

CFD-Modellierung von Vermischungsvorgängen in Druckwasserreaktoren in Anwesenheit von Dichtegradienten

Abschlussbericht

Roman Vaibar, Ulrich Rohde, Thomas Höhne

Juli 2008

Wissenschaftlich-Technische Berichte
FZD-500
Juli 2008

Roman Vaibar, Ulrich Rohde, Thomas Höhne

**CFD-Modellierung von Vermischungsvor-
gängen in Druckwasserreaktoren in
Anwesenheit von Dichtegradienten**

Abschlussbericht

Bibliothek D 120



100289502



**Forschungszentrum
Dresden** Rossendorf

Abschlussbericht

Final Report

Reaktorsicherheitsforschung – Vorhaben-Nr.
Reactor Safety Research-project No.:

1501287

Vorhabentitel: CFD-Modellierung von Vermischungsvorgängen in
Druckwasserreaktoren in Anwesenheit von Dichtegradienten

Project Title: CFD simulation of mixing phenomena in Pressurised Water
Reactors in the presence of density gradients

Autoren / Author(s) : Roman Vaibar¹⁾, Ulrich Rohde²⁾, Thomas Höhne²⁾

Dienststelle des Autors /
Performing Organisation:

1) Technische Universität Dresden
Fakultät für Maschinenwesen

2) Forschungszentrum Dresden-Rossendorf
Institut für Sicherheitsforschung

Berichtsdatum / Publication Date: July 2008

Das diesem Bericht zugrunde liegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie unter dem Förderkennzeichen 150 1287 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

Berichtsblatt

1. ISBN oder ISSN ISSN 1437-322X	2. Berichtsart Schlussbericht
3a. Titel des Berichts CFD-Modellierung von Vermischungsvorgängen in Druckwasserreaktoren in Anwesenheit von Dichtegradienten	
3b. Titel der Publikation	
4a. Autoren des Berichts (Name, Vorname(n)) Vaibar, Roman; Rohde, Ulrich; Höhne, Thomas	5. Abschlussdatum des Vorhabens 30.09.2007
	6. Veröffentlichungsdatum Juli 2008
4b. Autoren der Publikation (Name, Vorname(n))	7. Form der Publikation Report
	8. Durchführende Institution(en) (Name, Adresse) Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V. Institut für Sicherheitsforschung Postfach 510119 01314 Dresden
13. Fördernde Institution (Name, Adresse) Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi) 11019 Berlin	9. Ber.Nr. Durchführende Institution FZD-500
	10. Förderkennzeichen ¹⁾ 150 1287
	11a. Seitenzahl Bericht 26 + Anhang
	11b. Seitenzahl Publikation
12. Literaturangaben 11	14. Tabellen -
	15. Abbildungen 14
	16. Zusätzliche Angaben
17. Vorgelegt bei (Titel, Ort, Datum)	
18. Kurzfassung <p>In der Reaktorsicherheitsforschung sind auftriebsgetriebene Strömungen von Relevanz für Störfall-szenarien mit Verdünnung der Borkonzentration und für thermische Schockbelastungen des Reaktordruckbehälters bei Notkühlein speisung. In der numerischen Simulation der Strömungen werden neben der Berücksichtigung der Auftriebskräfte Quell- und Korrekturterme in die Bilanzgleichungen für die turbulente Energie und die turbulente Dissipation eingeführt. Es wurden erweiterte Modelle entwickelt, in die zusätzliche Gleichungen für die Turbulenzgrößen „turbulenter Massenstrom“ und „Dichteverianz“ eingehen. Die Modelle wurden in den CFD-Code ANSYS-CFX implementiert. Die Validierung der Modelle erfolgte an einem speziellen Versuchsaufbau (VeMix-Versuchsanlage), mit Einspeisung von Fluid höherer Dichte in eine Vorlage. Als Kriterien für die Validierung wurde der Umschlag zwischen zwei qualitativ verschiedenen Strömungsbildern für ein impulsdominiertes Strömungsregime mit vertikalem Jet oder ein vertikales Absinken bei Dominanz von Dichteeffekten sowie lokale Konzentrationsmessungen mit Hilfe eines speziell entwickelten Leitfähigkeits-Gittersensors herangezogen. Eine Verbesserung der Simulation dichtedominierter Vermischungsprozesse mit den erweiterten Turbulenzmodellen konnte allerdings nicht nachgewiesen werden, da die Unterschiede zwischen den Rechnungen mit verschiedenen Turbulenzmodellen zu gering sind. Andererseits konnte jedoch die Simulation der Stratifikation von Fluiden unterschiedlicher Dichte im kalten Strang einer Reaktoranlage deutlich verbessert werden. Anhand der Nachrechnung von Versuchen am geometrisch ähnlichen Reaktor-Strömungsmodell ROCOM wurde gezeigt, dass diese Stratifikation von bedeutendem Einfluss auf die Vermischung und somit letztendlich auch auf die Temperatur- bzw. Borkonzentrationsverteilung innerhalb des Reaktordruckbehälters ist. Sie lässt sich nur korrekt simulieren, wenn ausreichend große Abschnitte des kalten Stranges mit modelliert werden. Somit konnte doch eine bessere Vorhersagegenauigkeit der Simulation der Vermischung erreicht werden.</p>	
19. Schlagwörter Borverdünnung, Pressurised Thermal Shock, Kühlmittelvermischung, Auftrieb, Turbulenzmodelle, Validierung	
20. Verlag	21. Preis

Document Control Sheet

1. ISBN or ISSN ISSN 1437-322X	2. Type of Report Final Report
3a. Report Title CFD simulation of mixing phenomena in Pressurised Water Reactors in the presence of density gradients	
3b. Title of Publication	
4a. Author(s) of the Report (Family Name, First Name(s)) Vaibar, Roman; Rohde, Ulrich; Höhe, Thomas	5. End of Project 30.09.2007
4b. Author(s) of the Publication (Family Name, First Name(s))	6. Publication Date July 2008
8. Performing Organisation(s) (Name, Address) Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V. Institute of Safety Research P.O.Box 510119 01314 Dresden	7. Form of Publication Report
13. Sponsoring Agency (Name, Address) Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi) 11019 Berlin	9. Originator's Report No. FZD-500
	10. Reference No. ¹⁾ 150 1287
	11a. No. of Pages Report 26 + Attachment
	11b. No. of Pages Publication
	12. No. of References 11
	14. No. of Tables -
	15. No. of Figures 14
16. Supplementary Notes	
17. Presented at (Title, Place, Date)	
18. Abstract <p>In reactor safety research, buoyancy driven flows are of relevance for boron dilution accidents or pressurised thermal shock scenarios. Concerning the numerical simulation of these flows, besides of the consideration of buoyancy forces, source and correction terms are introduced into the balance equations for the turbulent energy and its dissipation rate. Within the project, extended turbulence models have been developed by introducing additional balance equations for the turbulent quantities "turbulent mass flow" and "density variance". The models have been implemented into the computational fluid dynamics code ANSYS-CFX.</p> <p>The validation of the models was performed against tests at a special experimental set-up, the VeMix facility, where fluid of higher density was injected into a vertical test section filled with lighter fluid. As validation criteria the switching-over between a momentum controlled mixing pattern with a horizontal jet and buoyancy driven mixing with vertical sinking down of the heavier fluid was used. Additionally, measurement data gained from an especially developed conductivity wire mesh sensor were used. However, an improvement of the modelling of buoyancy driven mixing by use of the extended models could not be shown, because the differences between calculations with the different models were not relevant.</p> <p>On the other hand, the modelling of the stratification of fluids with different density in the cold leg of a reactor primary circuit could be significantly improved. It has been shown on calculations of experiments at the ROCOM mixing test facility, a scaled model of a real reactor plant, that this stratification is relevant as a boundary condition for the mixing process inside the reactor pressure vessel. It can be correctly simulated only if sufficient large parts of the cold legs are included in the modelling. On this way, an improvement of the accuracy of the prediction of mixing processes was achieved.</p>	
19. Keywords Boron dilution, Pressurised Thermal Shock, coolant mixing, buoyancy forces, turbulence models, validation	
20. Verlag	21. Preis

Inhalt

1.	Einführung	3
1.1	Aufgabenstellung	3
1.2	Voraussetzungen für die Durchführung des Vorhabens	4
1.3	Planung und Ablauf des Vorhabens.....	5
1.4	Wissenschaftlicher und technischer Stand	6
2.	Erzielte Ergebnisse	8
2.1	Weiterentwicklung der statistischen Turbulenzmodelle mit Berücksichtigung von Dichtegradienten	8
2.2	Validierung der Modelle mit Berücksichtigung auftriebsgenerierter Turbulenz an Experimenten.....	9
2.2.1	Validierung anhand von VeMix-Experimenten	10
2.2.2	Validierung anhand von ROCOM-Experimenten	17
2.3	Skalierung auf die Originalanlage	21
2.4	Zusammenfassung und Schlussfolgerungen	23
3.	Voraussichtlicher Nutzen	24
	Literatur	24
	Anhang: Kurzfassung der Promotionsschrift.....	26

1. Einführung

1.1 Aufgabenstellung

Gegenstand des Vorhabens waren experimentelle und numerische Untersuchungen dichtegetriebener Strömungen, die im Rahmen der Sicherheitsforschung für Kernreaktoren am Forschungszentrum Dresden-Rossendorf (FZD) durchgeführt wurden. Ein wichtiger Aspekt der nuklearen Reaktorsicherheit ist für Druckwasserreaktoren die Kühlung des Reaktorkerns durch borhaltiges Wasser, weil über dessen Borkonzentration die Kritikalität des Reaktors geregelt wird. In bestimmten Störfallszenarien können sich im Primärkreislauf Pfropfen unterborierten Wassers mit unterschiedlichen Temperaturen ansammeln, die dann z.B. beim Wiederanlaufen der Naturzirkulation im Verlaufe eines Leckstörfalls in den Reaktorkern gelangen können. Dabei ist die Rekritikalität des abgeschalteten Reaktors zu vermeiden. Neben Temperatur und Druck bestimmt auch die Borkonzentration die Dichte des Kühlwassers. Dichteunterschiede sind die entscheidenden Triebkräfte für die Vermischung des unterborierten Wassers mit höher borierterem Kühlmittel, wenn die Strömungsgeschwindigkeiten gering sind. Man spricht dann von dichtegetriebener Vermischung. Während impulsgetriebene Vermischung, die bei geringen Dichteunterschieden und hohen Strömungsgeschwindigkeiten auftritt, mit CFD-Codes bereits recht gut modelliert werden kann, bestehen bei dichtegetriebener Vermischung noch Defizite. Dichtegetriebene Vermischung ist ebenfalls sicherheitsrelevant in sogenannten PTS-Szenarien (pressurized thermal shock). Dabei kommt es zu einer thermischen und mechanischen Belastung der Reaktordruckbehälterwand durch die Einspeisung kalten Notkühlwassers, das sich im kalten Strang der Reaktoranlage und im Ringraum des Druckbehälters mit wärmerem Wasser vermischt. Die mechanische Belastung der Wand hängt letztendlich von der Intensität der Vermischung ab.

Zunächst waren Ansätze für turbulente Auftriebsströmungen im Rahmen klassischer statistischer Turbulenzmodelle zu sichten. Entsprechend der Vorauswahl geeigneter Turbulenzmodelle für Auftriebsströmungen waren diese durch Vergleich mit experimentellen Daten (Benchmarks und generische Experimente in einfacher Geometrie mit geeigneter Instrumentierung zur detaillierten Erfassung der Vermischungsphänomene) zu bewerten und ggf. zu modifizieren. Diese Modifikationen haben beispielsweise das Ziel, die Turbulenzgenerierung durch Auftriebsstrahlen und die Turbulenzeigenschaften in geschichteten Strömungen adäquat zu beschreiben. Für die weitere Validierung wurden bereits durchgeführte Experimente an der ROCOM-Versuchsanlage genutzt.

In einem weiteren Arbeitsschritt sollten die Anwendbarkeit sowie die Vor- und Nachteile der Large Eddy Simulation (LES) gegenüber statistischen Turbulenzmodellen untersucht werden.

Von großer Bedeutung für die Anwendung in der Reaktorsicherheitsforschung ist die Skalierbarkeit der Ergebnisse auf reale Reaktoranlagen. Ergebnisse u.a. aus dem Vorhaben „Kühlmittelvermischung in Druckwasserreaktoren - Teil 2, Experimentelle Ausrüstung und Simulation der Vermischung“ (FKZ150 1216) zeigten, dass die Froude-Zahl zur Skalierung geeignet erscheint. Die Froude-Skalierung sollte experimentell überprüft werden. Darüber hinaus war in vergleichenden CFD-Rechnungen für Versuchsanlage und Reaktorgeometrie die Ähnlichkeit von Geschwindigkeits- und Konzentrationsverteilungen nachzuweisen.

Zielstellung der CFD-Simulationen zur dichtegetriebenen Vermischung ist letztendlich die Berechnung realistischer, zeitabhängiger Verteilungen der Kühlmitteltemperatur und Borkonzentration am Kerneintritt, die als Randbedingungen für die neutronenkinetische Störfallsimulation dienen bzw. von Temperaturverteilungen an der Reaktordruckbehälter-Innenwand als Voraussetzung für die Beurteilung von PTS-Szenarien. Eine realistische Berechnung ist nach dem Stand von Wissenschaft und Technik nur mit validierten CFD-Codes zu leisten.

1.2 Voraussetzungen für die Durchführung des Vorhabens

Voraussetzungen für die Durchführung des Vorhabens waren neben der Infrastruktur in Form von PC und LINUX-Cluster die Bereitstellung von Forschungslizenzen für den CFD-Code CFX durch den Codeentwickler ANSYS. Die für die Durchführung des Vorhabens erforderlichen Lizenzen für Pre- und Post-Processing, den Fluidynamik-Solver und die Parallelisierung des Codes wurden im Rahmen einer zwischen FZD und ANSYS bestehenden Kooperationsvereinbarung vom Codeentwickler zur Verfügung gestellt.

Wesentliche Voraussetzungen waren auch das vorhandene Know-how und die Erfahrungen in numerischer Strömungsmechanik, der Handhabung des CFD-Codes CFX und in experimentellen Methoden und Techniken zur Untersuchung der Vermischung von Fluiden mit unterschiedlicher Qualität wie Dichte, Temperatur oder Konzentration von Beimischungen. Dabei baute die Durchführung des Vorhabens vor allem auf Versuchseinrichtungen, Messverfahren und Ergebnissen des abgeschlossenen Vorhabens „Kühlmittelvermischung in Druckwasserreaktoren - Experimentelle Ausrüstung und Simulation der Vermischung“ (FKZ 150 1216) auf [3]. In diesem Vorhaben wurde die breit nutzbare Versuchsanlage ROCOM (**R**ossendorf **C**oolant **M**ixing Model) auf, die den zu untersuchenden Reaktortyp im Maßstab 1:5 nachbildet. Durch die volle Abbildung aller vier Umwälzschleifen, die flexible computergestützte Steuerung der Kühlmittelzirkulation und der Tracer-einspeisung zur Generierung der Randbedingungen sowie die speziell für ROCOM entwickelte Gittersensormesstechnik zur räumlich und zeitlich hochauflösenden Bestimmung von Konzentrationsverteilungen stellt ROCOM heute eine weltweit führende Versuchsanlage auf dem Gebiet der Kühlmittelvermischung in Druckwasserreaktoren dar.

An ROCOM wurden Experimente zur Kühlmittelvermischung in folgenden Szenarien durchgeführt:

- Zeitlich konstanter Massenstrom in allen oder einem Teil der Kühlmittelschleifen und Störung der Kühlmittelparameter (Temperatur und/oder Borkonzentration) in einer der Schleifen
- Transiente Strömungssituationen mit zeitlich veränderlichen Schleifendurchsätzen in einer oder mehreren Schleifen (Simulation des Anfahrens einer Hauptkühlmittelpumpe oder des Anlaufens der Naturzirkulation)
- Szenarien mit größeren Dichtedifferenzen der sich vermischenden Fluide

Bei den Experimenten wurden transiente Konzentrationsverteilungen am Kerneintritt für alle zu betrachtenden Szenarien ermittelt, die in Borsäure- bzw. Temperaturverteilungen umgerechnet werden können. Daneben wurden erstmals auch Verteilungen im Ringraum erhalten, die gemeinsam mit

Geschwindigkeitsmessungen mit Laser-Doppler-Anemometern zur Aufklärung der Ursache der beobachteten Phänomene führten und sich als außerordentlich geeignet für die Validierung von CFD-Codes erwiesen haben. Die Fülle des experimentellen Materials ist einmalig und deckt weite Parameterbereiche ab, was zum Aufbau eines umfangreichen Know-Hows in Fragen der Kühlmittelvermischung geführt hat. Es wurde eine Datenbasis für eine umfassende Validierung von dreidimensionalen Fluidodynamikmodellen geschaffen, die auch in dem abgeschlossenen Vorhaben genutzt wurde. Von besonderem Interesse für das Vorhaben waren die Experimente mit Dichteunterschieden.

Numerische Simulationen mit dem Code CFX umfassten alle die Versuchsszenarien, bei denen keine Rückwirkung von Dichtegradienten auf das Strömungsfeld auftrat. Durch die Implementierung des Modells eines porösen Körpers zur Darstellung perforierter Reaktoreinbauten und zur Beschreibung des Druckverlusts im Kern wurde eine realitätsnahe Beschreibung der hydraulischen Randbedingungen erreicht. Für die untersuchten Fälle mit Dominanz impulsgetriebener Vermischung konnte eine gute Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment erzielt werden. Die Vervollkommnung der Modellierung dichtegetriebener Vermischung war Gegenstand des abgeschlossenen Vorhabens.

Im Auftrag von KKW-Betreibern (VGB) wurden Experimente zu speziellen Szenarien mit Vermischung bei Vorhandensein von Dichteunterschieden durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Experimente werden in der gutachterlichen Tätigkeit der GRS und von TÜVs genutzt.

Auf europäischer Ebene koordinierte der Zuwendungsempfänger das Projekt FLOMIX-R im 5. Rahmenprogramm der EU. Damit flossen Ergebnisse und Erfahrungen des Antragstellers in eine breite internationale Kooperation zur Untersuchung der sicherheitsrelevanten Kühlmittelvermischung in verschiedenen Reaktorgeometrien ein [4, 6].

Um weitere quantitative Daten gewinnen zu können, wurde ein sogenannter "Surface Wire Mesh Sensor" (SMWS) konstruiert und auf die Innenwand einer Testsektion des VeMix-Versuchsstandes aufgebracht [7, 9, 10]. Das Messprinzip des SWMS besteht in der Bestimmung der elektrischen Leitfähigkeit des mit einer Salzlösung getracerten Fluids in einer wandnahen Schicht an 32 x 32 Messpunkten. Aus der Leitfähigkeit kann nach geeigneter Kalibrierung über die Konzentration des dem dichteren Fluid beigemischten Tracers auf die lokale Fluidichte geschlossen werden.

1.3 Planung und Ablauf des Vorhabens

Zunächst waren Ansätze für turbulente Auftriebsströmungen im Rahmen klassischer, statistischer Turbulenzmodelle zu sichten. Darauf aufsetzend waren verschiedene, in CFX-5 implementierte Ansätze an einfachen Benchmarkaufgaben zu testen. Es wurden Rechnungen zum IAHR "Stratified Mixing Layer" Benchmark mit dem CFD-Code CFX-5 durchgeführt.

Basierend auf der Literaturdurchsicht wurde ein neues Modell für einen auftriebsbedingten Quellterm in der Bilanzgleichung für die turbulente Energie vorgeschlagen. In die Aufstellung der Quellterme gehen die zusätzlichen Turbulenzgrößen „turbulenter Massenstrom“ und „Dichtevarianz“ ein. Der Quellterm ist proportional dem Schwankungsprodukt „turbulenter Massenstrom“ $\rho'u$, wobei

zusätzliche Bilanzgleichungen für $\rho'u$ und das Schwankungsprodukt der Dichte (Dichtevarianz) gelöst werden. Dieser Quellterm wurde in die Zwei-Gleichungs-Turbulenzmodelle vom Typ $k-\varepsilon$ im Fluidodynamikcode ANSYS-CFX implementiert. In vereinfachten Modellen werden anstelle der Bilanzgleichungen algebraische Gleichungen für die zusätzlichen Turbulenzgrößen gelöst. Die Ableitung und Implementierung dieser Modelle bildete das Kernstück der theoretischen Arbeiten im Vorhaben.

Weiterhin waren generische Untersuchungen sind an einem Versuchsstand in einfacher Geometrie mit geeigneter Instrumentierung zur detaillierten Erfassung der Vermischungsphänomene durchzuführen. Für diesen speziellen Zweck wurde die VeMix-(Vertical Mixing)-Versuchsanlage entworfen und aufgebaut. Sie hat eine einfache Geometrie und wurde so ausgelegt, dass die Schwerkraft entlang einer charakteristischen Längenskala, der Höhe, wirkt. Für die weitere Validierung konnten bereits durchgeführte Experimente an der ROCOM-Versuchsanlage genutzt werden.

In einem weiteren Arbeitsschritt sollten die Anwendbarkeit sowie die Vor- und Nachteile der Large Eddy Simulation (LES) gegenüber statistischen Turbulenzmodellen untersucht werden. Für ein ausgewähltes PTS-Szenario mit einer Dichtedifferenz zwischen eingespeistem Notkühlwasser und vorgelegtem Fluid von von 10 % wurden systematische Untersuchungen zum Einfluss verschiedener Turbulenzmodelle durchgeführt, wobei neben den statistischen Turbulenzmodellen (RANS) und dem Reynolds-Stress-Modell auch sog. Detached-Eddy-Simulationen durchgeführt wurden. Detached-Eddy-Simulation (DES) entspricht einer Kombination aus Large-Eddy-Simulation (LES) und RANS-Modellierung in Wandnähe. Eine volle Large-Eddy-Simulation war für die komplexe Geometrie der ROCOM-Anlage auf einem hinreichend feinem Gitter aus Rechenzeitgründen nicht möglich. Die Detached-Eddy-Simulationen ergaben keine wesentlichen Unterschiede zu den anderen Turbulenzmodellen. In den Ergebnissen ist daher kein eindeutiger Vorteil der DES zu erkennen.

Von großer Bedeutung für die Anwendung in der Reaktorsicherheitsforschung ist die Skalierbarkeit der Ergebnisse auf reale Reaktoranlagen. Ergebnisse u.a. aus dem Vorhaben 1501216 zeigen, dass die Froude-Zahl zur Skalierung geeignet erscheint. Die Froude-Skalierung wurde an der VEMIX-Anlage experimentell überprüft.

Zielstellung der CFD-Simulationen zur dichtegetriebenen Vermischung war letztendlich die Berechnung realistischer, zeitabhängiger Verteilungen der Kühlmitteltemperatur und Borkonzentration am Kerneintritt, die als Randbedingungen für die neutronenkinetische Störfallsimulation dienen, sowie von Temperaturverteilungen im Ringraum als Randbedingungen für PTS-Analysen. Anstelle der Fokussierung auf Borverdünnungsszenarien, die in der ursprünglichen Aufgabenstellung zum Vorhaben vorgesehen war, wurde der Schwerpunkt auf PTS-Szenarien verlagert, da hier größere Dichtedifferenzen auftreten.

1.4 Wissenschaftlicher und technischer Stand

Basierend auf Ansätzen aus der Literatur wurde ein neues Modell für einen auftriebsbedingten Quellterm in der Bilanzgleichung für die turbulente Energie entwickelt und in den CFD-Code ANSYS-CFX eingebaut. In die Aufstellung der Quellterme gehen die zusätzlichen Turbulenzgrößen „turbulenter Massenstrom“ und „Dichtevarianz“ ein. Die numerischen Simulationen haben allerdings gezeigt, dass die Turbulenzmodelle mit auftriebsbedingten Zusatztermen die dichtegetriebene

Strömung nur unmaßgeblich beeinflussen, da Simulationsrechnungen mit verschiedenen Varianten des erweiterten Turbulenzmodells keine signifikanten Unterschiede hervorgebracht haben. Zusammenfassend muss deshalb festgestellt werden, dass mit einer verbesserten Modellierung auftriebsgenerierter Turbulenz die Simulation dichtedominiertes Vermischungsprozesse kaum verbessert werden konnte. Wie an Nachrechnungen von Experimenten an der ROCOM-Versuchsanlage gezeigt wurde, sind die Unterschiede zwischen den Rechnungen mit verschiedenen Turbulenzmodellen gegenüber dem Einfluss von Randbedingungen von untergeordneter Bedeutung. Ein eindeutiges Ranking der verschiedenen Turbulenzmodelle ist deshalb nicht möglich.

Es wurde jedoch nachgewiesen, dass die Randbedingungen für die Strömung im kalten Strang der Reaktoranlage, bereits weit vor dem Eintritt in den Reaktor, einen entscheidenden Einfluss auf die Vermischung haben. Die Geschwindigkeits- und Turbulenzprofile, die sich einstellen, beeinflussen die Stratifikation im kalten Strang und entscheidend und somit letztendlich auch die Temperatur- bzw. Borkonzentrationsverteilung innerhalb des Reaktordruckbehälters. Diese lassen sich aber nur korrekt simulieren, wenn ausreichend große Abschnitte des kalten Stranges mit modelliert werden. Damit konnte auch eine bessere Vorhersagegenauigkeit der Simulation der Vermischung erreicht werden.

2. Erzielte Ergebnisse

2.1 Weiterentwicklung der statistischen Turbulenzmodelle mit Berücksichtigung von Dichtegradienten

Aus der Sichtung der Literatur wurde eine Vorauswahl an Turbulenzmodellen getroffen, die für die Beschreibung auftriebsgetriebener Vermischung mit der zu erwartenden Anisotropie der Turbulenzgenerierung geeignet erscheinen. Dabei wurden zunächst die die klassischen Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen in Form der K - ε - und K - ω -Zweigliedungsmodelle sowie die Kombination beider, das sogenannte Scherspannungstransportmodell (SST), mit Zusatztermen für die auftriebsbedingte Turbulenzgenerierung in den Bilanzgleichungen und der Large Eddy Ansatz betrachtet.

Es wurden Rechnungen zum IAHR "Stratified Mixing Layer" Benchmark [1] mit dem CFD-Code CFX-5 durchgeführt. In diesem Benchmark wird die Vermischung zweier Fluide unterschiedlicher Dichte betrachtet, die sich anfänglich rechts und links einer Trennwand in einer rechteckigen Box befinden. Zum Zeitpunkt Null wird die Trennwand entfernt und die Fluide vermischen sich. Anhand der Rechnungen zum "Stratified Mixing Layer" Benchmark wurde ein geeigneter Modellansatz für die Beschreibung von Fluiden unterschiedlicher Dichte in CFX-5 ausgewählt. Bei diesem Ansatz werden die Fluide unterschiedlicher Dichte als Komponenten einer Flüssigphase beschrieben. Die lokale Gemischdichte des Fluids ist dann eine Funktion der Komponentenanteile. Eine Beschreibung der Fluide unterschiedlicher Dichte als Phasen führt zu einer Entmischung beider Fluide und ist für die Modellierung nicht geeignet.

Weiterhin wurden Modelle analysiert, welche den Einfluss der Auftriebskräfte auf die Strömung enthalten. Die Schlüsselphänomene dichtegetriebener Strömung werden durch Volumenkräfte charakterisiert, die aufgrund der Schwerkraft auf Fluide unterschiedlicher Dichte wirken. Dabei bilden spezielle Quell- und Korrekturterme innerhalb der Transportgleichungen des gewählten Turbulenzmodells den Einfluss des Auftriebs auf die Turbulenz ab. Im Fall des Zweigliedungsmodells wird ein Quellterm in die Gleichung der turbulenten Energie K und ein Korrekturterm in die Gleichung der turbulenten Dissipation ε oder der turbulenten Frequenz ω eingefügt. Basierend auf der Literaturdurchsicht wurde ein neues Modell für einen auftriebsbedingten Quellterm in der Bilanzgleichung für die turbulente Energie vorgeschlagen. In die Aufstellung der Quellterme gehen die zusätzlichen Turbulenzgrößen „turbulenter Massenstrom“ und „Dichtevarianz“ ein. Der Quellterm ist proportional dem Schwankungsprodukt „turbulenter Massenstrom“ $\rho'u$, wobei zusätzliche Bilanzgleichungen für $\rho'u$ und das Schwankungsprodukt der Dichte (Dichtevarianz) gelöst werden. Dieser Quellterm kann grundsätzlich sowohl in Turbulenzmodelle vom Typ K - ε als auch in Reynolds-Stress-Modelle implementiert werden. Dieser Ansatz ist analog zu Turbulenzmodellen für Strömungen an beheizten Wänden, wobei hier als zusätzliche Turbulenzgrößen die turbulenten Wärmeströme und die Temperaturvarianz stehen [2]. In eigenentwickelten vereinfachten Modellen werden anstelle der Bilanzgleichungen algebraische Gleichungen für die zusätzlichen Turbulenzgrößen gelöst. Vier verschiedene Modelle reichen von vollständig differentiellen Bilanzgleichungen über gemischte Ansätze bis hin zu einem algebraischen Modell.

Die Implementierung dieser Größen in den Fluidodynamikcode ANSYS-CFX erfolgt über Zusatzvariablen, während Quell- und Korrekturterme als Anwenderrountinen in der Programmiersprache FORTRAN formuliert werden.

Eine Implementierung in die Reynolds-Stress-Modelle im Code ANSYS-CFX war aus programmtechnischen Gründen nicht möglich. Die Modelle mit zusätzlichen differenziellen Bilanzgleichungen für die zusätzlichen Turbulenzgrößen „turbulenter Massenstrom“ und „Dichtevarianz“ bedingen einen sehr hohen Mehraufwand an Rechenzeit gegenüber den Zwei-Gleichungs-Modellen.

2.2 Validierung der Modelle mit Berücksichtigung auftriebsgenerierter Turbulenz an Experimenten

Die verschiedenen Modelle mit Berücksichtigung auftriebsgenerierter Turbulenz wurden an Experimenten an folgenden beiden Versuchseinrichtungen erprobt:

- Die VeMix-(**V**ertical **M**ixing)-Versuchsanlage wurde speziell zur Validierung der in ANSYS-CFX implementierten turbulenten Auftriebsmodelle im FZD entworfen und aufgebaut. Sie hat eine einfache Geometrie und wurde so ausgelegt, dass die Schwerkraft entlang einer charakteristischen Längenskala, der Höhe, wirkt. Aus 8 Plexiglassegmenten von ca. 625 mm Höhe wurde eine Testsektion von ca. 5 m Höhe aufgebaut. Über einen Einspeisekanal, der geometrisch flexibel angeordnet werden kann, wird Fluid höherer Dichte eingespeist. Die höhere Dichte wird durch den Zusatz von Zuckerlösung erreicht. In der Testsektion wird eine Schichtung von Fluid geringerer (oben) und höherer (unten) Dichte vorgelegt. Bei seitlicher Einspeisung des dichteren Fluids in die obere Schicht ist ein vertikaler Strahl zu erwarten, unterhalb dessen sich eine Vermischungszone herausbildet (siehe Abb. 1).

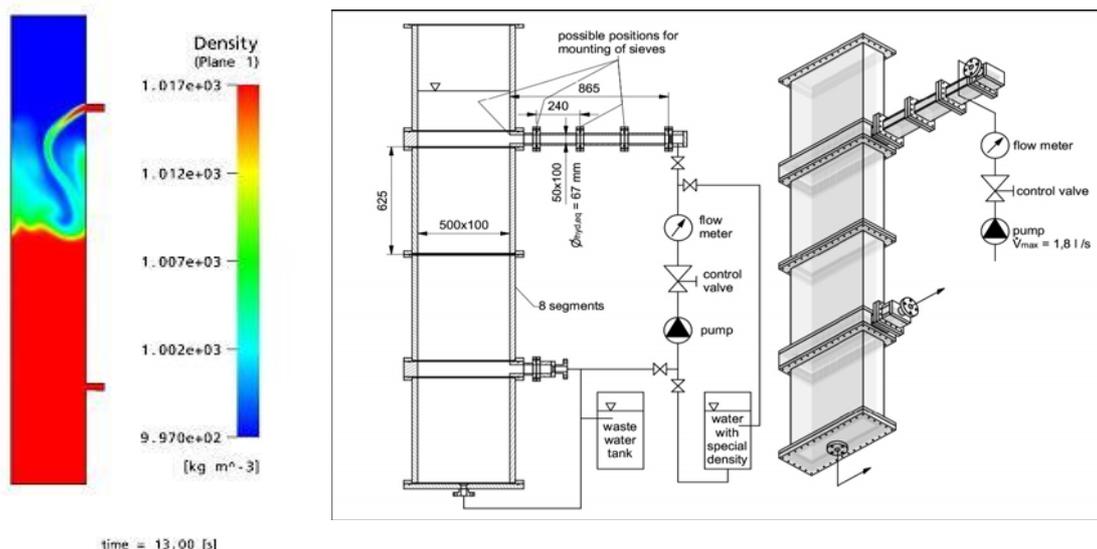


Abb. 1 Aufbau der VeMix-Anlage (rechts) und charakteristisches Strömungsbild (links)

- Die ROCOM-(Rossendorf **CO**olant **M**ixing)-Anlage [3] ist ein skaliertes Reaktormodell im Maßstab 1:5, in dem Vermischungsvorgänge infolge ungleichmäßiger Dichteverteilungen realitätsnah beobachtet werden können. Sie dient der Validierung der Modellierungen von Vermischungsvorgängen, die bei verschiedensten Szenarien der Kühlmittelströmung im Behälter eines Druckwasserreaktors auftreten.

2.2.1 Validierung anhand von VeMix-Experimenten

An der ROCOM-Versuchsanlage sind u.a. generische Experimente zu PTS-Szenarien mit dichtegetriebener Vermischung durchgeführt worden, in denen bei kleinen Massenströmen dichteres Fluid in einen der kalten Stränge der Anlage eingespeist worden ist [4]. Dabei zeigte sich, dass in Abhängigkeit von der Froude-Zahl ein impulsdominiertes oder auftriebsgetriebenes Vermischungsbild zu beobachten ist. Erste Rechnungen zu den Szenarien waren noch nicht vollständig befriedigend. Zwar stimmen die berechneten und beobachteten Strömungsbilder qualitativ gut überein, ebenso wie Mittelwerte des Vermischungsskalars im unteren Ringraum, doch gab es lokal größere Abweichungen. Dabei wurde das bereits in CFX-5 implementierte SST $K-\omega$ Turbulenzmodell mit Quellterm für die auftriebsgenerierte Turbulenzintensität benutzt. Einerseits wurde die Stratifikation des dichteren und weniger dichten Wassers im Kaltstrang in den Rechnungen überschätzt, d.h. die Vermischung wurde hier unterschätzt. Andererseits wurde die Vermischung im Ringraum aber überschätzt. Deshalb wurde entschieden, zunächst generische Probleme in einfacher Geometrie zu untersuchen, um die Defizite der Turbulenzmodelle aufzuzeigen. Die komplexeren Szenarien sollten später mit verbesserten Turbulenzmodellen nachgerechnet werden.

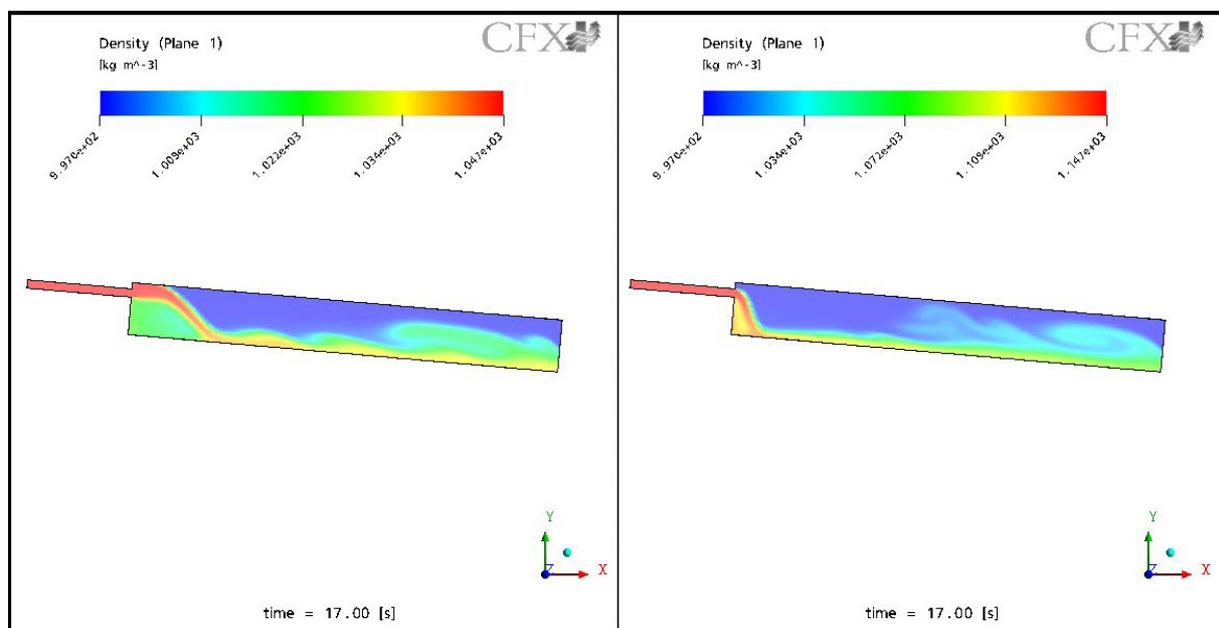


Abb. 2 CFD-Auslegungsrechnungen für ein Benchmark-Experiment mit Einspeisung dichteren Fluids in eine horizontalen Kanal: Dichteverteilung über dem Querschnitt des Kanals für $Fr = 1.0$ (links) und $Fr = 0.57$ (rechts)

Zur Auslegung ggf. aufzubauender Versuchsanordnungen zur generischen Untersuchung der dichtegetriebenen Vermischung wurden CFD Pre-Test-Rechnungen durchgeführt u.a. für die Injektion von Fluid geringerer Dichte in einen Behälter durch ein von oben eingetauchtes Rohr und für die seitliche Einspeisung von Fluid höherer Dichte in einen horizontalen Kanal. Auf Basis dieser Rechnungen sollte ein geeignetes Design für ein Experiment ausgewählt werden, bei dem signifikante Effekte bezüglich auftriebsgenerierter Turbulenz erwartet werden und das dann für Validierungszwecke aufgebaut wird. Abb. 2 (links) zeigt die Dichteverteilung im horizontalen Kanal, berechnet mit dem K-ε-Modell bei einer Dichtedifferenz von $\Delta\rho = 5\%$ und einer Einspeisegeschwindigkeit von $v_{inj} = 0.35\text{ m/s}$ (Froudezahl etwa 1.0). Abb. 2 (rechts) gibt die Verhältnisse für $\Delta\rho = 15\%$ und $v_{inj} = 0.35\text{ m/s}$ ($Fr = 0.5775$) wieder. Der qualitative Übergang zu einer stärker dichtegetriebenen Vermischung mit Verringerung der Froude-Zahl ist zu erkennen.

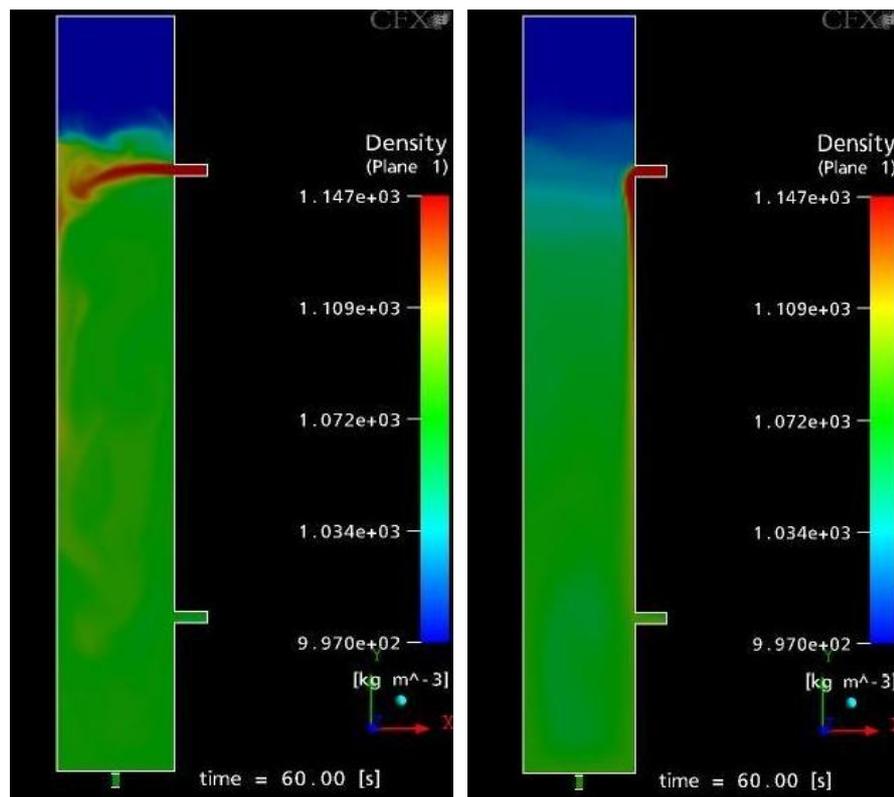
Der Versuchsaufbau mit horizontaler Teststrecke wurde später allerdings verworfen, da sich in einer vertikalen Testsektion (VeMix-Anlage) die dichtegetriebenen Phänomene deutlicher herausbilden. In Pre-Test-Rechnungen zeigte sich, dass auch im Fall einer vertikalen Teststrecke die Froude-Zahl Fr oder interne Richardson-Zahl iRi zur Charakterisierung der bei unterschiedlichen Bedingungen erzeugten Strömungsmuster verwendet werden kann:

$$iRi = \frac{g \cdot L^2 \cdot \Delta\rho}{\rho v_0^2}, \quad iRi = 1/\sqrt{Fr}$$

mit g – Erdbeschleunigung, L – charakteristisches Längenmaß, $\Delta\rho$ – Dichtedifferenz, ρ – Referenzdichte, v_0 – Leerrohrgeschwindigkeit des Fluids. Das charakteristische Längenmaß ist in diesem Fall die Höhe der Schicht leichteren Fluids $L = H_{inlet} - H_{fill}$ zwischen der Höhenposition des Einspeisestutzens H_{inlet} bis zur Höhenposition der Trennschicht zwischen leichterem und dichterem Fluid H_{fill} .

Abb. 3

Impulsdominiertes (links) und auftriebsdominiertes (rechts) Vermischungsbild in Abhängigkeit von der Froude-Zahl oder internen Richardson-Zahl



In Abhängigkeit von dieser Kennzahl bilden sich zwei qualitativ verschiedene Strömungsbilder heraus: ein horizontaler Strahl des eingespeisten schwereren Fluids oder ein vertikales Absinken unmittelbar unterhalb der Einspeisung. Während der horizontale Strahl ein impulsdominiertes Strömungsregime charakterisiert, bedeutet das vertikale Absinken die Dominanz von Dichteeffekten. Im Bereich von Werten der internen Richardson-Zahl um 1.0 findet ein qualitativer Umschlag der Strömungsregime statt (siehe Abb. 3). Die qualitative Differenz der Strömungsbilder ist deutlich größer als im Fall der horizontalen Teststrecke, weshalb das vertikale design letztendlich ausgewählt wurde.

Anhand der ersten VeMix-Rechnungen wurde zunächst die verwendete Gitterauflösung überprüft. Diese wurde solange verfeinert, bis sie sich als ausreichend für die nachfolgenden Simulationsrechnungen erwies, bei denen der Einfluss der verschiedenen Turbulenzmodelle und der implementierten turbulenten Auftriebsmodelle untersucht werden sollte. Dieses Vorgehen entspricht der Anwendung sogenannter „Best Practice Guidelines“ in der numerischen Strömungsmechanik [6].

Für einen ausgewählten Fall (Einspeiserate 1,8 l/s, Dichtedifferenz 10%) wurden Studien zur Wahl des numerischen Gitters durchgeführt. Es wurden verschiedene Gittertypen (bi- exponential oder gleichförmig) mit unterschiedlichen Gitterschrittweiten entlang der Koordinatenachsen bzw. ein unstrukturiertes Gitter mit Vorgabe nur der maximalen Schrittweite betrachtet. Unterhalb einer gewissen Schrittweite (etwa 10 mm) deutet sich eine Konvergenz der berechneten Strömungsbilder an. Dieses Verhalten zeigt sich für jeden Gittertyp. Rechnungen Gittern mit dem SST Turbulenzmodell, welches Produktions- und Dissipationsterme für die auftriebsgenerierte Turbulenz enthält, wurden auf Gittern mit etwa 115.000, 310.000, 478.000 und 589.000 Elementen durchgeführt (entspricht maximalen Schrittweiten von 15, 10, 9 und 8 mm). Die Ergebnisse zeigen, dass sich die berechneten Strömungsbilder für gröbere und feinere Gitter qualitativ unterscheiden können. Während man für grobe Gitter ein Herabfallen des Strahls dichteren Fluids unmittelbar an der Behälterwand erhält, ist bei feineren Gittern die Ausbildung eines horizontalen Jets, der einen Zirkulationswirbel anregt, zu verzeichnen. Eine theoretische Erklärung für dieses Phänomen kann dadurch gegeben werden, dass auf einem gröberen Gitter die Dissipation der turbulenten Energie überschätzt wird, was zu einer Unterdrückung des Zirkulationswirbels führt. Alle Rechnungen sind also auf ausreichend feinen Gittern durchzuführen. Für ein optimiertes Rechengitter mit ca. 120.000 hexahedralen Elementen und bei Verwendung des SST-Turbulenzmodells mit auftriebsbedingten Quell- und Dissipationstermen beträgt die Rechenzeit für eine transiente Rechnung über 150 s auf einem Cluster mit 4 CPU allerdings bereits ca. 15 Stunden.

Erste Versuche mit Farbtracern sollten die prinzipielle Phänomenologie der Vermischung zeigen. In diesen Versuchen erfolgte die Einfärbung des zugespeisten dichteren Fluids mit Uranin-Farbstoff, dessen Fluoreszenz mit einer UV-Lampe angeregt wurde. Qualitativ ist der Umschlag zwischen impulsdominierter und dichtegetriebener Vermischung sehr gut zu erkennen. Abb. 4 (links) zeigt das Strömungsbild bei einem Volumenstrom von 0,4 l/s, rechts - bei 0,7 l/s. Während bei einem Volumenstrom von 0,4 l/s das dichtere Fluid unmittelbar unterhalb des Einspeisestutzens nach unten strömt (vertikaler Jet), bildet sich bei einem Volumenstrom von 0,7 l/s ein horizontaler Jet heraus.

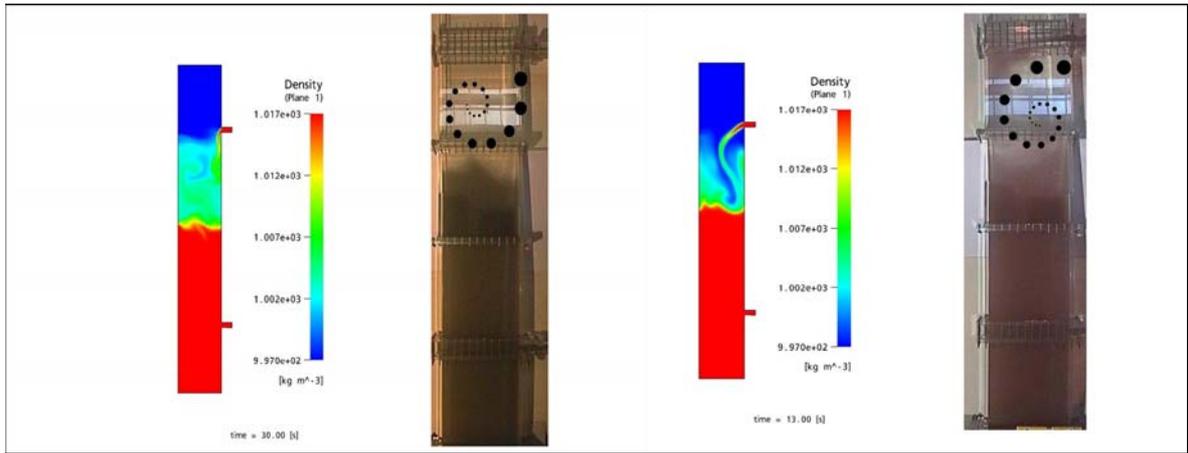


Abb. 4: Beobachtete Strömungsbilder und Ergebnisse von CFD-Rechnungen für zwei Experimente mit einem Volumenstrom von 0,4 l/s (links) und 0,7 l/s (rechts)

In den Rechnungen wurde bei einer Dichtedifferenz von 2 % die Volumenstromrate des eingespeisten dichteren Fluids variiert. In der Testsektion wird eine anfängliche Schichtung aus Fluid geringerer Dichte über Fluid höherer Dichte vorgelegt. Die axiale Position dieser Trennschicht betrug 2 m. Die Strömungsbilder und der qualitative Umschlag im Bereich der Volumenströme zwischen 0,4 und 0,7 l/s stehen in guter Übereinstimmung zwischen Experiment und Rechnung.

In einzelnen Fällen hängen die berechneten Strömungsbilder im Übergangsbereich auch vom gewählten Turbulenzmodell ab. So wurde bei einer Dichtedifferenz von 2 %, einer Position der Trennschicht von 1,5 m und einem Volumenstrom von 0,4 l/s mit dem SST-Turbulenzmodell ohne auftriebsbedingte Quellterme für die Turbulenzintensität ein vertikaler Jet berechnet, während sich mit Quell- und Senkentermen ein horizontaler Jet ergab.

Weiterhin wurden weitere Experimente mit Volumenströmen von 0,5; 0,45; 0,4 und 0,3 l/s und einer Position der Dichtegrenzschicht bei 2,0 m durchgeführt, in denen - in Übereinstimmung mit der CFD-Rechnung - der horizontale Jet beobachtet wurde.

Neben dem qualitativen Vergleich der charakteristischen Strömungsbilder erfolgte auch eine quantitative Auswertung von Videodaten (Frequenzanalysen) über Fast-Fourier-Transformation. Zum quantitativen Vergleich von Experiment und Simulation wurde die Oszillationsfrequenz des wellenförmig ausgelenkten Übergangsbereichs zwischen schwerem und leichtem Fluid im horizontalen Strahlexperiment gemessen. Sowohl die gemessenen, als auch die berechneten transienten Dichteverteilungen wurden einer Fast-Fourier-Analyse unterzogen. Die Abhängigkeit der charakteristischen Frequenz vom Einspeisemassenstrom wird in guter Übereinstimmung zwischen Experiment und Rechnung gefunden. Abb. 5 zeigt die Frequenz der Fluktuationen in der Grenzschicht zwischen dichtem und weniger dichtem Fluid vom Massenstrom.

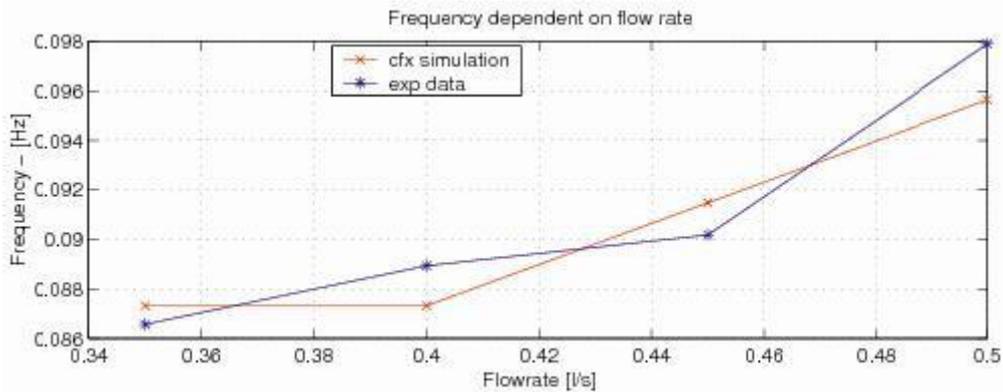


Abb. 5 Frequenz der Geschwindigkeits- und Dichtefluktuationen in Abhängigkeit von der Einspeiserate dichterem Fluids

Um weitere quantitative Daten gewinnen zu können, wurde ein sogenannter "Surface Wire Mesh Sensor" (SMWS) konstruiert und auf die Innenwand einer Testsektion des VeMix-Versuchsstandes aufgebracht (Abb. 6). Das Messprinzip des SWMS besteht in der Bestimmung der elektrischen Leitfähigkeit des mit einer Salzlösung getracerten Fluids in einer wandnahen Schicht an 32 x 32 Messpunkten. Aus der Leitfähigkeit kann nach geeigneter Kalibrierung über die Konzentration des dem dichteren Fluid beigemischten Tracers auf die lokale Fluidichte geschlossen werden.

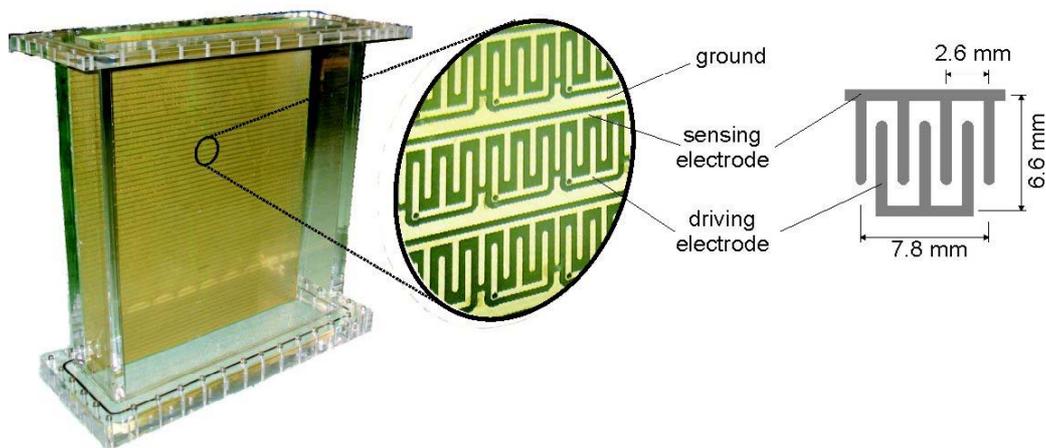


Abb. 6: Oberflächensensor mit 64 x 64 Messpositionen auf der Innenwand einer Testsektion

Zwei neue Testserien wurden mit Verwendung des neuen Surface-Wire-Mesh-Sensors durchgeführt. Sowohl die qualitativen Strömungsbilder als auch quantitative Parameter wie die Penetrationszeit des Jets dichteren Fluids, in der dieser die Schicht weniger dichten Fluids durchdringt, die aus der CFD-Rechnung und der Visualisierung der SWMS-Daten gewonnen wurden, zeigen eine gute Übereinstimmung. Für ein Experiment mit einer Einspeiserate von 0.35 l/s und einer Dichtedifferenz von 2% wurde die z.B. Penetrationszeit des Jet sowohl aus den SWMS-Daten als auch aus der Rechnung zu $T = 16$ s bestimmt. Das charakteristische Strömungsbild ist ein horizontaler Jet ohne Reflexion an der gegenüberliegenden Wand der Testsektion (siehe Abb. 7). Aus der Abb. ist aber

auch ersichtlich, dass die Berücksichtigung auftriebsgenerierter Turbulenz kaum einen Einfluss auf die Rechenergebnisse hat.

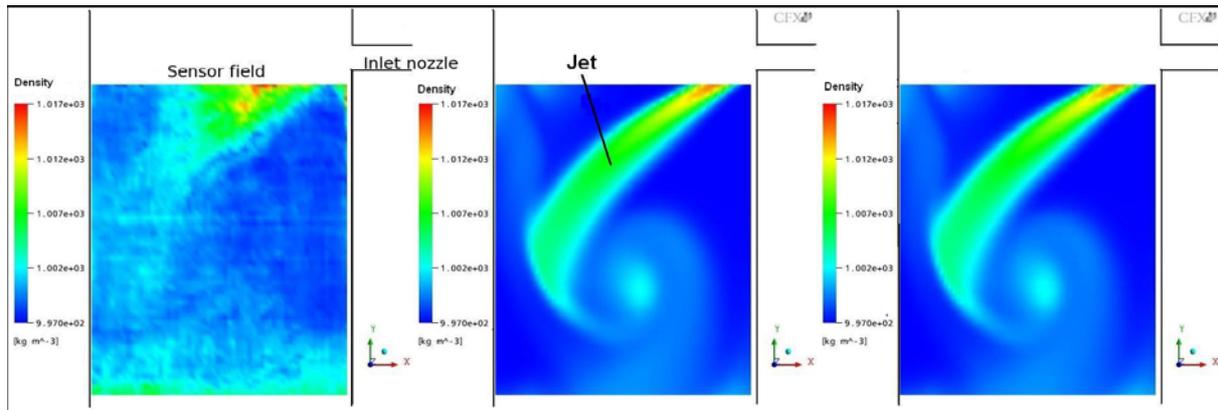


Abb. 7: Gemessene Dichteverteilung aus SWMS-Daten (links) und mit CFX berechnete Verteilung in der Testsektion des VeMix-Versuchsstandes für ein Experiment mit einer Einspeiserate von 0,35 l/s und einer Dichtedifferenz von 2 % (Mitte: SST-Turbulenzmodell mit auftriebsbedingten Quelltermen, rechts ohne diese Quellterme)

Eine weitere Studie zeigt die ausgeprägte Sensitivität der Strömungsphänomene bei der auftriebsgetriebenen Vermischung in Abhängigkeit von verschiedenen Parametern. In Experimenten wurde der Einfluss der Randbedingungen in der Zuspeseileitung für das dichtere Fluid im oberen Teil der Anlage untersucht. In den CFD-Simulationen wurde zunächst angenommen, dass die Zuspeseileitung bei Start der Einspeisung dichteren Fluids bereits bis zum Einspeisestutzen mit diesem Fluid gefüllt ist. Eine genauere Untersuchung ergab jedoch, dass sich bei den Experimenten in der Zuspeseileitung noch ein Rest Wasser mit normaler, also geringerer Dichte befindet. Dieses Volumen beträgt ca. 4,7 l. Seine Berücksichtigung führt einerseits zu einer Zeitverzögerung des Eindringens des dichteren Fluids in die vertikale Testsektion, zum anderen aber auch zu einer Verschiebung der internen Richardson-Zahl, da sich die Höhe der Stratifikationsgrenzschicht ändert, welche in diese Kennzahlen als charakteristischer Längenmaßstab eingeht. Werden die Randbedingungen wie beschrieben korrekt berücksichtigt, so wird in der CFD-Simulation das experimentell beobachtete Strömungsbild berechnet (impulsdominiert), wird aber das Restvolumen normalen Wassers in der Einspeiseleitung nicht berücksichtigt, so erhält man in der Rechnung einen vertikalen Jet (dichtedominiert), siehe Abb. 8.

An einem ausgewählten Testfall (VeMix-Experiment mit 2 % Dichtedifferenz, Volumenstrom 0,45 l/s, Höhe der Dichtegrenzschicht 2 m) mit Auftreten eines horizontalen Jets wurden verschiedene Turbulenzmodelle getestet:

- Large-Eddy-Simulation (LES)
- Scale Adaptive Simulation (SAS)
- Detached-Eddy-Simulation (DES)
- Shear Stress Transportmodell (SST), das eine Kombination aus K- ϵ -modell und K- ω -Modell darstellt und somit zur Gruppe der RANS-Modelle gehört.

Die numerischen Simulationen haben gezeigt, dass die Turbulenzmodelle mit auftriebsbedingten Zusatztermen die dichtegetriebene Strömung nur unmaßgeblich merklich beeinflussen, da in den mit den verschiedenen Modellen erhaltenen Ergebnissen keine signifikanten Unterschiede identifiziert werden konnten, die es erlauben würden, Vor- oder Nachteile der unterschiedlichen Modellansätze zu bewerten. Die Ursache ist darin zu sehen, dass die durch Mischung von zwei Fluiden generierten Dichteunterschiede, im Gegensatz zu thermisch bedingten Dichteunterschieden bei großen Temperaturdifferenzen, offenbar zu gering sind.

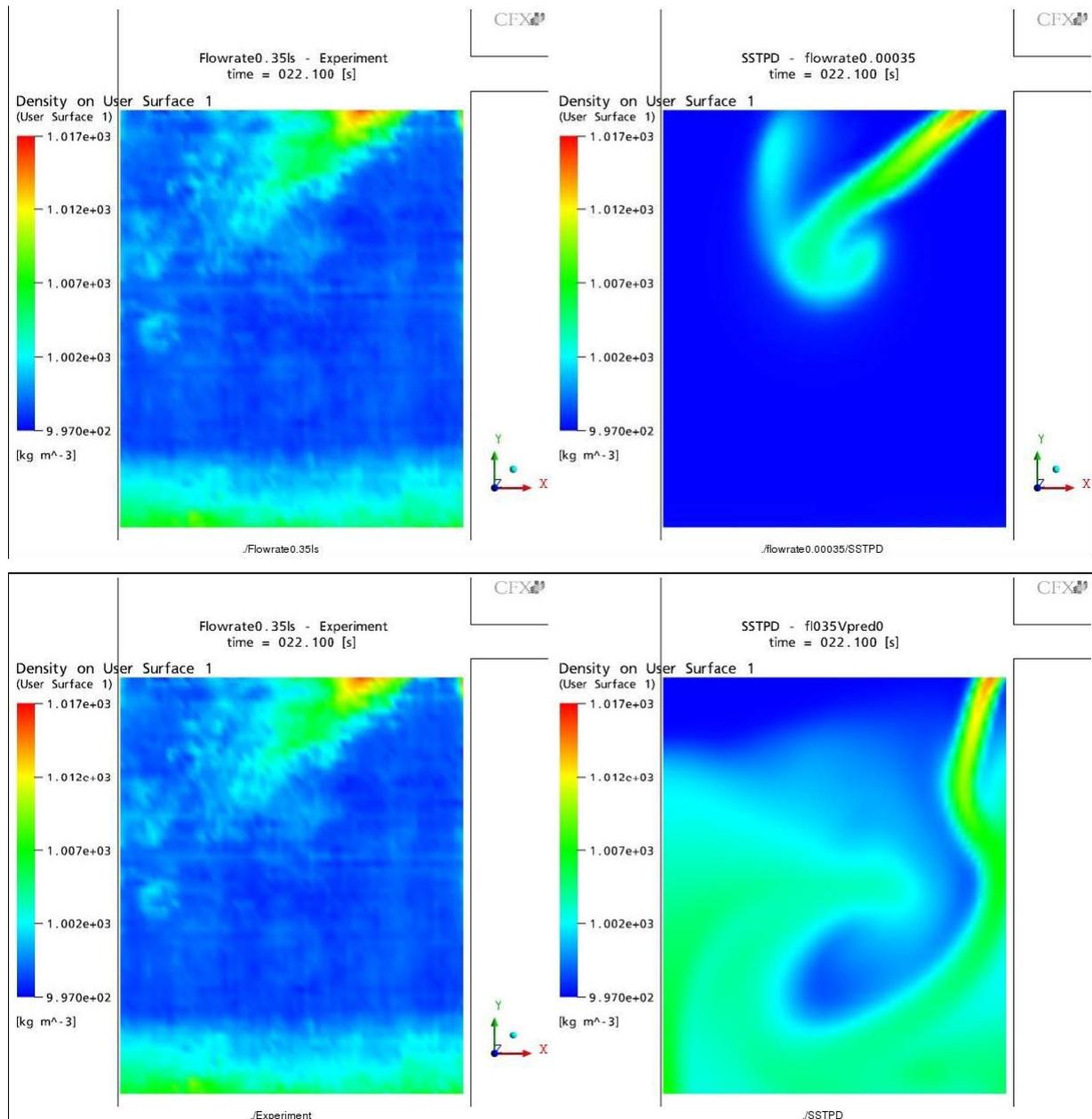
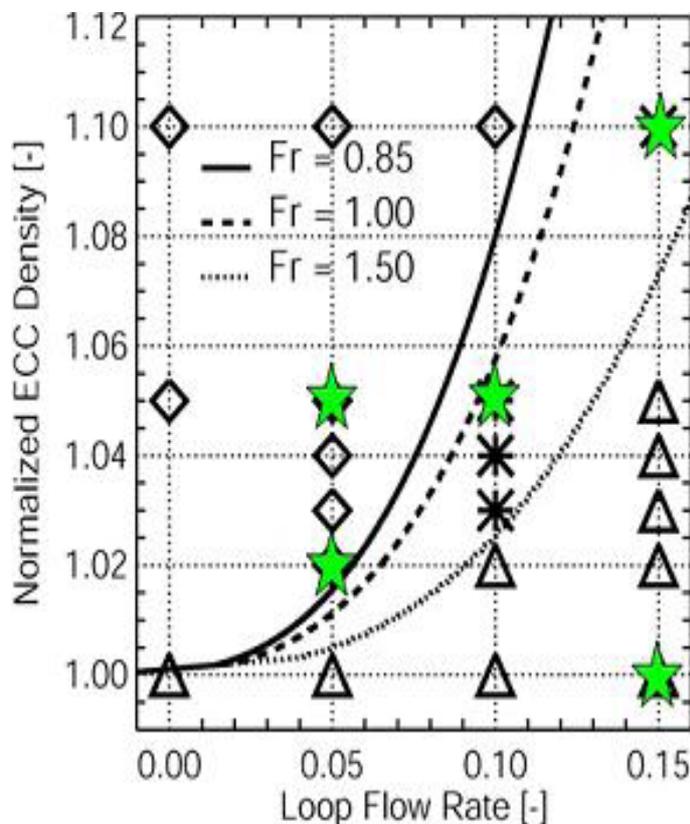


Abb. 8: Strömungsbild (Dichteverteilung) bei Einspeisung dichteren Fluids - links Visualisierung der SWMS-Messdaten, rechts CFD-Rechnung ohne Berücksichtigung des Restwassers im Einspeisestutzen

2.2.2 Validierung anhand von ROCOM-Experimenten

Ziel des Vorhabens war letztendlich, die CFD-Modellierung dichtegetriebener Vermischung im Hinblick auf die Beschreibung von Borverdünnungs- und PTS-Szenarien zu verbessern. Dazu waren die weiterentwickelten Modelle an Experimenten an einer Versuchsanlage zu validieren, welche die Verhältnisse in der realen Reaktoranlage skaliert modelliert, also an der ROCOM-Anlage. Da aber bereits die Studien zum Einfluss der auftriebsgenerierten Turbulenz in einfacher Geometrie an der VeMix-Anlage gezeigt haben, dass die unterschiedlichen Modelle für die auftriebsgenerierte Turbulenz die dichtegetriebenen Vermischungsprozesse kaum beeinflussen, wurden bei der Nachrechnung von ROCOM-Experimenten noch weitere Einflüsse untersucht, da angenommen werden musste, dass bei den komplexen Strömungsverhältnissen in der ROCOM-Anlage bzw. im Reaktor andere Effekte die Turbulenzmodellierung überdecken. Während die VeMix-Experimente auf eine möglichst separate Untersuchung der auftriebsgetriebenen Vermischung in einer vertikalen Dichteschichtung zielen, ist die Phänomenologie der Vermischung an ROCOM mit Modellierung der realen Anlagengeometrie komplexer.

Die nachgerechneten generischen PTS-Tests sind in der Froude-skalierten Testmatrix (Abb. 9) durch grüne Sterne gekennzeichnet (Abszisse: Massenstrom in der Einspeiseschleife (relativ zum Nominalwert)).



In der Testmatrix wurden die Dichtedifferenz und der vorgelegte Massenstrom im kalten Strang, in den die Einspeisung erfolgt, systematisch variiert. Der Einspeisemassenstrom selbst wurde konstant gehalten. Die Isolinie Froude = 1.0 kennzeichnet den Übergang zwischen auftriebs- und impulsdominierter Vermischung. In den PTS-Testfällen traten Differenzen zwischen den berechneten und gemessenen Konzentrationen des eingespeisten Fluids im Ringraum und am Kerneintritt auf. Es sollte untersucht werden, ob diese Differenzen auf Unterschiede in der Modellierung der auftriebsinduzierten Turbulenz begründet sind.

Abb. 9: Testmatrix von PTS-Experimenten an der ROCOM-Versuchsanlage mit Kennzeichnung der nachgerechneten Versuche

Es stellte sich heraus, dass die Modellierung der Stratifizierung der Fluide unterschiedlicher Dichte bereits im kalten Strang, in dem die Einspeisung erfolgt, auf dem Weg von der Einspeisestelle zum RDB-Eintrittsstutzen, von entscheidender Bedeutung ist. Wird diese Stratifizierung gut beschrieben, ist auch die Übereinstimmung der im Ringraum gemessenen Konzentrationen mit den berechneten gut. Der Einfluss der Dichtestratifikation im kalten Strang dominiert gegenüber der auftriebsbedingten Turbulenz bei der Vermischung im Ringraum.

Mit Erweiterung des berechneten Strömungsgebietes auf längere Kaltstrangabschnitte stromaufwärts der Kaltwassereinspeisung konnte die Übereinstimmung der berechneten Tracerverteilung am Reaktoreintritt mit den Messdaten deutlich verbessert werden. Für die Rechnungen wurde ein verfeinertes Nodalisierungsgitter für ROCOM mit ca. 2 Millionen Nodes erstellt.

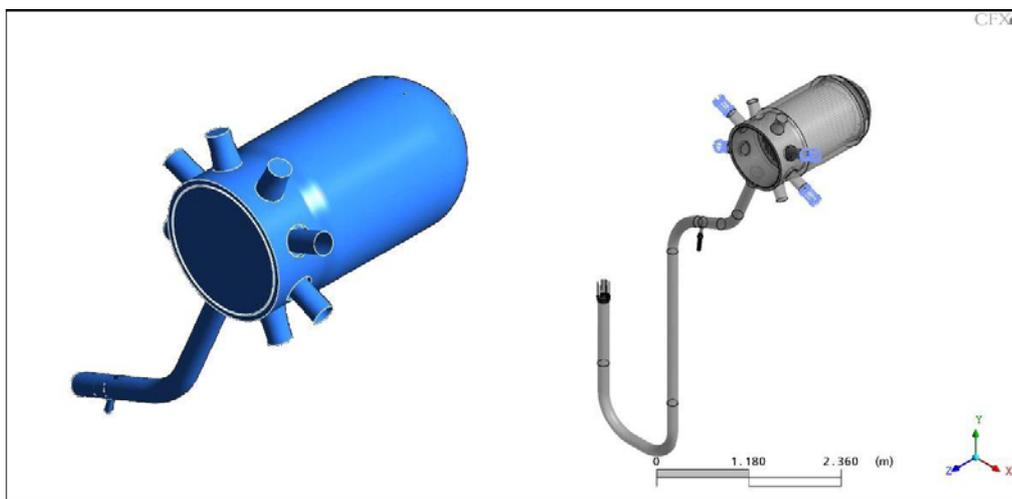


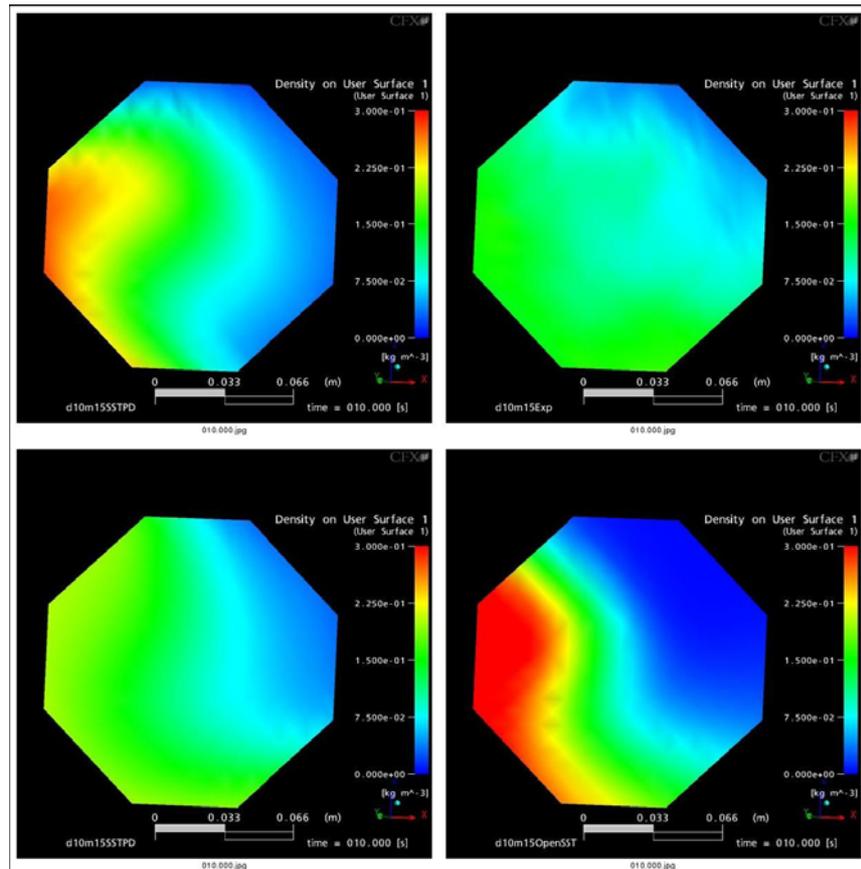
Abb.10: Vereinfachtes (links) und erweitertes (rechts) Geometriemodell der ROCOM-Anlage

Rechnungen mit einem erweiterten geometrischen Modell (Abb. 10) ergaben gegenüber früheren Rechnungen mit vereinfachter Geometriemodellierung eine deutlich bessere Übereinstimmung der Dichte- bzw. Tracerkonzentrationsverteilung am Reaktoreintritt. Insbesondere die Abweichungen bei Froude-Zahlen > 1 wurden deutlich reduziert (siehe Abb. 11).

Oben rechts in dieser Abbildung ist die gemessene Tracerverteilung dargestellt, unten rechts die früher berechnete Verteilung. In der linken Bildhälfte sind die berechneten Verteilungen mit dem erweiterten Geometriemodell zu sehen. Eine deutliche Verbesserung der Übereinstimmung mit den Messungen liefert noch die Initialisierung des Geschwindigkeitsfeldes in der Weise, dass vor Beginn der Einspeisung dichteren Fluids in einer transienten Rechnung zunächst das Geschwindigkeitsfeld ermittelt wird, während die Rechnungen ohne Initialisierung vom ruhenden Medium aus als Anfangsbedingung ausgehen.

Die Stratifikation im kalten Strang wird in den neuen Rechnungen besser beschrieben. Dies ist dadurch zu erklären, dass durch die größere "Einlauflänge" bzw. Initialisierung des Geschwindigkeitsfeldes ein realistischeres Geschwindigkeits- und Turbulenzprofil über den Rohrquerschnitt berechnet wird, welches letzten Endes den Grad der Vermischung oder Stratifikation bestimmt. Dies gilt für alle untersuchten Turbulenzmodelle.

Abb. 11:
 Konzentrationsprofil
 über dem Gittersensor
 am
 Reaktoreintrittsstutzen
 für ein Experiment mit
 10 % Dichtedifferenz
 und 15 %
 Massenstrom,
 Zeitpunkt $T = 10$ s.



Oben rechts: Experiment. Unten rechts: vereinfachtes Geometriemodell ohne Initialisierung.

Oben links: Rechnung mit erweitertem Geometriemodell, ohne Initialisierung des Geschwindigkeitsfeldes.

Unten links: erweitertes Geometriemodell, mit stationärer Initialisierung des Geschwindigkeitsfeldes.

Zu den ROCOM-Experimenten mit dichtegetriebener Vermischung wurden weitere CFD-Rechnungen mit systematischer Variation des Rechengebietes, der Anfangs- und Randbedingungen sowie der Turbulenzmodelle durchgeführt. Für das ausgewählte Szenario D10M15 (10 % Dichteunterschied bei einem Massenstrom im kalten Strang von 15 % des nominalen) wurde nun eine Matrix von CFD-Simulationen mit folgenden Variationen abgearbeitet:

- Rechengebiet: verkürzter kalter Strang und voller RDB; vollständiger kalter Strang und Teil des RDB; voller kalter Strang und voller RDB;
- Anfangsbedingungen: ruhendes Medium bzw. Initialisierung des Geschwindigkeitsfeldes in einer stationären Rechnung;
- Turbulenzmodelle: laminar, K-epsilon-Modell, SST-Modell, Baseline Reynolds-Stress-Modell, Detached-Eddy-Simulation.

Detached-Eddy-Simulation (DES) entspricht einer Kombination aus Large-Eddy-Simulation (LES) und RANS-Modellierung in Wandnähe.

Um die Vielzahl der Varianten bewerten zu können, wurden folgende quantitativen Kriterien ausgewertet:

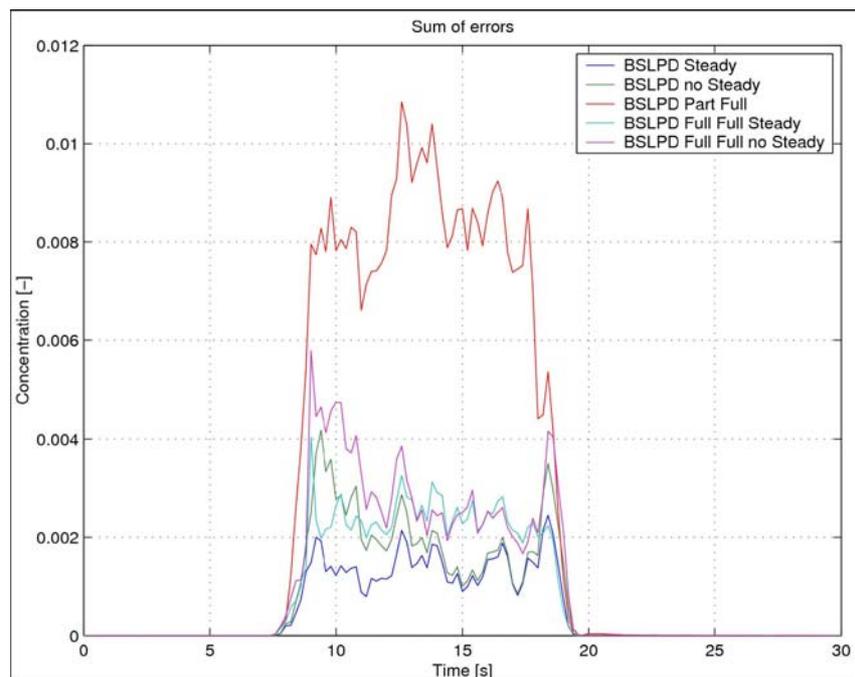
- mittlere quadratische Abweichung der Tracerkonzentration am Kerneintritt
- zwischen Rechnung und Experiment für jeden Zeitpunkt t ,
- Integral dieser Abweichung über der Zeit,
- Maximalwert der Tracerkonzentration am Kerneintritt zu jedem Zeitpunkt,
- Maximalwert über die gesamte Messzeit,
- Verhältnis dieser Maximalwerte zwischen Rechnung und Experiment.

Auf der Basis dieser Kriterien wurde ein Ranking der Rechnungen erstellt. Aus dem Ranking der Variantenrechnungen geht klar hervor, dass die Rechnungen mit voller Modellierung des RDB und erweitertem Kaltstrangmodell die geringsten Abweichungen zum Experiment aufweisen. Auch die Initialisierung des Geschwindigkeitsfeldes verbessert die Übereinstimmung.

Abb. 12 zeigt die mittlere quadratische Abweichung der Tracerkonzentration am Kerneintritt als Beispiel für die Variantenrechnungen mit dem Baseline-Reynolds-Stress-Modell. Die Variante mit dem verkürzten Kaltstrangmodell ("Part Full") weist eindeutig den größten Fehler auf. Die Varianten mit Initialisierung des Geschwindigkeitsfeldes in einer stationären Rechnung ("Steady") zeigen geringere Fehler als die Varianten mit ruhendem Medium als Anfangsbedingung ("no Steady"). Die Unterschiede zwischen den Rechnungen mit verschiedenen Turbulenzmodellen sind demgegenüber von untergeordneter Bedeutung. Ein eindeutiges Ranking der Turbulenzmodelle ist deshalb nicht möglich. Die laminare Rechnung liegt im Ranking eindeutig auf dem letzten Platz. K- ϵ -Modell, SST-Modell und Reynolds-Stress-Modell sind nicht eindeutig zu werten. Die Detached-Eddy-Simulationen ergeben keine wesentlichen Unterschiede zu anderen Turbulenzmodellen. In den Ergebnissen ist kein eindeutiger Vorteil der DES zu erkennen.

Abb. 12

Fehlersumme der Tracerkonzentration in der Kerneintrittsebene (Abweichungen von den Messdaten) in Variationsrechnungen mit dem Baseline-Reynolds-Stress-Modell



2.3 Skalierung auf die Originalanlage

Bei der Skalierung strömungsmechanischer Phänomene sind grundsätzlich gewisse dimensionslose Kennzahlen einzuhalten.

$$\text{Reynolds-Zahl} \quad \text{Re} = \frac{\mathbf{w} \cdot \mathbf{L}}{\nu}$$

w – Geschwindigkeit,
 L – charakteristisches Längenmaß
 ν – kinematische Zähigkeit

$$\text{Strouhal-Zahl} \quad \text{Sr} = \frac{\mathbf{L}}{\mathbf{w} \tau}$$

τ – charakteristische Zeitkonstante

$$\text{Froude-Zahl} \quad \text{Fr} = \mathbf{w} / \sqrt{\mathbf{g} \cdot \mathbf{L} \cdot \frac{\Delta \rho}{\rho}}$$

ρ – Dichte des Fluids, $\Delta \rho$ - Dichtedifferenz

Um die Übertragbarkeit von experimentellen Ergebnissen von einem skalierten Versuchsstand auf die Originalanlage zu gewährleisten, sind die für die jeweiligen Phänomene relevante Kennzahlen einzuhalten. Die Reynolds-Zahl ist dabei ein Maß für den Turbulenzgrad der Strömung. Die Strouhal-Zahl ist eine Kennzahl für die Zeitskala transienter Vorgänge. Als charakteristische Zeitkonstante kann die Umlaufzeit des Fluids durch die Anlage oder die Durchlaufzeit z.B. durch den Ringraum angesehen werden. Die Froude-Zahl ist, wie bereits weiter oben diskutiert, ein Maß für die Relevanz von Trägheitskräften gegenüber Auftriebskräften.

Die Versuchsanlage ROCOM ist gegenüber der originalen Reaktoranlage im Maßstab 1:5 skaliert. Die ROCOM-Anlage wurde so ausgelegt, dass die Kühlmittelgeschwindigkeiten ebenfalls um einen Faktor 5 skaliert ist. Die Strouhal-Zahl wird damit eingehalten. Die Reynolds-Zahl ist dagegen in der Versuchsanlage um etwa zwei Größenordnungen kleiner als im Reaktor, da Geschwindigkeit und Längenmaß jeweils 1:5 skaliert sind, zusätzlich aber noch die kinematische Viskosität bei den höheren Temperaturen im Reaktor kleiner ist. Die Reynolds-Zahl liegt aber auch noch in der ROCOM-Anlage im hochturbulenten Bereich. Auf der Grundlage von numerischen Scale-up-Studien wurde gefunden, dass der Einfluss des Scalings im hochturbulenten Bereich vernachlässigbar ist. Wichtig ist aber die Einhaltung der Froude-Zahl, da sie den Umschlag zwischen zwei grundlegend verschiedenen Vermischungsebenen, der auftriebsgetriebenen und der impulsdominierten Vermischung beschreibt. Da die Geschwindigkeiten in der Originalanlage um einen Faktor 5 höher sind als im Modell, muss für die Einhaltung der Froude-Zahl der Ausdruck unter der Wurzel um einen Faktor 25 höher sein. Das Längenmaß ist um einen Faktor 5 größer, so dass in der Originalanlage ebenfalls um einen Faktor 5 höhere Dichteunterschiede unterstellt werden müssen, um in Original und Modell die gleichen Vermischungsbilder zu erreichen. ROCOM-Experimente mit Dichtedifferenzen von 2% entsprechen also Szenarien mit Dichteunterschieden von 10 % im Reaktor. Diese Skalierung wurde in CFD-Rechnungen für ein Experiment mit einer Dichtedifferenz von 2 % gezeigt.

In dem Experiment wird ein mögliches Szenario für einen Störfall mit kleinem Leck simuliert. Bei einem heißseitigen Leck und heißseitiger Noteinspeisung (Szenario „heiß/heiß“) kann es in den beiden nicht bespeisten Schleifen zum Abriss des Naturumlaufs und zur Wärmeabfuhr im Reflux-Condenser-Betrieb kommen. In den beiden anderen Schleifen läuft der Naturumlauf auf rd. 5 % des Nominalwertes während der gesamten Transiente relativ gleichmäßig durch. Nach einer Reflux-

Condenser-Phase kommt es in den beiden nicht bespeisten Schleifen zum Wiederanlaufen des Naturumlaufs. Beide Schleifen laufen innerhalb von 25 s auf einen Wert von rd. 6 % des Nominalwertes hoch. In diesen beiden Schleifen haben sich deborierte Pfropfen gebildet, die den gesamten Pumpenbogen ausfüllen. Zwischen den Pfropfen und dem Kühlmittel der durchlaufenden Schleifen stellt sich ein Temperaturunterschied von rd. 11.5 K ein, wobei die Pfropfen die höhere Temperatur besitzen. Zusammen mit dem Dichteunterschied zwischen boriertem und nicht boriertem Kühlmittel ergibt sich eine Dichtedifferenz von 2 %.

Abb. 13 und 14 zeigen die Verteilung des Tracers, welcher das unborierte Fluid modelliert, jeweils im oberen und unteren Teil des Ringraums, abgewickelt über den Umfang entlang einer vertikalen Zeitachse.

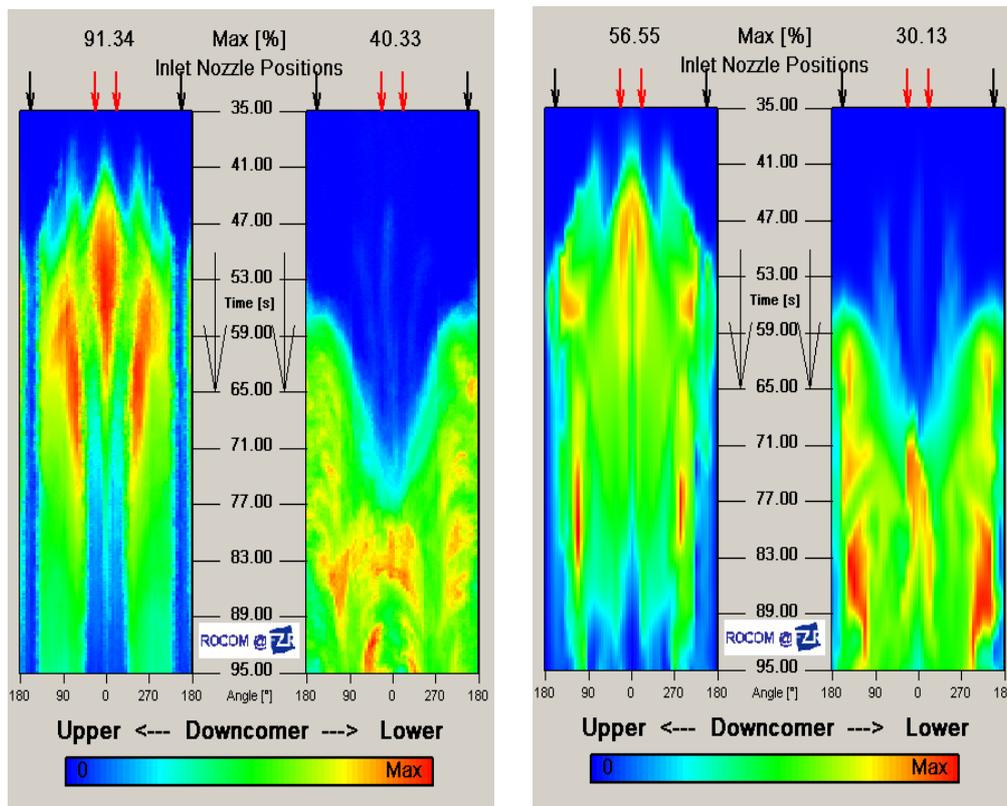


Abb. 13: Tracerkonzentration im Experiment an der ROCOM-Anlage (links) und in der CFD-Rechnung (rechts)

Experiment und Rechnung zeigen sehr ähnliche Vermischungsbilder. es ist zu erkennen, dass sich die zwei Teilströme schwach borierten Wassers aus den angelaufenen Schleifen im unteren teil des Ringraums vereinen. Abb. 14 zeigt die Verteilungen der Tracerkonzentration in den CFD-Rechnungen für die Originalgeometrie des Reaktors, die der 1:5 hochskalierten Geometrie der Versuchsanlage entspricht. Links sind die Ergebnisse der Rechnung mit gleicher Froude-Zahl in der Reaktoranlage wie im Experiment abgebildet, also bei einer Dichtedifferenz von 10 % anstatt 2 % im Experiment. Dieses Vermischungsbild zeigt eine starke Ähnlichkeit mit dem Experiment und der Nachrechnung für die ROCOM-Anlage. Rechts ist die Tracerverteilung abgebildet, wie sie bei gleicher Dichtedifferenz, aber somit Nichteinhaltung gleicher Froude-Zahl erhalten wird. Es zeigt sich ein qualitativ völlig anderes Strömungsbild.

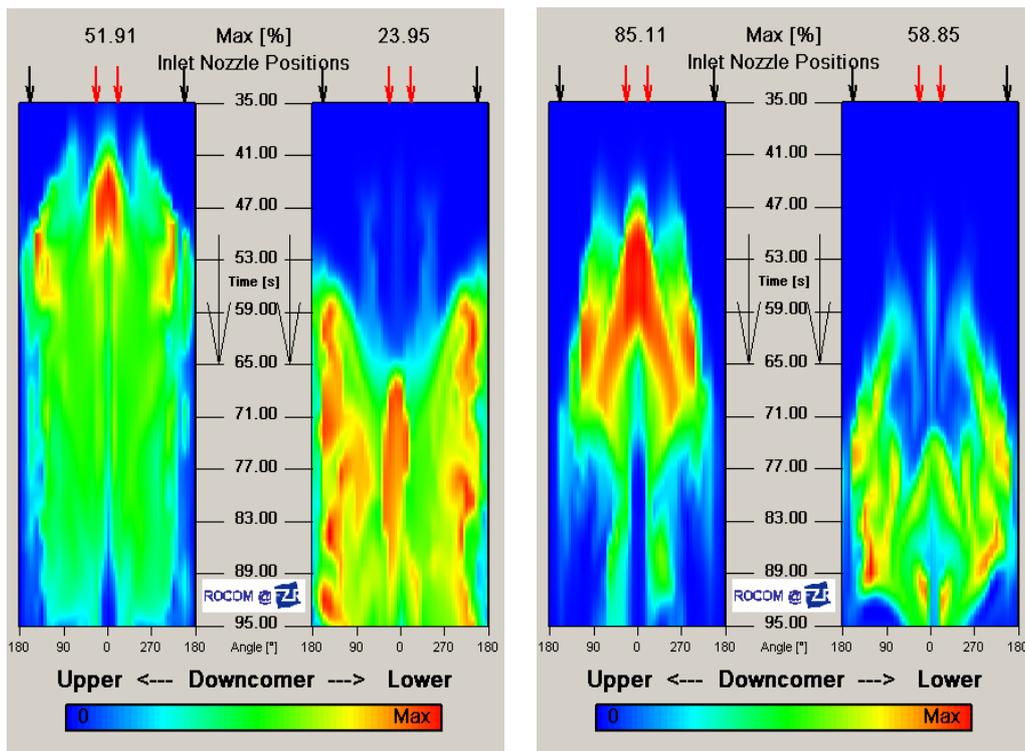


Abb. 14: Tracerverteilung im Ringraum in der CFD-Rechnung für die Originalanlage mit Einhaltung der Froude-Zahl (links) und mit gleicher Dichtedifferenz (rechts)

Die Rechnungen demonstrieren die Notwendigkeit der Einhaltung der Froude-Skalierung bei der Übertragung von experimentellen Ergebnissen von der Versuchs- auf die Originalanlage.

2.4 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass mit einer verbesserten Modellierung auftriebsgenerierter Turbulenz die Simulation dichtedomierter Vermischungsprozesse kaum verbessert werden kann. Die Unterschiede zwischen den Rechnungen mit verschiedenen Turbulenzmodellen sind von untergeordneter Bedeutung. Ein eindeutiges Ranking der verschiedenen Turbulenzmodelle war deshalb nicht möglich.

Es wurde jedoch nachgewiesen, dass die Randbedingungen für die Strömung im kalten Strang der Reaktoranlage, bereits weit vor dem Eintritt in den Reaktor, einen entscheidenden Einfluss auf die Vermischung haben. Die Geschwindigkeits- und Turbulenzprofile, die sich einstellen, beeinflussen die Stratifikation im kalten Strang und entscheidend und somit letztendlich auch die Temperatur- bzw. Borkonzentrationsverteilung innerhalb des Reaktordruckbehälters. Diese lassen sich aber nur korrekt simulieren, wenn ausreichend große Abschnitte des kalten Stranges mit modelliert werden.

3. Voraussichtlicher Nutzen

Das Vorhaben leistete einen Beitrag zur Entwicklung verbesserter, validierter Werkzeuge und Methoden für die CFD-Simulation der Vermischung von Fluiden unterschiedlicher Dichte. Die CFD-Simulation dichtegetriebener Vermischung ist Bestandteil einer qualifizierten Methode zur Analyse von Störfallszenarien mit Borverdünnung und PTS-Szenarien in Kernreaktoren. Es wurden weiterentwickelte Turbulenzmodelle für auftriebsgetriebene Strömungen in den CFD-Code ANSYS-CFX eingebaut. Es erwies sich allerdings, dass diese Modelle im Bereich der für die betrachteten Störfallszenarien relevanten Dichtedifferenzen keine messbare Verbesserung der Turbulenzmodellierung bewirken. Allerdings konnte gezeigt werden, dass die Stratifikation von Strömungen von Fluiden unterschiedlicher Dichte ganz wesentlich von der korrekten Berücksichtigung von Anfangs- und Randbedingungen für Geschwindigkeits- und Turbulenzprofile im Strömungsgebiet abhängt und wie diese besser als bisher berechnet werden können. Damit wurde letztendlich doch eine Verbesserung der Genauigkeit der Simulation dichtegetriebener Vermischung erreicht.

Literatur

Referenzen

- [1] R. E. Uittenbogaard : Stratified Mixing Layer – Test Problem 14th meeting IAHR Working Group on Refined Modelling of Flows, Delft Hydraulics, 1989
- [2] K. Hanjalic: “One-point closure models for buoyancy driven turbulent flows”, Fluid Mechanics 34 (2002) pp.321–347, 2002
- [3] G. Grunwald, T. Höhne, S. Kliem, H.-M. Prasser, K.-H. Richter, U. Rohde, F.-P. Weiß: „Kühlmittelvermischung in Druckwasserreaktoren - Teil 2, Experimentelle Ausrüstung und Simulation der Vermischung“, Report FZD-367, Rossendorf, 2003.
- [4] Rohde, U.; Kliem S.; Höhne T.; Karlsson R.; Hemström B.; Lillington J.; Toppila T.; Elter J.; Bezrukov Y.: “Fluid mixing and flow distribution in the reactor circuit - part 1: Measurement data base”, Nuclear Engineering and Design 235 (2005) pp. 412–443
- [5] Rohde, U.; Höhne, T.; Kliem, S.; Hemström, B.; Scheuerer, M.; Toppila, T.; Aszodi, A.; Boros, I.; Farkas, I.; Muehlbauer, P.; Vyskocil, V.; Klepac, J.; Remis, J.; Dury, T.: “Fluid mixing and flow distribution in a primary circuit of a nuclear pressurized water reactor – Validation of CFD codes”, Nuclear Engineering and Design 237(2007)15-17, 1639-1655
- [6] F. Menter et al.: CFD Best Practice Guidelines for CFD Code Validation for Reactor Safety Applications, Deliverable D01 of the ECORA project, February 2002

Publikationen, die im Rahmen des Vorhabens entstanden sind:

- [7] R. Vaibar, T. Sühnel, M. J. Da Silva: Bouyancy driven turbulent flow and experimental validation at the VeMix test facility, Conf. on Computational Mechanics, 5.-7.11.2007, Castle Nectiny (Czech Republic)

- [8] R. Vaibar, T. Höhne: New aspects in modelling buoyancy driven flow at the ROCOM test facility, ANSYS Conference & 25. CADFEM User's Meeting, 21.-23.11.2007, Dresden (Germany)
- [9] Da Silva, M. J.; Thiele, S.; Höhne, T.; Vaibar, R.; Hampel, U.: Experimental studies and CFD calculations for buoyancy driven mixing phenomena, XCFD4NRS - Experiments and CFD Code Applications to Nuclear Reactor Safety, 10.-12.09.2008, Grenoble, France (MIX-02)
- [10] Vaibar, R.; Sühnel, T.; Da Silva, M. J.: Buoyancy driven turbulent flow and experimental validation at the VeMix test facility, Applied and Computational Mechanics 1(2007), 677-684
- [11] Höhne, T.; Kliem, S.; Vaibar, R.: Experimental and numerical modeling of transition matrix from momentum to buoyancy-driven flow in a pressurized water reactor, 16th International Conference on Nuclear Engineering ICONE16, 11.-15.05.2008, Orlando, USA
- [12] Höhne, T.; Kliem, S.; Vaibar, R.: Experimental and numerical modeling of transition matrix from momentum to buoyancy-driven flow in a pressurized water reactor, Journal of Engineering for Gas Turbines and Power - Transactions of the ASME (2009), GTP-08-1206

Anhang: Kurzfassung der Promotionsschrift

Roman Vaibar:

Numerical and Experimental Approach to Turbulent Buoyancy Driven Flow in Reactor Safety Research

Contents

1	Introduction	1
2	Motivation	1
3	Buoyancy driven turbulence models	2
3.1	Fluid buoyancy model	2
3.2	Buoyancy induced turbulence	2
4	Application of buoyancy driven model	5
4.1	Validation of model at the VeMix test facility	5
4.2	Flow characterization	6
4.3	Analysis of oscillation frequencies	6
4.4	Surface wire mesh sensor	7
5	Different buoyancy turbulence terms	10
5.1	Description of calculation	10
5.2	Description of the graphical results	11
5.2.1	Flowrate 0.45 l/s	11
5.2.2	Flowrate 0.5 l/s	12
5.2.3	Flowrate 0.8 l/s	13
5.3	Conclusion	13
6	The effect of simplifications on the simulation	14
6.1	Description of calculation	14
6.2	Results	15
6.2.1	Direct comparison on position surface wire mesh sensor	16
6.3	Conclusion	17
7	Validation of the VeMix simulations with different experimental flow conditions	18
7.1	Description of experiment	18
7.2	Description of calculation	18
7.3	Results	19
7.3.1	Qualitative results - flow pattern forming	19
7.3.2	Quantitative results - oscillation frequency	19
7.4	Conclusion	22
8	Numerical simulations at the ROCOM test facility	23
8.1	Description of calculation	23
8.2	Results	25
9	Conclusions	27
	References	29

1 Introduction

Buoyancy driven flow is often found in many engineering application such as the mixing process of fluids, which have different densities. The aim of this study is to simulate the mixing of borated and unborated water, an issue which is relevant to the analysis of the safety of nuclear reactors. The degree of mixing of weakly and highly borated coolant is a critical issue with respect to reactivity of the reactor core. Therefore, a combined numerical and experimental study of buoyant mixing processes has been performed. As nuclear reactor geometries are complex, a vertical mixing (VeMix) test facility was used to validate the numerical models used with optical and surface wire mesh measurements. Good agreement was found between the physicality of the flow phenomena of the observed experiments and numerical calculations. Fourier analysis of the vortical oscillations in both the experiments and simulations also show good agreement for several flow conditions.

2 Motivation

Buoyancy driven flow is often found in many engineering application such as mixing process of fluids with different density. In nuclear reactor safety research, fluid mixing induced by buoyancy effect is relevant for

- Boron dilution issues, when highly borated water with different temperature mixes with the ambient water in the reactor pressure vessel.
- Pressurised thermal shock scenarios, when cold emergency cooling water is injected into the reactor and is contacted with the vessel wall.
- Containment analysis, when in the case of severe accidents, hot hydrogen and steam mix with the containment atmosphere.

The aim of our study is to simulate mixing processes that are relevant to the analysis of the safety of nuclear reactors, where the boron dilution problem is one such safety issue that requires analysis.

Borated water is used to moderate the nuclear reactions occurring in the reactor core. However, in certain situations such as when a lack of boron concentration occurs in the reactor, additional borated water in the form of boric acid is added to the core via an emergency input. This boric acid may also have a different temperature. Therefore, both the boron concentration and the temperature will affect the density difference of the fluids being mixed and therefore affect the mixing processes that occur in such situations. Thus, the degree of mixing of weakly and highly borated coolant is a critical issue with respect to the reactivity insertion into the reactor core.

Therefore, a very simple vertical test facility was chosen for validation of numerical models of the mixing process, as nuclear reactor geometries are complex leading to the mixing processes that are not widely understood and where the influence of the buoyancy may not be significant. A new source term, which consists of a sum of the component turbulent

density fluxes, is defined for the turbulence model and in this case it is based on the definition turbulent kinetic energy.

3 Buoyancy driven turbulent models

While commercial CFD codes in general can treat buoyancy effects e.g. within the Boussinesq approximation, there are deficiencies in the modelling of buoyancy driven turbulence. The turbulence models usually applied in such cases assume that turbulence is isotropic, whilst buoyancy actually induces anisotropy. Thus, in this project, higher order turbulence models have been developed which take into account for that anisotropy. Buoyancy generated source and dissipation terms were proposed and introduced into the balance equations for the turbulent kinetic energy. The buoyancy induced source term is proportional to the Reynolds flux $\overline{\rho \mathbf{u}}$. Additional balance equations for $\overline{\rho \mathbf{u}}$ and for the fluctuation product $\overline{\rho^2}$ are solved. The source term can be included into the two-equation type of turbulence model such as the $k - \epsilon$, $k - \omega$ or a combination of both these models in the form of the Shear Stress Transport model.

3.1 Fluid buoyancy model

Buoyancy is driven by variations in density, which can arise, as in this case, from *multi-component flows* through the variation of the mass fraction caused by local mixing.

For buoyancy calculations, a source term is added to the momentum equations as follows:

$$S_{M,buoy} = (\rho - \rho_{ref}) g$$

ρ	the evaluated mixture density calculated directly using the Full Buoyancy model from the concentration of each component and the density for each component
$\rho_{ref} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \rho_i$	the relative density calculated as an average density of all N components in mixture.
g	the acceleration due to gravity

3.2 Buoyancy induced turbulence

The influence of buoyancy on the turbulence model could be added via source term in equation for turbulent kinetic energy k . A typical example of the models that can characterise the turbulent kinetic energy are “two-equations” family of turbulence models i.e. $k - \epsilon$, $k - \omega$ and their combinations such as Shear Stress Transport (SST). The modification of *SST* model of the form below is the focus of this study:

$$\frac{D\rho k}{Dt} = \nabla \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k + P_k + P_b - \rho \epsilon$$

$$\frac{D\rho\omega}{Dt} = \nabla \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega + (1 - F_1) 2\rho \frac{1}{\sigma_\omega} \nabla k \nabla \omega + C_{1\omega} \frac{\omega}{k} (P_k + C_{2\omega} P_b) - \beta \rho \omega^2$$

$$\frac{D\rho k}{Dt} = \frac{\partial \rho k}{\partial t} + (\nabla U \cdot \rho k)$$

material derivative of variables ρ , k , U fluid velocity
molecular viscosity

μ

$$P_k = -\rho \overline{u_i u_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = \mu_T \sqrt{2S_{ij} S_{ij}}$$

production term due to viscous forces

$$P_b = -\sum_{i=1}^3 g_i \overline{\rho u_i}$$

general form of production due to buoyancy forces

$$P_b = -g \frac{\mu_T}{\rho P_{r_t}} \Delta \rho$$

standard turbulent buoyancy model in ANSYS CFX

$$\omega = \frac{\epsilon}{C_\mu k}$$

turbulent frequency

$$F_1$$

blending function limiting ω to the boundary layer [1]

$$\mu_t = \rho \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, S F_2)}$$

turbulent viscosity, F_2 blending function ,

$$S$$

invariant measure of the strain rate

$$C_\mu, \sigma_k, \sigma_\omega, C_{1\omega}, C_{2\omega}, \alpha, \beta$$

constants of *SST* model [1]

P_b describes the influence of buoyancy on the turbulent model [5] [7]. This term could be modelled by solving the proper transport equations for components of Reynolds-averaged turbulent density fluxes, $\overline{\rho u_i}$, which have the form:

$$\frac{D\overline{\rho u_i}}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \underbrace{\left(\underbrace{\alpha \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_k} \overline{u_i} + \nu \rho \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_k}}_{D_{\rho i}^\nu} \underbrace{-\overline{\rho u_i u_k}}_{D_{\rho i}^t} \right)}_{D_{\rho i}} \underbrace{-\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_i}}_{\Pi_{\rho i}} - \underbrace{(\alpha + \nu) \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_k} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_k}}_{\epsilon_{\rho i}} \quad (1)$$

$$\underbrace{-\overline{u_i u_k} \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_k} - \overline{g_i \rho^2}}_{\text{Production}} \underbrace{-\overline{g_i \rho^2}}_{G_{\rho i}^{th}}$$

$D_{\rho i}^\nu$ molecular diffusion

$D_{\rho i}^t$ turbulent diffusion

$\Pi_{\rho i}$ pressure scrambling effect

$\epsilon_{\rho i}$ molecular destruction term

$P_{\rho i}^\rho$ production term due to mean density gradient

$P_{\rho i}^U$ production term due to mean velocity gradient

$G_{\rho i}^{th}$ buoyancy due to density variance

Equation for density variance - $\overline{\rho^2}$ is:

$$\frac{D\overline{\rho^2}}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_k} \underbrace{\left(\underbrace{\alpha \frac{\partial \overline{\rho^2}}{\partial x_k}}_{D_{\rho^2}^\nu} \underbrace{-\overline{\rho^2 u_k}}_{D_{\rho^2}^t} \right)}_{D_{\rho^2}} \underbrace{-2\overline{\rho u_k} \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_k}}_{P_{\rho^2}} - \underbrace{2\alpha \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_k} \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_k}}_{\epsilon_{\rho^2}} \quad (2)$$

- D_{ρ^2} the total diffusion of density scale, ρ^2
 $D_{\rho^2}^\nu$ the molecular diffusion of density scale, ρ^2
 $D_{\rho^2}^t$ the turbulent diffusion of density scale, ρ^2
 P_{ρ^2} production term due to mean density gradient
 ϵ_{ρ^2} the molecular destruction term

The presented model was implemented into the ANSYS CFX code by using pre-defined additional variables, according to the balance equation:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \nabla(U\Phi) = \nabla \left(\left(\rho D_\Phi + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla \left(\frac{\Phi}{\rho} \right) \right) + S_\Phi$$

- | | | | |
|---------------------|---|----------|--|
| ρ | the mixture density, mass per unit volume | Φ | the conserved quantity per unit volume, or concentration |
| $\frac{\Phi}{\rho}$ | the conserved quantity per unit mass | S_Φ | the volumetric source term, with units of conserved quantity per unit volume per unit time |
| D_Φ | the kinematic diffusivity for the scalar | μ_t | the turbulence viscosity, with Sc_t the turbulence Schmidt number |

For the full implementation of the presented model, four equations were applied, three of which were used for description of the three components of turbulent density fluxes $\overline{\rho u_i}$. Where the fourth equation was an equation for density variance $\overline{\rho^2}$.

If the density flux transport equations (1) are neglected, the Algebraic Flux Model for turbulent density fluxes is obtained:

$$\overline{\rho u_i} = -C^\rho \frac{k}{\epsilon} \left(\overline{u_i u_j} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} + \xi \overline{\rho u_j} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \eta \beta g_i \overline{\rho^2} + \epsilon_{\rho_i} \right) \quad (3)$$

From this assumption, several simplifications can be defined in which more and more of the terms on the right hand side of equation (3) are neglected. Then by considering only the first term of equation (3) gives:

$$\overline{\rho u_i} = -C^\rho \frac{k}{\epsilon} \overline{u_i u_j} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \quad (4)$$

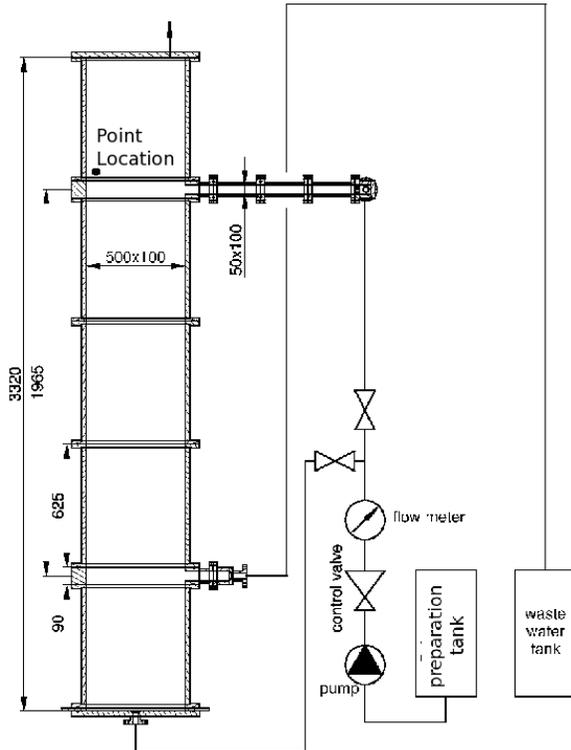
If the sum over all turbulent density fluxes is taken, then the isotropic source term of the standard model used in ANSYS CFX is obtained, as the simplest borderline case of our model:

$$P_b = g \sum_{i=1}^3 \overline{\rho u_i} = -g \frac{\mu_T}{\rho Pr_t} \Delta \rho$$

which is often used in standard CFD [1] codes for modelling of buoyancy influence to the turbulence model.

4 Application of buoyancy driven model

4.1 Validation of model at the VeMix test facility



For the validation of the model, which was implemented into ANSYS CFX, an experimental facility called **VeMix** - **Vertical Mixing** channel was built. The VeMix test facility has a simple geometry and it was setup to ensure that the gravity force acts along the significant length scale, the height. Five plexiglas units were constructed to allow the observation of the flow patterns formed and to also allow the use of laser based measurement techniques such as LDA and PIV.

In the *preparation tank*, the water is mixed to the required density by adding saccharose and the required conductivity by adding salt. This tank is connected to the bottom input and to the upper inlet nozzle of the vertical section. The output nozzle is connected to the *waste water tank*.

The experiment procedure has the following steps:

- 1 modify the conductivity of the water in the *preparation tank* by adding salt so that ($\kappa = 60 \mu\text{S cm}^{-1}$)
- 2 then fill almost the whole of the VeMix test facility with the water from the *preparation tank* via either inlet
- 3 modify the density and conductivity of the water in the *preparation tank* by adding saccharose and salt so that there is a 2% density difference and ($\kappa = 200 \mu\text{S cm}^{-1}$)
- 4 fill up the vertical section up to 2.12 m from bottom. The unit below the inlet nozzle, which includes the surface wire mesh sensor, should be covered by this water. The flow pattern formed is dependent on the level of the water with modified density filling of the VeMix vessel
- 5 set the desired flowrate via the flow meter before starting to pump the water with modified density from the tank to the VeMix though the upper inlet nozzle.
- 6 initially, normal water from the pipeline system is fed to the VeMix vessel, creating a jet of normal water entering the vessel, which forms a layer

- 7 after a short period of time, defined by the amount of normal water in the pipelines and flowrate used, the density modified water enters the vessel and mixing between the modified and normal waters begins
- 8 the conductivity measured by the surface wire mesh sensor corresponds to the fraction of normal water and density modified waters
- 9 the water leaving via the output nozzle is then fed to the waste water tank

4.2 Flow characterization

The different the flow conditions were defined to give typical flow patterns. This flow behaviour can be characterised by an internal Richardson number of form

$$Ri(\Delta\rho, fl, H_{fill}) = \frac{g * L^2 * \Delta\rho}{\rho * v^2}, \quad L = H_{input} - H_{fill} \quad (5)$$

where L is the characteristic length, $H_{input} = 2.63$ m distance of bottom part of the inlet nozzle from bottom of the VeMix vessel, H_{fill} distance of interface between the liquid from bottom of VeMix vessel, $\Delta\rho \sim \left| \frac{\partial\rho}{\partial y} \right|$ density difference, $\rho = 997$ kg m⁻³ density of water, $v = \frac{flowrate}{Surface}$, the characteristic flow velocity describing the movement of interface between the liquids, $flowrate$ input flowrate, $Surface = 0.5 * 0.1$ m², surface area of the VeMix vessel.

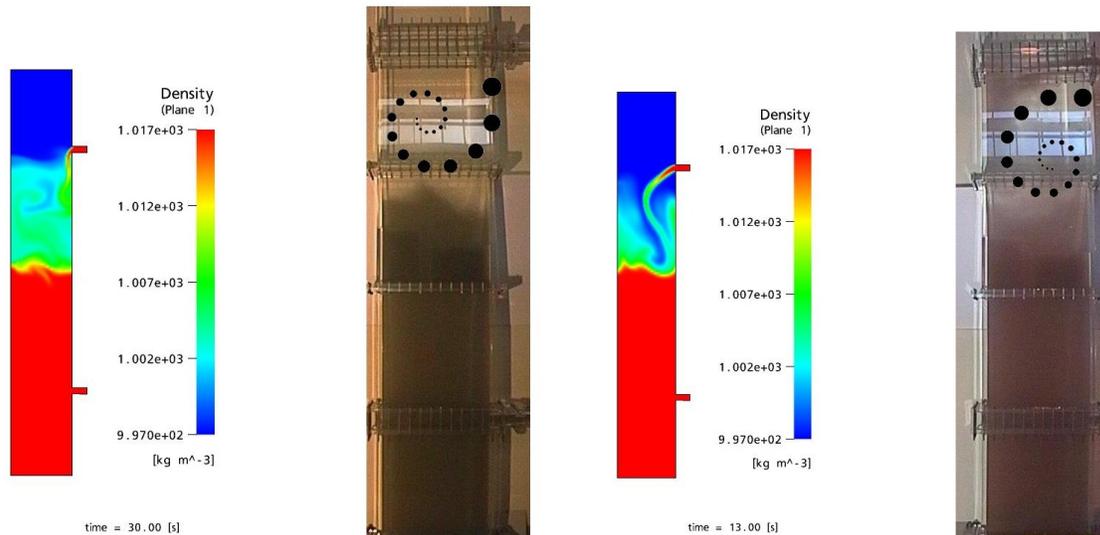
The Froude number has been widely used to characterise buoyant mixing; however, the Froude number is inversely dependent on the internal Richardson number, $Fr = \frac{1}{\sqrt{iRi}}$, as the Richardson number has a greater sensitivity to the characteristic flow patterns at the transition of the flow regimes. Thus, the internal Richardson number is used to qualitatively characterise the flow regimes observed in this study:

falling down regime of flow patterns $Ri > 2$ are shown in Figure 1a, for both the experiment and the simulation at time $t = 30$ s. Figure 1a clearly shows that the gravity force acts along the vertical axis and is significantly stronger than momentum forces. The jet drops down near the wall below the inlet nozzle.

horizontal jet regime of flow patterns $Ri < 1$ shown on Figure 1b, for both the experiment and simulation at $t = 13$ s. In this case, the momentum force driven by the input flowrate is stronger than the gravity force, which results in the formation of a horizontal jet. The horizontal jet influences the transient mixing behaviour, as oscillation waves are formed on interface between the heavier, density modified water (darker fluid) and the normal water (transparent fluid).

4.3 Analysis of oscillation frequencies

The frequencies of the oscillation waves in the layer between the heavier, density modified and normal waters above the horizontal jet were found via a Fourier analysis of the video signal. The Fourier analysis characterised the 3 components of video signal (RGB) from the digital camera signal and from the pictures created in CFX5Post. A point location



(a) falling down regime $flowrate = 0.4 \text{ l s}^{-1}$, $Ri = 2.12$, (b) horizontal jet regime $flowrate = 0.7 \text{ l s}^{-1}$, $Ri = 0.69$

Figure 1: Flow regime during the flow condition $\Delta\rho = 2\%$, $H_{fill} = 1.8 \text{ m}$ flowrate depend on case

above the inlet nozzle was chosen where the oscillation between the darker and transparent fluids occurs in experimental case and between the changing the color in simulation case. The selected location was at $X = 0.1 \text{ m}$, $Y = 2.7 \text{ m}$. The significant frequencies found in both Fourier power spectra corresponds to the frequency of oscillation of the waves at the interface, but the turbulent energy in the numerical case is much lower. A possible explanation of the discrepancy in the magnitudes of the spectra is that at the selected point in the experiment, the data stored is an integral over the depth of the section.

Figure 15a shows the base time series and the corresponding Fourier power spectra for the analysis of the simulated case on the left and the video data obtained from the experiment on the right. Figure 15b shows the dependency of oscillation frequencies on the flowrate, where other parameters were fixed at $\Delta\rho = 0.02$ and $H_{fill} = 2 \text{ m}$. Good agreement between the experimental and simulated cases can be observed in Figure 15b.

4.4 Surface wire mesh sensor

The array sensor used here was manufactured using standard printed-circuit board fabrication technology and has 4096 interdigital sensing structures, which are multiplexed in a matrix with 64 transmitter (rows) and 64 receiver electrodes (column). Figure 3 presents the surface sensor and in the detail depicts the structure of the sensors [2]. The *so-called* spatial wavelength is defined as the distance between the centerlines of neighboring electrodes of the same type (e.g. driving or sensing electrodes) and has the value of 2.6 mm for the sensor used here. The depth of penetration of the electric field generated by an inter-

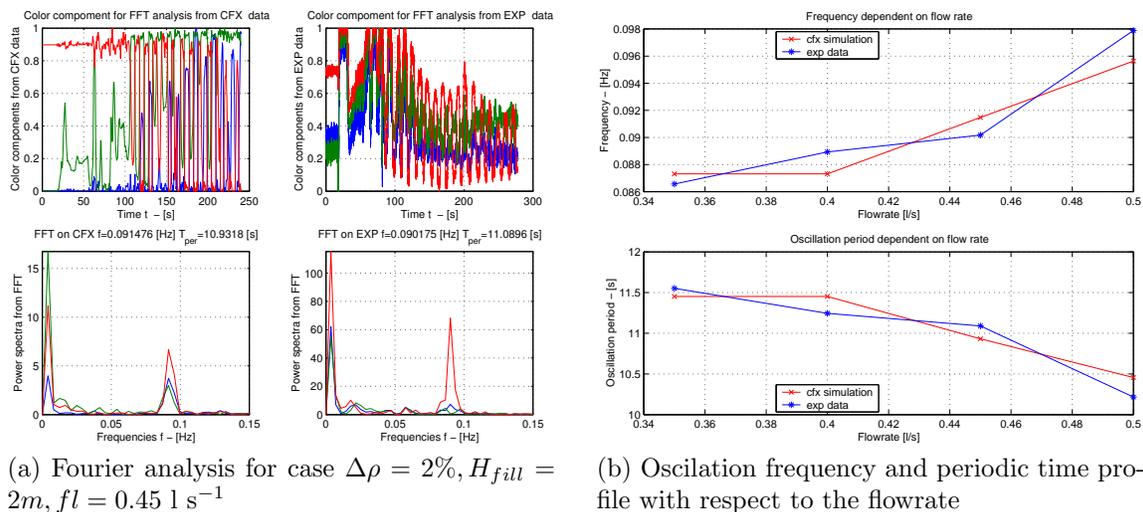


Figure 2: Fourier analysis of video data signal and oscillation frequencies

digital sensor into the material is proportional to the spatial wavelength [6]. Furthermore, the electrodes are gold plated to reduce electrochemical effects during the conductivity measurement. The sensor board was designed to fit to an experimental flow channel. The size of the whole sensor is 620 mm x 500 mm. Four connectors on the back side of the sensor (not shown in fig. 3) allow the sensor to be connected to recording devices. The voltage values measured by the surface sensor are proportional to the electrical current flowing from the transmitter electrode to the receiver electrode. This current basically depends on two parameters; the electrical conductivity κ of the liquid and on liquid wetting level of a sensing structure. The dependency of the application these parameters can be explored for the generation of information of how the fluid is distributed over the sensor. Since the system has only one measurement for two unknowns, in order to generate an unambiguous output, one of the parameters must be known or kept constant during the experiments. Therefore, two different conditions can be investigated. In the case where the wetting level is constant (i.e when the sensing structures are always covered by liquid) the use of conductivity tracers can be used to evaluate the flow in the channel. The second possibility is for the case when a liquid with constant conductivity is used and only its distribution over the sensor is of interest. For instance, the presence of gas bubbles on the surface can be detected due the fact the bubbles will change the wetting level of a sensing structure.

The most interesting location in the VeMix vessel was found to be just below the inlet nozzle. Therefore, the sensor was placed here in order to study the transition behaviour of jet between the vertical and horizontal regimes. The comparison between the simulated data and the data obtained from surface wire mesh sensor is depicted in Figure 4. A grid of data points was obtained from the data measured by surface wire mesh sensor. This grid was imported into CFX5Post to generate a field to which experimental and numerical data

could be mapped. The contour plots of the experimental and simulated data derived from this field are presented in Figure 4 at time $t = 28.1s$ for the case $\Delta\rho = 0.02$, $flowrate = 0.35 \text{ l s}^{-1}$, $H_{fill} = 2.12 \text{ m}$. This gave an internal Richardson number of 0.8822. For all the contour plots, the development of the horizontal jet is clearly seen, as can be expected for a flow at such a internal Richardson number, which lies close to the lower limit of the transition regime between horizontal and vertical jet flow $iRi \in (1, 2)$. However, the difference between modified buoyancy term and the standard term was small.

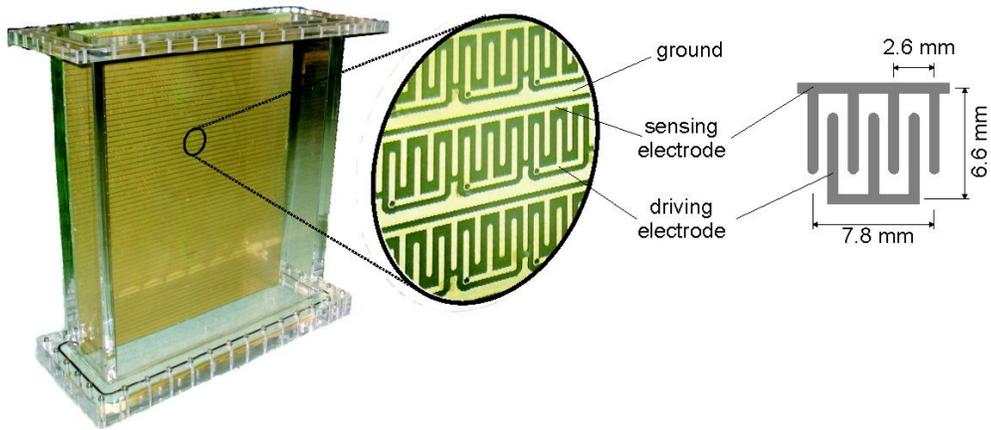


Figure 3: Printed circuit board surface sensor containing 64 x 64 interdigital sensing structures fitted to an experimental flow channel. The size of each sensing structure is 7.8 mm x 6.6 mm and the size of the whole sensor is 620 mm x 500 mm.

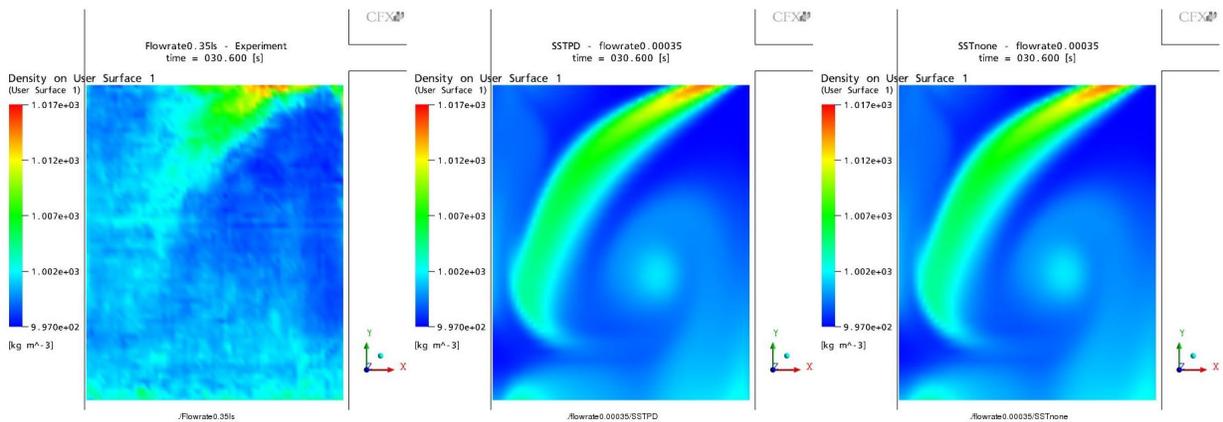


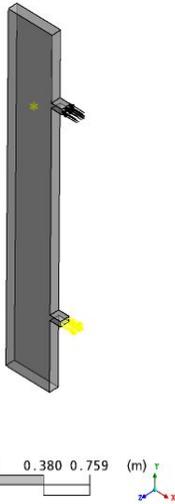
Figure 4: Comparison with experimental data on the position of Surface wire mesh sensor

5 Different buoyancy turbulent terms

In this section we will introduce the results, which were obtained from the ANSYS CFX simulation, where the Shear Stress Transport turbulence model was used with the various implemented buoyancy turbulent models included.

5.1 Description of calculation

CFX



The following parameters were used in the simulations discussed in this section. The different buoyancy turbulence models used were based on the four models derived in §3.

- Dimensions $x \in < 0; 0.62 >$, $y \in < 0; 3, 305 >$ $z \in < 0; 0, 1 >$
- $\rho_{DI} = 995,422 \text{ kgm}^{-3}$
- $\rho_{BoA} = 1010,2399 \text{ kgm}^{-3}$
- flowrate = 0.00045, 0.0005, 0.0008 m^3s^{-1}
- velocityIn = flowrate/(0.05 [m] *0.1 [m])
- velocityOut = flowrate/(0.05 [m] *0.1 [m])
- turbulence model Shear Stress Transport SST with various buoyancy models
- filled up to 1.7 m with heavy liquid
- $dt = 0.1 \quad t \in < 0, 30 >$
- $dt = 0.5 \quad t \in < 30, 300 >$
- Time $T = < 0, 300 >$

Figure 5: Definition in CFX5Pre

5.2 Description of the graphical results

Two types of graphical results are presented:

- Density profile on Line 7

Ten vertical lines across the width of the VeMix channel were defined and divided into ten cords. Line 7 corresponds to the line with the coordinates $x = 7 * 0.05 = 0.35[m]$, $z = 0.05[m]$, $y \in \langle 0; 3, 305 \rangle$.

- Density in middle plane

For presentation of the development of the jet from the inlet nozzle the density profile shown on the middle plane $z = 0.05$ at the specified time was used. Where the time used was $T=30$ [s], which corresponds to the time when the jet from the inlet nozzle encounters the layer between the heavy and light water, which can be indicative of the flow pattern that is created.

The results are shown in matrices of the following configuration:

SST none	SST PD	SST none Model no. 1
SST none Model no. 2	SST none Model no.3	SST none Model no. 4

SST none means that the Shear Stress Transport turbulence model was used without buoyancy turbulence model,

SST PD means that the Shear Stress Transport turbulence model was used with Production and Dissipation buoyancy turbulence model,

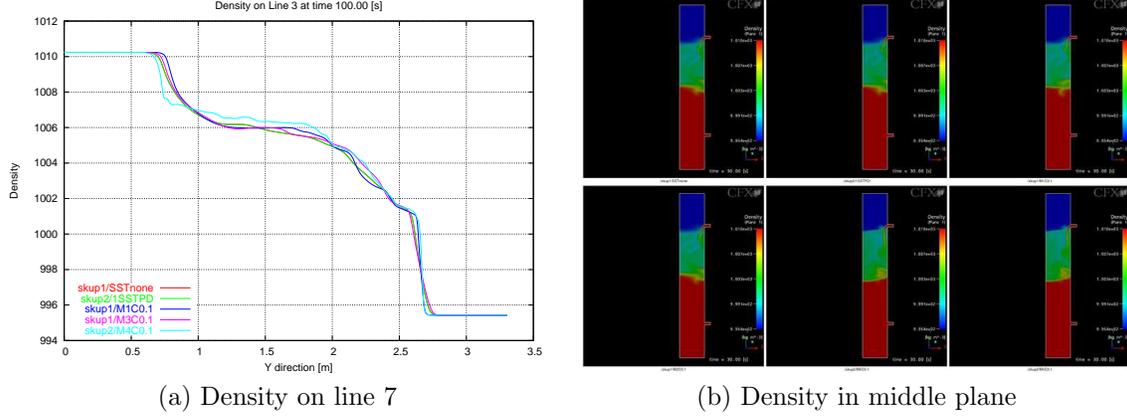
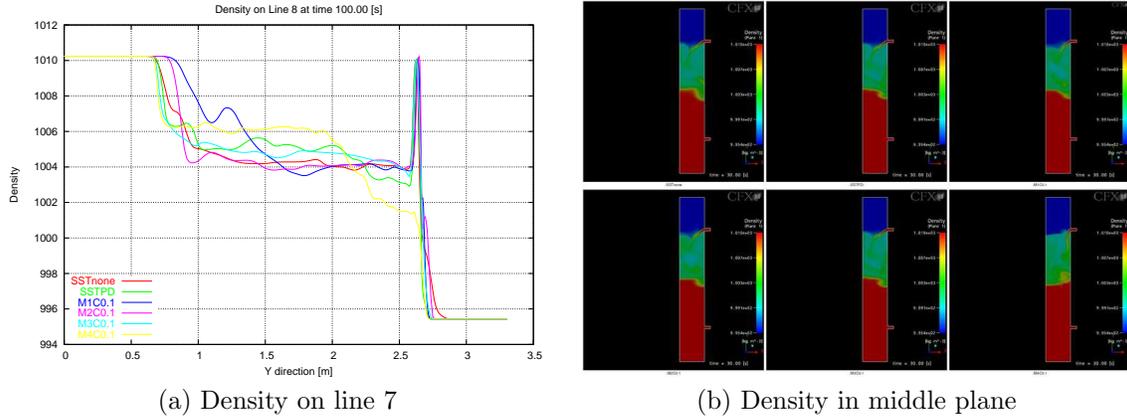
Model no.X means that the used model corresponds to the number of the Algebraic buoyancy turbulence model as defined in §4.

5.2.1 Flowrate $0.45 \text{ } l s^{-1}$

The flow conditions $fl = 0.45[l s^{-1}]$, $H_{fill} = 1.7[m]$, $\Delta\rho = \frac{1010.2399-995.422}{995.422} = 0.01488[-]$ define the internal Richardson number

$$iRi = \frac{F_B}{F_M} = \frac{g * L^2 * \Delta\rho}{\rho * v^2} = \frac{9.81 * 0.93^2 * 0.01488}{995.422 * 0.009^2} = \frac{0.1263}{0.0806} = 1.5670$$

The buoyancy forces and momentum forces are in the same range, but the buoyancy forces are strong enough for the development of the falling jet flow pattern. This is clearly depicted in Figures 6b and 6a for the density contour plot on the middle plane and the density profile on Line 7, respectively. Figure 6a also shows that the discrepancies between different buoyancy turbulence model are quite small.

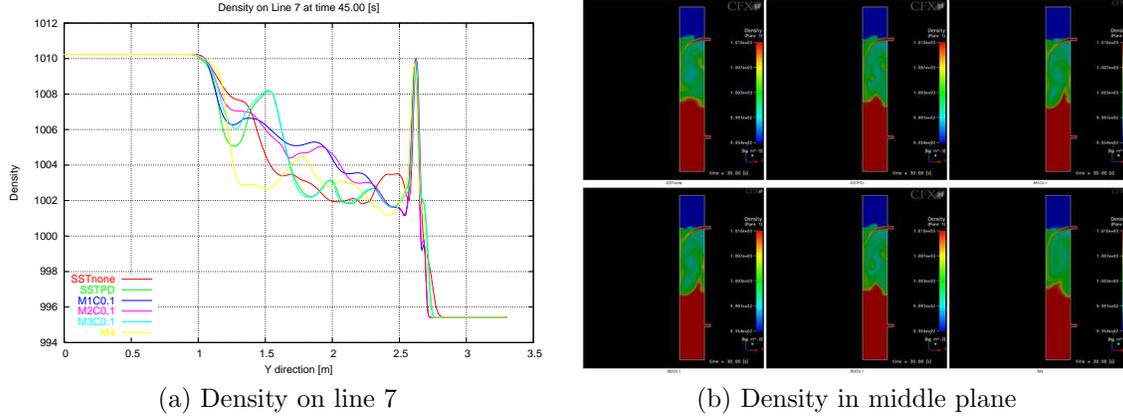
Figure 6: Flowrate $0.45 \frac{l}{s}$ falling down flow patternFigure 7: Flowrate $0.5 \frac{l}{s}$ horizontal jet flow pattern

5.2.2 Flowrate 0.5 l s^{-1}

The flow conditions $fl = 0.5[\text{l s}^{-1}]$, $H_{fill} = 1.7[\text{m}]$, $\Delta\rho = \frac{1010.2399 - 995.422}{995.422} = 0.01488[-]$ define the internal Richardson number

$$iRi = \frac{F_B}{F_M} = \frac{g * L^2 * \Delta\rho}{\rho * v^2} = \frac{9.81 * 0.93^2 * 0.01488}{995.422 * 0.01^2} = \frac{0.1263}{0.0995} = 1.2693$$

The buoyancy forces and momentum forces are in the same range, but the momentum forces are strong enough to enable the horizontal jet flow pattern to be developed. These structures can be observed in both 7b and 7a. The discrepancies between different buoyancy turbulence model are also present in 7a, though they are more significant than when a lower flow rate is used.

Figure 8: Flowrate $0.8 \frac{l}{s}$ horizontal jet flow pattern

5.2.3 Flowrate 0.8 l s^{-1}

The flow conditions $fl = 0.8[\text{l s}^{-1}]$, $H_{fill} = 1.7[\text{m}]$, $\Delta\rho = \frac{1010.2399 - 995.422}{995.422} = 0.01488[-]$ define the internal Richardson number

$$iRi = \frac{F_B}{F_M} = \frac{g * L^2 * \Delta\rho}{\rho * v^2} = \frac{9.81 * 0.93^2 * 0.01488}{995.422 * 0.016^2} = \frac{0.1263}{0.2548} = 0.4957$$

The momentum forces are almost two times greater than the buoyancy forces. Thus, the momentum forces are strong enough for the development of the horizontal jet flow pattern as shown in Figures 8b and 8a. The discrepancies between different buoyancy turbulent model can be discerned from Figure 8a.

5.3 Conclusion

From the qualitative results, it is shown that every model produces the flow pattern, which is expected from the characterization define by internal Richardson number. The direct comparison of the results in terms of the nominal value is different in each case. In figure 6a it is shown that the discrepancies of influence of the different types of models implemented are not significant. Discrepancies can be observed in the case of horizontal jet in figures 7a and 8a, but from an experimental point of view, these discrepancies are so small that are there not able to be caught by measurement method. Thus, the scale of the measurement errors and the scale of the discrepancies produced by implemented buoyancy turbulent model are similar in magnitude.

6 The effect of simplifications on the simulation

In this section, test simulations are introduced, which were used to correct the underlying assumptions applied in resolving the flow patterns. As will be seen the corrections that are applied are important in capturing the physical phenomena which occurred during the experiment. Without these corrections it may be impossible to represent the flow phenomena in the simulations.

6.1 Description of calculation

The following parameters were used in the simulations discussed in this section

- Dimensions $x \in < 0; 0.62 >$, $y \in < 0; 3.305 >$ $z \in < 0; 0.1 >$
- $\rho_{DI} = 997 \frac{kg}{m^3}$
- $\rho_{BoA} = 997 * 1.02 \frac{kg}{m^3}$
- flowrate = 0.0003, 0.00035 $\frac{m^3}{s}$
- velocityIn = flowrate/(0.05 [m] * 0.1 [m])
- velocityOut = flowrate/(0.05 [m] * 0.1 [m])
- turbulence model Shear Stress Transport SST

None without buoyancy models

PD with Production and Dissipation

- filled up to $H_{ini} = 2.63[m] - 0.900 * 0.625[m] = 2.0675[m]$ with heavy liquid
- Inlet concentration of heavy water
 - without any time delay
 - time delay respect the normal water in the pipeline system from the closed valve of the heavy liquid to the inlet nozzle input. The volume of normal water is consistant with the rectangular channel of dimensions $x = 0.81[m]$, $y = 0.05[m]$, $z = 0.1[m] \Rightarrow V_{channel} = 0.81 * 0.05 * 0.1[m^3]$ and the pipe with the inner diameter $r = 0.0284[m]$ and length $l = 1[m]$. Thus, the volume of the pipe is $V_{pipe} = \frac{0.0284^2}{4} * 1$. The whole volume is the sum of channel and pipe volume $V_{before} = 0.1 * 0.05 * 0.810[m^3] + pi * 0.0284^2 / 4 * 1[m^3] = 0.00468347[m^3]$. Time delay is defined as $T_{delay} = \frac{V_{before}[m^3]}{flowrate[\frac{m^3}{s}]}$.

Concentration of the heavy liquid in the inlet nozzle is defined via the step function, where the volume V_{before} and flowrate of form are used

$$HeavyInlet = step((t - V_{before}/flowrate)/1[s]) = step\left(1 - \frac{V_{before}}{1[s]}\right) \quad (6)$$

- $dt = 0.1 \quad t \in \langle 0, 30 \rangle$
- $dt = 0.5 \quad t \in \langle 30, 300 \rangle$
- Time $T = \langle 0, 300 \rangle$

6.2 Results

From the definition of the internal Richardson number 5 information about the expected flow patterns can be obtained. In postprocessing is used the followed picture setting:

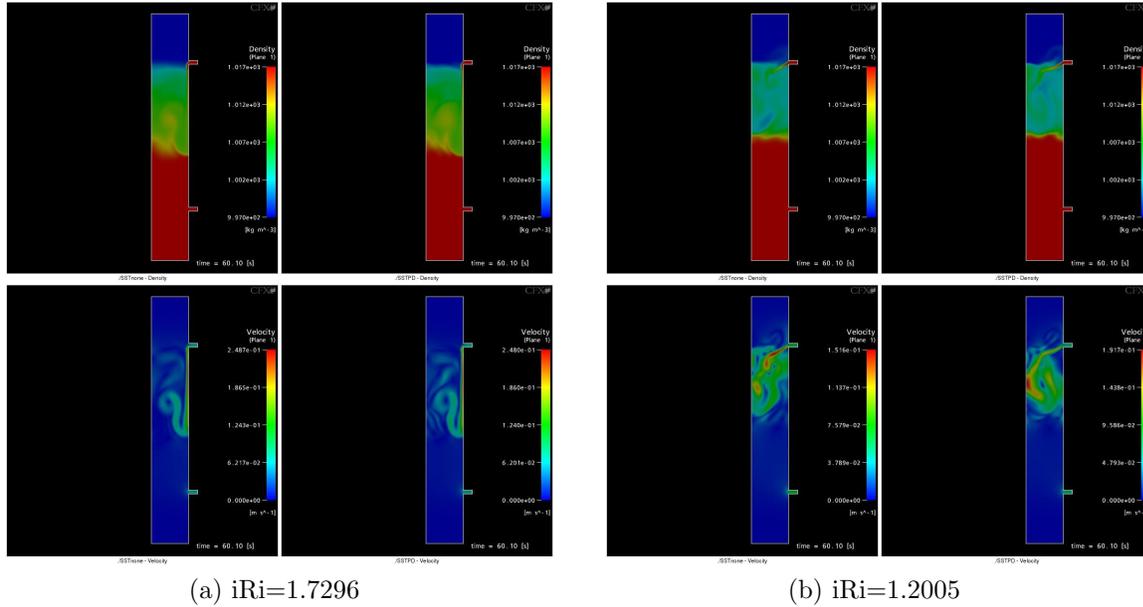


Figure 9: Comparison with different flow condition

SST None Density profile	SST PD Density profile
SST None Velocity profile	SST PD Velocity profile

- SST means that the Shear Stress Transport turbulence model was used
- None was performed without buoyancy turbulence model

- PD indicates the buoyancy turbulence model with Production and Dissipation was used
- Density shows the Density profile at the plane XY in the position $Z = 0.05[m]$
- Velocity shows the Velocity profile at the plane XY in the position $Z = 0.05[m]$.
- with the time delay, in the case when the time delay is used, the fact that the layer between the heavier and light water drops is taken into consideration and this changes the thickness of the layer from the initialization value. This falling length could be calculated from the given properties $H_{fall} = \frac{V_{before}}{S_{Vemix}} = \frac{0.00468347[m^3]}{0.5*0.1} = 0.0938694[m]$ with respect to the characteristic length, which is in this case becomes $L = H_{input} - H_{ini} - H_{fall} = 0.4686306[m]$

$$iRi(\Delta\rho, v, L) = \frac{gL^2\Delta\rho}{\rho v^2} = \frac{9.81 * 0.4686306^2 * 0.02}{997 * \left(\frac{0.0003}{0.05}\right)^2} = \frac{0.0431}{0.035892} = 1.2005$$

In this case, at a Richardson number of $iRi = 1.2005 \rightarrow iRi = 1$, the limits indicate that it is closer to the region of the flow horizontal jet pattern.

- without the time delay, characteristic length is defined as $L = H_{input} - H_{ini} = 0.5625$

$$iRi(\Delta\rho, v, L) = \frac{gL^2\Delta\rho}{\rho v^2} = \frac{9.81 * 0.5625^2 * 0.02}{997 * \left(\frac{0.0003}{0.05}\right)^2} = \frac{0.0621}{0.035892} = 1.7296$$

In this case, at a Richardson number of $iRi = 1.7296 \rightarrow iRi = 2$, the limits indicate that it is closer to the region of the flow falling jet pattern.

6.2.1 Direct comparison on position surface wire mesh sensor

For the simulation with the inlet flowrate defined as $flowrate = 0.35 \frac{l}{s} = 0.00035 \frac{m^3}{s}$, a direct comparison with the experimental data can be made. On Figure 6.2.1 and 6.2.1 are used the contour plots of the horizontal jet. Left: data obtained by the surface wire mesh sensor; Centre: Simulation performed with only the SST model; Right: Simulation performed with the modified buoyancy driven turbulence term applied to the SST model;

- with time delay $iRi(\Delta\rho, v, L) = \frac{gL^2\Delta\rho}{\rho v^2} = \frac{9.81*0.4686306^2*0.02}{997*\left(\frac{0.00035}{0.05}\right)^2} = \frac{0.0431}{0.048853} = 0.8822$
- without time delay $iRi(\Delta\rho, v, L) = \frac{gL^2\Delta\rho}{\rho v^2} = \frac{9.81*0.5625^2*0.02}{997*\left(\frac{0.0003}{0.05}\right)^2} = \frac{0.0621}{0.048853} = 1.2701$

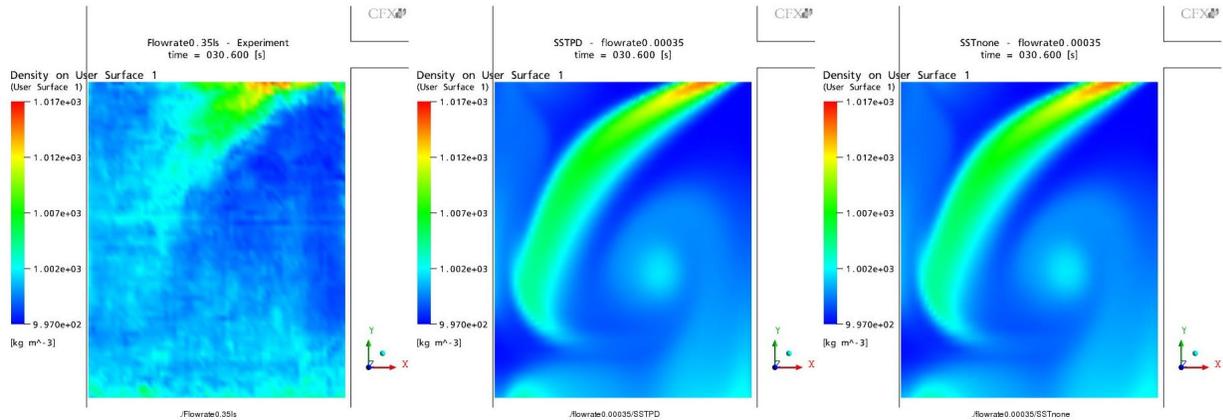


Figure 10: Direct comparison with experimental data on the position of Surface wire mesh sensor $iRi=0.8822$

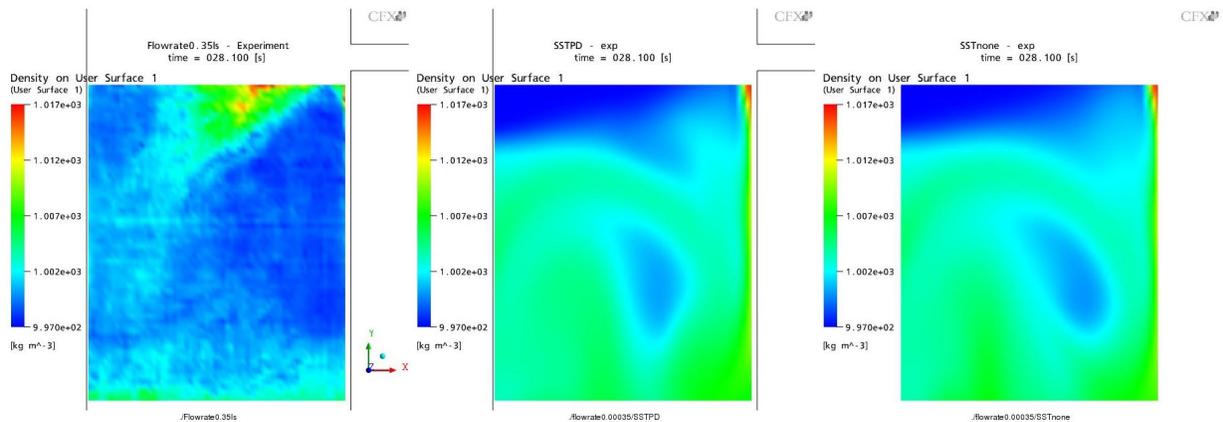


Figure 11: Direct comparison with experimental data on the position of Surface wire mesh sensor $iRi=1.2701$

6.3 Conclusion

The presented results show very clearly how the simulation can be influenced by the wrong physical assumptions. The difference between the calculation is that in one scenario the normal water in the pipelines is taken into consideration. The simulation results show how this amount of normal water has an influence on the results by changing the characteristic length and the flow pattern with the horizontal jet of light water. The flow characterization defined by the internal Richardson number is still valid and it is able to define the appropriate flow regime. If the pipeline of normal water is taken into consideration, then the simulation is able capture both qualitatively and quantitatively phenomena as observed in the experimental results. The influence of the buoyancy driven turbulent flow is negligible and it is impossible find a validation case where the discrepancies caused by the model are significant.

7 Validation of the VeMix simulations with different experimental flow conditions

In this section the results will be introduced when the Shear Stress Transport turbulence model was applied to the simulation of the VeMix vessel for several flow conditions. These conditions included changing the mode of filling, the input flowrate and the density difference. The flow conditions was pick up like the flow conditions used in the sets of experiment.

7.1 Description of experiment

The experiment with different flow conditions was used, during the whole experiment we fix the initialization height of the heavy water $H_{fill} = 2.12[m]$ and the density difference $\Delta\rho = 0.02[\%]$. The input flowrate was setup like the show following table.

flowrate [l s ⁻¹]	internal Richardson number
0.35	1.6720
0.40	1.2802
0.45	1.0115
0.50	0.8193

In the calculation of the internal Richardson number, the characteristic length formula is used. Where the characteristic length is defined with respect to the falling height, which is dependent on the volume of normal water in the pipeline system. $L = H_{input} - H_{fill} - H_{fall} = 2.63[m] - 2.12[m] - 0.0937[m] = 0.4163[m]$ During the experiment, the heavier water was dyed with the fluorescent dye yellow uranin.

7.2 Description of calculation

The following parameters were used in the simulations that are discussed in this section

- Dimensions $x \in < 0; 0.62 >$, $y \in < 0; 3.305 >$ $z \in < 0; 0.1 >$
- $\rho_{DI} = 997 \frac{kg}{m^3}$
- $\rho_{BoA} = 997 * 1.02 \frac{kg}{m^3}$
- flowrate = 0.00035 , 0.0004, 0.00045, 0.0005 $\frac{m^3}{s}$
- velocityIn = flowrate/(0.05 [m] *0.1 [m])
- velocityOut = flowrate/(0.05 [m] *0.1 [m])
- turbulence model was the Shear Stress Transport SST

None without buoyancy models

PD with Production and Dissipation

- filled up to $H_{ini} = 2.12[m]$ with heavy liquid
- Inlet concentration of heavy water
 - time delay respect the normal water in the pipeline system from the closed valve of the heavy liquid to the inlet nozzle input. The volume of normal water is $V_{before} = 0.1 * 0.05 * 0.810[m^3] + pi * 0.0284^2/4 * 1[m^3] = 0.00468347[m^3]$. Time delay is defined by $T_{delay} = \frac{V_{before}[m^3]}{flowrate[\frac{m^3}{s}]}$.

Concentration of the heavy liquid on the inlet nozzle is defined via the step function where the volume is V_{before} and flowrate of had the form

$$HeavyInlet = step((t - V_{before}/flowrate)/1[s]) = step\left(1 - \frac{V_{before}}{1[s]}\right) \quad (7)$$

- $dt = 0.1 \quad t \in < 0, 30 >$
- $dt = 0.5 \quad t \in < 30, 300 >$
- Time $T = < 0, 300 >$

7.3 Results

In this section, qualitative and quantitative comparisons between calculations and experiments for several flow conditions are presented. The qualitative comparisons are made with images extracted from video of the flow region at the point above the inlet nozzle. At this point, a wave was created at the interface between the heavier and lighter water. This wave was found in both the simulation and the experiment. A Fourier analysis of a single point is then made from the video and the simulations for a quantitative comparison

7.3.1 Qualitative results - flow pattern forming

The qualitative results were found in the comparison of the video images of the corresponding experiments and the simulations from ANSYS CFX.

7.3.2 Quantitative results - oscillation frequency

The horizontal jet regime of flow pattern $iRi < 1$ influences the transient mixing behaviour, as oscillation waves are formed on interface between the heavier water (darker fluid) and the normal water (transparent fluid).

For description of the behaviour of the wave between the darker and transparent water the data was extracted from the ANSYS CFX simulations at the point $X = 0.1[m]$, $Y = 2.7[m]$ show at the Fig 14. At the top of the Fig 14 is show the exported time series of the density

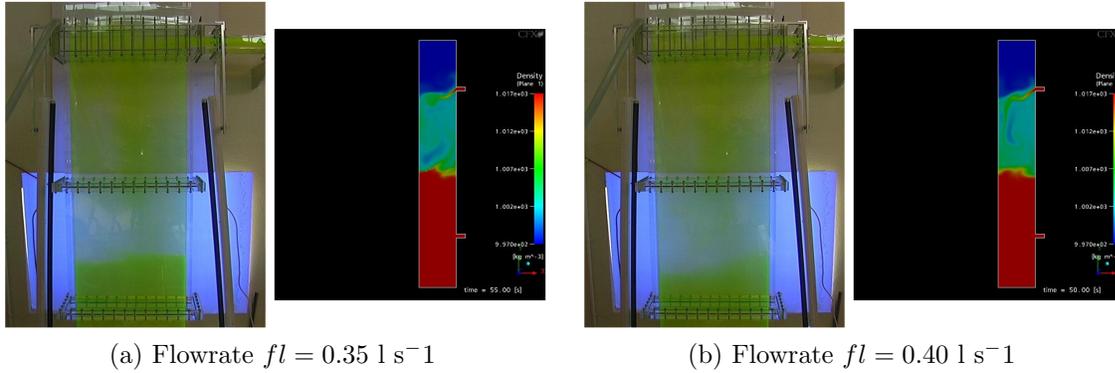


Figure 12: Qualitative comparison - flow pattern formation I

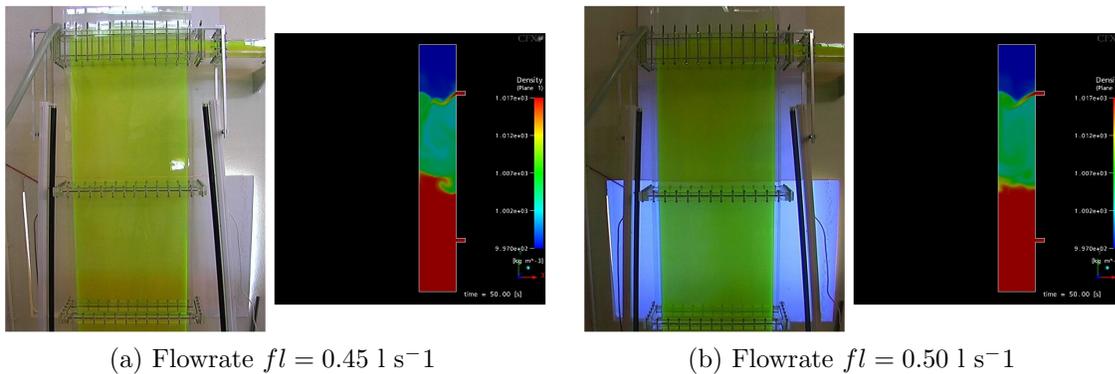


Figure 13: Qualitative comparison - flow pattern formation II

profile data at the point $X = 0.1[m], Y = 2.7[m]$. The bottom left of Fig 14 shows the signal of the Fourier series of the density profile obtained from a formula for the discrete Fourier analysis. The bottom right of Fig 14 shows the signal of the power spectra of Fourier series signal. The significant frequencies are identifiable as the second maxima of the power spectra.

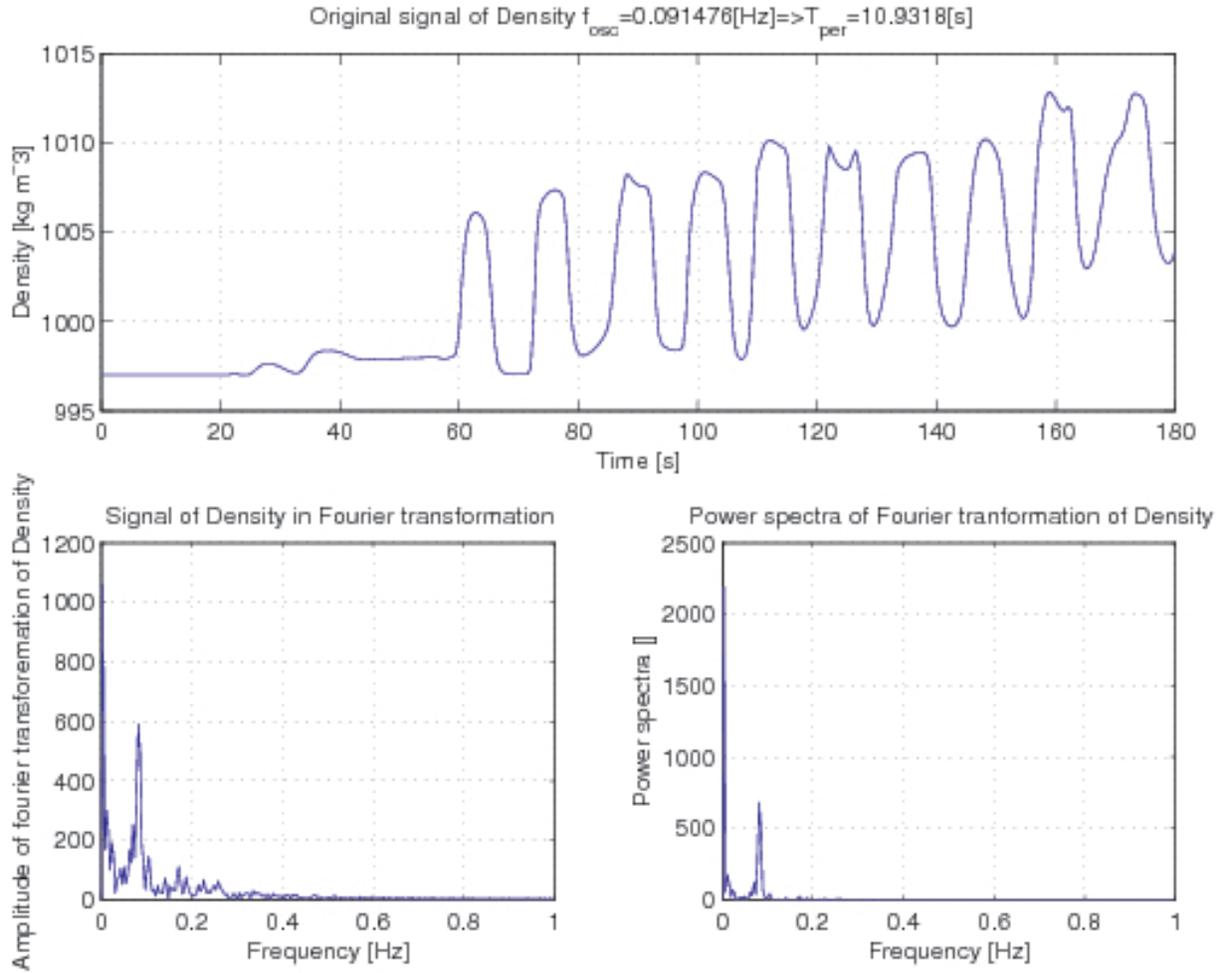


Figure 14: The Fourier analysis of the data from the ANSYS CFX at point $X = 0.1, Y = 2.7$

The frequencies of the oscillation waves layer between the heavier and light water above the horizontal jet was found via the Fourier analysis of the video signal. In the Fourier analysis, the 3 components of video signal (RGB) from the digital camera signal and from the pictures created in CFX5Post are analysed. A point above the inlet nozzle $X = 0.1, Y = 2.7$ was chosen where oscillations between the darker and transparent fluid in experimental case occur, these oscillations also occur between the changing the colors in the simulation case. The significant frequency of the Fourier power spectra was found to

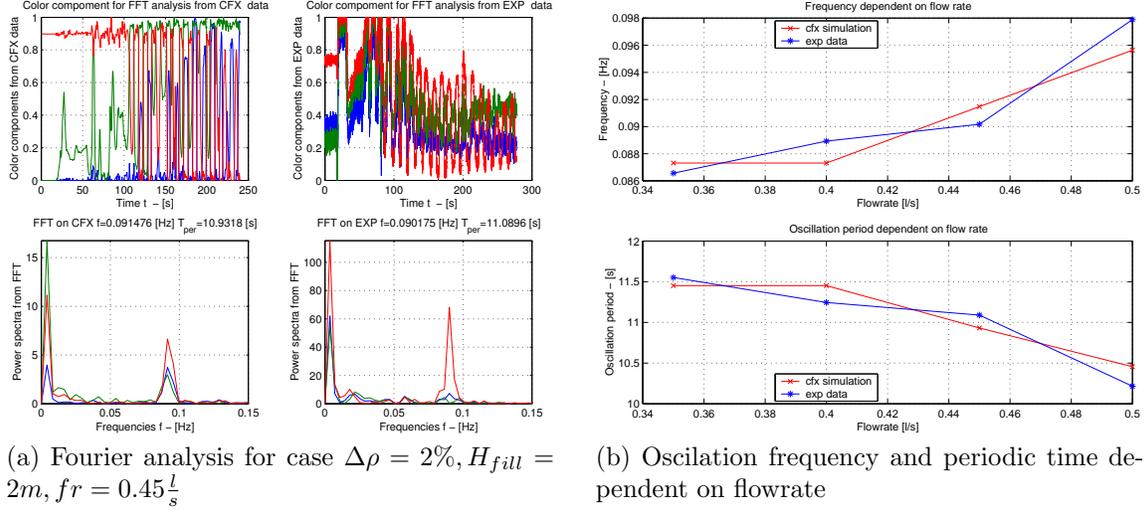


Figure 15: Fourier analysis of video data signal and oscillation frequencies

correspond to the frequency of oscillation of wave at the interface between the layers. In figure 15a is shown the base time series of the video data and their Fourier power spectra for the video data on the left and the data from simulation is found on the right. The figure 15b shows the dependency of oscillation frequencies for different flowrates, where the other parameters were fixed as $\Delta\rho = 0.02$, $H_{fill} = 2[m]$. It is clearly seen that the tendencies changes to oscillation frequencies is captured with both datasets with seemingly good agreement.

7.4 Conclusion

The validation study was performed with different flow condition, in which the expected regime as defined by the internal Richardson number was the horizontal jet regime. The qualitative results of depicting the horizontal jet at each flow condition are presented in figures 12 and 13. For a more quantitative comparison an oscillation frequency of the wave formed at interface between the heavier water (darker fluid) and the normal water (transparent fluid) was derived by Fourier analysis. Figure 15b illustrates the good agreement between the numerical simulations with the experimental data for a number of flow conditions.

8 Numerical simulations at the ROCOM test facility

In this section the numerical results for the ROCOM test facility are introduced. The flow condition on which the numerical case studies were performed are presented below with different turbulent model approaches (§8.1) and different grids (Figure 16) [8], [4], [3].

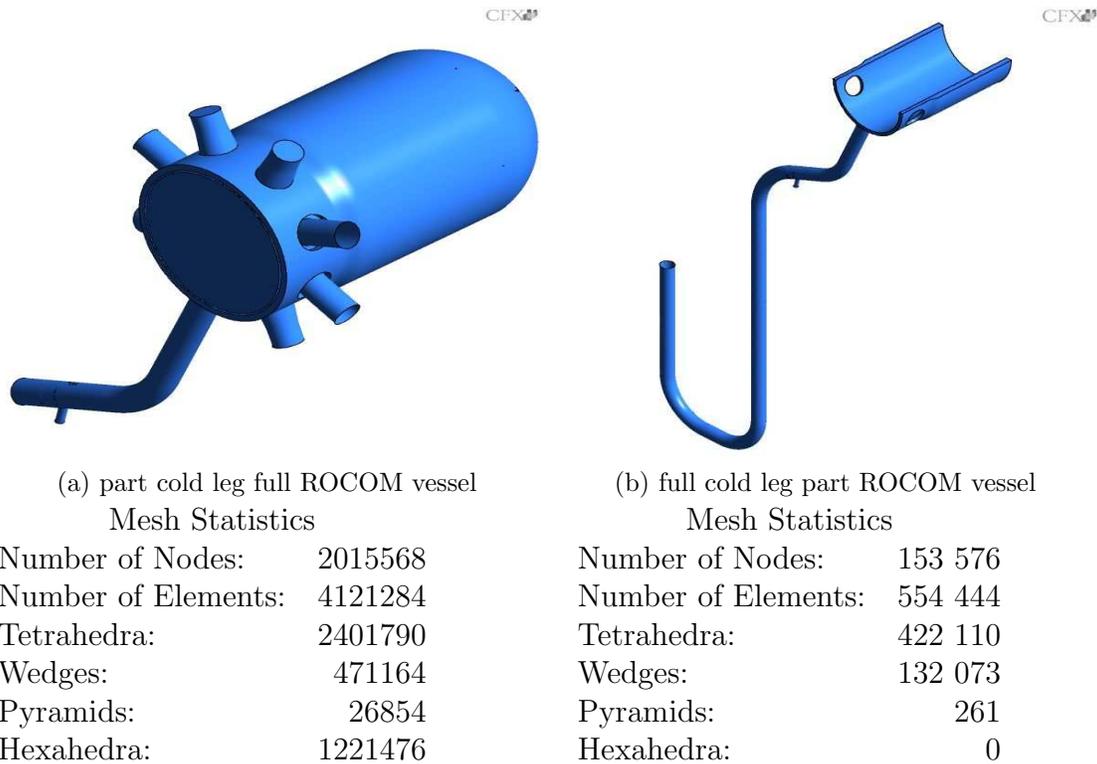


Figure 16: The different meshes used to model the ROCOM test facility with mesh statistics

8.1 Description of calculation

- Density difference was defined as $\Delta\rho = 0.10$.
- Ratio of the nominal mass flow rate was set as $m_{ratio} = 15\%$.
- The turbulence models used were:
 - the standard $k-\epsilon$ turbulence model - member of two-equation family turbulence model, turbulent stress is modelled via the analogy with the laminar stress, where the turbulence viscosity is defined by the two scale parameters
 - the standard Shear Stress Transport turbulence model - member of two-equation family turbulence model

- the BSL Reynolds Stress model from the Reynolds stress turbulence model, where the turbulence stress is directly solved with the transport equations for all six components of the turbulence stress.
 - the DES Detached Eddy Simulation model - combination of the two turbulence modelling approaches, the Large Eddy Simulation technique and the Reynolds Averaged Navier Stokes approach. In this case, the Shear Stress Transport model is used
 - without turbulence model - laminar type of flow
- Due to the small influence of the buoyancy turbulence model, which was observed in previous simulations with the partial cold leg inlet as shown in Fig. 16a the standard Production and Dissipation buoyancy turbulence model was used.
 - Initialization by the so-called *with Steady* state calculation was used. The Steady state initialization means that before starting the transient calculation a partial flow solution was obtained after 1000 iterations in which the steady state mode was selected. The Steady state calculation enabled the development of the main flow field in the simulation domain. Therefore, the velocity and pressure fields are resolved to there steady state forms and these fields are then used to initialise the transient calculation. The Shear Stress Transort turbulence model was chosed in Steady state precalculation.
 - Initialization by the so-called *without Steady* state calculation meant that a zero state condition was used to initialise the velocity and pressure field. Thus, every disturbance of the main flow field must be resolved before the injection of the heavy water into Emergency Core Cooling pipe.
 - The time step was set to $\Delta t = 0.1[s]$ and time duration was specified as $T_{totaltime} = 30$ s. The total time was applied due to the fact that the heavy water will leave the domain depicted in Fig. 16b within 30 s of the injection and the main focus of this study is the behaviour the slug in the inlet nozzle wire-mesh sensor region.
 - The impulse of the injection of heavy water through the Emergency Core Cooling pipe was defined via the step function $stepfunction = 1$ in time $T \in < 5, 15 >$.
 - The inlet velocity in Emergency Core Cooling pipe was specified via the expression $speedECC = stepfunction * 0.64297 \text{ m s}^{-1}$, where the nominal flow velocity in ECC pipe is $v_{nomECC} = 0.64297 \text{ m s}^{-1}$.
 - The inlet velocity in the cold leg was setup via the expression $inCL1 = 2.91 * mratio * 1 \text{ m s}^{-1}$, where the nominal flow velocity in the cold leg is $v_{nom} = 2.91 \text{ m s}^{-1}$
 - The *No - Slip* boundary condition was used on the wall boundary conditions.

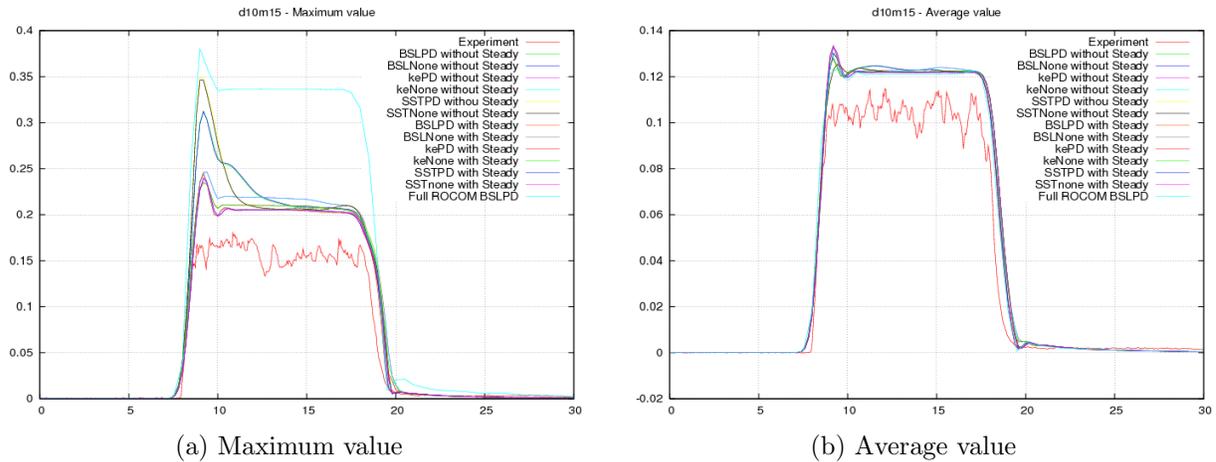


Figure 17: Traces of the maximum and average concentration from Case d10m15 at the inlet nozzle sensor

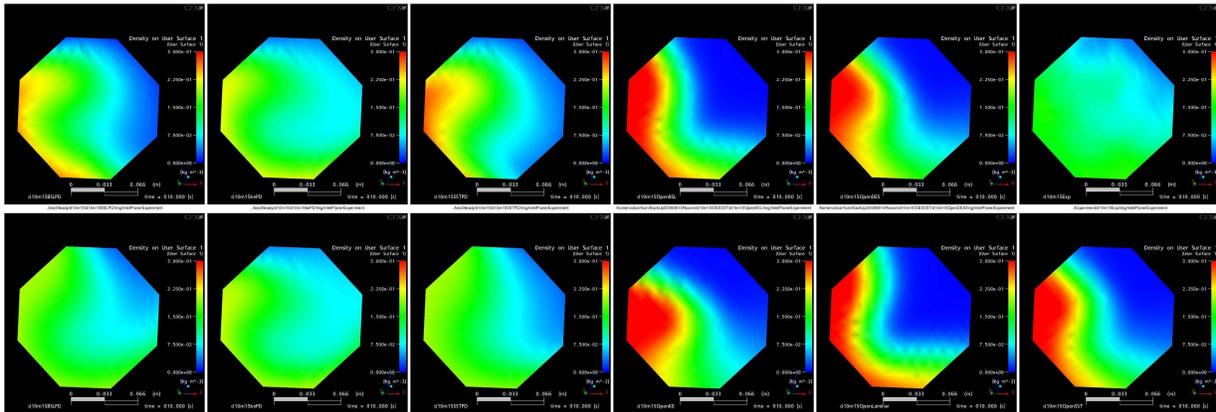


Figure 18: Concentration contours at the inlet nozzle sensor from Case d10m15

8.2 Results

In this section, only the comparison between the experiments and the simulations at the inlet nozzle wire mesh sensor position are introduced, as the other sensor position used in the ROCOM test facility are not present in the grid shown in Fig. 16b.

- The traces of the maximum value of the slug concentration are found in Figure 17a, where the value was measured by the inlet nozzle wire mesh sensor and determined by $Max = \max_i C_i, i = 1, \dots, 216$. From comparisons made between the simulations and the experiment, it is clearly seen that there is an over-prediction of the maximum value of the concentration for the earlier case where only a partial cold leg was used. The remaining traces of the simulations presented in relation to the study with

full cold leg and only part of the ROCOM vessel match the evolution of maximum concentration value in the experiments for all applications of the turbulent models considered. The discrepancies of the overprediction in maximum value in the case without the steady state initialization such as the SST and BSL turbulence models still result in the poor development of the flow field in the flow region reconsidered. The time delay used in the calculation before the starting injection is 5 [s] and this 5 [s] is not sufficient to create proper flow field in the cold leg. When the steady state initialization is used, it is clearly seen that this overprediction disappears.

- Figure 17b presents the traces for the averaged-value of the concentration at the inlet nozzle wire mesh sensor, $Ave = \frac{1}{216} \sum_{i=1}^{216} C_i$. The averaged-value curves show that the simulation and the experimental data have the similar values of $C_{AveEXP}cca0.107$ $C_{AveSim}cca0.12$. This is expected as the continuity equation conserves the transport of mass and averaged-value shows that the movement of the slug of water is in agreement with the movement of slug in the experiment and simulation.
- The contour plots in Figure 8.2 enable the comparison of the concentration distribution at the cold leg inlet plane at time T=10 s. By time T=10 [s], the slug of the injected water reaches the position of the cold leg inlet wiremesh sensor. The scale, which is used in the comparison view is $C \in \langle 0, 0.3 \rangle$. The resultant figures are show in a matrix of the form:

FP BSL	FP $k - \epsilon$	FP SST	PF BSL	PF DES	Experiment
FPS BSL	FPS $k - \epsilon$	FPS SST	PFS $k - \epsilon$	PF laminar	PF SST

where the description of the result is based on the key

- first letter is based on the type of the cold leg geometry P - Partial, F - Full cold leg geometry,
- second letter is based on the type of the ROCOM vessel geometry P - Partial, F- Full,
- third letter is S in the case when the initialization with the Steady state was used in simulation,
- the name of the turbulent model used in simulation.

It is immediately apparent that the slug stratification in the simulation for the partial cold leg and full ROCOM vessel is very poor. Comparing the partial cold leg simulation (PF XXX results on the Figure 8.2) with the contours of the measured data, the slug has huge overprediction on the left side and on the middle and right side of the inlet an underprediction of the concentration is depicted. This behaviour is found in all of the turbulence models used, which indicates that the stratification effects are not captured by the modelling by purely using the turbulent flow model.

Nevertheless, these stratification effects are caused by some physical phenomena in the ROCOM test facility, where the domain simplification by considering only a partial cold leg maybe the underlying cause of the poor slug stratification. The physical simplification in the type of simulation with partial cold leg utilises the principle of the uniform inlet velocity and this is not valid in cases where higher flowrates are used in the cold leg. Conversely, all the cases where the full cold leg is modelled (FPX XXX result on the Figure 8.2), the stratification of the slug is much better with high concentrations on the left side of the inlet and lower concentrations on the right. The effect of the partial solution of the steady state flow field on the transient solution is seen when we compare the contours depicted in the first against those depicted in the second row. However, for all the different turbulence models used in the grid with full cold leg simulation the concentration stratification has a “C” structure formation. The lowest concentrations are found on the top right side of the cold leg. However, in the case which was solved with the SST model and without steady state initialization, the “C” structure has rotated clockwise so that the lower concentration region is located on the right side.

Note that the time of first detection of the higher concentration and the duration of the impulse of the slug is exactly same in the experiments as it is in each simulation.

9 Conclusions

A new source term that was defined via the sum of the components of the turbulent density fluxes was implemented into the ANSYS CFX code. Validation experiments were performed in the VeMix test facility, which show typical vertical and horizontal flow pattern under different flow regimes. Comparisons of the experimental results with the corresponding simulations show similar flow patterns and periodic behaviour. The data from the surface wire mesh sensor was used for the validation of the data from the simulation. The influence of the buoyancy on the turbulence model was shown to be small through comparison between the implemented and standard buoyancy models.

The influence of the physical description of the fluid flow has a much greater importance than the implemented buoyancy driven turbulence model.

1. VeMix simulation

In §6 a case study was used to indicate the effect that the description of the VeMix flow conditions have on the flow structures formed. In the first case, it was assumed that there was no normal water in the pipeline system prior to the injection of the heavier water. This first case was then compared with a second case that took into account the amount of the normal water fed into the VeMix test facility prior to the heavier water entering the test section. The inclusion of the effect of the normal water in the pipeline caused the following phenomena to be captured:

- the layer between the heavier water and light water dropped with respect the volume of normal water.

- during the time, which respect the volume of normal water and flowrate $t_{delay} = \frac{V_{before}}{flowrate}$ is created the eddy of the injection normal water.

Both phenomena have strong influence on the flow structures generated, which in turn influences the limits of the flow regimes defined by the internal Richardson number. The influence of the normal water jet is sufficient for the flow regime to be switched from the expected vertical pattern to the horizontal jet flow pattern. Note that accompanying experiments were performed in which the horizontal jet flow pattern was also observed in the experiment data.

2. ROCOM simulation

The simplifications of the grid description used in the ROCOM simulations §8 has a much greater influence on the stratification and mixing of slugs of heavy water in the cold leg of the ROCOM test facility. Whilst the effect of the bouyancy driven turbulence model on the mixing is negligible. In a case where only the last part of the cold leg was modelled, the stratified flow field for higher nominal flow rate $mration = 10\%, 15\%$ was not developed. At lower nominal flowrates $mration = 5\%$ the assumption of the uniform velocity profile at the inlet position agrees with the experimental observations. Thus, only at higher nominal flowrate is the assumption of the uniform velocity at the inlet position in cold leg not valid, which results in significant overpredictions of the slug concentration at the wire mesh sensors at the inlet nozzle.

References

- [1] ANSYS Europe Ltd. *CFX 10.0 documentation, Turbulence and near-wall modelling*, 2005.
- [2] T.; Schleicher E.; Lucas D.; Vaibar R.; Hampel U. Da Silva, M. J.; Sühnel. Planar array sensor for high-speed component distribution imaging in fluid flow applications. In *Sensors*, 2007.
- [3] G. Grunwald, T. Höhne, S. Kliem, H.-M. Prasser, K.-H. Richter, U. Rohde, F.-P. Weiß. Kühlmittelvermischung in druckwasserreaktoren - teil 2, experimentelle ausrüstung und simulation der vermischung. In *Report FZD-367*, Rossendorf, 2003.
- [4] H.-M. Prasser, G. Grunwald, T. Höhne, S. Kliem, U. Rohde, F.-P. Weiß. Coolant mixing in a pwr - deboration transients, steam line breaks and emergency core cooling injection - experiments and analyses. In *Nuclear Technology*, volume 143, pages 37–56, 2003.
- [5] K. Hanjalić. One-point closure models for buoyancy driven turbulent flows. *Flouid Mechanics*, 34:321–347, 2002.
- [6] S.D.; Zyuzin A.S.; Mamishev A.V. Li, X.B.; Larson. Design principles for multichannel fringing electric field sensors. In *IEEE Sensors*, volume 6, pages 434–440, 2006.
- [7] L.N. Carteciano. Entwicklung eines turbulenzmodells für auftreibsstömungen. Technical report, Forschungszentrum Karlsruhe Technik und Umwelt, 1996. Institut für Angewandthe Thermo- und Fluidddynamik Projekt Nukleare Sicherheitforschung.
- [8] S. Kliem, H.-M. Prasser, G. Grunwald, U. Rohde, T. Höhne, F.-P. Weiß. Rocom experiments on the influence of density differences on the coolant mixing inside the reactor pressure vessel of a pwr. In *Proc. Annula Meeting on Nuclear Technology 2002*, pages 65–69, Bonn, 2002.

List of Publications

- Vaibar, R.; Sühnel, T. - Buoyancy driven flow in the VeMix test facility - Seminar on Numerical Analysis and Tutorial - SNA'07., Ústav geoniky AV ČR, 22.-26.01.2007, Ostrava, Czech Republic
- Vaibar, R.; Sühnel, T. - Buoyancy driven flow in the VeMix test facility - Jahrestagung Kerntechnik, Kerntechnische Gesellschaft, 22.05.2007, Karlsruhe, Germany
- Vaibar, R.; Sühnel, T.; Dasilva, M. J. - Buoyancy driven turbulent flow and experimental validation at the VeMix test facility - Computational Mechanics 2007, Department of Mechanics, Faculty of Applied Sciences, University of West Bohemia in Pilsen, Pilsner Office of the Czech Society for Mechanics, Czech National Committee of IFToMM, 05.-07.11.2007, Castle Nectiny, Czech Republic
- Vaibar, R.; Hoehne, T.- New aspects in modelling buoyancy driven flow at the RO-COM test facility - ANSYS Conference & 25. CADFEM Users' Meeting, CADFEM GmbH, ANSYS Germany GmbH, Fluent Deutschland GmbH, 21.-23.11.2007, Dresden, Germany
- Da Silva, M. J.; Sühnel, T.; Schleicher, E.; Lucas, D.; Vaibar, R.; Hampel, U. - Planar array sensor for high-speed component distribution imaging in fluid flow applications - Sensors (2007)