden war.

Numerische Wärmeübergangsstudien wurden ebenfalls in Japan bezüglich des dortigen SCWR Programms durchgeführt. Diese umfassten ebenfalls Untersuchungen unterschiedlicher Turbulenzmodelle für runde Rohre und Brennelementbündel unter Verwendung der Software Star-CD. Yang et al. [192] stellte bei Vergleichen mit experimentellen Daten fest, dass das Zweischicht-Modell von Hassid und Porreh [58] die besten Ergebnisse lieferte. Zudem wurde eine Abhängigkeit des Temperaturgradienten an der Wand vom verwendeten p/d Verhältnis festgestellt. Als Konsequenz dieser Erkenntnisse und zur Vermeidung dieser Temperaturspitzen wurden Spacer vorgeschlagen, welche den Turbulenzgrad steigern sollten. Dies wurde bei späteren Untersuchungen von Gou et al. [50], bezogen auf das Super Fast Reactor Programm, bestätigt. Er bevorzugte dabei das nicht lineare High Reynolds Turbulenzmodell von Speziale [172]. Bei Untersuchungen mit dem hauseigenen Code ACE-3D wurde von Misawa et al. [118] festgestellt, dass vorhandene Modelle stark verbessert werden müssen, damit sie den verschlechterten Wärmeübergang vorhersagen können. Nachfolgende Modifikationen [119] lieferten vielversprechende Ergebnisse.

Das Turbulenzmodell von Speziale wurde ebenfalls erfolgreich von Shang et al. [162], [161] für Wärmeübergangsstudien in Großbritannien angewendet. Mit Hilfe der Software Star-CD wurden vertikale und horizontale Rohr- und Rohrbündelströmungen untersucht. Die gewonnenen Erkenntnisse sind für das SCWR sowie für das kanadische CANDU Programm von Nutzen. Numerische Studien betreffend den Wärmeübergang bei überkritischen Drücken begannen in Großbritannien jedoch schon wesentlich früher. Die bekanntesten wurden dabei von He et al. [61], [60], [59] durchgeführt. 2004 wurde ein Experiment der Universität Manchester als Referenz verwendet [187], um verschiedene Low Reynolds Modelle zu testen. Die meisten Modelle erfassten die starken Auftriebseffekte, jedoch in der Intensität unterschieden sie sich sehr. Bei Nachrechnungen des Experimentes

von Fewster [40] im Jahre 2008 bestätigten sich die gewonnenen Erkenntnisse. Der Einfluss des Auftriebes auf die Turbulenzproduktion und -dissipation wurde als entscheidender Faktor angenommen, um den Wärmeübergang bei überkritischen Drücken vorherzusagen zu können. Da eine direkte numerische Simulation eine sehr viel größere Basis an Turbulenzdaten zur Verfügung stellt, wandte man den schon zuvor genutzten In-House Code SWIRL an, um diese nachzurechnen. Anhand der Resultate konnte man eine Einteilung der verwendeten Low Reynolds Modelle in zwei verschiedene Gruppen vornehmen. Gruppe 1 bestand aus Modellen, dessen Dämpfungsfunktionen von Variablen abhängig waren, die sehr stark auf Auftriebseffekte reagierten, wie z.B. die Dichte. Diese überschätzten die Laminarisierung und den verschlechterten Wärmeübergang. Die Dämpfungsfunktionen der Modelle von Gruppe 2 basierten nicht auf solchen Variablen. Diese lieferten bessere Ergebnisse unter Zwangskonvektionsbedingungen, insbesondere das V2F Modell. Jedoch für stark Auftriebsbehaftete Fälle versagten alle Turbulenzmodelle. Dies wurde als eine Folge der als konstant angenommenen turbulenten Prandtl Zahl gesehen. Weitere numerische Untersuchungen fanden im Rahmen des europäischen HPLWR Projektes statt [135], [200]. Das SST $k-\omega$ Modell wurde als das Modell indentifiziert, welches die vielversprechendsten Ergebnisse lieferte [199]. Es traten jedoch ähnliche Schwierigkeiten bei stark auftriebsbehafteten Strömungen auf, wie bei den zuvor genannten Modellen. In einer kanadischen Studie von Y. Zhang et al. [196] wurden vertikale und insbesondere horizontale Rohrströmungen numerisch untersucht, um das thermohydraulische Verhalten bei überkritischen Fluiden besser zu verstehen. Bei einem Vergleich von 6 verschiedenen Turbulenzmodellen mit den experimentellen Daten von Yamagata et al. [191] wurde festgestellt, dass das Reynolds Stress Modell die besten Ergebnisse liefert. Weitere Untersuchungen bezüglich des kanadischen fortgeschrittenen CANDU Projektes wurden von B. Zhang et al. [195] durchgeführt. Hierbei wurde für horizontale Rohrströmungen das standard $k-\epsilon$ Modell mit verbesserter Wandauflösung als Basis für weitere Studien empfohlen.

Zusammenfassend lässt sich folgendes feststellen:

- Das Verhalten bei „normalem“ Wärmeübergang kann von einigen Modellen gut wiedergegeben werden
- Keines der untersuchten Turbulenzmodelle liefert zufriedenstellende Resultate bei verschlechtertem Wärmeübergang
- Es gibt bisher lediglich Empfehlungen für eine Basis für die Neuentwicklungen von Modellen, jedoch noch keine angepassten Modelle
- Turbulenzmodelle liefern für verschiedene Experimente oftmals unterschiedliche Resultate
- Je verwendeter Software gibt es unterschiedliche Empfehlungen von Modellen

Im Gegensatz zu der großen Anzahl an Simulationen, welche mit der RANS Methode durchgeführt wurden, gibt es bisher nur extrem wenige in der Literatur bekannten Grobstruktursimulationen (LES), welche sich mit dem Wärmeübergang bei überkritischen Drücken auseinandersetzen, vgl. [125]. Dies könnte zum Einen mit dem höheren programmiertechnischen Aufwand, zum Anderen mit dem hohen Berechnungsaufwand zu tun haben. Diese Lücke soll mit Hilfe dieser Arbeit geschlossen werden. Hauptziel ist

Aussagen über die ingenieurstechnische Anwendung der LES Methode machen zu können.

Ebenso wie für die Verwendung eines bestimmten Turbulenz- oder Feinstrukturmodells, gibt es noch keine exakte Korrelation, welche das Einsetzen des verschlechterten Wärmeübergangs vorhersagen kann. Auf diese Problematik soll im nächsten Kapitel näher eingegangen werden.

1.3.4 Vorhersage des Wärmeübergangs (Korrelationen)

Der Wärmeübergang ist, wie bereits erwähnt, stark abhängig von den temperaturabhängigen Stoffgrößen, wodurch verschiedene Wärmeübergangsphänomene, wie etwa der verschlechterte Wärmeübergang, verursacht werden. Dies impliziert große Anforderungen an Korrelationen, die eine möglichst exakte Vorhersage des Wärmeübergangs gewährleisten sollen. Diese, meist empirisch hergeleiteten Korrelationen, können für konvektive Strömungen bei überkritischen Drücken in drei verschiedene Gruppen eingeteilt werden. Die erste Gruppe besitzt eine Form, welche vergleichbar zu der bekannten Dittus-Boelter Korrelation ist. Sie lautet,

$$Nu = A Re^{C_1} Pr^{C_2} \left(\frac{\rho_w}{\rho_b} \right)^{C_3} \left(\frac{\bar{c}_p}{c_{pb}} \right)^{C_4} \left(\frac{\mu_w}{\mu_b} \right)^{C_5} \left(\frac{\lambda_w}{\lambda_b} \right)^{C_6} \quad (1.5)$$

wobei die Variablen A und $C_1 - C_6$ auch von den Stoffwerten abhängig sein können. Die Indizes w und b stehen hierbei für die Stoffwerte an der Wand w bzw. im Bulk b . Als eine der bekanntesten dieser Art sei die Korrelation von Bishop [14] erwähnt, welche zusätzlich die Eigenschaften der Geometrie berücksichtigt. Des Weiteren soll auf die Jackson-Korrelation [69] hingewiesen werden, da sie die drei Regime, also den verschlechterten, den normalen und den verbesserten Wärmeübergang, jeweils gesondert behandelt. Eine weitere Form der Wärmeübergangskorrelation wird von Petukhov [137] wie folgt vorgeschlagen:

$$Nu = Nu_0 \left(\frac{\bar{c}_p}{c_{pw}} \right)^m \left(\frac{\rho_l}{\rho_w} \right)^n \quad (1.6)$$

mit

$$Nu_0 = \frac{(\xi/8) Re Pr}{k + 12.7 \sqrt{\xi/8} (Pr^{2/3} - 1)} \quad (1.7)$$

wobei $\xi = (1.82 \cdot \log(Re_b) - 1.64)^{-2}$. Die Variable k kann hierbei abhängig von Reynolds und Prandtl Zahl wie folgt bestimmt werden [12]: $k = 1.07 + 900/Re - 0.63/(1 + 10 \cdot Pr)$. Weitere Beispiele dieser Art von Korrelation sind die von Grass et al. [51] und Razumovskiy et al. [150].

Die letzte Klasse der Wärmeübergangskorrelationen wurde zuerst von Watts und Chou [186] vorgeschlagen. Sie bindet zusätzlich Auftriebs- und Beschleunigungseffekte, verursacht durch die Erwärmung des Fluids, ein, welche in Form eines Faktors $f(Bu)$ widergegeben werden.

$$Nu = A Re^{C_7} Pr^{C_8} \left(\frac{\rho_w}{\rho_b} \right)^{C_9} f \left[\frac{\overline{Gr}_b}{Re_b^{2.7} Pr_b^{0.5}} \right] \quad (1.8)$$

Abhängig vom neu eingeführten Parameter $Bu = \overline{Gr}_b Re_b^{2.7} / (\overline{Pr}_b^{0.5})$ wurden drei unabhängige Wärmeübergangskorrelationen für normalen, verbesserten und verschlechterten Wärmeübergang eingeführt. Weitere bekannte Korrelationen dieser Art wurden von Komita et al. [91] und Bae et al. [9] entwickelt.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass jede Form der Korrelation sowohl Vor- als auch Nachteile haben kann, da sie jeweils von einem eigenständigen oder einigen wenigen Experimenten mit beschränktem Parameterbereich abgeleitet wurden. Des Weiteren fällt auf, dass im Verlauf der letzten 50 Jahre die Anzahl der abhängigen Variablen der Korrelationen immer mehr anstieg und somit die Gleichungen immer komplizierter wurden. Dies hatte jedoch nicht immer positive Auswirkungen auf die Vorhersage des Wärmeübergangs. Um dem entgegenzuwirken wurde von Cheng et al. [26] eine vereinfachte Korrelation auf Basis der Dittus-Boelter Gleichung $Nu_b = A Re_b^{C_1} Pr_b^{C_2} F$ vorgeschlagen, wobei der Korrekturfaktor $F = \min(F_1, F_2)$ ausschließlich von der sogenannten Beschleunigungszahl $\pi_A = (\beta q)/(c_p G)$ wie folgt abhängig ist:

$$F_1 = 0.85 + 0.776 (\pi_A \cdot 10^{-3})^{2.4} \quad , \quad F_2 = \frac{0.48}{(\pi_A \cdot 10^3)^{1.55}} + 1.21 \left(1 - \frac{\pi_A}{\pi_{A,pc}} \right) \quad (1.9)$$

Bei einem Vergleich mit experimentellen Daten von Herkenrath et al. [62] konnte eine sehr gute Übereinstimmung bei der Vorhersage des Wärmeübergangs erzielt werden. Des Weiteren konnte festgestellt werden, dass die Korrelationen von Cheng, Griem und Jackson, bezogen auf eine große Anzahl an Experimenten, die exaktesten Vorhersagen treffen. Weitere Vergleiche von Korrelationen sind in Bae et al. [7] zu finden.

Es bleibt jedoch festzuhalten, dass alle Korrelationen in der Nähe des pseudokritischen Punktes die größten Abweichungen haben, insbesondere bei Bedingungen, für welche der verschlechterte Wärmeübergang (DHT) auftreten kann. Diese Problematik versuchte Jackson et al. [68] in seiner neuesten Arbeit zu berücksichtigen und entwickelte die bisher aktuellste Korrelation.

1.3.5 Kriterien für das Auftreten des DHT

Für bestimmte Verhältnisse von Masse- zu Wärmestromdichte kann eine starke Reduktion des Wärmeübergangskoeffizienten auftreten. Dieses Phänomen wird, wie bereits erwähnt, als Verschlechterung des Wärmeübergangs (DHT) bezeichnet und wird hauptsächlich durch Auftriebs- und Beschleunigungseffekte verursacht. Es ist jedoch sehr schwierig eine allgemeingültige Grenze festzulegen, welche das Einsetzen dieses Phänomens beschreibt. Gemeinhin wird hierfür das Verhältnis von Wärmeübergangskoeffizient (α) zu einem Referenzwert (α_0) verwendet, etwa dem aus der Dittus-Boelter Korrelation berechneten Wärmeübergangskoeffizient. Die somit festgelegte Grenze liegt bei

$$\frac{\alpha}{\alpha_0} = 0.3 \quad (1.10)$$

Yamagata et al. [191] und Styrikoviich et al. [178] schlugen anhand ihrer experimentellen Daten für unterschiedliche Geometrien die folgenden Beziehungen zwischen Masse (G)-

und Wärmestromdichte (\dot{q}) für das Einsetzen des DHT vor:

$$\dot{q}_Y = 200 \cdot G^{1.2} \quad (1.11)$$

$$\dot{q}_{St} = 580 \cdot G \quad (1.12)$$

Auf Basis weiterer Untersuchungen des Auftriebeffektes konnte Jackson et al. [69] eine auch von den Stoffwerten abhängige Korrelation angeben:

$$\frac{\dot{q}_w}{\rho_b G} \left(\frac{\partial \rho}{\partial h} \right)_{p,b} \left(\frac{\mu_w}{\mu_b} \right) \left(\frac{\rho_w}{\rho_b} \right)^{0.5} \frac{1}{Re_b^{0.7}} \geq C \quad (1.13)$$

Eine auf Basis des Beschleunigungseffektes hergeleitete Korrelation für das Einsetzen des DHT wurde von Petukhov et al. [139] bestimmt:

$$\dot{q} \approx 0.187 \cdot f \cdot \left(\frac{c_p}{\beta} \right)_{pc} \cdot G \quad (1.14)$$

Jackson et al. [69] legten zudem eine Bedingung fest, ab wann der Auftrieb den Wärmeübergang nicht mehr beeinflusst. Diese lautet für vertikale Rohrströmungen:

$$\frac{\overline{Gr}_b}{Re_b^{2.7}} < 10^{-5} \quad (1.15)$$

und für horizontale Rohrströmungen:

$$\frac{\overline{Gr}_b}{Re_b^{2.7}} < 10^{-3} \quad (1.16)$$

Schon zwei Jahre zuvor analysierte Protopopov [149] experimentelle Wärmeübergangsdaten von Wasser und CO₂ in beheizten vertikalen Rohrströmungen und schlug ein ähnliches Kriterium für die Vernachlässigung des Auftriebseffektes wie folgt vor:

$$\frac{\overline{Gr}_\rho}{Re_b^2} < 0.01 \quad (1.17)$$

Unter Berücksichtigung neuester Kenntnisse von Jackson [68] stammt das derzeit aktuellste Kriterium, das die Grenze der Vernachlässigung des Auftriebseffektes beschreibt. Diese ist abhängig von der sogenannten Auftriebszahl Bo*:

$$Bo_b^* = \frac{Gr_b^*}{Re_b^{3.425} Pr_b^{0.8}} < 4 \cdot 10^{-7} \left(\frac{\overline{Pr}}{Pr_b} \right)^{0.4} \quad (1.18)$$

Die Grashof Zahl ist dabei definiert als $Gr_b^* = g\beta_b q_w d^4 / \lambda_b \nu_b^2$ und ist abhängig von der Gravitationskonstanten g , dem Wärmeausdehnungskoeffizienten β , dem Wandwärmestrom \dot{q}_w , dem Durchmesser d , der Wärmeleitfähigkeit λ und der kinematischen Viskosität ν . Unterhalb dieser Grenze kann von Zwangskonvektionsbedingungen, oberhalb von Mischkonvektionsbedingungen ausgegangen werden, da hier der Einfluß des Auftriebes stetig zunimmt.

1.4 Zielsetzung und Aufbau der Arbeit

Das Kühlwasser eines SCWR durchläuft bei der Erwärmung im Reaktorkern die pseudokritische Temperatur. Die somit starken Stoffwertänderungen können lokale Verschlechterungen des Wärmeübergangs und hohe Temperaturgradienten hervorrufen, was hinsichtlich Sicherheit und Langlebigkeit eines solchen Systems vermieden werden muss. Daher ist es von großer Wichtigkeit den Wärmeübergang, insbesondere das Phänomen des verschlechterten Wärmeübergangs, bei überkritischen Druckbedingungen näher zu untersuchen. Um die Details und Mechanismen des DHT besser zu verstehen, kommt im Zuge dieser Arbeit die numerische Strömungsmechanik zum Einsatz, deren Grundlagen in den beiden folgenden Kapiteln näher erläutert wird.

Erstes Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung einer Methodik, um die starken Stoffwertänderungen in den Erhaltungsgleichungen zu berücksichtigen. Anschließend sollen erste Untersuchungen auf Basis der RANS-Methode, vgl. Kap. 2, durchgeführt werden. Hierbei wird zunächst der gewählte Ansatz für eine einfache Rohrströmung unter isothermen Bedingungen validiert. Anschließend erfolgt eine weitere Validierung der Methodik am Beispiel einer stark erhitzten Rohrströmung für Luft unter Atmosphärendruckbedingungen. Die somit gewonnenen Erkenntnisse werden für die Anwendung des Ansatzes auf überkritische Druckbedingungen genutzt. Als Benchmark steht hierfür eine direkte numerische Simulation zur Verfügung, welche sehr detaillierte Daten bezüglich der Turbulenz zur Verfügung stellt. Ziel ist es, auf Basis der Ergebnisse ein verbessertes, an überkritische Druckbedingungen angepasstes Turbulenzmodell zu entwickeln, welches die Eigenschaften des DHT wiedergeben kann.

Der zweite und Hauptteil dieser Arbeit ist die Anwendung des entwickelten Ansatzes unter Verwendung der LES-Methode zur Untersuchung des Wärmeübergangs bei überkritischen Drücken. Für Simulationen bei diesen Druckzuständen existieren noch keine Regeln bzw. best practice guidelines. Zur Validierung der entwickelten Methode soll zunächst eine einfache beheizte Kanalströmung untersucht werden. Nach Prüfung der Ergebnisse erfolgt die Anwendung der Methode auf überkritische Druckbedingungen. Die Basis für diese Untersuchungen bildet die gleiche direkte numerische Simulation wie bei der RANS-Studie. Hierbei soll gesondert auf Zwangs- und Mischkonvektionsbedingungen eingegangen werden. Ziel ist es die Haupteinflüsse auf die Wandtemperatur auszuarbeiten, da sie die entscheidende Größe etwa bei sicherheitstechnischen Fragestellungen für SCWR Reaktoren ist. Des Weiteren bleibt die Frage zu beantworten, ob die Verschiebung der Modellierungsproblematik auf die kleinen Skalen überhaupt sinnvoll ist. Hierfür sollen verschiedene Feinstrukturmodelle untersucht und anschließend ein neuer Ansatz für eine variable Feinstruktur Prandtl Zahl entwickelt und angewendet werden. Abschließend sollen etwaige Verbesserungsvorschläge für Nachfolgeuntersuchungen angegeben und erste Aussagen für die Möglichkeit einer ingenieurtechnischen Anwendung der Methode gemacht werden.

2 Turbulente Strömungen

Dieses Kapitel fasst die theoretischen Grundlagen zusammen, die für die Simulation turbulenter Strömungen benötigt werden. Ausgehend von der allgemeinen Beschreibung der Turbulenz, soll im Folgenden auf die zugrundeliegenden Erhaltungsgleichungen und den Simulationsansätzen DNS, RANS und LES näher eingegangen werden. Für detailliertere Informationen zu den jeweiligen Ansätzen soll auf die dieser Arbeit zugrundeliegende Fachliteratur [129],[39],[42] und [20] verwiesen werden.

2.1 Turbulenz

Die Eigenschaften der Turbulenz unterliegen keiner exakten Definition. Sie wird stattdessen mit Hilfe mehrerer Besonderheiten charakterisiert. Beispielhaft zeichnet sich die Turbulenz dadurch aus, dass ihre Bewegung auf unterschiedlichen räumlichen und zeitlichen Skalen stattfindet. Dies bedeutet, dass sich unterschiedlich große Wirbel ausbilden können, welche miteinander interagieren. Darüberhinaus ist sie irregulär und chaotisch, was die Sensitivität gegenüber Anfangs und Randbedingungen aufzeigt. Eine weitere Eigenschaft ist die Dreidimensionalität der Turbulenz bzw. die starke Zeitabhängigkeit der wirbelbehafteten Strömung. Des Weiteren nimmt die turbulente kinetische Energie mit der Zeit ab, falls keine Energie dem System von außen aufgeprägt wird. Dies wird als dissipative Eigenschaft der Turbulenz verstanden. Ein letzter, sehr starker Effekt bildet die durch die turbulenten Fluktuationen verursachte Vermischung bzw. Diffusion. Beispiele turbulenter Strömungen unterschiedlich großer Skalen sind in Abb. 2.1 und Abb. 2.2 gezeigt.



Abbildung 2.1: Durch Wirbelstürme verursachte turbulente Atmosphäre des Jupiter [190]

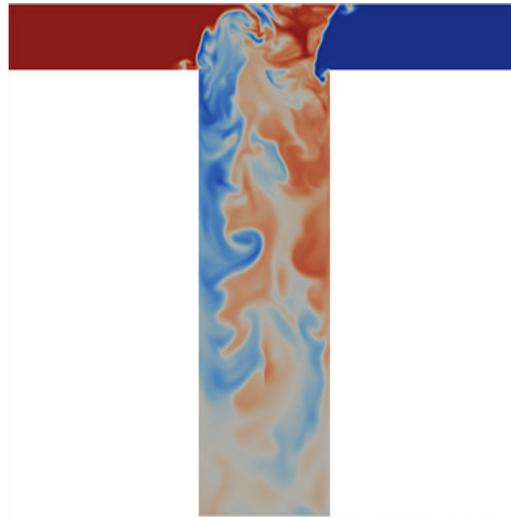


Abbildung 2.2: Turbulente Vermischung von warmen und kaltem Fluid [94]

Anzumerken bleibt, dass es keine allgemeingültige Definition der Turbulenz gibt, jedoch verschiedene Merkmale, abhängig von der Geometrie und den Randbedingungen, stärker in Erscheinung treten. Weitere Beschreibungen der Charakterisierung turbulenter Strömungen finden sich beispielsweise in Hinze [65] und Lesieur [106] wieder.

Turbulenz entwickelt sich ausschließlich in rotationsbehafteten Strömungen. Dieser Mechanismus wird mit Hilfe kleiner Störungen in Gang gesetzt, die sich anschließend zu großen Wirbelbewegungen weiterentwickeln (Transition). Dies ist jedoch nur möglich, falls der Einfluß der Viskosität nicht zu groß ist, bzw. die Viskosität nicht die einsetzenden Wirbelbewegungen abdämpft. Die Grenze dieses Einflusses kann mit Hilfe der Reynoldszahl, vgl. Glg. 1.4, beschrieben werden, welche, wie bereits erwähnt, das Verhältnis zwischen Trägheitskräften und Reibungskräften angibt. Bei kleinen Reynoldszahlen dominieren die viskosen Kräfte, was bedeutet, dass einer laminaren Strömung unterliegende Störungen keinen Einfluß haben, bzw. diese sofort wieder gedämpft werden. Im Gegensatz dazu dominieren bei hohen Reynoldszahlen die Trägheitskräfte. Hierbei verursachen kleine Störungen der Strömung eine Kettenreaktion, bzw. ein Anwachsen großskaliger Bewegung, was gemeinhin als Turbulenzproduktion verstanden wird. Dem Umschlagpunkt einer laminaren in eine turbulente Strömung ist normalerweise keine bestimmte Reynoldszahl zuzuordnen. Eine Ausnahme bildet hierbei die Rohrströmung. Der Richtwert für die kritische Reynoldszahl liegt bei etwa $Re = 2300$.

Die nach einer Störung entstehenden Wirbel bei hohen Reynoldszahlen zerfallen anschließend wieder in feinere, zufällige Strukturen. Dieser Prozess von der Entstehung bis hin zur Vernichtung turbulenter Strukturen wird in der Theorie von Kolmogorov [90] zusammengefasst. Zunächst soll die Grundlage dieser Theorie genauer erläutert werden. Der Austausch kinetischer Energie findet nicht nur zwischen den verschiedenen Skalen, also zwischen verschiedenen großen Wirbeln, statt, sondern auch zwischen der mittleren Strömung und den fluktuierenden Anteilen, und den Komponenten des Geschwindigkeitsvektors. Um insbesondere den Austausch turbulenter kinetischer Energie zwischen den Skalen

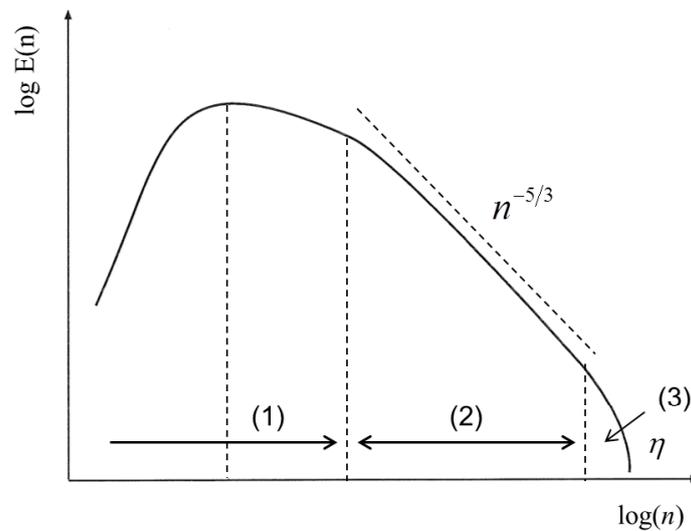


Abbildung 2.3: Spektrum der turbulenten kinetischen Energie

untersuchen zu können, müssen die anderen Effekte durch spezielle Wahl der Bedingungen ausgeschaltet werden. Dies geschieht mit Hilfe der Annahme isotroper Turbulenz, was bedeutet, dass alle statistische Eigenschaften der Strömung, wie etwa die mittleren Geschwindigkeitsschwankungen im gesamten Strömungsfeld gleich und richtungsunabhängig sind. Insbesondere die Large Eddy Simulation (LES - Grobstruktursimulation) [42] unterliegt dieser Annahme, da sie auf dem Modell der Energiekaskade beruht. Hierbei werden die großen Skalen, also die großen, anisotropen Wirbel, voll aufgelöst und die kleineren Wirbel, die mit abnehmender Größe als isotrop angesehen werden können, modelliert. Kolmogorovs Theorie besagt, dass der Verlauf der turbulenten kinetischen Energie isotroper Turbulenz lediglich von der Dissipationsrate ϵ und der Wellenzahl n , die die Größe der Wirbel beschreibt, abhängt. Kolmogorovs Gesetz beschreibt dabei den Verlauf turbulenter kinetischer Energie $E(n)$, vgl. Abb. 2.3. Durch Dimensionsanalyse ergibt sich

$$E(n) = C_K \epsilon^{2/3} n^{-5/3}, \quad (2.1)$$

wobei C_K die sogenannte Kolmogorov-Konstante kennzeichnet, die experimentell auf den Wert 1.5 bestimmt wurde [176]. Das Spektrum der turbulenten kinetischen Energie lässt sich verallgemeinert in drei verschiedene Bereiche einteilen, vgl. Abb. 2.3.

1. Der erste Teilbereich kennzeichnet die energiereichen Skalen, bei dem turbulente kinetische Energie dem System zugeführt wird (engl. productive subrange). Die großen Wirbel besitzen somit die größte Energie.
2. Der sogenannte Inertialbereich (engl. inertial subrange) kennzeichnet die Skalen, bei der turbulente kinetische Energie ausschließlich durch Trägheitskräfte an kleinere Skalen übertragen wird. Die großen Wirbel zerfallen also ausschließlich durch Trägheitskräfte in Kleinere, jedoch dissipiert dabei nur sehr wenig turbulente kinetische Energie. Dieser Zerfall unterliegt der zuvor angesprochenen Kolmogorov Theorie.

3. Der letzte Bereich kennzeichnet den dissipativen Teilbereich (engl. dissipative subrange). Ab einer bestimmten Größe der Skalen, der sogenannten Kolmogorov Skala n_d , vgl. Glg. 2.2, dämpfen viskose Kräfte die turbulente kinetische Energie sehr stark. Dabei dissipiert in den kleinsten Wirbeln Energie, welche in Wärme umgewandelt wird.

$$n_d \propto (\epsilon/\nu^3)^{1/4} \quad (2.2)$$

Die Größe der kleinsten existierenden Wirbel η lässt sich ebenso mit Hilfe der drei Thesen von Kolmogorov abschätzen. Eine Dimensionsanalyse führt zu folgender Darstellung:

$$\eta = (\nu^3/\epsilon)^{1/4} \quad (2.3)$$

Das zugehörige kleinste Zeitmaß wird in der Literatur mit τ_η gekennzeichnet und ist wie folgt definiert

$$\tau_\eta = (\nu/\epsilon)^{1/2} \quad (2.4)$$

Diese Theorie unterliegt jedoch idealisierter Annahmen. Sie ist etwa nur gültig für genügend hohe Reynoldszahlen und für das statistische Mittel. Es kann gezeigt werden, dass lokal kinetische Energie auch von den kleinen Skalen zu den großen Skalen übertragen wird (Backscatter-Effekt), wie in [198], [107] gezeigt, jedoch dies global durch den Forwardscatter wieder ausgeglichen wird. Im statistischen Mittel erlangt diese Betrachtung der Energiekaskade somit wieder Gültigkeit.

Der hier aufgezeigte, idealisierte Fall der isotropen Turbulenz tritt in den meisten Anwendungsfällen nicht auf. Ein Beispiel sei hierfür die wandgebundene Turbulenz, welche sehr starke anisotrope Eigenschaften aufweist. Turbulente Strömungen bieten im Gegensatz zu laminaren Strömungen oftmals wünschenswerte Vorteile, wie etwa die Erhöhung des Wärmeübergangs an beheizten Wänden oder die Verminderung des Widerstandes bei der Umströmung von Hindernissen. Ausführlichere, grundlegende Beschreibungen der Eigenschaften turbulenter Strömungen finden sich in [144] und [42] wieder.

2.2 Grundlegende Erhaltungsgleichungen der Strömungsmechanik

Die Grundgleichungen basieren auf der Annahme, dass das Fluid homogen ist, also als Kontinuum behandelt werden kann. Des Weiteren werden in dieser Arbeit ausschließlich newtonsche Fluide betrachtet. Hierbei handelt es sich um Flüssigkeiten oder Gase, welche ihre Viskosität nicht mit der Fließgeschwindigkeit ändern. Die Erhaltungsgleichungen dargestellt in der allgemeinsten Form lauten somit nach [21] bzw. [103]:

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}}_{(I)} + \underbrace{\frac{\partial(\rho\phi u_k)}{\partial x_k}}_{(II)} = \underbrace{\frac{\partial(J_k)}{\partial x_k}}_{(III)} + \underbrace{S}_{(IV)} \quad (2.5)$$

Hierbei kennzeichnet ρ die Dichte des Fluids, t die Zeit, x_k die kartesischen Koordinaten und u_k die Komponenten des Geschwindigkeitsvektors. Die restlichen Variablen sind in

Tabelle 2.1 definiert. Der erste Term (*I*) auf der linken Seite der Gleichung 2.5, beschreibt die zeitabhängigen Änderungen der Strömung, der zweite Term (*II*) die konvektiven Anteile, Term (*III*) die diffusiven Anteile und der letzte Term (*IV*) auf der rechten Seite zusätzliche Quellen.

Funktion	ϕ	J_k	S
Masse	1	0	0
Impuls	u_i	σ_{ik}	ρF_i
Energie	e	$-q_k$	$\sigma_{ik} \partial u_i / \partial x_k$

Tabelle 2.1: Ausdrücke für Massen-, Impuls- und Energieerhaltungsgleichung

In Tabelle 2.1 kennzeichnet σ_{ik} den Spannungstensor, e die innere Energie und q_k die diffusiven Wärmeströme. F_i beschreibt äußere Kräfte, die auf das Volumenelement einwirken, wie etwa die Gravitation. Die Anteile der molekularen Diffusion können nun mit Hilfe des Newton-Stokes'schen Ansatzes für die Impulsgleichung und des Fourier'schen Ansatzes für die Energiegleichung modelliert werden:

$$\text{Newton-Stokes : } \sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij} \quad \text{mit} \quad \tau_{ij} = 2\mu S_{ij} - \frac{2}{3}\mu S\delta_{ij}, \quad (2.6)$$

$$\text{Fourier : } q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (2.7)$$

p bezeichnet hierbei den Druck, μ die dynamische Viskosität und S_{ij} den Schubspannungstensor, definiert als

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad \text{und} \quad S = S_{ii} \equiv \text{div} \vec{u} \quad (2.8)$$

Das sogenannte Kronecker Delta δ_{ij} ist für gleiche Indizes 1 und für verschiedene 0. Insgesamt werden sechs Funktionen benötigt, um nach den Unbekannten, also der Dichte, dem Druck, der Temperatur und den drei Geschwindigkeitskomponenten auflösen zu können. Mit Hilfe der getroffenen Annahmen lassen sich somit die Gleichungen für Masse, Impuls und Energie aufstellen.

- Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.9)$$

- Impulsgleichung:

$$\frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3}\mu S\delta_{ij} \right] + \rho g_i \quad (2.10)$$

Der letzte Term auf der rechten Seite kennzeichnet die Auftriebskräfte, wobei $g_i = 9.81 \text{ m/s}^2$ die nach unten gerichtete Gravitationskonstante beschreibt.

- Energiegleichung:

– in Enthalpieform:

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j h)}{\partial x_j} = \frac{Dp}{Dt} + \Phi_\nu + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + \rho R_j \quad (2.11)$$

mit Hilfe der Konvention

$$\frac{D}{Dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \quad (2.12)$$

Die Dissipationsrate Φ_ν ist dabei wie folgt definiert:

$$\Phi_\nu = \tau_{ij} S_{ij} = 2\mu S_{ij} S_{ij} - \frac{2}{3}\mu S^2 \quad (2.13)$$

Der letzte Term auf der rechten Seite der Gleichung 2.11 beschreibt den möglichen Einfluß durch Strahlung auf die Strömung.

Um das Gleichungssystem zu schließen benötigt man noch eine letzte Gleichung, die sogenannte Zustandsgleichung, welche aus thermodynamischen Betrachtungen entstanden ist. Diese lautet für die vereinfachte Annahme eines idealen Gases [11]:

- Zustandsgleichung:

$$\rho = \frac{p}{RT} \quad (2.14)$$

R bezeichnet dabei die universelle Gaskonstante mit dem Wert 8.314472 J/mol K. Diese ist jedoch nur bei Gasen unter sehr niedrigem Druck gültig. Für die sogenannten nichtidealen oder realen Gase werden andere Berechnungsmöglichkeiten vorgeschlagen, siehe z.B. [44], auf die hier nicht näher eingegangen werden soll.

2.2.1 Angepasste Methodik für überkritische Druckzustände

Für Strömungen bei niedrigen Geschwindigkeiten mit Wärmeübergängen wird gewöhnlich die Boussinesq Approximation angewendet, welche besagt, dass die Änderungen der Dichte mit der Temperatur nur im Auftriebsterm linear berücksichtigt werden. Aufgrund der starken Änderungen der Stoffwerte bei überkritischen Drücken, vgl Kap. 1, ist diese Annahme eine zu starke Vereinfachung. In dem hier gewählten Ansatz zur Berücksichtigung der nichtlinearen Änderungen der Stoffwerte, der sogenannten Approximation für niedrige Machzahlen, werden die Erhaltungsgleichungen für niedrige Strömungsgeschwindigkeiten ($Ma < 0.3$) und hohe Wärmeübergänge angepasst. Hierbei werden Kompressibilitätseffekte, die bei hohen Machzahlen auftreten können, wie etwa Druckstöße bei der Tragflügelumströmung, vernachlässigt und akustische Effekte ausgeschlossen. Dies hat eine Vereinfachung der Energiegleichung zur Folge, da nun die zeitliche Abhängigkeit des Druckes vernachlässigt werden kann, $Dp/Dt = 0$. Starke Dichteänderungen durch hohe Wärmezufuhr können somit noch erfasst werden, die Vereinfachung ist ausschließlich auf den gewählten Geschwindigkeitsbereich bezogen. Ein weiterer Vorteil dieser Approximation ist, dass alle variablen Stoffwerte, wie etwa die Dichte oder spezifische Wärmekapazität, bei einem konstanten Referenzdruck p_0 bestimmt werden können. Dies hat zur Folge, dass

die Zustandsgleichung 2.14, ersetzt werden kann durch eine Tabelle, welche ausschließlich die Abhängigkeit der Dichte von der Temperatur berücksichtigt. Wegen der starken Nichtlinearität der Stoffwerte bei überkritischen Drücken, müssen alle Zustandsgrößen, wie u.a. dynamische Viskosität μ , spez. Wärmekapazität c_p und Wärmeleitfähigkeit λ , in den Erhaltungsgleichungen als variabel, also temperaturabhängig angenommen werden. Die Implementierung dieser temperaturabhängigen Parameter in die in dieser Arbeit verwendete Open Source Software Open Foam erfolgt hierbei mit Hilfe von Datentabellen, die vom National Institute of Standards and Technology (NIST) zur Verfügung gestellt werden. Hierbei werden im Abstand von 1 K die Stoffdaten erfasst und Zwischenwerte linear interpoliert. Um den pseudokritischen Punkt wird das Intervall auf Grund der hohen Gradienten auf 0.5 K reduziert. Zusätzlich zur gewählten Approximation können die Dissipationseffekte vernachlässigt werden, da auch sie bei niedrigen Geschwindigkeiten eine untergeordnete Rolle spielen, vgl. [4]. Der Einfluss durch Strahlung und anderen Wärmequellen, -senken ist ebenso vernachlässigbar klein.

Mit Hilfe der gewählten Vereinfachungen reduzieren sich die Erhaltungsgleichungen auf:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu S \delta_{ij} \right] + \rho g \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial (\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j h)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) \quad (2.17)$$

$$\rho = \rho(p_0, T) \quad (2.18)$$

2.3 Turbulenz in Wandnähe

Gemäß der Grenzschichttheorie nach Prandtl [146] bilden sich aufgrund der Wandreibung zwei Strömungsbereiche aus. Zum einen die reibungsfreie Außenströmung und zum anderen eine wandnahe reibungsbehaftete Strömungsschicht, auch Grenzschicht genannt. Innerhalb dieser Schicht steigt die Geschwindigkeit von 0 an der Wand durch einen erhöhten Impulsaustausch, verursacht durch wandnahe Turbulenz, sehr stark an. Dieser Einfluß nimmt jedoch mit zunehmenden Wandabstand wieder ab und eine voll entwickelte Außenströmung bildet sich aus, die je nach Reynoldszahl laminar oder turbulent ist. Diese Theorie ist ebenso gültig für die Ausbildung einer Temperaturgrenzschicht. Ähnlich zur Außenströmung können sich zwei verschiedene Typen von Grenzschichten entwickeln, beziehungsweise auch durch Transition ineinander übergehen. Zum einen ist dies die laminare Grenzschicht für kleine Reynoldszahlen und zum anderen die turbulente Grenzschicht bei hohen Reynoldszahlen. Dabei existiert für den Transitionspunkt keine genaue Grenze bzw. es ist vielmehr ein kontinuierlicher Übergang. Dieses Übergangsbereich ist zudem stark abhängig von der zu untersuchenden Geometrie. Der Umschlagpunkt wird etwa für eine längs angeströmte Platte mit einem kritischen Reynoldszahlenbereich von $3.5 \cdot 10^5 \leq Re_{krit} \leq 1.0 \cdot 10^6$ angegeben. Da hierbei die Reynoldszahl abhängig von der Lauflänge L ist, steigt auch die Grenzschichtdicke gemäß der Beziehung

$$\frac{\delta}{L} \propto \frac{1}{Re_L} \quad (2.19)$$

Eine allgemeine Definition der Grenzschichtdicke wird in [153] bzw. [154] gegeben. Hierbei ist δ die Dicke, bei der die Geschwindigkeit 99% der Außenströmung beträgt. Bei genauerer Untersuchung der turbulenten Grenzschicht fällt auf, dass die Geschwindigkeit in direkter Wandnähe gegen 0 geht, was impliziert, dass auch die Reynoldzahl gegen 0 sinkt. Somit muss sich innerhalb der turbulenten Grenzschicht eine Schicht ausbilden, die laminar bleibt. Diese Schicht wird viskose Unterschicht genannt, welche im Gegensatz zur turbulenten Grenzschicht sehr klein ist. Im weiteren Verlauf wird von hydraulisch glatten Wänden ausgegangen, wobei hier die viskose Grenzschicht höher ist als die höchste Rauigkeit an der Wand. Abbildung 2.4 zeigt die Unterschiede zwischen einem laminaren und einem turbulenten Geschwindigkeitsprofil am Beispiel einer einfachen Rohrströmung und veranschaulicht schematisch die viskose Unterschicht.

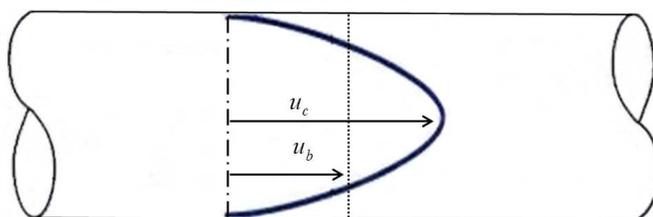


Abbildung 2.4: Laminares Geschwindigkeitsprofil einer wandgebundenen Strömung

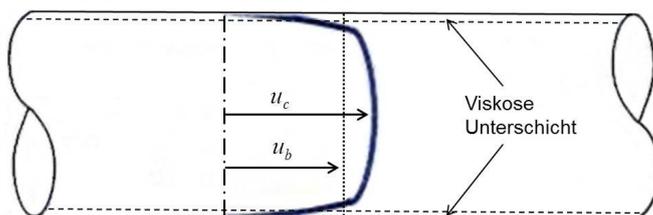


Abbildung 2.5: Turbulentes Geschwindigkeitsprofil einer wandgebundenen Strömung

u_c kennzeichnet dabei die maximale Geschwindigkeit im Zentrum des Rohres und u_b die mittlere Geschwindigkeit über dem Querschnitt (Bulk-Geschwindigkeit). Der Bereich der sich der viskosen Unterschicht anschließt, wird als sogenannter Übergangsbereich bezeichnet, welcher kontinuierlich in den sogenannten logarithmischen Bereich übergeht. Innerhalb dieser Bereiche kann davon ausgegangen werden, dass die Wandschubspannung τ_w , nahezu konstant ist, was Grundlage der Prandtlschen Mischungswegtheorie ist. Es wird angenommen, dass die Viskosität nur noch einen geringen Einfluß auf die Strömung hat und im logarithmischen Bereich ein lokales Gleichgewicht zwischen Produktion und Dissipation vorliegt.

Um die Ergebnisse der geometrie- und reynoldszahlenabhängigen Simulationen besser vergleichen zu können, werden relevante Größen, die in Wandnähe eine große Rolle spielen, in dimensionsloser Form wiedergegeben. Dies sind zum einen der dimensionslose Wandabstand y^+ und zum anderen die dimensionslose Geschwindigkeit u^+ :

$$y^+ = \frac{yu_\tau}{\nu} \quad \text{und} \quad u^+ = \frac{\bar{u}}{u_\tau} \quad (2.20)$$

Diese werden mit Hilfe der der sogenannten Schubspannungsgeschwindigkeit u_τ erzeugt, welche für die Analyse von wandgebundenen Strömungen eine wichtige Größe darstellt.

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad \text{mit} \quad \tau_w = \mu \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_w \quad (2.21)$$

Somit kann man das Gebiet der turbulenten Grenzschicht besser in die zuvor genannten Bereiche einteilen. Die viskose Grenzschicht ist dabei für einen Bereich von $0 < y^+ < 5$ definiert, der Übergangsbereich von etwa $5 < y^+ < 30$ und der logarithmische Bereich, stark abhängig von der Reynoldszahl, von $30 < y^+ < 350 - 800$. Unmittelbar nach dem logarithmischen Bereich folgt die Außenströmung. Prandtl bestimmte für die Bereiche der viskosen Unterschicht und des logarithmischen Bereiches charakteristische Geschwindigkeitsprofile ausschließlich abhängig vom dimensionslosen Wandabstand. Hierbei gilt $u^+ = y^+$ für die viskose Unterschicht und $u^+ = \frac{1}{\kappa} \cdot \ln(y^+) + C$ für den logarithmischen Bereich. Dabei sind κ und C Konstanten die jeweils abhängig von der Reynoldszahl den Wert $\kappa \approx 0.4$ und $C \approx 5.5$ annehmen. Der Übergangsbereich kann mit Interpolationsformeln beschrieben werden.

Um Aussagen über turbulente Strömungen machen zu können, müssen diese statistisch analysiert werden. Sei ϕ eine beliebige Variable, die das Geschwindigkeitsfeld bzw. Temperaturfeld repräsentiert, so ist das statistische Mittel über der Zeit definiert als

$$\overline{\phi(x)} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \phi(x, t) dt \quad (2.22)$$

Hierbei kennzeichnet $\phi(x, t)$ z.B. das Geschwindigkeitsfeld zu einem bestimmten Zeitpunkt t an einem bestimmten Ort x . Die turbulenten Fluktuationen können somit beschrieben werden als Differenz des aktuellen Feldes und dem statistischen Mittel,

$$\phi' = \phi - \overline{\phi} \quad (2.23)$$

mit den Eigenschaften

$$\overline{\phi'} \equiv 0, \quad \overline{\overline{\phi}} = \overline{\phi} \quad (2.24)$$

Die Intensität der turbulenten Fluktuationen, vermutlich erstmals eingeführt von Dryden und Kuethe [34], bzw. [35], können mit Hilfe des sogenannten *rms* (engl. root mean square) Wertes beschrieben werden

$$\phi_{rms} = \sqrt{\overline{(\phi - \overline{\phi})^2}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\phi - \overline{\phi})^2}{n}} \quad (2.25)$$

wobei n die Zeitschritte kennzeichnet. Die relative Intensität ist demnach definiert als Quotient von Fluktuationen zu gemitteltem Feld, $\phi'/\overline{\phi}$

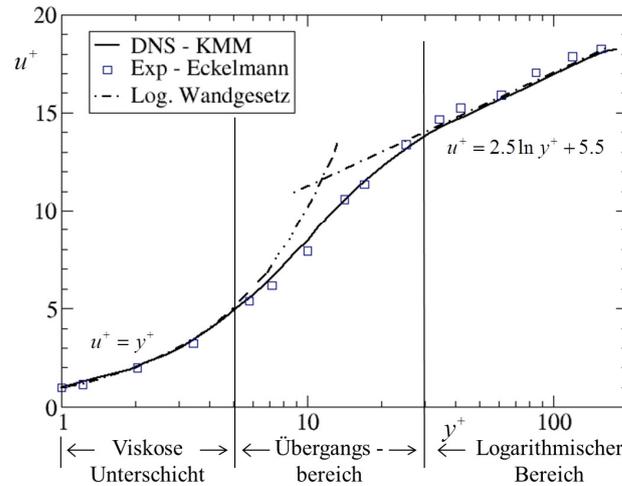


Abbildung 2.6: Turbulentes Geschwindigkeitsprofil einer wandgebundenen Strömung

Abbildung 2.6 zeigt das statistisch gemittelte Geschwindigkeitsprofil einer turbulenten Kanalströmung. Die hier gezeigten Daten wurden sowohl experimentell [37] als auch mit Hilfe einer numerischen Simulation gewonnen [83]. Jeder der zuvor genannten Bereiche, wie etwa die viskose Unterschicht, ist eindeutig zu indentifizieren. Des Weiteren sind die Übereinstimmungen der Geschwindigkeitsprofile der viskosen Unterschicht und des logarithmischen Bereiches bezogen auf den Mischungswegansatz sehr gut zu erkennen. Eine sich ergebende weitere sehr wichtige Größe ist hierbei die Reynoldszahl, abhängig von der Schubspannungsgeschwindigkeit, da sie viele wichtige Eigenschaften (z.B. Turbulenzgrad, max. dimensionsloser Wandabstand, etc.) der zu untersuchenden Strömung vereint.

$$Re_\tau = \frac{u_\tau L}{\nu} \quad (2.26)$$

Diese Ansätze lassen sich auch auf die Temperatur übertragen. Um jedoch die gleichen Einteilung vornehmen zu können bzw. die Profile von Temperatur und Geschwindigkeit vergleichen zu können, wird für die dimensionslose Temperatur Θ^+ eine relative Temperatur wie folgt angewandt:

$$\bar{\Theta}^+ = \frac{\bar{T}_w - T}{T_\tau} \quad \text{mit} \quad T_\tau = \frac{\dot{q}_w}{\rho c_p u_\tau} \quad \text{und} \quad \dot{q}_w = -\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_w \quad (2.27)$$

Hierbei kennzeichnet \dot{q}_w die Wärmestromdichte. Eine sich daraus ergebende weitere wichtige Größe für die Behandlung von wandgebundenen Strömungen mit Wärmeübergängen ist die Prandtl Zahl. Sie ist definiert als das Verhältnis von kinematischer Viskosität ν (Impulstransport infolge von Reibung) und Temperaturleitfähigkeit a (Wärmetransport infolge von Leitung), vgl. Glg. 1.1. Sie gibt somit ein Maß für die Dicke der Strömungsgrenzschicht im Verhältnis zur Temperaturgrenzschicht. Für $Pr \approx 1$ haben die Grenzschichten ungefähr die gleiche Dicke, wobei im Gegensatz dazu für $Pr > 1$ die Temperaturgrenzschicht kleiner als die Geschwindigkeitsgrenzschicht ist.

Aufgrund der starken Effekte der Wandreibung innerhalb der Grenzschicht auf die Strömung, wird die Turbulenzproduktion maßgeblich in diesem Bereich beeinflusst. Diese ist

in einem erheblichen Maße für den Transport von Energie von der Wand in Richtung Zentrum eines Rohres verantwortlich. Somit sollte die Turbulenz und die damit verbundenen hohen Gradienten für wandgebundene Strömungen in einer Simulation sehr gut aufgelöst werden. Wie zuvor gezeigt, kann die Intensität der Turbulenz mit Hilfe der rms Werte für die Geschwindigkeit beschrieben werden. Diese resultieren aus den turbulenten Schein-
spannungen bzw. genauer aus dem jeweiligen Mittelwert der drei Normalspannungen, was in Kap. 2.5 noch genauer erläutert wird.

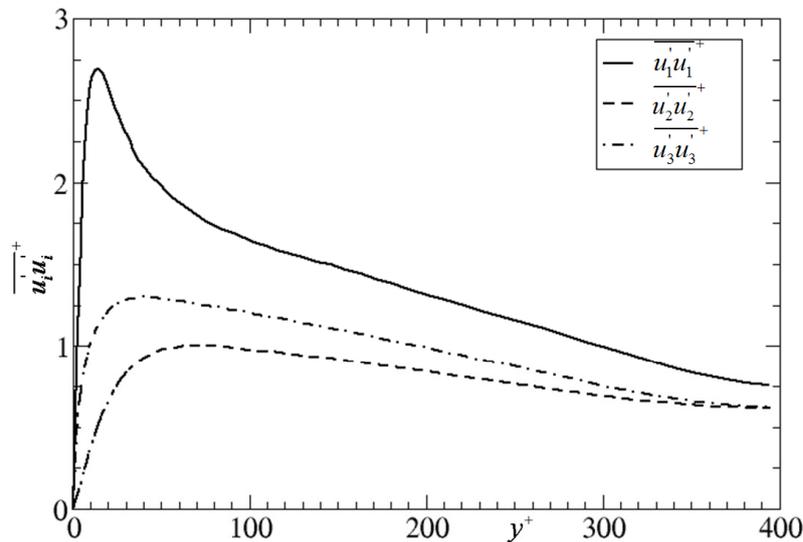


Abbildung 2.7: Fluktuationen der Geschwindigkeiten für Raumrichtungen x,y,z
[84]

Wie in Abb. 2.7 für eine turbulente Kanalströmung für $Re_\tau = 395$ gezeigt, sind die Fluktuationen der Geschwindigkeit in wandnähe in strömungsrichtung, $u_1'^2$, am stärksten. Des Weiteren ist gut zu erkennen, dass die Fluktuationen normal zur Hauptausbreitungsrichtung $u_2'^2$ und in Wandnormalenrichtung $u_3'^2$ einen geringeren Anteil an der gesamten turbulenten kinetischen Energie haben, die definiert ist als:

$$k = \frac{1}{2} \left(\overline{u_1'^2} + \overline{u_2'^2} + \overline{u_3'^2} \right) \quad (2.28)$$

Somit folgt für das oben gewählte Beispiel einer Kanalströmung, dass die turbulente kinetische Energie stark anisotrope Eigenschaften aufweist.

2.4 Verfahren der Turbulenzmodellierung

Die Erhaltungsgleichungen beschreiben die Bewegung bzw. die Strömung von newtonschen Fluiden. Diese bilden ein System von partiellen Differentialgleichungen, welche für dreidimensionale turbulente Strömungen analytisch nicht exakt lösbar sind. Somit kommen numerische Verfahren zum Einsatz, die es ermöglichen eine Näherungslösung zu bestimmen. Der Aufwand für die genaue Lösung der Gleichungen ist dabei jedoch so erheblich, dass im Laufe der letzten Jahrzehnte vereinfachte Verfahren entwickelt wurden, um etwa die Beschreibung der Turbulenz dennoch zu gewährleisten. Nach Berechnungsaufwand und Genauigkeit geordnet werden nun im Folgenden die bekanntesten Ansätze bzw. Verfahren, vgl. Abb. 2.8, kurz diskutiert und in den nächsten Kapiteln detailliert beschrieben:

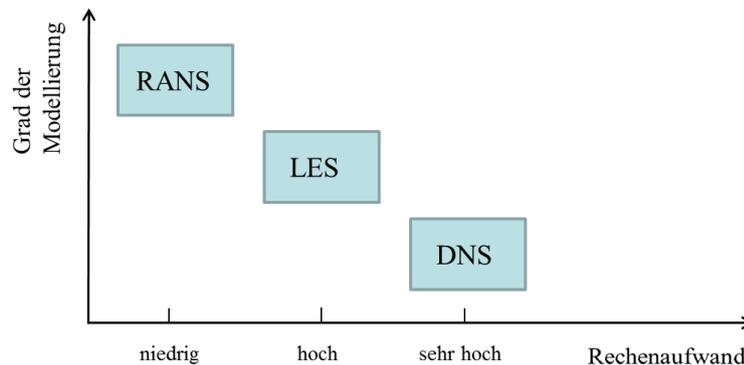


Abbildung 2.8: Vergleich der Verfahren

- Bei der sogenannten Direkten Numerischen Simulation (DNS) werden die Erhaltungsgleichungen in ihrer allgemeinsten Form gelöst. Hierbei werden alle Skalen, also sowohl große als auch kleinste Wirbel, voll aufgelöst. Die Qualität der DNS hängt dabei hauptsächlich von der gewählten Gitterweite und dem gewählten Diskretisierungsverfahren ab. Um sinnvolle Ergebnisse zu garantieren kann die Anzahl der zu verwendeten Zellen in Beziehung mit der Reynoldszahl gesetzt werden. Sie steigt dabei mit $N \propto Re^{9/4}$. Da somit der Aufwand exponentiell steigt, ist diese Methode im Moment ausschließlich für Grundlagenuntersuchungen für einfache Geometrien bei kleinen Reynoldszahlen geeignet. Durch die Auflösung aller Skalen und die Exaktheit der Ergebnisse werden direkte numerische Simulationen jedoch häufig dazu verwendet um Simulationsergebnisse zu verifizieren und Codes zu validieren. Sie ist außerdem sehr gut geeignet um die Physik der Turbulenz besser zu untersuchen und zu verstehen.
- Bei der sogenannten Large Eddy Simulation (LES) werden, wie der Name schon sagt, ausschließlich die großen, energiereichen Skalen in Zeit und Raum voll aufgelöst. Die kleinen, dissipativen Skalen werden modelliert. Diese haben einen stark isotropen Charakter, was eine Modellierung sehr vereinfacht. Die Einteilung erfolgt dabei mit Hilfe eines räumlichen Filters, einem sogenannten Hochpassfilter, wobei die Grenze hierbei im Inertialbereich liegt. Der Filter ist dabei abhängig von der Gitterweite des Netzes, wodurch Fehler abhängig vom verwendeten Modell auftreten können, falls das Netz zu grob gewählt wurde. Dabei liegt der Aufwand deutlich unter dem einer DNS. Die LES gewinnt in den letzten Jahren in der CFD enorm an Bedeutung, da die Rechenkapazitäten stark gestiegen sind und es somit ermöglicht wird auch komplexere Strömungsbedingungen zu simulieren. Somit ist es heutzutage möglich etwa turbulente Verbrennungen und Vermischungsvorgänge sehr genau zu beschreiben.
- Bei der Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS) Methode [129] werden die Erhaltungsgleichungen zeitlich gemittelt. Somit werden alle turbulenten Fluktuationen durch diese Mittelung vernachlässigt, welche durch Turbulenzmodelle wieder hinzugefügt werden müssen. Diese haben folglich einen sehr großen Einfluß auf die statistisch gemittelten Resultate. Abb. 2.9 veranschaulicht die Unterschiede bei

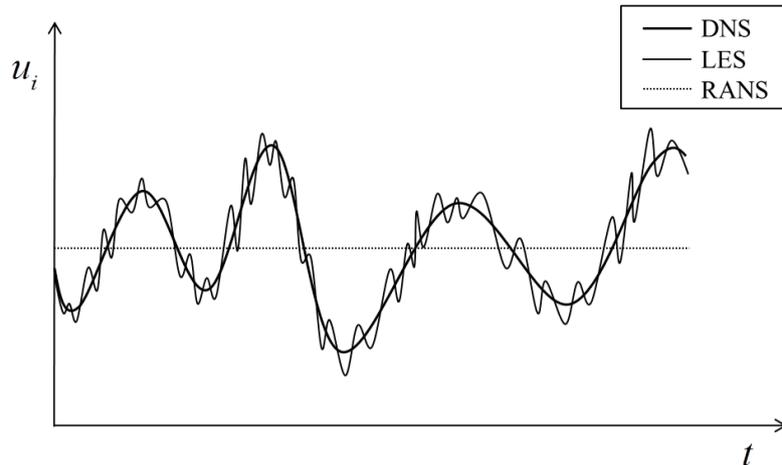


Abbildung 2.9: Vergleich der Signalerfassung der verschiedenen Verfahren für die Geschwindigkeit

der Erfassung der Geschwindigkeitssignale bei einer DNS, LES und einer RANS-Berechnung. Bei einer DNS können noch kleinste Schwankungen wiedergegeben werden, wobei eine LES nur noch die groben Schwankungen zeigt. Im Gegensatz dazu zeigt die RANS-Berechnung nur noch einen Mittelwert. Da nun die gesamte Turbulenz, also Produktion und Dissipation, Modellannahmen unterliegen, reduziert sich der Aufwand der Simulation erheblich. Viele Anwendungsfälle lassen sich somit auch auf eine 2D oder sogar 1D Betrachtung reduzieren. Jedoch bergen diese Annahmen, zusätzlich zur Auflösung und Numerik, erhebliches Fehlerpotential. Dennoch ist die RANS Methode die am weitest Verbreitetste in Industrie und Forschung.

- Der hybride Ansatz verbindet die Vorteile einer kostenintensiven LES mit der wenig aufwändigen RANS Methode [32], [171]. Als Anwendungsbeispiel sei hierbei eine Kanalströmung genannt, wobei hier der wandnahe, also aufwändigste Bereich mit Hilfe der RANS aufgelöst wird und der innere Bereich mit Hilfe der LES. Somit werden alle großskaligen Wirbel erfasst und trotzdem Kosten gespart. Probleme bilden dabei die Grenzen bzw. Übergänge der beiden Methoden. Sie bildet durch die Abbildung isotroper und nichtisotroper Turbulenz und des niedrigeren Aufwandes eine weitere Alternative zu den drei erst genannten.

Die in dieser Arbeit verwendeten Ansätze sind zum einen die RANS Methode und zum anderen die Large Eddy Simulation, welche in den nächsten Kapiteln genauer vorgestellt werden sollen.

2.5 Reynolds Averaged Navier Stokes Methode (RANS)

Die RANS Methode basiert auf der statistischen Zerlegung einer Größe ϕ in einen zeitlich gemittelten und einen fluktuierenden Anteil, vgl. Glg. (2.22) und Glg. (2.23). Diese Mittelung wird auch als Reynolds-Mittelung bezeichnet. Somit werden die Erhaltungsgleichungen nur für die mittleren Werte gelöst, was für Ingenieuranwendungen oftmals

ausreichend ist. Bei der Anwendung auf kompressible Strömungen mit starken Dichtevariationen würde jedoch ein Schließungsproblem entstehen, welches nur sehr schwer bzw. nur sehr aufwändig gelöst werden könnte. Der Berechnungsaufwand würde somit enorm steigen, was eine andere Methode der zeitlichen Mittelung impliziert, die sogenannte Favre Mittelung [129]. Diese berücksichtigt die Dichteänderungen und ist wie folgt definiert:

$$\tilde{\phi}(x) = \phi - \phi'' = \frac{1}{\bar{\rho}} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t \rho(x, t) \phi(x, t) dt = \frac{\overline{\rho\phi(x)}}{\bar{\rho}} \quad (2.29)$$

Für Dichte ρ und Druck p wird bei diesem Ansatz jedoch weiterhin die Reynoldsmittelung angewendet. Beide Mittelungen haben folgende Operatoreigenschaften auf die Strömungsgrößen ϕ und ψ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} &= \frac{\partial \phi}{\partial x} & \overline{\phi + \psi} &= \bar{\phi} + \bar{\psi} & \overline{\phi'} &= 0 & \overline{\phi'\phi'} &\neq 0 \\ \overline{\tilde{\phi}} &= \tilde{\phi} & \overline{\phi''} &\neq 0 & \overline{\tilde{\phi}\rho'} &= 0 & \overline{\phi''\rho} &= 0 \end{aligned} \quad (2.30)$$

Die restlichen Stoffwerte, wie etwa μ , c_p etc., folgen direkt aus der berechneten mittleren Enthalpie, wodurch sie ebenfalls als gemittelt betrachtet werden können. Für die zeitliche Mittelung der Erhaltungsgleichungen muss bezüglich der instationären Hauptströmung ein hinreichend kleines Zeitintervall gewählt werden. Dies ist jedoch deutlich größer als das Zeitmaß der turbulenten Fluktuationen der Strömungsgrößen. Wendet man nun die beiden Mittelungen auf die Erhaltungsgleichungen 2.15-2.17 an, entsteht ein völlig neuer Gleichungssatz. Dieses Vorgehen soll ausführlich an der Kontinuitätsgleichung gezeigt werden:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} \stackrel{(2.29)}{=} \frac{\partial (\bar{\rho} + \rho')}{\partial t} + \frac{\partial [(\bar{\rho} + \rho') (\tilde{u}_i + u_i'')]}{\partial x_j} \stackrel{(2.30)}{=} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (2.31)$$

Die aus Gleichung 2.16 mit Hilfe der Mittelungen gewonnenen Impulsgleichung lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''}) + (\bar{\rho} g) \quad (2.32)$$

wobei der gemittelte Spannungstensor $\bar{\tau}_{ij}$, mit Hilfe einer Vereinfachung, siehe [129], gegeben ist durch

$$\bar{\tau}_{ij} = 2\bar{\mu} \tilde{S}_{ij} - \frac{2}{3}\bar{\mu} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (2.33)$$

mit

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.34)$$

Resultierend aus den durchgeführten Mittelungen entsteht ein weiterer Term in der Impulsgleichung, der sogenannte Reynoldsspannungstensor $\overline{\rho u_i'' u_j''}$. Dieser beschreibt den gemittelten Beitrag der turbulenten Fluktuationen und kann zusammengefasst wie folgt beschrieben werden

$$\overline{\rho u_i'' u_j''} = -\bar{\rho} \begin{pmatrix} \overline{u_1'' u_1''} & \overline{u_1'' u_2''} & \overline{u_1'' u_3''} \\ \overline{u_2'' u_1''} & \overline{u_2'' u_2''} & \overline{u_2'' u_3''} \\ \overline{u_3'' u_1''} & \overline{u_3'' u_2''} & \overline{u_3'' u_3''} \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

Dieser symmetrische Tensor besteht aus sechs unabhängigen, unbekanntem Reynoldsspannungen, wodurch das Gleichungssystem nicht mehr geschlossen ist. Dies ist der Grund für die Anwendung von Modellen, die die Effekte der Turbulenz auf die Strömung beschreiben. Diese Turbulenzmodelle werden zumeist aus empirischen Daten gewonnen, wodurch manche nur eingeschränkt auf bestimmte Geometrien und Reynoldszahlen anwendbar sind. Die turbulente kinetische Energie ist, wie bereits in Kapitel 2.3 erwähnt, definiert als die Spur des Tensors multipliziert mit 0.5.

$$k = \frac{1}{2} \left(\overline{u_1''^2} + \overline{u_2''^2} + \overline{u_3''^2} \right) \quad (2.36)$$

Die Favre gemittelte Energiegleichung, bezogen auf Gleichung 2.17 lautet

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\bar{\lambda}}{c_p} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right) - \overline{\rho u_j'' h''} \quad (2.37)$$

Der letzte Term auf der rechten Seite der Gleichung repräsentiert den sogenannten turbulenten Wärmeübergangsvektor, welcher drei neue Unbekannte enthält. Wie dieses Schließungsproblem, was folglich aus fünf Gleichungen für 14 Unbekannte besteht, gelöst werden kann, soll nun im nächsten Kapitel gezeigt werden.

2.5.1 Turbulenzmodelle

Durch die angewandte zeitliche Mittelung der Erhaltungsgleichungen entstehen wie bereits erwähnt neun zusätzliche Unbekannte, die nun mit Hilfe von zusätzlichen Gleichungen gelöst werden können. Somit würden jedoch für die sechs Unbekannten des Reynoldsspannungstensors weitere 22 Unbekannte entstehen [189]. Diese Problematik entsteht durch die Nichtlinearität der Erhaltungsgleichungen, also je mehr Gleichungen man sucht, um die Unbekannten zu beschreiben, desto mehr Unbekannte kommen hinzu. Dieses Schließungsproblem ist somit zu keinem Zeitpunkt lösbar. Um eine Lösung des Problems zu finden, müssen nun eine Reihe von Approximationen, zumeist empirischer Art, gefunden werden, die die Eigenschaften der unbekanntem Terme, also die turbulenten Fluktuationen, beschreiben.

Der für technische Anwendungen verbreitetste Ansatz basiert auf der sogenannten Bousinesq Annahme, welche bis ins Jahr 1877 zurückreicht. Dieser schlug vor, die Schwankungsterme im Reynoldsspannungstensor (2.35) analog zur Berechnung der Normal- und Schubspannungen (2.6) zu modellieren. Es wird davon ausgegangen, dass die Turbulenz mit Hilfe von einer veränderlichen Viskosität beschrieben werden kann, der sogenannten turbulenten Viskosität oder Wirbelviskosität μ_t . Somit folgt für die Schwankungsterme nach [189]:

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} = 2\bar{\mu}_t \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{ij} \quad (2.38)$$

wobei der letzte Term auf der rechten Seite für Gültigkeit des Ansatzes auch bei Kontraktionen sorgt. Hierbei ist die Wirbelviskosität μ_t ausschließlich abhängig von lokalen Strömungsbedingungen und nicht, wie die molekulare Viskosität, von Druck und Temperatur. Sie beschreibt vielmehr integral die turbulenten Fluktuation an einem bestimmten

Ort. Ähnlich zur Boussinesq Formulierung wird für den turbulenten Wärmeübergangsvektor $-\overline{\rho u_j'' h''}$ angenommen, dass dieser proportional zum Gradienten der gemittelten Enthalpie ist:

$$-\overline{\rho u_j'' h''} = \overline{a_t} \frac{\partial \overline{h}}{\partial x_j} \quad (2.39)$$

wobei a_t die turbulente Temperaturleitfähigkeit darstellt. Dieser Ansatz ist in der Literatur auch unter Gradienten-Fluss-Ansatz zu finden. Mit Hilfe dieser beiden Ansätze reduziert sich die Anzahl der Unbekannten von neun auf zwei. Eine weitere Reduzierung wird durch die Einführung der turbulenten Prandtl Zahl erreicht.

$$Pr_t = \frac{\nu_t}{a_t} = \frac{\mu_t}{a_t \rho} \quad (2.40)$$

Sie unterliegt der Annahme, dass beide Größen, also Wirbelviskosität und turbulente Temperaturleitfähigkeit, von den selben turbulenten Fluktuationen transportiert werden und somit nicht unabhängig voneinander sind. Daraus resultierend wird in technischen Anwendungen häufig $Pr_t \approx 1$ gewählt, bzw. $Pr_t = 0.9$ für Strömungen ohne starke Wärmeübergänge. Es werden jedoch auch Ansätze verwendet, die die molekulare Prandtl Zahl mit einbeziehen [113]:

$$Pr_t^{-1} = 0.91 + 0.13 Pr^{0.545}; \quad 0.7 < Pr < 100 \quad (2.41)$$

Dieser Ansatz kann auch, wie in [112] gezeigt, für überkritische Drücke verwendet werden. Durch die somit entstehende Abhängigkeit, reduziert sich die Anzahl der Unbekannten auf nunmehr Eine. Somit folgt für die Impulsgleichung nach 2.32 die folgende Vereinfachung:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\underbrace{\left(\overline{\mu} + \overline{\mu}_t \right)}_{\mu_{eff}} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \right] \quad (2.42)$$

$$- \frac{2}{3} \overline{\mu} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + (\overline{\rho} g) \quad (2.43)$$

und für die Energiegleichung angewendet auf (2.37):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho} \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\underbrace{\left(\overline{a^*} + \overline{a_t} \right)}_{a_{eff}} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right] \quad (2.44)$$

Durch die Anwendung einer effektiven Wirbelviskosität μ_{eff} bzw. effektiven Temperaturleitfähigkeit a_{eff} erhöht sich zudem die Stabilität und Robustheit der Verfahren, wobei hier $\overline{a^*} = \overline{\lambda}/\overline{c_p}$. Im Allgemeinen beschränken sich Turbulenzmodelle, die mit Hilfe des Boussinesq Ansatzes gewonnen wurden, auf die Bestimmung von μ_t . Diese berechnen die Wirbelviskosität zumeist in Abhängigkeit der gemittelten Strömungsgrößen $\overline{\rho}$ und \tilde{u} . Je nach Komplexität des Strömungsproblems gibt es Turbulenzmodelle, die algebraische Gleichungen für die Berechnung der Wirbelviskosität verwenden, oder es müssen zusätzliche partielle Differentialgleichungen innerhalb der Modelle gelöst werden. Im folgenden sollen nun kurz die sogenannten algebraischen oder Null-Gleichungsmodelle und

die Mehrgleichungsmodelle genauer erläutert werden. Sie basieren auf der Boussinesq Annahme und setzen die Isotropie der Turbulenz voraus. Eine weitere Art der Turbulenzmodellierung, die dieser Einschränkung nicht unterliegt, soll ebenfalls vorgestellt werden:

- **Algebraische Modelle (Null-Gleichungsmodelle)**

Diese Art der Turbulenzmodellierung stellt die einfachste dar. Sie verwendet eine algebraische Gleichung um die Wirbelviskosität zu bestimmen. Die bekannteste Herleitung einer algebraischen Gleichung für Grenzschichtströmungen, geht auf Prandtl [146], zurück. Die Bestimmung der Wirbelviskosität erfolgt hierbei mit Hilfe des Mischungswegansatzes, welcher detailliert in [145] bzw. [130] beschrieben ist und auch schon in Kapitel 2.3 angesprochen wurde. Die daraus resultierende Gleichung für die Berechnung der Wirbelviskosität lautet:

$$\bar{\mu}_t = \bar{\rho} l^2 \left| \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} \right| \quad (2.45)$$

Die darin enthaltenen Mischungsweglänge l , ist dabei die Länge, die ein Turbulenzballen durchschnittlich zurücklegt, bevor er seine Individualität verliert. Für die Berechnung von l sei auf [129] verwiesen.

- **Transportgleichungsmodelle**

Diese Modelle basieren ebenfalls auf dem Wirbelviskositätsansatz. Jedoch berücksichtigen sie die Tatsache, dass die Turbulenz mit der Strömung transportiert wird. Im Gegensatz zu den vorher genannten algebraischen Modellen wird hierbei eine bzw. mehrere Transportgleichungen benötigt, welche diesen Transport beschreiben. Letzendlich kann hierdurch auch die Wirbelviskosität bestimmt werden. Diese Modelle werden zumeist in zwei Gruppen eingeteilt:

- **Eingleichungsmodelle**

Diese Art der Turbulenzmodelle verwendet nur eine Gleichung, die den Transport der turbulenten Fluktuationen beschreibt. Diese muss zusätzlich zu den Erhaltungsgleichungen gelöst werden, was einen Mehraufwand an Berechnungszeit zur Folge hat. Die Transportgleichung berechnet dabei eine weitere turbulente Größe, die sogenannte spezifische turbulente kinetische Energie k . Zusätzlich zu dieser Gleichung muss eine neue, hinzugekommene Größe, die Dissipation ϵ bestimmt werden. Diese wird hierbei wiederum mit Hilfe empirischer Ansätze gelöst. Eine weitere unbekannte Größe ist das turbulente Längenmaß, welches sich meist aus k und ϵ zusammensetzt.

- **Zweigliedungsmodelle**

Um das Längenmaß zu bestimmen, wird bei dieser Art der Turbulenzmodellierung, eine zweite Transportgleichung eingeführt. Das bekannteste Turbulenzmodell dieser Art ist das sogenannte $k-\epsilon$ Modell [75]. Hierbei wird eine Transportgleichung für die spezifische turbulente kinetische Energie und eine weitere Gleichung für die Dissipation gelöst. Das Längenmaß setzt sich dabei zusammen aus $k^{3/2}/\epsilon$. Andere Autoren, wie etwa Wilcox [189] ziehen einen Ansatz vor, mit dem sie direkt das Längenmaß bestimmen. Hierbei wird anstatt der Dissipation eine Transportgleichung für die spezifische Dissipationsrate $\omega = \epsilon/k$

gelöst. Zweigleichungsmodelle haben einen höheren Genauigkeitsgrad, der numerische Aufwand ist jedoch höher und die Kopplung der Gleichungen kann zu Konvergenzproblemen führen. Trotz dieser Nachteile überwiegen jedoch die Vorteile der Genauigkeit, womit sie im Rahmen dieser Arbeit zum Einsatz kommen werden. Eine ausführliche Beschreibung dieser Modelle folgt in Kapitel 2.5.2.

- **Reynoldsspannungsmodelle**

Die zugrundeliegende Annahme der Isotropie der Turbulenz schränkt die Modellierung mit Hilfe des Wirbelviskositätsansatzes stark ein. Deswegen kommen bei sehr stark anisotropen Strömungen oftmals die sogenannten Reynoldsspannungsmodelle [100] zum Einsatz. Hierbei wird für jede Komponente des Reynoldsspannungstensors eine separate Gleichung aufgestellt. Unter der Voraussetzung der Symmetrie des Tensors kommen somit 6 weitere Gleichungen zu den Erhaltungsgleichungen hinzu. Diese können wie bei den algebraischen Modellen mit empirischen Ansätzen gelöst werden, oder jedoch mit Hilfe einer Transportgleichung für jeden Term. Dies würde wie bereits erwähnt, zu 22 weiteren Unbekannten führen und ein Schließungsproblem verursachen. Dieses Problem wird mit weiteren Approximationen und empirischen Ansätzen umgangen. Zusätzlich wird die Dissipation mit Hilfe einer weiteren Transportgleichung berechnet. Insgesamt müssen bei diesem Ansatz unter Berücksichtigung der Energiegleichung zusätzlich zu den fünf Erhaltungsgleichungen somit zehn weitere Transportgleichungen gelöst werden, was den Aufwand vervielfacht. Zudem sind sie numerisch instabiler, liefern jedoch oftmals gute statistische Ergebnisse.

2.5.2 Zweigleichungsmodelle

Die Zweigleichungsmodelle basieren, wie bereits erwähnt, auf dem Wirbelviskositätsansatz. Dies impliziert weitere Approximationen zur Bestimmung der Wirbelviskosität, welche wie folgt mit Hilfe einer Dimensionsanalyse

$$\mu_t \propto u_{ch} l_{ch} \rho \quad (2.46)$$

in eine charakteristische Geschwindigkeitsskala u_{ch} und eine charakteristische Längenskala l_{ch} aufgeteilt werden kann. Ziel der Zweigleichungsmodelle ist die Modellierung dieser beiden charakteristischen Größen und somit die Modellierung der Wirbelviskosität. Gewöhnlicherweise geschieht dies mit Hilfe einer Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie und einer Transportgleichung für die Dissipation bzw. des Längenmaßes.

2.5.2.1 Die Transportgleichungen

Die exakte Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie kann mit Hilfe der Kontinuitäts- und der Impulsgleichung hergeleitet werden [189]. Somit folgt für die exakte

Gleichung der turbulenten kinetischen Energie:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}k)}_{(I)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}k\tilde{u}_j)}_{(II)} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\tau_{ij}u_i''}) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{1}{2}\overline{\rho u_j''u_i''u_i''}\right) - \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{u_j''p'})}_{(III)} \quad (2.47)$$

$$\underbrace{-\overline{\rho u_i''u_j''}}_{(IV)} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \underbrace{\mu}_{(V)} \frac{\partial u_i''}{\partial x_k} \frac{\partial u_i''}{\partial x_k} \quad (2.48)$$

Hierbei ist die Gleichung, ähnlich zu der Impulsgleichung, aufgeteilt in einen instationären Term (I) , den konvektiven Term (II) , den diffusiven Term (III) , den Produktionsterm (IV) und den dissipativen Term (V) . Um dieses Gleichungssystem zu schließen müssen weitere Approximationen für die Terme $(III) - (V)$ verwendet werden, ansonsten ist auch diese Gleichung nicht lösbar. Wie in [189] gezeigt, ergibt sich somit eine entgültige Form der Transportgleichung der turbulenten kinetischen Energie:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}k\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\bar{\mu} + \bar{\mu}_t) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \bar{\rho}\epsilon \quad (2.49)$$

P_k kennzeichnet hierbei den Produktionsterm, welcher ebenfalls mit Hilfe des Wirbelviskositätsansatzes modelliert wird und der letzte Term beschreibt die Dissipation der turbulenten kinetischen Energie. Zur Beschreibung der Längenskala wird eine zweite Transportgleichung benötigt. Für deren Beschreibung gibt es mehrere Ansätze, wobei hier insbesondere auf die Bestimmung der Dissipation hingewiesen werden soll, da sie in dieser Arbeit verwendet wird. Die Herleitung dieser Gleichung findet sich in [189]. Die exakte Transportgleichung beinhaltet Unbekannte, welche approximiert werden müssten. Daher wird die gesamte Gleichung als Approximation betrachtet, wobei die bekannteste Form wie folgt gegeben ist:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\epsilon\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\bar{\mu} + \frac{\bar{\mu}_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\epsilon 1} P_k \frac{\epsilon}{k} - \bar{\rho} C_{\epsilon 2} \frac{\epsilon^2}{k} \quad (2.50)$$

Dabei sind $C_{\epsilon 1}$, $C_{\epsilon 2}$, σ_k , σ_ϵ Konstanten, welche empirisch hergeleitet werden müssen. Die Transportgleichungen sind hierbei mit den Erhaltungsgleichungen voll gekoppelt. Für das bekannteste Turbulenzmodell, das sogenannte $k - \epsilon$ Turbulenzmodell, sind die Koeffizienten beispielhaft gegeben durch $C_{\epsilon 1} = 1.44$, $C_{\epsilon 2} = 1.92$ und $\sigma_\epsilon = 1.3$. Die Wirbelviskosität ist nach 2.46 definiert als

$$\bar{\mu}_t = \bar{\rho} \cdot u_{ch,k\epsilon} \cdot l_{ch,k\epsilon} = C_\mu \bar{\rho} \frac{k^2}{\epsilon} \quad (2.51)$$

mit $C_\mu = 0.09$. Dieses Modell besitzt jedoch einige Schwächen. Der gesamte wandnahe Bereich wird etwa mit Hilfe einer Wandfunktion, vgl. [66], beschrieben. Diese Art der Modelle werden High-Reynolds-Modelle [20],[102] genannt und sind für stark turbulente, wandgebundene Strömungen mit starker Wärmezufuhr, wie sie im folgenden betrachtet werden sollen, nicht geeignet. Wandfunktionen können Effekte der Wärmezufuhr auf die Turbulenz, insbesondere bei überkritischen Drücken, und somit resultierende Änderungen der Wandtemperaturen, schwach wiedergeben. Eine Alternative stellen hierbei die sogenannten Low-Reynolds-Modelle, die es ermöglichen, bis zur viskosen Unterschicht

aufzulösen. Die Vielzahl an verschiedenen Low-Reynolds-Modellen bedarf einer Übersicht, wobei die Werke von [136] und [151] zu erwähnen sind. Diese beinhalten zwei zusätzliche Terme (*I*) und (*II*), die erst in der Nähe der Wand aktiv werden, und zusätzliche Dämpfungsfunktionen, f_1 , f_2 und f_μ . Somit sind die Transportgleichungen gegeben durch:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}k\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\bar{\mu} + \bar{\mu}_t) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \bar{\rho}\epsilon - \underbrace{\bar{\rho}D}_{(I)} \quad (2.52)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}\epsilon\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\bar{\mu} + \frac{\bar{\mu}_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\epsilon 1} f_1 P_k \frac{\epsilon}{k} - \bar{\rho} C_{\epsilon 2} f_2 \frac{\epsilon^2}{k} + \underbrace{\bar{\rho}E}_{(II)} \quad (2.53)$$

Die Wirbelviskosität fällt dabei mit Hilfe der Dämpfungsfunktion f_μ ebenfalls gegen Null:

$$\bar{\mu}_t = \bar{\rho} \cdot u_{ch} \cdot l_{ch} = \bar{\rho} C_\mu f_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (2.54)$$

Als Low-Re-Turbulenzmodelle kommen in dieser Arbeit das Modell von Launder-Sharma [101], das Modell von Chien [27] und ein an überkritische Druckbedingungen angepasstes Modell [18] zum Einsatz. Diese werden im Folgenden näher beschrieben.

2.5.2.2 Launder-Sharma-Low-Re-Modell

Das Launder-Sharma Modell ist das wohl bekannteste Low-Reynolds Turbulenzmodell. Diesem Modell liegen die Standardwerte der Konstanten, wie zuvor gezeigt, zugrunde:

$$C_\mu = 0.09, \quad C_{\epsilon 1} = 1.44, \quad C_{\epsilon 2} = 1.92, \quad \sigma_\epsilon = 1.3 \quad (2.55)$$

Die Dämpfungsfunktion für die Wirbelviskosität ist dabei wie folgt in Abhängigkeit von Strömungsgrößen gegeben,

$$f_\mu = \exp \left[\frac{-3.4}{\left(1 + \frac{Re_t}{50}\right)^2} \right] \quad (2.56)$$

mit der turbulenten Reynoldszahl [61]:

$$Re_t = \frac{\bar{\rho}\tilde{k}^2}{\bar{\mu}\tilde{\epsilon}} \quad (2.57)$$

Die Dämpfungsfunktionen der Dissipationsgleichung sind definiert als:

$$f_1 = 1.0 \quad \text{und} \quad f_2 = 1.0 - 0.3 \exp(-Re_t^2) \quad (2.58)$$

Die zusätzliche Terme werden beschrieben mit

$$D = 2 \frac{\bar{\mu}}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial \sqrt{k}}{\partial y} \right)^2 \quad \text{und} \quad E = 2 \frac{\bar{\mu}\bar{\mu}_t}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial^2 \tilde{u}_i}{\partial y^2} \right)^2 \quad (2.59)$$

Die Randbedingungen sind gegeben durch:

$$k_w = 0, \quad \epsilon_w = 0 \quad (2.60)$$

2.5.2.3 Chien-Low-Re-Modell

Das Chien-Turbulenzmodell [27] basiert auf dem Modell von Jones und Launder [75]. Es wurde entwickelt um Wandreibungseinflüsse, Wärmeübergänge und die kinetischen Energie bei turbulenten Strömungen genauer wiederzugeben. Es verwendet dabei modifizierte Konstanten:

$$C_\mu = 0.09, \quad C_{\epsilon 1} = 1.35, \quad C_{\epsilon 2} = 1.80, \quad \sigma_\epsilon = 1.3 \quad (2.61)$$

Im Unterschied zu dem vorher genannten Launder-Sharma-Modell ist die Dämpfungsfunktion für die Wirbelviskosität abhängig vom dimensionslosen Wandabstand y^+ um Reibungseinflüsse zu berücksichtigen:

$$f_\mu = 1 - \exp(-0.0115y^+) \quad (2.62)$$

Die Dämpfungsfunktionen für die Dissipationsgleichung sind jedoch sehr ähnlich:

$$f_1 = 1.0 \quad \text{und} \quad f_2 = 1.0 - 0.22 \exp\left(\frac{-Re_t^2}{36}\right) \quad (2.63)$$

Ebenso die beiden zusätzlichen Quellterme D und E sind wie folgt in Abhängigkeit des Wandabstandes gesetzt [61]:

$$D = 2 \frac{\tilde{\mu} \tilde{k}}{\rho} \left(\frac{1}{y^2}\right) \quad \text{und} \quad E = -2 \frac{\tilde{\mu} \tilde{\epsilon}}{\rho y^2} \exp(-0.5y^+) \quad (2.64)$$

Die Randbedingungen sind vergleichbar zum Launder-Sharma Modell gegeben durch:

$$k_w = 0, \quad \epsilon_w = 0 \quad (2.65)$$

2.5.2.4 Angepasstes Modell für überkritische Druckzustände

Ausgehend vom Basismodell von Jones und Launder [75], fällt bei der Analyse vieler verschiedener Low-Re-Modelle, wie etwa auch dem Launder-Sharma Modell [101], auf, dass die Abhängigkeit der Wirbelviskosität von der turbulenten Reynoldszahl Re_t eine gewichtige Rolle bei der Vorhersage turbulenter Strömungen spielt. Falls diese zudem durch eine Wand begrenzt sind, gewinnen Reibungseinflüsse an Einfluss, welche ebenfalls bei der Berechnung der Wirbelviskosität berücksichtigt werden müssen, vgl. Chien [27]. Somit ist eine Kombination beider Ansätze eine logische Konsequenz, welche bereits erfolgreich von Lam und Bremhorst [99] auf turbulente Strömungen angewendet wurde. Schwächen des Modells zeigten sich jedoch bei der Untersuchung von Wärmeübergängen, insbesondere bei überkritischen Druckbedingungen [18]. Um diesen vielversprechenden Ansatz erfolgreich einsetzen zu können, wird im weiteren Verlauf eine Methodik entwickelt, welche speziell an überkritische Druckbedingungen angepasst ist.

Basierend auf dem Turbulenzmodell von Chien [27] erfolgt eine Modifikation der Dämpfungsfunktion f_μ , welche auf der Kombination der turbulenten Reynoldszahl Re_t und zusätzlich auf dem dimensionsbehafteten Wandabstand beruht:

$$f_\mu = 1 - \exp\left(-0.0115 \frac{y}{2y_{max}} Re_t\right) \quad (2.66)$$

Dieser Ansatz folgt der Vermutung, dass Turbulenzmodelle, welche ausschließlich auf den Stoffeigenschaften, wie etwa Re_t und/oder y^+ , basieren, sehr sensibel auf starke Änderungen dergleichen reagieren. Diese sind insbesondere in der Nähe des pseudokritischen Punktes sehr ausgeprägt. Darüber hinaus wird diese Aussage von mehreren Untersuchungen von He et al. [61], [60], [59] bestätigt. Eine Verwendung des geometrie-basierenden Verhältnisses von linearen und maximalen Wandabstand y/y_{max} soll helfen, die Wirbelviskosität in der Nähe des pseudokritischen Punktes zu stabilisieren.

Die zusätzliche Dämpfungsfunktion f_1 wird wie bei den meisten Low-Re-Modellen als konstant angenommen und orientiert sich dabei am Modell von Jones und Launder [75]. Auf Basis des Modells von Hanjalic und Launder [57] übernahm Chien [27] die weitere Dämpfungsfunktion f_2 , welche auch in dem hier modifizierten Modell zum Einsatz kommt.

$$f_1 = 1 \quad f_2 = 1 - 0.22 \left[\left(-\frac{Re_t}{6} \right)^2 \right] \quad (2.67)$$

Der zusätzliche Quellterm D orientiert sich ebenfalls an der Vorgabe von Chien. Eine Anpassung auf überkritische Druckbedingungen erfolgt ausschließlich für den Term E der Transportgleichung für die Dissipation. Ähnlich zur Dämpfungsfunktion f_μ erfolgt hierbei ebenfalls die Einbindung der beiden wichtigsten Faktoren zur Bestimmung der Wirbelviskosität einer turbulenten Strömung, Re_t und y .

$$E = -2 \frac{\bar{\mu} \tilde{\epsilon}}{\bar{\rho} y^2} \exp \left(-0.5 \frac{y}{2y_{max}} Re_t \right) \quad (2.68)$$

Die zugehörigen Randbedingungen lauten

$$k_W = 0 \quad \text{und} \quad \epsilon_W = 0. \quad (2.69)$$

Ebenso werden die Konstanten von den bereits erwähnten Modellen von Jones [75] und Hanjalic [57] übernommen:

$$C_\mu = 0.09, \quad C_{\epsilon 1} = 1.35, \quad C_{\epsilon 2} = 1.80, \quad \sigma_\epsilon = 1.3 \quad (2.70)$$

2.6 Large-Eddy Simulation - LES

2.6.1 Räumliche Filterung

Wie in Kapitel 2.4 bereits beschrieben werden die großen, energiereichen Skalen bei einer Large Eddy Simulation simuliert und die kleinen Skalen modelliert. Die Trennung in den sogenannten aufgelösten Anteil, den Grobstrukturanteil $\hat{\phi}$ und den Feinstrukturanteil ϕ' (SGS-Subgrid Scale) erfolgt hierbei mit Hilfe eines Filters [105], oder mit Hilfe einer Volumenintegration [159]. Gewöhnlich wird jedoch der erstgenannte Ansatz verwendet, da hier die Gitterweite Δx_j und die Filterbreite unabhängig voneinander gewählt werden können [114]:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (2.71)$$

Hierbei darf die gefilterte Strömungsgröße $\bar{\phi}$ nicht mit der zeitlichen Mittelung der RANS Methode verwechselt werden. Der Grobstrukturanteil kann mathematisch mit einer räumlichen Filterung der physikalischen Größe mit der Filterfunktion $G(x - \xi)$ beschrieben werden [152]:

$$\bar{\phi}(x) = \int_V \phi(\xi) G(x - \xi) d\xi \quad (2.72)$$

Eine wichtige Bedingung für die Filterfunktion oder den sogenannten Filterkernel ist hierbei:

$$\int_V \phi(\xi) G(x - \xi) dx = 1 \quad (2.73)$$

Weitere Eigenschaften der Filterung sind, im Gegensatz zur zeitlichen Mittelung der RANS Methode, u.a.:

$$\overline{\phi'} \neq 0, \quad \overline{\bar{\phi}} \neq \bar{\phi} \quad \text{und} \quad \overline{\bar{\phi}\psi} \neq \bar{\phi}\bar{\psi} \quad (2.74)$$

Mit Hilfe der Filterfunktion $G(x - \xi)$ erfolgt eine räumliche Mittelung auf einen beschränkten Wirkungsbereich. Somit werden die hochfrequenten kleinen Skalen von den niederfrequenten Skalen abgetrennt, was als Tiefpassfilterung bezeichnet wird. Die bekanntesten und meist verwendeten Filterfunktionen sind der sogenannte Top-Hat bzw. Box-Filter, der Gauß-Filter oder der Sharp-Spectral Filter [2], [152], vgl. Abb. 2.10:

- Box-Filter

$$G(x - \xi) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta} & \text{für } |x - \xi| \leq \frac{\Delta}{2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.75)$$

- Gauß-Filter

$$G(x - \xi) = \left(\frac{\gamma}{\pi\Delta^2}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-6|x - \xi|^2}{\Delta^2}\right) \quad (2.76)$$

- Sharp-Spectral-Filter

$$G(x - \xi) = \frac{\Delta \sin\left(\frac{\pi}{\Delta}(x - \xi)\right)}{\pi(x - \xi)} \quad (2.77)$$

γ kennzeichnet hierbei eine Konstante, die zumeist mit einem Wert von 6 in der Literatur angegeben wird, und Δ beschreibt die Filterweite. Da etwa der Box-Filter nur für ein bestimmtes Intervall $|x - \xi| < \frac{1}{2}\Delta$ gilt, entspricht dies einer scharfen Trennung im Frequenzraum und einer einfachen Mittelwertbildung im physikalischen Raum über die Filterbreite Δ . Hierbei wird diese Grenze mit einer bestimmten Wellenzahl in Verbindung gebracht, der sogenannte cut-off Wellenzahl k_c . Im Gegensatz dazu verschmiert der Sharp-Spectral-Filter die Trennung der Skalen, wodurch eine klare Grenze zwischen Simulationsanteil und Modellierungsanteil vermieden wird. Für die Berechnung der Filterbreite wird bei Verwendung der Finiten Volumen Methode zumeist der Box-Filter

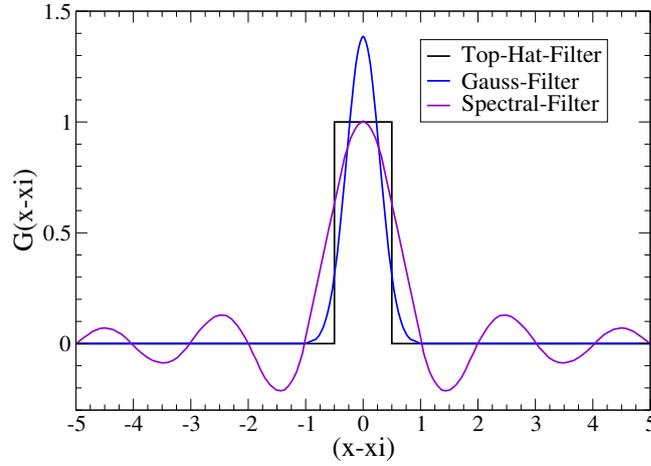


Abbildung 2.10: Top-Hat-, Gauss- und Spectral-Filter

vorgeschlagen. Hierbei wird, durch die räumliche Diskretisierung die Filterbreite implizit vorgegeben. Sie berechnet sich beispielhaft durch

$$\Delta = (\Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3)^{\frac{1}{3}} \quad \text{bzw.} \quad \Delta = \left(\frac{\Delta x_1^2 + \Delta x_2^2 + \Delta x_3^2}{3} \right) \quad (2.78)$$

wobei Erstere auch in der verwendeten Simulationssoftware OpenFOAM, also in dieser Arbeit, Anwendung findet. Weitere Berechnungsmöglichkeiten der Filterbreite finden sich beispielhaft in [47] und [183] wieder.

2.6.2 Erhaltungsgleichungen der LES

Nach Anwendung der räumlichen Favre Filterung (dichtegewichtet) auf die Strömungsgrößen ϕ , wie etwa Geschwindigkeit und Enthalpie,

$$\phi = \hat{\phi} + \phi'' \quad \text{mit} \quad \hat{\phi} = \overline{\rho\phi}/\rho \quad (2.79)$$

und der Standardfilterung der Stoffgrößen und Druckes ψ ,

$$\psi = \bar{\psi} + \psi' \quad (2.80)$$

entsteht somit unter Verwendung der räumlichen Favre Filterung auf das Gleichungssystem (2.15)-(2.17) folgendes System von Differentialgleichungen:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \hat{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.81)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \hat{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \hat{u}_i \hat{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\mu} \left(\frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{\mu} \hat{S} \delta_{ij} \right] + \bar{\rho} g \quad (2.82)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \hat{h})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \hat{u}_j \hat{h})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\bar{\lambda}}{\bar{c}_p} \frac{\partial \hat{h}}{\partial x_j} \right) \quad (2.83)$$

mit $\widehat{S} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widehat{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widehat{u}_j}{\partial x_i} \right)$. Unter Verwendung eines nichtlinearen Filters nimmt der nichtlineare Term der Impuls- und Energiegleichung folgende Form an [54]:

$$\widehat{u_i u_j} = \widehat{u}_i \widehat{u}_j + \widehat{u}_i \widehat{u}'_j + \widehat{u}_j \widehat{u}'_i + \widehat{u}'_i \widehat{u}'_j, \quad (2.84)$$

$$\widehat{u_i h} = \widehat{u}_i \widehat{h} + \widehat{u}_i \widehat{h}' + \widehat{h} \widehat{u}'_i + \widehat{u}'_i \widehat{h}' \quad (2.85)$$

Der erste Term der rechten Seite kennzeichnet den aufgelösten Anteil der turbulenten Schubspannungen und Wärmeströme, und der letzte Term beschreibt den Feinstrukturanteil, der modelliert werden muss. Dieser Feinstrukturanteil beinhaltet nicht, wie etwa bei der RANS Methode, alle turbulenten Fluktuationen, sondern nur den Anteil der nichtaufgelösten Skalen. Somit nähert sich die Lösung bei immer besserer räumlicher Auflösung der Lösung einer direkten numerischen Simulation. Der zweite und dritte Term der rechten Seite, die sogenannten Leonard Terme, entstehen durch die nichtlineare Filterung. Diese verschwinden bei der Anwendung von linearen Filtern [126], wie etwa dem Box-Filter. Die meisten Feinstrukturmodelle basieren auf dem Konzept der Wirbelviskosität, welches auch hier Anwendung findet. Somit entsteht mit Hilfe der getroffenen Annahmen für lineare Filter folgendes Gleichungssystem:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \widehat{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.86)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \widehat{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \widehat{u}_i \widehat{u}_j) = & - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\underbrace{(\bar{\mu} + \mu_{SGS})}_{\mu_{eff}} \left(\frac{\partial \widehat{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \widehat{u}_i}{\partial x_j} \right) \right] \\ & - \frac{2}{3} \bar{\mu} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \widehat{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + (\bar{\rho} g) \end{aligned} \quad (2.87)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \widehat{h}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \widehat{u}_j \widehat{h}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\underbrace{(\bar{a}^* + a_{SGS})}_{a_{eff}} \frac{\partial \widehat{h}}{\partial x_j} \right] \quad (2.88)$$

Die Bestimmung der Feinstrukturwirbelviskosität folgt analog zur RANS-Methode aus einem charakteristischen Zeit- und Längenmaß. Letzteres ist jedoch bei einer Large Eddy Simulation durch das Gitter, bzw. über die Filterweite, vorgegeben, was einen großen Vorteil darstellt. Im Folgenden soll näher auf die dieser Arbeit zugrunde liegenden Feinstrukturmodelle eingegangen werden.

2.6.3 Feinstrukturmodelle

2.6.3.1 Smagorinsky-Modell

Die meisten existierenden Feinstrukturmodelle wurden formal aus statistischen Modellen hergeleitet. Ebenso auch das wohl am weitesten verbreitetste und bekannteste Modell, das sogenannte Smagorinsky Modell [169]. Es basiert auf dem Wirbelviskositätskonzept, das schon in Kapitel 2.5.1 angesprochen wurde, und ist vergleichbar zu einem einfachen

Mischungswegmodell. Die Längenskala hängt hierbei jedoch nicht vom Mischungsweg ab, sondern von der lokalen Gitterweite, welches ein Maß für die nichtaufgelösten Skalen darstellt. Somit kann die Feinstrukturwirbelviskosität μ_{SGS} wie folgt bestimmt werden:

$$\mu_{SGS} = \rho (c_s \Delta)^2 \underbrace{\sqrt{2\widehat{S}_{ij}\widehat{S}_{ij}}}_{|\dot{S}|} \quad (2.89)$$

Hierbei kennzeichnet c_s eine Konstante, welche gewöhnlich Werte zwischen 0.1 – 0.2 annehmen kann [28], [33]. Moin und Kim [121] passten dieses Modell unter Verwendung der van Driest'schen Dämpfungsfunktion [182] für Rohrströmungen an und verwendeten einen Wert für die Konstante von $c_s = 0.065$. Um die Problematik der Wahl von c_s zu umgehen kann eine dynamische Prozedur verwendet werden, welche in Kapitel 2.6.3.3 näher erläutert wird.

Für die Berechnung der Feinstrukturwirbelviskosität der kompressiblen Erhaltungsgleichungen wird in dieser Arbeit ein modifizierter Ansatz gewählt [43]. Ähnlich zu Gleichung 2.38 ist die Berechnung des Schubspannungstensors begründet auf:

$$-\rho \widehat{u_i'' u_j''} = B = 2\overline{\mu_{SGS}} \left(\underbrace{\widehat{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \widehat{u}_k}{\partial x_k}}_{\dot{S}} \right) - \frac{2}{3}\bar{\rho}k\delta_{ij} \quad (2.90)$$

Mit Hilfe des Smagorinsky Ansatzes (2.89) folgt:

$$B = 2 \underbrace{(\bar{\rho}c_d\Delta^2|\dot{S}|)}_{\overline{\mu_{SGS}}} \dot{S} - \frac{2}{3}\bar{\rho}k\delta_{ij} \quad (2.91)$$

mit $c_d = c_s^2$. Mit Hilfe einer Approximation der turbulenten kinetischen Energie k nach [43] kann die Feinstrukturwirbelviskosität wie folgt modifiziert werden:

$$\overline{\mu_{SGS}} = \bar{\rho}c_d\Delta^2|\dot{S}| = \bar{\rho}(c_k\sqrt{c_i})\Delta|\dot{S}|\Delta = \bar{\rho}c_k \underbrace{\sqrt{c_i\Delta^2|\dot{S}|^2}}_k \Delta = c_k\bar{\rho}\sqrt{k}\Delta \quad (2.92)$$

Die Berechnung von k erfolgt nun nicht mit Hilfe des Ansatzes aus Gleichung 2.92, sondern aus einer lokalen Gleichgewichtsbedingung aus Produktion (I) und Dissipation (II) der turbulenten kinetischen Energie [43]:

$$\underbrace{-B \cdot \widehat{S}_{ij}}_{(I)} = \underbrace{c_e\bar{\rho}k^{3/2}\Delta^{-1}}_{(II)} \quad (2.93)$$

Das Ergebnis dieser Gleichung kann leicht mit Hilfe eines Ansatzes für das Lösen einer quadratischen Gleichung nach k bestimmt werden. Somit ist die Berechnung von μ_{SGS} gewährleistet und das Gleichungssystem ist geschlossen. Den dimensionslosen Koeffizienten werden folgende Werte zugewiesen:

$$c_k = 0.07, \quad c_e = 1.05, \quad c_i = 1.0 \quad (2.94)$$

Die Berechnung des Feinstrukturanteils der Temperaturleitfähigkeit a_{SGS} ist vergleichbar zur statistischen Turbulenzmodellierung mit der Feinstruktur Prandtl Zahl wie folgt gekoppelt:

$$a_{SGS} = \frac{\mu_{SGS}}{Pr_{SGS}} \quad (2.95)$$

2.6.3.2 Eingleichungs-Modell

Um die Genauigkeit der auf dem Wirbelviskositätsansatz beruhenden Feinstrukturmodelle zu verbessern, wurde ein neuer Ansatz, basierend auf einer Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie, vorgeschlagen. Dieser beruht ebenfalls auf Gleichung 2.90. Eine exakte Transportgleichung kann hergeleitet werden, jedoch ist es unabdingbar einige Terme zu modellieren. Basierend auf dem Eingleichungsmodell von Yoshizawa [193], [194] lautet die Transportgleichung:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} k_{SGS})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \hat{u}_j k_{SGS})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\bar{\mu} + \bar{\mu}_{SGS}) \frac{\partial k_{SGS}}{\partial x_j} \right] - B \cdot \hat{S}_{ij} - c_e \bar{\rho} k_{SGS}^{3/2} \Delta^{-1} \quad (2.96)$$

Hierbei beschreibt der erste Term der rechten Seite diffusive Transportprozesse, welche modelliert werden müssen. Wie bereits im vorangegangenen Kapitel erwähnt, kennzeichnet der zweite Term die Produktion und der letzte Term die dissipativen Transportprozesse. Die Feinstrukturwirbelviskosität wird vergleichbar zum Smagorinsky Modell wie folgt modelliert:

$$\bar{\mu}_{SGS} = c_k \bar{\rho} \sqrt{k_{SGS}} \Delta \quad (2.97)$$

Die dimensionslosen Koeffizienten und die Berechnung des Feinstrukturanteils der Temperaturleitfähigkeit folgen den Ausführungen 2.94 bzw. 2.95. Durch die Bezeichnung k_{SGS} soll noch einmal verdeutlicht werden, dass bei diesem Verfahren die turbulente kinetische Feinstrukturenergie aus einer Transportgleichung gewonnen wird. Vorteile dieser Art der Modellierung sind die Berücksichtigung des möglichen Backscatter Effekts, also dem Transport von Energie von den kleinen Skalen zu den großen Skalen, und ein verbessertes Verhalten für die anisotrope Turbulenz bei Kanalströmungen in Wandnähe. Ein Nachteil ist die weitere, zu lösende Transportgleichung, welche den Rechenaufwand erhöht.

2.6.3.3 Der dynamische Ansatz

Bei der Verwendung des Smagorinsky Modells oder des Eingleichungsmodells werden die Werte der Koeffizienten c vor der Simulation festgelegt und als konstant angenommen. Dies ist ein Schwachpunkt dieser Modelle, da die Koeffizienten von Zeit und Raum abhängig sind. Um diesen Nachteil auszugleichen, wird eine dynamische Berechnung der Koeffizienten während der Simulation angewendet [31], basierend auf dem zuvor beschriebenen Eingleichungsmodell. Der dynamische Koeffizient c_k innerhalb des Produktionstermes der Impulsgleichung

$$-B \cdot \hat{S}_{ij} = \left(2c_k \bar{\rho} \sqrt{k_{SGS}} \Delta \dot{S} - \frac{2}{3} \bar{\rho} k_{SGS} \delta_{ij} \right) \hat{S}_{ij} \quad (2.98)$$

wird ähnlich zu den dynamischen Standardmodellen [45], [46] wie folgt berechnet:

$$c_k = \frac{L_{ij} M_{ij}}{2M_{ij} M_{ij}}, \quad \text{mit} \quad L_{ij} = \widetilde{u_i u_j} - \widetilde{\widetilde{u_i} \widetilde{u_j}}, \quad (2.99)$$

$$M_{ij} = \widetilde{\Delta} K^{\frac{1}{2}} \widetilde{S_{ij}} - \Delta \left(k_{SGS}^{\frac{1}{2}} \widetilde{S_{ij}} \right) \quad \text{und} \quad K = \widetilde{k}_{SGS} + \frac{1}{2} L_{ii} \quad (2.100)$$

Hierbei beschreibt L_{ij} die dynamischen Leonard Spannungen, bestehend aus den Feinstrukturspannungen des Standardfilters $\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j}$ und den Feinstrukturspannungen eines größeren Testfilters $T_{ij} = \widetilde{\overline{u_i u_j}} - \widetilde{\overline{u_i} \overline{u_j}}$, vgl. Abb. 2.11. Die kinetische Feinstrukturenergie basiert ebenfalls auf dem Testfilter, gekennzeichnet durch \sim [30]. Diese sollte nicht mit der statistischen Mittelung aus Kapitel 2.5 verwechselt werden. Somit kann die Konstante c_k mit Hilfe aufgelöster Daten gewonnen werden. Die turbulente kinetische Feinstrukturenergie k_{SGS} ist hierbei im Wesentlichen eine lokale Größe. Die hiermit möglichen auftretenden großen lokalen Schwankungen der Koeffizienten können numerische Instabilitäten verursachen. Um diese zu vermeiden, wird eine Verwendung eines konstanten Koeffizienten c_k im Raum, jedoch nicht in der Zeit, vorgeschlagen [170]. Hierbei werden alle lokalen dynamischen Informationen der Quellterme der Transportgleichung für k_{SGS} berücksichtigt, jedoch die Schwankungen der Koeffizienten gedämpft. Dieser Ansatz für die Bestimmung von c_k findet auch in dieser Arbeit Verwendung. Die Konstanten c_e und c_i hingegen behalten ihre ursprünglichen Werte bei.

2.6.4 Herleitung eines variablen Feinstruktur Prandtl Zahl Ansatzes

Der Ansatz einer konstanten Feinstruktur Prandtl Zahl, vgl. Glg. 2.95, basiert auf der Annahme einer Ähnlichkeitsbeziehung zwischen Geschwindigkeits- und Temperaturfeld. Dies ist gewöhnlich gültig für molekulare Prandtl Zahlen um einen Wert von eins, was bei überkritischen Drücken nicht der Fall ist. Im folgenden soll auf Basis des Eingleichungsmodell aus Kapitel 2.6.3.2 ein Ansatz für eine variable Feinstruktur Prandtl Zahl hergeleitet werden, der die starken Stoffwertänderungen berücksichtigt. Dieser beruht im Wesentlichen auf den Untersuchungen von Otic et al. [134], welcher eine Abschätzung für konstante Stoffwerte bestimmte. Zunächst müssen hierfür die Grundlagen der Turbulenztheorie noch einmal genauer erläutert werden.

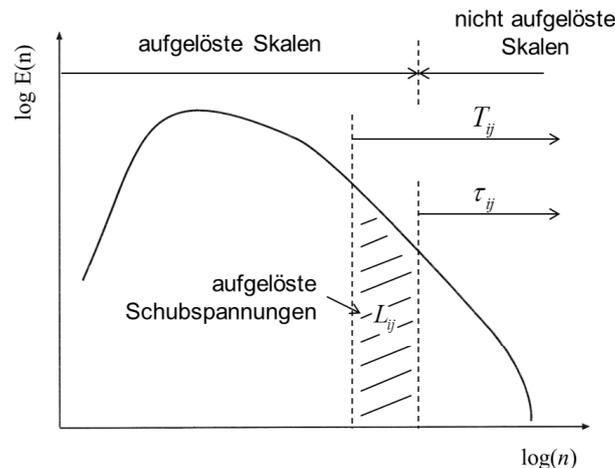


Abbildung 2.11: Dynamische Bestimmung der Konstanten innerhalb des Produktionstermes

Mit Hilfe des Gradienten-Diffusionsansatzes, welcher den Schließungsterm zum Gradienten der Enthalpie in Beziehung setzt

$$-\widehat{\rho u'_j h'} = -a_{SGS} \frac{\partial \hat{h}}{\partial x_j} \quad (2.101)$$

kann das System der Erhaltungsgleichungen in Bezug auf die Energiegleichung geschlossen werden. Hierbei steht die turbulente Temperaturleitfähigkeit a_{SGS} wie folgt mit der Feinstruktur Prandtl Zahl Pr_{SGS} in Beziehung

$$a_{SGS} = \frac{\nu_{SGS}}{Pr_{SGS}}. \quad (2.102)$$

Die Feinstrukturwirbelviskosität ν_{SGS} kann mit Hilfe des Ansatzes von Rotta für die Dissipationsrate,

$$\epsilon = c_\epsilon k^{3/2} \Delta^{-1} \quad (2.103)$$

und den in Kapitel 2.6.3.2 vorgestellten Ansätzen wie folgt modelliert werden,

$$\nu_{SGS} = c'_k \underbrace{\frac{k}{\epsilon}}_{(*)} k = c'_k \frac{k}{c_\epsilon k^{3/2} \Delta^{-1}} k = c_k \Delta k^{1/2} \quad (2.104)$$

wobei hier k die aus dem Eingleichungsmodell gewonnene turbulente kinetische Energie und c modellspezifische Konstanten kennzeichnet. Die turbulente Temperaturleitfähigkeit ist, wie bereits in Gleichung 2.102 gezeigt, mit der turbulenten Prandtl Zahl gekoppelt,

$$a_{SGS} = c'_a \underbrace{\frac{k}{\epsilon}}_{(*)} k = c'_a \frac{k}{c_\epsilon k^{3/2} \Delta^{-1}} k = c_a \Delta k^{1/2} \quad \text{mit} \quad c_a = \frac{c_k}{Pr_{SGS}} \quad (2.105)$$

Das turbulente Zeitmaß k/ϵ (*) spielt, wie in den Gleichungen 2.104 und 2.105 angedeutet, eine sehr wichtige Rolle für die Modellierung der Turbulenz. Dieses sogenannte mechanische Zeitmaß wird in den allermeisten Modellen verwendet, was bei sich sehr stark ändernden Prandtl Zahlen, wie es bei überkritischen Druckbedingungen der Fall ist, physikalisch unzureichend sein kann. Insbesondere können sich unter diesen Bedingungen die Turbulenzspektren der Geschwindigkeitsfluktuationen k und der Temperaturschwankungen $\overline{\Theta^2}$ stark unterscheiden. Somit ist die Wahl des richtigen Zeitmaßes bezogen auf das Impuls- oder Temperaturfeld, also k/ϵ oder $\overline{\Theta^2}/\epsilon_T$, wobei hier ϵ_T die zugehörige Dissipationsrate kennzeichnet, von fundamentaler Bedeutung. Eine Kombination beider Zeitskalen, wie in (2.106) gezeigt, kann die Modellierung des turbulenten Wärmetransportes stark verbessern.

$$\left(\frac{\overline{\Theta^2}}{\epsilon_T} \times \frac{k}{\epsilon} \right)^{1/2} \quad (2.106)$$

Auf Basis isotroper Turbulenz und Zwangskonvektionsbedingungen soll nun im weiteren Verlauf eine einfache Beziehung zwischen der Feinstruktur und der molekularen Prandtl Zahl hergeleitet werden. Die sogenannte „cutoff“-Wellenzahl, welche die aufgelösten von

den nichtaufgelösten Skalen trennt, spielt hierbei eine besondere Rolle. Bei von dem Wert eins stark abweichenden Prandtl Zahlen unterscheidet sich die „cutoff“-Wellenzahl des Spektrums der Geschwindigkeitfluktuationen n_c wesentlich von der „cutoff“-Wellenzahl des Spektrums der Temperaturfluktuationen Θn_c . Corsin konnte eine Beziehung herleiten [29], welche das Verhältnis beider Wellenzahlen mit der Änderung der Prandtl Zahl wie folgt gleichsetzt

$$\frac{\Theta n_c}{n_c} = Pr^{3/4} \quad (2.107)$$

Diese Beziehung ist jedoch nur gültig, falls die kinematische Viskosität ν und die Temperaturleitfähigkeit a die gleiche Größenordnung besitzen, bzw. $\nu < a$. Ersteres ist für die vorliegende Untersuchung der Fall. Nur dann weisen die unterschiedlichen Spektren die gleiche Zerfallsrate von $n^{-5/3}$ im Inertialbereich auf, vgl. Kapitel 2.1. Mit Hilfe der Ensemble-Mittelung,

$$\langle \phi(x, t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N \phi_i(x, t) \quad (2.108)$$

welche allgemein lokale Größen mit Hilfe einer zeitlichen Mittelung approximiert, können unter den getroffenen Annahmen das Spektrum der kinetischen Energie $\langle u_i^2/2 \rangle$ und der Temperaturfluktuationen $\langle \Theta^2 \rangle$ wie folgt für den Inertialbereich angegeben werden, vgl. [65],

$$E(n) = \alpha \langle \epsilon \rangle^{2/3} n^{-5/3}, \quad \text{bzw.} \quad E_T(n) = \beta \langle \epsilon_T \rangle \langle \epsilon \rangle^{-1/3} n^{-5/3} \quad (2.109)$$

Hierbei sind die jeweiligen Dissipationsraten wie folgt definiert:

$$\langle \epsilon \rangle = \left\langle \nu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 \right\rangle, \quad \text{bzw.} \quad \langle \epsilon_T \rangle = \left\langle a \left(\frac{\partial h}{\partial x_j} \right)^2 \right\rangle \quad (2.110)$$

Für die Konstanten α und β wurden empirischen die Werte

$$\alpha \approx 1.6 \quad \text{bzw.} \quad \beta \approx 1.3 \quad (2.111)$$

bestimmt, vgl. [122]. Diese unterliegen jedoch der Annahme isotroper Turbulenz. Mit einer einfachen Integration über den nichtaufgelösten Teil der Wellenzahlen folgt für die turbulente kinetische Energie

$$\langle k \rangle = \int_{n_c}^{\infty} E(n) dn = 3/2 \alpha \langle \epsilon \rangle^{2/3} (1/n_c)^{2/3} \quad (2.112)$$

und für die Temperaturschwankungen

$$\langle \overline{\Theta^2} \rangle = \int_{\Theta n_c}^{\infty} E_T(n) dn = 3/2 \beta \langle \epsilon_T \rangle \langle \epsilon \rangle^{-1/3} (1/\Theta n_c)^{2/3}. \quad (2.113)$$

Mit Hilfe der beiden vorangegangenen Gleichungen und Gleichung 2.107 lässt sich die nachstehende Beziehung ableiten:

$$\left(\frac{\langle \overline{\Theta^2} \rangle \langle k \rangle}{\langle \epsilon_T \rangle \langle \epsilon \rangle} \right)^{1/2} = \left(\frac{\beta}{\alpha} \right)^{1/2} Pr^{4/9} \frac{\langle k \rangle}{\langle \epsilon \rangle}. \quad (2.114)$$

Einsetzen von Gleichungen 2.103 in Gleichung 2.114 führt zu

$$c_e^{-1} \left(\frac{\beta}{\alpha} \right)^{1/2} Pr^{4/9} \Delta \langle k \rangle^{-1/2}. \quad (2.115)$$

Da die lokal definierten Größen k und $\langle k \rangle$ ausschließlich positive Werte annehmen können, gibt es eine lokal definierte Konstante c'_a für die gilt, dass $c'_a k^{-1/2} = \langle k \rangle^{-1/2}$. Mit Hilfe dieses Ansatzes folgt für die Beschreibung des Feinstrukturanteiles der Temperaturleitfähigkeit nach Gleichung 2.105:

$$a_{SGS} = c_a \left(\frac{\beta}{\alpha} \right)^{1/2} Pr^{4/9} \Delta k^{1/2} \quad (2.116)$$

Für die genannten Bedingungen zeigten Schmidt und Schumann [157] für den Inertialbereich die Gültigkeit der Beziehung $c_a = (2\alpha/\beta) c_k$. Dies führt zu der abschließenden Beschreibung des Feinstrukturanteiles der Temperaturleitfähigkeit

$$a_{SGS} = c_k \left(\frac{4\alpha}{\beta} \right)^{1/2} Pr^{4/9} \Delta k^{1/2} \quad (2.117)$$

und somit zum variablen Ansatz mit Hilfe von Gleichung 2.104:

$$Pr_{SGS} = \frac{\nu_{SGS}}{a_{SGS}} = \frac{1}{(4\alpha/\beta)^{1/2} Pr(T)^{4/9}} \quad (2.118)$$

Die Feinstruktur Prandtl Zahl ist somit abhängig von der sich stark ändernden molekularen Prandtl Zahl.

3 Numerischer Lösungsansatz

Das Ziel dieses Kapitels ist das Aufzeigen und Diskutieren der Ansätze, bzw. der Verfahren, welche für das Lösen der kompressiblen Erhaltungsgleichungen benötigt werden. Diese sind durch ihre Nichtlinearität analytisch nicht lösbar, wodurch numerische Verfahren zum Einsatz kommen, um möglichst exakte Näherungslösungen zu bestimmen. Insbesondere bei einer Large Eddy Simulation kann eine falsche Wahl des Lösungsverfahrens schnell zu Instabilitäten führen. Des Weiteren beeinflusst ein numerischer Fehler, verursacht durch die Wahl des numerische Verfahrens, alle Skalen und nicht, wie bei einem Feinstrukturmodell lediglich die kleinen Skalen.

Im folgenden Kapitel wird eine Methode zur Verfügung gestellt, welche es ermöglicht das System der Erhaltungsgleichungen, sowohl für die RANS als auch für die LES, numerisch zu lösen. Hierzu gehören geeignete Diskretisierungsverfahren, Gleichungslöser und ein geeigneter Ansatz für das Lösen des gesamten Gleichungssystems. Zuletzt werden die verwendeten Randbedingungen näher erläutert. Grundlage dieses Kapitels bilden dabei [39], [72] und [184].

3.1 Das Numerische Verfahren

Bevor ein numerisches Verfahren zur Anwendung kommen kann, muss das geometrische Modell des zu untersuchenden Strömungsgebietes in eine endliche Anzahl von Zellen eingeteilt werden. Für diese sogenannte Diskretisierung des Rechengebietes werden innerhalb und am Rand des Gebietes Stützstellen bzw. Netzpunkte festgelegt, welche in der Gesamtheit das numerische Netz bilden. Hierbei unterscheidet man im Allgemeinen drei Arten: strukturierte, blockstrukturierte und unstrukturierte Netze bzw. Gitter. Bei einem strukturiertem Netz sind die Zellen so angeordnet, dass sie mit Hilfe eines Indextripels i, j, k erfasst werden können. Dies hat bezüglich der numerischen Diskretisierung sehr große Vorteile, da hierbei die Nachbarnpunkte der Zellen eine wesentliche Rolle spielen. Diese können durch die Indizierung sehr schnell abgerufen werden, was eine geringere Speicherbelegung, schnellere Rechenzeiten und eine höhere Genauigkeit zur Folge hat. Das einfachste strukturierte Netz bildet das kartesische Netz, welches sich dadurch auszeichnet, dass alle Zellen in alle Raumkoordinaten gleich groß sind. Die beschränkte Einsetzbarkeit für einfache Geometrien ist jedoch ein sehr großer Nachteil. Um diesen auszugleichen, wird die Verwendung von sogenannten blockstrukturierten Netzen vorgeschlagen. Hierbei werden einzelne Regionen in Blöcke zusammengefasst und jeweils durch ein lokales Koordinatensystem beschrieben. Dies ermöglicht eine frei wählbare Verfeinerung des Netzes in eine beliebige Raumrichtung, etwa in Richtung einer Wand. Somit wird eine genaue Auflösung der Grenzschicht ermöglicht und numerischer Diffusion vorgebeugt. Aufgrund der numerischen Genauigkeit und des relativen geringen Aufwandes der Netzerzeugung werden in dieser Arbeit blockstrukturierte Netze bestehend aus Hexaedern verwendet. Unstrukturierte Netze kommen oft bei sehr komplexen Geome-

trien zum Einsatz, bei denen strukturierte Netze versagen. Hierbei sind die Gitterpunkte ungeordnet im Raum verteilt und werden in Dreieckselemente bzw. Tetraederelemente zusammengefasst. Jedem Element werden hierbei lokale Knotennummern zugeteilt, welche mit globalen Knotennummern verknüpft sind. Jedes Element ist somit über diese Beschreibung mit seinen Nachbarelementen verbunden. Auch eine lokale Verfeinerung in bestimmten Gebieten ist jederzeit möglich. Somit erlauben diese Gitter eine sehr hohe Flexibilität. Jedoch zeichnen sie sich auch durch die höhere Ungenauigkeit und den höheren Speicherplatzbedarf aus.

Der Gitterzeugung folgend müssen nun auch die Erhaltungsgleichungen von einer kontinuumsmechanischen bzw. kontinuierlichen Beschreibung in eine diskrete Beschreibung überführt werden. Hierzu werden in der numerischen Strömungsmechanik viele unterschiedliche Verfahren zur Verfügung gestellt. Zu den Bekanntesten zählen hierbei die Methode der Finiten Elemente (FEM), die Finite Differenzen Methode (FDM), die Finite Volumen Methode (FVM) und die weniger verbreiteten Spektralmethoden oder die Lattice-Boltzmann Methode. Details dieser Methoden können jeweils [39] entnommen werden.

Das in dieser Arbeit angewendete Verfahren ist die Finite Volumen Methode. Sie ist die wohl am häufigsten eingesetzte Methode in der Strömungsmechanik und bietet einen sehr guten Kompromiss aus Flexibilität und Genauigkeit. Sie bietet weiterhin den Vorteil, dass ihre integrale Formulierung der zugrundeliegenden Gleichungen den Erhaltungseigenschaften genügen. Es gibt innerhalb der FVM viele verschiedene Ansätze, weshalb im Folgenden nur auf die in dieser Arbeit verwendeten eingegangen werden soll. Die örtliche Diskretisierung basiert hierbei auf blockstrukturierten Gittern mit einer speziell auf das Zellzentrum ausgerichteten Anordnung für die Berechnung der jeweiligen Variablen. Die Diskretisierungsverfahren für Raum und Zeit müssen mindestens von zweiter Ordnung sein, da auch die Erhaltungsgleichungen von zweiter Ordnung sind. Somit kann eine genügend hohe Genauigkeit bei einer ausreichend hohen Berechnungsgeschwindigkeit erreicht werden. Die FVM, die zugehörigen Diskretisierung des Strömungsgebietes und die Diskretisierungsverfahren für Zeit und Raum werden nun im folgenden Kapitel näher erläutert.

3.2 Diskretisierungsverfahren

Die örtliche Diskretisierung des Strömungsgebietes erfolgt in dieser Arbeit mit Hilfe von blockstrukturierten Netzen mit hexagonalen Kontrollvolumen, vgl. Abb. 3.1, welche einer orthogonalen Anordnung unterliegen. Hierbei bilden die Zellen in Umfangsrichtung bei einer Zylindergeometrie die einzige Ausnahme. Deshalb erfolgt die Beschreibung der Diskretisierungsverfahren ausschließlich für orthogonale Netze. Jedes Kontrollvolumen besteht hierbei aus einem Berechnungspunkt P , welcher von sechs Flächen umgeben ist. Bei orthogonalen Netzen zeigen der Vektor d , welcher die beiden benachbarten Zellzentren P und N miteinander verknüpft, und der Normalenvektor der Zellfläche, A_f , in die gleiche Richtung. Dies ist für alle Nachbarzellen gültig. Die zu bestimmenden Variablen, wie etwa Geschwindigkeit oder Enthalpie, werden im Zellzentrum berechnet, wobei abgeleitete Größen auch auf den Flächen bestimmt werden können. Für die Beschreibung

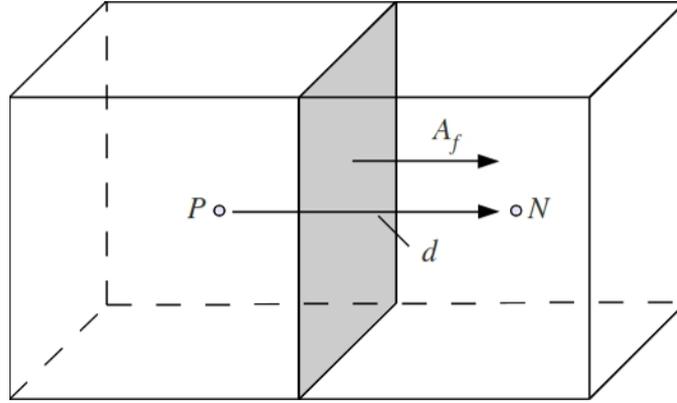


Abbildung 3.1: Kontrollvolumen der FVM

auf nicht-orthogonalen Netzen sei auf [184] verwiesen. Bei der zeitlichen Diskretisierung muss lediglich ein festgelegter Zeitschritt für die festgelegte Berechnungszeit vorgegeben werden. Das verwendete Diskretisierungsverfahren in der Zeit wird in Kap. 3.2.2 näher erläutert.

3.2.1 Räumliche Diskretisierungsverfahren

Nach der Diskretisierung des Strömungsgebietes in viele kleine Kontrollvolumen, wird bei der FVM im ersten Schritt über diese Zellen die Erhaltungsgleichungen integriert. Dies sei am Beispiel einer allgemeinen Transportgleichung gezeigt:

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_V \phi dV}_{\text{zeitl. Änderung}} + \underbrace{\int_V \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i \phi) dV}_{\text{Konvektionsterm}} = \underbrace{\int_V \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) dV}_{\text{Diffusionsterm}} + \underbrace{\int_V S_{\phi(\phi)} dV}_{\text{Quellterm}} \quad (3.1)$$

Hierbei kennzeichnet ϕ die zu transportierende Größe und Γ_ϕ den Koeffizienten des Diffusionstermes. Wegen der vereinfachten Darstellungsweise von Divergenz und Gradient kommt im weiteren Verlauf dieser Arbeit der Nabla Operator zum Einsatz. Hierbei gilt für die Divergenz einer Größe ϕ die Beschreibung $\nabla \cdot \phi = \sum_{i=1}^n \frac{\partial \phi}{\partial x_i}$ und für den Gradienten $\nabla \phi = \frac{\partial \phi}{\partial x_i}$. Mit Hilfe des Gauss'schen Integralsatzes werden nun die Volumenintegrale in Oberflächenintegrale umgewandelt. Dieser besagt, dass die Quell- bzw. Senkenbewegung, also die Divergenz innerhalb des Volumens V durch die Flüsse über alle Randflächen f ausgeglichen wird:

$$\int_V \nabla \cdot \phi dV = \int_{\partial V} dA \cdot \phi \quad (3.2)$$

Hierbei bezeichnet ∂V den Rand des Volumens. Wendet man den Gauss'schen Integralsatz auf ein bestimmtes Kontrollvolumen V_P an und integriert anschließend über die Zellflächen, folgt:

$$\int_{V_P} \nabla \cdot \phi dV = \int_{\partial V_P} dA \cdot \phi = \sum_f \left(\int_f dA \cdot \phi \right) = \sum_f A \cdot \phi_f \quad (3.3)$$

A bezeichnet hierbei den nach außen gerichteten Normalenvektor und ϕ_f die Werte der zu bestimmenden Variablen auf den Flächen. Somit kann die Ableitungsordnung um eins reduziert werden und die Ausgangsgleichung der FVM gewonnen werden. Dies soll anschaulich für jeden Term der allgemeinen Transportgleichung gezeigt werden.

3.2.1.1 Der konvektive Term

Die Diskretisierung des konvektiven Terms folgt der Ausführung von Gleichung 3.3:

$$\int_V \nabla \cdot (\bar{u}\phi) dV \stackrel{(3.3)}{=} \sum_f A \cdot (\bar{u}\phi)_f = \sum_f (A \cdot \bar{u}_f) \phi_f = \sum_f F \phi_f \quad (3.4)$$

Hierbei bezeichnet $F = A \cdot \bar{u}_f$ den Volumenfluss durch die Zellfläche mit Hilfe der zeitlich gemittelten oder gefilterten Geschwindigkeit \bar{u}_f . Das zugrundeliegende Geschwindigkeitsfeld \bar{u} muss dabei die Kontinuitätsgleichung erfüllen:

$$\int_V \nabla \cdot \bar{u} dV \stackrel{(3.3)}{=} \sum F = 0 \quad (3.5)$$

Die Geschwindigkeit bzw. die allgemeine Größe ϕ_f , welche auf den Zellflächen definiert ist, kann mit Hilfe einer einfachen linearen Interpolation der Werte in den Punkten P und N gewonnen werden:

$$\phi_f = f_x \phi_P + (1 - f_x) \phi_N \quad (3.6)$$

Der Interpolationsfaktor f_x ist dabei definiert als das Verhältnis der Abstände zwischen der Zellfläche f und dem Punkt N und dem Abstand zwischen P und N , $f_x = \frac{fN}{PN}$, vgl. Abb. 3.1. Bei einem kartesischen Netz wäre der Interpolationsfaktor somit 0.5. Diese Art der Interpolation wird allgemein als Zentrales Differenzenverfahren bezeichnet, welches eine Genauigkeit zweiter Ordnung besitzt. Es hat jedoch auch einen Nachteil. Bei stark konvektionsdominierenden Strömungen, also bei Strömungen mit hoher Reynoldszahl mit starker Turbulenz, können unphysikalische Oszillationen auftreten. Diese resultieren aus hohen Gradienten der zu interpolierenden Größen zwischen den einzelnen Zellflächen. Um diese zu vermeiden, wird eine Limitierung der Gradienten mit Hilfe des sogenannten Total Variation Diminishing (TVD) Verfahrens angewendet, vgl. [179], [185], um ausreichende Stabilität zu gewährleisten. Eine weitere Möglichkeit wäre die Anwendung des Upwind Verfahrens, welches sich durch seine große Stabilität auszeichnet. Dieses ist in seiner Grundform von erster Ordnung und bestimmt den Wert auf der Zellfläche abhängig von der Flussrichtung:

$$\phi_f = \phi_P, \quad \text{falls } F \geq 0 \quad (3.7)$$

$$\phi_f = \phi_N, \quad \text{falls } F < 0 \quad (3.8)$$

Jedoch wird bei diesem Verfahren dem System zusätzliche numerische Diffusion zugeführt, was insbesondere bei Large Eddy Simulationen die Ergebnisse stark verfälschen kann. Diese Eigenschaft besitzen auch ähnliche Verfahren zweiter Ordnung, wie etwa das lineare Upwind Verfahren [147]. Verfahren höherer Ordnung kommen nicht zum Einsatz, da sie zu einer Zunahme des Berechnungsaufwandes und zum Teil zu einer Erhöhung der Instabilitäten führen würden. Somit kommt in dieser Arbeit ausschließlich das limitierte zentrale Differenzenverfahren zum Einsatz.

3.2.1.2 Der diffusive Term

Der Ansatz für die Diskretisierung des Diffusionstermes ist ähnlich dem zuvor gezeigten:

$$\int_{V_P} \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) dV = \sum_f A \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi)_f = \sum_f (\Gamma_\phi)_f A \cdot (\nabla \phi)_f \quad (3.9)$$

Hierbei wird $(\Gamma_\phi)_f$ mit Hilfe des zentralen Differenzenverfahrens aus Gleichung 3.6 interpoliert. Für orthogonale Netze wird der Gradient auf den Zellflächen wie folgt bestimmt:

$$A \cdot (\nabla \phi)_f = |A| \frac{\phi_N - \phi_P}{|d|} \quad (3.10)$$

Im Allgemeinen werden bei Simulationen keine kartesischen Netze verwendet, was einen Faktor f_x für eine sich ändernde Zellgröße impliziert. Dies wird bei der Berechnung des Gradienten wie folgt berücksichtigt,

$$\left(\widetilde{\nabla \phi} \right)_f = f_x (\nabla \phi)_P + (1 - f_x) (\nabla \phi)_N \quad (3.11)$$

wobei

$$(\nabla \phi)_P = \frac{1}{V} \sum_f \phi_f \quad (3.12)$$

Beide Verfahren sind von zweiter Ordnung, was eine Taylorreihenentwicklung beweist. Des Weiteren ist darauf zu achten, dass nur eine bestimmte Änderung der Zellgröße in eine Richtung verwendet werden darf, da sonst der Abbruchfehler nach der zweiten Ableitung der Tayloreihe sich vergrößert, vgl. [72], [89]. Deswegen ist insbesondere bei einer Large Eddy Simulation darauf zu achten, dass Verfeinerungsraten nicht zu hoch gewählt werden dürfen, da sonst zu viel numerische Diffusion dem System zugeführt wird.

3.2.1.3 Quellterme

Quellterme, welche wiederum von einer Funktion ϕ abhängen können, müssen zunächst linearisiert werden, um dem Gleichungssystem hinzugefügt zu werden:

$$S_\phi(\phi) = S_c + S_p \phi \quad (3.13)$$

Mit Hilfe einfacher Integrationsregeln folgt:

$$\int_{V_P} S_\phi(\phi) = S_c V_P + S_p V_P \phi_P \quad (3.14)$$

3.2.2 Zeitliche Diskretisierungsverfahren

Simulationen, bei denen die RANS-Methode zum Einsatz kommt, werden meist immer stationär gelöst, da es sich um zeitgemittelte Gleichungen handelt. Somit werden die Ableitungsterme in der Zeit nicht berücksichtigt. Eine Large Eddy Simulation, welche

einer räumlichen Mittelung unterliegt, ist per Definition immer instationär. Hierfür lautet die zeitliche Integration der allgemeinen Transportgleichung 3.1 wie folgt:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{\partial}{\partial t} \int_V \phi dV + \int_V \nabla \cdot (\bar{u}\phi) dV - \int_V \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) dV \right] dt \\ = \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_V S_\phi(\phi) dV \right] dt \end{aligned} \quad (3.15)$$

Unter Verwendung der örtlichen Diskretisierung des konvektiven und diffusiven Terms bzw. der Quellterme S_ϕ folgt aus der vorangegangenen Gleichung:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_P V_P + \sum_f F \phi_f - \sum_f (\Gamma_\phi)_f A \cdot (\nabla \phi)_f \right] dt \\ = \int_t^{t+\Delta t} [S_c V_P + S_P V_P \phi_P] dt. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Hierbei können der zeitabhängige Term und die restlichen Terme mit Verfahren unterschiedlicher Ordnung diskretisiert werden. Die Genauigkeit darf jedoch nicht unter 2. Ordnung fallen. Als Beispiel zeitlicher Diskretisierungsschemata seien das Crank-Nicholson (CN) Verfahren und das Backward Verfahren (BD) genannt, wobei in dieser Arbeit nur das Letztere zum Einsatz kommt.

3.2.2.1 Crank-Nicholson Verfahren

Mit Hilfe der Bezeichnung $\phi^{n-1} = \phi(t)$ für den aktuellen Zeitschritt und $\phi^n = \phi(t + \Delta t)$ für den folgenden Zeitschritt, können die zeitliche Ableitung bzw. das Zeitintegral aus Gleichung 3.16 wie folgt bestimmt werden:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_P = \frac{\phi_P^n - \phi_P^{n-1}}{\Delta t} \quad (3.17)$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \phi(t) dt = \frac{1}{2} (\phi^{n-1} + \phi^n) \Delta t \quad (3.18)$$

Die zeitliche Ableitung beschreibt hierbei eine zwischen den Zeitschritten $n - 1$ und n linear gemittelten Wert. Somit folgt unter Anwendung dieser Gleichungen auf 3.16:

$$\begin{aligned} \frac{\phi_P^n - \phi_P^{n-1}}{\Delta t} V_P + \frac{1}{2} \left[\sum_f F \phi_f - \sum_f (\Gamma_\phi)_f A \cdot (\nabla \phi)_f \right]^n \\ + \frac{1}{2} \left[\sum_f F \phi_f - \sum_f (\Gamma_\phi)_f A \cdot (\nabla \phi)_f \right]^{n-1} \\ = \frac{1}{2} [S_c V_P + S_P V_P \phi_P]^n + \frac{1}{2} [S_c V_P + S_P V_P \phi_P]^{n-1} \end{aligned} \quad (3.19)$$

Das CN Verfahren ist von Genauigkeit 2. Ordnung und verwendet für die Berechnung von ϕ bzw. $\nabla \phi$ für beide Zeitschritte Werte im Zellzentrum bzw. im Zentrum der Zellflächen. Es fällt auf, dass bei diesem Verfahren die Variablen aus den Zeitschritten für die örtlichen Terme (Konvektion, Diffusion, Quellen) gespeichert werden müssen, was einen sehr großen Berechnungsaufwand nach sich zieht. Infolgedessen wird die Verwendung des BD Verfahrens, welches im nachfolgenden Kapitel beschrieben wird, bevorzugt.

3.2.2.2 Backward Verfahren

Das sogenannte Backward-Differenzenverfahren ist ebenfalls von Genauigkeit 2. Ordnung und verwendet dabei 3 Zeitebenen,

$$\phi^{n-2} = \phi(t - \Delta t), \quad \phi^{n-1} = \phi(t) \quad \text{und} \quad \phi^n = \phi(t + \Delta t) \quad (3.20)$$

um die zeitliche Ableitung zu bestimmen. Des Weiteren wird die örtliche Mittelung in der Zeit, im Vergleich zum erwähnten Crank-Nicholson Verfahren, nicht angewendet. Die Approximation der zeitlichen Ableitung lautet:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)^n = \frac{\frac{3}{2}\phi^n - 2\phi^{n-1} + \frac{1}{2}\phi^{n-2}}{\Delta t} \quad (3.21)$$

Dies resultiert aus zwei Taylorreihenentwicklungen der Zeitschritte ϕ^{n-2} und ϕ^{n-1} , welche jeweils einen Abbruchfehler 3. Ordnung besitzen:

$$\phi^{n-2} = \phi^n - 2 \left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)^n \Delta t + 2 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}\right)^n \Delta t^2 + O(\Delta t^3) \quad (3.22)$$

$$\phi^{n-1} = \phi^n - \left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)^n \Delta t + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}\right)^n \Delta t^2 + O(\Delta t^3) \quad (3.23)$$

Somit erhält man unter Vernachlässigung der zeitlichen Änderungen der Flüsse über die Zellflächen ein vollständig implizites Diskretisierungsverfahren zweiter Ordnung, wofür die allgemeine Transportgleichung wie folgt lautet:

$$\frac{\frac{3}{2}\phi^n - 2\phi^{n-1} + \frac{1}{2}\phi^{n-2}}{\Delta t} V_P + \sum_f F \phi_f^n - \sum_f (\Gamma_\phi)_f A \cdot (\nabla \phi)_f^n \quad (3.24)$$

$$= S_c V_P + S_P V_P \phi_P^n \quad (3.25)$$

Klarer Vorteil dieses Verfahrens ist der benötigte niedrigere Aufwand gegenüber dem CN-Verfahren sowie die numerische Stabilität. Letztere ist an die Courant Zahl gebunden, welche den Wert von 1 nicht überschreiten darf. Dies trägt zusätzlich zur Stabilität des zentralen Differenzschemas bei, da die Courant Zahl auch vom diskreten Ortsschritt d abhängt.

$$Co = \frac{\bar{u}_f \cdot n}{|d|} \stackrel{!}{<} 1 \quad (3.26)$$

Diese Bedingung besagt anschaulich, dass die Geschwindigkeit eines Fluidteilchens nur so groß sein darf, dass es sich in einem bestimmten Zeitschritt n nicht über die nächste Zelle hinaus bewegt.

3.3 Der Lösungsalgorithmus PISO

Bisher wurde die Diskretisierung anhand einer allgemeinen Transportgleichung beschrieben. Bei der Diskretisierung der kompressiblen Erhaltungsgleichungen können jedoch weitere Probleme entstehen. Dies soll anhand des nichtlinearen, also quadratischen, Konvektionstermes gezeigt werden. Dieser muss für die Diskretisierung zunächst linearisiert

werden, was durch eine Substitution der Geschwindigkeitswerte vom vorangegangenen Zeitschritt wie folgt erreicht wird:

$$\int_{V_P} \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u}) dV = \int_{\partial V} dA \cdot (\bar{\rho} \tilde{u}) = \sum_f A \cdot \bar{\rho} \tilde{u}_f \tilde{u}_f \quad (3.27)$$

$$\approx \sum_f (A \cdot \bar{\rho} \tilde{u}_f^{n-1}) \cdot \tilde{u}_f^n = \sum_f F^{n-1} \cdot \tilde{u}_f^n \quad (3.28)$$

Hierbei kennzeichnet \tilde{u} die Favre gemittelte oder die gefilterte Geschwindigkeit. Mit Hilfe des zentralen Differenzenverfahren kann erst jetzt der Konvektionsterm diskretisiert werden.

$$\sum_f F^{n-1} \cdot \tilde{u}_f = a_{cP} \tilde{u}_P + \sum_N a_{cN} \tilde{u}_N \quad (3.29)$$

wobei a_{cP} und a_{cN} die aus der Diskretisierung hervorgegangenen Koeffizienten der variablen Größe \tilde{u}^{n-1} in der zugehörigen Zelle P und den Nachbarzellen N kennzeichnen. Ähnliche Ansätze erfolgen auch für die restlichen Terme der Erhaltungsgleichung. Um im nächsten Schritt das diskretisierte Gleichungssystem zu lösen, muss eine Druck - Geschwindigkeitskopplung eingeführt werden. Dies ist notwendig, da die Geschwindigkeitskomponente sowohl in Impuls- als auch Kontinuitätsgleichung auftritt, jedoch der Druck als Gradient lediglich in der Impulsgleichung. Somit ist eine explizite Berechnung beider Größen ausgeschlossen. Es muss jedoch sichergestellt werden, dass die numerische Lösung alle Erhaltungsgleichungen erfüllt. Dies geschieht mit Hilfe einer iterativen Prozedur, dem sogenannten PISO - Algorithmus, welcher erstmals von Issa [67] vorgeschlagen wurde. Um das System der Erhaltungsgleichungen 2.2.1 zu koppeln, muss zunächst eine Druckgleichung hergeleitet werden. Diese Herleitung erfolgt mit Hilfe der diskretisierten Kontinuitäts- und Impulsgleichung. Diese lauten, abhängig vom gewählten Diskretisierungsverfahren und unter Vernachlässigung der Quellterme,

$$\frac{1}{\Delta t} (\bar{\rho}^{n+1} - \bar{\rho}^n) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u}_i)^{n+1} = 0 \quad (3.30)$$

$$\frac{1}{\Delta t} [(\bar{\rho} \tilde{u}_i)^{n+1} - (\bar{\rho} \tilde{u}_i)^n] = H(\tilde{u}_i^{n+1}) - \nabla p^{n+1} \quad (3.31)$$

wobei hier, zur besseren Veranschaulichung, das einfache implizite Euler-Verfahren zur Anwendung [103] kam. Hierbei beschreiben n den aktuellen und $n+1$ den folgenden Zeitschritt. Der Operator H fasst die konvektiven und diffusiven Flüsse der Impulsgleichung in ihrer diskretisierten Form zusammen,

$$H(\tilde{u}_i) = a_M \tilde{u}_{i,M} \quad (3.32)$$

wobei a_M die aus der Diskretisierung hervorgegangenen Koeffizienten der variablen Größe \tilde{u}_i in der zugehörigen Zelle P und der Nachbarzellen N ($M=P+N$) beschreibt. Mit Hilfe der getroffenen Annahmen kann nun die Druckgleichung mit Hilfe der Divergenz von Gleichung 3.31 und unter Verwendung der Kontinuitätsgleichung hergeleitet werden:

$$\frac{1}{\Delta t} (\bar{\rho}^{n+1} - \bar{\rho}^n) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u}_i)^n + \Delta t [\nabla \cdot H(\tilde{u}_i^{n+1}) - \nabla \cdot \nabla p^{n+1} + \nabla \cdot S_i] = 0 \quad (3.33)$$

Umschreiben der Gleichung führt zur Ausgangsform der gesuchten Druckgleichung:

$$\nabla \cdot \nabla p^{n+1} = \nabla \cdot H(\tilde{u}_i^{n+1}) + \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u}_i)^n + \nabla \cdot S_i + \frac{1}{\Delta t^2} (\bar{\rho}^{n+1} - \bar{\rho}^n) \quad (3.34)$$

Diese Gleichung wird in der Literatur als Poisson-Gleichung bezeichnet, in welcher $\nabla \cdot \nabla$ den Laplace Operator in Differenzenform beschreibt. Mit Hilfe von Gleichung 3.31 können nun Geschwindigkeit und Druck zum neuen Zeitpunkt $n + 1$ bestimmt werden. Sie sind linear gekoppelt, da nun beide Unbekannten p^{n+1} und u^{n+1} in beiden Gleichungen auftreten. Aus Stabilitätsgründen wird gewöhnlich das zentrale Element vom Operator H getrennt, $H'(\tilde{u}_i) = H(\tilde{u}_i) - a_P \tilde{u}_i$, auf die linke Seite der Impulsgleichung verschoben und fortan implizit behandelt. Der Lösungsansatz, der sogenannte PISO-Algorithmus, für das neue Gleichungssystem ist aufgeteilt in aufeinanderfolgende Prädiktor - Korrektor - Schritte. Die einzelnen Schritte sollen im Folgenden kurz beschrieben werden:

1. Als Ausgangspunkt dienen die Anfangsgrößen für die unbekannt Variablen u , p , h , die turbulenten Größen k und μ_{SGS} bzw. μ_t und der Flüsse F .
2. Erster Schritt des Lösungsansatzes ist das Aktualisieren der turbulenten Größen mit Hilfe der bekannten Werte für u , F und p und die Aktualisierung der Dichte ρ mit bekannten Werten von h .
3. Im ersten Prädiktorschritt wird ein vorläufiges Geschwindigkeitsfeld berechnet, welches noch nicht der Kontinuitätsgleichung genügt. Das Gleichungssystem wird hierbei mit Hilfe des konjugierten Gradienten Verfahrens (CG) [63] gelöst. Des weiteren werden als Prädiktionierer das Cholesky-Verfahren und das LU-Verfahren [115] Verfahren eingesetzt.
4. Im zweiten Prädiktorschritt wird ein vorläufiges Enthalpiefeld berechnet und die Stoffwerte, z.B. die Dichte, aktualisiert. Hierzu werden die gleichen Lösungsalgorithmen und Prädiktionierer wie in Schritt 3 verwendet.
5. Darauf aufbauend wird die Koeffizientenmatrix H aktualisiert.
6. Unter Verwendung der aktualisierten Koeffizientenmatrix wird im ersten Korrektorschritt die Druckgleichung gelöst. Das Gleichungssystem wiederum mit Hilfe des Cholesky präkonditionierten CG Verfahrens berechnet.
7. Mit Hilfe des aktualisierten Geschwindigkeitsfeld wird die Energiegleichung gelöst und das Enthalpiefeld aktualisiert.
8. Schritte 4-7 werden wiederholt, bis eine konvergente Lösung erreicht wird. Dies dauert normalerweise 2-3 Iterationen.
9. Zum Abschluss erfolgt die Berechnung des nächsten Zeitschrittes mit den aktualisierten Werten.

Es muss noch angemerkt werden, dass die Berechnung der Variablen im Zellzentrum bzw. auf den Zellflächen erfolgt, was zu unerwünschten Oszillationen bzw. Instabilitäten der Lösung führen kann. Dieses Problem wird mit Hilfe der sogenannten Rhie-Chow Korrektur [95], welche ebenfalls auf der Druck-Geschwindigkeitkopplung beruht, umgangen.

4 RANS-Simulationen turbulenter konvektiver Strömungen bei überkritischen Drücken

Der in Kapitel 2 vorgestellte numerische Ansatz, welcher auf der Approximation für niedrige Machzahlen und den kompressiblen Erhaltungsgleichungen beruht, wird im Folgenden auf verschiedene Rohrgeometrien bei unterschiedlichen Druckbedingungen angewendet. Die gezeigten Ergebnisse basieren auf der Diplomarbeit von Brandauer et al. [18], welche in enger Zusammenarbeit erarbeitet wurden. Hierbei kam die instationäre Reynolds Averaged Navier Stokes Simulationsmethode zum Einsatz. Dies impliziert die Reduktion des Ansatzes auf die Temperaturabhängigkeit der Stoffwerte und die Verwendung des SIMPLE [127] anstatt des bereits vorgestellten PISO Algorithmus, vgl. [96]. Dieser löst das stationäre Gleichungssystem und ist in Aufbau und Struktur zu Letztgenanntem sehr ähnlich, weswegen er nicht detailliert beschrieben werden soll. Die zugrundeliegende CFD-Software ist wie auch in den nachfolgenden Kapiteln die Open Source Software OpenFOAM.

In einer ersten Studie wurde der Ansatz auf eine isotherme turbulente Rohrströmung angewendet [18]. Unter Verwendung des kompletten kompressiblen Gleichungssatzes wurde das Verhalten unterschiedlicher Turbulenzmodelle untersucht und die Ergebnisse mit den Daten der zugrundeliegenden DNS, siehe Bae et al. [4], verglichen. Es konnte festgestellt werden, dass insbesondere Low Reynolds Modelle gute Ergebnisse für die wandgebunden Strömung erzielten. High Reynolds Modelle zeigten hingegen weitaus größere Schwächen, weswegen sie für die weiteren Untersuchungen vernachlässigt werden.

Im ersten Schritt dieser Arbeit wird näher auf die Anwendung des temperaturabhängigen Ansatzes auf eine stark beheizte Rohrströmung unter Atmosphärendruckbedingungen mit dem Medium Luft eingegangen. Durch die starken Stoffwertänderungen können erste Aussagen über die Anwendbarkeit, Stabilität und Erfolg des numerischen Ansatzes bei beheizten Strömungen gemacht werden.

In einem zweiten Schritt werden abschließend turbulente beheizte Rohrströmungen bei überkritischen Druckbedingungen näher untersucht. Hierbei wird zwischen Zwangs- und Mischkonvektion unterschieden, was den Einfluss des Auftriebes auf den Wärmeübergang klären soll. Die Ergebnisse werden dabei mit Hilfe einer DNS verifiziert.

4.1 Stark beheizte turbulente Luftströmung

Für die Verifizierung des numerischen Ansatzes wird eine stark beheizte Rohrströmung unter Atmosphärendruckbedingungen näher untersucht. Das hierfür zugrundeliegende Experiment wurde von Shehata et al. [163], [164], [165] im Jahr 1984 durchgeführt. Des Weiteren werden die Ergebnisse der Simulationen mit numerischen Daten von Mikiele-

wicz [117] verglichen, welcher ebenfalls das zuvor genannte Experiment mit Hilfe einer RANS Methode nachrechnete. Er stellte fest, dass mit Hilfe des Turbulenzmodells von Launder-Sharma die Geschwindigkeitsprofile und die Temperaturverteilungen entlang des beheizten Teilbereichs am besten wiedergegeben werden können. Somit wird im Folgenden ausschließlich das Verhalten dieses Modells näher untersucht.

Das Setup des Experiments sieht eine sehr lange Einlaufstrecke vor, um die Ausbildung einer vollständig entwickelten Strömung zu gewährleisten und Einlaufeffekte bezüglich des Wärmeübergangs auszuschließen. Als zu untersuchende Geometrie wurde ein rundes, vertikal ausgerichtetes Rohr gewählt, welches die beheizte Luft am Auslass direkt in die Atmosphäre abgibt. Die Länge der nicht beheizten Einlaufstrecke wird mit einem Länge zu Durchmesser Verhältnis von $L/d = 50$ angegeben und die beheizte Strecke mit $L/d = 32$ mit einem Rohrrinnendurchmesser von 27.4 mm. Am Eintritt beträgt die Temperatur $T_0 = 297$ K bei einem Druck von $p_0 = 93$ kPa. Es wurden mehrere Experimente mit unterschiedlichen dimensionslosen Aufheizraten von $0.0018 \leq q^+ \leq 0.0045$ durchgeführt, wobei

$$q^+ = \frac{\dot{q}_w}{\rho_0 u_0 c_{p0} T_0}. \quad (4.1)$$

Hierbei kennzeichnet der Index 0 die mittleren Anfangswerte der jeweiligen Größen. Die zugehörigen Reynoldszahlen variieren zwischen $4260 \leq Re \leq 6080$, was auf transitionelle bis voll turbulente Strömungen schließen lässt. Ziel des Experimentes war die Untersuchung der mittleren Geschwindigkeits- und Temperaturfelder unter Zwangskonvektionsbedingungen bei stark beheizten Strömungen. Die Messungenauigkeiten werden mit einer Fehlerspanne von 8-10% für die Geschwindigkeitsprofile und 1-2% für die Temperaturverteilungen angegeben.

4.1.1 Numerisches Setup

Aufgrund der Charakteristik der nachfolgenden Untersuchung bei überkritischen Druckbedingungen, wurde ein aus der Versuchsreihe passendes Experiment mit einer Reynoldszahl von $Re_0 = 6050$ und einer dimensionslosen Aufheizung von $q^+ = 0.0035$ gewählt, um den numerischen Ansatz zu verifizieren. Diese Konfiguration wird im Folgenden näher untersucht.

Die aus der Geometrie und der Reynoldszahl resultierende mittlere Eintrittsgeschwindigkeit beträgt $u_0 = 3.7$ m/s. Mit Hilfe der Ausführungen aus [144],

$$k_0 = \frac{3}{2} (u_0 I)^2 \quad \text{mit} \quad I = 0.16 Re^{-\frac{1}{8}} \quad (4.2)$$

wobei I die turbulente Intensität kennzeichnet, folgt für den mittleren Anfangswert der turbulente kinetische Energie $k_0 = 0.598 m^2/s^2$. Die mittlere Dissipationsrate ist dabei wie folgt beschrieben,

$$\epsilon_0 = \frac{C_\mu^{\frac{3}{4}} k_0^{\frac{3}{2}}}{l_\epsilon} \quad \text{mit} \quad l_\epsilon = 0.07L \quad (4.3)$$

wobei die Konstante C_μ mit einem Wert von 0.09 angegeben wird. Da ausschließlich runde Rohrgeometrien untersucht werden ist die charakteristische Länge L mit dem Durchmesser des Rohres gleichzusetzen und somit berechnet sich die Dissipationsrate zu $\epsilon_0 = 1.254$

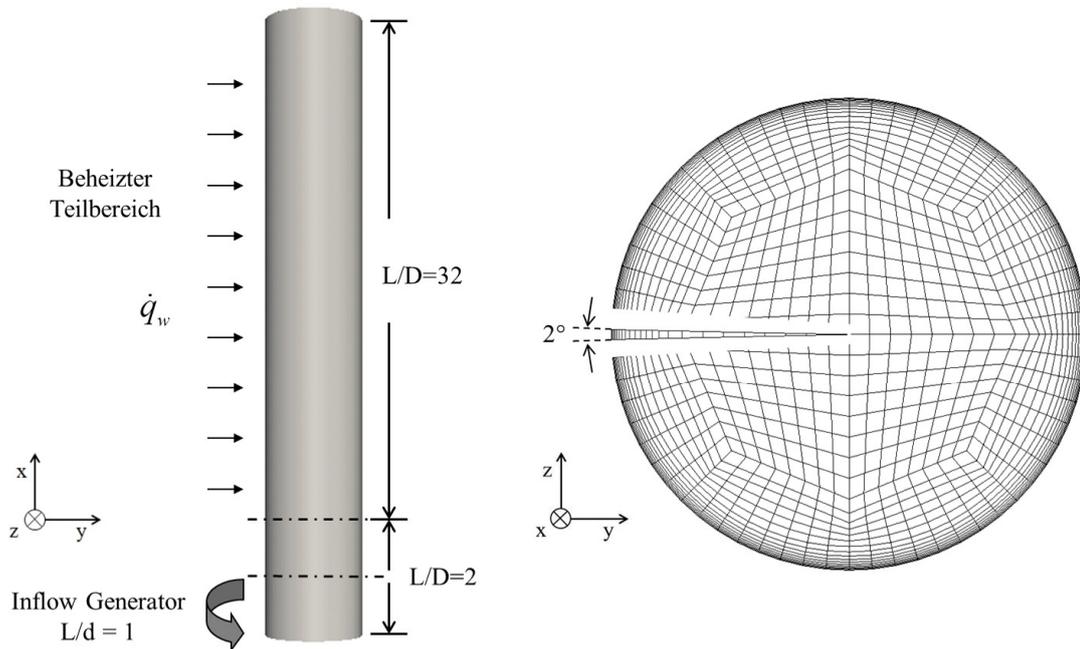


Abbildung 4.1: Geometrie und zugehörige Vernetzung.

m^2/s^3 .

Den Wänden der Geometrie, vgl. Abb. 4.1, werden sogenannte no-slip Randbedingungen aufgeprägt, was bedeutet dass die Werte der Größen u_w , k_w und ϵ_w zu Null gesetzt werden. Um die Ausbildung einer vollständig entwickelten turbulenten Strömung im isothermen Teilbereich zu gewährleisten, kommt bei der Simulation ein sogenannter Inflow Generator zum Einsatz. Somit reduziert sich die zu simulierende Geometrie und damit der Rechenaufwand wesentlich. Hierbei wird die sogenannte „directMapped“ Randbedingung verwendet, welche es erlaubt, Strömungsgrößen, wie etwa u , k und ϵ , von einem bestimmten Offset wieder auf den Einlass zu projizieren, vgl. Abb. 4.1. Unter Beibehaltung einer mittleren Strömungsgröße wird der durch die Wandreibung hervorgerufene Druckverlust bzw. die Abnahme der Geschwindigkeit vergleichbar zu periodischen Randbedingungen wieder ausgeglichen. Ein Offset von $L/d = 1$ ist bei RANS Simulationen ausreichend, um die Ausbildung der mittleren Profile zu gewährleisten [18]. Um Einflüsse des beheizten Teilbereichs auf den Inflow Generator auszuschließen wurde der isotherme Bereich um $L/d = 1$ verlängert. Im Gegensatz zu dem gewählten Ansatz wurde von Mikielwicz et al. die gesamte Einlaufstrecke von $L/d = 60$ mitgerechnet, was einen enormen Mehraufwand bedeutet.

Das Experiment wurde unter Atmosphärendruckbedingungen durchgeführt und kann als nahezu isobar angesehen werden, da der Druckverlust innerhalb des beheizten Teilbereichs vernachlässigbar klein ist. Somit ist die Anwendbarkeit des numerischen Ansatzes gewährleistet. Der übertragene dimensionslose Wärmestrom des beheizten Abschnittes wird mit einem konstanten Wert von $q^+ = 0.0035$ angegeben, was nach Glg. 4.1 einem Wert von $\dot{q}_w = 4.22 kW/m^2$ entspricht. Die aufgeprägte Wandrandbedingung ist jedoch mit Hilfe eines Temperaturgradienten gegeben. Diese ist abhängig von den variablen

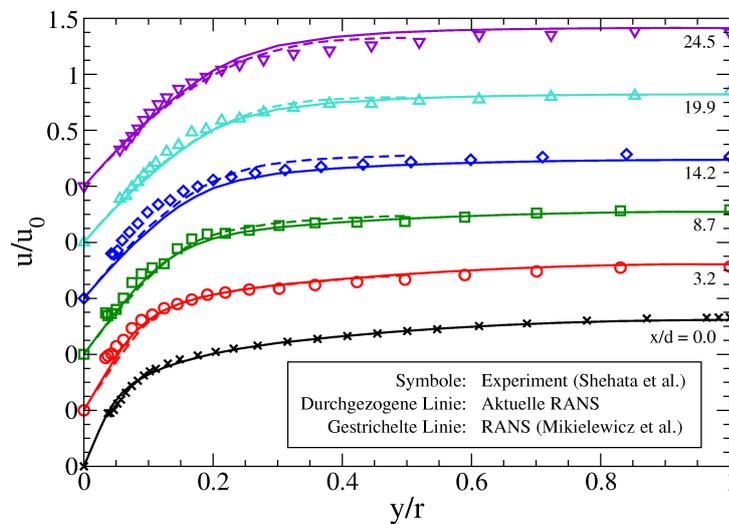


Abbildung 4.2: Geschwindigkeitsverteilung entlang des beheizten Teilbereichs.

Stoffwerten wie folgt definiert:

$$\frac{\partial T}{\partial x} = -\frac{\dot{q}_w}{\lambda(T)} \quad (4.4)$$

Die Luft wird hierbei von 297 K auf ungefähr 850 K an der Wand aufgeheizt. Dies impliziert sehr starke Stoffwertänderungen, wie beispielsweise Dichteänderungen um den Faktor drei und Änderungen der Viskosität um den Faktor sechs. Die Implementierung dergleichen erfolgt, wie bereits erwähnt, mit Hilfe der Datentabellen von NIST [128]. Mikielewicz et al. hingegen verwenden Polynome. Trotz der enormen Aufheizung der Luft innerhalb des Kanals haben Shehata et al. und Mikielewicz et al. gezeigt, dass von Zwangskonvektionsbedingungen ausgegangen werden kann. Somit ist der Gravitations-term innerhalb der Impulsgleichung vernachlässigbar.

Die rechte Seite von Abb. 4.1 zeigt das verwendete Netz für die Kanalgeometrie. Um die Berechnungszeiten möglichst zu reduzieren, wurde ein Vergleich von einer 3D zu einer 2D Geometrie durchgeführt [18]. Daraus geht hervor, dass die Ergebnisse der 2D Untersuchungen sehr gute Übereinstimmungen mit den entsprechenden 3D Analysen aufweisen. Als 2D Geometrie wurde hierfür lediglich ein achsensymmetrischer Ausschnitt des Kanals betrachtet, vgl. Abb. 4.1, mit einer Gitterpunktverteilung von 351 x 25 x 1 in axialer, radialer und Umfangsrichtung. Dies entspricht einer Gesamtanzahl von etwa 8800 Zellen und einer 50-fachen Reduktion des Berechnungsaufwandes im Vergleich zu einer entsprechenden 3D Simulation. Aufgrund dessen wird im Folgenden ausschließlich auf die Ergebnisse der 2D Analyse näher eingegangen.

4.1.2 Ergebnisse

Für das zugrundeliegende Experiment werden zunächst die mittleren Geschwindigkeitsprofile verglichen. Diese sind in Abb. 4.2 mit Hilfe der mittleren Eintrittsgeschwindigkeit

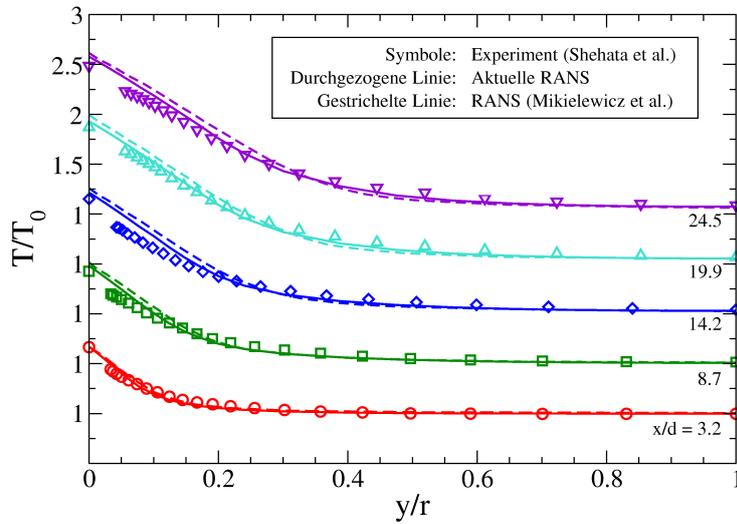


Abbildung 4.3: Temperaturverteilung entlang des beheizten Teilbereichs.

in entdimensionierter Form über dem normierten Wandabstand aufgetragen. Es werden insgesamt sechs Profile, ausgehend vom Eintritt des beheizten Bereichs, $x/d = 0$, bis hin zur Nähe des Austrittes, $x/d = 24.5$, gezeigt. Hierbei beschreiben die Symbole die Ergebnisse des Experimentes, die durchgezogene Linie die aktuellen Resultate und die gestrichelte Linie die Ergebnisse von Mikielewicz et al.. Letztere sind in der Literatur nur bis zu einem entdimensionierten Wandabstand von $y/r = 0.5$ gegeben, was folglich nur einen Vergleich der Profile in Wandnähe zulässt.

Über die komplette Länge des beheizten Bereichs ist eine sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse von Experiment und aktueller RANS zu erkennen, insbesondere unter der Berücksichtigung der von Shehata et al. angegebenen Fehlermarge. Kleinere Unterschätzungen der Geschwindigkeit in Wandnähe sind lediglich im mittleren Teil zu beobachten. Im Vergleich zur Simulation von Mikielewicz erzielt die gegenwärtige RANS in Wandnähe leicht verbesserte Resultate.

Dies ist ebenso an den zugehörigen Temperaturverteilungen zu erkennen, welche abermals in entdimensionierter Form gegeben sind, vgl. Abb. 4.3. Hierbei wurde der Wandabstand mit Hilfe des Radius und die Temperatur mit Hilfe der Eintrittstemperatur normiert. Der Ursprung der y -Achse ist somit gegeben durch $T/T_0 = 1$. Die Semantik ist dabei die gleiche wie in dem Schaubild zuvor. Es ist insbesondere im mittleren Teil des beheizten Bereichs eine Überhöhung der Temperatur in Wandnähe zu beobachten, was auf die etwas zu niedrigen Geschwindigkeiten zurückzuführen ist. Verglichen mit den experimentellen Daten erfolgt somit der Abtransport der Energie nicht mit der gleichen Intensität. Insgesamt gesehen gibt es jedoch eine gute Übereinstimmung der Temperaturprofile von Experiment und aktueller RANS, insbesondere direkt an der Wand. Des Weiteren sind die Unterschiede der Ergebnisse von Mikielewicz und gegenwärtiger Simulation vernachlässigbar klein. Deswegen soll im Folgenden auch nicht näher darauf eingegangen werden, da den Arbeiten verschiedene CFD-Software und eine unterschiedliche Stoffdatenbasis zugrunde liegt. Zusammenfassend kann gesagt werden, dass die Nachrechnung des Expe-

rimentes und die Validierung des Codes mit Hilfe des gewählten numerischen Ansatzes erfolgreich war. In den folgenden Unterkapiteln sollen nun die gewonnenen Erkenntnisse genutzt werden, um Simulationen bei überkritischen Druckbedingungen durchzuführen.

4.2 Turbulente Rohrströmung bei überkritischen Druckbedingungen

Nach der erfolgreichen Anwendung des numerischen Ansatzes auf eine stark beheizte Luftströmung unter Atmosphärendruckbedingungen erfolgt im weiteren Verlauf der Einsatz der RANS Methode auf überkritische Drücke. Für die Verifikation wurde eine direkte numerische Simulation von Bae et al. [4] gewählt, welche den Wärmeübergang unter Zwangs- und Mischkonvektionsbedingungen näher untersucht. Mit Hilfe von statistischen Turbulenzdaten konnte insbesondere das Phänomen des verschlechterten Wärmeübergangs sehr genau erfasst werden. Erst diese Daten ermöglichen die Entwicklung eines an überkritische Druckbedingungen angepassten Turbulenzmodells. Während einer Simulationsreihe von He et al. [59] wurden mehrere Analysen bezüglich des Verhaltens von mehreren Modellen bei überkritischen Druckbedingungen durchgeführt und die Ergebnisse mit den DNS Daten von Bae et al. verglichen. Sie zeigen eine enorme Abhängigkeit von dem jeweiligen verwendeten Turbulenzmodell, insbesondere unter Bedingungen der Mischkonvektion. Die Resultate werden ebenfalls als Vergleichswerte für die aktuelle Analyse hinzugezogen.

Die als Benchmark verwendete direkte numerische Simulation von Bae et al. [4] untersucht den turbulenten Wärmeübergang von CO_2 bei überkritischen Druckbedingungen in vertikalen Rohren bei einer Reynoldszahl von $Re_0 = 5400$. Diese beruht auf der mittleren Eintrittsgeschwindigkeit u_0 , dem Rohrdurchmesser d und den Stoffgrößen bei einem Druck von $p_0 = 8$ MPa. Die Aufheizung bzw. Temperaturspanne reicht dabei über den kompletten pseudokritischen Bereich, in welchem die großen Gradienten der Stoffwerte vorliegen. Knapp unterhalb der pseudokritischen Temperatur T_{pc} von CO_2 , welche sich bei etwa 307.85 K befindet, liegt die Eintrittstemperatur, welche mit einem Wert von $T_0 = 301.15$ K angegeben ist.

Die Geometrie der Teststrecke ist in zwei Teilbereiche, den Inflow Generator und die beheizte Strecke, unterteilt. Ersterer, welcher ein vollständig entwickeltes Strömungsfeld unter isothermen Bedingungen mit Hilfe von periodischen Randbedingungen generiert, besitzt ein Länge zu Durchmesser Verhältnis von $L/d = 5$. Die Anzahl der Gitterpunkte ist mit einer Unterteilung von $129 \times 69 \times 129$ in axialer, radialer und Umfangsrichtung angegeben, um die vollständige Auflösung aller Wirbel zu gewährleisten. Ähnlich zu dem vorangegangenen Experiment von Shehata et al. besitzt der beheizte Bereich eine Länge von $L/d = 30$. Der Wand werden dabei unterschiedliche entdimensionierte konstante Wärmeströme q^+ und no-slip Randbedingungen aufgeprägt. Am Austritt werden sogenannte konvektive Randbedingungen verwendet, welche ein korrektes Ausströmen des Fluids gewährleisten [4]. Das Netz des beheizten Bereichs besteht dabei aus $769 \times 69 \times 129$ Zellen.

Die der DNS zugrundeliegenden Erhaltungsgleichungen basieren ebenso auf dem in Kapitel 2.2.1 vorgestellten vollkompressiblen Ansatz für kleine Reynoldszahlen. Für die Bestimmung der variierenden Fluiddaten wird das Programm PROPATH [148] verwendet.

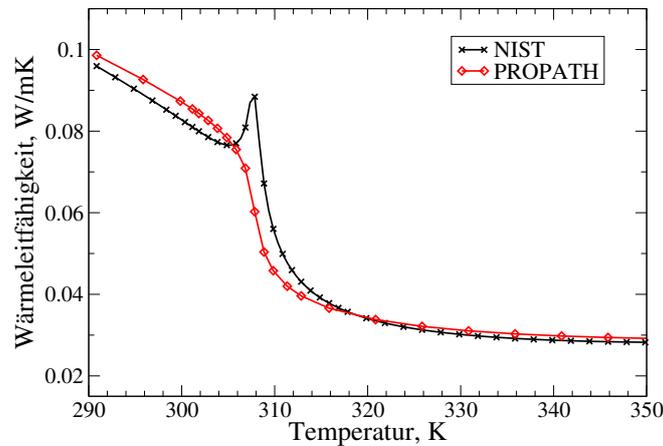


Abbildung 4.4: Vergleich der Stoffdaten für die Wärmeleitfähigkeit von NIST und PROPATH für CO_2 bei $p = 8 \text{ MPa}$.

Im Vergleich zu den NIST-Datentabellen sind die Unterschiede der Stoffgrößen mit einer Ausnahme sehr gering. Die Wärmeleitfähigkeit zeigt sehr große Abweichungen mit bis zu 50% im Bereich des pseudokritischen Punktes, vgl. Abb. 4.4. Da jedoch diese großen Unterschiede nur in einer sehr schmalen Temperaturspanne auftreten, sind lediglich minimale Unterschiede in den gemittelten Ergebnissen, abhängig von der gewählten Stoffdatenbasis zu erwarten.

Insgesamt werden unter Variation der Wärmezufuhr, des Durchmessers und der Fließrichtung des Fluids acht verschiedene direkte numerische Simulationen durchgeführt. Darunter befinden sich sieben, welche Strömungen bei Mischkonvektionsbedingungen untersuchen. Das Ziel der Analysen ist die Verdeutlichung des Einflusses des Auftriebes auf den Wärmeübergang.

Um die Richtigkeit der Implementierung des in dieser Arbeit verwendeten numerischen Ansatzes zu überprüfen, werden die Ergebnisse zusätzlich mit den Resultaten der Untersuchungen von He et al. verglichen. Fokus dieser Studie ist die Analyse der Leistungsfähigkeit verschiedener Low-Reynolds Modelle bei überkritischen Druckbedingungen. Unter Anwendung der kompressiblen Erhaltungsgleichungen wurden 2D Simulationen mit dem in-house Code „SWIRL“ durchgeführt und die Ergebnisse mit den Daten von Bae et al. verglichen. Die Implementierung der Stoffwerte erfolgt hierbei mit der bereits erwähnten Software PROPATH. Um die Ausbildung einer vollentwickelten Strömung zu garantieren wird eine isotherme Einlaufstrecke mit $L/d = 40$ dem beheizten Teilbereich vorgeschaltet. Die Anzahl der Gitterpunkte innerhalb der Teststrecke wird mit 120×10^6 in axialer und radialer Richtung angegeben. Ebenso wird eine Netzverfeinerung in Richtung der Wand und in Richtung des Eintritts des beheizten Teilbereichs durchgeführt. Der dimensionslose Wandabstand beträgt hierbei $y^+ < 0.5$.

Mit Hilfe der gewonnenen Erkenntnisse konnte eine Einteilung der verwendeten Turbulenzmodelle vorgenommen werden. Die erste Gruppe, welche ausschließlich von den Stoffwerten, etwa Re_t , abhängig war, wie z.B. das Launder-Sharma Modell, reagiert sehr heftig auf die starken Änderungen dergleichen. Die zweite Gruppe, für welche die Abhängigkeit vom Wandabstand dominiert, wie das Chien Modell, zeigen weitaus weniger

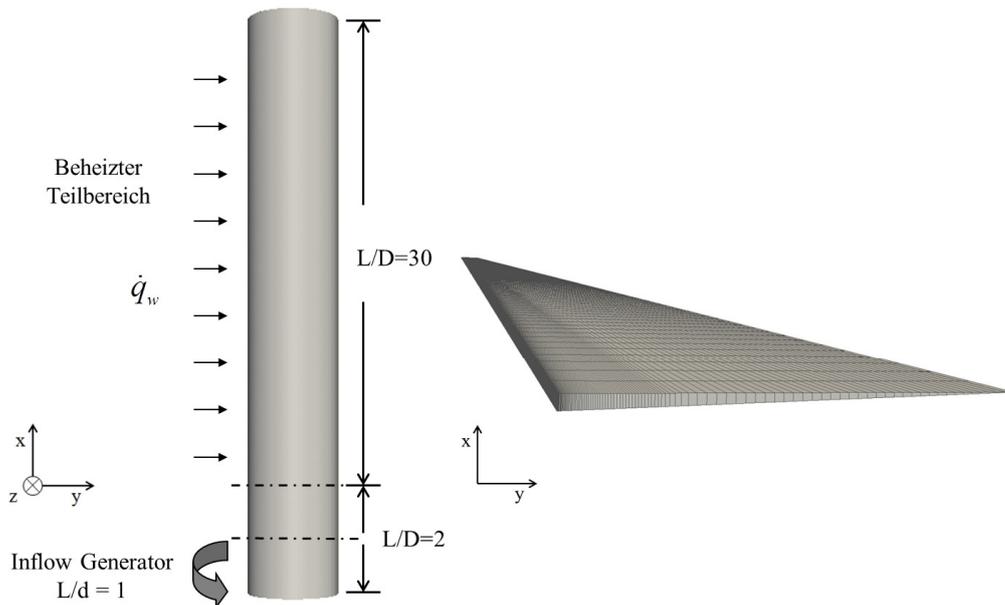


Abbildung 4.5: Geometrie und zugehöriges Netz.

starke Reaktionen.

4.2.1 Numerisches Setup

Aus der Vielzahl an durchgeführten direkten numerischen Simulationen wurden abhängig von Fließrichtung, Rohrdurchmesser und Wärmezufuhr drei ausgewählt, um den numerischen Ansatz zu validieren. Darunter befindet sich ein Fall, welcher Strömungen bei Zwangskonvektionsbedingungen näher untersucht und zwei Fälle, welche Strömungen unter Mischkonvektionsbedingungen analysieren. Im letzten Fall kann eine starke Verschlechterung des Wärmeübergangs durch die Zuführung der doppelten Menge an Energie beobachtet werden. Alle untersuchten Fälle sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst.

Fall	Bedingung	Fließrichtung	$q^+ \cdot 10^{-4}$	$d[mm]$
A	Zwangskonvektion	Aufwärts	1.4438	1.0
B	Mischkonvektion	Aufwärts	1.4438	2.0
C	Mischkonvektion	Aufwärts	2.8876	2.0

Tabelle 4.1: Untersuchte Strömungsbedingungen.

Das numerische Setup ist dem der vorangegangenen Simulation unter Atmosphärendruckbedingungen sehr ähnlich. Alle Anfangs- und Randbedingungen können mit Hilfe der Definition der Reynoldszahl, den Gleichungen (4.2) - (4.3) für die turbulenten Größen und der Gleichung (4.1) für die Wärmezufuhr bestimmt werden. Ausgehend vom konstanten Eintrittsdruck $p_0 = 8\text{MPa}$ und der Eintrittstemperatur von $T_0 = 301.15\text{K}$ sind alle Parameter in Tabelle 4.2 zusammengefasst.

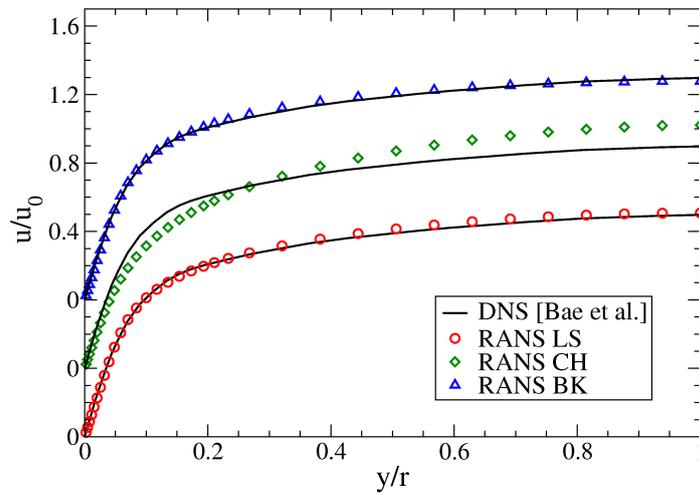


Abbildung 4.6: Vergleich der Geschwindigkeitsprofile des Inflow Generators.

Fall	u_0 [m/s]	$k_0 \cdot 10^{-3}$ [m ² /s ²]	ϵ_0 [m ² /s ³]	\dot{q} [KW/m ²]
A	0.4454	0.888	0.0621	61.74
B	0.2227	0.222	0.0038	30.87
C	0.2227	0.222	0.0038	61.74

Tabelle 4.2: Anfangs- und Randbedingungen.

Um den Rechenaufwand zu reduzieren wird abermals ein Inflow Generator mit einem Länge zu Durchmesser Verhältnis von $L/d = 1$ verwendet und die Gesamtlänge des isothermen Gebietes auf $2mm$ verringert. Mit Hilfe einer Netzverfeinerungsstudie konnte eine Gitteroptimierung erreicht werden, vgl. [18]. Dieses neue Gitter besteht aus 321×103 Zellen in axialer und radialer Richtung mit einer sehr starken Zellverfeinerung in Richtung Wand. Dies ist notwendig, da insbesondere in Wandnähe sehr große Gradienten der Stoffwerte auftreten. Der daraus resultierende dimensionslose Wandabstand beträgt somit $y^+ = 0.06$.

4.2.2 Ergebnisse - Zwangskonvektion

Unter Verwendung der Anfangsbedingungen von Fall A und den im letzten Unterkapitel erwähnten Randbedingungen soll zunächst die Strömung bei Zwangskonvektionsbedingungen ($Bo = 0$) näher untersucht werden. Dabei wird zunächst auf die Auswertung des isothermen Inflow Generators eingegangen. Dieser erzeugt, wie bereits erwähnt, voll eingelaufene Strömungsprofile, welche auf den beheizten Teilbereich abgebildet werden. Hierbei stehen insbesondere die Geschwindigkeitsprofile und die Profile der turbulenten kinetischen Energie (TKE) im Fokus. Erstere sind in Abb. 4.6 gezeigt. Dabei steht die Abkürzung BK für das im Zuge dieser Arbeit entwickelte Turbulenzmodell von Brandauer und Kunik, vgl. Kap. 2.5.2.4. Die voll eingelaufenen Geschwindigkeitsprofile der

Simulationen, denen die Turbulenzmodelle von Launder-Sharma (LS) und BK zugrunde liegen, zeigen gute Übereinstimmungen mit den Daten der DNS von Bae et al.. Große Abweichungen sind hingegen unter der Verwendung des Chien Modells (CH) zu erkennen. Es erzeugt in seiner Gesamtheit ein Profil mit einem mehr laminareren Charakter. Dies zeigt ganz klar die Notwendigkeit der Verwendung der turbulenten Reynoldszahl Re_t innerhalb der Dämpfungsfunktionen.

Abb. 4.7 veranschaulicht die zugehörigen Profile der turbulenten kinetischen Energie. Hierbei unterschätzt das LS-Modell die Intensität in Wandnähe sehr stark und das CH-Modell zeigt eine deutliche Überschätzung über den gesamten Radius. Das modifizierte Modell jedoch trifft den Peak, also das Maximum der TKE in Wandnähe, gut. Ferner zeigt es eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Gradienten bzw. der Abnahme der TKE in Richtung Zentrum des Rohres, im Vergleich zu den DNS Daten. Somit kann abschließend festgehalten werden, dass die angewandten Modifikationen bezüglich des BK-Modells angemessen sind.

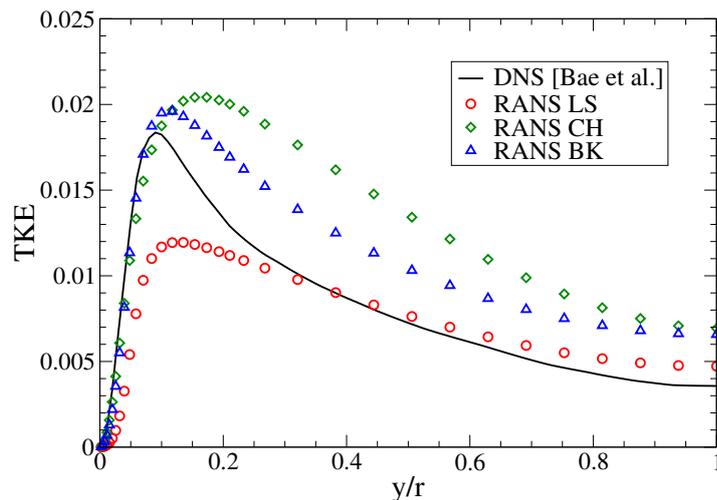


Abbildung 4.7: Zugehörige Profile der turbulenten kinetischen Energie (Fall A).

Nachfolgend sollen die Ergebnisse des beheizten Bereichs abhängig vom jeweils verwendeten Turbulenzmodell diskutiert werden. Abb. 4.8 zeigt die verschiedenen Temperaturverteilungen an der beheizten Wand und vergleicht diese mit den DNS Daten von Bae et al. und den RANS Daten von He et al.. Im Eintrittsbereich ist ein starker Anstieg der Wandtemperatur zu erkennen, welcher von allen Turbulenzmodellen gut vorhergesagt wird. Die anschließende monotone Zunahme wird jedoch insbesondere vom LS-Modell stark überschätzt. Dies führt zu einer Differenz der Austrittstemperatur im Vergleich zu den DNS Daten von über 100 K. Wesentlich besser reagiert das vorgestellte BK- und das CH-Modell. Beide zeigen ein monotones Wachstum der Wandtemperatur in Richtung Auslass und überschätzen diese lediglich um etwa 10 K. Die sehr großen Unterschiede sind abermals auf die Verwendung der jeweiligen Dämpfungsfunktionen zurückzuführen. Durch die sehr starke Stoffwertabhängigkeit reagiert das LS-Modell sehr heftig auf diese, wohingegen das CH-Modell dieses Verhalten nicht aufweist. Da das BK Turbulenzmo-

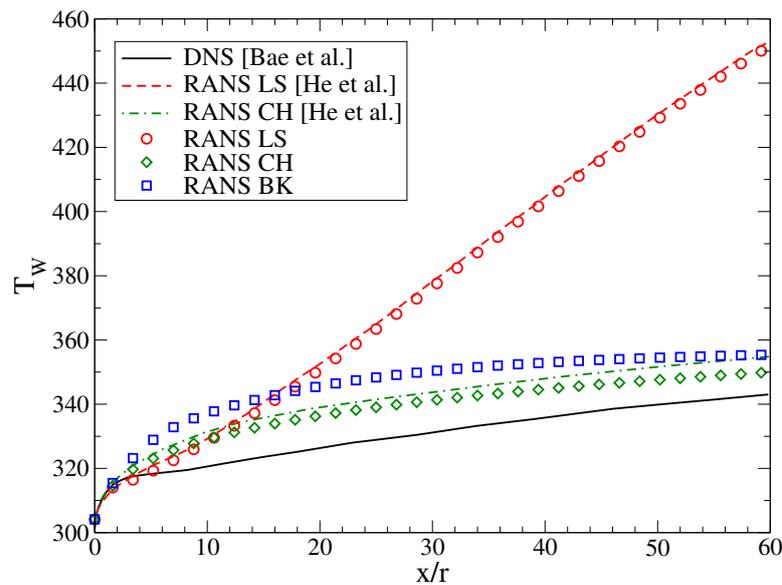


Abbildung 4.8: Vergleich der Wandtemperaturen entlang des beheizten Teilbereichs (Fall A).

Wenn eine Verwendung beider Ansätze in sich vereint, ist die leichte Überschätzung der Wandtemperatur im Vergleich zu dem CH-Modell eine direkte Konsequenz. Der Vergleich der Ergebnisse mit den Daten von He et al. zeigt zudem die Richtigkeit des verwendeten Ansatzes bzw. des Codes. Große Unterschiede sind ebenfalls in der Entwicklung der Geschwindigkeitsprofile zu erkennen. Sie sind in den Diagrammen der Abbildung 4.9 für vier verschiedene Querschnitte dargestellt. Anhand der DNS Profile ist eine durch die zugeführte Wärme induzierte Beschleunigung der Strömung zu beobachten, was, durch die Darstellungsweise, nicht sofort ersichtlich ist. Die linke Seite von Abb. 4.9 zeigt den Vergleich der Geschwindigkeitsprofile, welche mit Hilfe der RANS Methode unter Verwendung des LS-Modells und des BK-Modells berechnet wurden, und den zugrundeliegenden DNS Daten. Hierbei ist gut zu erkennen, dass das LS-Turbulenzmodell den wandnahen Bereich gut auflöst, jedoch die wärmeinduzierte Beschleunigung in Richtung Auslass sehr stark überschätzt. Das BK-Modell liefert hingegen sehr gute Übereinstimmungen im gesamten Strömungsfeld. Auf der rechten Seite der Abb. 4.9, ist die Entwicklung der Geschwindigkeitsprofile unter Verwendung des CH-Modells zu sehen. Diese haben, wie bereits zuvor gezeigt, einen deutlich weniger turbulenten Charakter, jedoch wird die induzierte Beschleunigung der Strömung sehr gut wiedergegeben. Es folgt somit, dass die Kombination aus guter Wandauflösung durch die Stoffwertabhängigkeiten des LS-Modells und die sehr gute Erfassung des Beschleunigungseffektes durch die Wandabstandsabhängigkeit des CH-Modells, die reale Entwicklung gut abbilden kann. Dies ist der Grund für die sehr guten Ergebnisse des BK-Modells.

Dies lässt sich auch anhand der Entwicklung der turbulenten kinetischen Energie TKE festmachen, vgl. Abb. 4.10. Die Profile sind hierbei in dimensionloser Form mittels der Gleichung $TKE = k_0/u_o^2$ dargestellt und an den gleichen Positionen wie die Geschwindigkeitsprofile ausgewertet. Über den gesamten beheizten Bereich ist deutlich die rapide Abnahme der TKE, vorhergesagt durch das LS-Modell, zu erkennen. Hierdurch kann die Energie an der Wand nicht genügend in Richtung Zentrum des Rohres abtransportiert werden, was folglich zu hohen Wandtemperaturen führt. Im Gegensatz dazu zeigen das

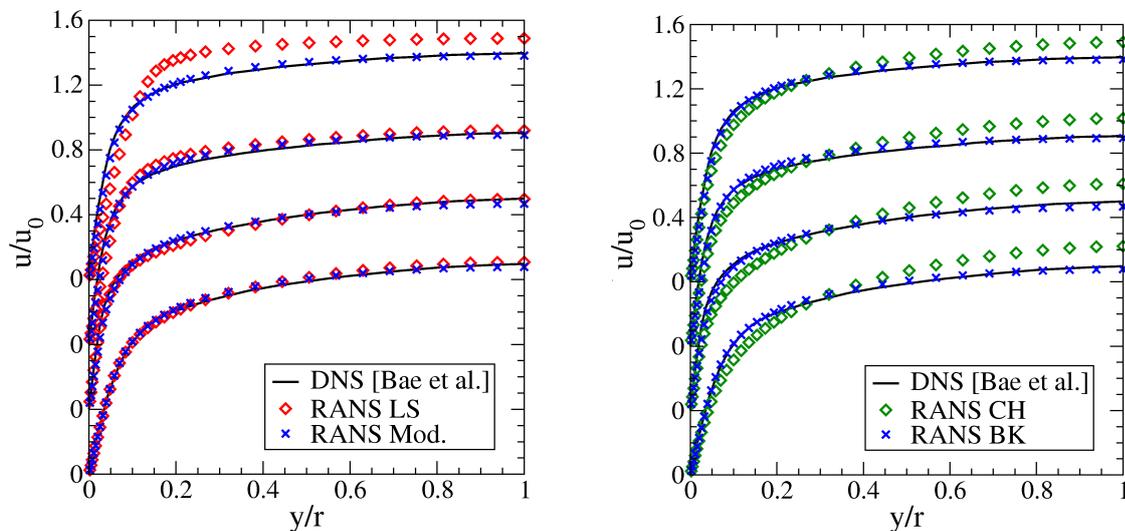


Abbildung 4.9: Vergleich der Geschwindigkeitsprofile verschiedener Turbulenzmodelle (Fall A) für $x/r = 0, 10, 30, 60$.

CH- und das BK-Modell nach einem anfänglichen Abfall der Energie wieder ein Anwachsen ab der Mitte des beheizten Bereichs. Hierdurch folgt ein moderates Ansteigen der Wandtemperatur. In der freien Außenströmung zeigt das BK-Modell deutliche Verbesserungen im Vergleich zu den DNS Daten und den Daten des CH-Modells. Durch den leicht versetzten und zu niedrigen Peak der TKE in unmittelbarer Wandnähe sind die Wandtemperaturen dennoch etwas zu hoch. Insgesamt zeigt sich aber auch hier eine deutliche Verbesserung.

Um zu gewährleisten, dass die Energie- bzw. Massenerhaltung erfüllt ist, werden in Abb. 4.11 die Bulk-Temperatur- und Bulk-Geschwindigkeitsprofile des LS- und des BK-Modells mit den DNS Daten von Bae et al. verglichen. Diese werden, da stark abhängig von den Stoffwerten, wie folgt berechnet [4]:

$$\dot{m} = G_b A = \int_A \overline{\rho u_x} dA, \quad H_b = \frac{1}{\dot{m}} \int_A \overline{\rho u_x h} dA \quad \Longrightarrow \quad T_b = \frac{T(p_0, H_b)}{T_0} \quad (4.5)$$

$$G_b = \frac{1}{A} \int_A \overline{\rho u_x} dA \quad \rho_b = \frac{\rho(p_0, T_b)}{\rho_0} \quad \Longrightarrow \quad U_b = \frac{G_b}{\rho_b} \quad (4.6)$$

Hierbei kennzeichnet \dot{m} den Massenstrom, G_b die Bulk-Massenstromdichte, A die Querschnittsfläche, H_b die Bulk-Enthalpie, ρ_b die Bulk-Dichte und U_b die Bulk-Geschwindigkeit. Die Bulk-Temperatur geht dabei direkt aus den NIST-Datentabellen hervor. Wie in den Diagrammen der Abb. 4.11 gezeigt gibt es eine sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse von DNS und RANS Simulation, unabhängig vom jeweils verwendeten Turbulenzmodell. Somit ist die Energie- als auch Massenerhaltung sichergestellt. Durch das unbefriedigende Verhalten des LS-Modells bei der Bestimmung der Wandtemperatur unter überkritischen Druckbedingungen wird es in den nachfolgenden Simulationen nicht berücksichtigt. Diese Eigenschaft des Modells wird auch in der Arbeit von He et al. [59] bestätigt.

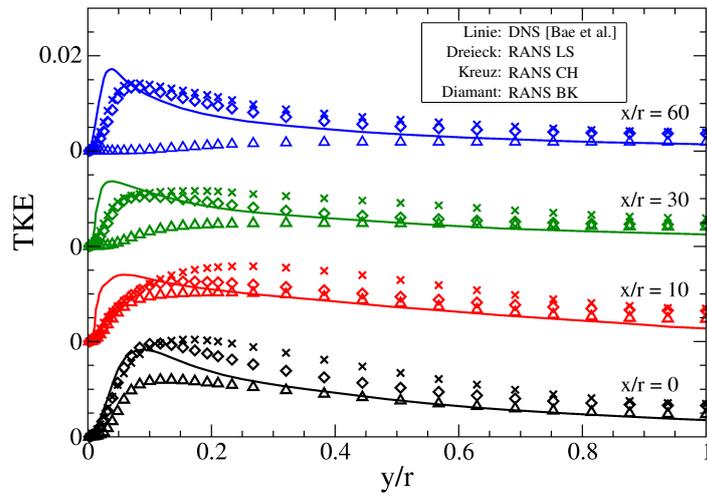


Abbildung 4.10: Verteilung der turbulenten kinetischen Energie entlang des beheizten Bereichs (Fall A).

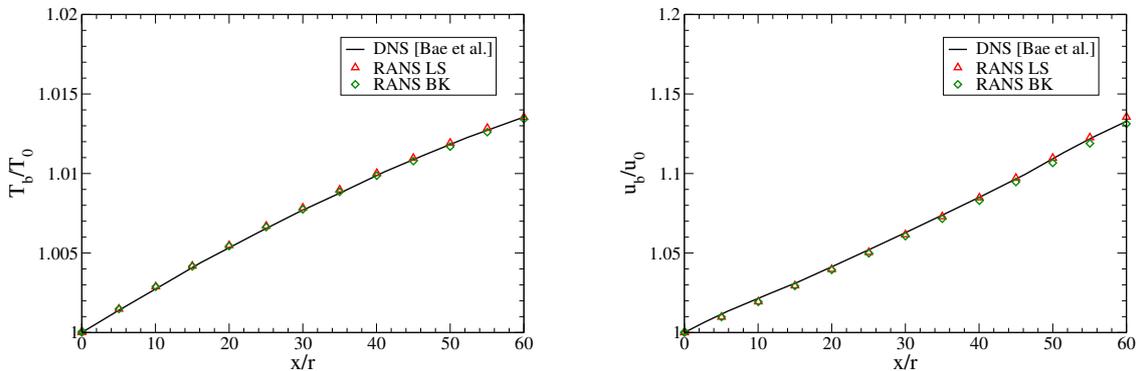


Abbildung 4.11: Bulk-Temperatur und Bulk-Geschwindigkeit (Fall A).

4.2.3 Ergebnisse - Mischkonvektion

Die nachfolgende Untersuchung für Mischkonvektion ($Bo = 1.124 \cdot 10^{-5}$) bei überkritischen Druckbedingungen basiert auf den Anfangs- und Randbedingungen des Falles B. Unter Beibehaltung der Reynoldszahl von $Re_0 = 5400$ bewirkt die Verdoppelung des Durchmessers des Rohres eine Reduktion der Eintrittsgeschwindigkeit um die Hälfte. Somit spielt der Auftriebseffekt für den Wärmeübergang an der beheizten Wand eine sehr viel größere Rolle als zuvor. Die verwendete Netzkonfiguration kann ebenso beibehalten werden.

Durch die aus dem vorangegangenen Unterkapitel gewonnenen Resultate reduziert sich die Anwendung der RANS Methode auf den Einsatz des CH- und BK-Modells. Abb. 4.12 zeigt den Vergleich der für Fall B gewonnenen Wandtemperaturprofile mit den DNS Daten. Bae et al. [4] zeigen, dass der ungewöhnliche Anstieg der Wandtemperatur im Mittelteil

des beheizten Bereichs auf eine deutliche Reduktion der turbulenten kinetischen Energie zurückzuführen ist. Diese Verschlechterung des Wärmeübergangs (DHT) wird von Auftriebseffekten verursacht. Die anschließende Abnahme der Wandtemperatur ist eine Folge des Wiederanstiegs der TKE bzw. der Turbulenzproduktion. Somit wird wieder mehr Energie von der Wand in Richtung Zentrum des Rohres abtransportiert und die Wandtemperatur fällt. Als Konsequenz steigt sie erneut linear, vergleichbar zu dem Profil aus Fall A.

Im Gegensatz zu dem bei überkritischen Druckbedingungen nachteiligen LS-Modell, liefert das CH-Modell in den Analysen die besten Ergebnisse, weswegen es der Entwicklung eines neuen Turbulenzmodell als Grundlage dient. Abb. 4.12 zeigt einen Vergleich der resultierenden Wandtemperaturprofile der Simulationen unter Verwendung der verschiedenen Modelle mit den DNS Ergebnissen von Bae et al. [4].

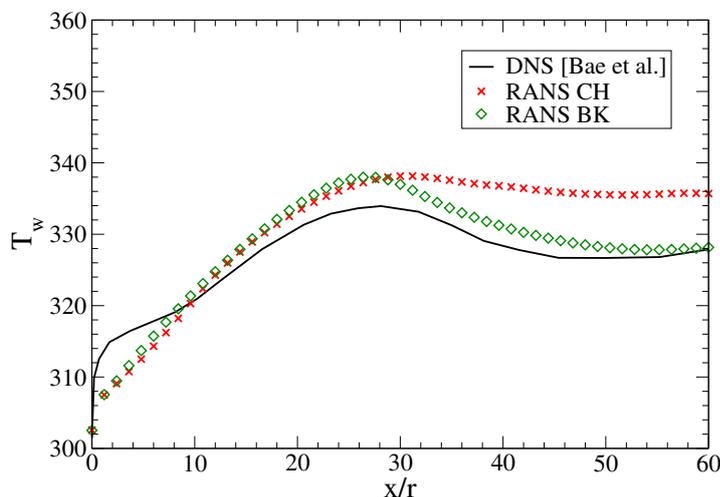


Abbildung 4.12: Wandtemperaturverteilung entlang des beheizten Bereichs (Fall B).

Die Profile beider Turbulenzmodelle zeigen eine leichte Unterschätzung der Wandtemperatur am Eintritt des beheizten Teilbereichs. Nach Erreichen des Peaks, welcher in Position und Wert gut mit den DNS Daten übereinstimmt, ist die Entwicklung der Profile vollkommen verschieden. Während das neue BK-Modell den Wiederanstieg der TKE, vgl. [18], und somit den Temperaturabfall vollständig erfasst, ist das CH-Modell nicht in der Lage diesen Effekt zu beschreiben. Somit kann eine wesentliche Verbesserung, auch im Vergleich zu allen bisher erzielten Ergebnissen von He et al. konstatiert werden. Dies ist auch anhand der Geschwindigkeitsprofile belegt, welche in Abb. 4.13 für drei verschiedenen Querschnittshöhen angegeben sind. Besonders auffällig sind die Überschätzungen der Geschwindigkeit bzw. des Auftriebseffektes bei allen Low-Re Modellen, vgl. [59]. Nicht nur im Vergleich zu den hier gezeigten Ergebnissen des CH-Modells, sondern auch zu allen anderen Turbulenzmodellen, zeigt das neu entwickelte BK-Modell gute Verbesserungen. Hierbei werden größere Übereinstimmungen in dem Bereich des Eintrittes und insbesondere in Richtung des Auslasses erreicht.

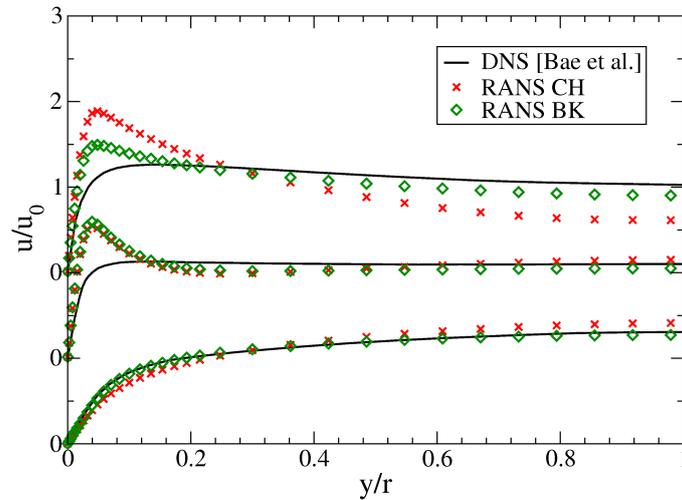


Abbildung 4.13: Geschwindigkeitsprofile entlang des beheizten Teilbereichs für $x/r = 0, 25, 55$ (Fall B).

Der Vollständigkeit halber sind zusätzlich die Profile der Bulk-Temperatur und Bulk-Geschwindigkeit in den Abbildungen 4.14 und 4.15 dargestellt. Durch die sehr guten Übereinstimmungen mit den DNS Daten für beide Simulationen ist gezeigt, dass sowohl die Energie- als auch Massenerhaltung erfüllt ist. Um zu unterstreichen, dass das

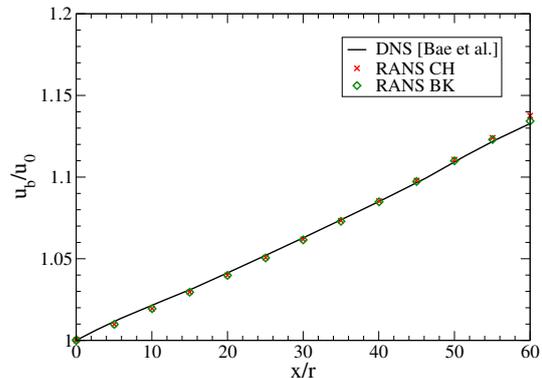
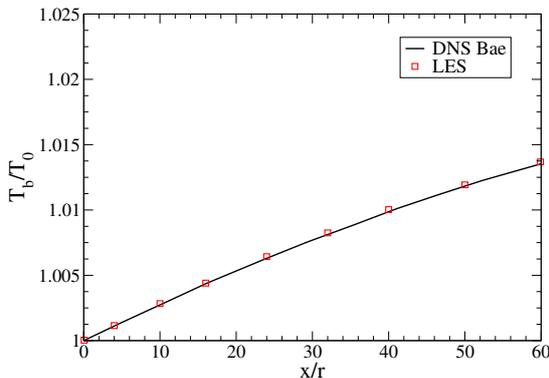


Abbildung 4.14: Bulk-Temperatur (Fall B). Abbildung 4.15: Bulk-Geschwindigkeit (Fall B).

neu entwickelte Modell auch bei verstärkten Auftriebseffekten bessere Ergebnisse liefert ($Bo = 2.248 \cdot 10^{-5}$), wird ein zweiter Fall unter Mischkonvektionsbedingungen bei doppelter Aufheizung untersucht. Hierdurch wird das Phänomen des verschlechterten Wärmeübergangs noch zusätzlich verstärkt. Alle Anfangs- und Randbedingungen sind in den Tabellen 4.1 und 4.2 unter Fall C zusammengefasst.

Abb. 4.16 zeigt den Vergleich der Temperaturverteilungen von DNS und RANS. Ähnlich zu den Profilen aus Fall B, steigt die Wandtemperatur beider durchgeführter Simulationen auf das gleiche Niveau. Im Gegensatz zu den Ergebnissen, welche mit Hilfe des

CH-Modells erzielt wurden, erfasst das BK-Modell abermals die Abnahme der Temperatur bzw. die somit verbundene erneute Zunahme der TKE nach Erreichen des Maximums. Lediglich der anschließende Anstieg der Wandtemperatur wird geringfügig unterschätzt. Insgesamt bleibt jedoch festzuhalten, dass das neu entwickelte Modell sowohl den verschlechterten als auch den anschließend wieder verbesserten Wärmeübergang, gekennzeichnet durch das lokale Maximum und Minimum des Profils, sehr gut erfasst. Auch die Geschwindigkeits- und TKE-Profile, auf die hier nicht näher eingegangen werden soll, zeigen ähnlich deutliche Verbesserung, wie in Fall B, vgl. [18].

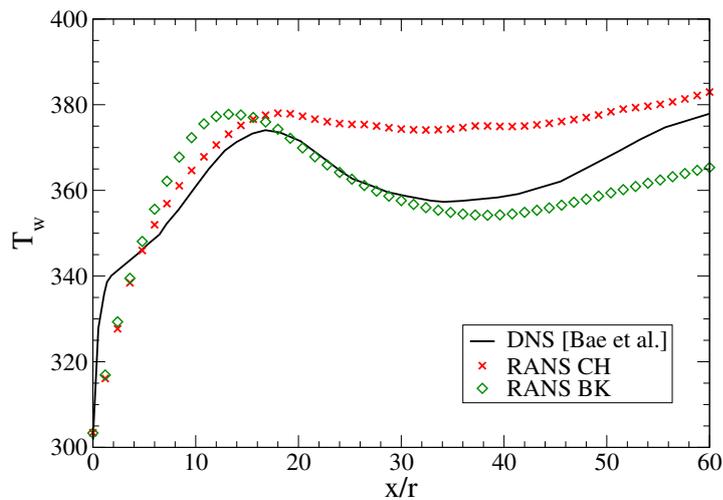


Abbildung 4.16: Wandtemperaturverteilung (Fall C).

Aufgrund der größeren Wärmezufuhr steigt auch die Bulk-Temperatur, vgl. Abb. 4.17. Dies hat zusätzlich große Auswirkungen auf die wärmeinduzierte Beschleunigung der Strömung, was in einer höheren Bulk-Geschwindigkeit am Austritt resultiert. Sowohl das CH-Modell als auch das BK-Modell erfassen diesen Effekt sehr gut.

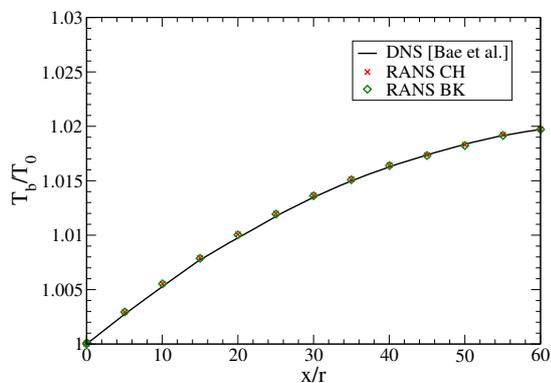


Abbildung 4.17: Bulk-Temperatur (Fall C).

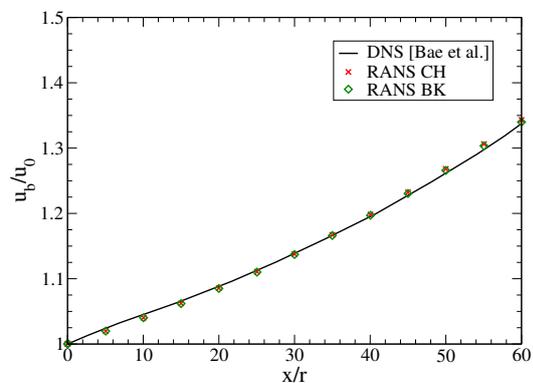


Abbildung 4.18: Bulk-Geschwindigkeit (Fall C).

5 LES-Simulationen turbulenter konvektiver Strömungen bei überkritischen Drücken

Die Large Eddy Simulationemethode, welche das kompressible temperaturabhängige System der Erhaltungsgleichungen unter Verwendung temperaturabhängiger Feinstrukturmodelle beinhaltet, vgl. Kapitel 2, muss auf alle Druck- und Strömungsbedingungen anwendbar sein. Aus diesem Grund erfolgt im ersten Schritt dieses Kapitels eine Validierung des LES Ansatzes für Druckbedingungen unterhalb des pseudokritischen Punktes anhand der DNS Daten von Kim und Moin [82] bzw. Kawamura et al. [76]. Die Autoren untersuchten eine inkompressible, vollturbulente und von außen beheizte Luftströmung in einem ebenen Kanal. Ziel dieser Studie ist es, erste Aussagen über die Anwendbarkeit, Stabilität und Erfolg des numerischen Ansatzes machen zu können.

Nach der Validierung des Ansatzes erfolgt die Anwendung der LES Methode auf eine turbulente Rohrströmung mit CO_2 bei überkritischen Druckbedingungen. Vergleichsdaten hierzu liefert eine direkte numerische Simulation von Bae et al. [4] aus dem Jahr 2005. Die untersuchte Geometrie ist unterteilt in einen isothermen Bereich, den sogenannten Inflow Generator, welcher ein vollständig eingelaufenes Strömungsfeld generiert, und einen beheizten Teilbereich. Für Ersteren sollen zunächst die Leistungsfähigkeit der SGS-Modelle und erste örtliche Auflösungskriterien näher untersucht werden.

Daran anschließend erfolgt die Untersuchung des beheizten Bereichs der turbulenten Rohrströmung. Hierfür wird ebenfalls, vergleichbar zum vorherigen Kapitel, zwischen Zwangs- und Mischkonvektionsbedingungen unterschieden, um den Einfluß des Auftriebes auf den Wärmeübergang zu klären. Hauptaufgaben dieser Studie sind die Ausarbeitung der Grundproblematiken von Large Eddy Simulationen bei überkritischen Druckbedingungen und eines geeigneten numerischen Setups. Im Detail müssen hierzu die Haupteinflussfaktoren auf die Wandtemperatur analysiert werden. Hierbei sollen speziell die Rolle der Feinstrukturmodelle geklärt und etwaige Netzeinflüsse geprüft werden. Abschließend wird der neuentwickelte Ansatz für variable turbulente Prandtl Zahlen auf die Rohrströmung bei überkritischen Drücken angewendet. Mit Hilfe der gewonnenen Ergebnisse können Verbesserungsvorschläge für zukünftige LES Berechnungen erstellt und Konsequenzen für ingenieurstechnische Anwendungen gezogen werden.

5.1 Turbulente Luftströmung in einem ebenen Kanal

Für die Validierung der LES Methode wurde eine direkte numerische Simulation für eine einfache Kanalströmung ausgewählt, deren Eigenschaften in der Vergangenheit sehr gut erforscht wurden. Erste Untersuchungen wurden im Jahr 1989 vom Kim und Moin [82] für verschiedene Prandtl Zahlen bei einer konstanten Reynoldszahl, basierend auf der

Schubspannungsgeschwindigkeit u_τ , von 180 durchgeführt. Dies entspricht einer auf der Bulk-Geschwindigkeit basierenden Reynoldszahl von etwa $Re_b = 3300$. Dank höherer Rechenleistungen konnten im Jahr 1998, ebenfalls basierend auf der Kanalgeometrie, Untersuchungen für höhere Reynoldszahlen von $Re_\tau = 395$ und $Re_\tau = 640$ von Kawamura et al. [77] durchgeführt werden. Diese Datenbasis wurde in der nachfolgenden Arbeit noch einmal für verschiedene Prandtlzahlen erweitert [76].

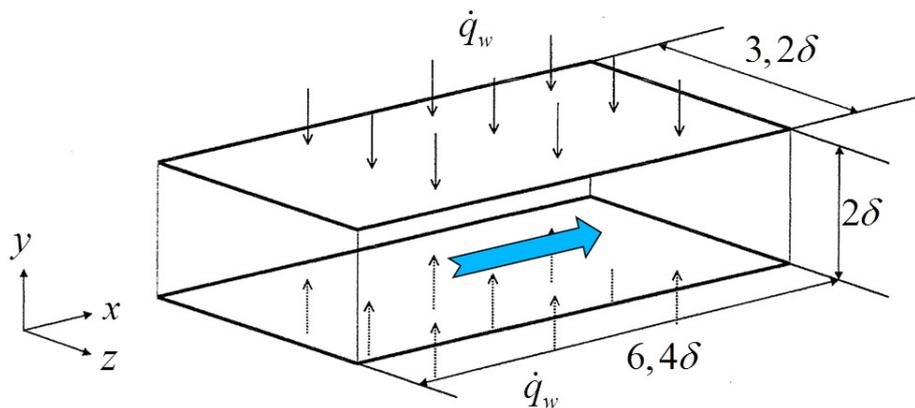


Abbildung 5.1: Aufbau der Kanalgeometrie.

Aus der großen Anzahl an durchgeführten direkten numerischen Simulationen wird nachfolgend speziell eine einzelne Konfiguration näher untersucht. Die Reynoldszahl, basierend auf der Wandschubspannungsgeschwindigkeit u_τ beträgt hierbei $Re_\tau = 395$ und die Prandtl Zahl $Pr = 0.71$. Abb. 5.1 zeigt die der DNS zugrundeliegende Geometrie mit einer auf der halben Kanalbreite δ basierenden Kanallänge von $6,4\delta$, einer Breite von 2δ und einer Tiefe von $3,2\delta$. Um eine Ausbildung einer voll entwickelten Strömung zu gewährleisten, werden am Eintritt, am Austritt und an den Seiten zyklische Randbedingungen verwendet. Diese jeweils gegenüberliegenden Flächen können somit als physikalisch verknüpft angesehen und somit die Geometrie als unendlich langer Kanal interpretiert werden. Beiden Wänden, oben und unten, wird eine konstante Wärmezufuhr \dot{q}_w aufgeprägt, deren Wert nicht explizit vorgegeben und somit frei wählbar ist. Dies liegt daran, dass die gesamte zugeführte Energie durch einen Senkenterm in der Energiegleichung wieder abgezogen wird, und somit das Profil der normierten Temperaturverteilung immer gleich ist. Darüberhinaus wird das System der Erhaltungsgleichungen in dimensionsloser Form unter Verwendung des finiten Differenzenverfahrens gelöst. Die hierfür zugrundeliegenden Diskretisierungsverfahren sind von zweiter Ordnung in Zeit und Raum. Das zugehörige Netz der DNS besteht aus $256 \times 128 \times 256$ Zellen in Hauptströmungsrichtung, Wandnormalenrichtung und azimuthaler Richtung.

5.1.1 Numerisches Setup

Die gefilterten, kompressiblen Erhaltungsgleichungen der LES werden dimensionsbehaftet gelöst. Dies bedeutet, dass zunächst die Bulk-Geschwindigkeit in dimensionsbehafteter Form bestimmt werden muss. Hierzu ist es notwendig zunächst Anfangsdruck und Temperatur über die vorgegebene Prandtl Zahl festzulegen. Dies erfolgt wiederum mit Hilfe der NIST Datentabellen [128]. Die Prandtl Zahl von 0.71 kann beispielhaft mit einem Druck von 10 bar und einer Anfangstemperatur vom 327 K erreicht werden. Mit Hilfe der so bestimmten Anfangsbedingungen kann unter Verwendung von $Re_\tau = 395$ die Wandschubspannungsgeschwindigkeit berechnet werden. Diese beträgt unter Verwendung einer halben Kanalbreite von $\delta = 1$ m etwa $u_\tau = Re_\tau \delta \rho / \mu = 0.0007388$ m/s. Integration der DNS Ergebnisse für das Geschwindigkeitsfeld von Kawamura et al. [76]. und anschließende Überführung der Bulk-Geschwindigkeit in dimensionsbehafteter Form über $u_b = u_b^+ \cdot u_\tau$, führt zu $u_b = 0.01289$ m/s. Darauf basierend lautet die Reynoldszahl $Re_b = 6891$. Der Anfangswert der turbulenten kinetischen Energie wird wiederum mit Hilfe der Gleichung 4.2 bestimmt. Die Wärmezufuhr an der Wand kann, wie bereits beschrieben, beliebig gewählt werden. Um die Auswirkungen der sich ändernden Stoffwerte auf die von Kawamura et al. [76] inkompressibel bestimmten Resultate möglichst gering zu halten, wird eine relativ niedrige konstante Wärmezufuhr von $\dot{q}_w = 2$ W/m² vorgegeben. Die vorgegebene Wandrandbedingung ist jedoch nicht konstant, da ihr ein Gradient zugrunde liegt, welcher von der temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit abhängig ist:

$$\frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\dot{q}_w}{\lambda(T)} \quad (5.1)$$

Folglich können bei dieser Simulation Temperaturfluktuationen auch unmittelbar an der Wand auftreten. Der bereits erwähnte Senkenterm (x) der Energiegleichung lautet nach [110]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \hat{h}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \hat{u}_j \hat{h}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(a_{eff} \frac{\partial \hat{h}}{\partial x_j} \right) - \underbrace{\frac{\hat{u}_j \dot{q}_w}{u_b \delta}}_{(x)} \quad (5.2)$$

Des Weiteren sind den Wänden no-slip Randbedingungen aufgeprägt, was bedeutet, dass die Geschwindigkeit und die turbulente kinetische Energie direkt an der Wand gleich null

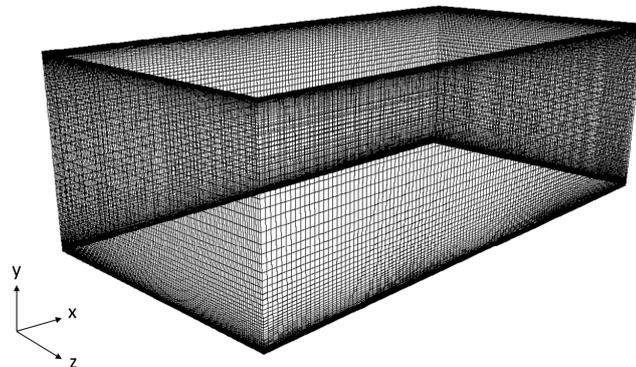


Abbildung 5.2: Gitter der wandgebundenen Strömung.

sind, also gilt, $u_w = 0$ und $k_w = 0$. Das dieser Simulation zugrundeliegende Feinstrukturmodell ist das dynamische Eingleichungsmodell, vorgestellt in Abschnitt 2.6.3.3. Die Courant Zahl, welche beschreibt um wieviele Zellen sich ein Fluidteilchen pro Zeitschritt maximal bewegt, ist definiert als,

$$Co = \frac{u \cdot \Delta t}{\Delta x} \quad (5.3)$$

wobei Δt die Zeitschrittweite und Δx die Maschenweite beschreibt. Diese kann während einer Simulation als konstant angegeben werden, wodurch der Zeitschritt jedesmal neu an das aktuelle Geschwindigkeitsfeld angepasst wird. Der bei dieser Simulation verwendete Wert liegt bei $Co = 0.65$. Die Netzauflösung ist $120 \times 96 \times 120$ in x, y und z-Richtung mit einer starken Verfeinerung in Richtung Wand, vgl. Abb. 5.2, was einer Gesamtzellenanzahl von etwa 1.38 Millionen Zellen entspricht. Dies garantiert eine sehr gute Auflösung turbulenter Strukturen innerhalb des wandnahen Bereichs und des Übergangsbereiches. Der dimensionslose Wandabstand beträgt hierbei $y^+ < 1$. Netzverfeinerungsstudien und die Untersuchung des Einflusses verschiedener Feinstrukturmodelle folgen für die Simulationen bei überkritischen Druckbedingungen.

Um die Entwicklung einer voll turbulenten Strömung zu beschleunigen, wird das Geschwindigkeitsfeld zum Zeitschritt null mit Hilfe einer Methode von Schoppa und Hussain nach [158] gestört, vgl. Abb. 5.3 und 5.4. Die Störung spiegelt sich in einer gemittelten turbulenten Geschwindigkeitsverteilung in Hauptströmungsrichtung des Kanals wieder. Des Weiteren sind sinusförmige Schwankungen des Geschwindigkeitsfeldes für u_x und u_z in unmittelbarer Wandnähe zu beobachten, welche sich überlagern. Dies führt zu einer Ausbildung einer voll entwickelten turbulenten Strömung nach etwa 5-10 Durchflusszeiten. Diese Größe beschreibt, wie lange ein Fluidteilchen benötigt um vom Eintritt des Kanals zum Austritt zu gelangen.

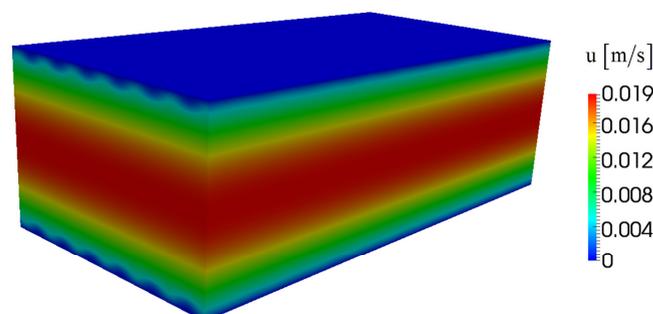


Abbildung 5.3: Störung des Geschwindigkeitsfeldes zum Zeitpunkt null.

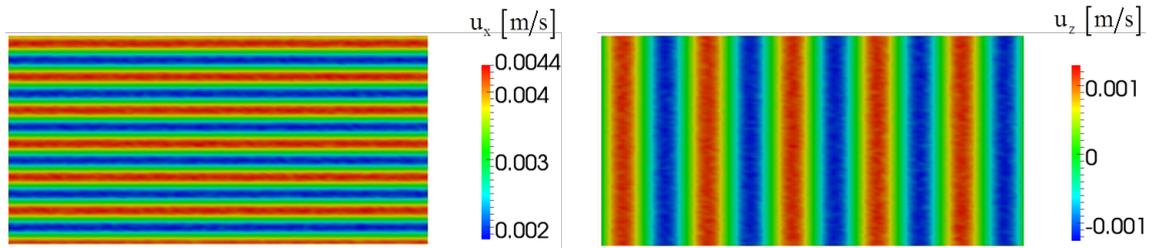


Abbildung 5.4: Querschnitt des gestörten Geschwindigkeitsfeldes in unmittelbarer Wandnähe.

Um die Resultate der LES mit den DNS Daten vergleichen zu können, müssen die Größen in entdimensionierter Form angegeben werden. Die Normierung erfolgt hierbei mit Hilfe der Wandschubspannungsgeschwindigkeit u_τ und der ebenso darauf basierenden Temperatur T_τ . Somit folgt für den entdimensionierten Wandabstand y^+ , die mittlere Geschwindigkeit u^+ und die mittlere Temperatur T^+ :

$$y^+ = \frac{yu_\tau}{\nu}, \quad u^+ = \frac{\bar{u}}{u_\tau}, \quad T^+ = \frac{T_w - \bar{T}}{T_\tau}, \quad \text{mit} \quad T_\tau = \frac{\dot{q}_w}{\rho c_p u_\tau} \quad (5.4)$$

5.1.2 Ergebnisse

Mit Hilfe der zuvor bestimmten Anfangs- und Randbedingungen kann eine voll eingelaufene, turbulente Strömung mit zugehörigem Temperaturfeld erzeugt werden. Eine Momentaufnahme der Strömungsstruktur des Geschwindigkeitsfeldes ist der linken Seite von Abb. 5.5 zu entnehmen.

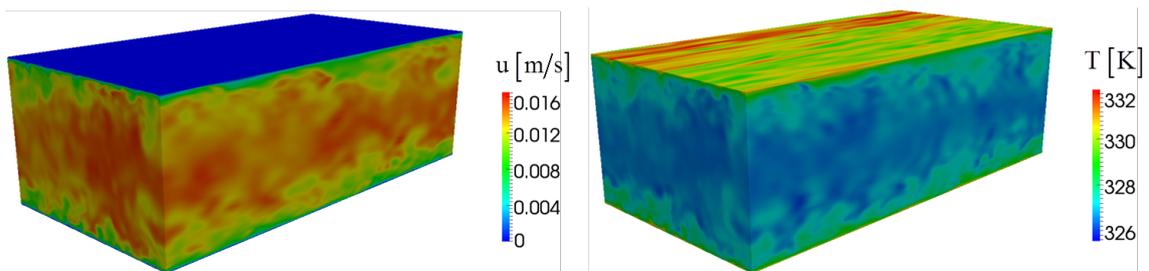


Abbildung 5.5: Strömungsstruktur des Geschwindigkeits- und Temperaturfeldes.

Aufgrund der No-slip Randbedingungen, bzw. der Reibung, ist die Geschwindigkeit direkt an der Wand null und steigt Richtung Kanalzentrum. Die rechte Seite von Abb. 5.5 zeigt das zugehörige Temperaturfeld, worauf deutliche Fluktuationen an der Wand zu erkennen sind. Diese zeigen lokale Schwankungen von 328 - 332.5 K, verursacht durch die angewendete temperaturabhängige Randbedingung. Die maximale Differenz der mittleren Temperatur beträgt hierbei aufgrund der niedrigen Aufheizung lediglich etwa sieben Kelvin. Somit sind Auswirkungen der Stoffwertänderungen auf die Resultate nicht zu erwarten. Insgesamt sind die Strömungsstruktur beider Felder für eine Prandtl Zahl von 0.71 sehr ähnlich.

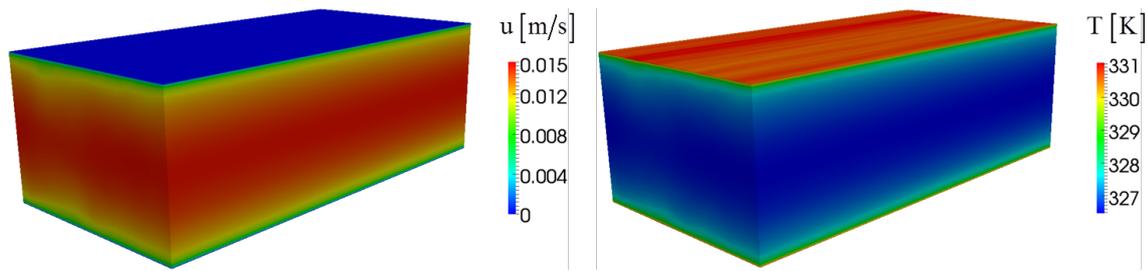


Abbildung 5.6: Zeitlich gemittelte Geschwindigkeits- und Temperaturfelder.

Um nun Aussagen über die jeweiligen Profile machen zu können, müssen das Geschwindigkeits- und das Temperaturfeld statistisch ausgewertet, also zeitlich gemittelt werden. Die resultierenden Verteilungen sind in Abb. 5.6 veranschaulicht und werden in den Abbildungen 5.7 und 5.8 mit den DNS Daten von Kawamura et al. verglichen. Hierbei beschreibt die x-Achse den dimensionslosen Wandabstand y^+ von der Wand bis zum Zentrum des Kanals bei etwa $y^+ = 395$. Dieser ist in logarithmischer Form aufgetragen um die Ergebnisse innerhalb des wandnahen Bereichs besser vergleichen zu können. Der minimale Wandabstand beträgt hierbei $y^+ = 0.6$. Ebenso in normierter Form ist die mittlere Geschwindigkeit und Temperatur aufgetragen.

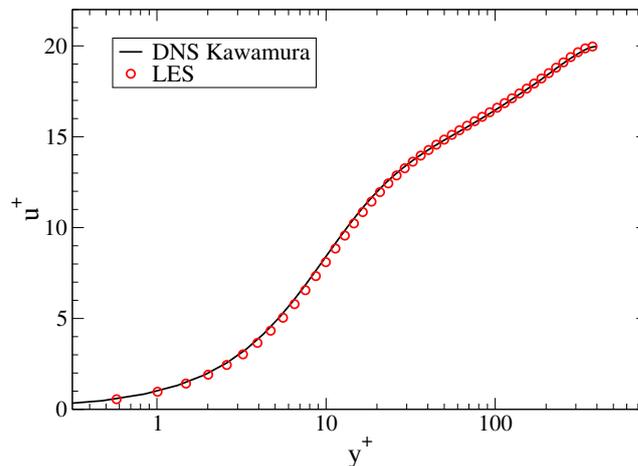


Abbildung 5.7: Zeitlich gemittelttes Geschwindigkeitsprofil.

In beiden Diagrammen beschreibt die schwarze, durchgezogene Linie die Ergebnisse der direkten numerischen Simulation und die Symbole in rot die Ergebnisse der Large Eddy Simulation. Es ist deutlich eine sehr gute Übereinstimmung beider Resultate sowohl in direkter Wandnähe, als auch im Zentrum des Kanals, zu erkennen.

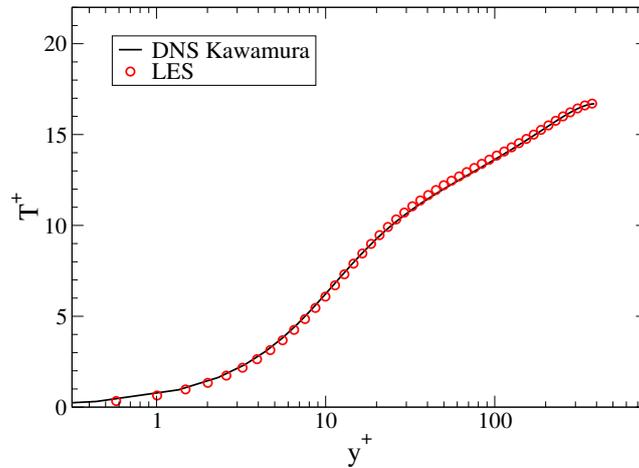


Abbildung 5.8: Zeitlich gemittelte Temperaturverteilung.

Dies trifft ebenso auf die Profile der mittleren turbulenten Geschwindigkeitsfluktuationen in Hauptströmungsrichtung (streamwise-str), azimuthaler Richtung (spanwise-sp) und Wandnormalenrichtung (radial-r) zu, vgl. Abb. 5.9. Bis auf sehr geringe Abweichungen außerhalb des wandnahen Bereichs stimmen die erhaltenen Resultate, beschrieben durch die roten, grünen und blauen Symbole, sehr gut mit den DNS Daten überein.

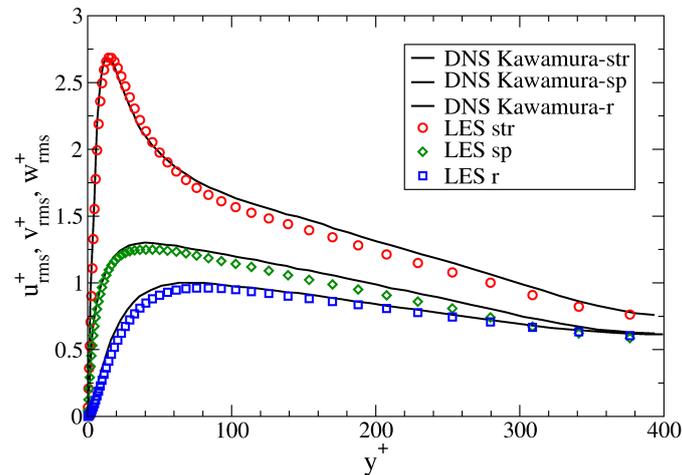


Abbildung 5.9: Intensität der Geschwindigkeitsfluktuationen in jeweilige Raumrichtung.

Einen sehr auffälligen Unterschied zeigen hingegen die mittleren Fluktuationen des Temperaturfeldes T_{rms}^+ . Diese weichen direkt an der Wand bei $y^+ = 0$ sehr stark von den Vergleichsdaten der DNS ab, was auf eine unterschiedliche Anwendung der Gradientenrandbedingung zurückzuführen ist. In dieser Studie werden im Gegensatz zur direkten numerischen Simulation Temperaturfluktuationen direkt an der Wand zugelassen.

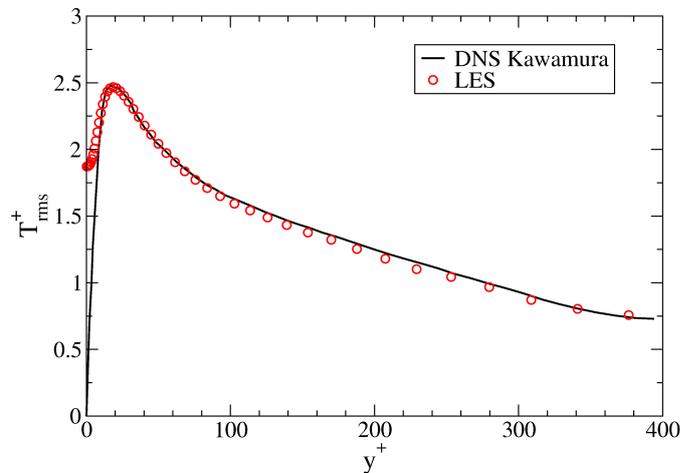


Abbildung 5.10: Intensität der Temperaturfluktuationen.

Abschließend muss noch angeführt werden, dass bei allen durchgeführten Simulationen starke Netzabhängigkeiten und Abhängigkeiten vom jeweils verwendeten Feinstrukturmodell vorlagen. Hierauf soll jedoch genauer im Folgenden Kapitel eingegangen werden. Zusammenfassend kann von einer erfolgreichen Validierung der LES Methode gesprochen werden.

5.2 Turbulente Rohrströmung bei überkritischen Druckbedingungen

Ziel dieser Studie ist die Grundlagenuntersuchung der physikalischen Mechanismen des verschlechterten Wärmeübergangphänomens bei überkritischen Druckbedingungen. Hierzu müssen zuverlässige Daten der mittleren Geschwindigkeits- und Temperaturverteilungen sowie der Turbulenzintensitäten bereitgestellt werden, welche auf Grund der hohen Drücke und Temperaturen nur sehr schwer aus Experimenten gewonnen werden können. Die Ausarbeitung der Haupteinflussfaktoren bezüglich der Wandtemperaturverteilung steht ebenfalls im Vordergrund der Untersuchung, da sie bei ingenieurstechnischen Anwendungen oftmals die entscheidende Größe ist. Das verwendete Feinstrukturmodell und die Netzaufösung spielen hierbei eine besondere Rolle.

5.2.1 Numerisches Setup

Ausgangspunkt der Untersuchung bei überkritischen Druckbedingungen bildet abermals die direkte numerische Simulation von Bae et al. [4], welche bereits ausführlich im vorangegangenen Kapitel beschrieben wurde. Die zugrundeliegenden Anfangsbedingungen bleiben demnach identisch, sind jedoch noch einmal in Tabelle 5.1 zusammengefasst. Insgesamt werden eine Large Eddy Simulation unter Zwangskonvektionsbedingungen und zwei Simulationen unter Mischkonvektionsbedingungen durchgeführt. Unterschiede zur verwendeten numerischen Konfiguration der RANS Untersuchung bestehen lediglich in

der voll dreidimensionalen Berechnung der Strömung und zum Anderen in der Länge des Inflow Generators von $L/d = 5$, um die Erfassung auch großer Wirbel zu gewährleisten, vgl. Abb. 5.11.

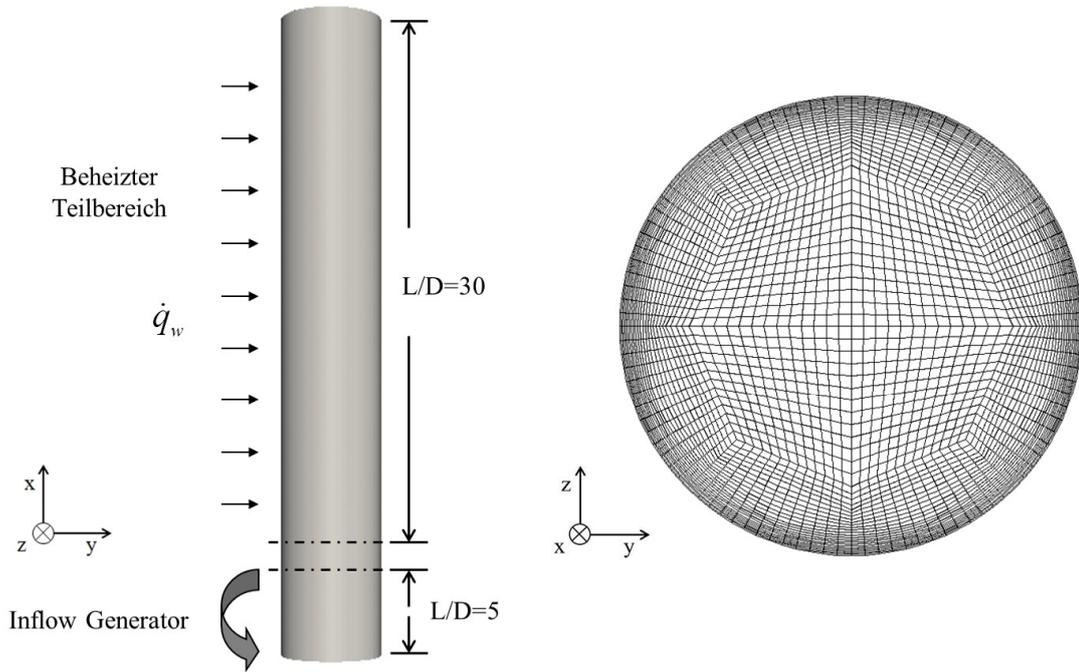


Abbildung 5.11: Aufbau der LES mit zugehörigem Netz.

Fall	Bedingung	Fließrichtung	\dot{q}^+ (kW/m^2)	d (mm)	u_0 (m/s)
A	Zwangskonvektion	Aufwärts	1.4438	1.0	0.4454
B	Mischkonvektion	Aufwärts	1.4438	2.0	0.2227
C	Mischkonvektion	Aufwärts	2.8876	2.0	0.2227

Tabelle 5.1: Untersuchte Strömungsbedingungen bei $p_0 = 8$ MPa, $T_0 = 301.15$ K, $Re_0 = 5400$ und $Pr_0 = 3.08$.

Die Längen des zusätzlichen Gebietes zur Vermeidung von Rückkopplungseffekten und des beheizten Teilbereichs bleiben ebenfalls gleich. Das Netz basiert aufgrund der hohen Homogenität auf einem Oktagon mit einer starken Netzverfeinerung in Richtung Wand, vgl. 5.11.

Im nun folgenden ersten Schritt der Untersuchung sollen die mittleren Geschwindigkeits- und Turbulenzprofile des isothermen Inflow Generators näher untersucht werden. Diesem liegen, wie bereits erwähnt, periodische Randbedingungen am Eintritt und Austritt zugrunde, sowie no-slip Randbedingungen direkt an der Wand, um die Ausbildung einer vollentwickelten Strömung zu gewährleisten. Fokus dieser ersten Studie liegt auf der Untersuchung des Einflusses der Netzauflösung und der unterschiedlicher Feinstrukturmodelle auf das mittlere Geschwindigkeitsfeld.

5.2.2 Ergebnisse - Inflow Generator (IG)

Auf Grundlage des Durchmessers d und der Eintrittsgeschwindigkeit u_0 von Fall A werden zu Beginn zwei Simulationen unter Verwendung des dynamischen Eingleichungsmodells und verschiedener Netzauflösungen durchgeführt. Das erste, gröbere Netz besteht aus etwa 103000 Hexahedrazellen mit einer zugehörigen Verteilung von $50 \times 29 \times 88$ in Hauptströmungsrichtung, radialer Richtung und Umfangsrichtung. Dem gegenüber steht eine wesentlich feinere Netz, bestehend aus etwa 680000 Zellen mit einer Verteilung von $100 \times 53 \times 144$. Ziel ist die Ausarbeitung erster Aussagen für die benötigte Auflösung des beheizten Teilbereichs. Hierfür werden mittlere Geschwindigkeitsprofile sowie Profile der turbulenten Fluktuationen mit den DNS Daten von Bae et al. [4] verglichen. Zusätzlich stehen für den Inflow Generator weitere Daten von Eggels et al. [38] zur Verfügung, welcher ebenfalls eine direkte numerische Simulation für eine vergleichbare Rohrströmung durchführte.

Abb. 5.12 zeigt die normierten, mittleren Geschwindigkeitsprofile beider durchgeführter Large Eddy Simulationen im Vergleich zu logarithmischen Wandgesetz und den direkten numerischen Simulationen. Die Profile sind hierbei über dem logarithmisch aufgetragenen dimensionslosen Wandabstand dargestellt. Es sind kleinere Abweichungen der Ergebnisse zwischen Simulation unter Verwendung des groben Gitters (rote Symbole) und den DNS Daten (durchgezogenen und gestrichelte Linien) zu erkennen. Demgegenüber stehen sehr gute Übereinstimmungen der Ergebnisse unter Verwendung des feineren Gitters, welche in grünen Symbolen angegeben sind.

Dies ist ebenso für die Profile der turbulenten Fluktuationen in Hauptströmungsrichtung und radialer Richtung der Fall, welche in Abb. 5.13 gezeigt sind. Die Überschätzungen an der Wand ($y/r = 1$) und im Zentrum des Kanals ($y/r = 0$) sind deutlich geringer für das feinere Netz. Jedoch ist diese Auflösung für beide Geometriebereiche, also Inflow Generator und beheizter Teilbereich, nicht anwendbar, da der Berechnungsaufwand viel zu hoch wäre. Eine weitere Auffälligkeit sind die unterschiedlichen Ergebnisse der beiden direkten numerischen Simulationen, insbesondere für die Fluktuationen in Hauptströmungsrichtung.

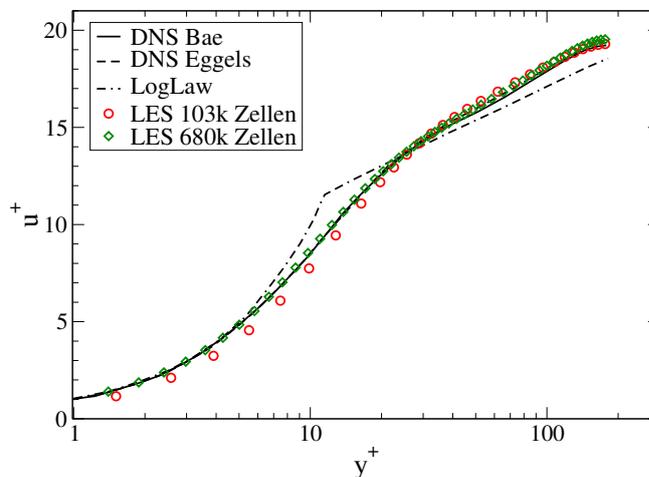


Abbildung 5.12: Einfluss der Netzauflösung auf das Geschwindigkeitsprofil (IG).

tung. Diese resultieren aus einer unterschiedlichen Auflösung des Rechengebietes. Eggels et al. verwendet etwa doppelt so viele Zellen im Vergleich zu Bae et al.. Es bleibt festzuhalten, dass der Inflow Generator unter Verwendung des groben Netzes Ergebnisse mit ausreichender Genauigkeit liefert, um die Hauptproblematiken für Strömungen mit Wärmeübergängen bei überkritischen Drücken zu erfassen.

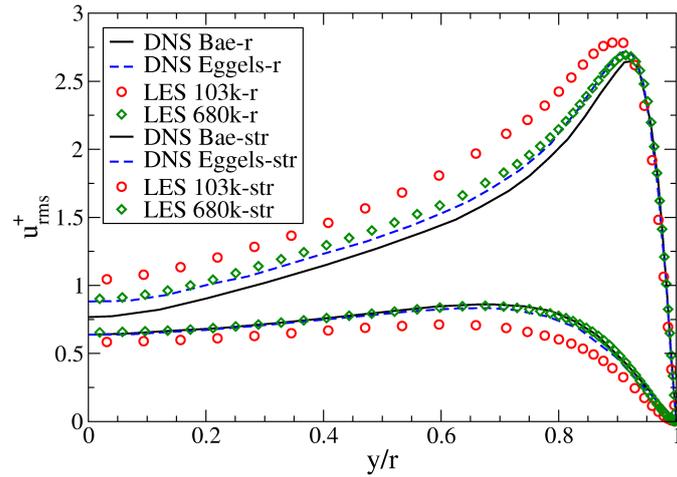


Abbildung 5.13: Einfluss der Netzaufösung auf die Intensität der turbulenten Fluktuationen (IG).

Die beiden Abbildungen 5.14 und 5.15 zeigen einen Vergleich der mittleren Geschwindigkeitsprofile und der turbulenten Fluktuationen von LES, unter Verwendung von verschiedenen Feinstrukturmodellen, und DNS Daten. Es ist zu erkennen, dass sowohl das

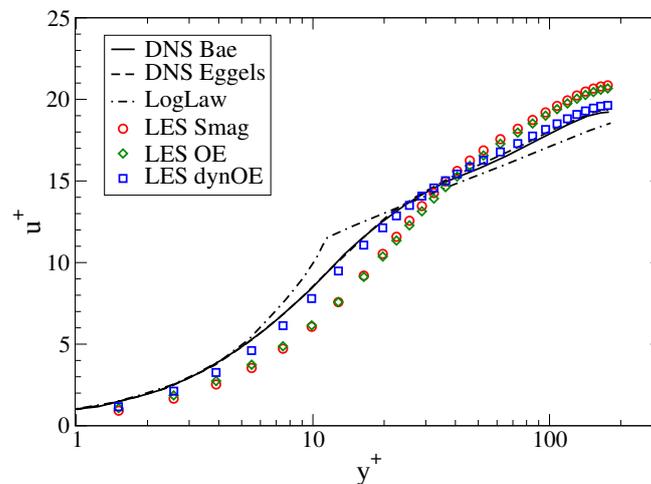


Abbildung 5.14: Vergleich der Geschwindigkeitsprofile unter Verwendung unterschiedlicher Feinstrukturmodelle (IG).

Smagorinsky- als auch das Eingleichungsmodell die Geschwindigkeit in Wandnähe deutlich unterschätzen und zusätzlich im Zentrum des Kanals überschätzen.

Dies trifft ebenso auf die Profile der turbulenten Fluktuationen zu. Da auch hier die Unterschiede zwischen Smagorinsky Modell und Eingleichungsmodell vernachlässigbar klein sind, werden nur die Profile von Erstgenannten gezeigt.

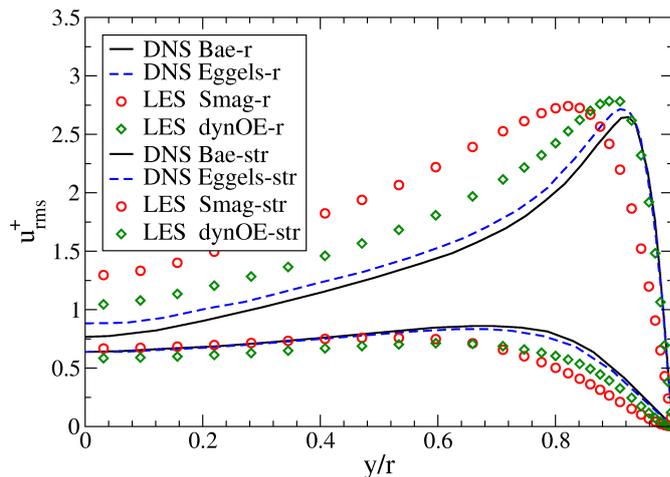


Abbildung 5.15: Vergleich der Profile für die Geschwindigkeitsfluktuationen unter Verwendung unterschiedlicher Feinstrukturmodelle (IG).

Deutlich besseres Verhalten zeigen die Profile der Simulation, in welcher das dynamische Eingleichungsmodell zum Einsatz kommt. Durch die zeitlich dynamische Berechnung der Konstanten innerhalb des Modells werden enorme Verbesserungen erzielt. Daraus geht hervor, dass der Produktionsterm eine entscheidende Rolle für die Modellierung wandgebundener Strömungen spielt. Aus diesem Grund wird für die weiteren Berechnungen ausschließlich dieses Modell verwendet.

5.2.3 Ergebnisse - Zwangskonvektion

Unter Anwendung der kompressiblen LES Methode erfolgt im Folgenden die Untersuchung des beheizten Teilbereichs. Hierzu werden zunächst mögliche Auftriebseffekte vernachlässigt, also Strömungen bei Zwangskonvektionsbedingungen analysiert. Als Anfangs- und Randbedingungen dienen die Werte von Fall A, vgl. Tabelle 5.1. Aufgrund der konstanten zugeführten Energie von $\dot{q}_w = 61\text{kW/m}^2$ wird die pseudokritische Temperatur schon im Eintrittsgebiet des beheizten Teilbereichs überschritten. Insgesamt gilt für den gesamten Strömungsbereich die Aussage, dass $T_b \leq T_{pc} \leq T_w$.

Im weiteren Verlauf dieser Studie werden mehrere Netzauflösungen untersucht. Das größte Gitter besteht hierbei aus einer Gesamtzellenanzahl von etwa 190000 Zellen mit einer Verteilung von 180x20x64 in axialer, radialer und tangentialer Richtung. Die Anzahl der Zellen in radialer Richtung ist gegeben von Kanalmitte bis zur Wand. Trotz des groben Gitters garantiert diese Auflösung eine stabile Berechnung. Die Hauptuntersuchung wird mit Hilfe eines weitaus feineren Netzes vorgenommen, bestehend aus etwa 934000 Zellen mit einer Verteilung von 360x35x88. Aufgrund des sehr feines Netzes innerhalb des

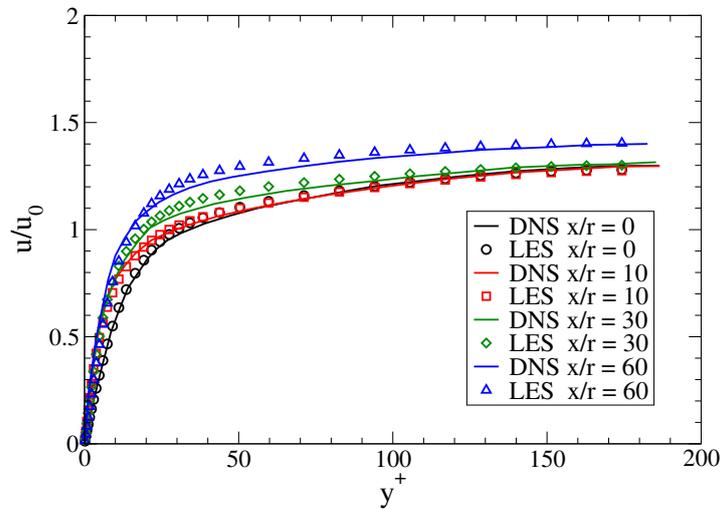


Abbildung 5.16: Geschwindigkeitsprofile entlang des beheizten Bereichs (Fall A).

wandnahen Bereichs bis hin zu einem dimensionslosen Wandabstand von $y^+ \leq 0.1$, kann hier von einer guten Auflösung der Wirbel in radialer Richtung, gesprochen werden. Die nun folgenden Ergebnisse für den beheizten Bereich werden zunächst ausschließlich für diese Konfiguration gezeigt.

Abb. 5.16 veranschaulicht die Entwicklung der Geschwindigkeitsprofile entlang des beheizten Bereichs. Hierzu wurden die Geschwindigkeitsfelder auf vier verschiedenen Höhen ausgewertet und in dimensionsloser Form über den Wandabstand aufgetragen. Direkt am Eintritt in den beheizten Teilbereich bei $x/r = 0$ gibt es eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den DNS Daten, dargestellt mit einer durchgezogenen Linie, und den LES Daten, dargestellt durch verschiedene Symbole. Durch die zugeführte Energie wird die

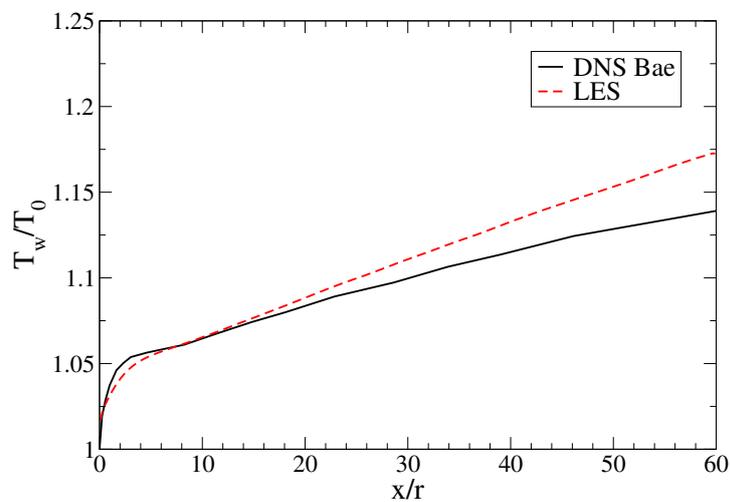


Abbildung 5.17: Wandtemperaturverteilung (Fall A).

Strömung zunächst an der Wand, und anschließend über den gesamten Strömungsbereich beschleunigt. Dieser Effekt wird von der LES sehr gut erfasst und es gibt lediglich kleinere Abweichungen in Wandnähe in Richtung Austritt bei $x/r = 60$.

Die Wandtemperaturverteilung entlang des beheizten Bereichs ist in Abb. 5.17 gezeigt. Diese ist unter Verwendung der Anfangstemperatur T_0 in dimensionloser Form über die normierte Länge x/r aufgetragen. Im Eintrittsbereich ist eine kleine Unterschätzung der Wandtemperatur zu erkennen. Grund hierfür ist die gerade beginnende Ausbildung der Temperaturgrenzschicht, welche in diesem Bereich noch sehr dünn ist, und nicht komplett durch das verwendete Netz aufgelöst werden kann. Zusätzlich befinden sich am Eintritt die höchsten Gradienten der Wandtemperatur, was die Bestimmung zusätzlich erschwert. Im weiteren Verlauf liegt eine lineare Steigung der Wandtemperatur vor, welche wegen der zu gering gewählten axialen Netzauflösung, wie später noch detaillierter gezeigt, nur leicht überschätzt wird. Dies führt jedoch zu einer Differenz von etwa 10 K am Austritt. Insgesamt kann jedoch postuliert werden, dass die Entwicklung der Wandtemperatur gut wiedergegeben wird.

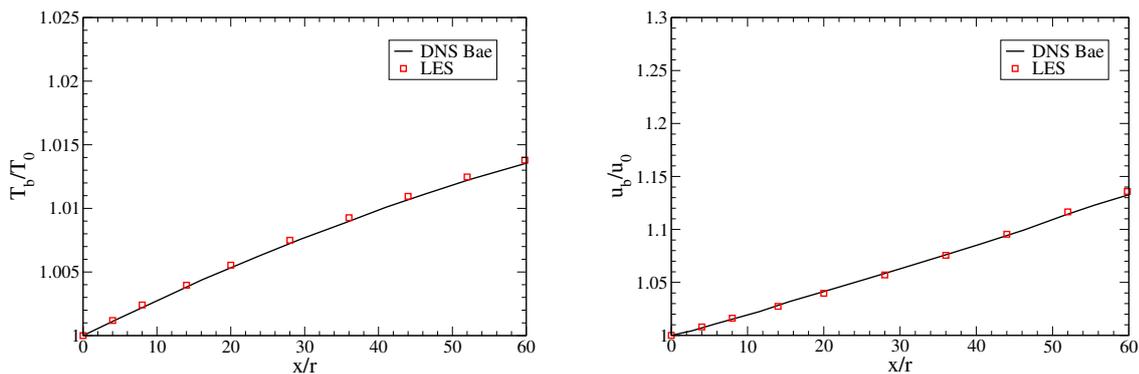


Abbildung 5.18: Bulk-Temperatur- und Bulk-Geschwindigkeitsprofil (Fall A)

In Abbildung 5.18 ist der Verlauf der Bulk-Temperatur und der Bulk-Geschwindigkeit dargestellt. Diese werden mit Hilfe der Gleichungen 4.5 und 4.6 berechnet und zeigen ein fast lineares Ansteigen bis hin zum Austritt des beheizten Bereichs. Die Bulk-Temperatur von 305.3 K am Austritt liegt dabei noch unterhalb der pseudokritischen Temperatur. Insgesamt gibt es eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den DNS Ergebnissen von Bae et al. und den LES Resultaten. Dies ist jedoch nur der Fall, falls die Courant-Zahl, vgl. Glg. 5.3, kleiner als 0.05 ist, also der sich an das Geschwindigkeitsfeld anpassende Zeitschritt klein genug ist. Grund hierfür sind die extremen Schwankungen bzw. Variationen der Stoffgrößen, welche numerische Oszillationen hervorrufen können und somit dem System zusätzliche Energie zuführen. Im Gegensatz hierzu lag dieses Verhalten bei unterkritischen Druckbedingungen nicht vor, weswegen hier eine stabile Berechnung mit einer Courant Zahl von 0.65 möglich war. Dies ist der Grund für den enormen Rechenaufwand, welcher für Large Eddy Simulationen bei überkritischen Drücken notwendig ist. Dieser liegt bei der Verwendung von 32 Prozessoren bei etwa 2-3 Wochen.

Das Profil der Nusselt Zahl ist insbesondere abhängig von der Wand- bzw. Bulktemperaturverteilung, vgl. Gleichung 5.5. Somit sind die geringen Abweichungen am Eintritt

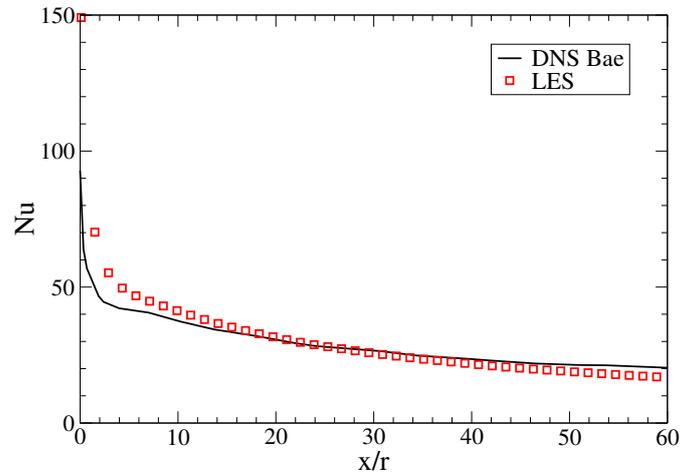


Abbildung 5.19: Nusselt Zahl Verteilung (Fall A)

und Austritt lediglich eine Folge der zuvor bestimmten Temperaturprofile.

$$Nu_b = \frac{\dot{q}_w}{T_w - T_b} \frac{d}{\lambda_b} \quad (5.5)$$

Im nächsten Schritt erfolgt die Auswertung des Einflusses des Feinstrukturmodells auf das Impulsfeld. Hierzu sei das Verhältnis zwischen Feinstrukturanteil der Wirbelviskosität und der molekularen Viskosität für sechs verschiedene Höhen des beheizten Bereichs aufgetragen, vgl. Abb. 5.20. Der Anteil an zusätzlicher Vermischung ist, wie gezeigt, über die gesamte Länge des Kanals kleiner als 5%, also relativ gering. Als Konsequenz kann von einer sehr guten Auflösung des Geschwindigkeitsfeldes, vergleichbar zu einer DNS, ausgegangen werden.

Das Gegenteil ist der Fall für das Temperaturfeld. Hierbei zeigt das Verhältnis aus Feinstrukturanteil der Temperaturleitfähigkeit und molekularer Temperaturleitfähigkeit einen über die beheizte Länge stetig wachsenden Anteil des Modells. Dieser beträgt am Austritt des Rohres etwa 80% bei einem dimensionslosen Wandabstand von $y^+ = 10$. Das Netz ist

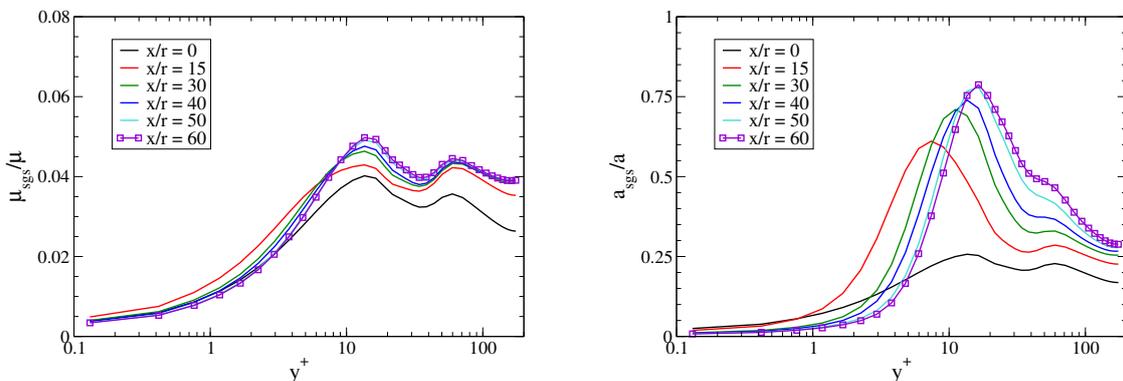


Abbildung 5.20: Einfluss des Feinstrukturmodells auf das Impuls- und Temperaturfeld (fall A)

demnach für das Temperaturfeld im Vergleich zum Geschwindigkeitsfeldes zu grob, um eine gut aufgelösten Energietransport zu gewährleisten. Bleibt die Frage zu klären, ob man den Energietransport von Wand in Richtung Zentrum des Kanals mit einem variablen Feinstruktur Prandtl Zahl Ansatz so stark beeinflussen kann, so dass dies Auswirkungen auf die Wandtemperaturverteilung hat. Diese Frage wird am Ende dieses Kapitels beantwortet werden. Abb. 5.21 zeigt die Entwicklung der normierten turbulenten kinetischen Energie $TKE = 1/2 ((u_{rms}^2 + v_{rms}^2 + w_{rms}^2)/u_0^2)$, welche von den mittleren Fluktuationswerten aller drei Koordinatenrichtungen abhängt, über die beheizte Länge. Die Profile sind hierbei über dem logarithmisch aufgetragenen Wandabstand (y/r) dargestellt. Nach anfänglicher guter Übereinstimmung bei einer Höhe von $x/r = 5.04$ zeigt sich im weiteren Verlauf eine anwachsende Überschätzung der TKE innerhalb des beheizten Bereichs. Dies steht im Zusammenhang mit der dominanten Geschwindigkeitsfluktuation in Hauptströmungsrichtung u_{rms} . Die Profile der Fluktuationswerte aller Raumrichtungen für Eintritt und Austritt sind in Abb. 5.21 gezeigt. Es ist deutlich zu sehen, dass die Intensität der Fluktuationen in Wandnormalenrichtung und Umfangsrichtung abnimmt, jedoch die der dominanten Fluktuationen in Strömungsrichtung gleich bleibt. Die Verschiebung des Maximums der TKE in Richtung Wand, angedeutet durch die gestrichelten Linien, ist jedoch gut getroffen. Zusammengefasst kann gefolgert werden, dass insbesondere die Auflösung in Hauptströmungsrichtung durch die Überschätzung der Fluktuationen, erhöht werden muss.

Dies zeigt sich ebenfalls anhand einer Netzverfeinerungsstudie, vgl. Abb. 5.22. Ein Vergleich der Ergebnisse, gewonnen aus einer LES unter Verwendung des groben Netzes von 190000 Zellen, eines feinen Netzes von 934000 Zellen und den DNS Resultaten von Bae et al. zeigt, dass eine radiale Netzverfeinerung insbesondere am Eintritt bessere Ergebnisse liefert. Dies liegt an der wesentlich besseren Auflösung der dünnen Temperaturgrenzschicht. Eine axiale Netzverfeinerung führt zu einer Absenkung des Gradienten der Wandtemperatur und somit zu einer deutlichen Verbesserung der Ergebnisse. Ein weiterer Vergleich zwischen den gewonnenen LES Daten und RANS Daten aus der Literatur von He et al. [59], vgl. Abb. 5.23, zeigt die meist beträchtlichen Unterschiede der verschiedenen Wandtemperaturverteilungen. Während die RANS Simulation unter Verwendung des Launder-Sharma Turbulenzmodells die Wandtemperatur um ein Viel-

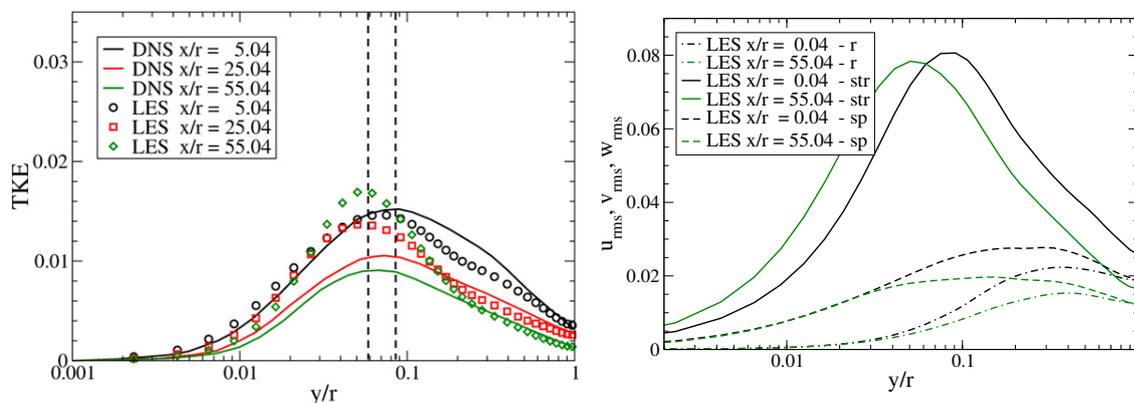


Abbildung 5.21: Entwicklung der turbulenten kinetischen Energie TKE und der Fluktuationswerte über die beheizte Länge (Fall A).

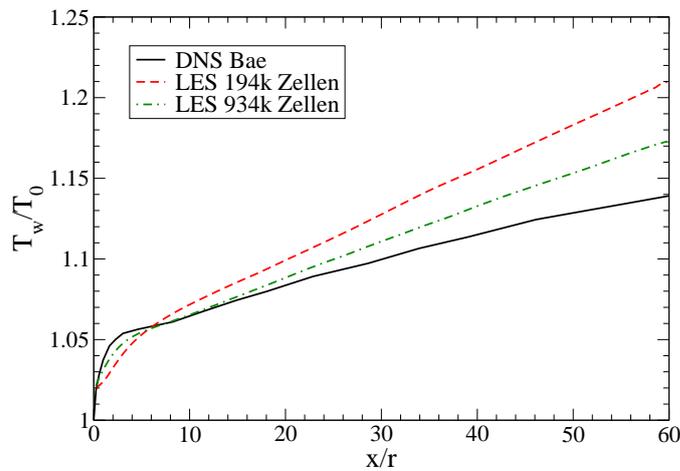


Abbildung 5.22: Netzverfeinerungsstudie (Fall A).

faches überschätzt, zeigen die Ergebnisse, welche mit Hilfe des Chien-Modells gewonnen wurden, ein wesentlich besseres Verhalten. Dennoch bleibt festzuhalten, dass die durchgeführte LES sowohl den Temperaturanstieg im Eintrittsbereich besser vorhersagt, als auch den linearen Temperaturanstieg im weiteren Verlauf über die beheizte Länge.

Somit bleibt letztendlich festzuhalten, dass die Large Eddy Simulation unter Anwendung des dynamischen Modells qualitativ gute Ergebnisse erzielt, jedoch eine bessere Auflösung notwendig ist, um weitere Verbesserungen der Wandtemperaturprofile zu erreichen. Eine weitere Möglichkeit ist die Steigerung des konvektiven Energietransportes von Wand in Richtung Zentrum des Rohres, um den Gradienten der Wandtemperatur zu senken. Dies ist mit einem variablen Feinstruktur Prandtl Zahl Ansatz möglich.

Die nachfolgende Simulation unter Verwendung der Anfangs- und Randbedingungen von

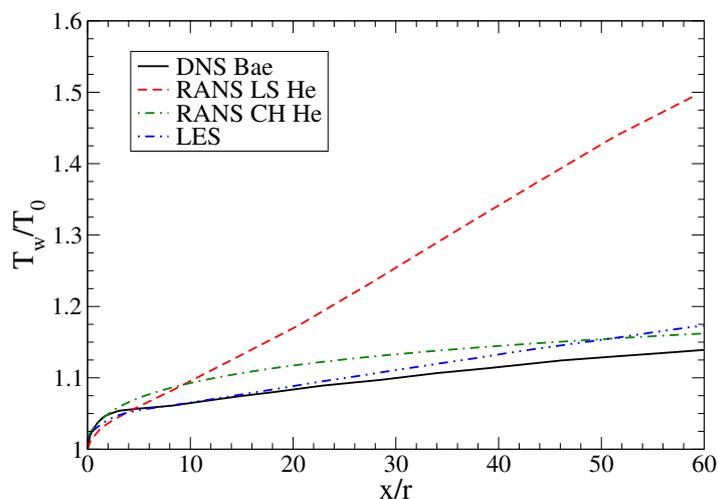


Abbildung 5.23: Vergleich der Wandtemperaturverteilungen von RANS und LES (Fall A).

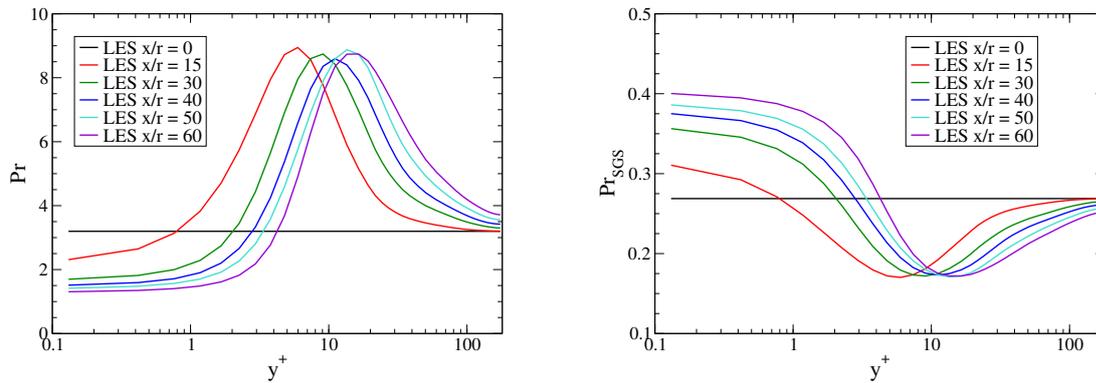


Abbildung 5.24: Verteilung der molekularen Prandtl Zahl und der variablen Feinstruktur Prandtl Zahl (Fall A).

Fall A, der gleichen Netzgröße sowie einer zusätzlich eingebrachten minimalen Netzverfeinerung in Richtung Eintritt des beheizten Bereichs und des vorgestellten Ansatzes aus Kapitel 2.6.4 liefert eine Verteilung der molekularen sowie der Feinstruktur Prandtl Zahl über die beheizte Länge, vgl. Abb. 5.24. Die mittlere molekulare Prandtl Zahl variiert hierbei um einen Faktor von sechs von etwa 1.5 direkt an der Wand bis etwa neun für einen Wandabstand von etwa $y^+ = 10$. Eine exakt gegenläufige Verteilung ist für die Profile der Feinstruktur Prandtl Zahl zu erkennen. Auf Grund der Abhängigkeit von der molekularen Prandtl Zahl werden die maximalen Werte von etwa 0.4 in unmittelbarer Wandnähe und die Minima bei einem dimensionslosen Wandabstand von $y^+ = 10$ erreicht.

Abb. 5.25 zeigt den Einfluss des Feinstrukturmodells auf das Temperaturfeld für eine konstante Höhe von $x/r = 40$ für verschiedene Feinstruktur Prandtl Zahl Ansätze. Die durchgezogene schwarze Linie beschreibt den Verlauf unter Anwendung eines konstanten Wertes von 0.5 und die rote Linie den Verlauf unter Verwendung des variablen Feinstruktur Prandtl Zahl Ansatzes. Hierbei ist eine deutliche Erhöhung des turbulenten Transportes der Energie bis um den Faktor vier zu erkennen.

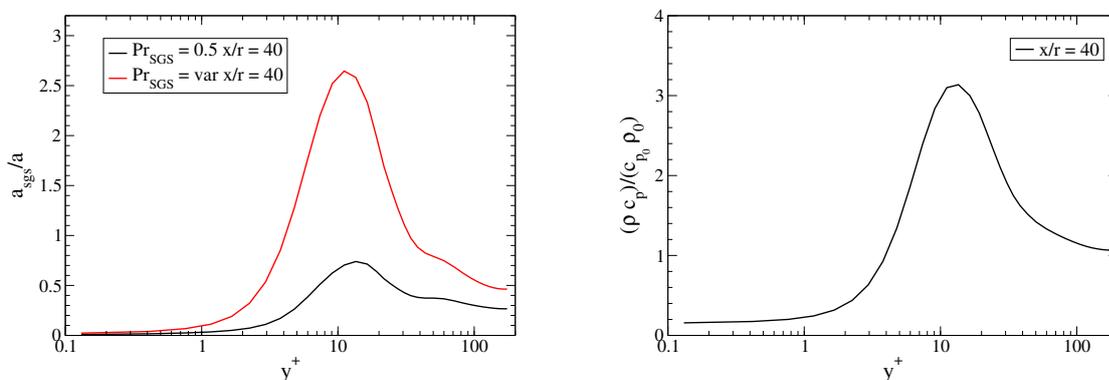


Abbildung 5.25: Einfluss des Feinstrukturmodells auf das Impulsfeld für verschiedene Pr_{SGS} Ansätze und Profil der Größe ρc_p (Fall A).

Die Erhöhung des konvektiven Transportes von Energie kann auch anhand der Peclet Zahl, welche das Verhältnis zwischen konvektiven und diffusiven Transport beschreibt, erklärt werden. Diese ist definiert als

$$Pe = RePr = \frac{u \cdot L \cdot \rho \cdot c_p}{\lambda} \quad (5.6)$$

und ist direkt proportional zu $c_p \rho$. Falls sich nun die Stoffwerte sehr stark ändern, wie es bei überkritischen Drücken der Fall ist, ist genau dort der konvektive Transport, also der Turbulenzgrad höher, wo auch die Peaks von $c_p \rho$ hoch sind, vgl. Abb. 5.25. Folglich sind die Profile des Verhältnisses von Feinstruktur zu molekularer Temperaturleitfähigkeit durch die Abhängigkeit von der molekularen Prandtl Zahl, welche per Definition von c_p abhängt und $c_p \rho$ sehr ähnlich.

Die durch den neu eingeführten variablen Feinstruktur Prandtl Zahl Ansatz erreichte Änderung des Wandtemperaturprofils ist Abb. 5.26 anhand der grün gestrichelten Linie zu entnehmen. Auf Grund des höheren Energietransportes von Wand in Richtung Zentrum des Rohres ist im Eintrittsbereich eine Unterschätzung der Wandtemperatur im Vergleich zu den DNS Daten und den Ergebnissen unter Verwendung einer konstanten Feinstruktur Prandtl Zahl zu erkennen. Der Gradient des Profils stimmt jedoch über die gesamte Kanalhöhe sehr gut mit den Vergleichsdaten überein. Eine Differenz von etwa 4.5 K bleibt hierbei über die gesamte beheizte Länge bis hin zu Austritt erhalten.

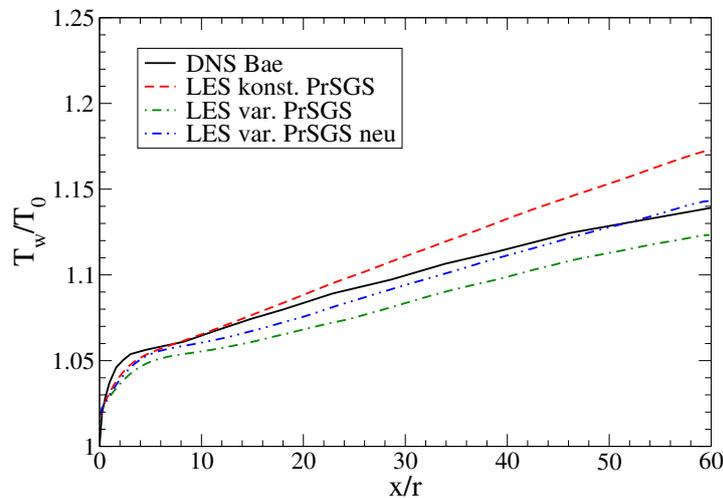


Abbildung 5.26: Vergleich der Wandtemperaturprofile für verschiedene Pr_{SGS} Ansätze (Fall A)

Um eine weitere Verbesserung des Wandtemperaturprofil zu erreichen verbleiben zwei Möglichkeiten. Dies ist zum Einen die Erhöhung der Gesamtzellenanzahl, was auf Grund der begrenzten Rechenressourcen nicht möglich ist, zum Anderen eine Anpassung der Koeffizienten α und β des variablen Feinstruktur Prandtl Zahl Ansatzes aus Kapitel 2.6.4, um den Energietransport von der Wand bis hin zum Zentrum des Rohres wieder zu beschränken. Diese Koeffizienten unterliegen, wie bereits erwähnt der Annahme isotroper Turbulenz, welche für die vorliegende Geometrie bei überkritischen Druckbedingungen keine allgemeine Gültigkeit besitzt. Ein auf diesen Überlegungen beruhender Vorschlag

ist die Wahl von

$$\alpha_{mod} \approx 1.5 \quad \text{bzw.} \quad \beta_{mod} \approx 1.85 \quad (5.7)$$

um die variable Feinstruktur Prandtl Zahl Verteilung wieder zu erhöhen. Eine mit Hilfe dieser Koeffizienten durchgeführten Simulation zeigt deutliche Verbesserung der Wandtemperaturverteilung sowohl im Eintrittsbereich als auch über die gesamte Höhe, vgl. blau gestrichelte Linie in Abb. 5.26. Die zugehörigen Verteilung der variablen Feinstruktur Prandtl Zahl veranschaulicht noch einmal die Reduktion der zusätzlichen Vermischung, vgl. Abb. 5.27. Das Maximum liegt hierbei bei einem Wert von etwa 0.5 und bei einem Minimum von etwa 0.24, was wesentlich höher ist als im Ansatz zuvor.

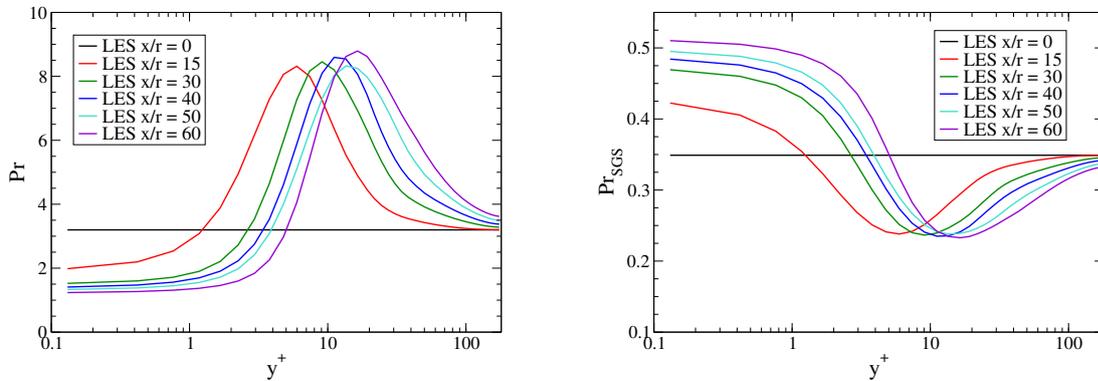


Abbildung 5.27: Verteilung der molekularen Prandtl Zahl und der angepassten variablen Feinstruktur Prandtl Zahl (Fall A).

Auch der Einfluss des Feinstrukturmodells auf das Temperaturfeld wurde mit Hilfe des neuen Ansatzes auf einen Faktor von 3 im Vergleich zu der Verwendung einer konstanten Feinstruktur Prandtl Zahl reduziert, vgl. Abb. 5.28. Zusätzlich ist noch einmal das zugehörige Profil von der Größe $c_p \rho$ gezeigt.

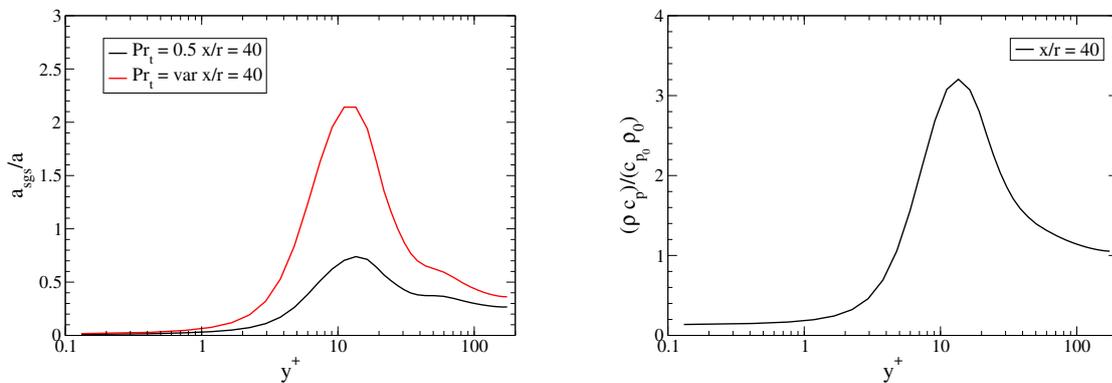


Abbildung 5.28: Einfluss des Feinstrukturmodells auf das Impulsfeld für verschiedene Pr_{SGS} Ansätze und Profil der Größe ρc_p (Fall A).

Insgesamt kann gefolgert werden, dass mit Hilfe des angepassten variablen Feinstruktur Prandtl Ansatzes, sehr gute Ergebnisse der Wandtemperaturverteilungen bei Zwangskonvektionsbedingungen unter Verwendung relativ grober Netze möglich ist.

5.2.4 Ergebnisse - Mischkonvektion

Um Aussagen über die Auswirkungen des Auftriebes auf den Wärmeübergang bei überkritischen Druckbedingungen machen zu können, werden im Folgenden Strömungen unter Mischkonvektionsbedingungen analysiert. Hierfür müssen veränderte Anfangsbedingungen gewählt werden, welche in Tabelle 5.1 zusammengefasst sind. Der Radius der Geometrie ist im Vergleich zur vorherigen Untersuchung doppelt so groß. Da die Reynoldszahl auf einen Wert von $Re_0 = 5400$ fixiert ist, folgt daraus, dass die Eintrittsgeschwindigkeit u_0 nun nur noch 0.2227m/s beträgt, also nur noch halb so groß ist, was einen großen Einfluss auf den Wärmeübergang hat. Mit der Ausnahme einer Halbierung der zugeführten Wärme \dot{q}_w sind die gewählten Randbedingungen identisch. Die numerischen Verfahren bzw. Gleichungslöser bleiben ebenfalls unverändert.

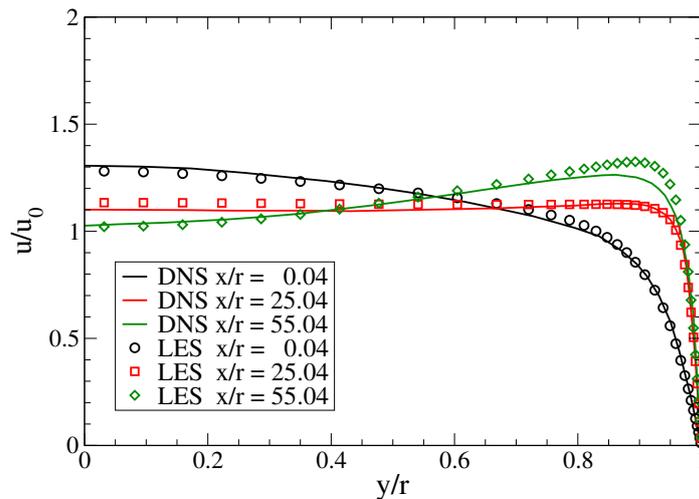


Abbildung 5.29: Verlauf der Geschwindigkeitsprofile entlang des beheizten Bereichs (Fall B).

In Abb. 5.29 sind die Geschwindigkeitsprofile vom Eintritt des beheizten Teilstückes bei $x/r = 0.04$ bis hin zum Austrittsbereich bei $x/r = 55.04$ zusammengefasst. Es ist eine gute Übereinstimmung der LES Ergebnisse, dargestellt durch unterschiedliche Symbole, und den DNS Resultaten, veranschaulicht mit durchgezogenen Linien, zu erkennen. Hierbei werden die Effekte des Auftriebes, also die Beschleunigung der Strömung in Wandnähe sehr gut erfasst. Diese resultieren aus enormen Dichteänderungen hervorgerufen durch die zugeführte Energie. Lediglich am Austritt des beheizten Bereichs liegt eine geringe Überschätzungen der Geschwindigkeit im wandnahen Bereich vor. Die Wandtemperaturverteilungen zeigen hingegen deutlich größere Unterschiede, vgl. Abb. 5.30. Um die Gründe für die Abweichungen zu erfassen muss das aus der DNS resultierende Profil genauer erläutert werden. Nach anfänglich starkem Anwachsen der Wandtemperatur wird

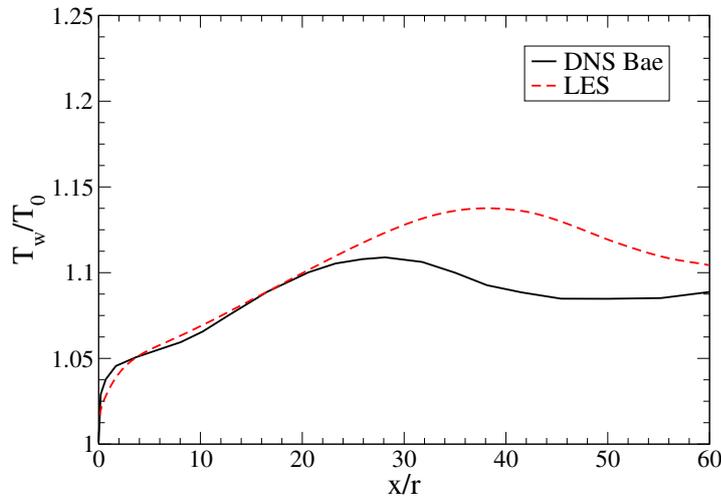


Abbildung 5.30: Wandtemperaturverteilung (Fall B).

in der Mitte des beheizten Bereiches ein Maximum erreicht. Der große Temperaturgradient wird, wie von Bae et al. [4] gezeigt, durch eine starke Verminderung der turbulenten kinetischen Energie verursacht. Diese sogenannte Relaminarisierung verursacht eine Reduktion des Energietransportes von Wand in Richtung Zentrum des Rohres, und resultiert letztendlich in einer starken Zunahme der Wandtemperatur. Die Verminderung der turbulenten kinetischen Energie wird durch ein Zusammenspiel von Auftrieb und starken Stoffwertänderungen ausgelöst. Dieses Phänomen wird in der Literatur allgemein als Verschlechterung des Wärmeübergangs, bzw. als DHT Effekt (deteriorated heat transfer) bezeichnet. Lässt ab einem bestimmten Punkt der Einfluss des Auftriebes bzw. der starken Stoffwertänderungen wieder nach, steigt die Produktion der turbulente kinetische Energie wieder an und folglich nimmt der Energietransport wieder zu. Dies hat eine Abnahme der Wandtemperatur unmittelbar nach Erreichen des Peaks zur Folge. In Austrittsnähe steigt die Temperatur langsam wieder an, da hier die beschriebenen Effekte keine Rolle mehr spielen.

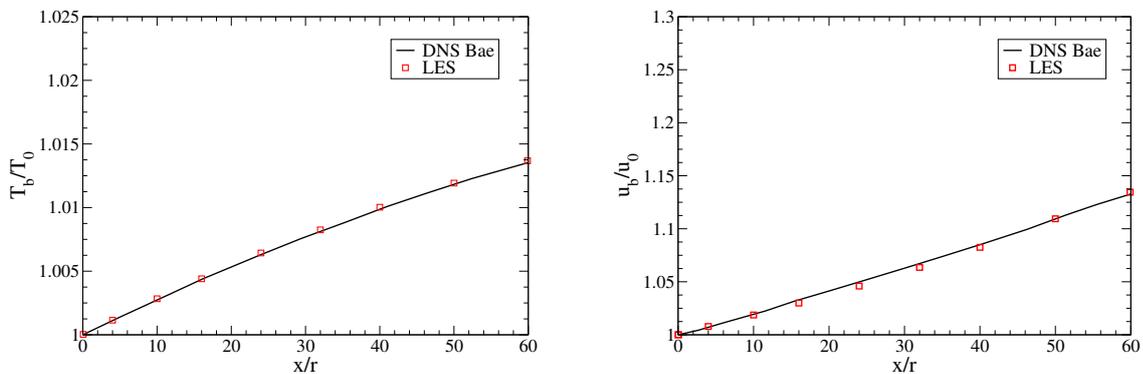


Abbildung 5.31: Bulk-Temperatur- und Bulk-Geschwindigkeitsverteilung (Fall B)

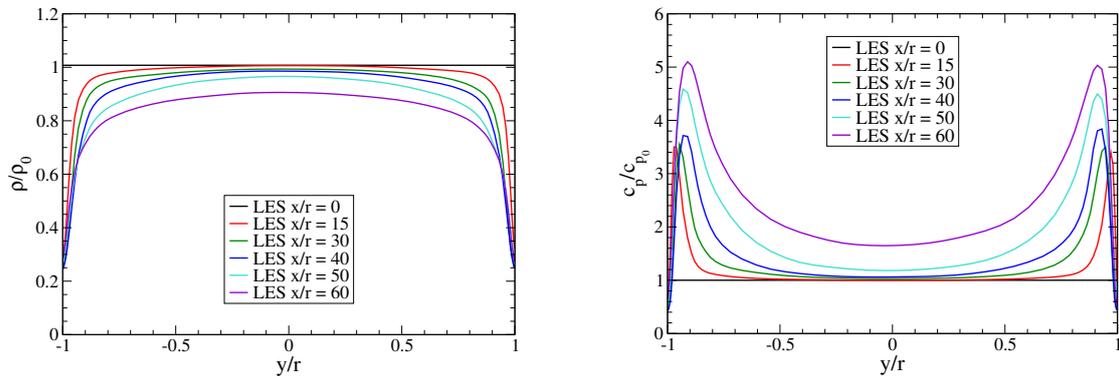


Abbildung 5.32: Änderungen der Dichte und der spez. Wärmekapazität entlang des beheizten Bereichs (Fall B).

Die Ergebnisse der LES bezogen auf die Wandtemperaturverteilung, dargestellt mit einer roten gestrichelten Linie, zeigen ein vergleichbares Verhalten, lediglich der DHT Effekt wird leicht überschätzt. Daraus resultierend ist das Maximum der Wandtemperatur etwas höher und leicht Richtung Austritt versetzt. Der anschließende Rückgang der Temperatur wird qualitativ gut erfasst. Die Profile der Bulk-Temperatur und der Bulk-Geschwindigkeit stimmen, wie in Abbildung 5.31 veranschaulicht, sehr gut mit den Daten der direkten numerischen Simulation überein. Der dieser Rechnung zugrundeliegende Zeitschritt wird abermals über eine fixierte Courant Zahl vom 0.05 angepasst, um numerische Oszillationen zu vermeiden. Andernfalls würden beide Profile deutliche Überschätzungen in Richtung Austritt aufweisen. Die zuvor angesprochenen starken Stoffwertänderungen entlang des beheizten Bereichs sind in den Abbildungen 5.32 und 5.32 beispielhaft für die mittlere Dichte und die mittlere spezifische Wärmekapazität gezeigt. Es sind deutlich sehr große Gradienten für beide Größen in unmittelbarer Wandnähe zu

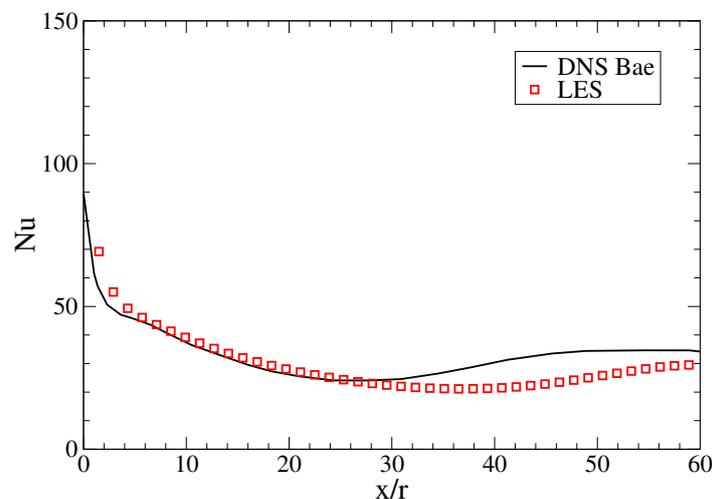


Abbildung 5.33: Nusselt Zahl Verteilung (Fall B).

erkennen, welche etwa für die spezifische Wärmekapazität in Richtung Austritt noch zu nehmen. Die maximale Änderung der mittleren Dichte kann mit einem Faktor von fünf und für die mittlere spezifische Wärmekapazität mit einem Faktor von zehn angegeben werden. Lokal jedoch sind Variationen bis zu einem Faktor von über 20 möglich.

Mit Hilfe der Verteilungen von Wand- und Bulk-Temperatur kann wiederum das Profil der Nusselt-Zahl gewonnen werden. Dieses zeigt eine gute Übereinstimmung in der ersten Hälfte des beheizten Bereiches, jedoch einen Versatz des Minimums in der zweiten Hälfte. Dies resultiert aus der Verschiebung des DHT-Phänomens, bzw. aus der zu hohen Wandtemperatur in diesem Teilstück.

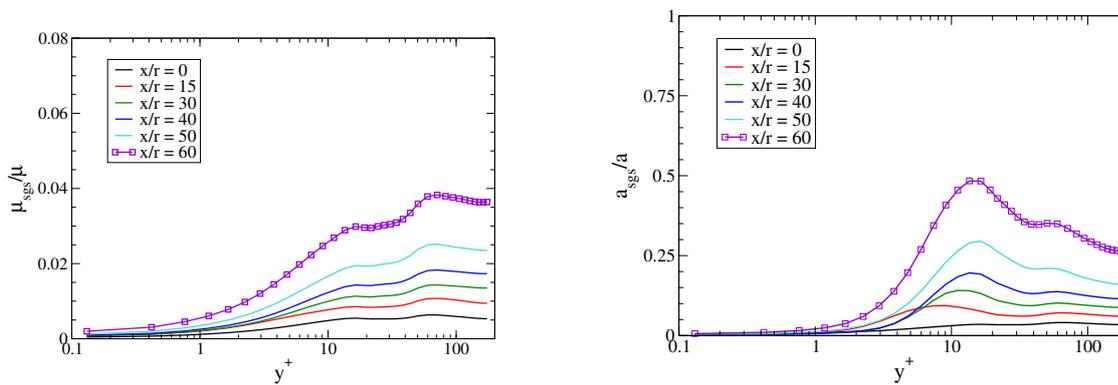


Abbildung 5.34: Einfluss des Feinstrukturmodells auf das Impuls- und Temperaturfeld (Fall B).

Um die Gründe für das Einsetzen des DHT Phänomens genauer zu erläutern müssen noch die Daten bezüglich der Turbulenz ausgewertet werden. Im ersten Schritt werden die Einflüsse des Feinstrukturmodells auf das Impuls- und das Temperaturfeld aufgezeigt, vgl. Abb. 5.34. Hierbei ist jeweils der Feinstrukturanteil im Verhältnis zu molekularer Viskosität bzw. Temperaturleitfähigkeit über den dimensionslosen Wandabstand y^+ aufgetragen. Der Einfluss des Feinstrukturmodells auf das Impulsfeld ist, vergleichbar zu der Untersuchung bei Zwangskonvektionsbedingungen, verschwindend gering, wohingegen der Einfluss des Modells auf das Temperaturfeld bis zu 50% am Rohraustritt beträgt. Um eine bessere Wandtemperaturverteilung zu erreichen folgt hieraus, dass entweder der Energietransport in Wandnähe mit Hilfe eines variable Feinstruktur Prandtl Zahl Ansatzes gesteigert, oder das Netz, insbesondere in axialer Richtung, stark verfeinert werden müsste. Die wichtige Größe für das Verständnis des DHT Phänomens ist die turbulente kinetische Energie, welche direkt aus dem simulierten Geschwindigkeitsfeld gewonnen wird. Die Entwicklung ist hierbei Abb. 5.35 zu entnehmen. Im Eintrittsbereich, welcher bis ungefähr $x/r = 5$ reicht, wird die von der LES vorhergesagte turbulente kinetische Energie, dargestellt durch Symbole, im Vergleich zu den DNS Daten nur gering überschätzt. Es folgt eine sehr starke Reduktion der Turbulenz im gesamten Strömungsfeld, was ebenfalls sehr gut von der LES prognostiziert wird. Diese extreme Abnahme, oder auch Relaminarisierung genannt, verursacht eine wesentliche Verschlechterung des Wärmeübergangs, was in sehr hohen Wandtemperaturen resultiert. Die anschließende Zunahme der turbulenten kinetischen Energie, ermöglicht wieder den Abtransport der Energie von Wand in Richtung Zentrum. Dieser Transport wird im Vergleich zu der direkten numerischen Simulation von der LES stark überschätzt. Das Phänomen, verursacht durch

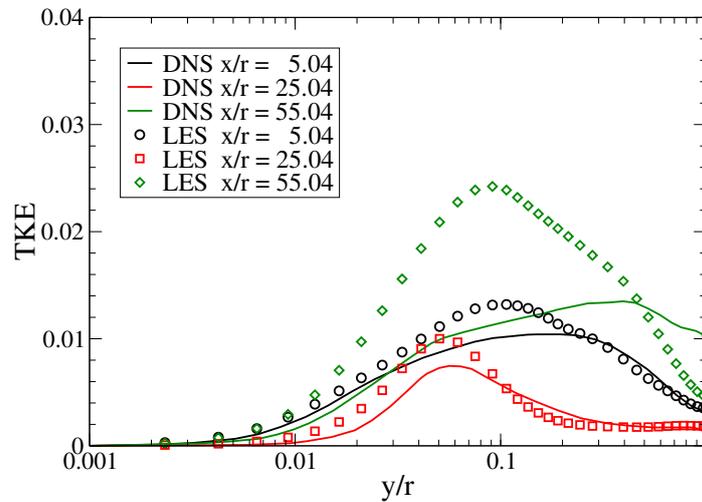


Abbildung 5.35: Entwicklung der turbulenten kinetischen Energie (Fall B).

Auftrieb und Stoffwertänderungen wird insgesamt jedoch sehr gut erfasst. Ein Blick innerhalb des Rohres ermöglicht die anschauliche Betrachtung des Phänomens, vgl. Abb. 5.36, worauf turbulente Strukturen, bzw. Wirbelbewegungen durch Bestimmung der Drehgeschwindigkeiten ϖ , zu sehen sind ($700 \text{ 1/s} \leq \varpi = \text{rot } u \leq 800 \text{ 1/s}$). Am Eintritt des beheizten Bereiches sind diese noch sehr ausgeprägt, verschwinden jedoch



Abbildung 5.36: Reduktion und Aufreissen der turbulenten Strukturen innerhalb des Rohres (Blick vom Eintritt des Rohres bis hin zum Austritt).

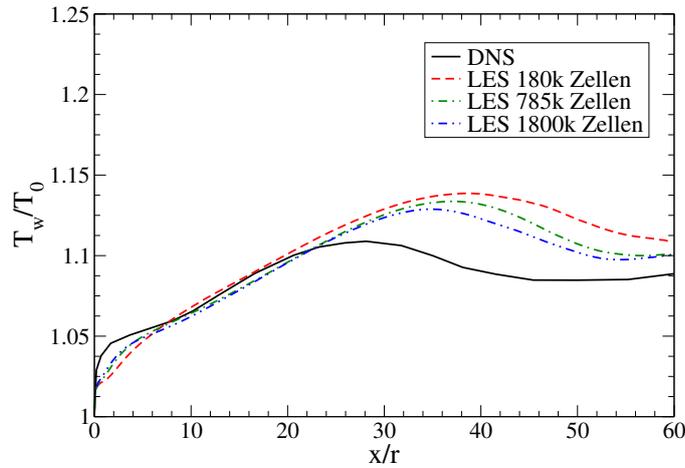


Abbildung 5.37: Temperaturverteilungen der Netzverfeinerungsstudie (Fall B).

bis zur Kanalmitte vollständig. Somit findet kein Transport von Energie durch Wirbelbewegungen mehr statt und die Wandtemperatur steigt. Ein anschließendes Aufreißen der turbulenten Strukturen in Richtung Austritt erklärt den anschließenden Abfall der Temperatur, vgl. Abb. 5.30.

Eine durchgeführte Netzverfeinerungsstudie bestätigt die aus dem ersten Fall unter Zwangskonvektionsbedingungen gewonnenen Ergebnisse, vgl. Abb. 5.37. Für diese Untersuchung werden die Temperaturprofile dreier verschiedener Netze, bestehend aus 180000 Zellen, 785000 Zellen und 1,8 Millionen Zellen, miteinander verglichen. Die Studie bestätigt erneut, dass durch eine radiale Netzverfeinerung die dünne, sich gerade entwickelnde Temperaturgranzschicht am Eintritt besser aufgelöst werden kann, und sich deshalb die Wandtemperatur den DNS Ergebnissen am Eintritt annähert. In Kombination mit einer

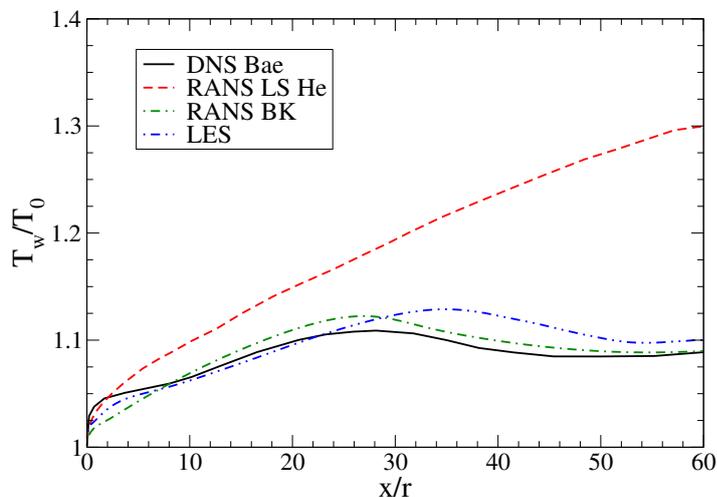


Abbildung 5.38: Vergleich der Wandtemperaturverteilungen von RANS und LES (Fall B).

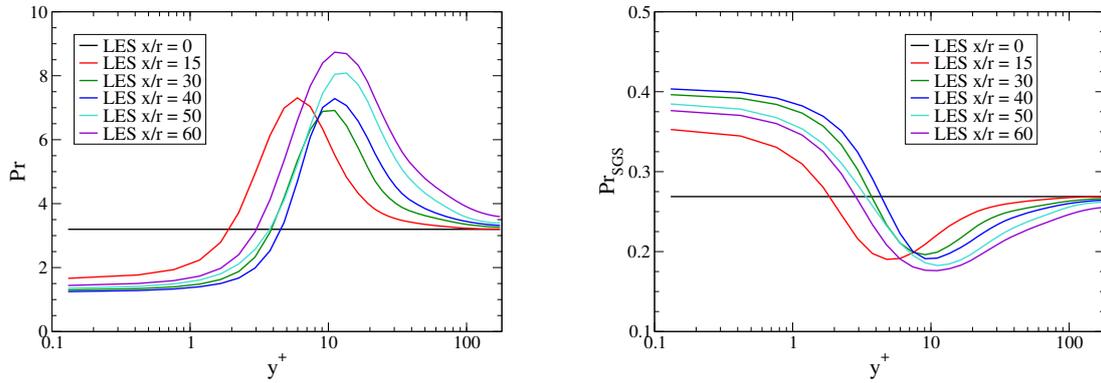


Abbildung 5.39: Verteilung der molekularen Prandtl Zahl und der variablen Feinstruktur Prandtl Zahl (Fall B).

axialen Netzverfeinerung kann dies zu einer weiteren Annäherung der Profile im Bereich des DHT führen. Das Maximum der Wandtemperatur verschiebt sich dabei langsam in Richtung der DNS Resultate.

Abb. 5.38 zeigt einen Vergleich der LES mit den RANS Ergebnissen aus der Literatur von He et al. [59], hier beispielhaft unter Verwendung des LS-Modells. Keines der Modelle war hierbei in der Lage das Wandtemperaturprofil wiederzugeben und insbesondere das Phänomen des verschlechterten Wärmeübergangs zu erfassen. Hier zeigt sich ein großer Vorteil der LES Berechnungsmethode. Im Vergleich zu dem neu entwickelten BK-Modell zeigen sich Unterschiede lediglich in einer Verschiebung des Temperaturmaximums.

Wie u.a. in Abb. 5.30 zu sehen, wird die Wandtemperatur bei Mischkonvektion wie auch unter Zwangskonvektionsbedingungen bei Verwendung eines konstanten Feinstruktur Prandtl Zahl Ansatzes überschätzt. Um dieser Überschätzung entgegenzuwirken, kommt in einer weiteren Simulation der variable Feinstruktur Prandtl Zahl Ansatz aus Kapitel 2.6.4 zum Einsatz, um den Energietransport von Wand in Richtung Zentrum des Rohres zu erhöhen. Diese wird durchgeführt unter Verwendung der gleichen Netzgröße sowie der gleichen Anfangs- und Randbedingungen von Fall B.

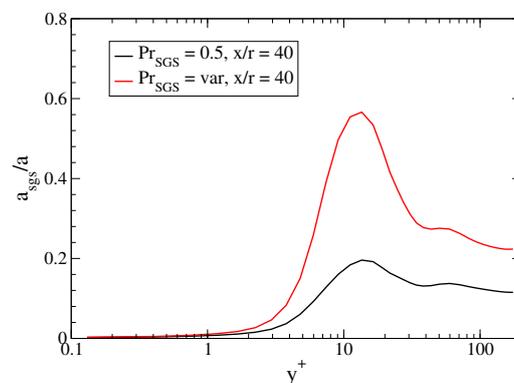


Abbildung 5.40: Einfluss des Feinstrukturmodells auf das Impulsfeld für verschiedene Pr_{SGS} Ansätze und Profil der Größe ρc_p (Fall B).

Abb. 5.39 zeigt die Verteilung der molekularen und der davon abhängigen Feinstruktur Prandtl Zahl. Die molekulare Prandtl Zahl variiert hierbei um einen Faktor von sechs von etwa 1.5 direkt an der Wand bis etwa neun für einen dimensionslosen Wandabstand von $y^+ = 10$. Eine gegenläufige Verteilung ist abermals für die Profile der variablen Feinstruktur Prandtl Zahl zu erkennen, welche von 0.4 direkt an der Wand bis etwa 0.15 bei $y^+ = 10$ variiert. Der hiermit bis um den Faktor drei gesteigerte Einfluß des Feinstrukturmodells und der somit stark erhöhte Energietransport von der Wand in Richtung Zentrum des Rohres ist Abb. 5.40 zu entnehmen. Hierbei beschreibt die schwarze Linie den Einfluß des SGS-Modells bei Verwendung einer konstanten Feinstruktur Prandtl Zahl und die rote Linie den Einfluß unter Verwendung einer variablen Feinstruktur Prandtl Zahl.

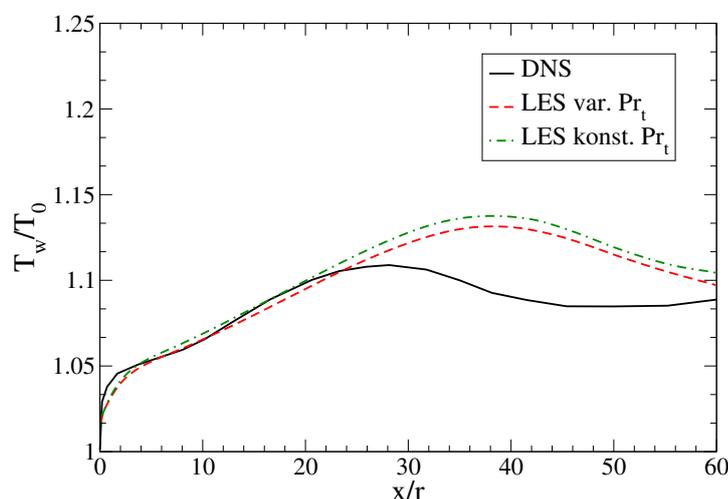


Abbildung 5.41: Vergleich der Wandtemperaturprofile für verschiedene Pr_{SGS} Ansätze (Fall B)

Die mit Hilfe dieses Ansatzes erreichte Verbesserung des Wandtemperaturprofils ist in Abb. 5.41 gezeigt. Hierbei ist die durch den variablen Feinstruktur Ansatz verursachte Abnahme der Wandtemperatur über die beheizte Länge nur minimal. Der Ort des Maximums bleibt ebenso unverändert. Somit kann gefolgert werden, dass der Auftriebseinfluss in Wandnähe den dominierenden Effekt darstellt und zusätzlich der durch den variablen Ansatz eingebrachte höhere Energietransport nicht ausreicht. Zur Verbesserung des Wandtemperaturprofils bleiben folglich zwei Möglichkeiten. Dies ist zum Einen eine weitere Erhöhung der Zellanzahl, insbesondere in Wandnähe als auch in axialer Richtung, und zum Anderen eine Berücksichtigung des Auftriebes innerhalb des Produktionstermes des Feinstrukturmodells, da dieser, wie bereits in Kap. 5.2.2 gezeigt den größten Einfluß auf die Strömung hat. Ersterer ist für die ingenieurtechnische Anwendung der Grobstruktursimulation bei überkritischen Drücken sehr von Nachteil, da der Berechnungsaufwand sehr stark wächst. Die Überprüfung des zweiten Vorschlages erfolgt in einer zu dieser Arbeit nachfolgenden Ausarbeitung.

5.2.4.1 Ergebnisse Fall C

Um zu prüfen, wie sensibel die Wandtemperatur auf noch stärkere Auftriebseinflüsse reagiert, wird in nachfolgender Untersuchung die zugeführte Energie \dot{q}_w von 30.87 kW/m^2 auf 61.74 kW/m^2 verdoppelt. Alle anderen Anfangs- und Randbedingungen sowie die Netzgröße sind vergleichbar zu Fall B. Vergleichsdaten der DNS von Bae et al. liegen jedoch ausschließlich für die Wandtemperaturverteilung und die Bulk-Profile vor. Erstere zeigt eine starke Überhöhung der Temperatur im Eintrittsbereich des beheizten Teilstückes bis etwa $x/r = 15$ mit einer anschließenden Abnahme bis hin zur Mitte, vgl. Abb. 5.42. Nach Erreichen des lokalen Minimums steigt die Wandtemperatur wieder nahezu linear. Dieser Verlauf wird von der durchgeführten Large Eddy Simulation unter Verwendung einer konstanten Feinstruktur Prandtl Zahl sehr gut wiedergegeben, jedoch unglücklicherweise mit einer starken Überschätzung der Temperatur.

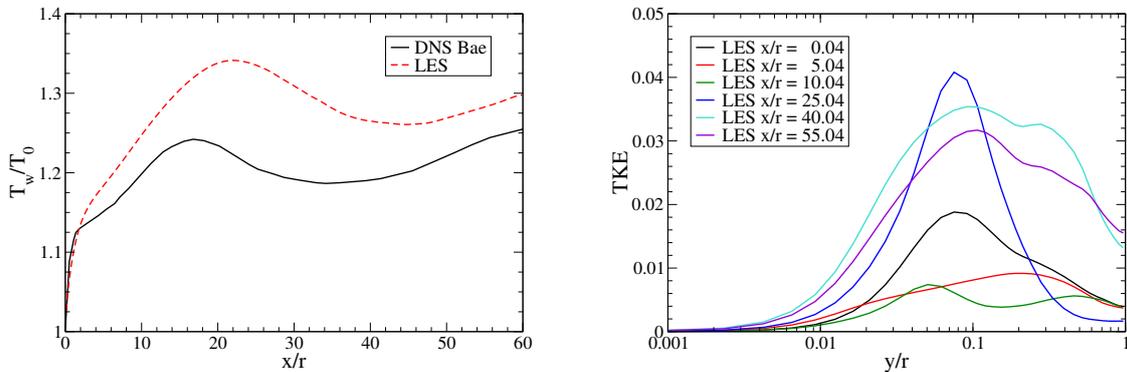


Abbildung 5.42: Wandtemperaturverteilung und Verlauf der turbulenten kinetischen Energie (Fall C).

Es ist festzustellen, dass durch die stärkere Wärmezufuhr der Effekt des verschlechterten Wärmeübergangs wesentlich früher eintritt im Vergleich zu Fall B. Die turbulente kinetische Energie TKE nimmt bis zu einer Höhe von ungefähr $x/r = 10$ sehr stark ab, was

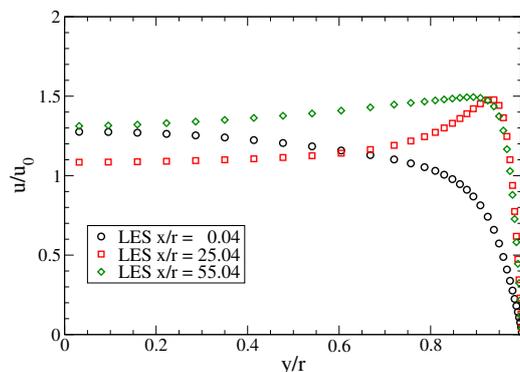


Abbildung 5.43: Verlauf der Geschwindigkeitsprofile entlang des beheizten Bereichs (Fall C)

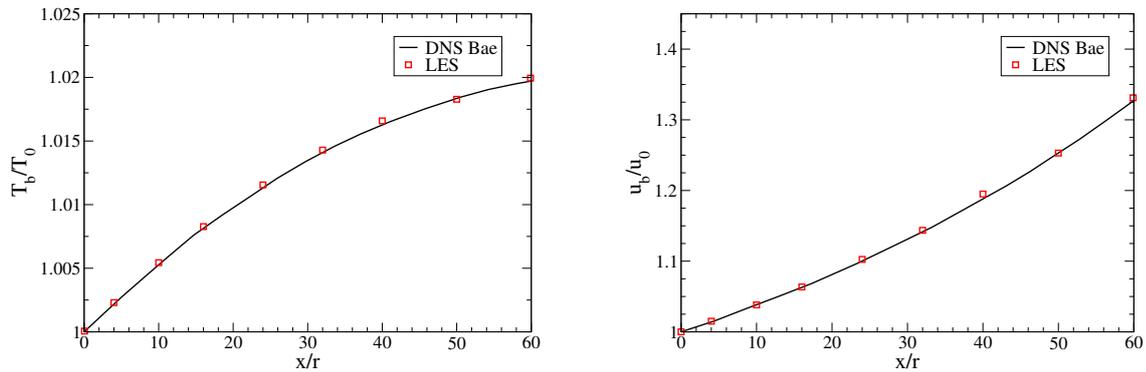
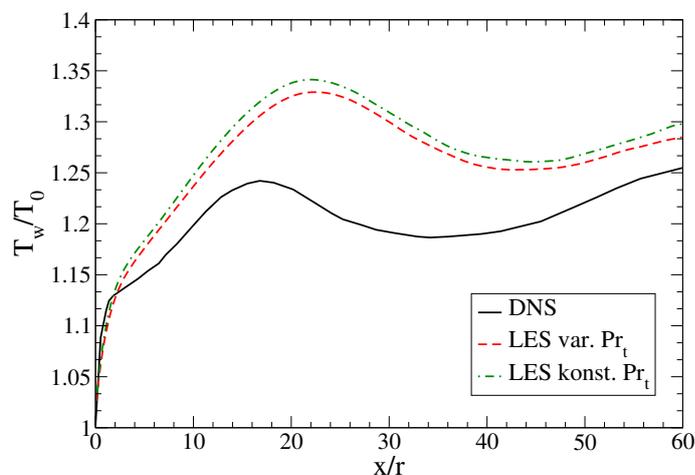


Abbildung 5.44: Bulk-Temperatur- und Bulk-Geschwindigkeitsverteilung (Fall C).

den großen Temperaturgradienten in diesem Bereich erklärt. Daran anschließend nimmt sie insbesondere in Wandnähe im Bereich von $y/r = 25$ wieder sprunghaft zu, was zur Folge hat, dass die Wandtemperatur um über 20 K im weiteren Verlauf abnimmt. Durch die zugeführte Energie steigt die Bulk-Temperatur auf einen Wert von über 307.1 K bis hin zum Austritt, was bedeutet, dass ein großer Teil der Strömung von den starken Stoffwertänderungen beeinflusst wird. Durch die drastische Reduktion der Dichte steigt die Reynoldszahl nun auch im inneren Teil des Rohres stark an und verursacht auch hier eine Zunahme der Turbulenz. Dieser Effekt ist sehr gut anhand der Daten der TKE im Austrittsbereich zu erkennen. Die Wandtemperatur steigt als Folge wieder linear an.

Auftriebseffekt und das Phänomen des verschlechterten Wärmeübergangs, also insbesondere die Ab- und anschließende Zunahme der TKE, haben sehr starke Auswirkungen auch auf das Geschwindigkeitsfeld, vgl. Abb. 5.43. Durch die starke Aufheizung wird die Strömung in Wandnähe sehr stark beschleunigt und im Bulk verlangsamt. Durch die da-

Abbildung 5.45: Vergleich der Wandtemperaturverteilungen für verschiedene Pr_{SGS} Ansätze (Fall C)

mit einhergehende Abnahme der TKE kann von einer Relaminarisierung der Strömung in diesem Bereich gesprochen werden. Die anschließende drastische Zunahme der TKE sorgt für eine Beschleunigung der Strömung innerhalb des gesamten Rohres, vergleichbar zu den Geschwindigkeitsprofilen von Fall A. Hierfür stehen leider keine Vergleichsdaten der DNS zu Verfügung, die Qualität der in Fall A und Fall B berechneten Geschwindigkeitsprofile lassen jedoch den Schluss zu, dass die hier gezeigten Resultate nur sehr geringe Abweichungen aufzeigen. Zur Vervollständigung der Ergebnisse sind in Abb. 5.44 die Bulk-Temperatur- und Bulk-Geschwindigkeitprofile gezeigt, welche sehr gut mit den DNS Daten übereinstimmen.

Ein abschließender Vergleich der Wandtemperaturverteilungen, welche aus Simulationen unter Verwendung einer konstanten Feinstruktur Prandtl Zahl von 0.5 und des variablen Ansatzes aus Kap. 2.6.4 gewonnen wurden, zeigt abermals nur leichte Verbesserungen, vgl Abb. 5.45.

5.2.5 Fazit der LES-Untersuchungen

Entscheidend für die ingenieurstechnische Anwendung der LES Methode bei überkritischen Druckbedingungen, insbesondere für den kerntechnischen Bereich, ist die Güte der Vorhersage der Wandtemperaturverteilung, um Materialermüdung oder Beschädigungen vorzubeugen. Aufgrund der Tatsache, dass die bei dieser Untersuchung verwendete Large Eddy Simulationsmethode die großen Wirbel vollständig auflöst und die kleinen Wirbel modelliert, liegt die Vermutung nahe, dass dieses entscheidende Kriterium erfüllt sein würde. Dies ist jedoch nur zum Teil der Fall, da die kleinen modellierten Wirbel in unmittelbarer Wandnähe eine entscheidende Rolle beim Energietransport übernehmen. Das Hauptproblem sind die extremen Änderungen der Stoffgrößen in unmittelbarer Wandnähe und deren Einfluss auf das vollkompressible Gleichungssystem und das Feinstrukturmodell. Dies trägt maßgeblich dazu bei, dass unter Zwangskonvektionsbedingungen der lineare Temperaturanstieg bei Verwendung einer konstanten Feinstruktur Prandtl Zahl überschätzt wird. Mit Hilfe des angewendeten variablen Ansatzes konnte eine wesentliche Verbesserung der Wandtemperaturverteilung erzielt werden. Dies zeigt sich ebenfalls bei einem Vergleich zu RANS Daten aus der Literatur. Die Anwendung dieses Ansatzes auf Mischkonvektionsbedingungen zeigt hingegen nur geringe Verbesserungen, da hier die Auftriebseffekte, also starke Beschleunigungseffekte die entscheidende Rolle spielen. Eine Einbindung dieser Einflüsse innerhalb des Produktionsterms des Feinstrukturmodells verbleibt folglich als eine weitere Möglichkeit zur Verbesserung der Wandtemperaturverteilung. Eine Netzverfeinerung in axialer und radialer Richtung würde ebenfalls zur Verbesserung beitragen, jedoch durch den enormen Rechenaufwand ist dies sowohl bei der aktuellen Untersuchung, als auch bei ingenieurstechnischen Anwendungen nicht zielführend.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurden auf Basis der numerischen Strömungsmechanik Grundlagenuntersuchungen betreffend den Wärmeübergang bei überkritischen Druckbedingungen durchgeführt. Die Studien umfassten hierbei sowohl die Anwendung der Reynolds Averaged Navier-Stokes als auch der Large Eddy Simulationmethode.

Hintergrund der Untersuchungen ist der Einsatz von Fluiden bei überkritischen Drücken für die Energiegewinnung in Kernreaktoren und weiterer ingenieurstechnischen Anwendungen, welche in Kapitel 1.1 zusammengefasst wurden. Eine durchgeführte Literaturstudie zeigt, dass weltweit bereits mehrere innovative Reaktorkonzepte, mit dem Ziel der Wirkungsgraderhöhung, Kostenreduktion und Reduktion der Brennstoffmenge, existieren bzw. zur Zeit entwickelt werden. Bei stationären Betriebsbedingungen kann unter diesen Druckzuständen eine Verbesserung des Wärmeübergangs erreicht werden, jedoch lokal auch eine wesentliche Verschlechterung, was zu stark überhöhten Wandtemperaturen und somit zu Materialschäden führen kann. Experimentelle Untersuchungen für unterschiedliche Konfigurationen zeigen, dass dieses Phänomen insbesondere bei aufwärtsgerichteten Strömungen, hohen Wärmestromdichten und niedrigen Massenstromdichten auftritt. Auftriebs- bzw. starke Beschleunigungseffekte hervorgerufen durch die starken Stoffwertänderungen reduzieren hierbei die Turbulenz in Wandnähe maßgeblich. Durch die starke lokale Abhängigkeit stellt dieser Effekt ebenfalls für die numerische Strömungsmechanik eine große Herausforderung dar. Es existieren noch keine allgemeingültigen Regeln bzw. keine an überkritische Druckbedingungen angepasste Turbulenzmodelle sowohl für die RANS als auch für die LES Methode. Um diese auszuarbeiten, wurde zunächst ein auf überkritische Druckbedingungen angepasster numerischer Ansatz entwickelt und in die open source Software OpenFOAM implementiert. Dieser beruht insbesondere auf dem Ansatz für niedrige Machzahlen und der vollständigen temperaturabhängigen Einbindung der Stoffgrößen in das zu lösende System der Erhaltungsgleichungen und in die verwendeten Turbulenz- bzw. Feinstrukturmodelle.

Im ersten Teil dieser Arbeit erfolgte die Anwendung dieses Ansatzes unter Verwendung der RANS Methode. In der ersten Studie einer isothermen turbulenten Rohrströmung konnte festgestellt werden, dass insbesondere Low-Reynolds Modelle gute Ergebnisse für die Geschwindigkeitsprofile einer wandgebundenen Strömung erzielen. Auf dieser Basis erfolgte eine zweite Untersuchung einer stark beheizten Luftströmung in einem Rohr unter Atmosphärendruckbedingungen. Die Stoffwertänderungen über die beheizte Länge waren hierbei vergleichbar mit denen bei überkritischen Druckbedingungen. Für die Studie standen Vergleichsdaten von Shehata et al. und Mikielewicz et al. zur Verfügung. Mit Hilfe eines sogenannten Inflow Generators konnte eine Reduktion des Berechnungsaufwandes um ein Vielfaches erreicht werden, da nicht die komplette Einlaufstrecke mitsimuliert werden musste. Des Weiteren konnte festgestellt werden, dass sowohl 3D, als auch 2D Analysen nahezu identische Resultate lieferten, was eine weitere Reduktion des Aufwandes nach sich zog. Insgesamt konnte unter Verwendung des Launder-Sharma Turbulenzmodelles eine sehr gute Übereinstimmung der Geschwindigkeits- und Temperaturfelder mit den

experimentellen Ergebnissen erreicht werden. Aufgrund dessen und des stabilen Verhaltens der Simulation kann von einer erfolgreichen Validierung des numerischen Ansatzes gesprochen werden.

Darauf aufbauend wurde die Methode auf verschiedene Konfigurationen einer Rohrströmung mit Kohlenstoffdioxid bei überkritischen Druckbedingungen angewendet. Daten für die Verifikation der Ergebnisse wurden hierbei von Bae et al. und He et al. zur Verfügung gestellt. Die wegen ihrer Genauigkeit in der Industrie standardmäßig eingesetzten NIST Stoffdaten ersetzen in dieser Arbeit die in den zuvor genannten Werken zum Einsatz kommenden PROPATH Daten. Ein Vergleich der Werte für die Wärmeleitfähigkeit zeigte Unterschiede im Bereich des pseudokritischen Punktes, weswegen davon ausgegangen werden kann, dass diese sich minimal auf die Ergebnisse auswirken.

Es wurden mehrere Simulationen unter Zwangs- und Mischkonvektionsbedingungen mit dem Ziel durchgeführt, den Einfluss verschiedener Turbulenzmodelle auf die Wandtemperaturverteilung zu prüfen, da diese für ingenieurtechnische Anwendungen von entscheidender Bedeutung ist. Für Erstere wurde festgestellt, dass das Turbulenzmodell von Launder-Sharma, dessen Dämpfungsfunktionen ausschließlich von den Stoffwerten abhängen, die turbulente kinetische Energie in Wandnähe im gesamten Kanal stark unterschätzt, was folglich in einer zu hohen Wandtemperatur resultiert. Im Gegensatz dazu zeigt die Entwicklung der Geschwindigkeitsprofile gute Übereinstimmungen im wandnahen Bereich, jedoch eine Überschätzung der wärmeinduzierten Beschleunigung in Richtung Auslass. Das zweite getestete Modell von Chien et al., dessen Dämpfungsfunktionen im Wesentlichen vom Wandabstand abhängen, zeigte ein realistischeres Verhalten der Turbulenzproduktion und folglich auch der Temperaturverteilung. Schwächen lagen hingegen in der Bestimmung der Geschwindigkeitsprofile, welche einen zu laminaren Charakter aufwiesen. Die wärmeinduzierte Beschleunigung wurde jedoch sehr gut erfasst. Unter der Ausnutzung der Vorteile beider Modelle wurde ein an überkritische Druckbedingungen angepasstes Modell entwickelt, dessen Dämpfungsfunktionen zugleich von den Stoffwerten und dem Wandabstand abhängig waren. Dieses innovative Modell (BK) zeigte im Vergleich zum Modell von Chien et al. ein ähnliches Verhalten für die Wandtemperaturverteilung unter Zwangskonvektionsbedingungen, jedoch mit deutlich verbesserten Profilen für die Geschwindigkeit und der turbulenten kinetischen Energie entlang des beheizten Bereichs.

Eine Anwendung des neu entwickelten Modells auf Mischkonvektionsbedingungen zeigte eine wesentliche Verbesserung der Wandtemperaturverteilung im Vergleich zu den Profilen, welche mit anderen Modellen gewonnen wurden. Der Effekt des verschlechterten Wärmeübergangs, also die Überhöhung und anschließende Abnahme der Wandtemperatur, wurde hierbei in Intensität und Ort sehr gut erfasst. Dies ist ebenso für die Abnahme und nachfolgende Zunahme der turbulenten kinetischen Energie der Fall. Lediglich die Geschwindigkeitsprofile zeigen leichte Überschätzungen in Wandnähe. Ähnliche Ergebnisse wurden auch für höhere Aufheizraten erzielt.

Die Leistungsfähigkeit der RANS Methode unter Verwendung des neuentwickelnden Modells für die Berechnung von Strömungen unter Zwangs- und Mischkonvektionsbedingungen ist folglich sehr vielversprechend. Es müssen jedoch noch weiterführende Untersuchungen und Vergleiche mit experimentellen Daten durchgeführt werden, um die gewonnen Ergebnisse zu bestätigen. Die hier vorgestellte Methode unter Verwendung des neu entwickelten Modells bildet eine sehr gute Basis für weiterführende Forschungen.

Im Hauptteil dieser Arbeit erfolgte eine Grundlagenuntersuchung der Wärmeübergangs-

effekte bei überkritischen Drücken unter Verwendung der Large Eddy Simulationsmethode. Diese basiert auf einer Aufteilung der Größen in einen aufgelösten, simulierten Anteil (große Wirbel) und einen nichtaufgelösten, modellierten Anteil (kleine Wirbel). Unter der Annahme, dass die großen, vollaufgelösten Wirbel bei der Wärmeübertragung eine entscheidende Rolle spielen, wäre diese Methode auch für ingenieurtechnische Anwendungen geeignet.

Der vorgestellte LES Ansatz, welcher auf dem Ansatz niedriger Machzahlen und temperaturabhängiger Stoffdaten beruht, muss auf alle Druckbedingungen anwendbar sein. Aus diesem Grund erfolgte im ersten Schritt dieses Kapitels eine Validierung des Ansatzes unter Verwendung des dynamischen Eingleichungsmodelles für Druckbedingungen unterhalb des pseudokritischen Punktes. Hierfür standen DNS Daten von Kim und Moin, bzw. Kawamura et al. zur Verfügung, welche eine inkompressible, turbulente Rohrströmung untersuchten. Unter Verwendung des vollkompressiblen Gleichungssystems, temperaturabhängiger Feinstrukturmodelle und Randbedingungen konnten sehr gute Übereinstimmungen der mittleren Geschwindigkeits- und Temperaturprofile erzielt werden. Ebenso war dies für die Profile der turbulenten Fluktuationen der Fall, womit eine erfolgreiche Validierung postuliert werden kann.

Im nächsten Schritt erfolgte die Anwendung der LES Methode auf überkritische Druckbedingungen. Hierfür standen mit der DNS von Bae et al. abermals Vergleichsdaten zur Verfügung. Es wurden mehrere Konfigurationen für Zwangs- und Mischkonvektionsbedingungen ausgewählt, um allgemein den Wärmeübergang und insbesondere das Phänomen des verschlechterten Wärmeübergangs zu untersuchen. Um den Berechnungsaufwand zu reduzieren kam erneut ein Inflow Generator zum Einsatz. Mit dessen Hilfe wurde der Einfluss der Netzauflösung untersucht und festgestellt, dass wegen des enormen Rechenaufwandes nur eine beschränkte Auflösung für die komplette Geometrie möglich war. Eine weitere Studie ergab, dass das Feinstrukturmodell, welches die Konstante innerhalb des Produktionstermes dynamisch bestimmte, im Vergleich zum Standard Smagorinsky und Eingleichungsmodell wesentlich bessere Ergebnisse für wandgebundene Strömungen lieferte. Aus diesem Grund wurde ausschließlich das dynamische Eingleichungsmodell für weitere Untersuchungen verwendet.

Nach Auswertung der Daten des Inflow Generators erfolgte die Studie des beheizten Bereichs zunächst für Zwangskonvektionsbedingungen. Unter Verwendung einer konstanten Feinstruktur Prandtl Zahl und einer angepassten Auflösung konnte eine gute Übereinstimmung des Verlaufs der Geschwindigkeitsprofile, insbesondere der wärmeinduzierten Beschleunigung, erreicht werden. Die zugehörige Wandtemperaturverteilung zeigte im Vergleich zu den DNS Daten kleinere Abweichungen im Eintrittsbereich. Diese gehen mit einer zu groben Auflösung der sich gerade entwickelten Temperaturgrenzschicht einher. Im weiteren Verlauf wird der lineare Temperaturanstieg an der Wand überschätzt. Grund hierfür sind zum Einen die zu grobe Netzauflösung in axialer Richtung bzw. der durch das Modell unterschätzte Transport der Energie durch die kleinen Wirbel. Die Bulk-Temperatur- bzw. Bulk-Geschwindigkeitsverteilung zeigte keinerlei Abweichungen zu den vorgegebenen DNS Daten, jedoch musste die fixierte Courant Zahl durch die sich stark ändernden Stoffwerte wesentlich niedriger gewählt werden im Vergleich zu den vorgegangenen Untersuchungen der Kanalströmung. Eine Auswertung des Einflusses des Feinstrukturmodells auf das Impulsfeld zeigte, dass dieses im Gegensatz zum Temperaturfeld, sehr gut aufgelöst war. Des Weiteren wurde eine zunehmende Abweichung der Profile der turbulenten kinetischen Energie im wandnahen Bereich entlang des beheizten

Bereichs festgestellt. Eine anschließend durchgeführte Netzverfeinerungsstudie bestätigte die getroffenen Folgerungen für die Wandtemperaturverteilung. Um nun den Transport der Energie von der Wand in Richtung Zentrum des Rohres zu erhöhen, und somit die überschätzte Wandtemperatur zu senken, wurde ein variabler Feinstruktur Prandtl Zahl Ansatz entwickelt und angewendet. Dieser basiert auf einer linearen Abhängigkeit von der molekularen Prandtl Zahl und führte zu einer drastischen Erhöhung der zusätzlichen Vermischung im wandnahen Bereich, insbesondere um $y^+ = 10$. Hierdurch konnte eine wesentliche Verbesserung der Wandtemperaturverteilung erreicht werden. Im Vergleich zu den RANS Ergebnissen aus der Literatur konnte ebenfalls ein wesentlicher Fortschritt erzielt werden.

Die nachfolgende Studie erfolgte für Mischkonvektionsbedingungen, also für Strömungen, bei denen der Auftriebseffekt eine dominierende Rolle spielt. Speziell das Phänomen des verschlechterten Wärmeübergangs und dessen Ursache sollten näher untersucht werden. Hierfür wurden Geometrie und Wärmezufuhr bei konstanter Reynoldszahl variiert. Die durch die LES berechneten Geschwindigkeitsprofile zeigten eine sehr gute Übereinstimmung mit den DNS Daten. Insbesondere auf Grund der enormen Dichteänderungen resultierenden Auftriebseffekte, wie die Beschleunigung der Strömung in unmittelbarer Wandnähe, wurden sehr gut erfasst. Deutlich größere Unterschiede lagen bei der Bestimmung der Wandtemperaturverteilung vor. Hierbei wurde der DHT Effekt stark überschätzt, was zu einer Verschiebung des Maximums der Wandtemperatur in Richtung Rohrauslass führte. Die extreme Abnahme der turbulenten kinetischen Energie in der ersten Hälfte des beheizten Bereichs wurde qualitativ gut getroffen, jedoch die anschließende Zunahme deutlich überschätzt. Des Weiteren wurden das Verhalten turbulenter Strukturen innerhalb des Rohres untersucht. Dabei war ein deutlicher Zerfall im Eintrittsbereich bis hin zu einer vollständigen Relaminarisierung zu erkennen. Das anschließende Aufreißen der Strukturen und der damit einhergehende Abtransport der Energie trat später auf als erwartet. Eine anschließende Untersuchung des Einflusses des Feinstrukturmodells auf das Temperaturfeld zeigte erneut, dass die Netzauflösung insbesondere in axialer Richtung erhöht werden müsste. Dies wurde ebenfalls durch eine anschließende Netzverfeinerungsstudie bestätigt. Die Anwendung des variablen Feinstruktur Prandtl Zahl Ansatzes zeigte lediglich eine geringe Abnahme der Wandtemperatur, da unter Mischkonvektionsbedingungen die durch den Auftrieb eingebrachte Beschleunigung der dominierende Effekt ist. Eine abschließende Untersuchung mit doppelter Aufheizung bestätigte alle erzielten Resultate.

Als Fazit bleibt festzuhalten, dass die kleinen, modellierten Wirbel eine große Rolle beim Wärmeübergang von der Wand auf Fluide bei überkritischen Drücken spielen. Somit wäre eine höhere Auflösung dergleichen wünschenswert. Hauptproblem für die korrekte Vorhersage der Wandtemperaturverteilung sind jedoch die extremen Stoffwertänderungen in unmittelbarer Wandnähe, welche einen großen Einfluss auf das Verhalten des temperaturabhängigen Feinstrukturmodells und des kompressiblen Gleichungssystems haben. Für ingenieurtechnische Anwendungen bei höheren Reynoldszahlen wäre eine Netzverfeinerung auf Grund des enormen Mehraufwandes an Berechnungszeit nicht realisierbar. Unter Verwendung eines lokal dynamischen Feinstrukturmodells, welches den Auftriebseffekt innerhalb des Produktionstermes berücksichtigt, in Kombination mit einem geeigneten variablen Feinstruktur Prandtl Ansatz, wäre es jedoch möglich eine erste gute Abschätzung der Wandtemperaturverteilung auch bei Mischkonvektionsbedingungen zu erhalten.

Nomenklatur

Lateinische Symbole	SI-Einheit	Beschreibung
a	$[m^2/s]$	Temperaturleitfähigkeit
a_t	$[m^2/s]$	Turbulente Temperaturleitfähigkeit
a_{eff}	$[m^2/s]$	Effektive Temperaturleitfähigkeit
a_{SGS}	$[m^2/s]$	Feinstrukturanteil der Temperaturleitfähigkeit
$c_a, c_d, c_e, c_i, c_k, c_s$	$[-]$	Konstanten innerhalb der Feinstrukturmodelle
c_p	$[kJ/kgK]$	Spezifische Wärmekapazität
d	$[m]$	Durchmesser
e	$[J]$	Innere Energie
f_i	$[-]$	Modellspezifische Funktionen
g	$[m/s^2]$	Erdbeschleunigung
h	$[kJ/kg]$	Enthalpie
k	$[m^2/s^2]$	Turbulente kinetische Energie
k_{SGS}	$[m^2/s^2]$	Turbulente kinetische Energie innerhalb der Feinstrukturmodelle
l	$[m]$	Mischungsweglänge
n	$[s]$	Zeitschritt
n	$[1/m]$	Wellenzahl
n_c	$[1/m]$	Cutoff-Wellenzahl
p	$[Pa]$	Druck
\dot{q}	$[W/m^2]$	Wärmestromdichte
t	$[s]$	Zeit
u_b	$[m/s]$	Bulk-Geschwindigkeit
u_i	$[m/s]$	Komponenten des Geschwindigkeitsvektors
u_i'	$[m/s]$	Geschwindigkeitsfluktuationen in alle drei Raumrichtungen
u_τ	$[m/s]$	Schubspannungsgeschwindigkeit
x_i bzw. x, y, z	$[-]$	Koordinatenrichtungen
y^+	$[-]$	Dimensionsloser Wandabstand
y_{max}	$[m]$	maximaler Wandabstand
A	$[m^2]$	Oberfläche
Bu	$[-]$	Auftriebszahl
C_i	$[-]$	Konstanten
C_k	$[-]$	Kolmogorov-Konstante
C_{ϵ_i}	$[-]$	Konstanten innerhalb der Transportgleichung von k

D, E	$[-]$	Dämpfungsterme der Low-Re Modelle
D	$[m]$	Durchmesser
$E(n)$	$[-]$	Energiespektrum bezogen auf das Impulsfeld
$E_T(n)$	$[-]$	Energiespektrum bezogen auf das Temperaturfeld
F	$[m^3/s]$	Volumenfluss durch Zelloberfläche
F_i	$[-]$	Modellspezifische Funktionen
G	$[kg/m^2s]$	Massenstromdichte
$G(x)$	$[1/m]$	Filterfunktion
Gr	$[-]$	Graßhof-Zahl
H	$[-]$	Koeffizientenmatrix
I	$[-]$	Turbulente Intensität
L	$[m]$	Charakteristisches Längenmaß
L_{ij}	$[m^2/s^2]$	Dynamische Leonard Spannungen
N	$[-]$	Anzahl der Zellen
Nu	$[-]$	Nusselt-Zahl
Nu_0	$[-]$	Nusselt-Zahl zum Zeitpunkt 0
P_k	$[-]$	Produktionsterm des Turbulenzmodells
Pr	$[-]$	Prandtl-Zahl
Pr_t	$[-]$	Turbulente Prandtl-Zahl
Pr_{SGS}	$[-]$	Feinstruktur Prandtl-Zahl
R	$[J/molK]$	Universelle Gaskonstante
Re	$[-]$	Reynolds-Zahl
Re_b	$[-]$	Reynolds-Zahl bezogen auf Bulk-Geschwindigkeit
Re_t	$[-]$	Turbulente Reynolds-Zahl
S_{ij}	$[-]$	Schubspannungstensor
S_ϕ	$[-]$	Quellterme
T_b	$[K]$	Bulk-Temperatur
T_{cr}	$[K]$	Pseudokritische Temperatur
T_{pc}	$[K]$	Pseudokritische Temperatur
T_w	$[K]$	Wandtemperatur
T_τ	$[K]$	Normierte Temperatur basierend auf u_τ
V	$[m^3]$	Volumen

**Griechische
Symbole**
SI-Einheit
Beschreibung

α, β	$[-]$	Konstanten innerhalb des variablen Feinstruktur-Prandtl-Zahl Ansatzes
α	$[W/m^2K]$	Wärmeübergangskoeffizient
α	$[W/m^2K]$	Wärmeübergangskoeffizient zum Zeitpunkt $t=0$
β	$[1/K]$	Wärmeausdehnungskoeffizient
δ	$[m]$	Grenzschichtdicke
δ_{ij}	$[-]$	Kronecker-Delta
ϵ	$[m^2/s^3]$	Dissipation der Turbulenz
ϕ	$[-]$	Modellabhängige Variable
γ	$[-]$	Konstante innerhalb des Gauß-Filters

η	$[m]$	Kolmogorov Länge
κ	$[-]$	Konstante innerhalb des logarithmischen Wandgesetzes
λ	$[W/mK]$	Wärmeleitfähigkeit
μ	$[kg/ms]$	Dynamische Viskosität
μ_t	$[kg/ms]$	Turbulente Viskosität/Wirbelviskosität
μ_{SGS}	$[kg/ms]$	Feinstruktur-Wirbelviskosität
μ_{eff}	$[kg/ms]$	Effektive Viskosität
ν	$[m^2/s]$	Kinematische Viskosität
π_A	$[-]$	Beschleunigungszahl
ϖ	$[1/s]$	Wirbelstärke, Vortizität
ρ	$[kg/m^3]$	Dichte
ρ_b	$[kg/m^3]$	Dichte bezogen auf Bulk-Temperatur
ρ_l	$[kg/m^3]$	Dichte Liquid/Flüssigkeit
ρ_w	$[kg/m^3]$	Dichte bezogen auf Wandtemperatur
σ_{ik}	$[kg/ms^2]$	Spannungstensor
$\sigma_\epsilon, \sigma_k$	$[-]$	Konstanten innerhalb der Transportgleichung von k
τ_n	$[1/s]$	Kleinstes Zeitmaß des Turbulenzspektrums
τ_w	$[kg/ms^2]$	Wandschubspannung
ω	$[1/s]$	charakteristische Frequenz
ξ	$[-]$	Modellspezifische Variable
ψ	$[-]$	Modellspezifische Variable

Δ	$[m]$	Filterweite
Γ_ϕ	$[-]$	Koeffizienten des diffusiven Terms
Φ_ν	$[kg/ms^3]$	Dissipationsrate
Θ^+	$[-]$	Normierte Temperatur

Abbildungsverzeichnis

1.1	Druck-Temperatur Diagramm von Wasser und Betriebszustände von verschiedenen Reaktortypen	2
1.2	Spez. Wärmekapazität bei überkritischen Drücken (CO_2)	3
1.3	Dichte bei überkritischen Drücken (CO_2)	3
1.4	Dyn. Viskosität bei überkritischen Drücken (CO_2)	3
1.5	Wärmeleitfähigkeit bei überkritischen Drücken (CO_2)	3
1.6	Enthalpie bei überkritischen Drücken (CO_2)	3
1.7	SCWR-Schema [78]	5
1.8	Wärmeübergangskoeffizient bei aufwärtsgerichteter Rohrströmung für Wasser bei überkritischen Drücken [191]	8
1.9	Wärmeübergangskoeffizienten und zugehörige Wandtemperaturverteilungen bei konstanter Massenstromdichte [167]	9
2.1	Durch Wirbelstürme verursachte turbulente Atmosphäre des Jupiter [190]	23
2.2	Turbulente Vermischung von warmen und kaltem Fluid [94]	24
2.3	Spektrum der turbulenten kinetischen Energie	25
2.4	Laminares Geschwindigkeitsprofil einer wandgebundenen Strömung . . .	30
2.5	Turbulentes Geschwindigkeitsprofil einer wandgebundenen Strömung . . .	30
2.6	Turbulentes Geschwindigkeitsprofil einer wandgebundenen Strömung . . .	32
2.7	Fluktuationen der Geschwindigkeiten für Raumrichtungen x,y,z	33
2.8	Vergleich der Verfahren	34
2.9	Vergleich der Signalerfassung der verschiedenen Verfahren für die Geschwindigkeit	35
2.10	Top-Hat-, Gauss- und Spectral-Filter	46
2.11	Dynamische Bestimmung der Konstanten innerhalb des Produktionstermes	50
3.1	Kontrollvolumen der FVM	57
4.1	Geometrie und zugehörige Vernetzung.	67
4.2	Geschwindigkeitsverteilung entlang des beheizten Teilbereichs.	68
4.3	Temperaturverteilung entlang des beheizten Teilbereichs.	69
4.4	Vergleich der Stoffdaten für die Wärmeleitfähigkeit von NIST und PRO-PATH für CO_2 bei $p = 8 \text{ MPa}$	71
4.5	Geometrie und zugehöriges Netz.	72
4.6	Vergleich der Geschwindigkeitsprofile des Inflow Generators.	73
4.7	Zugehörige Profile der turbulenten kinetischen Energie (Fall A).	74
4.8	Vergleich der Wandtemperaturen entlang des beheizten Teilbereichs (Fall A).	75
4.9	Vergleich der Geschwindigkeitsprofile verschiedener Turbulenzmodelle (Fall A) für $x/r = 0, 10, 30, 60$	76

4.10	Verteilung der turbulenten kinetischen Energie entlang des beheizten Bereichs (Fall A).	77
4.11	Bulk-Temperatur und Bulk-Geschwindigkeit (Fall A).	77
4.12	Wandtemperaturverteilung entlang des beheizten Bereichs (Fall B).	78
4.13	Geschwindigkeitsprofile entlang des beheizten Teilbereichs für $x/r = 0, 25, 55$ (Fall B).	79
4.14	Bulk-Temperatur (Fall B).	79
4.15	Bulk-Geschwindigkeit (Fall B).	79
4.16	Wandtemperaturverteilung (Fall C).	80
4.17	Bulk-Temperatur (Fall C).	80
4.18	Bulk-Geschwindigkeit (Fall C).	80
5.1	Aufbau der Kanalgeometrie.	82
5.2	Gitter der wandgebundenen Strömung.	83
5.3	Störung des Geschwindigkeitsfeldes zum Zeitpunkt null.	84
5.4	Querschnitt des gestörten Geschwindigkeitsfeldes in unmittelbarer Wandnähe.	85
5.5	Strömungsstruktur des Geschwindigkeits- und Temperaturfeldes.	85
5.6	Zeitlich gemittelte Geschwindigkeits- und Temperaturfelder.	86
5.7	Zeitlich gemitteltes Geschwindigkeitsprofil.	86
5.8	Zeitlich gemittelte Temperaturverteilung.	87
5.9	Intensität der Geschwindigkeitsfluktuationen in jeweilige Raumrichtung.	87
5.10	Intensität der Temperaturfluktuationen.	88
5.11	Aufbau der LES mit zugehörigem Netz.	89
5.12	Einfluss der Netzauflösung auf das Geschwindigkeitsprofil (IG).	90
5.13	Einfluss der Netzauflösung auf die Intensität der turbulenten Fluktuationen (IG).	91
5.14	Vergleich der Geschwindigkeitsprofile unter Verwendung unterschiedlicher Feinstrukturmodelle (IG).	91
5.15	Vergleich der Profile für die Geschwindigkeitsfluktuationen unter Verwendung unterschiedlicher Feinstrukturmodelle (IG).	92
5.16	Geschwindigkeitsprofile entlang des beheizten Bereichs (Fall A).	93
5.17	Wandtemperaturverteilung (Fall A).	93
5.18	Bulk-Temperatur- und Bulk-Geschwindigkeitsprofil (Fall A)	94
5.19	Nusselt Zahl Verteilung (Fall A)	95
5.20	Einfluss des Feinstrukturmodells auf das Impuls- und Temperaturfeld (fall A)	95
5.21	Entwicklung der trubulenten kinetischen Energie TKE und der Fluktuationenwerte über die beheizte Länge (Fall A).	96
5.22	Netzverfeinerungsstudie (Fall A).	97
5.23	Vergleich der Wandtemperaturverteilungen von RANS und LES (Fall A).	97
5.24	Verteilung der molekularen Prandtl Zahl und der variablen Feinstruktur Prandtl Zahl (Fall A).	98
5.25	Einfluss des Feinstrukturmodells auf das Impulsfeld für verschiedene Pr_{SGS} Ansätze und Profil der Größe ρc_p (Fall A).	98
5.26	Vergleich der Wandtemperaturprofile für verschiedene Pr_{SGS} Ansätze (Fall A)	99

5.27	Verteilung der molekularen Prandtl Zahl und der angepassten variablen Feinstruktur Prandtl Zahl (Fall A).	100
5.28	Einfluss des Feinstrukturmodells auf das Impulsfeld für verschiedene Pr_{SGS} Ansätze und Profil der Größe ρc_p (Fall A).	100
5.29	Verlauf der Geschwindigkeitsprofile entlang des beheizten Bereichs (Fall B).	101
5.30	Wandtemperaturverteilung (Fall B).	102
5.31	Bulk-Temperatur- und Bulk-Geschwindigkeitsverteilung (Fall B)	102
5.32	Änderungen der Dichte und der spez. Wärmekapazität entlang des beheiz- ten Bereichs (Fall B).	103
5.33	Nusselt Zahl Verteilung (Fall B).	103
5.34	Einfluss des Feinstrukturmodells auf das Impuls- und Temperaturfeld (Fall B).	104
5.35	Entwicklung der turbulenten kinetischen Energie (Fall B).	105
5.36	Reduktion und Aufreissen der turbulenten Strukturen innerhalb des Roh- res (Blick vom Eintritt des Rohres bis hin zum Austritt).	105
5.37	Temperaturverteilungen der Netzverfeinerungsstudie (Fall B).	106
5.38	Vergleich der Wandtemperaturverteilungen von RANS und LES (Fall B).	106
5.39	Verteilung der molekularen Prandtl Zahl und der variablen Feinstruktur Prandtl Zahl (Fall B).	107
5.40	Einfluss des Feinstrukturmodells auf das Impulsfeld für verschiedene Pr_{SGS} Ansätze und Profil der Größe ρc_p (Fall B).	107
5.41	Vergleich der Wandtemperaturprofile für verschiedene Pr_{SGS} Ansätze (Fall B)	108
5.42	Wandtemperaturverteilung und Verlauf der turbulenten kinetischen Ener- gie (Fall C).	109
5.43	Verlauf der Geschwindigkeitsprofile entlang des beheizten Bereichs (Fall C)	109
5.44	Bulk-Temperatur- und Bulk-Geschwindigkeitsverteilung (Fall C).	110
5.45	Vergleich der Wandtemperaturverteilungen für verschiedene Pr_{SGS} Ansät- ze (Fall C)	110

Literaturverzeichnis

- [1] ACKERMAN, J.W.: Pseudoboiling heat transfer to supercritical pressure water in smooth ribbed tubes. In: *J. Heat Transfer* (1970), S. 490–498
- [2] ALDAMA, A.A.: Filtering techniques for turbulent flow simulations. In: *Lecture Notes in Engineering* 56 (1990)
- [3] ALLEN, T. ; SRIDHARAN, K.: Materials Development and Selection for Corrosion Resistance: A Critical Issue in Supercritical Water Reactors. In: *Proc. 16th PBNC*. Aomori, Japan, 13.-18. Oktober, 2008. – P16P1032
- [4] BAE, J.H. ; YOO, J.Y. ; CHOI, H.: Direct numerical simulation of turbulent supercritical flows with heat transfer. In: *Physics of Fluids* 17 (2005), S. 105104–01–105104–24
- [5] BAE, J.H. ; YOO, J.Y. ; MCELIGOT, D.M.: Direct numerical simulation of heated CO₂ flows at supercritical pressure in a vertical annulus at Re=8900. In: *Physics of Fluids* 20 (2008), S. 055108–01–055108–20
- [6] BAE, Y.Y. ; BAE, K.M.: Research and Development on a Supercritical Pressure Water Cooled Reactor in Korea. In: *Proc. ICAPP'06*. RENO, NV, USA, 4.-8. Juni, 2006. – Paper No. 6022
- [7] BAE, Y.Y. ; HONG, S.D. ; KIM, Y.W.: Assessment of mixed convection heat transfer correlations at supercritical pressures. In: *The 5th Int. Sym. SCWR (ISSCWR-5)*. Vancouver, Canada, 13.-16. März, 2011
- [8] BAE, Y.Y. ; JANG, J. ; KIM, H.Y. ; YOON, H.Y. ; KANG, H.O. ; BAE, K.M.: Research activities on a supercritical pressure water reactor in Korea. In: *Nuclear Engineering and Technology* 39 (2007), S. 273–286
- [9] BAE, Y.Y. ; KIM, H.Y.: Convective heat transfer to CO₂ at a supercritical pressure flowing vertically upward in tubes and an annular channel. In: *Experimental Thermal and Fluid Science* 33 (2009), S. 329–339
- [10] BAE, Y.Y. ; KIM, H.Y.: Update on the SCWR Research in Korea. In: *Proc. 4th Int. Symp. on SCWR*. Heidelberg, Deutschland, 8.-11. März, 2009. – Paper No. 52
- [11] BAEHR, H.D.: *Thermodynamik*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005
- [12] BASKOV, V.L. ; KURAEVA, I.V. ; PROTOPOPOV, V.S.: Heat transfer with the turbulent flow of a liquid at supercritical pressure in tubes under cooling conditions. In: *High Temp.* 15 (1977), Nr. 1, S. 81–86

- [13] BEHNIA, M. ; PARNEIX, S. ; DURBIN, P.A.: Prediction of heat transfer in an axisymmetric turbulent jet impinging on a flat plate. In: *Int. J. Heat Mass Transfer* 41 (1998), S. 1845–1855
- [14] BISHOP, A.A. ; SANDBERG, R.O. ; TONG, L.S.: Forced convection heat transfer to water at near-critical temperatures and super-critical pressures. In: *A.I.Ch.E.-I.Chem.E. Symposium Series 2* (1965), S. 77–85
- [15] BOURKE, J.P. ; PULLING, D.J. ; GILL, L.E. ; DENTON, W.H.: Forced convective heat transfer to turbulent CO₂ in the supercritical region. In: *Int. J. Heat and Mass Transfer* 13 (1970), Nr. 8, S. 1339–1348
- [16] BOYLE, D. ; BRADY, D.: Canada's Generation IV National Program - Overview. In: *Proc. 4th Int. Symp. on SCWR*. Heidelberg, Deutschland, 8.-11. März, 2009. – Paper No. 74
- [17] BRADY, D. ; DUTTEY, D.: Generation IV Reactor Development in Canada. In: *Proc. 3rd Int. Symp. on SCWR*. Shanghai, China, 12.-15. März, 2007. – SCR2007-P057
- [18] BRANDAUER, M. ; KUNIK, C. ; OTIC, I. ; CHENG, X.: *RANS-Simulations of Turbulent Convective Flows at Supercritical Pressure*. Institut für Fusions- und Reaktortechnik, Karlsruhe Institut für Technologie (KIT), 2011. – Diplomarbeit
- [19] BUONGIORNO, J.: The Supercritical Water Cooled Reactor: Ongoing Research and Development in the US. In: *Proc. ICAPP'04*. Pittsburgh, PA, 13.-17. Juni, 2004. – Paper No. 4229
- [20] CASEY, M. ; WINTERGERSTE, T.: *Numerische Strömungsmechanik*. European Research Community On Flow, Turbulence and Combustion, ERCOFTAC, 2000
- [21] CHASSAING, P. ; ANTONIA, R.A. ; ANSELMET, F. ; JOLY, L. ; SARKAR, S.: *Variable Density Fluid Turbulence*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 2002
- [22] CHENG, X.: Research and Development Activities on SCWR in China. In: *Proc. 4th Int. Symp. on SCWR*. Heidelberg, Deutschland, 8.-11. März, 2009. – Paper No. 53
- [23] CHENG, X. ; KANG, B. ; YANG, Y.H.: Numerical analysis of heat transfer in supercritical water cooled flow channels. In: *Nuclear Engineering and Design* 237 (2007), S. 240–252
- [24] CHENG, X. ; LIU, X.J. ; YANG, Y.H.: A Mixed Core for Supercritical Water-Cooled Reactors. In: *Nuclear Engineering and Technology* 40 (2008), Nr. 1, S. 1–10
- [25] CHENG, X. ; SCHULENBERG, T.: Heat Transfer at Supercritical Pressures - Literature Review and Application to HPLWR / Institut für Kern- und Energietechnik, Karlsruhe Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe, FZKA 6609, Mai, 2001. – Forschungsbericht

- [26] CHENG, X. ; YANG, Y.H. ; HUANG, S.F.: A simplified method for heat transfer prediction of supercritical fluids in circular tubes. In: *Annals of Nuclear Energy* 36 (2009), S. 1120–1128
- [27] CHIEN, K.J.: Predictions of Channel and Boundary-Layer Flows with a Low-Reynolds Number Turbulence Model. In: *AIAA Journal* 20 (1982), Nr. 1, S. 33–38
- [28] CLARK, R.A. ; FERZIGER, J.H. ; REYNOLDS, W.C.: Evaluation of subgrid-scale models using an accurately simulated turbulent flow. In: *J. Fluid Mech.* 91 (1979), Nr. 1, S. 1–16
- [29] CORSIN, S.: On the spectrum of isotropic temperature fluctuations in an isotropic turbulence. In: *J. of Appl. Physics* 22 (1951), Nr. 8, S. 469–473
- [30] DAVIDSON, L.: Large Eddy Simulation: A note on Derivation of the Equations for the Subgrid Turbulent Kinetic Energies / Rept. 97/12, Dept. of Thermo and Fluid Dynamics, Chalmers University of Technology, Gothenburg, März, 1997. – Forschungsbericht
- [31] DAVIDSON, L.: Large Eddy Simulation: A Dynamic One-Equation Subgrid Model for Three-Dimensional Recirculating Flow. In: *11th Int. Symp. on turbulent Shear Flow*. Grenoble, 8.-10. September, 1997, S. 26.1–26.6
- [32] DAVIDSON, L. ; PENG, S.H.: A Hybrid LES-RANS Model Based on a One-Equation SGS Model and a Two-Equation k-omega Model. In: LINDBORG, E. (Hrsg.) ; JOHANSSON, A. (Hrsg.) ; EATON, J. (Hrsg.) ; HUMPHREY, J. (Hrsg.) ; KASAGI, N. (Hrsg.) ; LESCHZINER, M. (Hrsg.) ; SOMMERFELD, M. (Hrsg.): *The second International Symp. on Turbulence and Shear Flow Phenomena, KTH, Stockholm*, 27.-29. Juni, 2001
- [33] DEARDORFF, J.W.: A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds numbers. In: *J. Fluid Mech.* 41 (1970), S. 453–465
- [34] DRYDEN, H.L. ; KUETHE, A.M.: The measurements of fluctuations of air speed by the hot-wire anemometer. In: *Natl. Advisory Comm. Aeronaut. Tech. Repts. No. 320* (1929)
- [35] DRYDEN, H.L. ; KUETHE, A.M.: In: *Natl. Advisory Comm. Aeronaut. Tech. Repts. No. 342* (1930)
- [36] DUFFEY, R.B. ; PIORO, I.L.: Experimental heat transfer of supercritical carbon dioxide flowing inside channels (survey). In: *Nuclear Engineering and Design* 235 (2005), Nr. 8, S. 913–924
- [37] ECKELMANN, H.: The structure of the viscous sublayer and the adjacent wall region in a turbulent channel flow. In: *J. Fluid Mech.* 65 (1974), S. 439–459
- [38] EGGELS, J.G.M. ; UNGER, F. ; WEISS, M.H. ; WESTERWEEL, J. ; ADRIAN, R.J. ; FRIEDRICH, R. ; NIEUWSTADT, F.T.M.: Fully Developed Turbulent Pipe Flow: A Comparison Between Direct Numerical Simulation and Experiment. In: *J. of Fluid Mechanics* 268 (1994), S. 175–210

- [39] FERZIGER, J.H. ; PERIĆ, M.: *Numerische Strömungsmechanik*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2008
- [40] FEWSTER, J.: *Mixed forced and free convective heat transfer to supercritical pressure fluids flowing in vertical pipes*, Universität Manchester, Diss., 1976
- [41] FEWSTER, J. ; JACKSON, J.D.: Experiments on supercritical pressure convective heat transfer having relevance to SCWR. In: *Proceedings of ICAPP'04*. Pittsburg, USA, 13.-17. Juni, 2004. – Paper No. 4342
- [42] FRÖHLICH, J.: *Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen*. Teubner Verlag, 2006
- [43] FUREBY, C.: On subgrid scale modeling in large eddy simulations of compressible fluid flow. In: *Phys. Fluids* 8 (1996), Nr. 5, S. 1301–1311
- [44] GELLER, W.: *Thermodynamik für Maschinenbauer*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005
- [45] GERMANO, M. ; PIOMELLI, U. ; MOIN, P. ; CABOT, W.H.: A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. In: *Phys. Fluids A* 3 (1991), S. 1760–1765
- [46] GHOSAL, S. ; LUND, T.S. ; MOIN, P. ; AKSELVOLL, K.: A dynamic localization model for large-eddy simulation of turbulent flows. In: *J. Fluid Mech.* 286 (1995), S. 229–255
- [47] GHOSAL, S. ; MOIN, P.: The basic equations for the large-eddy simulation of turbulent flows in complex geometry. In: *J. Comput. Phys.* 118 (1995), S. 24–37
- [48] GLUSHCHENKO, L.F. ; KALACHEV, S.I. ; GANDZYUK, O.F.: Determining the conditions of existence of deteriorated heat transfer at supercritical pressure of the medium. In: *Thermal Engineering* 19 (1972), Nr. 2, S. 107–111
- [49] GOLDMANN, K.: Heat Transfer to supercritical water at 5000 psi flowing at high mass flow rates through round tubes. In: *International developments in heat transfer, Proceedings of Heat Transfer Conf.* Colorado, USA, 1961
- [50] GOU, J. ; SHANG, Z. ; ISHIWATARI, Y. ; OKA, Y. ; YAMAKAWA, M. ; IKEJIRI, S.: CFD analysis of heat transfer in subchannels of a Super Fast Reactor. In: *Nuclear Engineering and Design* 240 (2010), Nr. 7, S. 1819–1829
- [51] GRASS, G. ; HERKENRATH, H. ; HUFSCHEMID, W.: Anwendung des Prandtlschen Grenzschichtmodells auf den Wärmeübergang an Flüssigkeiten mit stark temperaturabhängigen Stoffeigenschaften bei erzwungener Strömung. In: *Heat and Mass Transfer* 4 (1971), Nr. 2, S. 113–119
- [52] GRIEM, H.: *Untersuchungen zur Thermohydraulik innenberippter Verdampferrohre*, Technische Universität München, Diss., 1995
- [53] GRIEM, H.: A new procedure for the prediction of forced heat transfer at near- and supercritical pressure. In: *Heat and Mass Transfer* 31 (1996), S. 301–305

- [54] GRÖTZBACH, G. ; WÖRNER, M.: Direct numerical and large eddy simulations in nuclear applications. In: *Int. J. of Heat and Fluid Flow* 20 (1999), S. 222–240
- [55] GU, H.Y. ; CHENG, X. ; YANG, Y.H.: CFD analysis of thermal-hydraulic behavior of supercritical water in sub-channels. In: *Nuclear Engineering and Design* 237 (2007), S. 240–252
- [56] HALL, W.B. ; JACKSON, J.D.: Laminarization of a turbulent pipe flow by buoyancy forces. In: *ASME Paper 69-HT-55* (2005), S. 8 ff.
- [57] HANJALIC, K. ; LAUNDER, B.E.: Contribution towards a Reynolds-Stress Closure for Low-Reynolds-Number Turbulence. In: *Journal of Fluid Mech.* 74 (1976), S. 593–610
- [58] HASSID, S. ; POREH, M.: A turbulent energy dissipation model for flows with drag reduction. In: *J. Fluids. Eng.* 100 (1978), S. 107–112
- [59] HE, S. ; KIM, W.S. ; BAE, J.H.: Assessment of performance of turbulence models in predicting supercritical pressure heat transfer in a vertical tube. In: *Int. J. of Heat and Mass Transfer* 51 (2008), S. 4659–4675
- [60] HE, S. ; KIM, W.S. ; JACKSON, J.D.: A computational study of convective heat transfer to carbon dioxide at a pressure just above the critical value. In: *Applied Thermal Eng.* 28 (2008), S. 1662–1675
- [61] HE, S. ; KIM, W.S. ; JIANG, P.X. ; JACKSON, J.D.: Simulation of mixed convection heat transfer to carbon dioxide at supercritical pressure. In: *J. Mech. Eng. Sci.* 218 (2004), S. 1281–1296
- [62] HERKENRATH, H. ; MÖRK-MÖRKENSTEIN, P. ; JUNG, U.: Wärmeübergang an Wasser bei Erzwungener Strömung im Druckbereich von 140 bis 250 bar / EURATOM. 1967 (EUR 3658 d). – Forschungsbericht
- [63] HESTENES, M. ; E., Stiefel: Methods of conjugate gradients for solving linear systems. In: *Journal of Research of the National Bureau of Standards* 49 (1952), S. 409–436
- [64] HEUSENER, G. ; MÜLLER, U. ; SCHULENBERG, T. ; SQUARER, D.: A European Development Program for a High Performance Light Water Reactor (HPLWR). In: *1st Int. Symposium on Supercritical Water-Cooled Reactors*. Tokyo, Japan, 6.-8. November, 2000. – Paper No. 102
- [65] HINZE, J.O.: *Turbulence*. McGraw-Hill series in mechanical engineering, McGraw-Hill Book Company, 1959
- [66] IACOVIDES, H.: Current Practice and Recent Developments in Wall Functions / Department of Mechanical Aerospace and Manufacturing Engineering, University of Manchester, Institute of Science and Technology. Manchester, England, 2004. – Forschungsbericht
- [67] ISSA, R.I.: Solution of the Implicitly Discretised Fluid Flow Equations by Operator-Splitting. In: *J. Comput. Phys.* 62 (1984), S. 40–65

- [68] JACKSON, J.D. ; JIANG, P.X. ; LIU, B. ; ZHAO, C.R.: Interpreting and categorising experimental data on forced and mixed convection heat transfer to supercritical pressure fluids using physically-based models. In: *The 5th Int. Sym. SCWR (ISSCWR-5)*. Vancouver, Canada, 13.-16. März, 2011
- [69] JACKSON, J.D. ; W.B., Hall: Forced Convection Heat Transfer to Fluids at Supercritical Pressure. In: KAKAC, S. (Hrsg.) ; SPALDING, D.B. (Hrsg.): *Turbulent Forced Convection in Channels and Bundles* Bd. 2. Hemisphere Publishing Corp., New York, USA, 1979, S. 563–612
- [70] JACKSON, J.D. ; W.B., Hall: Influences of Buoyancy on Heat Transfer to Fluids Flowing in Vertical Tubes under Turbulent Conditions. In: KAKAC, S. (Hrsg.) ; SPALDING, D.B. (Hrsg.): *Turbulent Forced Convection in Channels and Bundles* Bd. 2. Hemisphere Publishing Corp., New York, USA, 1979, S. 613–640
- [71] JACKSON, J.D. ; W.B., Hall ; WATSON, A.: A review of forced convection heat transfer to fluids at supercritical pressures. In: *Proc. Instn. Mech. Engrs.* 182 (1967), Nr. 3I, S. 10–22
- [72] JASAK, H.: *Error analysis and estimation for the finite volume method with application to fluid flow*, Imperial College London, Diss., 1996
- [73] JIANG, P.X. ; LI, Z.H. ; ZHAO, C.R.: Convection Heat Transfer of CO₂ at Supercritical Pressures in a Vertical Mini Tube. In: *Proceedings of MNHMT2009, ASME 2009 2nd Micro/Nanoscale Heat and Mass Transfer International Conference*. Shanghai, China, 2009
- [74] JIANG, P.X. ; ZHANG, Y. ; ZHAO, C.R. ; SHI, R.F.: Convection heat transfer of CO₂ at supercritical pressures in a vertical mini tube at relatively low Reynolds numbers. In: *Experimental Thermal and Fluid Science* 32 (2008), S. 1628–1637
- [75] JONES, W.P. ; LAUNDER, B.E.: The prediction of Laminarization with Two-Equation Model of Turbulence. In: *Int. J. Heat Mass Transfer* 15 (1972), S. 301–314
- [76] KAWAMURA, H. ; ABE, H. ; MATSUO, Y.: DNS of turbulent heat transfer in channel flow with respect to Reynolds and Prandtl number effects. In: *Int. J. of Heat and Fluid Flow* 20 (1999), S. 196–207
- [77] KAWAMURA, H. ; OHSAKA, K. ; ABE, H. ; YAMAMOTO, K.: DNS of turbulent heat transfer in channel flow with low to medium-high Prandtl number fluid. In: *Int. J. of Heat and Fluid Flow* 19 (1998), S. 482–491
- [78] KHARTABIL, H: SCWR: Overview. In: *GIF Symposium*. Paris, France, 9.-10. September, 2009
- [79] KIM, H.Y. ; BAE, Y.Y.: Experimental Study on heat transfer to supercritical CO₂ in a circular tube. In: *16th Pacific Basin Nuclear Conference (16PBNC)*. Aomori, Japan, 13.-18. Oktober, 2008
- [80] KIM, H.Y. ; KIM, H.: Experimental Investigations on Heat Transfer to CO₂ Flowing Upward in a Narrow Annulus at Supercritical Pressure. In: *Nuclear Engineering and Technology* 40 (2008), Nr. 2, S. 155–162

- [81] KIM, H.Y. ; KIM, H. ; KANG, D.J. ; SONG, J.H. ; BAE, Y.Y.: Heat transfer experiments for an upward flow of supercritical pressure CO₂ in a narrow annulus. In: *3rd Int. Symposium on SCWR-Design and Technology*. Shanghai, China, 12.-15. März, 2007
- [82] KIM, J. ; MOIN, P.: Transport of passive scalars in a turbulent channel flow. In: *Turbulent Shear Flows 6* (1989), S. 85–96
- [83] KIM, J. ; MOIN, P. ; MOSER, R.: Turbulence statistics in fully developed turbulent channel flow at low Reynolds number. In: *J. Fluid Mech.* 177 (1987), S. 133–166
- [84] KIM, J. ; MOIN, P. ; MOSER, R.: In: Bradshaw, P. (Ed.), *The diskette of Collaborative testing of turbulence models*, Stanford University, 1990
- [85] KIM, S.H. ; KIM, Y.I. ; BAE, Y.Y. ; CHO, B.H.: Numerical simulation of the vertical upward flow of water in a heated tube at supercritical pressure. In: *Proceedings of ICAPP'04*. Pittsburgh, USA, 13.-17. Juni, 2004
- [86] KIRILLOV, P.L.: Heat and Mass Transfer at Supercritical Parameters - The short Review of Researches in Russia, Theory and Experiments. In: *SCR-2000*. Tokyo, 6.-8. November, 2000
- [87] KIRILLOV, P.L. ; POMET'KO, R.S. ; SMIRNOV, A.M. ; GRABEZHNAIA, V.A.: Investigation of heat transfer to water at supercritical pressures in tubes and rod bundles / Obninsk, IPPE-3051. 2005. – Forschungsbericht
- [88] KIRILLOV, P.L. ; POMET'KO, R.S. ; SMIRNOV, A.M. ; GRABEZHNAIA, V.A.: Experimental Study on Heat Transfer to Supercritical Water Flowing in 1- and 4-m-Long Vertical Tubes. In: *Proceedings of GLOBAL'05*. Tsukuba, Japan, 9.-13. Oktober, 2005
- [89] KNIESNER, B.: *Ein hybrides LES/RANS-Verfahren für konjugierte Impuls-, Wärme- und Stoffübertragung mit Relevanz zu Brennkammerkonfiguration*, Technische Universität Darmstadt, Diss., 2008
- [90] KOLMOGOROV, A. N.: The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers. In: *Dokl. Akad. Nauk.* 30 (1941), S. 301 – 305. – Reprinted Proc. Royal Soc. London; 434; 9; 1991
- [91] KOMITA, H. ; MOROOKA, S. ; YOSHIDA, S. ; MORI, H.: Study on the heat transfer to the supercritical pressure fluid for supercritical water cooled power reactor development. In: *Proceedings of the NURETH-10*. Seoul, Korea, 5.-8. Oktober, 2010
- [92] KRASNOSHCHCKOV, E.A. ; PROTOPOPOV, V.S.: Experimental study of heat exchange in carbon dioxide in the supercritical range at high temperature drops. In: *High Temp.* 4 (1966), Nr. 3, S. 375–382
- [93] KRASNOSHCHCKOV, E.A. ; PROTOPOPOV, V.S. ; VAN, F. ; KURAEVA, I.V.: Experimental investigation of heat transfer for carbon dioxide in the supercritical region.

- In: *Gazley, Z.; Hartnett, Jr.; Ecker, J.P.; E.R.C., Proceedings of the Second All-Soviet Union Conference on Heat and Mass Transfer*. Minsk, Weißrussland, 1964. – Rand Report R-451-PR, vol. 1, S. 26-35
- [94] KREUZIGER+MANHART TURBULENZ GMBH, München
- [95] KÄRRHOLM, F.P.: Rhie-Chow interpolation in OpenFOAM / Department of Applied Mechanics, Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden. 2006. – Forschungsbericht
- [96] KUNIK, C. ; OTIC, I. ; SCHULENBERG, T.: Anelastic, non-Boussinesq simulations of turbulent convective flows. In: *Annual Meeting on Nuclear Technology*. Berlin, Deutschland, 4.-6. Mai, 2010
- [97] KURGANOV, V.A. ; KAPTIL'NY: Velocity and enthalpy fields and eddy diffusivities in a supercritical fluid flow. In: *Exp. Thermal Fluid Sci.* 5 (1992), S. 465–478
- [98] KURGANOV, V.A. ; KAPTIL'NY: Flow structure and turbulent transport of a supercritical pressure fluid in a vertical heated tube under the conditions of mixed convection. Exp. data. In: *Int. J. Heat and Mass Transfer* 36 (1993), Nr. 13, S. 3383–3392
- [99] LAM, C.K.G. ; BREMHORST, K.: A modified form of the k - ϵ model for predicting wall turbulence. In: *Trans. ASME, J. Fluids Engng* 103 (1981), S. 456–460
- [100] LAUNDER, B.E. ; REECE, G.J. ; RODI, W.: Progress in the Development of a Reynolds-Stress Turbulent Closure. In: *J. of Fluid Mech.* 68 (1975), Nr. 3, S. 537–566
- [101] LAUNDER, B.E. ; SHARMA, B.I.: Application of the Energy-Dissipation Model of Turbulence to the Calculation of Flow Near a Spinning Disc. In: *Letters in Heat and Mass Transfer* 1 (1974), Nr. 2, S. 131–138
- [102] LAUNDER, B.E. ; SPALDING, D.B.: The Numerical Computation of Turbulent Flows. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 3 (1974), S. 269–289
- [103] LAURIEN, E. ; OERTEL JR., H.: *Numerische Strömungsmechanik*. Vieweg Teubner Verlag, 3. Auflage, 2009
- [104] LEE, R.A. ; HALLER, K.H.: Supercritical water heat transfer developments and applications. In: *Proceedings of 5th Int. Heat Transfer Conf.* Tokyo, Japan, 1974, S. 335–339
- [105] LEONARD, A.: Energy Cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows. In: *Adv. Geophys.* 18A (1974), S. 237–248
- [106] LESIEUR, M.: *Turbulence in Fluids*. Bd. 40. 3. Ed. Kluwer Academic Publishers, 1997
- [107] LESLIE, D.C. ; QUARINI, G.L.: The application of turbulence theory to the formulation of subgrid modelling procedures. In: *J. Fluid Mech.* 91 (1979), S. 65–91

- [108] LICHT, J. ; ANDERSON, M. ; CORRADINI, M.: Heat Transfer to Water at Supercritical Pressure. In: *Proceedings of ICAPP'07*. Nice, France, 13.-18. Mai, 2007. – Paper No. 7223
- [109] LICHT, J. ; ANDERSON, M. ; CORRADINI, M.: Heat transfer and fluid flow characteristics in supercritical water. In: *J. Heat Transfer* 131 (2009), S. 072502–1 – 072502–14
- [110] LIU, Y. ; TUCKER, P.G. ; IACONO, G.L.: Comparison of zonal RANS and LES for non-isothermal ribbed channel flow. In: *J. Heat and Fluid Flow* 27 (2006), S. 391–401
- [111] LÖWENBERG, M.F.: Wärmeübergang von Wasser in vertikalen Rohrströmungen bei überkritischem Druck / Institut für Kern- und Energietechnik, Karlsruhe Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe. 2007 (7320). – Forschungsbericht
- [112] MALHOTRA, A.: *An analytical investigation of forced convective heat transfer to supercritical carbon dioxide flowing in circular duct*, University of British Columbia, Diss., 1977
- [113] MALHOTRA, A. ; KANG, S.S.: Turbulent Prandtl number in circular pipes. In: *Int. J. Heat Mass Transfer* 22 (1984), Nr. 11, S. 2158–2161
- [114] MASON, P.J.: Large eddy simulation: a critical review of the technique. In: *Q.J.R. Meteorol. Soc.* 120 (1994), S. 1–26
- [115] MELJERINK, J.A. ; VORST, H.A. van d.: An iterative solution method for linear systems of which the coefficients matrix is a symmetric M-Matrix. In: *Mathematics and Computation* 31 (1977), S. 148–162
- [116] MENTER, F.R.: Zonal two equation $k-\omega$ turbulence models for aerodynamic flows. In: *AIAA 24th Fluid Dynamics Conference*. Orlando, Florida USA, 6.-9. Juli, 1993. – Paper 1993-2906
- [117] MIKIELEWICZ, D.P. ; SHEHATA, A.M. ; JACKSON, J.D. ; MCELIGOT, D.M.: Temperature, Velocity and Mean Turbulence Structure in Strongly Heated Internal Gas Flows. Comparison of Numerical Predictions with Data. In: *Int. J. of Heat and Mass Transfer* 45 (2002), S. 4333–4352
- [118] MISAWA, T. ; NAKATSUKA, T. ; YOSHIDA, H. ; TAKASE, K.: Numerical Analysis of Heat Transfer Experiment of Supercritical Pressure Water and Freon in a Rod bundle. In: *16th Pacific Basin Nuclear Conference (PBNC)*. Aomori, Japan, 13.-18. Oktober, 2008. – PaperID P16P1065
- [119] MISAWA, T. ; YOSHIDA, H. ; TAMAI, H. ; TAKASE, K.: Numerical analysis of heat transfer test of supercritical water in a tube using three dimensional two-fluid model code. In: *J. of Power and Energy Systems* 3 (2009), Nr. 1, S. 194–203
- [120] MODRO, S.M.: The Supercritical Water Cooled Reactor Research and Development in the US. In: *Proc. ICAPP'05*. Seoul, Korea, 15.-19. Mai, 2005. – Paper No. 5294

- [121] MOIN, P. ; KIM, J.: Numerical investigation of turbulent channel flow. In: *J. Fluid. Mech.* 118 (1982), S. 341–377
- [122] MONIN, A.S. ; YAGLOM, A.M.: *Statistical Fluid Mechanics*. MIT Press, Cambridge, MA, 1971
- [123] MORI, H. ; OHNO, M. ; OHISHI, K. ; HAMAMOTO, Y.: Research and Development of a Super Fast Reactor (7), Heat Transfer to a Supercritical Pressure Fluid Flowing in a Sub-bundle Channel. In: *16th Pacific Basin Nuclear Conference (PBNC)*. Aomori, Japan, 13.-18. Oktober, 2008. – PaperID P16P1297
- [124] MORI, H. ; YOSHIDA, S. ; MOROOKA, S. ; KOMITA, H.: Heat transfer study under supercritical pressure conditions for single rod test section. In: *Proceedings of ICAPP'05*. Seoul, Korea, 15.-19. Mai, 2005. – Paper 5303
- [125] NAKATSUKA, T. ; MORI ; H., M. Akiba ; EZATO, K. ; YASUOKA, M.: Outline of research and development of thermal-hydraulics and safety of japanese supercritical water cooled reactor (JSCWR) project. In: *The 5th Int. Sym. SCWR (ISSCWR-5)*. Vancouver, Canada, 13.-16. März, 2011. – Paper no. P072
- [126] NETO, A.S. ; GRAND, D. ; MÉTAIS, O. ; LESIEUR, M.: A numerical investigation of the coherent vortices in turbulence behind a backward-facing step. In: *J. Fluid. Mech.* 256 (1993), S. 1–25
- [127] NIKRITYUK, P.A.: *Computational Thermo-Fluid Dynamics*. WILEY-VCH Verlag, Weinheim, Deutschland, 2011
- [128] NIST: *National Institute of Standards and Technologies*. Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties - REFPROP, Version 8.0, Boulder, Colorado, USA, 2007
- [129] OERTEL JR., H.: *Strömungsmechanik*. Vieweg Verlag, 1999
- [130] OERTEL JR., H.: *Prandtl-Führer durch die Strömungslehre*. 11. Auflage, Vieweg Verlag, Braunschweig, Wiesbaden, 2002
- [131] OKA, Y. ; KOSHIZUKA, S. ; ISHIWATARI, Y. ; YAMAJI, A.: *Super Light Water Reactors and Super Fast Reactors*, Springer Verlag, Heidelberg, New York, 2010
- [132] OKA, Y. ; YAMADA, K.: Research and Development of High Temperature Light Water Cooled Reactor Operating at Supercritical-Pressure in Japan. In: *Proceedings of ICAPP'04*. Pittsburgh, USA, 13.-17. Juni, 2004. – Paper 4233
- [133] ORNATSKII, A.P. ; GLUSHCHENKO, L.F. ; KALACHEV, S.I.: Heat Transfer with rising and falling flows of water in tubes of small diameter at supercritical pressures. In: *Thermal Engineering* 18 (1971), Nr. 5, S. 137–141
- [134] OTIC, I.: One Equation subgrid model for liquid metal forced convection. In: *8th International Topical Meeting on Nuclear Thermal-Hydraulics, Operation and Safety (NUTHOS-8)*. Shanghai, China, 10.-14. Oktober, 2010. – PaperID N8P0123

- [135] PALKO, D. ; ANGLART, H.: Investigation of the onset of heat transfer deterioration to supercritical water. In: *4th Int. Symposium on Supercritical Water-Cooled Reactors*. Heidelberg, Deutschland, 8.-11. März, 2009. – Paper no. 19
- [136] PATEL, V.C. ; RODI, W. ; SCHEUERER, G.: Turbulence Models for Near-Wall and Low Reynolds Number Flows: A review. In: *AIAA Journal* 23 (1985), Nr. 9, S. 1308–1319
- [137] PETUKHOV, B.S.: Heat transfer and friction in turbulent pipe flow with Variable Physical Properties. In: *Advances in Heat Transfer* 6 (1970), S. 503–565
- [138] PETUKHOV, B.S. ; KRASNOSCHEKOW, E.A. ; PROTOPOPOV, V.S.: An investigation of heat transfer to fluids flowing in pipes under supercritical conditions. In: *International developments in heat transfer, Proceedings of Heat Transfer Conference, Part III*. Colorado, USA, August, 1961, S. 569–578
- [139] PETUKHOV, B.S. ; KURGANOV, V.A.: Heat transfer and flow resistance in the turbulent pipe flow of a fluid with near-critical state parameters. In: *Teplofizika Vysokikh Temperature* 21 (1983), Nr. 1, S. 92–100
- [140] PIORO, I.L. ; DUFFEY, R.B.: Experimental heat transfer in supercritical water flowing inside channels (survey). In: *Nuclear Engineering and Design* 235 (2005), Nr. 22, S. 2407–2430
- [141] PIORO, I.L. ; DUFFEY, R.B.: Heat Transfer And Hydraulic Resistance at Supercritical Pressures in Power-Engineering Applications, ASME Press, 2007
- [142] PIORO, I.L. ; DUFFEY, R.B. ; T.J., Dumouchel: Hydraulic resistance of fluids flowing inside channels at supercritical pressures (survey). In: *Nuclear Engineering and Design* 231 (2004), Nr. 2, S. 187–197
- [143] PIORO, I.L. ; KHARTABIL, H.F. ; DUFFEY, R.B.: Heat transfer to supercritical fluids flowing in channels - empirical correlations (survey). In: *Nuclear Engineering and Design* 230 (2004), Nr. 1-3, S. 69–91
- [144] POPE, S.B.: *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000
- [145] PRANDTL, L.: *Führer durch die Strömungslehre*. 1. Auflage, Vieweg Verlag, Braunschweig, 1942
- [146] PRANDTL, L.: *Gesammelte Abhandlungen, Zweiter Teil, Über Flüssigkeitsbewegung bei sehr kleiner Reibung (1904)*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1961
- [147] PRICE, H.C. ; VARGA, R.S. ; WARREN, J.E.: Application of oscillation matrices to diffusion-convection equations. In: *Journal Math. and Phys.* 45 (1966), S. 301
- [148] PROPATH: *A Program Package for Thermophysical Properties of Fluids*. W-PROPATH, www2.mech.nagasaki-u.ac.jp/PROPATH, 2002
- [149] PROTOPOPOV, V.S.: Generalizing relations for the local heat-transfer coefficients in turbulent flows of water and carbon dioxide at supercritical pressure in a uniformly heated circular tube. In: *High Temperatures* 15 (1977), Nr. 4, S. 687–692

- [150] RAZUMOVSKIY, V.G. ; ORNATSKI, A.P. ; MAYEVSKIY, E.M.: Local heat transfer and hydraulic behaviour in turbulent channel flow of water at supercritical pressure. In: *Heat Transfer - Soviet Research* 22 (1990), Nr. 1, S. 91–102
- [151] RODI, W. ; MANSOUR, N.N.: Low Reynolds Number k-epsilon Modeling with the Aid of Direct Simulation Data. In: *J. of Fluid Mech.* 250 (1993), S. 509–529
- [152] SAGAUT, P.: *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 2001
- [153] SCHLICHTING, H.: *Grenzschichttheorie*. 1. Auflage, Braun Verlag, Karlsruhe, 1951
- [154] SCHLICHTING, H. ; GERSTEN, K.: *Grenzschichttheorie*. 9. Auflage, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 2006
- [155] SCHMIDT, E.: Wärmetransport durch natürliche Konvektion in Stoffen bei kritischen Zuständen. In: *Int. J. Heat Mass Transfer* 1 (1960), Nr. 1, S. 92–101
- [156] SCHMIDT, E. ; ECKERT, E. ; GRIGULL, E.: Heat transfer by liquids near the critical state, AFF Translation, No. 527. In: *Air Materials Command* (1946)
- [157] SCHMIDT, H. ; SCHUMANN, U.: Coherent structure of the convective boundary layer derived from large-eddy simulations. In: *J. Fluid. Mech.* 200 (1989), S. 511–562
- [158] SCHOPPA, W. ; HUSSAIN, F.: Coherent structure dynamics in near-wall turbulence. In: *Fluid Dynamics Research* 26 (2000), S. 119–139
- [159] SCHUMANN, U.: Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli. In: *J. Comput. Phys.* 18 (1975), S. 376–404
- [160] SEO, K.W. ; ANDERSON, M.H. ; CORRADINI, M.L.: Studies of supercritical heat transfer and flow phenomena. In: *The 11th Int. Topical Meetin on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics (NURETH-11)*. Avignon, France, 2.-6. Oktober, 2005. – Paper No. 162
- [161] SHANG, Z. ; LO, S.: CFD investigation of vertical rod bundles of supercritical water-cooled nuclear reactor. In: *Nuclear Engineering and Design* 239 (2009), Nr. 11, S. 2562–2572
- [162] SHANG, Z. ; LO, S.: CFD in supercritical water-cooled nuclear reactor (SCWR) with horizontal tube bundles. In: *Nuclear Engineering and Design* (2010). – Article in Press
- [163] SHEHATA, A.M.: *Mean Turbulence Structure in Strongly Heated Air Flows*, Universität of Arizona, USA, Diss., 1984
- [164] SHEHATA, A.M. ; MCELIGOT, D.M.: *Turbulence Structure in the Viscous Layer of Strongly Heated Gas Flows* / Idaho National Engineering and Environmental Laboratory, Lockheed Martin Idaho Technologies Co., Idaho Falls, USA, Report No. INEL-95/0223. 1995. – Forschungsbericht

- [165] SHEHATA, A.M. ; MCELIGOT, D.M.: Mean Structure in the Viscous Layer of Strongly-Heated Internal Gas Flows. In: *Int. J. of Heat and Mass Transfer* 41 (1998), S. 4297–4313
- [166] SHIRALKAR, M.E. ; GRIFFITH, P.: The Effect of Swirl, Inlet Conditions, Flow direction, and Tube Diameter on the Heat Transfer to Fluids at Supercritical Pressure. In: *J. Heat Transfer* 92 (1970), Nr. 3, S. 465–474
- [167] SHITSMAN, M.E.: Impairment of the transmission at supercritical pressures. In: *Teplofizika Vysokih Temperature* 1 (1963), Nr. 2, S. 237–244
- [168] SHITSMAN, M.E.: Temperature conditions in tubes at supercritical pressures. In: *Thermal Engineering* 15 (1968), Nr. 5, S. 72–77
- [169] SMAGORINSKY, J.: General circulation experiments with primitive equations, I, The basic experiment. In: *Mon. Weather Rev.* 91 (1963), S. 99–164
- [170] SOHANKAR, A. ; DAVIDSON, L. ; C., Norberg: A Dynamic One-Equation Subgrid Model for Simulation of Flow around a Square Cylinder. In: RODI, W. (Hrsg.) ; LAURENCE, D. (Hrsg.): *Engineering Turbulence Modelling and Experiments* Bd. 4. Elsevier Science B.V., 1999, S. 227–236
- [171] SPALART, P.R. ; JOU, W.H. ; STRETLETS, M. ; ALLMARAS, S.R.: Comments on the Feasibility of LES for Wings and on the Hybrid RANS/LES Approach. In: *Proceedings of the First AFOSR International Conference on DNS/LES*. Arlington, Texas, USA, August, 1997
- [172] SPEZIALE, C.G.: On nonlinear $k-l$ and $k-\epsilon$ models of turbulence. In: *J. Fluid Mech.* 178 (1987), S. 459–475
- [173] SPEZIALE, C.G. ; SARKAR, S. ; GATSKI, T.B.: Modelling the pressure-strain correlation of turbulence: an invariant dynamical systems approach. In: *J. Fluid Mech.* 227 (1991), S. 245–272
- [174] SQUARER, D. ; BITTERMANN, D. ; SCHULENBERG, T. ; OKA, Y.: Overview of the HPLWR Project and Future Direction. In: *Proceedings of ICAPP'03*. Cordoba, Spanien, 4.-7. Mai, 2003. – Paper No. 3137
- [175] SQUARER, D. ; SCHULENBERG, T. ; STRUWE, D. ; OKA, Y. ; BITTERMANN, D.: High Performance Light Water Reactor. In: *Nuclear Engineering and Design* 221 (2003), S. 167–180
- [176] SREENIVASAN, K.: On the universality of the Kolmogorov constant. In: *Phys. Fluids* 7 (1995), S. 2778–2784
- [177] STARFLINGER, J.: Final Report Assessment of the HPLWR Concept, HPLWR D7-08 Public Final Report / HPLWR-S/T-WP7-11 / KIT, Karlsruhe, Deutschland, CEA, Cadarache, Frankreich, uvm., www.hplwr.eu. 1995. – Forschungsbericht
- [178] STYRIKOVICH, M.A. ; MARGULOVA, T.K. ; MITROPOLSKIY, Z.L.: Problem in the development of designs of supercritical boilers. In: *Teploenergetika* 14 (1965), Nr. 6, S. 4–7

- [179] SWEBY, P.K.: High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. In: *SIAM Journal of Numerical Analysis* 21 (1984), S. 995–1011
- [180] SWENSON, H.S. ; CARVER, J.R. ; KAKARALA, C.R.: Heat transfer to supercritical water in smooth-bore tubes. In: *J. Heat Transfer* 87 (1965), Nr. 4, S. 477–484
- [181] US DOE, Nuclear Energy Research Advisory C.: A Technology Roadmap for Generation IV Nuclear Energy Systems / Generation IV International Forum. 2002. – Forschungsbericht
- [182] VANDRIEST, E.R.: On turbulent flow near a wall. In: *J. Aero. Sci.* 23 (1956), S. 1007–1011
- [183] VASILYEV, O. ; LUND, T.S. ; MOIN, P.: A general class of commutative filters for LES in complex geometries. In: *J. Comput. Phys.* 146 (1998), S. 82–104
- [184] VILLIERS, E. de: *The Potential of Large Eddy Simulation for the Modeling of Wall Bounded Flows*, Imperial College London, Diss., 2006
- [185] WATERSON, N.P. ; DECONINCK, H.: Design Principles for bounded higher-order convection schemes - a unified approach. In: *Journal of Computational Physics* 224 (2007), S. 182–207
- [186] WATTS, M.J. ; CHOU, C.T.: Mixed convection heat transfer to supercritical pressure water. In: *Proceedings of 7th Int. Heat Transfer Conf.* München, Deutschland, 1982, S. 495–500
- [187] WEINBERG, R.: *Experimental and theoretical study of buoyancy effects in forced convection to supercritical pressure carbon dioxide*, Universität Manchester, Diss., 1972
- [188] WEN, Q.L. ; GU, H.Y.: Numerical simulation of heat transfer deterioration phenomenon in supercritical water through vertical tube. In: *Annals of Nuclear Energy* 37 (2010), S. 1272–1280
- [189] WILCOX, D.C.: *Turbulence Modeling for CFD*. third edition, DCW Industries, Inc., La Cañada, California, USA, 2006
- [190] WONG, M. ; PATER, I. de: *New Red Spot Appears on Jupiter*. University of California, Berkeley, 2008
- [191] YAMAGATA, K. ; NISHIKAWA, K. ; HASEGAWA, S. ; FUJI, T. ; YOSHIDA, S.: Forced convective heat transfer to supercritical water flowing in tubes. In: *Int. J. Heat Transfer* 15 (1972), S. 2575–2593
- [192] YANG, J. ; OKA, Y. ; ISHIWATARI, Y. ; LIU, J. ; YOO, J.: Numerical Investigation of heat transfer in upward flows of supercritical water in circular tubes and tight fuel rod bundles. In: *Nuclear Engineering and Design* 237 (2007), S. 420–430
- [193] YOSHIKAWA, A.: Bridging between eddy-viscosity-type and second-order turbulence models through a two-scale turbulence theory. In: *APS, Phys. Rev. E* 48 (1993), S. 273–281

- [194] YOSHIKAWA, A. ; HORIUTI, K.: A statistically-derived subgridscale kinetic energy model for the large-eddy simulation of turbulent flows. In: *J. Phys. Soc. Jpn.* 54 (1985), S. 2834–2839
- [195] ZHANG, B. ; SHAN, J. ; JIANG, J.: Numerical Analysis of Supercritical Heat Transfer in Horizontal Circular Tube. In: *Proceedings of 17th Int. Conf. on Nucl. Eng., ICONE17*. Brussels, Belgium, 12.-16. Juli, 2009. – Paper No. ICONE17-75411
- [196] ZHANG, Y. ; ZHANG, C. ; JIANG, J.: Numerical Simulation of Heat Transfer of Supercritical Fluids in Circular Tubes Using Different Turbulence Models. In: *J. Nuclear Science and Technology* 48 (2011), Nr. 3, S. 366–373
- [197] ZHAO, C.R. ; HE, S. ; JIANG, P.X.: Numerical Simulation of Heat Transfer of CO₂ at Supercritical Pressures using various Turbulence Models. In: *Heat Transfer, Thermal-Hydraulics and System Design for Supercritical Water-Cooled Reactors*. Pisa, Italy, 2010
- [198] ZHOU, Y.: Interacting scales and energy transfer in isotropic turbulence. In: *Phys. Fluids* 5 (1993), S. 2511–2524
- [199] ZHU, Y.: *Numerical investigation of the flow and heat transfer within the core cooling channel of a supercritical water reactor*, Institut für Kernenergetik und Energiesysteme (IKE), Universität Stuttgart, Diss., 2010
- [200] ZHU, Y. ; LAURIEN, E.: Prediction of heat transfer of upward flow in annular channel at supercritical pressure - water and CO₂. In: *4th Int. Symposium on Supercritical Water-Cooled Reactors*. Heidelberg, Deutschland, 8.-11. März, 2009. – Paper no. 35