

## PSF-Jahresbericht 1995

### **32.22 INNOVATIVE SYSTEME**

#### **32.22.02 Passive Nachwärmeverfahren**

##### **I. Turbulenzmodellentwicklung und ingenieurtechnische Anwendung**

(G. Grötzbach, T. Ammann, C. Bratianu, B. Dorr, S. Hofmann, M. Kampczyk, Y. Kimhi, W. Olbrich, M. Wörner, IRS; M. Alef, A. Hennemuth, G. Janßen, D. Seldner, HIK)

##### Abstract:

The numerical tools used to investigate the passive decay heat removal for innovative reactor systems and related experiments need distinct model features. For the multi-purpose code FLUTAN, which is used in this context, a new code version is provided which includes all recent model extensions, improvements of numerical schemes, and corrections. Meanwhile, this recent code version is extended by a newly developed turbulent heat flux model of second order. This achieves accurate modelling of buoyant convection in very different fluids at small and large turbulence levels. One model extension, which is important for applications at low Peclet numbers, is developed from numerical simulation data gained with the TURBIT code. A theoretical investigation is started in which the basic equations and the corresponding physical modelling will be developed which are required to extend the applicability of technical codes to detailed analyses of turbulent two-phase flows. In a first step the adequate averaging operators and their consequences on the physical meaning of the resulting equations with their unknown terms are investigated.

## Rechenprogramm FLUTAN für thermofluiddynamische Anwendungen

Für die Analyse der Nachwärmeabfuhr in neu konzipierten Reaktorsystemen wird bei FZK das Rechenprogramm FLUTAN weiterentwickelt und eingesetzt. Ebenso wird es für die detaillierte Analyse von Modellexperimenten zu diesem und anderen Themenbereichen herangezogen. Für Anwendungen auf Naturkonvektion müssen die physikalischen Modelle des Programms, insbesondere die Turbulenzmodelle, und die Effizienz der verwendeten numerischen Methoden verbessert werden. Schließlich soll es auch vorbereitet werden für den Einsatz auf Zweiphasenströmungen, wie sie z.B. bei der Sumpfkühlung für neue Druckwasserreaktorkonzepte analysiert werden müssen.

In der im IRS 1994 neu gebildeten Arbeitsgruppe zur Weiterentwicklung von FLUTAN werden auch die Arbeiten aller Arbeitsgruppen bei FZK, die an oder mit FLUTAN arbeiten, ausgewertet, koordiniert, Lösungen für akute Probleme erarbeitet und Programmversionen mit Erweiterungen für spezielle Aufgaben bereitgestellt. Insbesondere wurde zusammen mit allen Beteiligten eine neue Programmversion FLUTAN 2.0 erstellt, die die in den Vorjahren entwickelten Verbesserungen und Erweiterungen, besonders zur Numerik, enthält.

Das im IATF entwickelte Turbulenzmodell zweiter Ordnung für den turbulenten Wärmetransport wurde dort unter anderem unter Verwendung von Analysen aus den Turbulenzsimulationen mit TURBIT und einer daraus entwickelten Modellierung sowie einem für Naturkonvektion gültigen Modellkoeffizienten erweitert und verifiziert (siehe unten). Dieses neue Turbulenzmodell und die im IATF durchgeführten Modellerweiterungen für kleine Reynolds-Zahlen wurden auf die neue Fassung FLUTAN 2.0 übertragen. Die Leistungsfähigkeit der Modelle für Zwangskonvektion und Mischkonvektion wurde im IATF nachgewiesen. Eine Anwendung auf reine Naturkonvektion unter Einschluß von wandnahen Strömungen mit Wärmeübertragung ist möglich.

Die Aufarbeitung des in FLUTAN verfügbaren Modells für homogene Zweiphasenströmung mußte aus Personalgründen vorübergehend unterbrochen werden. Die bei Testrechnungen aufgetretenen Probleme zeigen, daß Verbesserungen in der programminternen Umsetzung des Modells und in der numerischen Lösung notwendig sind. Verbesserungsvorschläge wurden abgeleitet.

Im Rahmen der Arbeiten zur Verbesserung und Erweiterung der numerischen Grundlagen des Programms wurden Genauigkeit und Stabilität des im Vorjahr entwickelten Verfahrens zur lokalen Gitterverfeinerung theoretisch untersucht. In einer ersten Fassung wurde diese neue Methode in FLUTAN realisiert. Die zur

Lösung der entstehenden Gleichungssysteme notwendigen Poisson-Gleichungslöser wurden in enger Kooperation mit HIK und der University of Virginia bereitgestellt. Im Rahmen der Kooperation mit HIK laufen auch Vorbereitungen, um diese Programmteile für den zukünftigen Einsatz von FLUTAN auf Parallelrechnern einzusetzen. Zur Effizienzsteigerung bei aufwendigen Anwendungsrechnungen wurden Möglichkeiten vorgesehen, um durch Modifikation von Maschennetzen aus existierenden Rechenergebnissen Startwerte für neue Analysen zu erzeugen. Zum selben Zweck wird zur Zeit auch an der Entkopplung der Zeitintegration der verschiedenen Transportgleichungen gearbeitet, um z.B. bei Aufgaben mit unterschiedlichen Zeitskalen in Impuls- und Energiefeld nicht alle Gleichungen mit dem kleinsten Zeitschritt lösen zu müssen.

Der relativ rasche Übergang bei HIK vom Vektorrechner VP400-EX auf eine unter UNIX laufende CRAY J90/16 führte in diesem Jahr zu einem erheblichen Zusatzaufwand für die Anpassung und Überarbeitung des Programmes und einiger seiner Hilfsprogramme. Die älteren grafischen Analyseprogramme von FLUTAN lassen sich nicht oder nur mit großem Aufwand auf UNIX-basierte Software umstellen. Deshalb wird zur Zeit an einem Konzept zur Auswahl und Anbindung kommerzieller Postprozessoren gearbeitet.

Bei den Anwendungen von FLUTAN gingen im Berichtszeitraum die Analysen des IATF für die Wärmeabfuhrmöglichkeiten aus Modellen von großen Reaktortanks, speziell aus NEPTUN, zu Ende. Die Interpretation von Experimenten zur Analyse der kompletten Kühlungskette vom Reaktorkern bis zum Naturzugkühler, KIWA, im INR wurde unterbrochen. Die Interpretation des Strahlungsanteils am Wärmetransport in der PASCO-Anlage zur Simulation des Naturzuges zwischen Beton- und Stahl-Containmentschale wurde im IATF weitergeführt. Zu Einzelberichten siehe dort. Mit der Nachrechnung von einigen kleineren Experimenten und einem Beitrag zu einem Code-Benchmarking wurden Detailmodelle, insbesondere das neue Modell für den turbulenten Wärmetransport, und numerische Verfahren genauer überprüft. Anwendungen von FLUTAN auf die Analyse von Modellexperimenten zur Wärmeabfuhr aus dem Reaktorsumpf, SUCO, werden im IRS gerade vorbereitet.

### **Numerische Simulation turbulenter Naturkonvektion**

Die Arbeiten am Rechenprogramm TURBIT zur numerischen Simulation von Turbulenz in Kanalströmungen dienen dazu, die im Rechenprogramm FLUTAN verwendeten Turbulenzmodelle auf eine breitere Basis zu stellen. Insbesondere soll mit Hilfe der Ergebnisse aus numerischen Simulationen der Anwendungsbereich

von Turbulenzmodellen auf Naturkonvektion in verschiedenen Fluiden überprüft und methodisch erweitert werden. Schließlich soll eine Detailabstimmung der Koeffizienten der Turbulenzmodelle vorgenommen werden.

Die von TURBIT mit der direkten Simulationsmethode, bei der alle Skalen von Geschwindigkeits- und Temperaturfeld durch das Maschennetz aufgelöst werden, zuvor bereitgestellte Datenbasis für Rayleigh-Bénard-Konvektion in Natrium und Luft wurde um Simulationen für Quecksilber, dessen Prandtl-Zahl zwischen der von Natrium und Luft liegt, erweitert. Zur Untersuchung der Strukturen und dynamischen Vorgänge bei dieser Strömung wurden die zeitabhängigen Simulationsergebnisse verfilmt. Die Analysen geben Hinweise darauf, daß die zuvor in den Simulationen für Natrium gefundenen großräumigen Wirbel, die wie ein Starrkörper rotieren, die sogenannte Trägheitskonvektion, auch in anderen Fluiden kleiner Prandtl-Zahl, wie z.B. in Quecksilber, existieren. Es wurden erste Schritte zur Herleitung eines Zustandsdiagramms der Trägheitskonvektion in Abhängigkeit der relevanten dimensionslosen Kennzahlen unternommen, Abb. 1. Der Bereich, in dem aus physikalischen Begründungen heraus Trägheitskonvektion erwartet werden kann, ist in dem Zustandsdiagramm als Funktion von Boussinesque-Zahl,  $Bo = Ra * Pr$ , und Grashof-Zahl,  $Gr = Ra / Pr$ , schraffiert dargestellt; hierin ist  $Ra = \text{Rayleigh-Zahl}$  und  $Pr = \text{Prandtl-Zahl}$ . Die in den Simulationsergebnissen für Quecksilber,  $Pr = 0,025$ , und Natrium,  $Pr = 0,006$ , gefundenen Strömungszustände unterstützen diese Begründung quantitativ.

Die um die Ergebnisse aus den numerischen Simulationen für Quecksilber erweiterte Datenbasis für turbulente Rayleigh-Bénard-Konvektion wurde mit statistischen Methoden analysiert. Ein wichtiges Ergebnis betrifft den molekularen Senkterm in der Transportgleichung des turbulenten Wärmestroms, die in statistischen Turbulenzmodellen gelöst wird. Frühere Analysen von TURBIT-Ergebnissen haben gezeigt, daß für die Berechnung der Wärmeübertragung in Naturkonvektion mit statistischen Turbulenzmodellen eine adäquate Modellierung dieses Terms von großer Bedeutung ist. Neuere Modellvorschläge sehen vor, den Einfluß der Turbulenzintensität im Rahmen des Modells durch eine Funktion  $f_{\varepsilon\theta}$  zu berücksichtigen. Da diese Funktion experimentell nicht zugänglich ist, konnte bisher keine ausreichende funktionale Abhängigkeit formuliert werden. Aus der Analyse der mit TURBIT erzeugten Datenbasis konnte dagegen gezeigt werden, daß diese Funktion für sehr unterschiedliche Fluide mit einer exponentiellen Abhängigkeit von der Summe der Turbulenz-Reynolds- und Peclet-Zahl beschrieben werden kann (gestrichelte Linie in Abb. 2). Mit diesem Gesetz werden die Koeffizienten solcher Wärmestromtransportgleichungsmodelle unabhängig von der

Art des verwendeten Fluids und brauchen nur eine einmalige Anpassung für alle Fluide mit Prandtl-Zahlen, die von Natrium bis Wasser reichen. Der neue Modellierungsansatz wurde in FLUTAN in modifizierter Form übernommen. Für die übrigen Koeffizienten werden Standardwerte aus der Literatur angewandt. Mit dem derart verbesserten Turbulenzmodell konnte FLUTAN tatsächlich bei der Nachrechnung von Zwangs- und Mischkonvektionsexperimenten mit unterschiedlichen Fluiden eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen erzielen.

Die in TURBIT verfügbaren Analysemöglichkeiten zur Validierung, Kalibrierung und Weiterentwicklung von statistischen Turbulenzmodellen wurden weiter ergänzt. So ist es jetzt möglich, die Transportgleichung für die Dissipation der Varianz der Temperaturfluktuationen, die z.B. auch in FLUTAN im Rahmen des erweiterten Turbulenzmodells gelöst wird, auszuwerten und entsprechende Modellansätze auf ihre Gültigkeit für Naturkonvektion zu überprüfen.

Im Rahmen der generellen Weiterentwicklung von TURBIT wurde eine Möglichkeit geschaffen, durch geeignete Maschennetze die numerische Genauigkeit zu erhöhen. Alternativ zum bisherigen Verfahren, die Maschenweiten einzeln durch Eingabe festzulegen, können nun auch Netze mit einer feinen Abstufung der Maschenweiten generiert werden, die auf einer hyperbolischen Funktion aufbauen. Analysen haben gezeigt, daß sich bei Verwendung solcher nicht-äquidistanter Maschennetze die Genauigkeit bei der Berechnung von Gradienten und zweiten Ortsableitungen im Rahmen der statistischen Analysen deutlich verbessert.

Im Zuge der Umstellung der Hardware- und Betriebssystemumgebung im Rechenzentrum des HIK wurde TURBIT an die neuen Erfordernisse angepaßt. Das Programm ist inzwischen einsatzfähig auf dem Hochleistungsrechner CRAY J90/16 des Forschungszentrums Karlsruhe implementiert. Maßnahmen zur Parallelisierung des Programms wurden im HIK begonnen.

### **Theoretische Untersuchungen für turbulente Zweiphasenströmungen**

Ziel dieses Vorhabens, das aus 52.01.06 übernommen wurde, ist es, Methoden bereitzustellen, mit denen mittels numerischer Simulation die Details turbulenter Zweiphasenströmungen untersucht und später auch für technische Anwendungen detailliert beschrieben werden können. Die aus den Simulationen zu erzielenden Ergebnisse sollen den aus laufenden Experimenten ableitbaren Kenntnisstand zu den Eigenschaften der Turbulenz in Blasenströmung im Detail ergänzen. Daraus werden dann physikalische Modelle abgeleitet, wie sie in Rechenpro-

grammen für fluiddynamische Aufgaben mit Zweiphasenströmungen im Ingenieurbereich benötigt werden.

Zur Vorbereitung für die Auswahl eines geeigneten Mehrfeld-Rechenprogramms, das als Basis für die eigenen Entwicklungen dienen kann, in dem dann die weiterentwickelten physikalischen Modelle realisiert werden, wurden in einer Studie die physikalischen und mathematischen Grundlagen zur Beschreibung von Zweiphasenströmungen mit Zweifluidmodellen untersucht. Bei der Zusammenstellung und Diskussion der möglichen Mittelungsoperatoren, mit denen man zu einer numerischen Beschreibung der Gas- und Flüssigkeitsströmung kommen kann, wird deutlich, daß die üblicherweise mit Zweifluidmodell bezeichnete Vorgehensweise richtiger als Zweifeldmodell zu bezeichnen ist. Die Abbildung aus den TWOFLUX-Experimenten verdeutlicht, Abb. 3, daß z.B. eine Blasenströmung nur bei einer Kurzzeitmittelung als eine Zweifluiddarstellung aufgefaßt werden kann. Diese Darstellung entspricht der einer direkten numerischen Simulation. Dagegen durchdringen sich die beiden Fluide bei der in Anwendungsprogrammen üblichen statistischen Betrachtungsweise, die einer Langzeitmittelung entspricht. D.h., an einem Ort können beide Fluide vorkommen, und damit ist die Betrachtung von sich durchdringenden Strömungsfeldern die richtige Vorstellung. Diese Unterschiede in der Vorstellung haben Konsequenzen auf die Art der Modellierung der Austauschterme für Masse, Impuls und Wärme zwischen den Phasen.

Für beide Arten von Betrachtungsweisen wurden die entsprechend gemittelten Erhaltungsgleichungen abgeleitet und dokumentiert. Mit einem Überblick über existierende Feinstrukturmodelle für Einphasenströmung und dem Zusammenführen mit den volumetrisch gemittelten Grundgleichungen wurde die Grundlage für den Beginn der Entwicklung eines Grobstruktursimulationsmodells für turbulente Zweiphasenströmung geschaffen.

## Veröffentlichungen

Baumann, W., Kimhi, Y., Grötzbach, G.,  
Turbulente Naturkonvektion in einem Plenum simuliert mit Differenzverfahren  
erster und zweiter Ordnung.  
Jahrestagung Kerntechnik 95. Nürnberg, 16.-18. Mai 1995, Kerntechnische Ges.  
e.V. Deutsches Atomforum e.V., Bonn : INFORUM 1995 S.100-02, Nürnberg.

Grötzbach, G., Ammann, T., Dorr, B., Hiltner, I., Hofmann, S., Kampczyk, M.,  
Kimhi, Y., Seiter, Ch., Wörner, M., Alef, M., Hennemuth, A.,  
Turbulenzmodellentwicklung und ingenieurtechnische Anwendung.  
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1994.  
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5600, August 1995, S.349-56

Grötzbach, G., Wörner, M.,  
Inertial convection in turbulent Rayleigh-Bénard convection at small Prandtl  
numbers.  
in: "Computational Fluid Dynamics - Selected Topics", Special Edition to the 60-th  
birthday of Prof. K. G. Roesner, TH, Darmstadt; Eds. R. C. Srivastava, D. Leutloff,  
Springer Verlag, 1995, pp. 219 - 232

Seiter, Ch.,  
Numerische Simulation turbulenter Auftriebsströmungen in horizontalen  
Kanälen.  
Dissertation, Universität Karlsruhe,  
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5505, 1995.

Wörner, M., Grötzbach, G.,  
Modelling the molecular terms in the turbulent heat flux equation for natural  
convection.  
Proceedings Tenth Symposium on Turbulent Shear Flows, August 14-16, 1995,  
Pennsylvania State University, State College, Pennsylvania, USA, Vol. 2, P2-73 -  
P2-78

Wörner, M.,  
Direkte numerische Simulation als Werkzeug zur Validierung und  
Weiterentwicklung statistischer Turbulenzmodelle für Naturkonvektion.  
Strömungsmechanisches Kolloquium, TH Darmstadt, 26. Januar 1995

Wörner, M., Grötzbach, G.,  
Contributions of the direct simulation method to the validation of statistical  
turbulence models for natural convection.  
8th IAHR Working Group Meeting on Advanced Nuclear Reactor Thermal  
Hydraulics, Rez, CR, June 13-15, 1995

## Berichte

Ammann, T.,  
Analyse der numerischen Eigenschaften eines Verfahrens zur lokalen Gitter-  
verfeinerung in FLUTAN.  
Forschungszentrum Karlsruhe, Interner Bericht IRS-Nr. 16/95, PSF-Nr. 3233,  
November 1995.

Bratianu, C.,  
A comparison between turbulent Two-phase flow models based on separated  
and interpenetrating fields.  
Forschungszentrum Karlsruhe, Interner Bericht IRS-Nr. 10/95, PSF-Nr. 3219,  
Dezember 1995

Bunk, M.  
Direkte numerische Simulation turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion in  
Quecksilber,  
Diplomarbeit Universität Karlsruhe, Institut für Kerntechnik und Reaktor-  
sicherheit,  
September 1995

Dorr, B.,  
Implementierung der GAUSS-Lösungsroutine zur direkten Lösung einer  
Bandmatrix in FLUTAN.  
Forschungszentrum Karlsruhe, Interner Bericht IRS-Nr. 5/95, PSF-Nr. 3244,  
Dezember 1995

Hennemuth, A.  
Erweiterung von TURBIT um Analysemodule für die Epsilon-Theta-Gleichung und  
Erstellung von  
benutzerspezifischen AVS-Modulen,  
Forschungszentrum Karlsruhe, Interner Bericht IRS Nr. 15/95, PSF-Nr. 3231,  
Oktober 1995

Janssen, G.  
Untersuchung der Genauigkeit der numerischen Gradientenberechnung bei  
nicht-äquidistanten Maschennetzen  
Forschungszentrum Karlsruhe, Interner Bericht IRS Nr. 14/95, PSF-Nr. 3230,  
Oktober 1995

Olbrich, W.,  
2-d Vektorgraphik im IRS (Umstellung von MVS auf UNIX).  
Forschungszentrum Karlsruhe, Interner Bericht IRS-Nr. 3/95, PSF-Nr. 3211,  
März 1995

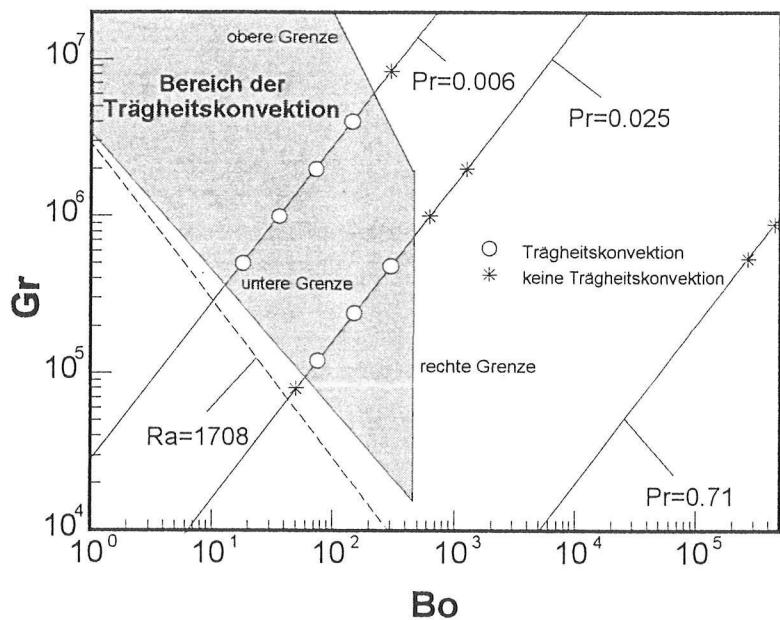


Abb. 1: Schematisches Zustandsdiagramm zur Entstehung der Trägheitskonvektion. Die Markierungen geben Ergebnisse aus den Direkten Numerischen Simulationen mit TURBIT wieder.

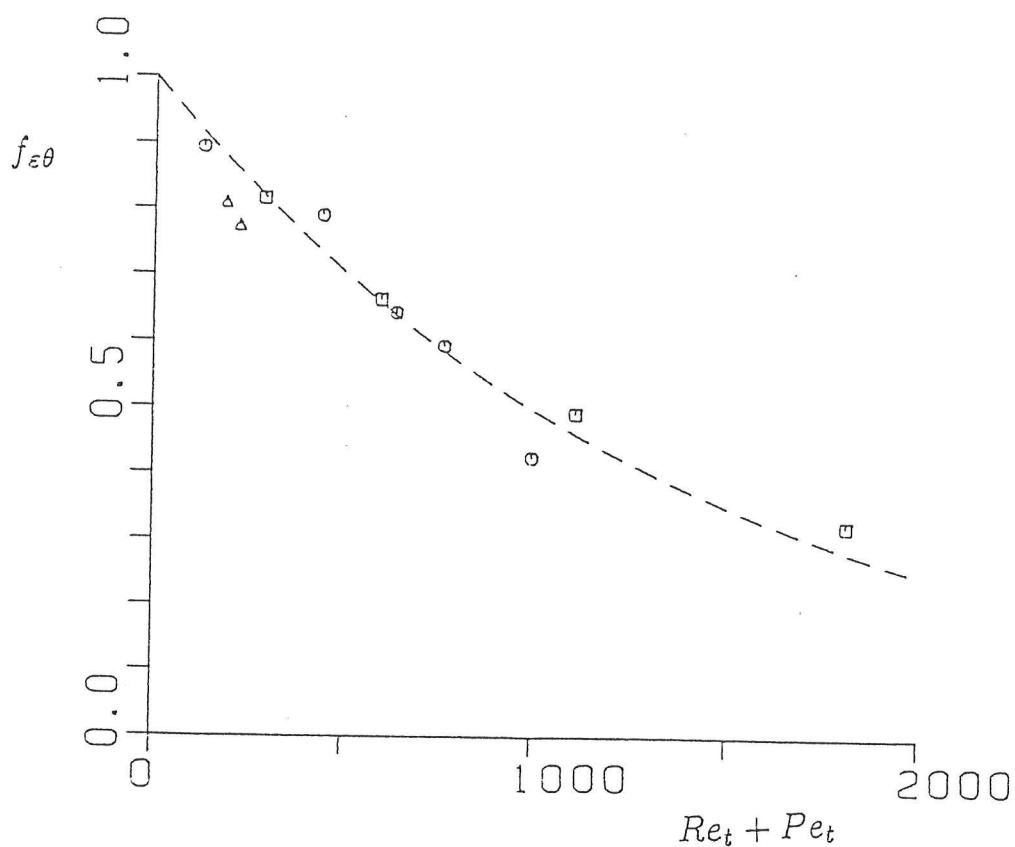
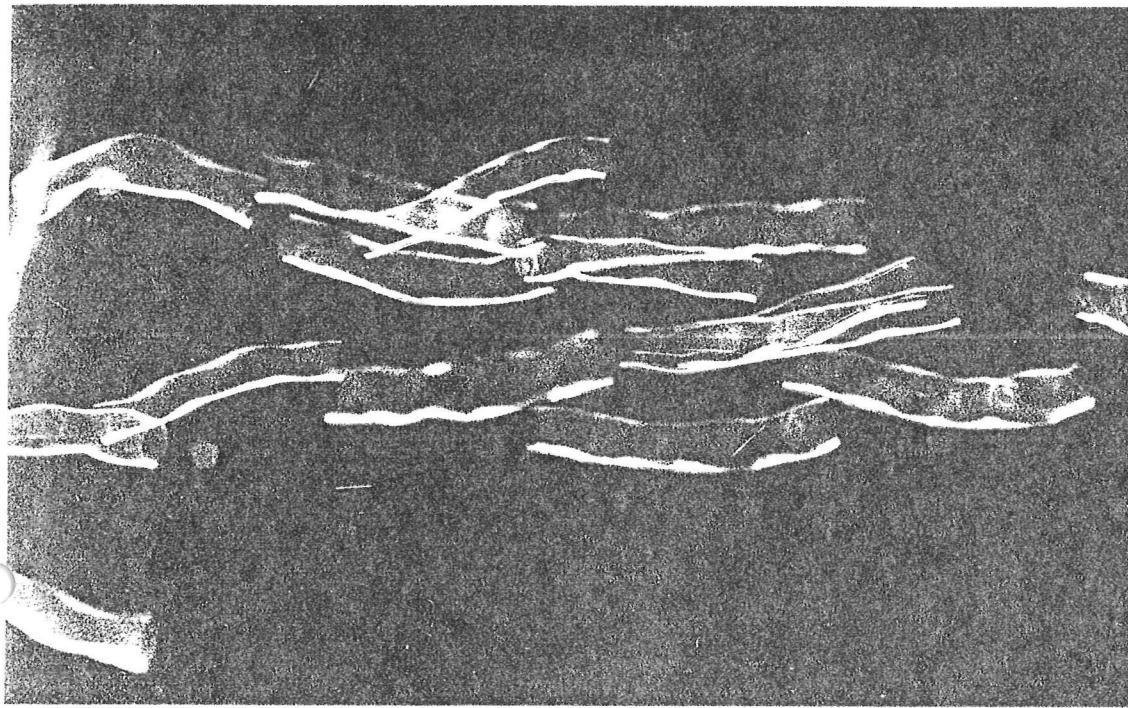
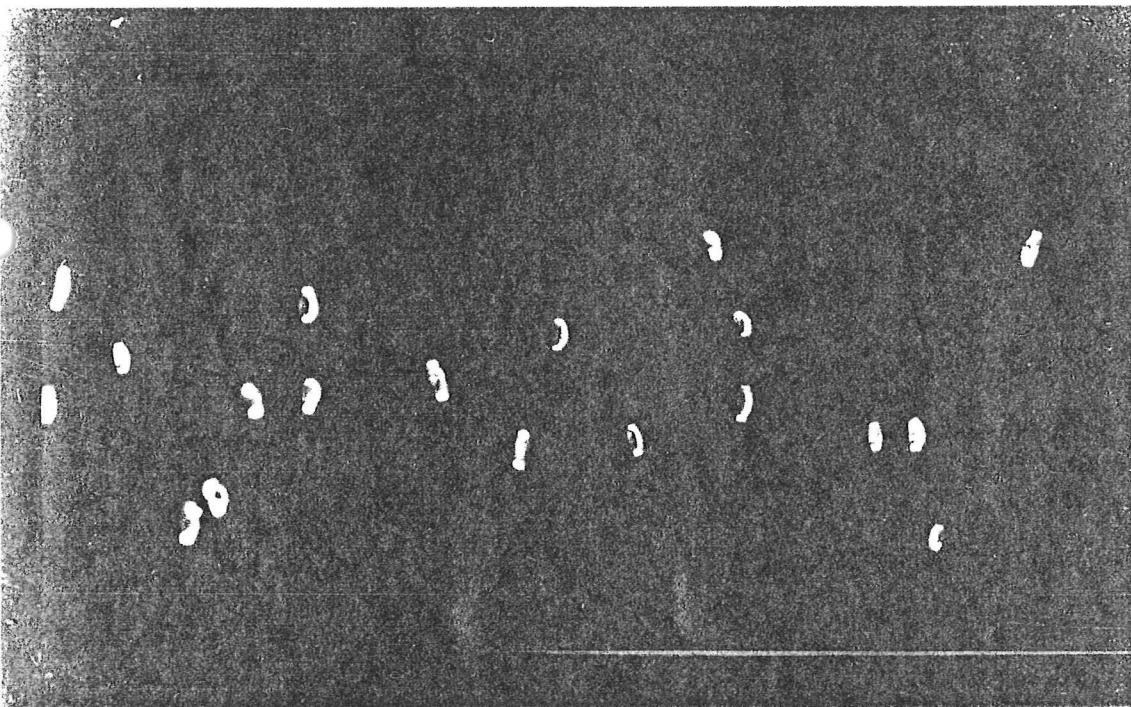


Abb. 2: Aus direkten numerischen Simulationen für Luft ( $\Delta$ ), Natrium ( $\square$ ) und Quecksilber ( $\circ$ ) ausgewertete Daten für  $f_{\varepsilon\theta}$ , aufgetragen über der Summe aus Turbulenz-Reynolds- und Peclet-Zahl.



b)



a)

Abb. 3: Momentaufnahme a) und Langzeitaufnahme b) einer turbulenten Blasenströmung zur Charakterisierung eines Zweifluid- und eines Zweifeldmodells.