



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN
Vienna University of Technology

Dissertation

Untersuchung von mehrphasigen, kompressiblen Strömungen durch Simulation und Experiment

ausgeführt zum Zwecke der Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der
technischen Wissenschaften unter der Leitung von

Ao.Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Dr.h.c. Anton Friedl
Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Michael Harasek

E 166

Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und Technische Biowissenschaften der
Technischen Universität Wien

eingereicht an der Technischen Universität Wien

Fakultät für Maschinenwesen und Betriebswissenschaften

von

Dipl.-Ing. József Nagy
Matr. Nr.: 0325565
Adresse: Reithofferplatz 5, 1150 Wien

Wien, 24. November 2012

.....
József Nagy

Kurzfassung

Die Untersuchung von kompressiblen und mehrphasigen Strömungen in technischen Anlagen ist nach wie vor eine Herausforderung. Die experimentelle Erfassung der Strömung ist aufgrund des hohen Dichteunterschiedes oft schwierig. Die Simulation solcher Strömungen stellt ebenfalls eine Herausforderung dar, da man die Phasengrenze sowie den Impulsaustausch genau abbilden muss.

In dieser Arbeit werden schnelle, mehrphasige Strömungen in Anlagen im sowohl Labor- als auch Industriemaßstab simulativ und experimentell untersucht. Dazu wurde ein kompressibler, mehrphasiger Solver in OpenFOAM[®] entwickelt, der auf dem Finite-Volumen Verfahren beruht. Zur Mehrphasenmodellierung wird die Volume-of-Fluid Methode verwendet.

Der Solver ist parallelisierbar, womit die benötigte räumliche und zeitliche Auflösung bei akzeptabler Rechenzeit gewährleistet wird. Der Solver ist kompatibel mit kommerziellen Programmen, was den Import und Export von Daten ermöglicht.

Der Solver wird mit Literaturergebnissen validiert. Anschließend werden Themengebiete analysiert, die Mehrphasenströmungen bei hohen Geschwindigkeiten beinhalten.

Der Tropfenzerfall in Überschallströmungen wird auf das Erfordernis der dreidimensionalen expliziten Turbulenzmodellierung untersucht, was in der Literatur bis jetzt vernachlässigt wurde.

Der Tropfenzerfall in Unterschallströmungen wird experimentell untersucht, wobei Experimente auch simulativ analysiert werden, um den Vorgang im Detail zu verstehen. Diese Erfahrungen werden zur Analyse von Zerstäubungsprozessen verwendet.

Das theoretische Potenzial eines innovativen Bohrkopfes, Gestein zerstören zu können, wird detailliert untersucht und mit Daten aus der Literatur verglichen.

Die mehrphasige Strömung in speziellen Feuerlöschsystemen wird ebenfalls abgebildet um von Experimenten nicht aufgelöste Phänomene erfassen zu können.

Abstract

The investigation of compressible multiphase flows in technical equipment is still a challenging task. The experimental depiction of the flow is often difficult due to the high density difference. The simulation of such flows can be complicated, as one has to correctly depict the interface between the phases as well as the interphase momentum exchange.

In this work multiphase flows at high velocities in bench-scale as well as industrial equipment are investigated both theoretically and experimentally. For this reason a compressible, multiphase solver was implemented in the open source CFD library OpenFOAM[®], which is based on the finite-volume method. For multiphase modeling the volume-of-fluid method is used.

The solver can be run in parallel, which enables the needed spatial and temporal resolution of the problem settings at acceptable calculation times. The solver is compatible to commercial software packages thus guaranteeing import and export of data.

The solver is validated with simulative and experimental results from literature. In addition four topics are analyzed, which include multiphase flows at high velocities.

The aerobreakup of liquid droplets at supersonic speeds is investigated via simulations for the importance of three-dimensional explicit turbulence modeling, as this has been neglected in literature up until now.

The breakup of liquid droplets at subsonic speeds are investigated experimentally and selected cases are simulated in order to understand the process in detail. These experiences are used to interpret atomization processes in technical equipment.

The theoretical potential of an innovative drilling head to ablate rock is analyzed via simulations and the results are compared to experiments from literature.

Finally, the multiphase flow in special fire extinguishing systems is also examined in order to analyze phenomena, which cannot be depicted by experiments.

Danksagung

Ich würde mich gern in erster Linie bei Michael Harasek bedanken, der mich in die TVT Gruppe aufgenommen hat und mich über die gesamte Zeit meiner Arbeit in jeder Hinsicht unterstützt hat. Ebenso würd ich mich bei Anton Friedl für die Anführung der Arbeitsgruppe sowie für die unterstützende Kontrolle dieser Arbeit bedanken.

Ich möchte gleichzeitig allen Kollegen, die mich in technischen und sonstigen Problemen unterstützt haben, Dank aussprechen. Vor allem bedanke ich mich bei András Horváth für seine Hilfestellung in OpenFOAM[®] sowie alle anderen IT-technischen Problemstellungen und bei Christian Jordan für die Hilfe in CFD und bei den Messungen in dieser Arbeit.

Diese Arbeit wurde zum Teil durch die Europäische Union (European Regional Development Fund, Programm zur grenzüberschreitenden Zusammenarbeit SLOWAKEI–ÖSTERREICH 2007–2013) gefördert.

Zuletzt bedanke ich mich bei meinen Eltern, die in meinem ganzen Leben die Voraussetzungen bereitgestellt haben eine wissenschaftliche Karriere zu verfolgen.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|-------------|
| Kurzzusammenfassung | i |
| Abstract | iii |
| Danksagung | v |
| Inhaltsverzeichnis | vi |
| Abbildungsverzeichnis | xii |
| Tabellenverzeichnis | xxii |
| Nomenklatur | xxv |
| 1 Motivation | 1 |
| 2 Einführung | 3 |
| 2.1 Strömungsuntersuchungen in der Verfahrenstechnik | 3 |
| 2.2 Ablauf einer CFD-Untersuchung in OpenFOAM® | 5 |
| 2.2.1 Preprocessing | 5 |
| 2.2.2 Simulation | 6 |
| 2.2.3 Postprocessing | 7 |
| 2.3 Gliederung der Arbeit | 7 |
| 3 Physik/Stand der Technik | 9 |
| 3.1 Zerstäubung und Tropfenzerfall | 9 |
| 3.1.1 Instabilität von multiplen Fluiden | 9 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 3.1.1.1 | Die Rayleigh-Taylor Instabilität | 9 |
| 3.1.1.2 | Die Kelvin-Helmholtz Instabilität | 10 |
| 3.1.2 | Zerstäubung am Beispiel des Hochofens | 11 |
| 3.1.3 | Einteilung der Tropfenzerfallregime nach klassischen Kriterien . . | 14 |
| 3.1.4 | Einteilung der Tropfenzerfallregime nach dem Konzept von Theofanous | 15 |
| 3.2 | Geothermie | 18 |
| 3.3 | Feuerlöschanlagen | 20 |
| 4 | Theorie | 23 |
| 4.1 | Beschreibende Gleichungen | 23 |
| 4.2 | Diskretisierung mit dem Finite-Volumen-Verfahren | 25 |
| 4.2.1 | Diskretisierung von Raum und Zeit | 25 |
| 4.2.2 | Diskretisierung der Gleichungen | 26 |
| 4.2.2.1 | Flächeninterpolation | 28 |
| 4.2.2.2 | Gradient | 29 |
| 4.2.2.3 | Advektion | 29 |
| 4.2.2.4 | Diffusion | 29 |
| 4.2.2.5 | Quellterme | 30 |
| 4.2.2.6 | Zeitableitung und Zeitintegration | 30 |
| 4.2.3 | Residuum | 32 |
| 4.3 | Randbedingungen | 32 |
| 4.4 | Gittergenerierung | 34 |
| 4.4.1 | Strukturiertes Gitter | 34 |
| 4.4.2 | Unstrukturiertes Gitter | 35 |
| 4.5 | Turbulenzmodellierung | 38 |
| 4.5.1 | Direkte numerische Simulation | 38 |
| 4.5.2 | Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen | 39 |
| 4.5.3 | Large Eddy Simulation | 39 |
| 4.5.3.1 | <i>Smagorinsky-Lilly</i> -Modell | 40 |
| 4.5.3.2 | <i>oneEqEddy</i> -Modell | 41 |
| 4.5.3.3 | <i>dynOneEqEddy</i> -Modell | 41 |
| 4.5.3.4 | <i>DeardorffDiffStress</i> -Modell | 41 |
| 4.5.3.5 | Spalart-Allmaras-Modell | 42 |
| 4.6 | Mehrphasenmodellierung | 42 |
| 4.6.1 | Euler-Modell | 42 |
| 4.6.2 | Mixture-Modell | 42 |
| 4.6.3 | Lagrange'sches-Modell | 42 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 4.6.4 | Volume-of-Fluid-Modell (VOF) | 43 |
| 4.6.4.1 | Oberflächenspannung | 44 |
| 5 | Mehrphasiger Solver | 45 |
| 5.1 | Motivation | 45 |
| 5.1.1 | OpenFOAM® | 47 |
| 5.2 | Implementierter Solver | 49 |
| 5.2.1 | Zustandsgleichung | 49 |
| 5.2.2 | Beschreibende Gleichungen | 50 |
| 5.3 | Validierung des Solvers ohne explizite Turbulenzmodellierung | 52 |
| 5.3.1 | Eindimensionale Validierung | 52 |
| 5.3.1.1 | Shocktube (einphasig) | 52 |
| 5.3.1.2 | Druckverhältnis 100 und 500 | 55 |
| 5.3.1.3 | Shocktube mit Luft und Wasser | 55 |
| 5.3.2 | Zweidimensionale Validierung | 60 |
| 5.3.2.1 | Vorbemerkungen | 60 |
| 5.3.2.2 | Numerische Diskussion | 62 |
| 5.3.2.3 | Physikalische Diskussion | 65 |
| 5.3.3 | Dreidimensionale Untersuchung des Solvers mit expliziter Turbulenzmodellierung | 69 |
| 5.4 | Zusammenfassung | 73 |
| 6 | Anwendung 1: Tropfenzerfall bei Überschallbedingungen | 75 |
| 6.1 | Motivation | 75 |
| 6.2 | Nachteile der bisherigen Simulationen | 76 |
| 6.3 | Voruntersuchungen | 77 |
| 6.3.1 | Turbulente Effekte in der $M=3$ Umströmung einer Kugel | 77 |
| 6.3.2 | Expansions-/Kompressionseck | 79 |
| 6.3.2.1 | Einfluss der Einlassrandbedingungen auf die Grenzschicht | 80 |
| 6.3.2.2 | Ergebnisse | 80 |
| 6.4 | Turbulente Simulation des Zerfalls eines Flüssigkeitstropfens | 84 |
| 6.4.1 | Simulationseinstellungen | 84 |
| 6.4.2 | Einfluss von Scherspannungen auf die Strömung | 84 |
| 6.4.3 | Einfluss von unterschiedlichen Turbulenzmodellen | 90 |
| 6.5 | Zusammenfassung | 96 |
| 7 | Anwendung 2: Tropfenzerfall bei Unterschallbedingungen | 97 |
| 7.1 | Motivation | 97 |
| 7.1.1 | Messaufbau | 98 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 7.2 | Untersuchung der Gasströmung | 99 |
| 7.2.1 | Vermessung des Strömungsfeldes | 99 |
| 7.2.2 | Simulation des Strömungsfeldes | 101 |
| 7.3 | Simulative Untersuchung des Tropfenzerfalls | 104 |
| 7.3.1 | Einstellungen | 104 |
| 7.3.2 | Rayleigh-Taylor Piercing (RTP) | 105 |
| 7.3.2.1 | Simulationsergebnisse des asymmetrischen Zerfalls eines niederviskosen Fluids | 106 |
| 7.3.2.2 | Vergleich der Simulation mit den experimentellen Ergeb- nissen für ein niederviskoses Fluid | 108 |
| 7.3.2.3 | Vergleich der Simulation mit den experimentellen Ergeb- nissen für ein hochviskoses Fluid | 109 |
| 7.3.3 | Shear-induced entrainment (SIE) | 110 |
| 7.3.3.1 | Vergleich der Simulation mit den experimentellen Ergeb- nissen für ein niederviskoses Fluid | 110 |
| 7.3.3.2 | Vergleich der Simulation mit den experimentellen Ergeb- nissen für ein hochviskoses Fluid | 112 |
| 7.4 | Experimentelle Untersuchungen des Tropfenzerfalls | 114 |
| 7.4.1 | Experimentelle Ergebnisse | 114 |
| 7.4.1.1 | Wasser | 114 |
| 7.4.1.2 | Ethanol | 118 |
| 7.4.1.3 | Paraffinöl | 122 |
| 7.4.1.4 | Glycerin (96 %) | 126 |
| 7.4.1.5 | Glycerin (99 %) | 130 |
| 7.4.2 | Schlussfolgerungen aus den Experimenten | 134 |
| 7.5 | Interpretation des Zerstäubungsprozesses im Hochofen | 136 |
| 7.5.1 | Laboranlage | 136 |
| 7.5.2 | Auswirkungen auf die Zerstäubung | 143 |
| 7.6 | Zusammenfassung | 143 |
| 8 | Anwendung 3: Berührungsloser Bohrkopf für die geothermische In- | |
| | dustrie | 145 |
| 8.1 | Motivation | 145 |
| 8.2 | Prozesskonzept | 146 |
| 8.3 | Deflagrationssimulation | 148 |
| 8.3.1 | Kurze Beschreibung | 148 |
| 8.3.2 | Anknüpfungspunkt Deflagration-Strömung | 149 |
| 8.3.3 | Ergebnisse der Deflagrationssimulation | 150 |

| | | |
|-----------|---|------------|
| 8.4 | Strömungssimulation | 152 |
| 8.4.1 | Vorbemerkung | 152 |
| 8.4.2 | Strömungssimulationsergebnisse | 152 |
| 8.5 | Zusammenfassung | 160 |
| 9 | Anwendung 4: Feuerlöchanlage | 161 |
| 9.1 | Motivation | 161 |
| 9.2 | Zustandsgleichung | 162 |
| 9.3 | 'Feuerlösch'-Experimente | 163 |
| 9.3.1 | Experimenteller Aufbau | 163 |
| 9.3.2 | Simulation der Feuerlöchanlage | 166 |
| 9.3.2.1 | Simulationseinstellungen | 166 |
| 9.3.3 | Vergleich von Experimenten mit Simulationsergebnissen | 168 |
| 9.4 | Zusammenfassung | 176 |
| 10 | Zusammenfassung | 177 |
| 11 | Ausblick | 179 |
| A | Source code | 181 |
| A.1 | multiRhoSonicFoam | 181 |
| A.2 | multiRhoSonicTurbulenceFoam | 183 |
| B | Tropfenzerfall | 187 |
| B.1 | Wasser | 187 |
| B.2 | Ethanol | 202 |
| B.3 | Paraffinöl | 217 |
| B.4 | Glycerin (96 %) | 232 |
| B.5 | Glycerin (99 %) | 247 |
| | Literaturverzeichnis | 262 |

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|-----|--|----|
| 2.1 | Einfaches orthogonales Gitter in OpenFOAM® (a) und Detailausschnitt (b) eines Strömungsbeispiels | 6 |
| 2.2 | Beispielhafte Auswertung der Strömung aus Kapitel 6 in Paraview | 7 |
| 3.1 | Schematische Darstellung der Rayleigh-Taylor (Normalkräfte) sowie der Kelvin-Helmholtz (Scherkräfte) Instabilitäten | 10 |
| 3.2 | Schematische Darstellung des Hochofenprozesses aus (Paloposki und Hakala, 1996; Längen und Yagi, 2000) | 11 |
| 3.3 | Schematische Darstellung des Hochofenprozesses aus (Paloposki und Hakala, 1996; Längen und Yagi, 2000) ((a) Schacht (b) kohesive Zone (c) Hängezone (d) Raceway (e) Toter Mann (f) Gestell) | 12 |
| 3.4 | Temperaturänderung im Hochofen (Längen und Yagi, 2000) | 13 |
| 3.5 | Zerstäubung und Verbrennung von Heizöl in einem Hochofen (Paloposki und Hakala, 1996) | 14 |
| 3.6 | Zerfallsregime aus (Joseph et al., 1999) | 15 |
| 3.7 | Laser-induced fluorescence 'LIF' Aufnahme des Tropfenzerfalls aus (Theofanous und Li, 2008) | 16 |
| 3.8 | Abhängigkeit der Übergangs-Weber-Zahl von der Ohnesorge-Zahl nach (Theofanous et al., 2012) | 17 |
| 4.1 | Räumliche und zeitliche Diskretisierung (Rusche, 2002; NablaLtd, 2012) | 26 |
| 4.2 | Parameter für die Diskretisierung (Rusche, 2002; NablaLtd, 2012) | 27 |
| 4.3 | Parameter für die Diskretisierung in einer Zelle am Domänenrand (Rusche, 2002; NablaLtd, 2012) | 33 |
| 4.4 | Zweidimensionales (a) und dreidimensionales (b) strukturiertes Gitter | 35 |

| | | |
|------|---|----|
| 4.5 | Zweidimensionales (a) und dreidimensionales (b) unstrukturiertes Gitter | 36 |
| 4.6 | Erstellungsschritte zum unstrukturierten Gitter | 36 |
| 4.7 | Qualität des unstrukturierten Gitters | 37 |
| 4.8 | Schlechteste Zellen im unstrukturierten Gitter | 37 |
| 5.1 | Schematischer Verlauf der Berechnungen während eines Zeitschrittes . . | 51 |
| 5.2 | Verläufe von Druck p , Geschwindigkeit u und Dichte ρ zum Zeitpunkt $t=6$ ms | 54 |
| 5.3 | Verlauf der Dichte ρ nach $t=6$ ms mit Gitterverfeinerung | 55 |
| 5.4 | Verläufe von Druck p , Geschwindigkeit u und Dichte ρ zum Zeitpunkt $t=5$ ms mit einem Anfangsdrucksverhältnis von 100 | 56 |
| 5.5 | Verläufe von Druck p , Geschwindigkeit u und Dichte ρ zum Zeitpunkt $t=5$ ms mit einem Anfangsdrucksverhältnis von 500 | 57 |
| 5.6 | Verläufe von Druck p und Geschwindigkeit u nach $t=3$ ms mit 10000 Zellen, Entspannungswelle bei $x=3.9$ m und Schockwelle bei $x=9.65$ m | 58 |
| 5.7 | Verlauf der Dichte nach $t=3$ ms bei Gitterverfeinerung | 59 |
| 5.8 | Anfangszustand der Simulation, punktierte Referenzlinien für Gitteruntersuchungen | 61 |
| 5.9 | 'Schlieren' Plots (a)-(c) und Druckverlauf (d) (simulierte Bilder) | 63 |
| 5.10 | 'Schlieren' Plots (a)-(c) und Druckverlauf (d). Die Überlappung der beiden Halbwellen ist sichtbar. (simulierte Bilder) | 64 |
| 5.11 | Geschwindigkeitsbetrag, x-Komponente der Geschwindigkeit nach $t=8$ ms (Skala in (m/s)) | 66 |
| 5.12 | Geschwindigkeitsbetrag, x-Komponente der Geschwindigkeit nach $t=15$ ms (Skala in (m/s)) | 67 |
| 5.13 | 'Schlieren' Plot nach $t=24 \mu\text{s}$ (simuliertes Bild) | 68 |
| 5.14 | Dichte entlang der Referenzlinien in Wasser (a) und Luft (b) nach $t=1.5 \mu\text{s}$ bei Gitterverfeinerung | 68 |
| 5.15 | Schematische Skizze der einfachen Testgeometrie | 70 |
| 5.16 | Gitterkonvergenzuntersuchung nach $t=1.5$ ms | 71 |
| 5.17 | Relative Druckdifferenz zwischen der Lösungen mit erster Ordnung und zweiter Ordnung Genauigkeit nach $t=0.1$ ms | 72 |
| 5.18 | Relative Druckdifferenz zwischen der Lösungen mit den beiden Turbulenzmodellen <i>Smagorinsky</i> und <i>Spalart-Allmaras</i> nach $t=0.1$ ms | 72 |
| 6.1 | Geschwindigkeitsbetrag mit den unskalierten Geschwindigkeitsvektoren nach $t=26 \mu\text{s}$ | 78 |

| | | |
|------|--|----|
| 6.2 | Verlauf der ersten Komponente des turbulenten Schubspannungstensors $u'u'$ mit den unskalierten Geschwindigkeitsvektoren nach $t = 26 \mu s$. . . | 79 |
| 6.3 | Schematische Skizze des untersuchten Expansions-/Kompressionsecks . . | 80 |
| 6.4 | Iso-Linien des gemittelten Drucks | 81 |
| 6.5 | Gemittelte Stromlinien mit der Separationszone | 81 |
| 6.6 | Gemittelttes Druckprofil auf der Wand (skaliert), experimentelle daten aus (Knight et al., 2006) | 82 |
| 6.7 | Mittlerer Geschwindigkeitsbetrag (skaliert) | 83 |
| 6.8 | Erste Komponente des turbulenten Spannungstensors (skaliert) | 83 |
| 6.9 | Schematische Skizze der Anfangsbedingungen (strich-punktierte Linie zeigt die Lage der Auswertungsgerade für Abbildungen 6.13-6.16) | 85 |
| 6.10 | Verteilung des Geschwindigkeitsbetrages mit konstanter Fläche $\alpha = 0.9$ sowie Geschwindigkeitsvektoren mit konstanter Länge (nach $T = 0.38$) . | 86 |
| 6.11 | Verteilung der ersten Komponente des turbulenten (subgrid-scale) Spannungstensors multipliziert mit der mittleren Dichte $\rho u'u'$ mit der Fläche $\alpha = 0.9$ und mit den unskalierten Geschwindigkeitsvektoren (nach $T = 0.38$) | 87 |
| 6.12 | $\rho u'u' / \rho_i u_i^2$ nach $T = 0.175$ auf der Auswertegerade | 88 |
| 6.13 | $\rho u'u' / \rho_i u_i^2$, $\rho v'v' / \rho_i u_i^2$ und $\rho w'w' / \rho_i u_i^2$ nach $T = 0.175$ auf der Auswertegerade | 88 |
| 6.14 | $\rho v'v' / \rho_i u_i^2$, $\rho u'w' / \rho_i u_i^2$ und $\rho w'w' / \rho_i u_i^2$ nach $T = 0.175$ auf der Auswertegerade | 89 |
| 6.15 | Vergleich von Turbulenz und Scherspannung nach $T = 0.175$ auf der Auswertegerade | 89 |
| 6.16 | Geschwindigkeit, Form des Tropfens ($\alpha = 0.9$) (a), dynamische (b) und kinematische (c) turbulente Viskosität mit dem <i>Smagorinsky</i> -Modell . . | 91 |
| 6.17 | Geschwindigkeit, Form des Tropfens ($\alpha = 0.9$) (a), dynamische (b) und kinematische (c) turbulente Viskosität mit dem <i>oneEqEddy</i> -Modell . . . | 92 |
| 6.18 | Geschwindigkeit, Form des Tropfens ($\alpha = 0.9$) (a), dynamische (b) und kinematische (c) turbulente Viskosität mit dem <i>dynOneEqEddy</i> -Modell (Skala der dynamischen turbulenten Viskosität ist um eine Größenordnung kleiner als in den anderen Abbildungen) | 93 |
| 6.19 | Geschwindigkeit, Form des Tropfens ($\alpha = 0.9$) dynamische und kinematische turbulente Viskosität mit dem <i>DearDorffDiffStress</i> -Modell | 94 |
| 6.20 | Vergleich Experiment aus (Theofanous und Li, 2008) mit Simulation . . | 95 |
| 7.1 | Schematische Skizze der gleichmäßigen (a) und der asymmetrischen (b) Umströmung eines Tropfens | 97 |
| 7.2 | Schematische Skizze (a) und Foto (b) des Versuchaufbaus | 99 |

| | | |
|------|---|-----|
| 7.3 | Detailaufnahme der Luft- (links) sowie Flüssigkeitsdüse (vertikale Spritzen- nadel) | 100 |
| 7.4 | Messpunkte und -werte im Strömungsfeld bei 9 NL/min | 101 |
| 7.5 | Messpunkte und -werte im Strömungsfeld bei 12.5 NL/min | 101 |
| 7.6 | Messpunkte und -werte im Strömungsfeld bei 15 NL/min | 101 |
| 7.7 | Instantanes Geschwindigkeitsfeld in der Symmetrieebene der Düse nach $t = 15$ ms | 102 |
| 7.8 | Instantanes Geschwindigkeitsfeld in der Symmetrieebene der Düse nach $t = 28$ ms | 103 |
| 7.9 | Instantanes Geschwindigkeitsfeld in der Symmetrieebene der Düse nach $t = 40$ ms | 104 |
| 7.10 | Oh-We Diagramm der untersuchten Fälle | 105 |
| 7.11 | Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 0$ ms (10 NL/min, Ethanol) | 106 |
| 7.12 | Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 29$ ms (10 NL/min, Ethanol) | 107 |
| 7.13 | Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 30$ ms (10 NL/min, Ethanol) | 108 |
| 7.14 | Zellmittelpunkt-basierte Werte des Phasenanteils α bei $t = 30$ ms | 108 |
| 7.15 | Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 26$ ms (10 NL/min, Glycerin) | 109 |
| 7.16 | Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 36.5$ ms (10 NL/min, Glycerin) | 110 |
| 7.17 | Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 20$ ms (60 NL/min, Ethanol) | 111 |
| 7.18 | Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 25.5$ ms (60 NL/min, Ethanol) | 111 |
| 7.19 | Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 26$ ms (60 NL/min, Ethanol) | 112 |

| | | |
|------|---|-----|
| 7.20 | Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 24$ ms (60 NL/min, Glycerin) | 112 |
| 7.21 | Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 24.5$ ms (60 NL/min, Glycerin) | 113 |
| 7.22 | Zerfall von Wasser | 115 |
| 7.23 | Zerfall von Wasser | 116 |
| 7.24 | Oh-We Diagramm der Messungen mit Wasser, offene Punkte - kein Zerfall, halb gefüllte Punkte - Zerfall außerhalb des Freistrahls , gefüllte Punkte - Zerfall im Freistrah (Kern oder Scherzone), blaue Punkte - Prozesse durch Normalkräfte, rote Punkte - Prozesse durch Scherkräfte | 117 |
| 7.25 | Zerfall von Ethanol | 119 |
| 7.26 | Zerfall von Ethanol | 120 |
| 7.27 | Oh-We Diagramm der Messungen mit Wasser und Ethanol, offene Punkte - kein Zerfall, halb gefüllte Punkte - Zerfall außerhalb des Freistrahls , gefüllte Punkte - Zerfall im Freistrah (Kern oder Scherzone), blaue Punkte - Prozesse durch Normalkräfte, rote Punkte - Prozesse durch Scherkräfte | 121 |
| 7.28 | Zerfall von Paraffinöl | 123 |
| 7.29 | Zerfall von Paraffinöl | 124 |
| 7.30 | Oh-We Diagramm der Messungen mit Wasser, Ethanol und Parffinöl, offene Punkte - kein Zerfall, halb gefüllte Punkte - Zerfall außerhalb des Freistrahls , gefüllte Punkte - Zerfall im Freistrah (Kern oder Scherzone), blaue Punkte - Prozesse durch Normalkräfte, rote Punkte - Prozesse durch Scherkräfte | 125 |
| 7.31 | Zerfall von Glycerin (96 %) | 127 |
| 7.32 | Zerfall von Glycerin (96 %) | 128 |
| 7.33 | Oh-We Diagramm der Messungen mit Wasser, Ethanol, Parffinöl und Glycerin (96 %-ig), offene Punkte - kein Zerfall, halb gefüllte Punkte - Zerfall außerhalb des Freistrahls , gefüllte Punkte - Zerfall im Freistrah (Kern oder Scherzone), blaue Punkte - Prozesse durch Normalkräfte, rote Punkte - Prozesse durch Scherkräfte | 129 |
| 7.34 | Zerfall von Glycerin (99 %) | 131 |
| 7.35 | Zerfall von Glycerin (99 %) | 132 |

| | | |
|------|--|-----|
| 7.36 | Oh-We Diagramm der Messungen mit Wasser, Ethanol, Parffinöl sowie Glycerin (96 und 99 %-ig), offene Punkte - kein Zerfall, halb gefüllte Punkte - Zerfall außerhalb des Freistrahls , gefüllte Punkte - Zerfall im Freistrah (Kern oder Scherzone), blaue Punkte - Prozesse durch Normalkräfte, rote Punkte - Prozesse durch Scherkräfte | 133 |
| 7.37 | Oh-We Diagramm mit den Messungen sowie der Kurve für die zweite Kritikalität im asymmetrischen Fall | 135 |
| 7.38 | CAD-Modell der Laboranlage | 136 |
| 7.39 | Geschwindigkeitsverteilung der einphasigen Luftströmung um die Lanze für den Fall mit ≈ 60 m/s aus (Castaño Martínez, 2012) | 137 |
| 7.40 | Mitreißen während der Zerstäubung von Paraffinöl direkt hinter dem Auslass der Lanze bei einer Anströmgeschwindigkeit von 60 m/s | 138 |
| 7.41 | Kein Mitreißen während der Zerstäubung von Paraffinöl direkt hinter dem Auslass der Lanze bei einer Anströmgeschwindigkeit von 35 m/s | 139 |
| 7.42 | Schwarmbildung während der Zerstäubung von Paraffinöl bei einer Anströmgeschwindigkeit von 35 m/s | 140 |
| 7.43 | Schwarmbildung während der Zerstäubung von Paraffinöl bei einer Anströmgeschwindigkeit von 60 m/s | 141 |
| 7.44 | Ausgangs- und Endzustand der Zerstäubung im Oh-We Diagramm | 142 |
| 8.1 | Schematische Skizze des Deflagrations- und Strömungsvolumens | 147 |
| 8.2 | Zeitskala der Deflagration | 150 |
| 8.3 | Detailausschnitt aus der Zeitskala der Deflagration | 151 |
| 8.4 | 360° Geometrie des Strömungsvolumens, 90° wurden simuliert | 153 |
| 8.5 | Schnitt durch die Geometrie | 154 |
| 8.6 | Geschwindigkeitsverteilung (in m/s) nach $t = 1.1 \cdot 10^{-4}$ s (a) und $t = 1.8 \cdot 10^{-4}$ s (b) | 155 |
| 8.7 | Flüssigkeitsphasenanteil (a) und spezifische kinetische Energie (b) des bereits beschleunigten Wassers nach $t = 2.3 \cdot 10^{-4}$ s (die rote Linie zeigt die Position der Auswerteebene in Abbildung 8.9) | 156 |
| 8.8 | Verteilung der spezifischen kinetischen Energie | 157 |
| 8.9 | Radiale Verteilung der spezifischen kinetischen Energie | 158 |
| 8.10 | Radiale Verteilung des Geschwindigkeitsbetrages | 158 |
| 8.11 | Radiale Verteilung der spezifischen kinetischen Energie in den Fällen '8.4 MPa' und '10.1 MPa' für beide Austrittsdurchmesser | 159 |
| 9.1 | Schematische Skizze des Prozesses | 161 |

| | | |
|------|--|-----|
| 9.2 | Beziehung zwischen Druck und Dichte für die Gasphase bei 285 K (NIST-Webbook, 2012) | 163 |
| 9.3 | Beziehung zwischen Druck und Dichte für die Flüssigphase bei 285 K (NISTWebbook, 2012) | 164 |
| 9.4 | Schematische Skizze der Druckflasche im Experiment sowie in der Simulation (Anfangsbedingungen) | 165 |
| 9.5 | Experimentelle Daten des Gasdruckes und der Gas- und Flüssigkeitstemperatur im ersten Experiment | 166 |
| 9.6 | Experimentelle Daten des Gasdruckes und der Gas- und Flüssigkeitstemperatur im zweiten Experiment | 167 |
| 9.7 | Experimentelle und simulative Ergebnisse des Druckverlaufes während der ersten zwei Sekunden (erster Lauf) | 168 |
| 9.8 | Experimentelle und simulative Ergebnisse des Gastemperaturverlaufes während der ersten zwei Sekunden (erster Lauf) | 169 |
| 9.9 | Experimentelle und simulative Ergebnisse des Flüssigkeitstemperaturverlaufes während der ersten zwei Sekunden (erster Lauf) | 170 |
| 9.10 | Experimentelle und simulative Ergebnisse des Druckverlaufes während der ersten zwei Sekunden (zweiter Lauf) | 171 |
| 9.11 | Experimentelle und simulative Ergebnisse des Gastemperaturverlaufes während der ersten zwei Sekunden (zweiter Lauf) | 171 |
| 9.12 | Experimentelle und simulative Ergebnisse des Flüssigkeitstemperaturverlaufes während der ersten zwei Sekunden (zweiter Lauf) | 172 |
| 9.13 | Geschwindigkeitsbetrag, Schallgeschwindigkeit und Mach-Zahl nach $t = 0.05$ s | 172 |
| 9.14 | Geschwindigkeitsbetrag $t = 0.8$ s auf der Mittelebene der Flasche (in m/s) | 173 |
| 9.15 | Druckwelle nach $t = 0$ s (Ventil wird geöffnet, in Pa) | 173 |
| 9.16 | Druckwelle nach $t = 0.001$ s, in Pa | 174 |
| 9.17 | Druckwelle nach $t = 0.002$ s, in Pa | 174 |
| 9.18 | Druckwelle nach $t = 0.003$ s, in Pa | 175 |
| | | |
| B.1 | Wasser, 3 NL/min | 188 |
| B.2 | Wasser, 5 NL/min | 189 |
| B.3 | Wasser, 8 NL/min | 190 |
| B.4 | Wasser, 10 NL/min | 191 |
| B.5 | Wasser, 15 NL/min | 192 |
| B.6 | Wasser, 20 NL/min | 193 |
| B.7 | Wasser, 25 NL/min | 194 |
| B.8 | Wasser, 30 NL/min | 195 |

| | |
|---|-----|
| B.9 Wasser, 40 NL/min | 196 |
| B.10 Wasser, 50 NL/min | 197 |
| B.11 Wasser, 60 NL/min | 198 |
| B.12 Wasser, 70 NL/min | 199 |
| B.13 Wasser, 80 NL/min | 200 |
| B.14 Wasser, 90 NL/min | 201 |
| B.15 Ethanol, 3 NL/min | 203 |
| B.16 Ethanol, 5 NL/min | 204 |
| B.17 Ethanol, 8 NL/min | 205 |
| B.18 Ethanol, 10 NL/min | 206 |
| B.19 Ethanol, 15 NL/min | 207 |
| B.20 Ethanol, 20 NL/min | 208 |
| B.21 Ethanol, 25 NL/min | 209 |
| B.22 Ethanol, 30 NL/min | 210 |
| B.23 Ethanol, 40 NL/min | 211 |
| B.24 Ethanol, 50 NL/min | 212 |
| B.25 Ethanol, 60 NL/min | 213 |
| B.26 Ethanol, 70 NL/min | 214 |
| B.27 Ethanol, 80 NL/min | 215 |
| B.28 Ethanol, 90 NL/min | 216 |
| B.29 Paraffinöl, 3 NL/min | 218 |
| B.30 Paraffinöl, 5 NL/min | 219 |
| B.31 Paraffinöl, 8 NL/min | 220 |
| B.32 Paraffinöl, 10 NL/min | 221 |
| B.33 Paraffinöl, 15 NL/min | 222 |
| B.34 Paraffinöl, 20 NL/min | 223 |
| B.35 Paraffinöl, 25 NL/min | 224 |
| B.36 Paraffinöl, 30 NL/min | 225 |
| B.37 Paraffinöl, 40 NL/min | 226 |
| B.38 Paraffinöl, 50 NL/min | 227 |
| B.39 Paraffinöl, 60 NL/min | 228 |
| B.40 Paraffinöl, 70 NL/min | 229 |
| B.41 Paraffinöl, 80 NL/min | 230 |
| B.42 Paraffinöl, 90 NL/min | 231 |
| B.43 Glycerin (96 %), 3 NL/min | 233 |
| B.44 Glycerin (96 %), 5 NL/min | 234 |
| B.45 Glycerin (96 %), 8 NL/min | 235 |
| B.46 Glycerin (96 %), 10 NL/min | 236 |

| | |
|---|-----|
| B.47 Glycerin (96 %), 15 NL/min | 237 |
| B.48 Glycerin (96 %), 20 NL/min | 238 |
| B.49 Glycerin (96 %), 25 NL/min | 239 |
| B.50 Glycerin (96 %), 30 NL/min | 240 |
| B.51 Glycerin (96 %), 40 NL/min | 241 |
| B.52 Glycerin (96 %), 50 NL/min | 242 |
| B.53 Glycerin (96 %), 60 NL/min | 243 |
| B.54 Glycerin (96 %), 70 NL/min | 244 |
| B.55 Glycerin (96 %), 80 NL/min | 245 |
| B.56 Glycerin (96 %), 90 NL/min | 246 |
| B.57 Glycerin (99 %), 3 NL/min | 248 |
| B.58 Glycerin (99 %), 5 NL/min | 249 |
| B.59 Glycerin (99 %), 8 NL/min | 250 |
| B.60 Glycerin (99 %), 10 NL/min | 251 |
| B.61 Glycerin (99 %), 15 NL/min | 252 |
| B.62 Glycerin (99 %), 20 NL/min | 253 |
| B.63 Glycerin (99 %), 25 NL/min | 254 |
| B.64 Glycerin (99 %), 30 NL/min | 255 |
| B.65 Glycerin (99 %), 40 NL/min | 256 |
| B.66 Glycerin (99 %), 50 NL/min | 257 |
| B.67 Glycerin (99 %), 60 NL/min | 258 |
| B.68 Glycerin (99 %), 70 NL/min | 259 |
| B.69 Glycerin (99 %), 80 NL/min | 260 |
| B.70 Glycerin (99 %), 90 NL/min | 261 |

Tabellenverzeichnis

| | | |
|-----|--|-----|
| 2.1 | Vor- (+) und Nachteile (-) von Experiment und Simulation | 3 |
| 5.1 | Leistung der untersuchten Solver | 53 |
| 7.1 | Vergleich der skalierten Geschwindigkeitswerte zwischen Simulation und Experiment | 103 |
| 7.2 | Physikalische Eigenschaften der untersuchte Fluide | 105 |
| 7.3 | Weber- und Ohnesorge-Zahlen | 138 |
| 8.1 | Ergebnisse der Deflagration (Teil 1) | 151 |
| 8.2 | Ergebnisse der Deflagration (Teil 2) | 151 |
| 8.3 | Integrierte spezifische kinetische Energiewerte für den größeren Austrittsdurchmesser | 156 |
| 8.4 | Integrierte spezifische kinetische Energiewerte für den kleineren Austrittsdurchmesser | 157 |

Nomenklatur

Römische Symbole

| Symbol | Beschreibung | Dimension | Einheit |
|----------|---|-----------------|---------------|
| A | Quadratische Matrix der Koeffizienten | | |
| <i>a</i> | Koeffizient für Matrixgleichung | | |
| B | Tensor des subgrid-scale Spannungskomponenten | L^2/T^2 | m^2/s^2 |
| b | Inhomogenität | | |
| b | Vektor des subgrid-scale Wärmeflusses | $M/(L^2T)$ | $kg/(m^2s)$ |
| <i>b</i> | Zellflächenmittelpunkt | | |
| <i>c</i> | spezifische Wärmekapazität | $L^2/(T^2Temp)$ | $m^2/(s^2 K)$ |
| <i>c</i> | Schallgeschwindigkeit | L/T | m/s |
| <i>c</i> | LES Konstante | - | - |
| D | beliebige Diffusionskonstante | L^2/T | m^2/s |
| D | Symmetrischer Teil von $\nabla \mathbf{u}$ | $1/T$ | $1/s$ |
| d | Richtungsvektor | L | m |

| Symbol | Beschreibung | Dimension | Einheit |
|----------------|---|--|---|
| \mathbf{d} | Richtungsvektor zwischen Zellmittelpunkt P und Mittelpunkt der Randfläche b | L | m |
| \mathbf{d}_n | Normalvektor auf die Randfläche | L | m |
| d | Tropfendurchmesser | L | m |
| E | spezifische Energie | M/(L T ²) | kg/(m s ²) |
| \mathbf{F} | Kraftdichte | M/(L ² T ²) | kg/(m ² s ²) |
| \mathbf{g} | Erdbeschleunigung (≈ 9.81 m/s ²) | L/T ² | m/s ² |
| g | normaler Gradient auf Randfläche | beliebig | beliebig |
| \mathbf{h} | Vektor des Wärmeflusses | M/(L ² T) | kg/(m ² s) |
| \mathbf{k} | orthogonaler Vektor zur Aufteilung des Diffusionsterms | L | m |
| k | turbulente kinetische Energie | L ² /T ² | m ² /s ² |
| L | Länge | L | m |
| \mathbf{n} | Normalvektor | L | m |
| n | Stoffmenge | - | mol |
| m | Masse | M | kg |
| p | Druck | M/(L T ²) | kg/(m s ²) |
| R | Residuum | | |
| R | universelle Gaskonstante (≈ 8.314462175 J/(mol K)) | (ML ²)/(T ² Temp) | (kg m ²)/(mol s ² K) |
| r | Radius | L | m |

| Symbol | Beschreibung | Dimension | Einheit |
|------------------|---|-------------------|---------------|
| S | Spannungstensor | L^2/T^2 | m^2/s^2 |
| S | Quellterm | $M/(L^2T^2)$ | $kg/(m^2s^2)$ |
| \mathbf{S} | Flächennormalvektor | L^2 | m^2 |
| <i>Schlieren</i> | Größe 'Schlieren' ($= (1 + \alpha_{Gas}^2) \cdot \log(\nabla\rho + 1)$) | M/L^4 | kg/m^4 |
| T | Temperatur | Temp | K |
| t | Zeit | T | s |
| \mathbf{u} | Geschwindigkeitsvektor | L/T | m/s |
| u | Geschwindigkeitsbetrag | L/T | m/s |
| u, v, w | Geschwindigkeitskomponenten | L/T | m/s |
| V | Volumen | L^3 | m^3 |
| \mathbf{x} | Ortsvektor | L | m |
| \mathbf{x} | Lösungsvektor | | |
| x, y, z | kartische Koordinaten | L | m |
| Y | Volumsprozentspezies | $\frac{mol}{mol}$ | - |
| W | Massenprozent | $\frac{kg}{kg}$ | - |

Griechische Symbole

| Symbol | Beschreibung | Dimension | Einheit |
|----------|--|-----------|-----------|
| α | Volumenanteil in der VOF Methode | - | - |
| Δ | paralleler Vektor zur Aufteilung des Diffusionsterms | L | m |
| κ | Krümmung der Grenzfläche in der Mehrphasenmodellierung | - | - |
| μ | dynamische Viskosität | $M/(LT)$ | $kg/(ms)$ |
| ν | kinematische Viskosität | L^2/T | m^2/s |
| ρ | Dichte | M/L^3 | kg/m^3 |
| Φ | beliebige Transportierte Größe | beliebig | beliebig |
| ϕ | Volumenfluss | L^3/T | m^3/s |
| ψ | Proportionalitätsfaktor in der Zustandsgleichung | T^2/L^2 | s^2/m^2 |

Indices

| Symbol | Beschreibung |
|------------------------|--|
| b | randflächebezogen |
| E | Quellterm |
| e | LES Index |
| e | stromaufwärts |
| $erste, zweiteordnung$ | Diskretisierung erster, zweiter Ordnung Genauigkeit |
| f | Fläche |
| $Flasche$ | Flaschenwert |
| Gas | Gas |
| I | Quellterm |
| i | Anfangswert |
| k | LES Index |
| l, r | linke, rechte Seite |
| m | Wert hinter der Schockwelle |
| mol | molar |
| N | Zellmittelpunkt der Nachbarzelle |
| P | Zellmittelpunkt der Zelle |
| pl | Plateau |
| r | Grenflächenkompressionsterm |
| r | Wert vor der Schockwelle |
| $schock$ | Wert für Schockwelle |
| sgs | subgrid-scale |
| sm, sp | <i>Smagorinsky</i> und <i>Spalart-Allmaras</i> Turbulenzmodell |
| vis | viskos |
| x | abhängig von der variable \mathbf{x} |
| δ | Grenzschicht |
| σ | Oberflächenspannung |
| Φ | beliebige Transportierte Größe |
| 0 | zum Zeitpunkt $t = 0$ s |
| 1,2,3,4 | Phase 1,2,3 oder 4 des Deflagrationsprozesses in Kapitel |

Superscripts

| Symbol | Beschreibung |
|--------|---------------------|
| (k) | k-te Zwischenlösung |
| n | neuer Zeitschritt |
| 0 | alter Zeitschritt |

Andere Markierungen

| Symbol | Beschreibung |
|---------------|--|
| \bar{u} | Mittlere Geschwindigkeit |
| \mathbf{u}' | subgrid-scale Schwankung der Geschwindigkeit |
| \hat{n} | Einheitsvektor |
| \tilde{R}_g | Unterscheidungsmerkmal |

Dimensionslose Kennzahlen und charakteristische Größen

| Symbol | Formel | Beschreibung |
|--------|---|--|
| Co | $\frac{u\Delta t}{\Delta x}$ | Courant-Zahl, setzt die Zeitschrittweite einer Simulation fest |
| M | $\frac{u}{c}$ | Mach-Zahl - Verhältnis vom Geschwindigkeitsbetrags zur Schallgeschwindigkeit |
| Oh | $\frac{\mu}{\sqrt{\rho\sigma}d}$ | Ohnesorge-Zahl - Verhältnis der viskosen Kräfte zu den Trägheits- und Oberflächenkräften |
| Re | $\frac{ud}{\nu}$ | Reynolds-Zahl - Verhältnis der Trägheitskräfte zu den viskosen Kräften |
| T^+ | $\frac{d}{u} \sqrt{\frac{\rho Fl}{\rho_{Gas}}}$ | charakteristische Zeitskala |
| T | $\frac{t}{T^+}$ | charakteristische Zeit |
| We | $\frac{\rho_{Gas}u^2d}{\sigma}$ | Weber-Zahl, Verhältnis von Trägheitskräften zu den Oberflächenkräften |

In dieser Arbeit sollen mehrphasige, kompressible Hochgeschwindigkeitsströmungen mittels Experiment und Simulation untersucht werden. Für die korrekte Simulation der Phänomene müssen mehrere Voraussetzungen erfüllt werden. Die wichtigsten sind

- korrekte Modelle für kompressible Strömungen (Zustandsgleichung für die Gas- und Flüssigkeitsphase)
- korrekte Modelle für Mehrphasenströmungen (richtige Beschreibung der Oberfläche zwischen Gas- und Flüssigkeitsphase)
- korrekte Modelle für Turbulenzmodellierung
- Kombination dieser Modelle
- Parallelisierbarkeit der Rechnungen für ausreichende räumliche und zeitliche Auflösung der untersuchten Vorgänge
- Kompatibilität mit anderen Geometrie- und Rechengittererstellungsprogrammen, alternative Strömungslöser sowie Nachbearbeitungsprogramme
- Validierung durch Experimente

Oft existieren Modelle entweder für kompressible oder für mehrphasige Strömungen (mit und ohne explizite Turbulenzmodellierung). Die Kombination ist jedoch nur in seltenen Fällen möglich. Die Kombinierbarkeit sowie die zusätzliche Voraussetzung für Parallelisierbarkeit und Kompatibilität schafft einen Bedarf nach einem speziellen Strömungslöser. Die Programmierung, die Validierung und die Anwendung für typische Fragestellungen eines solchen Strömungslöser ist die Zielsetzung der vorliegenden Arbeit.

Dafür wird die open source Strömungssimulationsbibliothek OpenFOAM[®] herangezogen, da in diesem

- Modelle für kompressible Strömungen vorhanden sind,
- Modelle für mehrphasige Strömungen vorliegen,
- mehrere Turbulenzmodelle implementiert sind,
- die Möglichkeit besteht, den Code zu verändern, neuen Code einzufügen und Modelle zu kombinieren,
- eine hohe Parallelisierbarkeit erreicht werden kann,
- die Kompatibilität mit mehreren anderen Programmen gegeben ist.

Aus diesem Grund sollen in dieser Arbeit diese Vorteile dazu verwendet werden, den Bedarf nach einem kompressiblen, mehrphasigen Hochgeschwindigkeitsströmungslöser mit expliziter Turbulenzmodellierung zu erfüllen.

Dazu soll immer gewährleistet werden, dass der Löser validiert wird und die Simulationen stets von Experimenten begleitet werden, um die physikalische Korrektheit zu zeigen. Ist die Durchführung von Experimenten nicht möglich, so werden Literaturre-sultate zum Vergleich herangezogen.

Ebenfalls soll dieser Strömungslöser dazu verwendet werden, akademische sowie industriennahe Anwendungen zu untersuchen, um grundlegende physikalische Phänomene zu analysieren und zu verstehen.

2.1 Strömungsuntersuchungen in der Verfahrenstechnik

In der Verfahrenstechnik ist die Optimierung bestehender Prozesse und Anlagen oftmals gefordert. Dies dient zum Einen der Ressourcenschonung und zum Anderen der Effizienzsteigerung (Ausbeute, Reinheit, ...). Zu diesem Zweck können Strömungsuntersuchungen genutzt werden. Grundsätzlich können Strömungen entweder durch Experimente oder durch Simulationen untersucht werden. Beide Herangehensweisen haben Vor- und Nachteile.

In der experimentellen Untersuchung wird die physikalische Realität direkt erfasst und sind in Realzeit durchführbar. Strömungssimulationsergebnisse liefern Information über die Strömung im gesamten untersuchten Volumen. Werden Modelle mit Experimenten validiert, so liefern diese für die gleiche Problemstellung belastbare und korrekte Ergebnisse. Wird gewährleistet, dass die Modelle für die untersuchte Strömung korrekt sind, können die Berechnungen schnell automatisiert werden.

Tabelle 2.1: Vor- (+) und Nachteile (-) von Experiment und Simulation in der Strömungsuntersuchung

| Experiment | Simulation |
|---|--|
| + direkte Erfassung der physikalischen Realität | - Modelle zur Beschreibung der physikalischen Realität |
| + in Realzeit durchführbar | - Beschränkung durch verfügbare Hardwareleistung |
| - Messfehler | + Validierte Modelle liefern korrekte Ergebnisse |
| - Punktuelle Erfassung des Strömungsfeldes | + Visualisierung des gesamten Strömungsfeldes |

Wie Tabelle 2.1 zu entnehmen ist, haben Experimente und Simulationen sowohl Vor-

und Nachteile. Jedoch können Nachteile der einen Methode durch die Vorteile der Anderen kompensiert werden. Aus diesem Grund ist es von Vorteil, eine Strömungsuntersuchung sowohl mit Experimenten als auch mit Simulationen durchzuführen.

Numerische Werkzeuge zur Analyse von verfahrenstechnischen Problemstellungen sind in der Industrie weitgehend akzeptiert. CAE (computer-aided engineering) ermöglicht es, Produkte oder Produktionsanlagen zu optimieren, ohne dabei in die eigentliche industrielle Produktion eingreifen zu müssen. Dies ist dann zu bevorzugen, wenn äquivalente experimentelle Optimierungsschritte an Produktionsanlagen schwer durchführbar sind. Dadurch können die Auswirkungen von Designs und Optimierungsschritten vorab erfasst werden. Gleichzeitig unterstützt CAE auch die Behebung von Fehlern, die auf die Anlagen und auch auf die Produkte selbst weitreichende Konsequenzen haben könnten.

Eine andere Alternative stellen Pilotanlagen dar, die die industriellen Vorgänge nachstellen sollen. Diese sind für größere, längerfristige Optimierungsschritte geeignet. Die Strömungssimulation ist ein vorteilhaftes Mittel zur Begleitung solcher längerfristigen Optimierungsmaßnahmen. Für kleine, kurzfristige Veränderungen (z.B. Position von Leitblechen, Ausrichtung von Ein- und Auslässen) kann diese unter Umständen eine zu bevorzugende Alternative darstellen, da diese schnell Ergebnisse liefern kann. Man muss immer beachten, dass Modelle zur Strömungssimulation nach wie vor weiterentwickelt werden. Es muss gewährleistet werden, dass die verwendeten Modelle für die untersuchte Strömung benutzbar sind.

Einige Beispiele für fluiddynamische Aufgabenstellungen in der Verfahrenstechnik finden sich in folgender Liste (Harasek, 2012):

- Mischprozesse: Verteilen von Gasen und Flüssigkeiten
- Anströmung von Trennapparaten
- Optimierung von Druckverlusten
- Stoffaustausch zwischen Phasen
- Stoffdurchgang (z.B. Membrantrennverfahren)
- Kopplung von Strömung, Wärme- und Stoffdurchgang (z.B. Verdampfung, Kondensation)
- Reaktive Strömungen
- Kompressible Strömungen (z.B. Schockwellen)
- Mehrphasenströmungen (Tropfenzerfall, Zerstäubung)

Eine spezielle Klasse stellen Mehrphasenströmungen dar. Diese können gasförmig-fest, gasförmig-flüssig, fest-flüssig, gasförmig-flüssig-fest oder im Falle von zwei unmischbaren Flüssigkeiten flüssig-flüssig sein. Die experimentelle Untersuchung von solchen Strömungen ist eine besondere Herausforderung.

In dieser Arbeit werden mehrphasige kompressible Strömungen untersucht. Die grundsätzliche Analyse erfolgt mit Hilfe von CFD Simulationen, jedoch wird versucht, die Strömungen parallel mit Experimenten zu untersuchen. Ist dies nicht möglich, werden Vergleiche zu Experimenten und Simulationen in der Literatur hergestellt.

In dieser Arbeit wird für die Simulationen ausschließlich das open source CFD Tool OpenFOAM[®] verwendet.

2.2 Ablauf einer CFD-Untersuchung in OpenFOAM[®]

Bei der Analyse einer Strömung mittels Strömungssimulation sind drei Schritte durchzuführen, um ein Ergebnis zu erhalten. Diese sind:

- Geometrieerstellung und Vernetzung (Preprocessing)
- Diskretisierung der beschreibenden Differentialgleichungen (Simulation)
- Auswertung und graphische Darstellung der Lösungen (Postprocessing)

Im Folgenden wird detaillierter auf jede einzelne Stufe eingegangen.

2.2.1 Preprocessing

In der ersten Phase *'Preprocessing'* ist die Problemstellung so aufzubereiten, dass in der nächsten Phase die Simulation gestartet werden kann. Zu Beginn muss die zu untersuchende Geometrie insofern vereinfacht werden, dass nur jene Teile der Geometrie berücksichtigt werden, deren Einfluss auf die Strömung relevant ist. Im Anschluss errichtet man das CAD-Modell der Geometrie, wofür mehrere Softwaretools existieren. Kommerzielle Produkte wie Gambit (ANSYS, 2012), Solid Edge (Softwares, 2012), Solid Works (DassaultSystemes, 2012) oder open source Produkte, wie FreeCad (Riegel und Mayer, 2012) oder Salome (OpenCascade, 2012) eignen sich gut für diesen Schritt. Mit Hilfe der Geometrie ist im Weiteren das Negativvolumen zu erstellen, das das eigentliche Strömungsvolumen darstellt. In dieses Volumen muss ein Rechengitter gelegt werden (siehe Kapitel 4.4). Ein Beispiel ist in Abbildung 2.1 dargestellt, das zur Diskretisierung der Gleichungen benutzt wird.

Dieses Gitter (Mesh) kann in Gambit, Salome oder in OpenFOAM[®] erstellt werden. Wird es nicht in OpenFOAM[®] direkt erstellt, so müssen noch weiters die geometrische

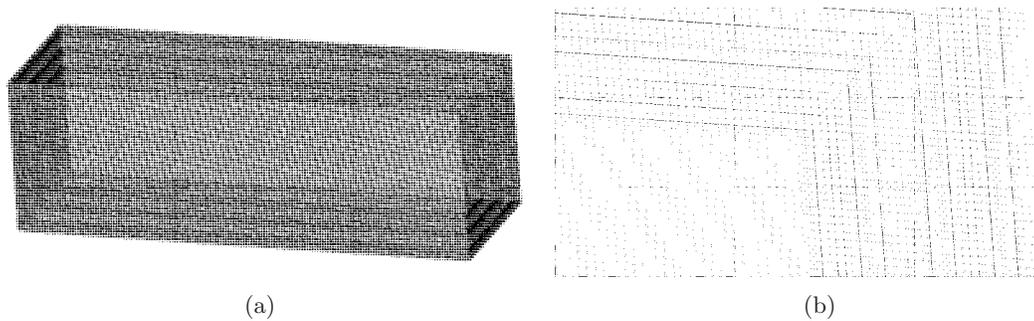


Abbildung 2.1: Einfaches orthogonales Gitter in OpenFOAM® (a) und Detailausschnitt (b) eines Strömungsbeispiels

Beschreibung der Zellen sowie der Ränder in diese Software importiert werden. Weiters müssen die Rand- und Anfangsbedingungen sowie Modelle für Turbulenz, physikalische Eigenschaften, Diskretisierung und Solvereinstellungen eingerichtet werden, um die Strömungssimulation starten zu können.

2.2.2 Simulation

In diesem Schritt werden die Geometriedaten sowie die Feldgrößen in den Speicher des Rechners gelesen. Mit diesen Anfangswerten werden die Gleichungen aus Kapitel 4.1 (Kontinuitäts- und Energiegleichung sowie die Navier-Stokes-Gleichungen) iterativ gelöst. Hier können stationäre oder transiente Simulationen mit diversen Modellen durchgeführt werden. Die in dieser Arbeit verwendeten Modelle werden in den folgenden Kapiteln beschreiben.

Während der Iterationen gibt der Solver Information über den Stand der *Simulation*. Im Folgenden ist ein Beispiel aus OpenFOAM® angeführt:

```

Max Courant Number = 0.02
deltaT = 1.26711e-09
Time = 2.400061325e-05
This is multiRhoSonicFoam working:
MULES: Solving for alpha1
Liquid phase volume fraction = 0.0146305 Min(alpha1) = 0 Min(alpha2) = 1
diagonal: Solving for rho, Initial residual = 0, Final residual = 0, No Iterations 0
DILUPBiCG: Solving for Ux, Initial residual = 1.30933e-05, Final residual = 7.87713e-16, No Iterations
3
DILUPBiCG: Solving for Uy, Initial residual = 0.000163275, Final residual = 5.82811e-18, No Iterations
4
DILUPBiCG: Solving for Uz, Initial residual = 0.000163523, Final residual = 1.7151e-17, No Iterations

```

4

```
DILUPBiCG: Solving for E, Initial residual = 4.93101e-06, Final residual = 3.79541e-16, No Iterations
```

7

```
ExecutionTime = 68485.7 s ClockTime = 73115 s
```

Dabei werden der aktuelle Zeitschritt, Zeitpunkt, Anfangs- und Endresiduen der unterschiedlichen Gleichungen ausgegeben. Die Ergebnisse werden in vorgegebenen Zeit- oder Iterationsschritten gespeichert. Bis zu diesem Zeitpunkt erhält man ausschließlich Textausgaben. Im Gegensatz zu anderen Simulationstools, besitzt OpenFOAM® keine graphische Oberfläche. Die Ergebnisse werden im letzten Schritt visualisiert.

2.2.3 Postprocessing

In der *Postprocessingphase* werden die Ergebnisse derart konvertiert (VTK-Format), sodass sie im Postprocessingtool ParaView bearbeiten werden können. Mit diesem Programm können die Simulationsergebnisse visuell dargestellt werden (siehe Abbildung 2.2). Feldgrößen wie etwa Druck oder Geschwindigkeit können auf definierten Ebenen angezeigt, Stromlinien visualisiert oder Iso-Flächen dargestellt werden.

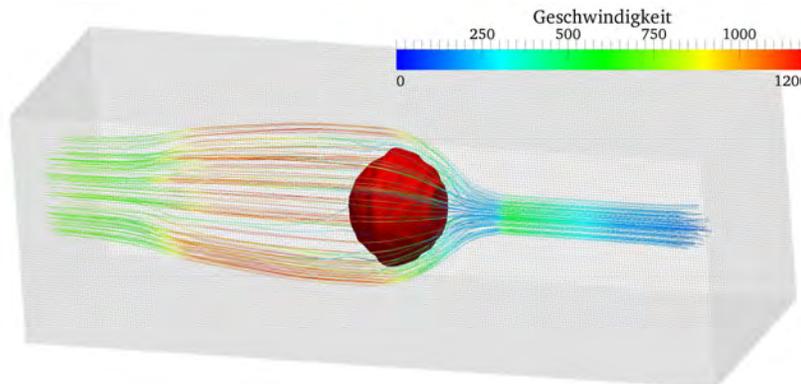


Abbildung 2.2: Beispielhafte Auswertung der Strömung aus Kapitel 6 in Paraview

2.3 Gliederung der Arbeit

In der Verfahrenstechnik kommen Mehrphasenströmungen oft vor. Die simulative und experimentelle Untersuchung solcher Strömungen ist nach wie vor ein wichtiges Thema der Forschung und Entwicklung. Zu diesem Zweck werden mehrere für die Verfahrenstechnik interessante Anwendungsgebiete ausgewählt. Im Folgenden wird ein kurzer

Einblick über die hier vorliegende Arbeit gegeben.

In Kapitel 3 werden vorliegende Literaturstellen und die Stand der Technik dargestellt.

In Kapitel 4 werden die theoretischen Grundlagen für die Simulation der Problemstellungen in den Kapiteln 6, 7, 8 und 9 zusammengefasst. Hierbei wird auf die Diskretisierung der beschreibenden Gleichungen (z.B. Navier-Stokes-Gleichungen), auf Gittergenerierung, Turbulenz- und Mehrphasenmodellierung eingegangen.

In Kapitel 5 wird die Umsetzung der theoretischen Grundlagen aus Kapitel 4 in den CFD Code vorgestellt. Zusätzlich wird der im Rahmen dieser Arbeit erstellte Solver mit einfachen Beispielen validiert, indem die Ergebnisse mit analytischen Ergebnissen sowie Simulationen bzw. Experimenten aus der Literatur verglichen werden. Ergebnisse können auch in der Publikation (Nagy et al., 2012a) gefunden werden.

In Kapitel 6 wird die simulative Untersuchung des Tropfenzerfalls bei Überschallbedingungen dargestellt. Hier wird auf die Turbulenzmodellierung und die Dreidimensionalität des Problems eingegangen, die bisher in der Literatur vernachlässigt wurden. Vergleiche mit Experimenten aus der Literatur sollen zeigen, dass die vorgestellten Simulationen einen weiteren Schritt in Richtung des Verständnisses des Phänomens darstellen. Ergebnisse wurden in den Arbeiten (Nagy und Harasek, 2012; Nagy et al., 2011b, 2012b) veröffentlicht.

In Kapitel 7 werden experimentelle und simulative Ergebnisse des Tropfenzerfalls bei Unterschallbedingungen (Mach Zahl $M \leq 0.6$) vorgestellt. Hierbei wird der Aufbau des Experiments dargestellt, Ergebnisse mit der Literatur verglichen und einige ausgewählte Messungen in CFD Simulationen näher betrachtet. Dabei werden mögliche Unterschiede zwischen der gleichmäßigen und der asymmetrischen Anströmung erarbeitet. Die Erfahrungen aus diesen Untersuchungen werden anschließend dazu verwendet, vorliegende Ergebnisse über Zerstäubung in einer Laboranlage im Detail zu interpretieren ((Nagy et al., 2012c)).

In Kapitel 8 wird die Untersuchung des Bohrprozesses eines innovativen Bohrkopfes im Detail durchbesprochen. Hier soll das theoretische Potenzial des Werkzeuges untersucht werden, ob es in der Lage ist, die nötige kinetische Energie aufzubringen, um Gestein abtragen zu können. Hierzu wird die aufgebrachte kinetische Energie mit der Literatur verglichen. Ergebnisse findet man auch in (Nagy et al., 2012d).

In Kapitel 9 wird eine Feuerlöschanlage experimentell und simulativ untersucht. Dabei wird in der CFD Simulation analysiert, inwieweit der Solver den Prozess richtig abbilden kann und ob, abgesehen von der Verdampfung, andere Phänomene richtig abgebildet werden können. Ergebnisse wurden in (Nagy et al., 2011a) veröffentlicht.

3.1 Zerstäubung und Tropfenzerfall

Als Beispiel zur Optimierung eines Prozesses in der Verfahrenstechnik dient die Zerstäubung von Schweröl in einem Hochofen. Diesem komplexen Prozess liegt der grundlegendere Prozess des Tropfenzerfalls zu Grunde. Aus dem Verständnis der Phänomene des Tropfenzerfalls kann man für die Zerstäubung Schlussfolgerungen ziehen.

Die beim Tropfenzerfall auftretenden wichtigen Kennzahlen sind die *Weber-Zahl* und die *Ohnesorge-Zahl*.

$$We = \frac{\rho_{gas} u d}{\sigma} \quad Oh = \frac{\mu_{Fl}}{\sqrt{\rho_{Fl} \sigma d}} \quad (3.1.1)$$

Im Fall des Tropfenzerfalls gibt die erste Kennzahl (Weber-Zahl) das Verhältnis der Trägheitskräfte der Luftströmung zur Oberflächenspannung der Flüssigkeit an und die zweite Kennzahl (Ohnesorge-Zahl) das Verhältnis der viskosen Kräfte zur Oberflächenspannung.

3.1.1 Instabilität von multiplen Fluiden

Um die Prozesse der Flüssigkeitszerstäubung sowie des Tropfenzerfalls verstehen zu können, müssen die Grundlagen der Theorie der Instabilität von Fluidgrenzschichten definiert werden.

3.1.1.1 Die Rayleigh-Taylor Instabilität

Die Rayleigh-Taylor Instabilität (siehe Abbildung 3.1, links) ist eine Instabilität der Grenzschicht zwischen zwei Fluiden mit unterschiedlichen Dichten. Eine externe Störung (z.B. Gravitation), die normal auf die Grenzfläche zwischen den beiden Fluiden steht, kann einen exponentiellen Anstieg von Wellen an der Grenzschicht verursachen.

Die Oberflächenspannung wirkt dabei als dämpfende Kraft. Bei den Berechnungen der Moden (Wellenzahl, Wellenlänge, Kreisfrequenz/Wachstumsrate) wird von einer anfänglich flachen Grenzschicht ausgegangen. Die nichtviskose Lösung der Eigenwertgleichung kann analytisch angegeben werden (Chandrasekhar, 1981). Die Behandlung von viskosen Flüssigkeiten ist im Gegensatz dazu wesentlich komplizierter, da man die zugehörige Eigenwertgleichung nur mehr numerisch lösen kann (Mikaelian, 1996). Verwendet man den Lösungsansatz der nichtviskosen Lösung für die viskose Eigenwertgleichung (Mikaelian, 1996), so kann man eine approximative analytische Lösung angeben. Diese Lösung wird in (Theofanous, 2010; Theofanous et al., 2012) für den Tropfenzerfall verwendet. In (Mikaelian, 1996) wird angegeben, dass man bei Verwendung des Ansatzes von (Theofanous, 2010; Theofanous et al., 2012) vor allem für die erste Mode der Eigenwertgleichung (größte Wellenlänge) einen nicht zu vernachlässigenden Fehler macht, jedoch wird in (Theofanous et al., 2012) für diese Annäherung eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen angegeben.

Rayleigh-Taylor Instabilität Kelvin-Helmholtz Instabilität

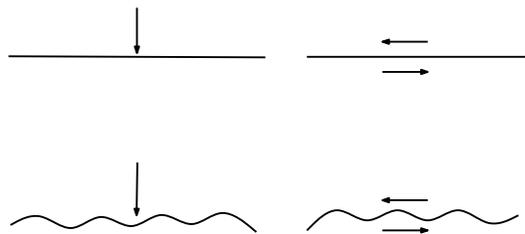


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Rayleigh-Taylor (Normalkräfte) sowie der Kelvin-Helmholtz (Scherkräfte) Instabilitäten

3.1.1.2 Die Kelvin-Helmholtz Instabilität

Die Kelvin-Helmholtz Instabilität (siehe Abbildung 3.1, rechts) entsteht wie folgt. Bei Betrachtung des Gleichgewichtes einer geschichteten Strömung mit zwei Fluiden, die parallel zur Grenzfläche mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten fließen, erzeugen Scherspannungen Instabilitäten (Chandrasekhar, 1981). Diese beschreibt etwa die Wellenbewegung im See oder die Entstehung von Wasserwellen in einem Tank bei einer Luftströmung über dem Wasser. Sowohl für den nichtviskosen (Chandrasekhar, 1981) als auch für den viskosen Fall (Funada und Joseph, 2001) können die Eigenwertgleichungen gelöst werden. In beiden Fällen wird auch in diesem Fall von ebenen Strömungen ausgegangen und eine direkte Umlegung der Lösungen auf den Zerfall eines kugelförmigen Tropfens ist nicht trivial.

3.1.2 Zerstäubung am Beispiel des Hochofens

In der Eisen- und Stahlindustrie erfolgt die Herstellung von Roheisen in Hochöfen. Wie in den schematischen Abbildungen 3.2 und 3.3 dargestellt, wird die vorgewärmte Luft in den unteren Bereich des Hochofens durch Blasdüsen eingeblasen. Eisenoxide, Koks und Flussmittel gelangen von oben mit Hilfe der Schwerkraft in die Verbrennungszone des Ofens. Danach wandern sie bis zum Boden des Hochofens, wo sie zur flüssigen Schlacke und zum flüssigen Eisen werden. Das in der Reaktion entstehende Gas steigt durch den Ofen auf und erwärmt die absinkenden Rohstoffe. Die Endprodukte werden unten in regelmäßigen Abständen am Boden abgelassen und das Gas wird von der Oberseite des Ofens abgesaugt (Paloposki und Hakala, 1996).

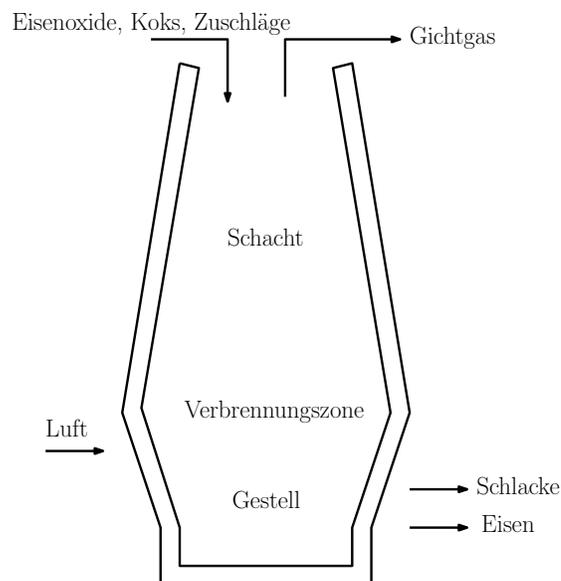


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung des Hochofenprozesses aus (Paloposki und Hakala, 1996; Längen und Yagi, 2000)

Ein Hochofen wird nach drei Zielsetzungen betrieben (Längen und Yagi, 2000):

- niedriger Energieverbrauch
- hohe Produktivität
- Zusammensetzung und Temperatur des Produktes müssen den Anforderungen des Stahlwerks entsprechen und konstant sein.

Um einen möglichst geringen Energieverbrauch zu erhalten, müssen die folgenden Überlegungen im Auge behalten werden (Längen und Yagi, 2000):

- effiziente Benutzung der chemischen Energie des oberen Gichtgases für den Prozess

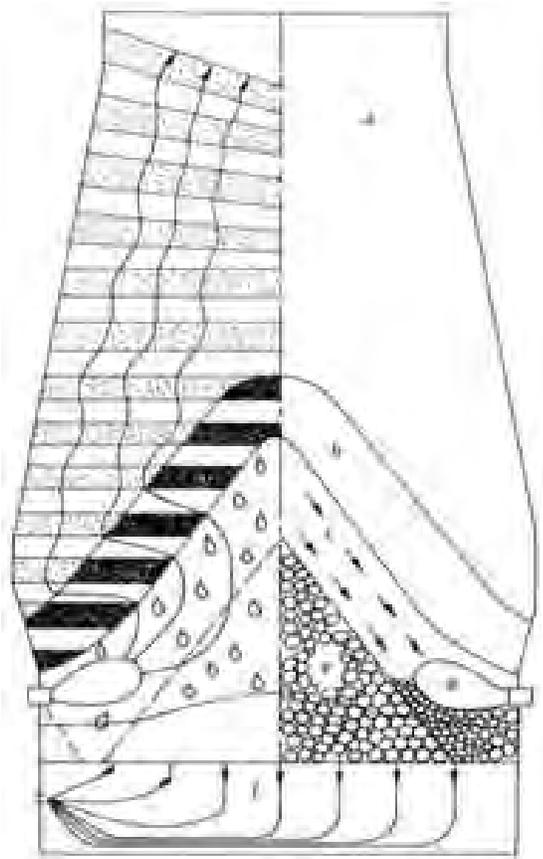


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung des Hochofenprozesses aus (Paloposki und Hakala, 1996; Längen und Yagi, 2000) ((a) Schacht (b) kohesive Zone (c) Hängezone (d) Raceway (e) Toter Mann (f) Gestell)

- Verringerung des spezifischen Volumens der Schlacke
- Dehydration und Entkarbonisierung außerhalb des Hochofens mit kostengünstigen Energiequellen

Heutzutage sind die Hochöfen mit einem Stahlmantel versehen, in dessen Innerem sich eine feuerfeste Auskleidung befindet. Außerhalb wird der Mantel zusätzlich gekühlt. Dies ist aufgrund des hohen Temperaturgradienten innerhalb der Ofens nötig (siehe Abbildung 3.4).

Um den Koksverbrauch des Hochofens zu reduzieren, werden oft zusätzliche Brennstoffe wie Kohlestaub, Heizöl oder Erdgas benutzt. In industriellen Anlagen erfolgt die hier untersuchte Eindüsung und Zerstäubung von Öl in den Hochofen durch eine Lanze. Dabei wird das Öl am Ende der Lanze durch eine Wasserdampfströmung zerstäubt (siehe Abbildung 3.5).

Das Öl sollte so stark zerstäubt werden, dass die Verbrennung in einem definiertem

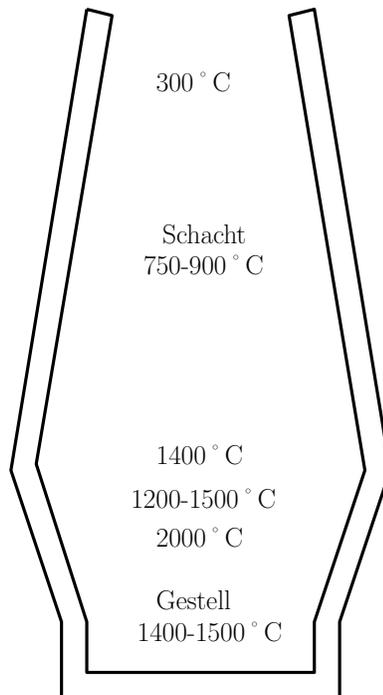


Abbildung 3.4: Temperaturänderung im Hochofen (Lüngen und Yagi, 2000)

Bereich (Raceway, siehe Abbildung 3.5) stattfinden kann. Tritt unverbranntes Öl aus der Raceway aus, kann dies zu Betriebsproblemen führen. Daher müssen die Öltropfen klein genug sein, um eine vollständige Verbrennung des Öls zu gewährleisten.

In (Paloposki und Hakala, 1996) wurde die Tropfengrößenverteilung untersucht. Die Autoren geben an, dass bei einem gegebenen Ölvolumenstrom je höher die Anzahl der Lanzen ist, umso kürzer ist die Länge, die die Flüssigkeit nach Austritt aus der Düse für die Zerstäubung braucht. Damit findet auch die Verbrennung in einem kleinerem Volumen statt.

In (Helle und Saxén, 2002) werden als Maßnahme für die vollständige Verbrennung der Öltropfen, die bei der Zerstäubung entstehen, die Erhöhung der Temperatur sowie der Turbulenz und die gleichzeitige Eindüsung von Sauerstoff angegeben. Simulative Untersuchungen der Eindüsung von Schweröl in den Hochofen finden sich auch in (Andahazy et al., 2006; Jordan et al., 2010).

Für das grundlegende Verständnis des Prozesses wurde die Zerstäubung von Öl in einer Laboranlage in (Zauner, 2010; Kirchbacher, 2010) untersucht. Dabei wurden PIV-Aufnahmen für die Tropfengeschwindigkeitsverteilung, Tropfengrößenverteilungen sowie Hochgeschwindigkeitsaufnahmen analysiert.

In der Arbeit (Castaño Martínez, 2012) wurde die mehrphasige Simulation der Geometrie der Laboranlage aus (Zauner, 2010) durchgeführt. Dabei sind erste Ergebnisse

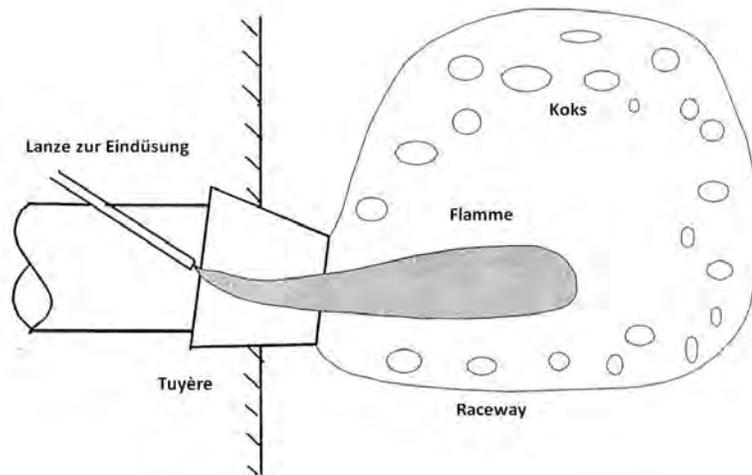


Abbildung 3.5: Zerstäubung und Verbrennung von Heizöl in einem Hochofen (Paloposki und Hakala, 1996)

von den lokalen Phänomenen der Zerstäubung entstanden, jedoch müssen Ergebnisse in sowohl (Castaño Martínez, 2012) als auch in (Zauner, 2010) mit den Erfahrungen aus dieser Arbeit weiter interpretiert werden (siehe dazu Kapitel 7).

3.1.3 Einteilung der Tropfenzerfallregime nach klassischen Kriterien

Der Zerfall von Tropfen in einer gleichmäßigen Gasströmung wird oft in mehrere Regime aufgeteilt. Zum Beispiel werden die Regime in (Joseph et al., 1999) folgendermaßen eingeteilt (siehe auch Abbildung 3.6):

- *vibrational*
- *bag*
- *bag and stamen*
- *sheet stripping*
- *wave crest stripping*
- *catastrophic*

Es wurden dabei Bilder mit niedriger Auflösung und Qualität (bedingt durch die damals verfügbare Kamaratechnik) analysiert und vor allem bei Weber-Zahlen über 350 im *catastrophic* Regime Rayleigh-Taylor Wellen angenommen.

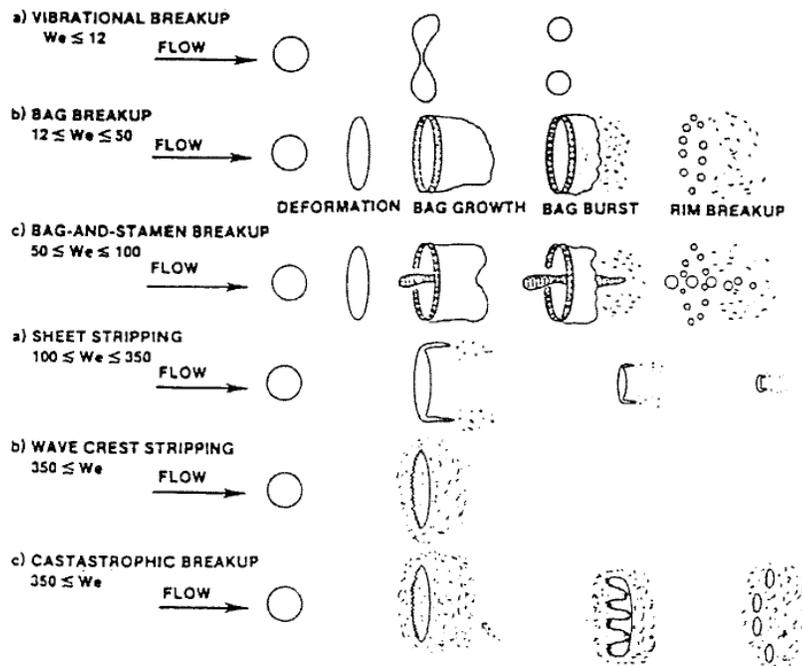


Abbildung 3.6: Zerfallsregime aus (Joseph et al., 1999)

3.1.4 Einteilung der Tropfenzerfallregime nach dem Konzept von Theofanous

Die Fragestellung des Tropfenzerfalls bei Überschallbedingungen entstand vor allem in drei Themengebieten (Theofanous et al., 2012), die sich über die vergangenen 60 Jahre erstrecken. Das erste Thema beschäftigte sich mit der Verbreitung von chemischen Kampfstoffen (Taylor, 1949). Das zweite behandelt Schäden verursacht durch Regentropfen im Überschallflug (Engel, 1958; Harper et al., 1972; Reinicke und Waldmann, 1970; Simpkins und Bales, 1994). Das dritte behandelt die Kraftstoffeinspritzung in Verbrennungsmotoren sowie Raketen (Gelfang, 1996; Hinze, 1955; Hsiang und Fäth, 1992).

Theofanous hat im Rahmen seiner Arbeitsgruppe den Tropfenzerfall näher analysiert. 2008 wurde die LIF-Methode (*laser-induced fluorescence*, siehe Abbildung 3.7) zur Visualisierung der dreidimensionalen Oberfläche des zerfallenden Tropfens eingesetzt (Theofanous und Li, 2008; Theofanous, 2010; Theofanous et al., 2012). Mit Hilfe der dreidimensionalen Visualisierung wurde gezeigt, dass die Annahmen in (Joseph et al., 1999) aufgrund der Qualität der Bilder verfälscht sind. Die Autoren haben gezeigt, dass bei hohen Weber-Zahlen (über 1000) keine Rayleigh-Taylor Wellen entstehen und das catastrophic Regime nicht existiert. Bei den Messungen wurde gewährleistet, dass sich die

Gasströmung, durch die ein Flüssigkeitstropfen zerfallen soll, mit Geschwindigkeiten $M \geq 1$ bewegt und dass der Tropfen perfekt umflossen wird, um asymmetrische Effekte zu vermeiden.

Ein Beispiel für den Anfangszustand eines solchen Prozesses bei $M = 3$ kann in Kapitel 7 in Abbildung 6.9 näher beschrieben. Experimentell wurde der Tropfenzerfall bei Überschallbedingungen in (Theofanous und Li, 2008; Theofanous, 2010; Theofanous et al., 2012) behandelt. Dabei wurde eine Beziehung zwischen Weber- und Ohnesorge-Zahl gefunden, die beschreibt, ab welchen Bedingungen für bestimmte Stoffgrößen der Zerfall stattfinden kann.

Die Zerfallsregime wurden in (Theofanous und Li, 2008) für niederviskose Flüssigkeiten in zwei Bereiche geteilt. Zerfälle in Strömungen mit einer Weber-Zahl unter 1000 wurden dem Phänomen des *Rayleigh-Taylor Piercings* (RTP) zugeschrieben und Zerfälle in Strömungen mit einer Weber-Zahl über 1000 wurden dem Phänomen des *shear-induced entrainment* (SIE) zugeteilt.

Im Fall RTP wird der Tropfen von Normalkräften verformt (siehe Abbildung 3.1). Dabei entstehen Rayleigh-Taylor Instabilitäten, die zum Zerfall führen. Bei bestimmten Bedingungen kann die flache Flüssigkeitsscheibe in der Mitte durchbohrt werden.

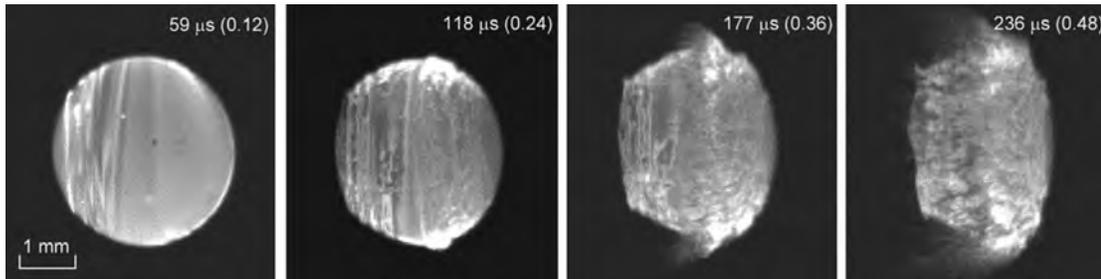


Abbildung 3.7: Laser-induced fluorescence 'LIF' Aufnahme des Tropfenzerfalls aus (Theofanous und Li, 2008)

In Abbildung 3.7 ist die zeitliche Entwicklung der Veränderung der charakteristischen Tropfenform während des Anfangsabschnittes des Zerfalls im SIE Regime (siehe parallele Kräfte in Abbildung 3.1) sichtbar (Theofanous und Li, 2008). Zwei gut unterscheidbare Gebiete ergeben sich auf der Vorderseite des Tropfens. In der Mitte ist ein glatter Bereich (*mirror-smooth*) mit einem abrupten Übergang in eine Region mit auswärtsgerichteter Strömung erkennbar (*outwardly directed*), die für die Bewegung der Flüssigkeitsmasse zuständig ist. Als Ursache für den mittleren Bereich wird die Stabilität der Stagnationszone vor dem Tropfen angegeben. Als Ursache für die Form der zweiten Region werden Grenzflächeninstabilitäten der ausgedehnten Flüssigkeitsoberfläche identifiziert.

Um unterschiedliche Experimente untereinander sowie Simulationen mit Experi-

menten vergleichen zu können, wird in (Engel, 1958; Theofanous und Li, 2008) eine charakteristische Zeit $T = \frac{tu}{d} \sqrt{\frac{\rho_{Gas}}{\rho_{Fl}}}$ eingeführt. In Abbildung 3.7 werden diese Zeiten hinter der Realzeit in Klammern angegeben. Mit Hilfe dieser Zeiten sind Zerfallsprozesse bei unterschiedlichen Weber-Zahlen qualitativ vergleichbar.

In (Theofanous, 2010; Theofanous et al., 2012) werden nicht nur niederviskose Flüssigkeiten betrachtet, sondern es werden auch Zerfälle von viskosen Flüssigkeiten in die Untersuchung involviert. Dabei wird eine Abhängigkeit der Übergangs-Weber-Zahl von der Ohnesorge-Zahl angegeben (siehe Abbildung 3.8). In (Theofanous et al., 2012) werden bereits drei Phänomene für den Zerfall des Tropfens angegeben.

- Unterhalb der ersten Kritikalität findet kein Zerfall statt.
- Die erste Kritikalität (blaue Kurve in Abbildung 3.8) stellt den Übergang zum Zerfall des Tropfens durch *Rayleigh-Taylor Piercing, RTP* dar.
- Die zweite Kritikalität (rote Kurve in Abbildung 3.8) gibt den Übergang zum *shear-induced entrainment, SIE* an.
- Die dritte Kritikalität (braune Kurve in Abbildung 3.8) gibt das Einsetzen von Kelvin-Helmholtz (K-H) Instabilitäten an.

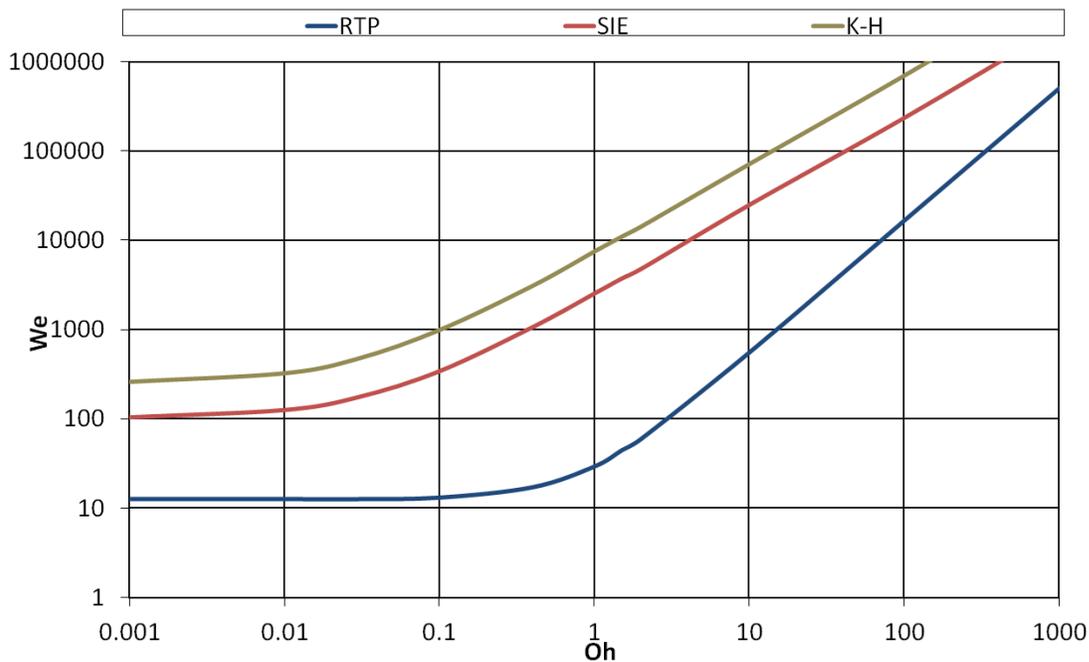


Abbildung 3.8: Abhängigkeit der Übergangs-Weber-Zahl von der Ohnesorge-Zahl nach (Theofanous et al., 2012)

Für niederviskose Fluide ($Oh \leq 0.1$) finden Theofanous et al. den Übergang zum RTP bei knapp $We \approx 10^1$. Der zweite Übergang beginnt bei 10^2 und SIE ist ab 10^3 vollständig ausgebildet. Erste K-H Wellen tauchen bereits bei $2 \cdot 3 \cdot 10^2$ auf. Bei hohen Viskositäten steigen die Grenzwerte mit der Ohnesorge-Zahl an. Dies wird durch die steigende Viskosität der Flüssigkeit bedingt, die ab einer gewissen Oh-Zahl einen zusätzlich zur Oberflächenspannung stabilisierenden Einfluss auf den Zerfall hat.

Der Übergang zwischen dem konstanten und dem linearen Verlauf der Kurve für RTP wird mit dem Intervall $Oh = [2 \cdot 10^{-1}; 2 \cdot 10^0]$ angegeben.

Die experimentelle Untersuchung von Zerfällen in einer Strömung mit einer Weber-Zahl von über 10000 ist sehr schwierig (Überschallzerfall), da das Messequipment sehr kostspielig ist. Aus diesem Grund sind Strömungssimulationen zur Untersuchung der Phänomene von Vorteil (Chang und Liou, 2007). In Kapitel 6 werden Phänomene des Anfangszustands solch eines Zerfalls untersucht. Dabei wird auf die Untersuchung der Spannungen an der Tropfenoberfläche eingegangen, um das Phänomen besser verstehen zu können.

Kurven wie in Abbildung 3.8 sind sehr hilfreich für die Beurteilung des Zerstäubungsprozesses, da man eine Aussage treffen kann, ob Tropfen noch zerfallen können oder nicht. Dazu muss gewährleistet werden, dass die Kurven nicht nur für den Zerfall bei gleichmäßiger, sondern auch bei einer einseitiger Umströmung stimmen. Sollte es Abweichungen geben, müssen diese erarbeitet werden. In Kapitel 7 soll die Gültigkeit der Kurven aus Abbildung 3.8 für eine einseitige Anströmung untersucht werden und Resultate für die Analyse von Aufnahmen von Zerstäubungsprozessen herangezogen werden.

3.2 Geothermie

Eine der wichtigsten gesellschaftlichen Themen heutzutage ist die Fragestellung der Energiegewinnung. Nach wie vor wird größtenteils Energie aus fossilen Energiequellen hergestellt. Laut (Gupta und Roy, 2007) werden ca. 63% des weltweiten Energieverbrauchs durch Öl und durch Erdgas abgedeckt. Hinzu kommt, dass der Bedarf nach Energie in den letzten Jahrzehnten immer weiter gestiegen ist, und die Prognosen für die nächsten Jahre zeigen den gleichen Trend. Mit der Energieumwandlung aus fossilen Brennstoffen wird zum Treibhauseffekt beigetragen, auf der anderen Seite müssen Lagerstätten erschlossen werden, die immer schwieriger zu erreichen sind. Aus diesen Gründen ist es sehr wichtig, alternative Rohstoffe und effizientere Methoden zur Energiegewinnung zu entwickeln.

Die geothermische Energie ist eine vielversprechende Alternative zur Energie aus fossilen Brennstoffen oder der Kernspaltung, da weder CO_2 noch giftige oder radioaktive Rohstoffe bei der Energieproduktion entstehen oder verwendet werden. Geothermische

Energie ist auf der Erde reichlich vorhanden und sie wurde mittlerweile jahrzehntlang an bestimmten Orten erfolgreich für industrielle und private Zwecke verwendet. Zwei wesentliche Vorteile dieser Art der Energiegewinnung resultieren aus der Tatsache, dass sie jahreszeit- und tageszeitunabhängig zur Verfügung stehen.

Wärme aus dem Erdinneren fließt stetig zur kalten Erdkruste und erhitzt dabei Gestein und im Boden gespeichertes Wasser, welche einige hundert Meter bzw. Kilometer unter der Erdoberfläche liegen. Diese gespeicherte Wärme wird als heißes Wasser oder Wasserdampf an die Erdoberfläche befördert und kann zur Gewinnung von elektrischer Energie benutzt werden. Ebenso kann die Wärme direkt verwertet werden. Das Wasser kann bereits im Gestein natürlich vorkommen. Ebenfalls kann Wasser in die Tiefe gepumpt werden, wobei es als Wärmeträgermedium benutzt wird. es kann auch in bestimmte Tiefen gepumpt werden, um die Wärme aufzunehmen.

Die Verschiebung der Kontinentalplatten erzeugt auf der Erdoberfläche Regionen mit hoher seismologischer Aktivität. In diesen Regionen findet man oft aktive Vulkane. Jedoch liegen die geothermischen Lagerstätten ebenfalls größtenteils in diesen Regionen, da in jenen Bereichen durch die Verschiebung der Kontinentalplatten ein zusätzlicher Wärmeeintrag geliefert wird und Lagerstätten in geringeren Bohrtiefen aufgefunden werden können.

Der Abbau dieser Energiealternative ist im Vergleich zu fossilen Energiequellen wegen technischer Herausforderungen (Huenges, 2010) wie

- mögliche hoch korrosive Fluide in bestimmten Bohrtiefen, die das Equipment zerstören können,
- hohe Temperaturen
- der zur Beförderung benötigte große Durchmesser des Bohrlochs, das aufgrund des benötigten Flusses des Wassers gewährleistet werden muss,

relativ teuer. Jedoch hat diese Energiealternative seit dem Preisanstieg von fossilen Brennstoffen eine neue Bedeutung erlangt.

Um nicht nur in jenen Regionen mit erdoberflächennahen Lagerstätten diese alternative Energie abbauen zu können, müssen die Kosten der Bohrung und Beförderung gesenkt werden. Kommerzielle Bohrausrüstungen bestehen aus einem System von sich drehenden Rollen aus hartem Material, die durch mechanische Reibung Gestein abtragen. Aufgrund der starken Beanspruchung verschleißten sogar die härtesten Materialien rasch und müssen regelmäßig ausgetauscht werden. Der Tausch der Bohrköpfe ist einer der Kostenfaktoren, die diese Energie zur Zeit unökonomisch machen (Gupta und Roy, 2007; Huenges, 2010).

Mit einem neu entwickelten Gerät (GeothermalAnywhere, 2012) könnte sich in Zukunft ein Paradigmenwechsel in der geothermischen Energieverwertung einstellen. Auch könnte diese Technologie in der Ölindustrie neue Möglichkeiten eröffnen. Dazu sollen in einem speziellen Bohrkopf Wasserpakete durch einen repetitiven Deflagrationsprozess beschleunigt werden, die dann außerhalb des Bohrkopfes einzeln Gesteinsschichten abtragen sollen. Dabei wird das Gestein vom Bohrkopf nicht berührt. Durch den berührungslosen Prozess soll ermöglicht werden, dass man für den Bohrprozess nur einen Bohrkopf benötigt, was zur Erhöhung der Standzeit des Gerätes und zu einer Kostensenkung führen würde. Weiters soll dadurch die ökonomisch erreichbare Bohrtiefe erhöht und damit die Benutzung der geothermischen Energie für weitere Gebiete ermöglicht werden. Die vorläufige Zielsetzung für die Technologie soll eine maximale Bohrtiefe von 6 bis 7 km sein, die endgültig angestrebte Tiefe liegt bei 10 km. Die Nutzung von Wasser zur Beförderung des abgetragenen Gesteins trägt zusätzlich zu einer grünen und umweltfreundlichen Technologie bei.

Da Experimente bei den extremen Bedingungen einerseits während der Bohrung, andererseits in den als Ziel gesetzten Tiefen sehr schwierig und kostspielig durchzuführen sind, ist aus Sicht der Prozessoptimierung eine fluiddynamische Simulation von Vorteil. Dadurch können von vornherein Fehlentscheidungen ausgeschlossen werden. Über die Simulation soll weiters das Potential der Bohrausrüstung untersucht werden. Weiters sollen die Abbauraten des Gesteins untersucht werden. Die Ergebnisse sind in Kapitel 8 ersichtlich.

3.3 Feuerlöschanlagen

Feuersicherheit ist einer der wichtigsten sicherheitstechnischen Aspekte. Neben den allgemein bekannten Sicherheitsmaßnahmen wie z.B. Handfeuerlöschgeräte, Wassersprinkleranlagen oder die richtige Aufbewahrung von Chemikalien existieren seltenere, aber nicht weniger wichtige Feuerbekämpfungsmethoden. In speziellen Gebäuden wie zum Beispiel in einer Bibliothek, in einem Museum oder in einem Serverraum können die ersteren oft nur bedingt eingesetzt werden. Da sich in solchen Gebäuden Gegenstände von kulturellem Wert oder mit Feinelektronik befinden, würde der Einsatz von mit Wasser betriebenen Feuerlöschanlagen zu zusätzlichen Schäden führen.

Im 20. Jahrhundert wurde Halon (halogenierter Kohlenwasserstoff) in vielen Bereichen, wo z.B. Wasser nicht eingesetzt werden kann, verwendet. Neben Bibliotheken und Museen fand Halon bei der Kriegsmarine und der Luftwaffe großen Einsatz. Die Funktionsweise im Brandfall erfolgt durch homogene Inhibition. In der ersten Phase werden durch die hohe Temperatur im Feuer Halogenradikale (Rodewald und Remppe, 2005) von den Halonmolekülen abgespaltet. Ebenso entstehen in der Verbrennung z.B.

Methan $\cdot\text{CH}_3$ - und $\cdot\text{OH}$ -Radikale. Die Verbrennung ist nur als Kettenreaktion möglich. In der zweiten Phase binden die Halogenradikale die Radikale $\cdot\text{CH}_3$ und $\cdot\text{OH}$ und entfernen diese aus der Kettenreaktion. Damit wird die Kette unterbrochen und das Feuer erlischt. Je leichter ein Halogen aufgespalten werden kann, umso größer ist die Löschwirkung.

Um 1970 wurde die ozonschädigende Wirkung der Halone festgestellt. Aus diesem Grund wurden nach 1990 alle Halonvarianten verboten. Es wurde an alternativen Methoden geforscht, die Halon ersetzen sollten. Im Allgemeinen gibt es heutzutage je nach Einsatzgebiet drei Hauptalternativen (Gressmann, 2005; Rodewald und Rempe, 2005):

- Inertgas-Löschanlagen
- Löschanlagen mit halogenierten Kohlenwasserstoffen
- CO_2 -Löschanlagen

Inertgas-Löschanlagen (Gressmann, 2005) haben eine Hauptlöschwirkung vor allem durch Stickwirkung. Dabei wird der Raum mit Stickstoff, Argon oder einer definierten Mischung aus diesen geflutet und dabei die Sauerstoffkonzentration auf unter 15 % herabgesetzt. Die benötigte Inertgaskonzentration muss auf den jeweiligen Raum abgestimmt sein. Dabei müssen in Deutschland z.B. die Flutungszeiten unter 60 Sekunden liegen.

Löschanlagen mit *halogenierten Kohlenwasserstoffen* beruhen auf dem gleichen Lösprinzip wie jene mit Halon. In den neueren Verbindungen gibt es jedoch keine Brom- und Chloratome und die Anzahl der Fluoratome ist sehr gering. Dadurch wird erreicht, dass diese Verbindungen einen vernachlässigbaren Einfluss auf die Ozonschicht haben.

CO_2 -Löschanlagen beruhen ebenfalls auf den Verdrängungseffekt des Verbrennungsgases. CO_2 kommt in drei Arten zum Einsatz (Rodewald und Rempe, 2005). CO_2 -Schnee, CO_2 -Nebel und CO_2 -Gas werden je nach Anwendung eingesetzt. Alle haben Vor- und Nachteile, die für die jeweilige Anwendung berücksichtigt werden müssen.

Alle Materialien werden grundsätzlich in Druckbehältern (meistens Druckflaschen) aufbewahrt. Jene Stoffe, die zwischen 2-6 MPa in flüssiger Form auftreten, werden in den Druckflaschen als Flüssigkeit gelagert. Es existieren zwei Designs zur besten Verteilung der Löschmittel (U.S.CoastGuard, 2007). In der ersten Variante werden die Druckflaschen an einem Ort gelagert und mit einem gemeinsamen Leitungssystem verbunden. Dieses System leitet nach der Öffnung der Absperrventile das ausströmende Fluid zu speziellen Düsen, die das Löschmittel im Raum gleichmäßig verteilen. In der zweiten Variante werden die Druckflaschen im Raum verteilt angebracht. Diese können wiederum durch ein gemeinsames Leitungssystem verbunden werden oder jede einzelne Druckflasche kann separat mit Düsen verbunden sein. Diese Anlagen müssen

automatisch angesteuert sein, um im Brandfall ohne menschliches Eingreifen die Feuerbekämpfung durchführen zu können. Parallel dazu müssen manuelle Auslöser bei Notausgängen angebracht werden, um trotzdem menschliches Eingreifen zu ermöglichen.

Aus diesem Grund ist es wichtig, dass solche Anlagen verstanden und damit richtig betrieben werden. Dazu wird eine Testanlage dieser Art in Kapitel 9 experimentell und simulativ untersucht. Dies ist wichtig, damit man die Vorgänge (vor allem in der Anfangsphase, die man experimentell schwer auflösen kann) auch lokal verstehen und gegebenenfalls optimieren kann.

4.1 Beschreibende Gleichungen

Um die Bewegung eines Fluids beschreiben zu können, verwendet man ein System von gekoppelten partiellen Differentialgleichungen. Dieses System besteht in den meisten Fällen aus

- der Kontinuitätsgleichung
- den Navier-Stokes-Gleichungen
- der Energiegleichung

Dazu können zusätzliche spezielle Transportgleichungen hinzukommen, die z.B. den Transport von unterschiedlichen Phasen oder Spezies beschreiben.

Die Kontinuitätsgleichung ist in allgemeiner Form

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} = 0 \quad (4.1.1)$$

Diese Gleichung beschreibt die Massenerhaltung beziehungsweise aus einer anderen Sichtweise den advektiven Transport der Größe ρ . Hierbei ist ρ die Dichte des betrachteten Fluids, t ist die Zeit und \mathbf{u} ist der Vektor der Geschwindigkeit.

Die Navier-Stokes-Gleichungen beschreiben die Erhaltung des Impulses in einem Fluid sowie den nichtlinearen Transport der Impulsdichte $\rho \mathbf{u}$. Die Gleichungen wurden unabhängig von G. G. Stokes in Großbritannien sowie von M. Navier in Frankreich am Anfang des 19. Jahrhunderts abgeleitet. Sie stellen durch die zusätzliche Behandlung der Viskosität des Fluids eine gewisse Erweiterung der Euler-Gleichungen dar.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{S}_{vis} + \mathbf{F} \quad (4.1.2)$$

p ist der Druck, $S_{vis} = \rho\nu[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T - \frac{2}{3}\nabla \cdot \mathbf{u}]$ ist der viskose Spannungstensor mit der kinematischen Viskosität ν und \mathbf{F} ist ein Quellterm (z.B.: $\rho\mathbf{g}$ für Auftrieb).

Der erste Term auf der linken Seite stellt die zeitliche Veränderung des Impulses dar und der zweite Term die Advektion des Impulses. Die Advektion (auch Konvektion) ist ein physikalischer Prozess, der den Transport einer Größe mit der Strömung mit der Geschwindigkeit \mathbf{u} beschreibt. In diesem Fall wird der Impuls mit dieser Geschwindigkeit transportiert. Dies führt die Nichtlinearität in die Gleichung hinein, da damit die Geschwindigkeit mit sich selbst transportiert und verändert wird. Auf der rechten Seite stellt der erste Term die Änderung der Impulsdichte aufgrund des Druckgradienten dar, der zweite Term die Auswirkung der Viskosität, wobei dieser Term in vielen Fällen als eine reine Diffusion behandelt wird. Die Diffusion ist ein physikalischer Prozess, der zu einer gleichmäßigen Verteilung der Größen führt. \mathbf{F} ist eine mögliche zusätzliche Impulsdichte, die abhängig von der Art der Strömung entstehen kann, wie z.B. Oberflächenspannung, Auftrieb, in chemischen Reaktionen oder porösen Medien.

Hierbei ist es sichtbar, dass in diesen Gleichungen eine Koppelung zwischen der räumlichen Änderung der Druckes und der Geschwindigkeit besteht. Ist ein Fluid (z.B. ein Gas) kompressibel, so kann sich die Dichte als Funktion des Druckes sowie der Temperatur verändern. Im einfachsten Fall wird dies durch die ideale Gasgleichung beschrieben.

$$pV = nRT = \frac{m}{m_{mol}}RT \quad \rightarrow \quad \rho = \frac{pm_{mol}}{RT} = p\psi_{Gas} \quad (4.1.3)$$

V ist das vom Gas eingenommene Volumen, n ist die Stoffmenge, R ist die universelle Gaskonstante ($R = 8.314 \frac{J}{mol K}$), T ist die Temperatur des Gases, m und m_{mol} sind die Masse des Gases sowie die molare Masse des Gases und ψ_{gas} ist der temperaturabhängige Proportionalitätskoeffizient zwischen Dichte und Druck. Diese lineare Beziehung stimmt für niedrige Drücke. Existiert eine Abweichung vom linearen Verhalten, so muss man Polynome höherer Ordnung oder zusätzliche Korrekturfaktoren verwenden (siehe Kapitel 9.2).

Dadurch hat man bis zu diesem Punkt eine Gleichung, die für den Transport der Dichte zuständig ist, drei Gleichungen, die für den Transport der Geschwindigkeits- bzw. Impulsdichtekomponenten und eine zusätzliche Gleichung, die für die Berechnung der Druckes aus der Dichte ermöglicht.

Will man auch die Veränderung der Temperatur ermöglichen, muss man eine zusätzliche Transportgleichung einführen. Diese soll eine Energie transportieren, die selbst mit der Temperatur verknüpft ist. Diese Gleichung kann die folgende Form haben:

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot ((E + p)\mathbf{u}) = \nabla \cdot \mathbf{h} \quad (4.1.4)$$

E ist die transportierte Energie und \mathbf{h} ist der Vektor des Wärmeflusses. E kann abhängig von der Art der Strömung unterschiedliche Formen annehmen. Sind die dominanten Größen die kinetische und die innere Energie, ist $E = \frac{\rho \mathbf{u}^2}{2} + \rho c_v T$ mit der spezifischen Wärmekapazität c_v .

4.2 Diskretisierung mit dem Finite-Volumen-Verfahren

4.2.1 Diskretisierung von Raum und Zeit

Das gekoppelte System von partiellen Differentialgleichungen 4.1.1-4.1.2, 4.1.4 kann analytisch nur für bestimmte einfache Geometrien gelöst werden. Um die Strömung in beliebigen Geometrien beschreiben zu können, werden diese Gleichungen diskretisiert. Bei der Diskretisierung im Sinne der Finite-Volumen-Verfahren ist die Umwandlung der partiellen Differentialgleichungen 4.1.1-4.1.2, 4.1.4 in ein System von algebraischen Gleichungen mit Hilfe von diskreten Größen gemeint. Dazu teilt man den Raum in diskrete Zellen, die diesen ausfüllen und abgrenzen (räumliche Diskretisierung) und die Zeit in eine finite Anzahl an Zeitschritte (zeitliche Diskretisierung). Eine schematische Zeichnung dieser Überlegungen kann man in Abbildung 4.1 sehen. Die Ableitungen in diesem Kapitel werden in Anlehnung an (Rusche, 2002; Jasak, 1996) durchgeführt.

Eine solche Zelle kann im Allgemeinen ein beliebiges Polyeder sein (siehe Abbildung 4.2). Ein solches Polyeder wird von n Flächen berandet und mit den anderen Zellen verbunden. Die Zellflächen können auch eine beliebige Form haben (z.B. Dreieck, Viereck, usw.). Bevorzugt werden würfelförmige Zellen mit quadratischen Flächen verwendet. Eine Zelle wird durch mehrere Größen definiert. Der Zellmittelpunkt P ist definiert durch das Volumenintegral

$$\int_{V_P} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) dV = 0$$

Der Mittelpunkt einer Fläche f ist analog definiert durch das Flächenintegral

$$\int_S (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) dS = 0$$

Der Flächenvektor \mathbf{S} ist normal zur Fläche f und der Betrag ist gleich dem Flächeninhalt der Fläche f . Die Richtung ist von innen (Zelle P) nach außen (Nachbarzelle N) gerichtet. Der Einheitsvektor normal zur Fläche ist definiert durch $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{S}}{|\mathbf{S}|}$. Der Richtungsvektor vom Zellmittelpunkt P zum Nachbarzellmittelpunkt N ist gegeben durch $\mathbf{d} = \mathbf{x}_N - \mathbf{x}_P$. Ist der Normalvektor \mathbf{n} parallel zu \mathbf{d} , so ist das Rechengitter orthogonal.

In dieser Arbeit werden ausschließlich statische Gitter verwendet, was bedeutet, dass sich die Zellen im Laufe der Simulation nicht verändern. Die Größen wie Geschwindig-

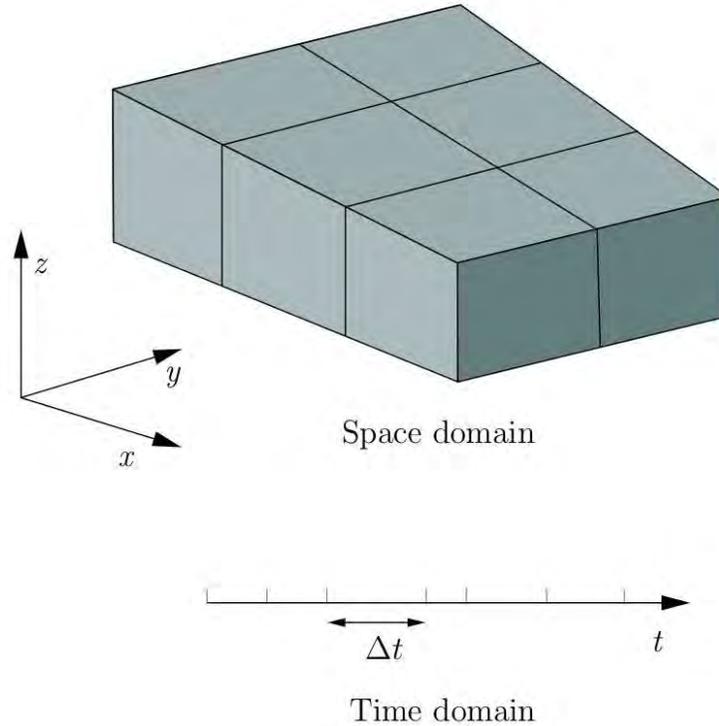


Abbildung 4.1: Räumliche und zeitliche Diskretisierung (Rusche, 2002; NablaLtd, 2012)

keitskomponenten, Dichte oder Druck werden alle im Zellmittelpunkt gespeichert. Dies stellt die grundsätzliche Herangehensweise in OpenFOAM[®] (OpenCFDLtd, 2012) dar.

4.2.2 Diskretisierung der Gleichungen

Um die partiellen Differentialgleichungen 4.1.1-4.1.2, 4.1.4 in ein System algebraischer Gleichungen umformen zu können, werden die Differentialgleichungen im ersten Schritt in Integrodifferentialgleichungen umgeformt. Dazu nimmt man die allgemeine Transportgleichung von der allgemeinen Größe Φ

$$\frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \Phi) = \nabla \cdot (D \nabla \Phi) + S_{\Phi}(\Phi) \quad (4.2.1)$$

Dabei kann Φ zum Beispiel für die Geschwindigkeit \mathbf{u} in den Navier-Stokes-Gleichungen stehen. Dabei ist D die Diffusionskonstante für die jeweilige Transportgleichung.

Man integriert über das jeweilige Zellvolumen V_P und den jeweiligen Zeitschritt Δt .

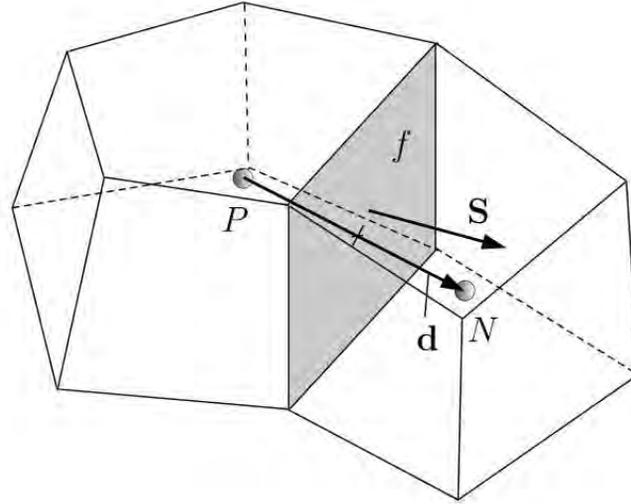


Abbildung 4.2: Parameter für die Diskretisierung (Rusche, 2002; NablaLtd, 2012)

$$\begin{aligned}
 & \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V_P} \frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} dV + \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \Phi) dV \right] dt \\
 &= \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V_P} \nabla \cdot (D \nabla \Phi) dV + \int_{V_P} S_{\Phi}(\Phi) dV \right] dt
 \end{aligned} \tag{4.2.2}$$

Die meisten Volumenintegrale über die Raumableitungen werden durch das verallgemeinerte Gauß'sche Theorem in Oberflächenintegrale umgeformt.

$$\int_V \nabla \otimes \Phi dV = \int_S d\mathbf{S} \otimes \Phi \tag{4.2.3}$$

Dabei steht der Operator \otimes für beliebige Tensorprodukte wie das innere oder das äußere Produkt, die mit dem Nablaoperator ∇ , der Divergenz, $\nabla \cdot \Phi$, dem Gradienten $\nabla \Phi$ oder dem Rotor $\nabla \times \Phi$ der Größe Φ darstellen.

Will man die in Gleichung 4.2.3 vorkommenden Oberflächenintegrale über die Zellflächen lösen, muss man die Größen Φ_P , welche im Zellmittelpunkt berechnet werden, auf die Oberfläche f interpolieren (Φ_f).

4.2.2.1 Flächeninterpolation

'Upwind' Diskretisierung

Dabei wird angenommen, dass der Wert an der Fläche Φ_f einerseits konstant auf der Fläche f ist und gleich dem Wert im Zellmittelpunkt ist. Abhängig von der Strömungsrichtung wird der Zellmittelpunktswert aus der Zelle selbst oder aus der Nachbarzelle genommen.

$$\Phi_{f,U} = \begin{cases} \Phi_P & \text{für } (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) > 0 \\ \Phi_N & \text{für } (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) < 0 \end{cases} \quad (4.2.4)$$

Diese Diskretisierung garantiert die Beschränktheit der Lösung, ist jedoch nur von Genauigkeit erster Ordnung. Man kann zeigen (Kuhlmann, 2010; Jasak, 1996; Rusche, 2002), dass der führende Fehlerterm bei dieser Diskretisierung eine zusätzliche Diffusion einführt, was sich negativ auf z.B. unstetige Sprünge (Druck bei einer Schockwelle) auswirken kann.

'Zentrale-Differenzen' Diskretisierung

Dabei wird der Wert auf der Fläche linear aus dem Zellmittelpunkt interpoliert. Diese Diskretisierung ist von Genauigkeit zweiter Ordnung, jedoch ist die Beschränktheit der Lösung nicht gewährleistet, da der führende Fehlerterm die dritte räumliche Ableitung beinhaltet (Kuhlmann, 2010), die zu Schwingungen der Lösung führen kann. Dadurch kann z.B. durch den abrupten Sprung der Dichte eine räumliche Schwingung der Dichte entstehen. Damit kann teilweise der physikalisch sinnvolle maximale Wert überschritten werden.

$$\Phi_{f,ZD} = f_x \Phi_P + (1 - f_x) \Phi_N \quad (4.2.5)$$

$$\text{mit } f = \frac{|\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_N|}{|\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_N| + |\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_P|}.$$

'Upwind-Zentrale-Differenzen' Diskretisierung

Diese Diskretisierung ist ähnlich der 'Zentrale-Differenzen' Diskretisierung mit dem Unterschied, dass die Richtung der linearen Interpolation ähnlich der 'Upwind' Diskretisierung von der Strömungsrichtung abhängt. Je nach Strömungsrichtung wird der Gradient für die lineare Interpolation entweder aus der Zelle oder aus der Nachbarzelle herangezogen.

4.2.2.2 Gradient

Der Gradiententerm $\nabla\Phi$ kann unterschiedlich diskretisiert werden (Rusche, 2002). In dieser Arbeit wird ausschließlich die Methode der *Gaußintegration* verwendet. Diese Methode berechnet einen Gradienten von Φ im Zellmittelpunkt aus dem Wert auf der Fläche Φ_f . Dazu wird das Gauß'sche Theorem verwendet.

$$\int_v \nabla\Phi dV = \int_S d\mathbf{S}\Phi \approx \sum_f \mathbf{S}\Phi_f \quad (4.2.6)$$

Der Wert von Φ_f kann z.B. mit den Diskretisierungsmethoden aus Kapitel 4.2.2.1 berechnet werden.

4.2.2.3 Advektion

Für die Diskretisierung des Divergenztermes $\nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\Phi)$ wird das Volumenintegral mit dem Gauß'schen Theorem in ein Oberflächenintegral umgewandelt.

$$\int_v \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\Phi) dV = \int_S d\mathbf{S} \cdot (\rho\mathbf{u}\Phi) \approx \sum_f \mathbf{S} \cdot (\rho\mathbf{u})_f \Phi_f = \sum_f F\Phi_f \quad (4.2.7)$$

$F = \mathbf{S} \cdot (\rho\mathbf{u})_f$ ist der Massenfluss durch die Fläche f . Wiederum kann der Wert Φ_f auf der Fläche f mit Hilfe der Interpolationsmethoden aus Kapitel 4.2.2.1 berechnet werden.

Da dieser Term die mögliche Nichtlinearität in die Transportgleichung bringt (z.B. in den Navier-Stokes-Gleichungen), ist die richtige Diskretisierung dieses Termes von höchster Wichtigkeit.

4.2.2.4 Diffusion

Für die Diskretisierung des Termes $\nabla \cdot (D\nabla\Phi)$ wird wiederum das Gauß'sche Theorem verwendet, da man auch hier das Volumenintegral in ein Oberflächenintegral überführt.

$$\int_V \nabla \cdot (D\nabla\Phi) dV = \int_S d\mathbf{S} \cdot (D\nabla\Phi) \approx \sum_f D_f(\mathbf{S} \cdot \nabla\Phi)_f \quad (4.2.8)$$

Dies ist zulässig, falls D ein Skalar ist. Auf orthogonalen Rechengittern ist die Annäherung für $(\nabla\Phi)_f$ in Gleichung 4.2.6 von Genauigkeit zweiter Ordnung. Auf nicht orthogonalen Gittern wird ein zusätzlicher Term eingeführt (Jasak, 1996; Rusche, 2002).

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla\Phi)_f = \Delta \cdot (\nabla\Phi)_f + \mathbf{k} \cdot (\nabla\Phi)_f \quad (4.2.9)$$

Die Vektoren Δ und \mathbf{k} sind unterschiedlich definierbare Vektoren und unterteilen den Gradienten in einen orthogonalen beziehungsweise nicht orthogonalen Teil. Dabei wird Δ meist parallel zu \mathbf{d} definiert. Details können in (Jasak, 1996) gefunden werden.

4.2.2.5 Quellterme

Quellterme S_Φ können allgemeine Funktionen von Φ sein. Vor der Diskretisierung wird der Term linearisiert.

$$S_\Phi = S_I \Phi + S_E \quad (4.2.10)$$

Die Terme S_I und S_E können weiters von Φ selbst abhängen. Danach wird das Volumenintegral in der Form

$$\int_V S_\Phi(\Phi) dV = S_I V_P \Phi_P + S_E V_P \quad (4.2.11)$$

ausgeführt. Die Linearisierung wird eingeführt, damit bei der Zeitintegration 4.2.2.6 der Einfluss von Φ für den Quellterm zum neuen Zeitpunkt (beim impliziten Verfahren) berücksichtigt wird (siehe Gleichung 4.2.16).

4.2.2.6 Zeitableitung und Zeitintegration

Die Diskretisierung der Zeitableitung $\frac{\partial \rho \Phi}{\partial t}$ ist gegeben durch

$$\int_V \frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} dV = \frac{\rho_P^n \Phi_P^n - \rho_P^0 \Phi_P^0}{\Delta t} V_P \quad (4.2.12)$$

Für die Zeitintegration wird in dieser Arbeit ausschließlich das implizite Euler Verfahren verwendet, das von Genauigkeit erster Ordnung ist. Beim expliziten Verfahren wird der Zeitschritt Δt durch die Courant-Zahl (CFL Zahl) $Co = \frac{\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{S}}{\mathbf{d} \cdot \mathbf{S}} \Delta t \leq 1$ beschränkt. Das implizite Verfahren ist hingegen von der Theorie her bedingungslos stabil.

Dabei bezeichnet der obere Index n den Wert zum neuen Zeitpunkt $\Phi^n = \Phi(t + \Delta t)$ und der Index 0 $\Phi^0 = \Phi(t)$ den Wert zum alten Zeitpunkt. Bisher wurden die oberen Indices weggelassen. Bei dieser Methode wird angenommen, dass in den oben angeführten Gleichungen

$$\begin{aligned} \Phi_P &= \Phi_P^n \\ \Phi_f &= \Phi_f^n \\ \mathbf{S} \cdot (\nabla \Phi)_f &= \mathbf{S} \cdot (\nabla \Phi^n)_f = \Delta \cdot (\nabla \Phi^n)_f + \mathbf{k} \cdot (\nabla \Phi^0)_f \end{aligned} \quad (4.2.13)$$

gilt. Das heißt, dass die Zeitintegration die Werte im Zellmittelpunkt und auf der Fläche f zum neuen Zeitpunkt ergibt. Dies garantiert auch die zeitliche Beschränktheit der Lösung. Dabei muss erwähnt werden, dass der nicht orthogonale Term aus Gleichung 4.2.9 explizit behandelt wird (Rusche, 2002).

Mit den angeführten Diskretisierungen kann man die Integrodifferentialgleichung 4.2.2

$$\begin{aligned} & \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V_P} \frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} dV + \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \Phi) dV \right] dt \\ &= \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V_P} \nabla \cdot (D \nabla \Phi) dV + \int_{V_P} S_{\Phi}(\Phi) dV \right] dt \end{aligned} \quad (4.2.14)$$

schreiben als

$$\begin{aligned} & \int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{\rho_P^n \Phi^n - \rho_P^0 \Phi_0}{\Delta t} V_P + \sum_f F \Phi_f \right] dt \\ &= \int_t^{t+\Delta t} \left[\sum_f D_f (\mathbf{S} \cdot \nabla \Phi)_f + S_I V_P \Phi_P + S_E V_P \right] dt \end{aligned} \quad (4.2.15)$$

mit der Annahme in 4.2.13 ergibt die Zeitintegration

$$\frac{\rho_P^n \Phi^n - \rho_P^0 \Phi_0}{\Delta t} V_P + \sum_f F \Phi_f^n = \sum_f D_f (\mathbf{S} \cdot \nabla \Phi^n)_f + S_I V_P \Phi_P^n + S_E V_P \quad (4.2.16)$$

Setzt man die jeweilige Oberflächeninterpolation aus Kapitel 4.2.2.1 ein, formt man die Gleichung um und fasst man alle Terme außer Φ_P^n und Φ_N^n in Koeffizienten $a_{P,N}$ zusammen, kann man Gleichung 4.2.16 schreiben als

$$a_P \Phi_P^n + \sum_N a_N \Phi_N^n = R_P \quad (4.2.17)$$

Dabei werden im ersten Term alle Beiträge aus dem Zellmittelpunkt P zusammengefasst, im zweiten Term alle Beiträge aus allen Nachbarzellen N und im dritten Term alle von Φ unabhängigen Quellterme. Gleichung 4.2.17 kann man als Matrixgleichung aufschreiben

$$\underline{\underline{A}} \Phi = \underline{\underline{R}} \quad (4.2.18)$$

Hier sind die Vektoren $\underline{\Phi}$ und \underline{R} nicht im physikalischen Sinne zu verstehen, vielmehr stellen diese eine Liste der Feldgrößen in den einzelnen Zellen dar.

Unterschiedliche Lösungswege solcher Matrixgleichungen werden in (Rusche, 2002; Jasak, 1996) im Detail behandelt. In OpenFOAM[®] wird die Matrixgleichung iterativ gelöst.

4.2.3 Residuum

Bei der iterativen Lösung einer Matrixgleichung in der Form

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (4.2.19)$$

erhält man nach der k -ten Iteration die Annäherung der Lösung der Gleichung

$$A\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{b} - \mathbf{r}^{(k)}, \quad (4.2.20)$$

wobei $\mathbf{r}^{(k)}$ das Residuum nach der k -ten Iteration ist. Definiert man $\epsilon^{(k)} = \mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}$ als die Abweichung der momentanen Lösung von der exakten Lösung \mathbf{x} , so gilt

$$A\epsilon^{(k)} = \mathbf{r}^{(k)} \quad (4.2.21)$$

Der Sinn von mehreren Iterationen besteht darin, dieses Residuum möglichst klein zu machen.

In OpenFOAM[®] werden die Residuen berechnet, indem man die instantane Lösung in die Gleichung 4.2.16 einsetzt und den Betrag des Unterschiedes zwischen der linken und rechten Seite der Gleichung vergleicht (OpenCFDLtd, 2011). Dieser Wert wird vor der nächsten Iteration als Anfangsresiduum herangezogen. Die Bedingung für eine konvergente Lösung ist, dass dieser Wert unter einen vordefinierten Wert fallen muss.

4.3 Randbedingungen

Im Gegensatz zur physikalischen Welt, in der das untersuchte Gebiet von der Umgebung umgeben und damit beeinflusst wird, wird in der Simulation das Rechengebiet bei der Geometriedefinition abgegrenzt. Um den Einfluss der Umgebung in die Rechnung einfließen zu lassen, werden Randbedingungen auf der Berandung des Strömungsvolumens definiert. Es gibt viele Arten von Randbedingungen, wobei die wichtigsten in zwei Gruppen unterteilt werden können:

- Die **Dirichlet** Randbedingung schreibt für die jeweilige Variable auf dem Rand einen fixen Wert zu.

- Die **von Neumann** Randbedingung schreibt den Gradienten für die jeweilige Variable auf dem Rand vor.

In Kapitel 4.2.2.1 werden die Werte aus dem Zellmittelpunkt auf die Oberfläche f der Zelle interpoliert, um bei der Diskretisierung die Summe der Produkte von Fläche und Variable auf der Fläche berechnen zu können. Beinhaltet die Summe über die Flächen der Zelle auch Flächen am Rand, so kommen Randbedingungen ins Spiel.

In (Rusche, 2002) werden dazu folgende Größen zusätzlich definiert. Abbildung 4.3 zeigt eine zweidimensionale Zelle am Domänenrand mit dem Zellmittelpunkt P . Die Fläche am Rand wird mit b bezeichnet, wobei der Vektor von Zellmittelpunkt zum Mittelpunkt auf b mit \mathbf{d} gekennzeichnet ist. Die Normalkomponente dieses Vektors ist \mathbf{d}_n . Wiederum wird angenommen, dass der angegebene Wert am Rand für die gesamte Fläche b gilt.

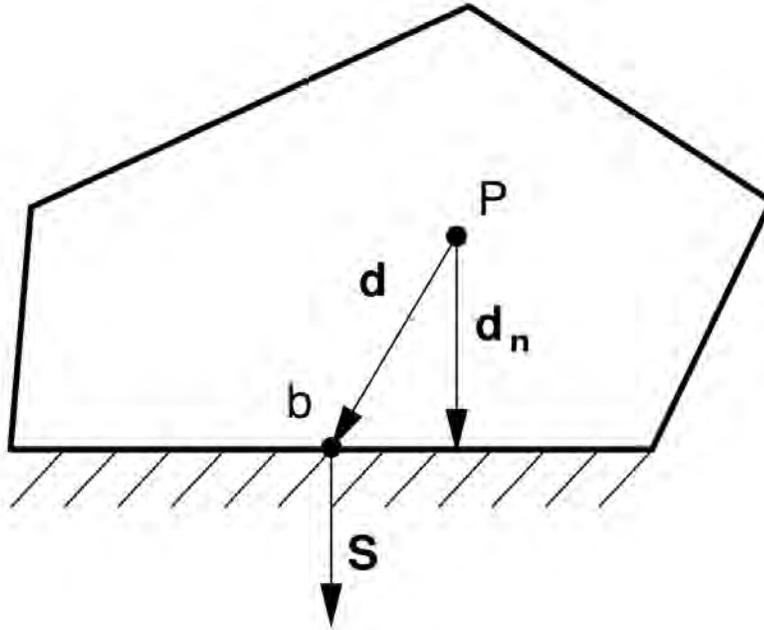


Abbildung 4.3: Parameter für die Diskretisierung in einer Zelle am Domänenrand (Rusche, 2002; NablaLtd, 2012)

Die **Dirichlet Randbedingung** gibt einen fixen Wert Φ_b auf der Randfläche vor. Wird der Wert auf der Randfläche b für die Rechnung gebraucht, so wird dieser Wert $\Phi_b = \Phi_f$ gesetzt (siehe dazu Advektion in Kapitel 4.2.2.3).

Wird der Gradient $(\nabla\Phi)_f$ auf der Randfläche b benötigt (z.B.: Diffusion), so wird dieser mit Hilfe des Wertes im Zellmittelpunkt errechnet.

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla\Phi)_f = |\mathbf{S}| \frac{\Phi_b - \Phi_P}{|\mathbf{d}_n|} \quad (4.3.1)$$

Die **von Neumann Randbedingung** fixiert den normalen Gradienten $g_b = (\nabla^\perp \Phi)$ auf der Randfläche b .

Wird der Wert Φ_f auf der Fläche benötigt, so wird aus dem Zellmittelpunkt extrapoliert:

$$\Phi_f = \Phi_P + \mathbf{d}_n \cdot (\nabla \Phi)_f = \Phi_P + |\mathbf{d}_n| g_b \quad (4.3.2)$$

Wird der Gradient auf der Randfläche gebraucht, so kann g_b direkt verwendet werden:

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla \Phi)_f = |\mathbf{S}| g_b \quad (4.3.3)$$

Eine spezielle Variante dieser Randbedingung ist, wenn der Gradient auf der Randfläche Null gesetzt wird $g_b = 0$.

4.4 Gittergenerierung

In Kapitel 4.2 wurden einzelne beliebige Zellen für die Diskretisierung gezeigt. Nun wird der Prozess der Generierung aller Zellen im Strömungsvolumen kurz erläutert. Dieser Vorbereitungsschritt ist von großer Wichtigkeit, da die Qualität der Zellen auf die Konvergenz und damit die Rechenzeit während der Simulation und die Genauigkeit der Lösung Einfluss nimmt.

Grundsätzlich gibt es zwei Hauptkategorien von Gittern (Koomullil et al., 2008):

- strukturiertes (z.B. orthogonales) Gitter
- unstrukturiertes Gitter

Beide haben sowohl bei der Gittergenerierung selbst als auch bei der Genauigkeit der Strömungssimulation Vor- und Nachteile.

4.4.1 Strukturiertes Gitter

Ein strukturiertes Gitter setzt sich in drei Dimensionen durch hexaedrische Zellen mit einer impliziten Konnektivität der Zellen zusammen. Die Erzeugung eines strukturierten Gitters für komplexe Geometrien (z.B. Geometrie in Kapitel 9) benötigt viel Arbeit, da man die Geometrie in Untergeometrien zerteilen muss, die einzeln mit einem strukturierten Gitter versehen werden können.

In Abbildung 4.4 sieht man ein zwei- und ein dreidimensionales strukturiertes Gitter. Dabei ist zu beachten, dass die Anzahl der Zellen auf gegenüberliegenden Kanten gleich sein muss. Diese Bedingung beschränkt die Gittergenerierung in beliebigen Geometrien.

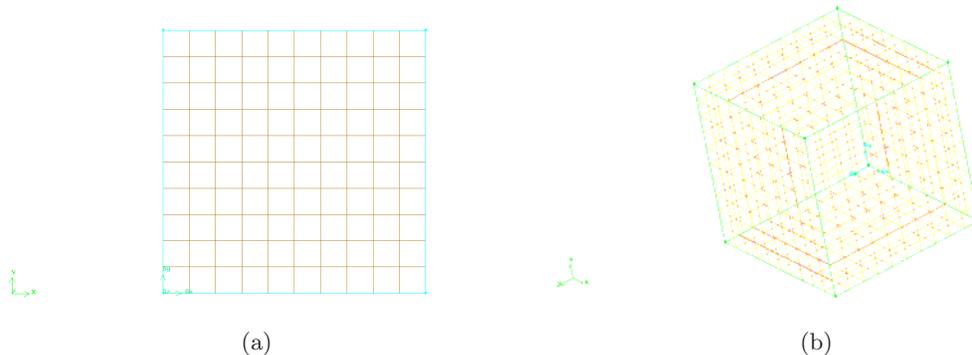


Abbildung 4.4: Zweidimensionales (a) und dreidimensionales (b) strukturiertes Gitter

Dabei ist implizit definiert, welche die sechs Nachbarzellen für eine bestimmte Zelle sind. Dies erleichtert die Strukturierung und die Lösung der Matrixgleichung 4.2.18.

4.4.2 Unstrukturiertes Gitter

Ein unstrukturiertes Gitter wird in drei Dimensionen aus beliebigen Zellen (z.B. Tetraeder, Pyramiden usw.) aufgebaut, die eine explizite Konnektivität besitzen. Vorteile dieser Methode liegen in der Automatisierbarkeit der Gittergeneration, da die Geometrien nicht so stark in Untervolumina zerteilt werden müssen wie für strukturierte Gitter. Jedoch kann ein stark verzerrtes Gitter (stark nicht orthogonal) große Auswirkungen auf die Genauigkeit der Strömungssimulation haben.

In Abbildung 4.5 ist ein zwei- und ein dreidimensionales unstrukturiertes Gitter zu sehen. In der zweidimensionalen Geometrie ist zu erkennen, dass in diesem Fall nicht eindeutig ist, in welcher Richtung die Nachbarzellen liegen. Teilweise haben fünf Zellen einen gemeinsamen Knoten. Aus diesem Grund muss explizit definiert werden, welche Zellen welche Nachbarzellen haben. Dazu wird eine Liste der Nachbarn erstellt. Diese Zuordnung kann die Matrixgleichung 4.2.18 kompliziert gestalten und zu einer langsameren Konvergenz führen.

Als Beispiel zur Erstellung eines unstrukturierten Gitters in GAMBIT werden in Abbildung 4.6 die wichtigsten Schritte des Cooper Algorithmus gezeigt (ANSYS, 2012). Hierzu muss die Mantelfläche mit einem strukturierten zweidimensionalen Gitter vermesht werden (siehe Abbildung 4.6 (a)). Eine Fläche (Quellfläche) wird mit einem zweidimensionalen unstrukturierten Gitter versehen (siehe Abbildung 4.6 (b)).

Dazu wird mit Hilfe des strukturierten Mantelgitters das unstrukturierte Flächengitter durch das Volumen gezogen. Auf der gegenüberliegenden Seite wird von der Quellfläche aus (in Abbildung 4.6 (b) durch den roten Kreis gekennzeichnet) ein ähnliches unstrukturiertes Flächenmesh erzeugt. Das endgültige Gitter in in Abbildung 4.5 (b)

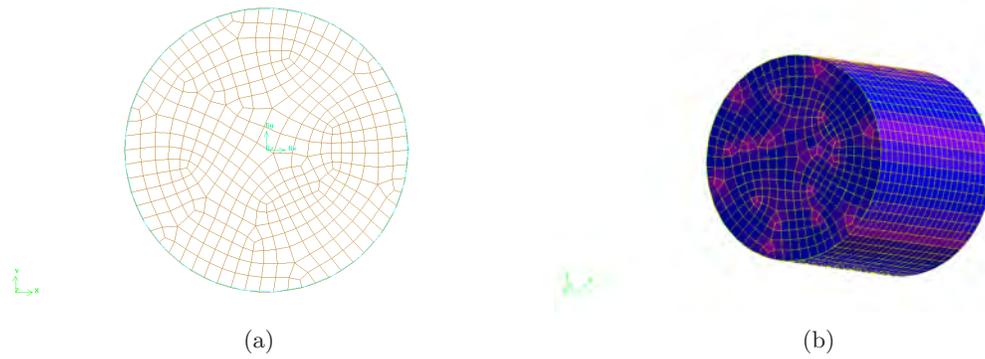


Abbildung 4.5: Zweidimensionales (a) und dreidimensionales (b) unstrukturiertes Gitter

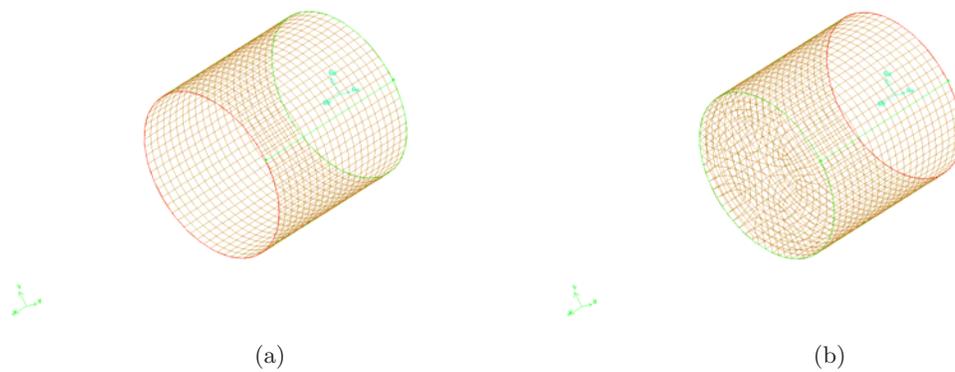


Abbildung 4.6: Erstellungsschritte zum unstrukturierten Gitter

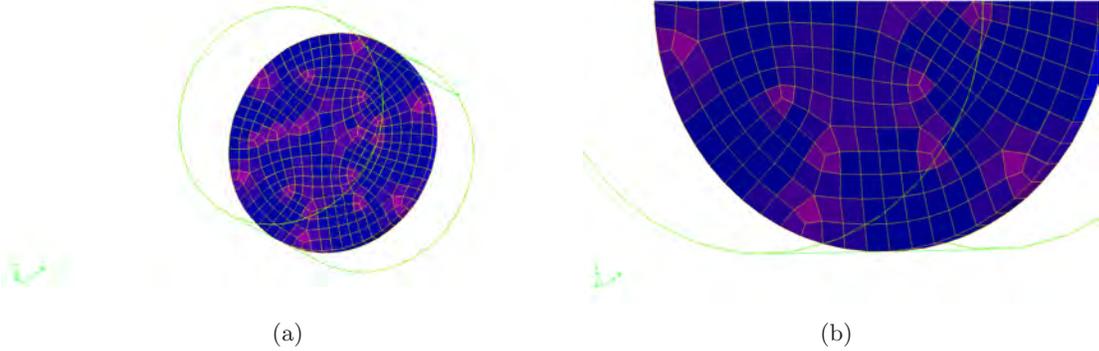


Abbildung 4.7: Qualität des unstrukturierten Gitters

zu sehen.

In Abbildung 4.7 werden Zellen auf einer Ebene durch den Zylinder gezeigt. Dabei sind Zellen mit guter Qualität in blauer Farbe dargestellt und Zellen von schlechter Qualität in magenta. Ein Maß für die Qualität der Zelle ist die Verzerrtheit ('*equisize-skew*'), die durch das Verhältnis der Differenz aus dem Zellvolumen und dem Volumen einer gleichseitigen Zelle mit dem gleichen Umfangsradius und dem Volumen der gleichseitigen Zelle definiert ist (ANSYS, 2012).

$$\text{Verzerrtheit} = \frac{V_{\text{Zelle}} - V_{\text{gleichseitig}}}{V_{\text{gleichseitig}}} \tag{4.4.1}$$

Damit liegt diese Größe zwischen 0 und 1, wobei 0 eine gleichseitige (würfelförmige) Zelle von perfekter Qualität und 1 eine degenerierte Zelle von unakzeptierbarer Qualität darstellt.

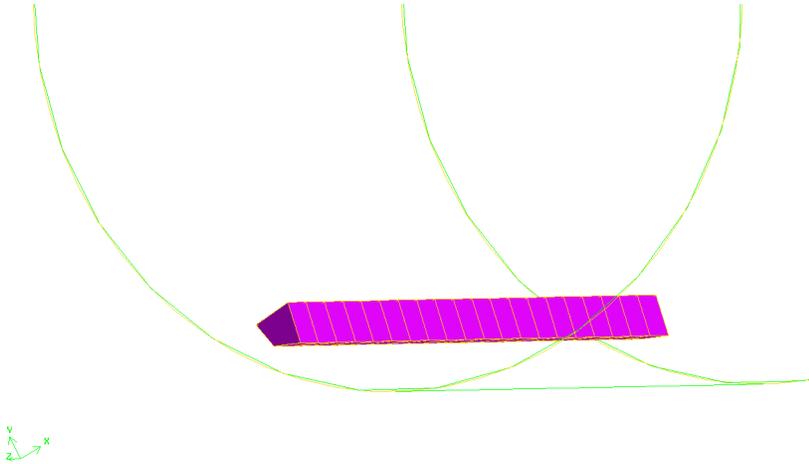


Abbildung 4.8: Schlechteste Zellen im unstrukturierten Gitter

Durch den Cooper Algorithmus wird die Qualität der zweidimensionalen Zellen durch das Volumen mitgenommen (siehe Abbildung 4.8).

4.5 Turbulenzmodellierung

Sind Trägheitskräfte in einer Strömung größer als die viskosen Kräfte (d.h. die Reynolds-Zahl ist hinreichend groß), so treten Turbulenzphänomene in dieser Strömung auf. Die laminare Strömung schlägt durch statistische Schwankungen in eine turbulente Strömung um.

Eine turbulente Strömung kann dadurch charakterisiert werden, dass z.B. die Geschwindigkeit im zeitlichen Verlauf um einen mittleren Wert schwankt. In einer voll entwickelten turbulenten Strömung finden diese Schwankungen auf mehreren Skalen statt (Kuhlmann, 2010). In einer Strömungssimulation müssen diese entweder voll aufgelöst, modelliert oder teils aufgelöst und teils modelliert werden.

Turbulenzbehandlung kann in der Simulation auf drei Arten inkludiert werden:

- direkte numerische Simulation (DNS)
- Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen (RANS)
- Large Eddy Simulation (LES)

Die ersten zwei werden kurz beschrieben. Die Large Eddy Simulation wird detaillierter dargestellt, da für Simulationen in dieser Arbeit diese Turbulenzbehandlung verwendet wurde.

4.5.1 Direkte numerische Simulation

Wie der Name sagt, wird hier Turbulenz direkt durch die Navier-Stokes-Gleichungen berechnet. Dazu muss jedoch gewährleistet werden, dass alle Skalen der Turbulenz aufgelöst werden. Das Rechengitter und die Zeitschrittweite müssen die *Kolmogorov-Skalen* (Längen-, Geschwindigkeits- und Zeitskalen) auflösen (Kuhlmann, 2010)

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{\frac{1}{4}}, \quad u_\eta = (\nu\epsilon)^{\frac{1}{4}}, \quad \tau_\eta = \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.5.1)$$

Dabei ist ν die kinematische Viskosität und ϵ die Dissipationsrate. Diese Herangehensweise setzt in den meisten Fällen eine extrem hohe Zellzahl ($\geq 10^8$ - 10^9) und eine geringe Zeitschrittweite voraus. Dadurch erhöht sich das Ausmaß der Rechnungen immens. Für technische Anwendungen ist dies in den meisten Fällen zu kostspielig, somit werden andere Möglichkeiten für die Beschreibung von Turbulenz verwendet.

4.5.2 Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen

In diesem Fall wird angenommen, dass die Größen in den Gleichungen 4.1.1, 4.1.2 und 4.1.4 einen gemittelten Wert darstellen. Zum Beispiel wird für die Geschwindigkeit

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}' \quad (4.5.2)$$

angenommen. Ähnlich wird für die anderen Größen verfahren. Die gemittelten Größen $\bar{\Phi}$ werden durch die Gleichungen 4.1.1, 4.1.2 und 4.1.4 gelöst und die Schwankungen zusätzlich modelliert. Diese werden entweder in Form eines Tensors (Kuhlmann, 2010) mit Transportgleichungen transportiert (Reynolds-Spannungsmodelle) oder als eine zusätzliche Viskosität in den Navier-Stokes-Gleichungen modelliert.

Die Art und Weise, wie diese Viskosität definiert wird, unterscheidet die Modelle voneinander. Ein paar Beispiele sind (Kuhlmann, 2010; Ferziger und Peric, 2002):

- $k - \epsilon$ -Modelle
 - standard $k - \epsilon$ -Modell
 - realizable $k - \epsilon$ -Modell
 - RNG $k - \epsilon$ -Modell
- $k - \omega$ -Modelle
 - Wilcox $k - \omega$ -Modell
 - SST $k - \omega$ -Modell
- Spallart-Allmaras Modell
- $\overline{v^2} - f$ Modell
- $\zeta - f$ Modell

Bei diesen Modellen kann das Rechengitter größer sein, was impliziert, dass in Wandnähe Fehler gemacht werden. Dies kann mit Hilfe von speziellen Wandfunktionen (OpenCFDLtd, 2011, 2012) als Randbedingungen an Wänden richtiggestellt werden. Jedoch kann durch das grobe Mesh die Rechenzeit verringert werden, was für industrielle Anwendungen von Vorteil ist.

4.5.3 Large Eddy Simulation

In LES Simulationen wird davon ausgegangen, dass mit dem existierenden Rechengitter die großen Skalen direkt abgebildet und die kleinen Skalen modelliert werden. Dies setzt

voraus, dass die kleinen Fluktuationen nichts von der Geometrie des Randes merken und sich mit der Strömung mitbewegen. Dabei spaltet man zum Beispiel die Geschwindigkeit auf:

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}' \quad (4.5.3)$$

Dies gilt auch für andere Variablen. Dabei ist $\bar{\mathbf{u}}$ jener Teil der Geschwindigkeit, den man explizit simulieren will (Größen in Gleichungen 4.1.1, 4.1.2 und 4.1.4) und \mathbf{u}' ist der Teil, den man modellieren will (Kuhlmann, 2010). $\bar{\mathbf{u}}$ wird durch die Anwendung eines räumlichen Filters $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \Delta)$ auf das ungefilterte Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u} definiert.

$$\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = \int_V \mathbf{u}(\mathbf{x}', t) G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \Delta) dV' \quad (4.5.4)$$

Δ ist die Filterlänge. In dieser Arbeit wird diese als $\Delta = V_{Zelle}^{\frac{1}{3}}$ definiert. Als Filterfunktion $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \Delta)$ wird eine einfache Rechtecksfunktion mit der Breite Δ verwendet.

Die Beiträge von \mathbf{u}' können unterschiedlich angesetzt werden. Gleichung 4.1.2 kann geschrieben werden als

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot [(\mu + \mu_{sgs})2\mathbf{S}] + \mathbf{F} \quad (4.5.5)$$

\mathbf{S} ist der Spannungstensor und μ bzw. μ_{sgs} sind die dynamische molekulare und turbulente (subgrid-scale) Viskosität. Die nicht aufgelösten, turbulenten Phänomene fließen durch den Term μ_{sgs} in die Navier-Stokes-Gleichungen ein.

In den meisten LES Modellen in OpenFOAM[®] wird diese Art der Turbulenzmodellierung verwendet, wobei

$$\mu_{sgs} = \rho \nu_{sgs} = \rho c_k \Delta \sqrt{k} \quad (4.5.6)$$

definiert ist. Dabei ist ρ die Dichte, ν_{sgs} die kinematische subgrid-scale Viskosität, c_k eine Konstante, Δ die Filterlänge und k die turbulente kinetische Energie der Strömung.

Im Folgenden werden die in dieser Arbeit verwendeten Modelle und deren Implementierung in OpenFOAM[®] beschrieben (OpenCFDLtd, 2012).

4.5.3.1 Smagorinsky-Lilly-Modell

Das Smagorinsky-Modell ist ein Nullgleichungsmodell, hierbei wird die turbulente kinetische Energie k definiert als

$$k = \frac{2 c_k}{c_e} \Delta^2 |\mathbf{D}|^2 \quad \text{mit} \quad \mathbf{D} = \text{symm}(\nabla \mathbf{u}) \quad (4.5.7)$$

Die Konstanten sind $c_k = 0.094$ und $c_e = 1.048$. Die subgrid-scale Viskosität wird damit aus dem Geschwindigkeitsfeld abgeleitet.

4.5.3.2 *oneEqEddy*-Modell

Das *oneEqEddy*-Modell ist ein Eingleichungsmodell, wobei die turbulente kinetische Energie mit einer Transportgleichung mit der Strömung mittransportiert wird.

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot \rho k \mathbf{u} = \Delta [(\mu + \mu_{sgs})k] + S_k(\mathbf{u}, k, \rho, \mu, \mu_{sgs}, \Delta, c_e, \nabla \mathbf{u}) \quad (4.5.8)$$

S_k stellt Quellterme für die Produktion und Vernichtung der kinetischen Energie dar. Eine detaillierte Beschreibung findet man in (OpenCFDLtd, 2012). Die Konstanten sind $c_k = 0.094$ und $c_e = 1.048$.

4.5.3.3 *dynOneEqEddy*-Modell

Das *dynOneEqEddy*-Modell ist ebenfalls ein Eingleichungsmodell, wobei die turbulente kinetische Energie mit der Transportgleichung 4.5.8 mit der Strömung mittransportiert wird. In diesem Fall werden die Konstanten c_k und c_e nicht konstant gehalten. Diese werden dynamisch aus dem Strömungsfeld neu errechnet (in Analogie zum dynamischen Modell von Germano (Germano et al., 1991)).

$$c_k = c_k(\Delta, \mathbf{u}, k, D), \quad c_e = c_e(\Delta, \mathbf{u}, k, D) \quad (4.5.9)$$

4.5.3.4 *DeardorffDiffStress*-Modell

Das *DeardorffDiffStress*-Modell (Fureby und Grinstein, 2002) ist ein Mehrgleichungsmodell, da die turbulente kinetische Energie k als die Spur des Tensors B angesetzt wird. B ist der Tensor der subgrid-scale Spannungskomponenten $u_i'u_i'$. Diese sechs Komponenten werden mit der Transportgleichung 4.5.10 transportiert.

$$\frac{\partial \rho B}{\partial t} + \nabla \cdot \rho B \mathbf{u} = \Delta [(\mu + \mu_{sgs})B] + S_B(\mathbf{u}, B, \rho, \mu, \mu_{sgs}, \Delta, c_e, c_m, \nabla \mathbf{u}) \quad (4.5.10)$$

Dabei sind die Konstanten $c_m = 4.13$, $c_k = 0.094$ und $c_e = 1.048$. S_B stellt Quellterme für die Produktion und Vernichtung von B dar. Eine detaillierte Beschreibung findet man in (OpenCFDLtd, 2012).

4.5.3.5 Spalart-Allmaras-Modell

Das Spalart-Allmaras-Modell kann als DES (Detached Eddy Simulation) Modell angesetzt und als eine Mischung von LES und RANS gesehen werden. Eine nähere Beschreibung findet man in (Spalart et al., 1997; Strelets, 2001).

4.6 Mehrphasenmodellierung

Treten in einer Strömung mehrere Phasen auf (z.B. Gas und Flüssigkeit), so müssen diese richtig abgebildet werden. In der Strömungssimulation existieren dazu mehrere Modelle.

4.6.1 Euler-Modell

Das Euler Modell löst für jede Phase die Navier-Stokes-Gleichungen mit den jeweiligen Materialeigenschaften der Phase. Diese werden durch zusätzliche Kopplungsterme für den Impulsaustausch zwischen den Phasen gekoppelt. Das Modell ist für disperse Phasen in einer kontinuierlichen Phase geeignet. Für alle Phasen wird der gleiche Druck verwendet, aber Transportgleichungen wie Kontinuitäts-, Energie- oder Turbulenzgleichungen werden für die einzelnen Phasen getrennt gelöst.

4.6.2 Mixture-Modell

Dieses ist eine vereinfachte Abwandlung des Euler Modells. Hier werden die Navier-Stokes, die Kontinuitäts-, die Energie- oder die Turbulenzgleichungen für eine Mischung gelöst. Im Gegensatz zum Volume-of-Fluid Modell, können sich die Phasen gegenseitig durchdringen. Auch in diesem Fall wird ein einzelnes Druckfeld verwendet.

Rechenzeit sowie Speicherbedarf verringern sich im Vergleich zum Euler Modell. Turbulenz in den unterschiedlichen Phasen wird intensiv untersucht, da oft eine gemittelte Turbulenz für die Mischung nicht angenommen werden kann.

4.6.3 Lagrange'sches-Modell

Es ist auch als Diskrete-Phasen-Modell (DPM) bekannt, da man die Trajektorien von einzelnen Partikeln abbildet. Diese befinden sich in einer kontinuierlichen Phase und werden mit der Strömung mitgenommen. Die diskreten Partikel sind normalerweise kleiner als die Auflösung des Rechengitters und der Volumenanteil ist kleiner als 10 %.

4.6.4 Volume-of-Fluid-Modell (VOF)

Bei der Simulation einer gasförmigen und einer flüssigen Phase wird diese Methode oft verwendet. In dieser Arbeit wird dieses Modell angewandt. Die Phasen durchdringen sich nicht. Dabei wird der Volumenanteil α der flüssigen Phase zugeteilt und die Gasphase errechnet sich aus $1 - \alpha$. Ein Phasenanteil von 1 bedeutet somit die reine Flüssigkeit und 0 bedeutet reines Gas. Ein Wert zwischen 0 und 1 stellt den Übergang der Phasen dar. Die Zustandsgleichung der Flüssigkeit ist gegeben durch 5.2.3 und jene der gasförmigen Phase ist gegeben durch 4.1.3 bzw. 5.2.2. Für die Dichte wird ein gemittelter Wert für die Gleichungen 4.1.1, 4.1.2 und 4.1.4 errechnet, indem man die Linearkombination der Gas- und der Flüssigkeitsdichte bildet. Für die Viskositäten gilt das Gleiche.

$$\begin{pmatrix} \rho \\ \nu \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} \rho_{Fl} \\ \nu_{Fl} \end{pmatrix} + (1 - \alpha) \begin{pmatrix} \rho_{Gas} \\ \nu_{Gas} \end{pmatrix} \quad (4.6.1)$$

Dies ist der Ansatz des Volume-of-Fluid Modells (OpenCFDLtd, 2012; Raessi et al., 2010; Rusche, 2002). Die Phase α wird mit der Transportgleichung 4.6.2 transportiert.

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\alpha) + \nabla \cdot (\mathbf{u}_r \alpha (1 - \alpha)) = S_u + S_p \quad (4.6.2)$$

Die ersten beiden Terme stellen den einfachen advektiven Transport einer skalaren Größe mit der Geschwindigkeit \mathbf{u} dar. Einfache Diskretisierungen können die Phasengrenze verschmieren und eine durch numerische Diffusion erzeugte Region zwischen $\alpha = 1$ und $\alpha = 0$ erstellen. Die Terme S_u sowie S_p sind Terme, die die Kompressibilität der Strömung berücksichtigen.

Diese diffuse Grenzbehandlung wird auch in (Pecenko et al., 2011) verwendet. Unterschiedliche Methoden wurden vorgeschlagen, um das Problem der diffusen Phasengrenze zwischen Flüssigkeit und Gas zu lösen (Saurel und Abgrall, 1999; Cocchi und Saurel, 1997; Chang und Liou, 2007; Nourgaliev et al., 2006; Abgrall, 1994; Karni, 1994; Terashima und Tryggvason, 2010; Abgrall und Karni, 2001). Der Ansatz von Weller (Rusche, 2002), der in OpenFOAM[®] implementiert ist, führt einen zusätzlichen Grenzflächenkompressionsterm ein (dritter Term in Gleichung 4.6.2). Dieser Term ist nur im diffusen Grenzbereich durch die Multiplikation mit $\alpha(1 - \alpha)$ ungleich Null und beeinflusst das restliche Volumen nicht. \mathbf{u}_r ist eine Geschwindigkeit, die dazu benutzt wird die Grenzfläche zu komprimieren. Für die Berechnung dieser Geschwindigkeit wird das Maximum des Flusses ϕ verwendet. Die Kompression wirkt orthogonal zur Grenzfläche. Dadurch wird der maximale Fluss mit dem Normalvektor \hat{n} der Grenzfläche multipliziert.

$$\rho \mathbf{u}_r = \phi_r = \hat{n} \cdot \min \left(c_\alpha \cdot \left| \frac{\phi}{S} \right|, \max \left| \frac{\phi}{S} \right| \right) \quad (4.6.3)$$

Dabei ist S der Flächeninhalt der Zellfläche f und man verwendet für ϕ_r entweder den maximalen Wert von ϕ im gesamten Strömungsvolumen oder das c_α -fache des Flusses in der Zelle. In (Rusche, 2002) wird $c_\alpha = 1.5$ vorgeschlagen, und dieser Wert wird auch in dieser Arbeit verwendet. \hat{n} ist der Einheitsnormalvektor der Grenzfläche und wird berechnet durch

$$\hat{n} = \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha| + \delta} \quad (4.6.4)$$

δ ist eine kleine Zahl, die zur Stabilität des dritten Terms in Gleichung 4.6.2 in Bereichen, die weit von der Grenzfläche entfernt sind, beitragen soll. $\delta = 10^{-8}/(V_{\text{Zelle}})^{1/3}$ und ist vom Zellvolumen abhängig.

4.6.4.1 Oberflächenspannung

Eine wichtige Größe für die richtige Beschreibung der Grenzfläche zwischen einer gasförmigen und einer flüssigen Phase ist die volumetrische Kraft, erzeugt durch die Oberflächenspannung (Rusche, 2002; OpenCFDLtd, 2012). Sie wird in OpenFOAM® (Rusche, 2002) nach (Brackbill et al., 1992) in der Form 4.6.5 implementiert, wobei die Oberflächenspannung als eine Kontinuumsflächenkraft (*continuum-surface-force*, CSF) (Brackbill et al., 1992) modelliert wird. Diese repräsentiert die Oberflächenspannung als eine stetige volumetrische Kraft, die ausschließlich im Grenzbereich wirkt. Sie ist gegeben durch

$$\mathbf{F}_\sigma = \int_S \sigma \kappa' \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\vec{S} \approx \sigma \kappa \nabla \alpha \quad (4.6.5)$$

S ist die Oberfläche der Zelle, σ ist der konstante Wert der Oberflächenspannung und κ ist die Krümmung der Grenzfläche. κ wird mit Hilfe des Grenzflächennormalvektors \hat{n} definiert:

$$\kappa = -\nabla \cdot \hat{n} \quad (4.6.6)$$

5.1 Motivation

In der Literatur findet man Ansätze sowohl für die Lösung von einphasigen Überschallströmungen (Deiterding, 2005; Browne et al., 2005; Brzil und Stewart, 2007) als auch für die Lösung von mehrphasigen Strömungen bei hohen Drücken unter der Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen einer flüssigen und einer gasförmigen Phase, wie die Unterwasserexplosion (Cole, 1948; Ding und Buijk, 2007; Keller und Kolodner, 1956; Kim und Shin, 2008), Kavitation (Mueller et al., 2009; Mueller, 2010) und andere technische Anwendungen (Balasubramanyam und Chen, 2008; Bhat et al., 1972; Chang und Kailasanath, 2003; Ryan, 2006; Yang und Wang, 2005). Solver mit dem Riemann Ansatz sind gut geeignet für die Beschreibung von hyperbolischen Differentialgleichungen, die eine Überschallströmung in erster Näherung beschreiben (ein- und mehrphasig). In (Abgrall, 1994; Abgrall und Karni, 2001; Karni, 1994) wurde versucht, mit Hilfe von eindimensionalen Beispielen die Qualität der Simulationsergebnisse zu verbessern. (Terashima und Tryggvason, 2009, 2010) versuchen die Problematik mit der *front-tracking/ghost-fluid* Methode zu beschreiben. Alle diese Methoden sind sehr gut geeignet für die scharfe Beschreibung von Schockwellen in einem Gas oder in einer Flüssigkeit.

In den meisten Publikationen wird die explizite Turbulenzmodellierung vernachlässigt oder die direkte numerische Simulation (DNS) von Turbulenz wird impliziert. Ebenso ist die Behandlung von beliebigen unstrukturierten Gittern (Import aus kommerziellen Programmen) nicht überall enthalten.

Die Schritte, die in dieser Arbeit unternommen werden:

- Zusammenstellung eines Solvers mit den in Kapitel 5.2 beschriebenen Transportgleichungen
- Implementierung von expliziter Turbulenzmodellierung in den Solver

- Vergleich der Ergebnisse mit Experimenten und mit publizierten Ergebnissen (sowohl Experimente als auch Simulationen)

Um diese Schritte machen zu können, muss speziell auf die richtige Abbildung der Kompressibilität sowie der unterschiedlichen physikalischen Eigenschaften der wechselwirkenden Fluide Acht gegeben werden. Es ist von höchster Wichtigkeit, die Wechselwirkung zwischen einer gasförmigen Überschallströmung und einer stagnanten oder sich langsam beweglichen Flüssigkeit richtig simulieren zu können. Aus diesem Grund muss der Solver folgende Punkte erfüllen:

- Ein dichtebasierter Solver ist für die Beschreibung von einer hoch kompressiblen Überschallströmungen mit Schockwellen besser geeignet als ein druckbasierter Solver.
- Ein Mehrphasensolver muss die Oberflächenspannung zwischen Gas- und Flüssigphase richtig abbilden und den Austausch von Impuls zwischen den Phasen richtig berechnen.
- Kompatibilität mit anderen Softwarepaketen ist wichtig, da beliebige Geometrien untersucht werden sollen. Aus diesem Grund ist das Importieren von Rechengittern wichtig, die mit speziellen Programmen (z.B. GAMBIT) erstellt wurden und selbst die Möglichkeit bieten CAD Daten einzulesen.
- Die Fähigkeit beliebige Rechengitter behandeln zu können, ist für die Behandlung von komplizierten Geometrien ausschlaggebend.
- Um eine akzeptable Rechenzeit mit einer gewissen benötigten Zellauflösung gewährleisten zu können, ist die Möglichkeit parallele Rechnungen auf Computerclustern durchführen zu können, von großem Vorteil.
- Die einfache Implementierung von weiteren physikalischen Modellen für spätere Untersuchungen ist ein weiterer Vorteil.

Mit diesen Möglichkeiten kann der implementierte Solver folgende Probleme behandeln:

- Simulation des Anfangsintervalls des Tropfenzerfalls in einer Überschallströmung mit großer Weber-Zahl ($\geq 10^3$)
- Simulation des Tropfenzerfalls in einer Unterschallströmung, um grundlegende physikalische Phänomene verstehen zu können, die man für das Verständnis von Zerstäubungsprozessen benötigt.

- Simulation einer Feuerlöschanlage, die mit einem flüssigen Löschmittel arbeitet, das in einer Druckflasche aufbewahrt wird.
- Simulation eines innovativen Bohrprozesses, der Wasser und Schockwellen benutzen soll, um Gestein abtragen zu können.

5.1.1 OpenFOAM®

In dieser Arbeit wurden die Versionen OpenFOAM® 1.6 und OpenFOAM® 1.7.1 verwendet. OpenFOAM® ist eine open source C++ Bibliothek für die simulative Analyse von unterschiedlichen Strömungen. OpenFOAM® besteht aus getrennten Solvern für inkompressible oder kompressible Strömungen sowie für andere Phänomene. Des Weiteren werden für die Behandlung von skalaren, vektoriellen sowie tensoriellen Feldern im Code die Vorteile des objektorientierten Programmierens in C++ ausgenutzt. Eine der wichtigsten Literaturstellen ist (Weller et al., 1998). Hier wird die ursprüngliche Zielsetzung dieses CFD Tools beschrieben. Ein kurze Beschreibung dieser Ideen wird im Folgenden gegeben.

Grundsätzlich benutzt OpenFOAM® die *Finite Volumen Methode* (siehe Kapitel 4.2). Das Strömungsvolumen wird in diskrete Volumina δV_i eingeteilt. Wie in Kapitel 4.1 beschrieben, werden die beschreibenden Gleichungen über solch ein Volumen integriert. Die Operatoren werden mit Hilfe des Gauß'schen Theorems in Oberflächenintegrale umgeformt, wobei Werte auf der Oberfläche aus dem Zellmittelpunkt interpoliert werden. Die Gleichungen werden in die Form von Gleichung 4.2.18 formatiert

$$\underline{A}\Phi = \underline{R} \quad (5.1.1)$$

Diese Gleichung wird invertiert, um gelöst werden zu können. Das wichtigste Ziel von OpenFOAM® ist es eine Plattform bereitzustellen, die komplizierte mathematische und physikalische Gleichungen als abstrakte mathematische Ausdrücke behandeln kann. Dies wird dadurch erreicht, dass die höheren Ebenen des Codes, so weit es geht, an die bekannte mathematische Vektor- und Tensornotation erinnern. Die objektorientierte Programmiersprache C++ ist für diese Herangehensweise sehr gut geeignet. Darin können Operatoren überbeladen werden, wodurch es ermöglicht wird, mathematische Operatoren wie '+', '-', '.', '/' oder '∇' für unterschiedliche Größen zu definieren. Die Fluidodynamik kann durch Tensorcalculus von zweiter Ordnung beschrieben werden. Aus diesem Grund werden drei fundamentale Klassen in OpenFOAM® implementiert: scalarField, vectorField und tensorField. Diese unterscheiden sich von mathematischen Feldern, da diese keine Information über Position erhalten. Sie sind geordnete Listen von Tensoren. Punktweise Operationen können durchgeführt werden.

Die nächste Stufe von Tensorfeldern enthalten die geometrische Positionsinformation: `volScalarField`, `volVectorField` und `volTensorField`. Diese Klassen enthalten Informationen über die Metrik, über die Ränder, über den letzten Zeitschritt und, am Wichtigsten, über alle sieben SI Einheiten. Dadurch können Operationen über dieser Stufe mit inkonsistenten Einheiten nicht durchgeführt werden.

Für Operatoren wie ∇ , \cdot oder Δ existieren zwei Tensorklassen in OpenFOAM[®]. Einerseits führt der `finiteVolumeCalculus` (`fvc`) die Rechnung explizit durch und liefert ein geometrisches Tensorfeld als Lösung zurück, andererseits liefert die `finiteVolumeMethod` (`fvm`) eine Matrixrepräsentation der Operation zurück, was die Berechnung des Fortschrittes der Variablen um einen Zeitschritt ermöglicht.

Als Beispiel werden im Sourcecode die Divergenzterme in der `fvm` durch ein Oberflächenintegral über die Zelle repräsentiert. Dieser Term wird im Code als `div(phi,q)` geschrieben, wobei `phi` der Fluss ist, der auf der Zelloberfläche (`surfaceScalarField`) gespeichert wird. `q` ist das transportierte Feld, das im Zellmittelpunkt gespeichert wird.

Die Kontinuitätsgleichung 4.1.1 lautet in der von OpenFOAM[®] verwendeten abstrakten Form

```
solve(fvm::ddt(rho) + fvc::div(phi));
```

Alle Operatoren sind überladen, was ermöglicht, dass man neue Zeilen in den Code hinzufügt ohne den Sourcecode auf den fundamentalen Ebenen angreifen zu müssen. Somit kann man spezifische Probleme wie einen Code für eine mehrphasige Überschallströmung auf den höchsten Ebenen implementieren oder modifizieren.

OpenFOAM[®] benutzt virtuelle Klassenhierarchien für sowohl RANS als auch LES Turbulenzmodellierung. Aus diesem Grund existiert auf der höchsten Programmierenebene für beide Modelle der gleiche Code. Die Implementierung von expliziter Turbulenzmodellierung kann somit einfach auf dieser Ebene durchgeführt werden.

Die Arbeit mit geordneten Listen ermöglicht OpenFOAM[®] beliebige Rechengitter behandeln zu können. Weitere Details über die Behandlung von Operatoren und diversen physikalischen Modellen kann direkt im OpenFOAM[®] Sourcecode (OpenCFDLtd, 2012) oder in (Jasak, 1996; Rusche, 2002; Weller et al., 1998) gefunden werden.

In Anbetracht der Punkte in Kapitel 5.1 sind die Vorteile (OpenCFDLtd, 2011) von OpenFOAM[®]:

- Mehrere Solver für die Simulation von kompressiblen Einphasenströmungen
- Mehrere Mehrphasensolver (einer davon kompressibel)
- Meshimport aus kommerziellen Programmen (FLUENT[®], STARCD[®])
- Parallele Simulation durch Aufteilung des Strömungsvolumens

Die Limitierungen von den existierenden Solvern in OpenFOAM® für kompressible und/oder mehrphasige Strömungen werden in Kapitel 5.3 aufgezeigt. Diese werden als Benchmarks für den in dieser Arbeit entwickelten Solver verwendet.

5.2 Implementierter Solver

Für die untersuchten kompressiblen Mehrphasenströmungen wird ein Solver gebraucht, der beide Phasen als kompressibel betrachtet. Bei niedrigen Drücken soll man die Kompressibilität ausschalten können. Die direkte Lösung (Abgrall, 1994; Abgrall und Karni, 2001; Karni, 1994) liefert eine bessere Vorhersage von Unstetigkeiten als eine Schockwelle (siehe auch Kapitel 5.3). Aus diesem Grund werden die Gleichungen 4.1.1, 4.1.2 und 4.1.4 und Modelle im Gegensatz zum standardmäßigen Ansatz in OpenFOAM® (*'predictor-corrector'* Methode, z.B. PISO für die Berechnung der Druck-Geschwindigkeitskopplung, (OpenCFDLtd, 2011, 2012)) in diesem Fall direkt gelöst. Eine Beschreibung des Lösungsweges in den beiden im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Solver (multiRhoSonicFoam, multiRhoSonicTurbulenceFoam) wird im Folgenden angegeben.

5.2.1 Zustandsgleichung

Die in dieser Arbeit untersuchten Strömungen sind größtenteils kompressibel. Dies wird durch eine gewisse Zustandsgleichung beschrieben, welche die Änderung von Dichte ρ mit dem Druck p sowie mit der Temperatur T beschreibt. Die meistverwendete Beziehung ist die ideale Gasgleichung (Abgrall, 1994; Abgrall und Karni, 2001; Karni, 1994) (siehe auch Kapitel 4.1).

$$p_{Gas} = \rho_{Gas} R T_{Gas} = \frac{\rho_{Gas}}{\psi_{Gas}} \quad (5.2.1)$$

$$\longrightarrow \rho_{Gas} = p_{Gas} \psi_{Gas} \quad (5.2.2)$$

R ist hier die universelle Gaskonstante dividiert durch die molare Masse des Stoffes (z.B. für Luft $R = (8.314472 \text{ [J/(mol K)]}) / (0.0289644 \text{ [kg/mol]}) \cong 287 \text{ [m}^2 \text{/(s}^2 \text{ K)]}$) und ψ_{Gas} ist die temperaturabhängige Proportionalitätskonstante zwischen Dichte und Druck.

Eine ähnliche lineare Beziehung zwischen Druck und Dichte kann man für eine Flüssigkeit aufstellen.

$$\rho_{Fl} = \psi_{Fl} p + \rho_0 \quad (5.2.3)$$

Der Koeffizient ψ_{Fl} ist genauso temperaturabhängig wie ψ_{Gas}

$$\psi_l = b / (\tilde{R}_l T), \quad (5.2.4)$$

wobei $\tilde{R}_l = R/m_{mol,l}$ ($m_{mol,l}$ - molare Masse der Flüssigkeit) und b Materialkonstanten sind.

5.2.2 Beschreibende Gleichungen

Aus den Dichten der Gleichungen 5.2.2 und 5.2.3 wird mit Hilfe des Phasenanteils eine mittlere Dichte ausgerechnet (VOF Methode).

$$\rho = \alpha\rho_l + (1 - \alpha)\rho_g \quad (5.2.5)$$

Die Kontinuitätsgleichung wird mit dieser veränderlichen Dichte gelöst.

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) = 0 \quad (5.2.6)$$

Diese modifizierte Dichte wird für die Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen verwendet. Der Druck p wird aus der Dichte ρ errechnet.

$$\begin{aligned} \frac{\partial\rho\mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) &= -\nabla p + \\ \nabla \cdot [\rho(\nu + \nu_{sgs})2\mathbf{S}] + \rho\mathbf{g} + \mathbf{F}_\sigma & \end{aligned} \quad (5.2.7)$$

Dabei sind ν und ν_{sgs} die kinematische molekulare Viskosität und die kinematische turbulente (subgrid-scale) Viskosität, \mathbf{S} ist der Spannungstensor, \mathbf{g} der Vektor der Erdbeschleunigung und der Term \mathbf{F}_σ die volumetrische Kraftdichte aufgrund von Oberflächenspannung (OpenCFDLtd, 2012; Dijkhuizen et al., 2005).

Es existieren zwei Versionen des Solvers. In der ersten Version (multiRhoSonicFoam) werden die Erdbeschleunigung und die Turbulenzmodellierung vernachlässigt, d.h. ν_{sgs} und \mathbf{g} werden in Gleichung 5.2.7 Null gesetzt. In der zweiten Version (multiRhoSonicTurbulenceFoam) wird die explizite Turbulenzmodellierung hinzugefügt und ν_{sgs} wird nach Kapitel 4.5 modelliert. (OpenCFDLtd, 2012; Weller et al., 1998)

Im nächsten Schritt wird die Energiegleichung gelöst

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot ((E + p)\mathbf{u}) &= \\ \nabla \cdot \mathbf{h} + \nabla \cdot \mathbf{b} & \end{aligned} \quad (5.2.8)$$

Dabei ist $E = \rho c_v T + \frac{1}{2}\rho\mathbf{u}^2$ die Summe aus der spezifischen kinetischen Energie und der spezifischen inneren Energie des Fluids. c_v ist die spezifische Wärmekapazität und T ist die Temperatur. \mathbf{h} ist der Vektor des Wärmeflusses und \mathbf{b} der entsprechende subgrid-scale Wärmefluss. In der ersten Solverversion werden aufgrund der mit diesem Solver untersuchten Zeitintervalle und aufgrund der Vernachlässigbarkeit des Wärmeflusses in

diesen Zeitintervallen die letzten beiden Terme Null gesetzt. In der zweiten Version des Solvers sind die beiden Terme inkludiert.

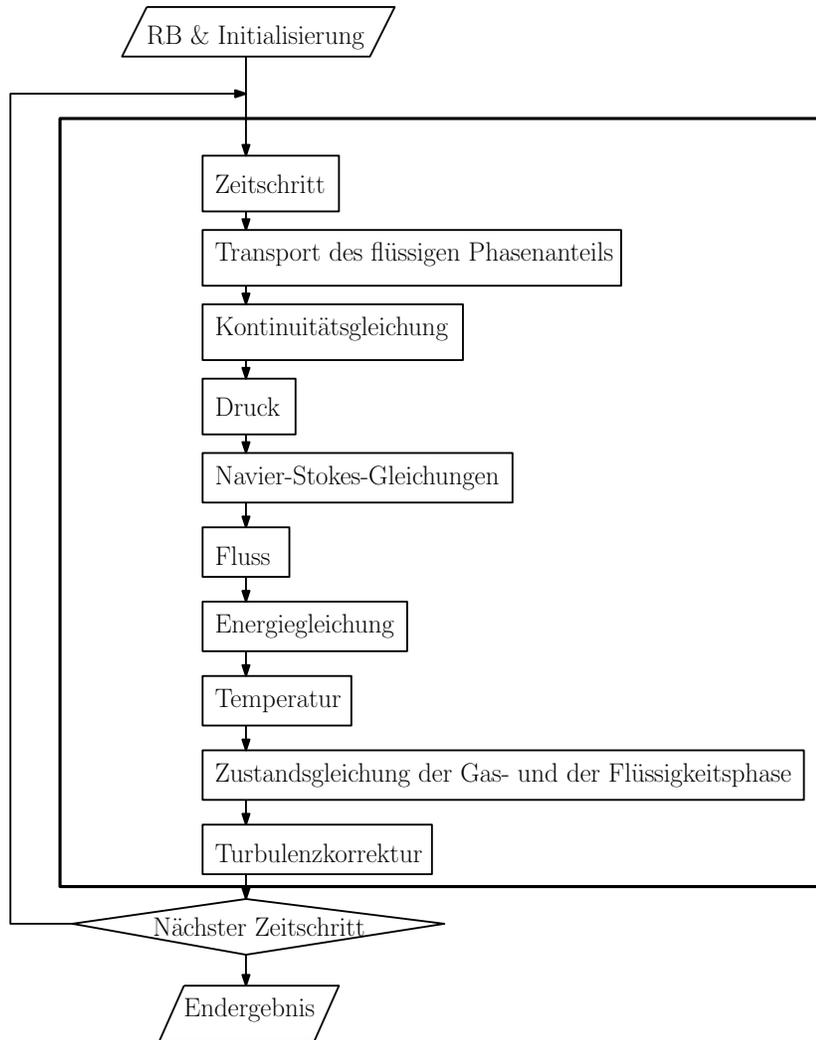


Abbildung 5.1: Schematischer Verlauf der Berechnungen während eines Zeitschrittes

Aus 5.2.8 wird die Temperatur T errechnet. Mit dieser Temperatur werden die Größen ψ_g , ψ_l , ρ_g und ρ_l in den Gleichungen 5.2.1-5.2.4 korrigiert. Danach wird ein neuer Zeitschritt initialisiert und die Schritte werden in gleicher Reihenfolge wiederholt. In Abbildung 5.1 sieht man den schematischen Verlauf der Berechnungen während eines Zeitschrittes.

5.3 Validierung des Solvers ohne explizite Turbulenzmodellierung

5.3.1 Eindimensionale Validierung

5.3.1.1 Shocktube (einphasig)

Dieses eindimensionale Problem (Sod, 1978) ist für den Vergleich der numerischen Fähigkeiten unterschiedlicher Simulationstools bewegte Unstetigkeiten abzubilden geeignet. Die Qualität einer Schockwelle kann damit untersucht sowie Rechenzeiten verglichen werden. Unterschiedliche OpenFOAM® Solver werden untersucht, um Vor- und Nachteile feststellen zu können.

Es wurde eine eindimensionale Geometrie mit der Länge von 10 m von -5 m bis +5 m mit 1000 Rechenzellen verwendet. Um eine Schockwelle zu erzeugen, wurden zwei Regionen, getrennt durch den Nullpunkt, erschaffen. Auf der linken Seite werden folgende physikalischen Eigenschaften verwendet:

$$(p_l, \rho_l, T_l, u_l) = (1000000 \text{ Pa}, 10 \text{ kg/m}^3, 348.432 \text{ K}, 0 \text{ m/s})$$

Auf der rechten Seite werden die Werte

$$(p_r, \rho_r, T_r, u_r) = (100000 \text{ Pa}, 1.25 \text{ kg/m}^3, 278.746 \text{ K}, 0 \text{ m/s})$$

benutzt. In allen Simulationen wurde für die Diskretisierung des Advektionsterms das einfache 'upwind' Verfahren Genauigkeit erster Ordnung verwendet, um festzustellen, wie die unterschiedlichen Solver mit dieser diffusiven Diskretisierung die Unstetigkeit erhalten können. Solvereinstellungen wurden gleichgehalten. Für die Courant-Zahl (CFL) $Co = u\Delta t/\Delta x$ (u x-Komponente der Geschwindigkeit, Δt Zeitschritt, Δx Zelllänge in x-Richtung) wurde aus Stabilitätsgründen der Wert 0.02 verwendet. Die Simulationen wurden von $t_0 = 0$ ms bis $t_{end} = 6$ ms durchgeführt. In allen Solvern wurden die thermodynamischen Daten von Luft mit $c_v = 717 \text{ J}/(\text{kg K})$ für die spezifische Wärmekapazität, $R = 287 \text{ m}^2/(\text{s}^2 \text{ K})$ und $\nu = 1.5 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ für die kinematische Viskosität verwendet. Der Mehrphasensolver wurde so aufgesetzt, dass beide Phasen die gleichen thermodynamischen Werte haben. Als Zustandsgleichung wurde die ideale Gasgleichung (siehe Gleichung 5.2.2) verwendet (Abgrall, 1994; Abgrall und Karni, 2001; Karni, 1994). Iterationen zu jedem Zeitschritt wurden so lange ausgeführt, bis alle Residuen den Wert von 10^{-15} unterschritten hatten.

Insgesamt wurden sechs OpenFOAM® Solver (Version 1.6) untersucht (OpenCFDLtd, 2012, 2011). Diese sind vier spezielle kompressible Solver (rhoSonicFoam, sonicFoam,

rhoSonicFoam, rhoCentralFoam), der einzige frei benutzbare kompressible Mehrphasen-solver (compressibleInterFoam) und multiRhoSonicFoam.

Die analytische Lösung wird in allen Abbildungen gezeigt, jedoch muss man beachten, dass diese ein nichtviskoses Fluid impliziert. Auf der einen Seite wurde die Qualität der Ergebnisse analysiert, auf der anderen Seite werden ebenfalls die CPU Zeiten der Rechnungen verglichen. In den Abbildungen 5.2 (a) und (b) ist der Verlauf des Drucks nach $t = 6$ ms (sowohl im gesamten Bereich als auch ein Detailausschnitt) dargestellt. Die analytische Unstetigkeit wird durch alle Solver verschmiert. Der Grund dafür liegt einerseits in der Diffusivität des 'upwind' Verfahrens als auch in der physikalischen Diffusivität des Fluids. Die Unterschiede der Verschmierung liegen in der implementierten Numerik der einzelnen Solver. Die numerische Diffusivität dominiert die physikalische. Dabei wird klar, dass der druckbasierte Solver sonicFoam die höchste numerische Diffusion aufweist. Der Ort der Unstetigkeit von sonicFoam und compressibleInterFoam liegen nach 6 ms um 0.5 % and 2.9 % vor der analytischen Lösung (siehe Abbildungen 5.2 (a)-(f)). Außerdem treffen diese Solver nicht die richtige Höhe des Drucksprunges hinter der Schockwelle. Man könnte die Einstellungen des Solvers so umstellen, dass die Ergebnisse besser werden, aber in dieser Untersuchung geht es um die Qualität der Lösungen bei gleichen Einstellungen.

Wenn man die CPU Zeiten der Simulationen vergleicht (siehe Tabelle 5.1), wird es offensichtlich, dass rhoSonicFoam bei Weitem der schnellste Solver ist, wobei multiRhoSonicFoam für die Simulation in etwa die zweifache Zeit braucht. Dies ist aufgrund der zusätzlichen Gleichungen (bedingt durch den mehrphasigen Ansatz). Wenn man die Laufzeit mit dem anderen Mehrphasensolver vergleicht, schneidet multiRhoSonicFoam gut ab.

Tabelle 5.1: Leistung der untersuchten Solver auf einem AMD Phenom II X4 955 CPU

| Solver | Laufzeit [s] | relative Laufzeit [] |
|-----------------------|--------------|----------------------|
| rhoSonicFoam | 16 | 0.5 |
| sonicFoam | 39 | 1.1 |
| rhoSonicFoam | 65 | 1.9 |
| rhoCentralFoam | 70 | 2.0 |
| compressibleInterFoam | 227 | 6.5 |
| multiRhoSonicFoam | 35 | 1 |

Für die Qualität der Ergebnisse ist die Konvergenz der Ergebnisse auf einem graduell verfeinertem Rechengitter essentiell. Der durch 'upwind' verschmierte Sprung kann auf einem feineren Mesh verbessert werden. Dafür wurden mit multiRhoSonicFoam drei Simulationen auf drei Gittern mit 1000, 10000 und 100000 Zellen durchgeführt. In Abbildung 5.3 kann man sehen, dass die Steilheit des Drucksprunges zunimmt und die

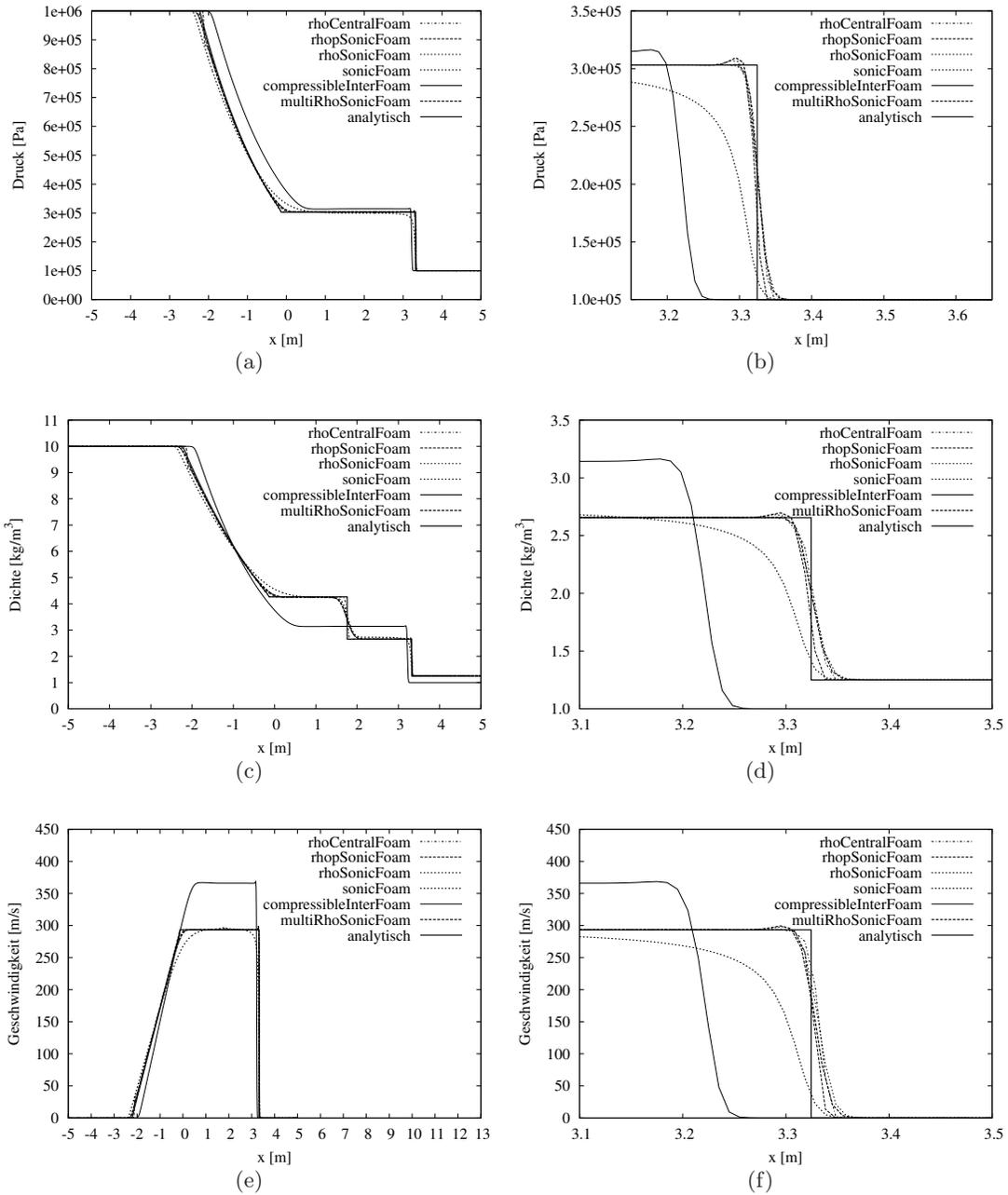


Abbildung 5.2: Verläufe von Druck p , Geschwindigkeit u und Dichte ρ zum Zeitpunkt $t=6$ ms

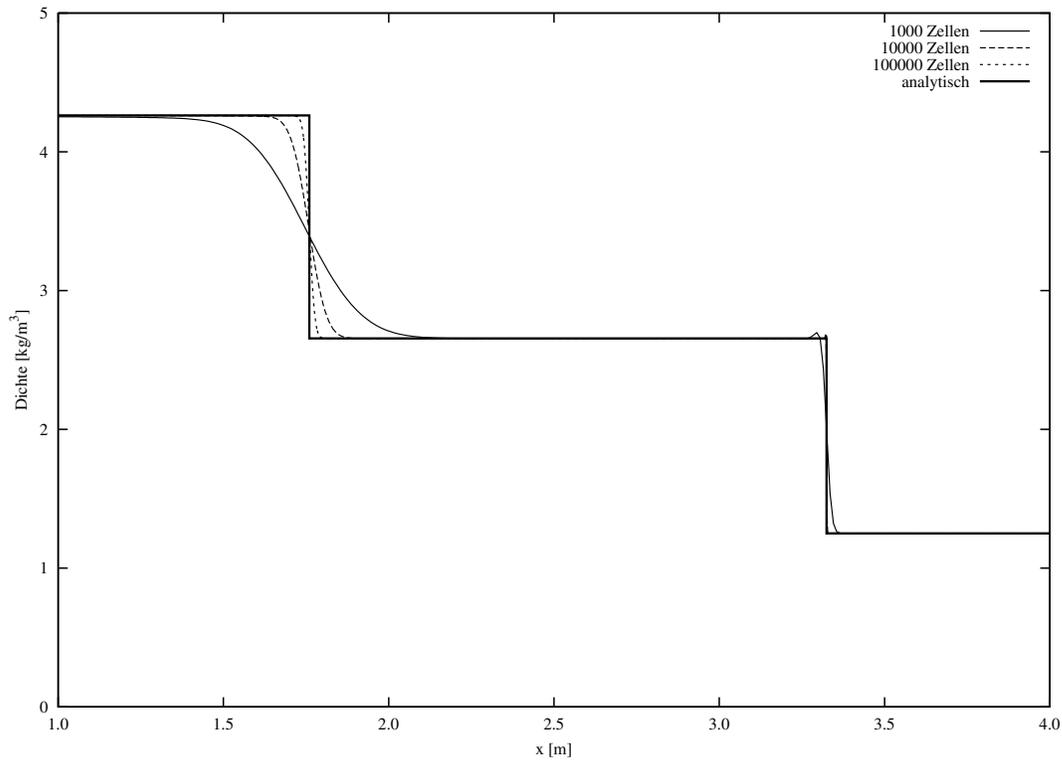


Abbildung 5.3: Verlauf der Dichte ρ nach $t = 6$ ms mit Gitterverfeinerung

Ergebnisse gegen die analytische Lösung konvergieren.

Bei der richtigen Benutzung des OpenFOAM[®] Sourcecodes kann eine Überschallströmung mit Unstetigkeiten richtig abgebildet werden. Mit Hilfe von Meshverfeinerung kann man der numerischen Diffusion entgegenwirken. Man kann einen guten Kompromiss zwischen der Qualität der Lösung und der Rechenzeit finden.

5.3.1.2 Druckverhältnis 100 und 500

In den Abbildungen 5.4 und 5.5 sind Ergebnisse mit unterschiedlichen Anfangsdruckverhältnissen zu sehen. Dazu wurde statt dem Druckverhältnis 10:1 100:1 sowie 500:1 untersucht. Der mehrphasige Solver (compressibleInterFoam) weicht bei höheren Verhältnissen immer mehr ab, wohingegen multiRhoSonicFoam die analytische Lösung besser wiedergeben kann.

5.3.1.3 Shocktube mit Luft und Wasser

In diesem eindimensionalen Fall wurde die Wechselwirkung zwischen einer gasförmigen und einer flüssigen Phase, d.h. die Lage der Kontaktfläche und der Ort der Stoßwelle in der flüssigen Phase im Detail analysiert. Die Anfangsbedingungen auf der linken Seite

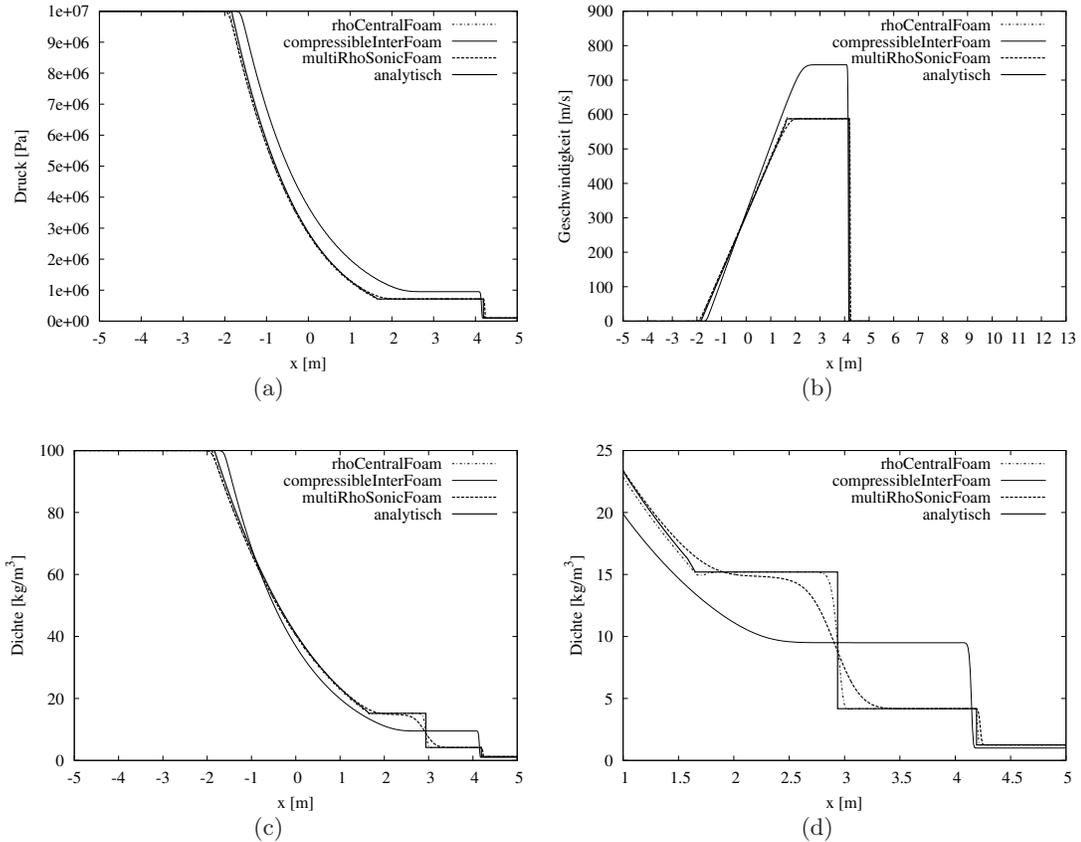


Abbildung 5.4: Verläufe von Druck p , Geschwindigkeit u und Dichte ρ zum Zeitpunkt $t = 5$ ms mit einem Anfangsdrucksverhältnis von 100

wurden mit $(p_l, \rho_l, T_l, u_l, \alpha_l) = (50 \text{ MPa}, 565.263 \text{ kg/m}^3, 308.15 \text{ K}, 0 \text{ m/s}, 0)$ und auf der rechten Seite mit $(p_r, \rho_r, T_r, u_r, \alpha_l) = (0.1 \text{ MPa}, 996.563 \text{ kg/m}^3, 308.15 \text{ K}, 0 \text{ m/s}, 1)$ gesetzt. Der Sprung zwischen diesen Bedingungen wurde bei $x = 5$ m platziert, wobei der simulierte Bereich von 0 m bis 10 m reicht. Für die gasförmige Phase werden die gleichen thermodynamischen Einstellungen verwendet wie in Kapitel 5.3.1 (d.h. Luft), während für die flüssige Phase für die spezifische Wärme $c_v = 4179 \text{ J/(kg K)}$ und für die kinematische Viskosität $\nu = 1 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ verwendet wurde. Alle Solvereinstellungen (z.B. Courant-Zahl) wurden wie in Kapitel 5.3.1 verwendet. Die Autoren in (Chang und Liou, 2007) erhielten ähnliche Ergebnisse, doch bei einem noch höheren Druckverhältnis. Der Verlauf von Druck p und Geschwindigkeit u sind vergleichbar mit denen in (Chang und Liou, 2007).

Der Druck p ist zum Zeitpunkt $t = 3$ ms in Abbildung 5.6 zu sehen. Die Zustandsgleichung in der flüssigen Phase erzeugt einen Fehler von 5 % (aufgrund der numerischen Oszillation). Es entsteht ein Überschwingen hinter der Stoßwelle, aber die Mittelwerte

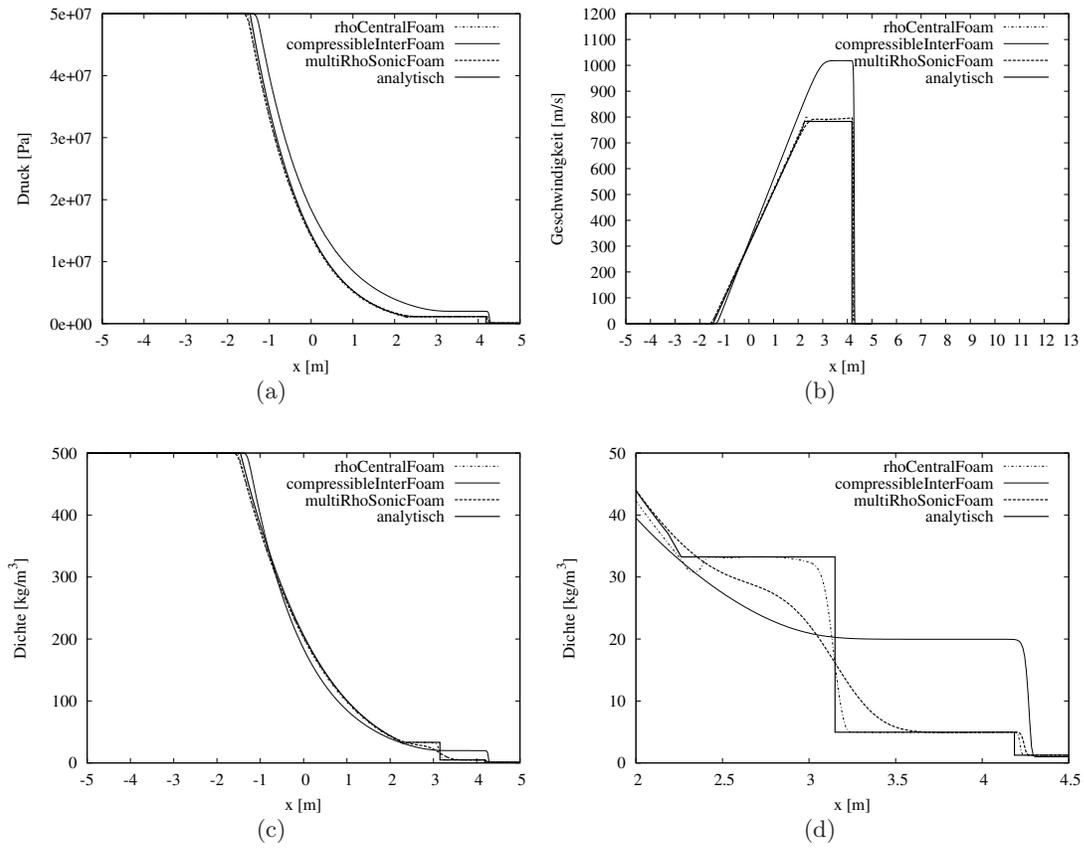


Abbildung 5.5: Verläufe von Druck p , Geschwindigkeit u und Dichte ρ zum Zeitpunkt $t=5\text{ ms}$ mit einem Anfangsdrucksverhältnis von 500

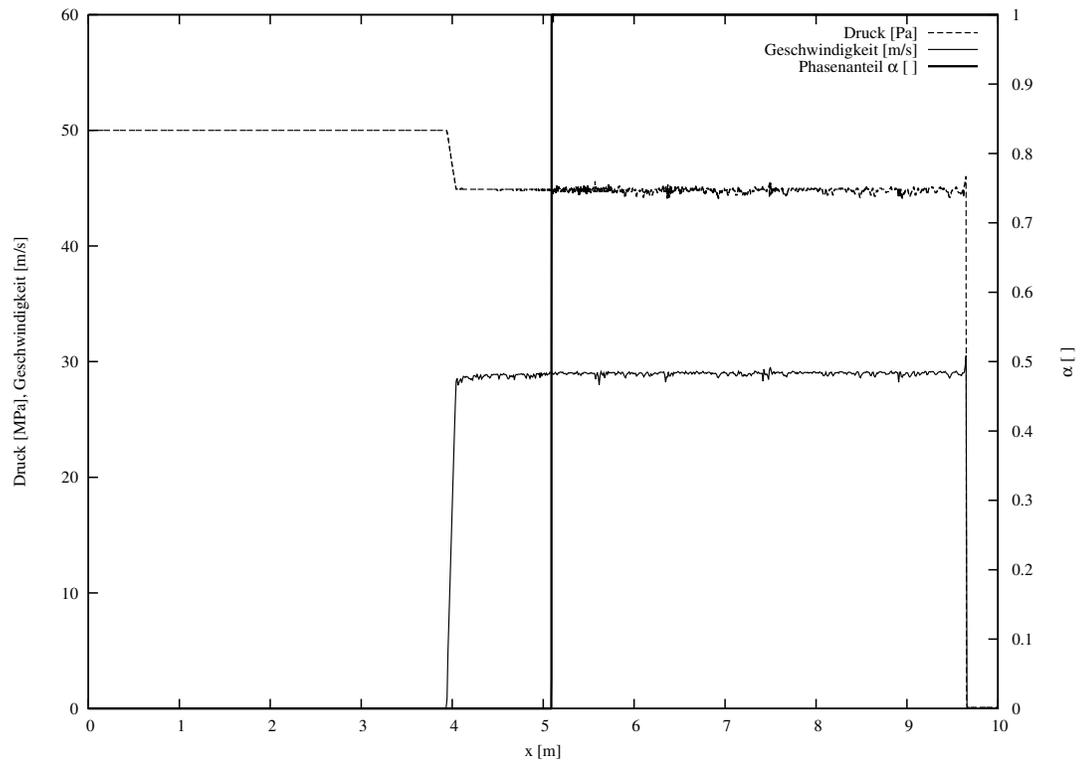


Abbildung 5.6: Verläufe von Druck p und Geschwindigkeit u nach $t = 3$ ms mit 10000 Zellen, Entspannungswelle bei $x = 3.9$ m und Schockwelle bei $x = 9.65$ m

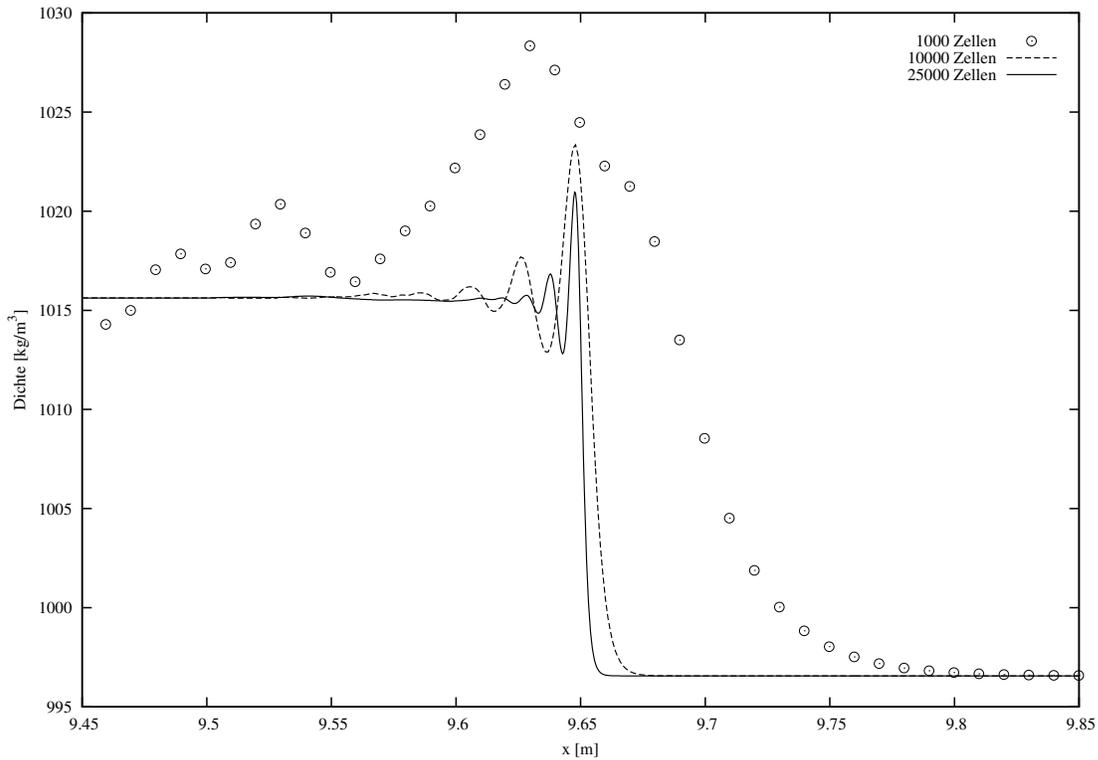


Abbildung 5.7: Verlauf der Dichte nach $t = 3$ ms bei Gitterverfeinerung

von sowohl dem Druck als auch der Geschwindigkeit pendeln sich bei 44.8 MPa und 29.1 m/s, jeweils ein.

In Anbetracht der wichtigen Frage der Lage der Kontaktfläche und der Steilheit des Sprunges zwischen Gas und Flüssigkeit wird es offensichtlich, dass die Kontaktfläche in 3 ms eine Strecke von 0.0905 m zurücklegt (siehe Abbildung 5.6), was einer mittleren Geschwindigkeit von 30.2 m/s entspricht. Die mittlere Geschwindigkeit in der Simulation nach 3 ms ist 29.1 m/s, was gut mit diesem Wert zusammenpasst.

In Abbildung 5.7 sieht man die genaue Lage der Schockwelle. In (Anderson, 1990) wird die Geschwindigkeit der Schockwelle in einer Einphasenströmung gegeben durch

$$u_{shock} = u_{Fl} \cdot \frac{\frac{\rho_m}{\rho_r}}{\frac{\rho_m}{\rho_r} - 1} \quad (5.3.1)$$

wobei ρ_m die Dichte hinter der Schockwelle ist und ρ_r die Dichte vor der Schockwelle ist. Mit dieser Beziehung liegt die Schockwelle nach 3 ms bei 9.7 m, wobei die Simulation den Ort der Schockwelle bei 9.651 m erhält, was bloß einer Abweichung von 1 % entspricht.

Auch in diesem Fall wird eine Konvergenz der Lösung mit der Verfeinerung der Lösung untersucht. Dazu wird der Sprung der Dichte am Ort der Schockwelle herangezogen. In Abbildung 5.7 sieht man das konvergente Verhalten der Ergebnisse gegen eine

asymptotische Lösung. Somit können auch Unstetigkeiten in mehrere Phasen korrekt behandelt werden.

5.3.2 Zweidimensionale Validierung

Im nächsten Schritt wurde der Solver durch eine zweidimensionale Rechnung validiert, indem man die Ergebnisse mit bereits veröffentlichten Simulationen in (Chang und Liou, 2007) und experimentellen Ergebnissen (Theofanous und Li, 2008) vergleicht. Eine andere Veröffentlichung (Nourgaliev et al., 2006) befasst sich mit einem ähnlichen Fall, wobei dort die Anfangsbedingungen anders gesetzt wurden. Auch in diesem Fall wird die Konvergenz der Ergebnisse durch Gitterverfeinerung untersucht. Die Hauptziele dieser Simulationen waren

- Ergebnisse, die mit der Literatur auch auf groben Gittern qualitativ vergleichbar sind
- die Gewährleistung der quantitativen Vergleichbarkeit auf feinen Gittern
- Vergleich der groben Strukturen mit experimentellen Ergebnissen

5.3.2.1 Vorbemerkungen

Hierzu wurde der zweidimensionale Aufprall einer Stoßwelle auf einen kreisförmigen Wasserzylinder mit einem Durchmesser von 3.5 mm analysiert. Die Stoßwelle bewegt sich im Gas mit $M=3$ und die flüssige Phase ist zunächst stagnant. Die Stoßfront ist bei $t=0\ \mu\text{s}$ 2 mm vom Mittelpunkt des Zylinders (siehe Abbildung 5.8) entfernt. Anfangsbedingungen in der positiven x-Richtung der Stoßfront sind

$$p_i = 0.1\ \text{MPa}, u_i = v_i = 0\ \text{m/s}, T_i = 346.98\ \text{K}$$

und in der negativen x-Richtung

$$p_i = 1.0333\ \text{MPa}, u_i = 831.48\ \text{m/s}, v_i = 0\ \text{m/s}, T_i = 929.57\ \text{K}$$

Diese Bedingungen wurden aus (Chang und Liou, 2007) entnommen, um eine maximale Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu gewährleisten. Der simulierte Bereich erstreckt sich von -12 mm bis +12 mm in x-Richtung und von -4 mm bis 4 mm in y-Richtung. Eine Simulation in einem größeren Bereich (-12 mm bis 12 mm in y-Richtung) wurde auch durchgeführt, aber in der untersuchten Zeit wurden keine Unterschiede gefunden. Damit wurde für die Simulationen die kleinere Region verwendet, um die Anzahl der Zellen zu reduzieren, ohne die räumliche Auflösung zu verändern. Drei Gitter mit 76800, 307200

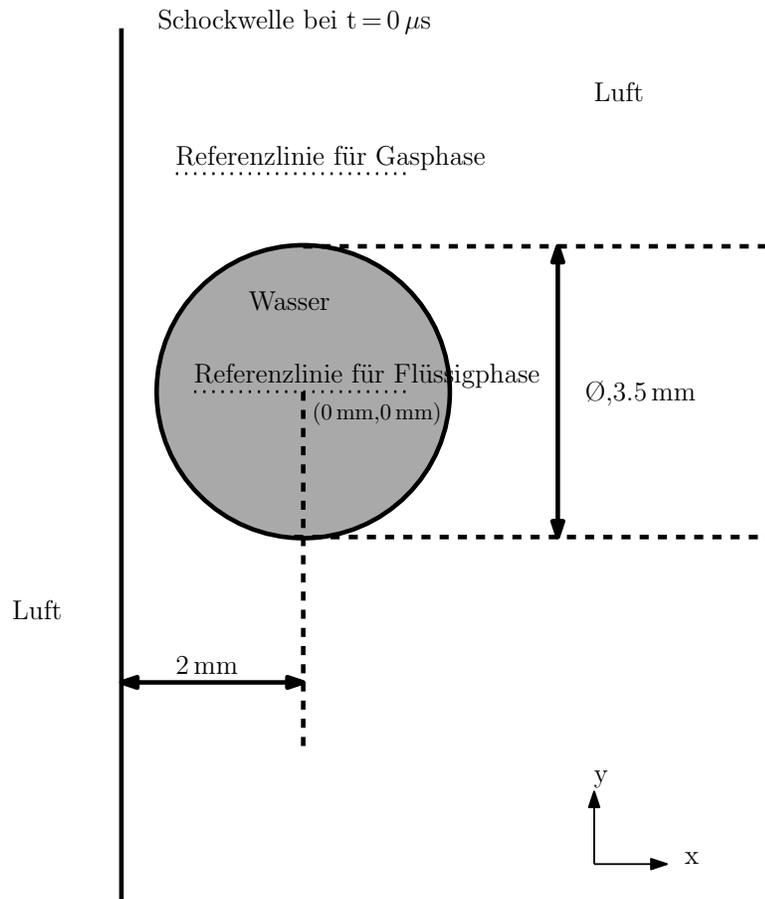


Abbildung 5.8: Anfangszustand der Simulation, punktierte Referenzlinien für Gitteruntersuchungen

und 1920000 Zellen wurden untersucht, wobei alle Zellen perfekte Quadrate sind. Die Länge einer Kante einer Zelle entspricht für die drei Fälle $50 \mu\text{m}$, $25 \mu\text{m}$ und $10 \mu\text{m}$. Aus Stabilitätsgründen wurde die Courant-Zahl wiederum auf 0.02 beschränkt.

An den vier Rändern des Strömungsvolumens (oben, unten, rechts und links) wurden von Neumann Randbedingungen gesetzt. Diese lieferten in der untersuchten Zeit keine Reflexionen. Es wurden die gleichen thermophysikalischen Daten verwendet wie in Kapitel 5.3.1.3. Die Oberflächenspannung zwischen Wasser und Luft wurde auf den konstanten Wert von 0.075 N/m eingestellt.

Man muss dabei beachten, dass zu diesem Zeitpunkt noch keine Turbulenzmodellierung stattfindet. Damit können nur makroskopische Phänomene wie die Verformung der Wassersäule unter der Hochgeschwindigkeitsgasströmung mit experimentellen Werten verglichen werden.

5.3.2.2 Numerische Diskussion

Abbildung 5.9 zeigt die Bewegung der Stoßwelle zu den Zeiten von $1 \mu\text{s}$, $2 \mu\text{s}$ und $3 \mu\text{s}$ durch und um die flüssige Phase. Dazu wurde die fiktive Größe 'Schlieren' ($(1 + \alpha_{Gas}^2) \cdot \log(|\nabla\rho| + 1)$), wie in (Chang und Liou, 2007) vorgeschlagen, verwendet. Diese Größe macht sowohl hohe als auch geringe Dichteänderungen sichtbar. Die erste Schockwelle trifft den Zylinder, wird teilweise reflektiert und teilweise transmittiert. Die transmittierte Welle breitet sich durch das Wasser fort, wo sich diese schneller bewegen kann als jene in Luft (siehe Bild 5.9 (a)-(c)). Dies ist aufgrund der höheren Geschwindigkeit des Schalls in der dichteren Flüssigkeit möglich.

In Abbildung 5.9 (b) ist erkennbar, dass der Punkt, wo die einfallende und die reflektierte Welle oberhalb und unterhalb des Zylinders aufeinandertreffen, nicht auf der Oberfläche der Flüssigkeit liegt. Dieser Punkt wird durch eine dritte Unstetigkeit, den Machstamm (Nourgaliev et al., 2006), mit der Flüssigkeitsoberfläche verbunden. Nachdem die Schockwelle auf die Hinterseite des Wassers (siehe 5.9 (c)) trifft, wird diese reflektiert. Dabei entsteht ein pilzkappenförmiger Niederdruckbereich in der flüssigen Phase, wo der Druck schnell abfällt. Aufgrund der geringen Dichte sind die Druckänderungen stark in dieser Region. Dies kann im *Schlieren*-Plot als klar identifizierbare Region erkannt werden. Ein ähnliches Verhalten wird auch in der Literatur (Chang und Liou, 2007) gefunden. Vergleiche mit den Ergebnissen in (Nourgaliev et al., 2006) müssen mit Vorsicht behandelt werden, da in jener Arbeit unterschiedliche Anfangsbedingungen benutzt wurden, doch qualitativ kann man Ähnlichkeiten finden. In Abbildung 5.9 wird auch der Druck nach $2 \mu\text{s}$ gezeigt. Oberhalb und unterhalb des Zylinders sind zwei Tiefdruckgebiete innerhalb der Flüssigkeit zu erkennen, wo der Druck nahe dem Wert des Umgebungsdruckes liegt.

Abbildung 5.10 zeigt die weitere Entwicklung der Strömung zu den Zeitpunkten $4 \mu\text{s}$, $6 \mu\text{s}$ und $8 \mu\text{s}$. Die 'Schlieren' Plots zeigen, wie die Schockwelle um den Zylinder läuft und dahinter mit sich überlappt. Stromabwärts vom Zylinder entsteht eine Niederdruckzone, die die Oberfläche nach hinten zieht, wodurch eine leichte Verformung der Hinterseite entsteht.

Stromaufwärts vom Zylinder ist in der Gasphase eine rückwärts laufende Welle zu sehen. Diese entsteht durch die teilweise Reflexion der einfallenden Anfangswelle. Man muss dabei beachten, dass die Richtung der Geschwindigkeit dabei nicht umgekehrt wird, sondern sich bloß der Betrag ändert (siehe Abbildungen 5.11 und 5.12). Die Maximalgeschwindigkeit steigt nach $3 \mu\text{s}$ durch die Umleitung der Luft aufgrund der runden Form des Wasserzylinders vom Ausgangswert auf rund 1200 m/s . Im Vergleich dazu ist der Betrag der Geschwindigkeit innerhalb des Zylinders aufgrund der Trägheit des Wassers sehr gering (zwischen 1.5 m/s und 6 m/s).

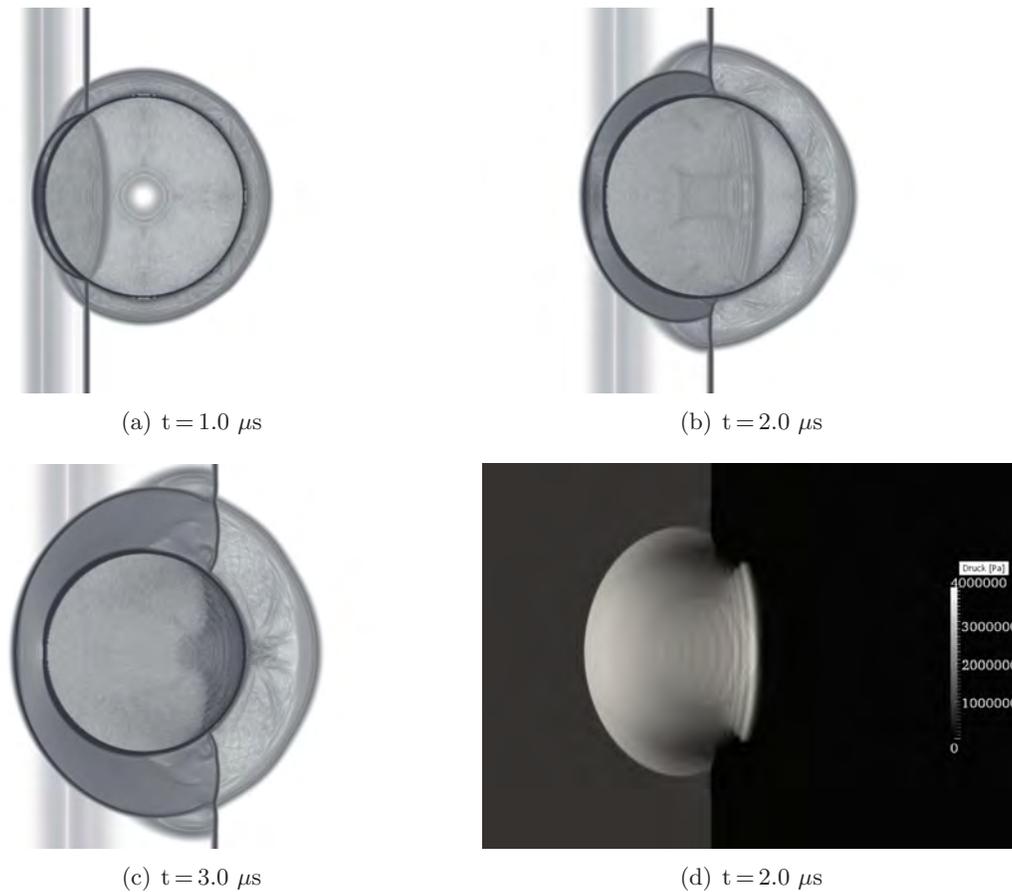


Abbildung 5.9: 'Schlieren' Plots (a)-(c) und Druckverlauf (d) (simulierte Bilder)

Hinter dem Zylinder, wo sich die obere und die untere Halbwelle überlagern (siehe Abbildungen 5.10 (a)-(c)), entsteht ein Rückströmgebiet, welches zunächst anwächst und nach ca. $t = 15 \mu s$ beginnt, sich vom Wasserzylinder abzulösen. Nach dieser Zeit nimmt die Säule eine Form an, die es ermöglicht, dass die Luft entlang der Wasseroberfläche ohne Rückströmung abfließen kann. Dadurch kann sich das Rückströmgebiet langsam flussabwärts bewegen.

In den Abbildungen 5.11 und 5.12 sieht man die Verteilung des Geschwindigkeitsbetrages sowie vier Diagramme mit der x-Komponente der Geschwindigkeit entlang von vier gekennzeichneten Linien. Die Simulation wurde bis $24 \mu s$ durchgeführt (siehe Abbildung 5.13).

Der VOF-Ansatz für die Mehrphasenmodellierung führt zu einem gewissen Fehler in der Grenzflächenregion. Eine Welle mit relativ geringer Amplitude bewegt sich im *Schlieren*-Plot von der Grenzfläche zwischen flüssiger und gasförmiger Phase nach innen und außen (siehe Abbildung 5.9 (a)). Dies ist auf numerische Ungenauigkeit von geringer

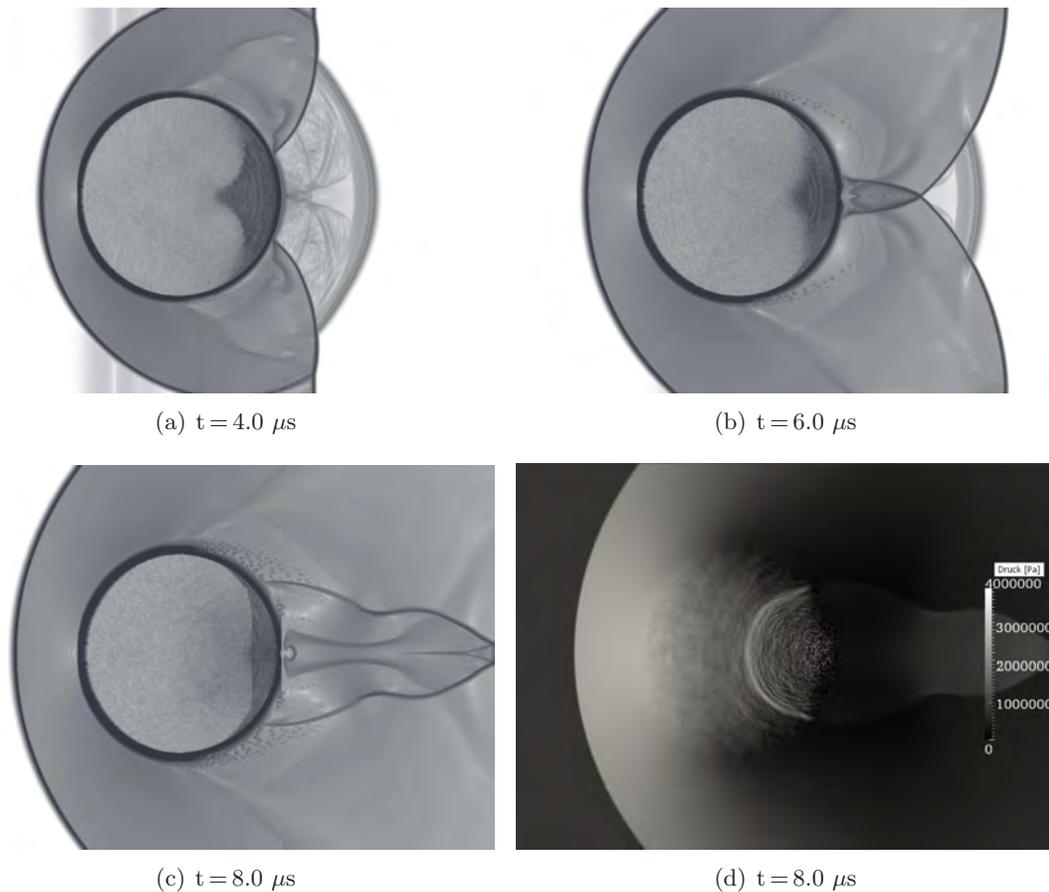


Abbildung 5.10: 'Schlieren' Plots (a)-(c) und Druckverlauf (d). Die Überlappung der beiden Halbwellen ist sichtbar. (simulierte Bilder)

Größe in den Anfangsbedingungen durch die Initialisierung an der zweiten Dezimalstelle zurückzuführen. Dies führt zu einer Inkonsistenz an der Grenzfläche der Säule, wo die Dichte um drei Größenordnungen ansteigt. Da die Inkonsistenz bloß hinter der zweiten Dezimalstelle eine Rolle spielt, ist diese sowohl in der Flüssigkeit als auch in der Gasphase vernachlässigbar, da der Fehler um sechs (Flüssigphase) bzw. um drei (Gasphase) Größenordnungen niedriger ist als die tatsächlichen Werte der Dichte. Aufgrund der logarithmischen Eigenschaft der Größe 'Schlieren' sind diese kleinen Schwankungen jedoch in Abbildung 5.9 (a) gut erkennbar.

Der Vollständigkeit halber wird hier ebenfalls die Konvergenz der Ergebnisse mit Gitterverfeinerung untersucht (siehe Abbildungen 5.14 (a) und (b)). Es wurde sowohl die gasförmige als auch die flüssige Phase auf die Qualität der Stoßwelle untersucht. Zum Zeitpunkt $t = 1.5 \mu\text{s}$ wurde dazu die Schockwelle untersucht. Zu diesem Zeitpunkt hat die Druckwelle in der Luft ungefähr die Vorderseite des Wasserzylinders umflossen. Der Schock in der Flüssigkeit ist vor dem Stoß in der Gasphase. Aus diesem Grund werden

zwei Referenzlinien genommen, einerseits zwischen den Punkten mit den Koordinaten (-1.0, 0.0) mm und (1.5, 0.0) mm für die flüssige Phase (untere gestrichelte Linie in Abbildung 5.8), und andererseits zwischen den Punkten mit den Koordinaten (-1.0, 2.5) mm und (1.5, 2.5) mm für die gasförmige Phase (obere gestrichelte Linie in 5.8). Ein viertes Gitter mit 7680000 Zellen wurde erstellt (Zellkantenlänge von $5 \mu\text{m}$), und die Simulation wurde bis $2 \mu\text{s}$ durchgeführt. Die vier Gitter stellen eine Verfeinerung der Kantenlängen um den Faktor 10 dar.

Abbildung 5.14 (a) zeigt, dass die Dichte hinter der Stoßwelle im Wasser auf einen gewissen Wert ansteigt. Dieser konstante Wert wird von den beiden feineren Gittern richtig vorhergesagt. Das gröbere Mesh zeigt Schwingungen, aber mit der Verfeinerung des Gitters können diese numerischen Oszillationen minimiert werden, wie bereits in Kapitel 5.3.1.3 gezeigt wurde. Die Qualität der Schockwelle wird durch die Verfeinerung erhöht, jedoch liefert die letzte Verfeinerung keine merkbare Verbesserung in der Steilheit des Sprunges, was darauf hinweist, dass damit die physikalische Viskosität die numerische Viskosität dominiert. Auch die Lage wird richtig vorhergesagt. In Abbildung 5.14 (b) sieht man die Druckwelle in der Luft, der Verlauf ist sehr ähnlich zu den Ergebnissen in Kapitel 5.3.1. Die Qualität des Sprunges wird durch die Verfeinerung erhöht, und die Position wird von allen vier Simulationen an der gleichen Stelle vorhergesagt. Auch in diesem Fall bringt die letzte Verfeinerung keine merkbare Verbesserung der Schockwelle.

5.3.2.3 Physikalische Diskussion

Um die Simulation mit experimentellen Ergebnissen vergleichen zu können, müssen einige charakteristische Größen definiert werden. Solch eine wichtige Zahl ist die Weber-Zahl (Theofanous et al., 2007), das Verhältnis zwischen Trägheits- und Oberflächenkräften. Diese ist definiert durch $We = \frac{\rho_{gas} u d}{\sigma} = 128803$ für die untersuchte Hochgeschwindigkeitsströmung. Hier ist ρ_{Gas} die Dichte des Gases, u ist die Anströmgeschwindigkeit, d ist der anfängliche Tropfendurchmesser und σ ist der Wert der Oberflächenspannung.

Eine andere wichtige Kennzahl ist die Ohnesorge-Zahl, die Viskositätskräfte mit Oberflächenkräften vergleicht ($Oh = \frac{\mu_{Fl}}{\sqrt{\rho_{Fl} \sigma d}} = 0.002$). Hier ist μ_{Fl} die dynamische Viskosität der Flüssigkeit. Da in diesem Fall Oh kleiner als 0.1 ist, können viskose Effekte vernachlässigt werden.

Die Reynolds-Zahl ist das Verhältnis der Trägheitskräfte zu den viskosen Kräften $Re = \frac{u d}{\nu}$. Für die Strömung ist $Re = 194012$.

Die letzte wichtige Größe ist eine charakteristische Zeitskala (Engel, 1958; Theofanous et al., 2007) $T^+ = \frac{d}{u} \sqrt{\frac{\rho_{Fl}}{\rho_{Gas}}}$. Damit kann eine dimensionslose Zeit $T = t/T^+$ angegeben werden. Für die untersuchte Strömung ist $T^+ = 68.2 \mu\text{s}$. In den letzten Jahren

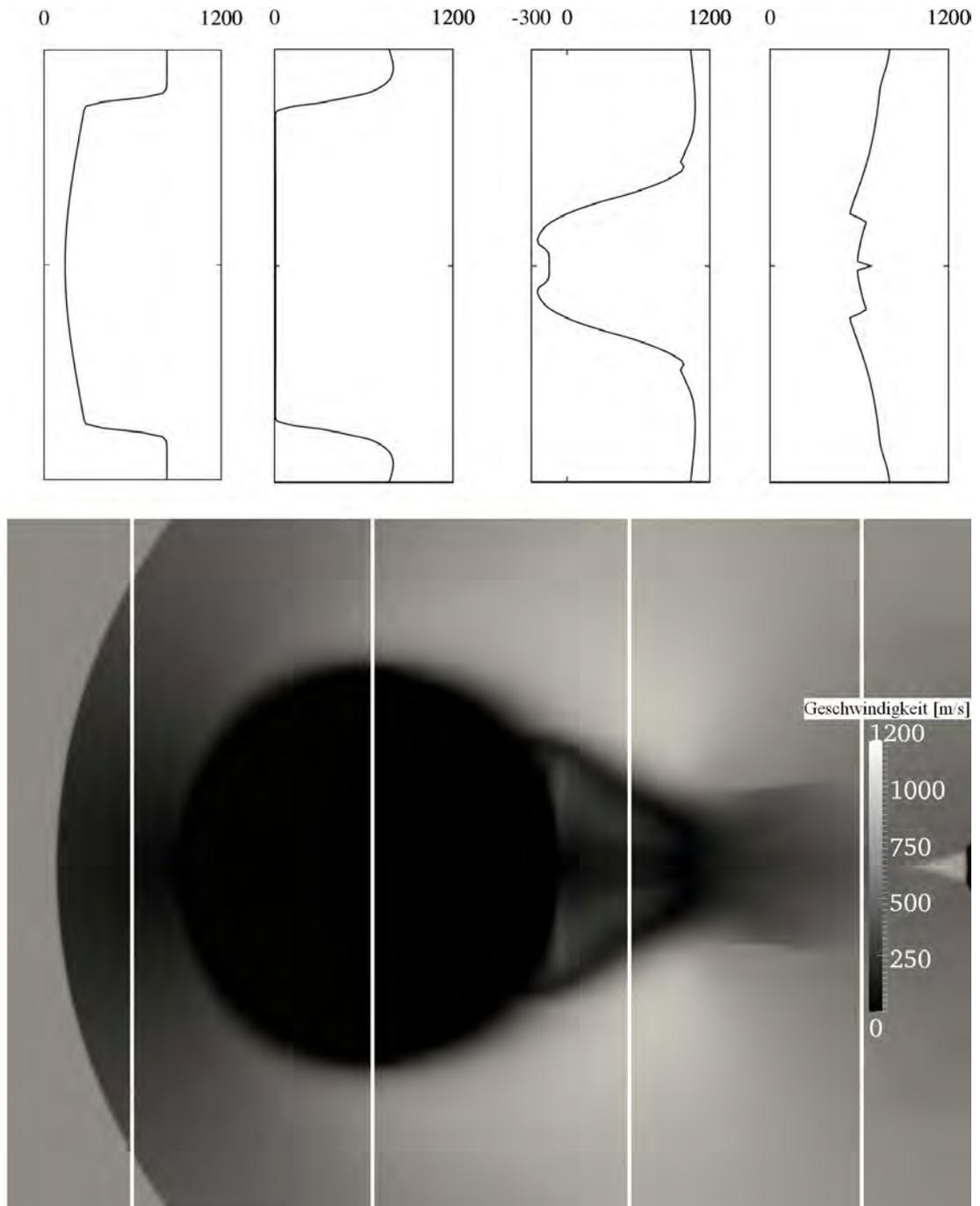


Abbildung 5.11: Geschwindigkeitsbetrag und Diagramme mit der x-Komponente der Geschwindigkeit nach $t = 8 \mu\text{s}$ (Skala in (m/s))

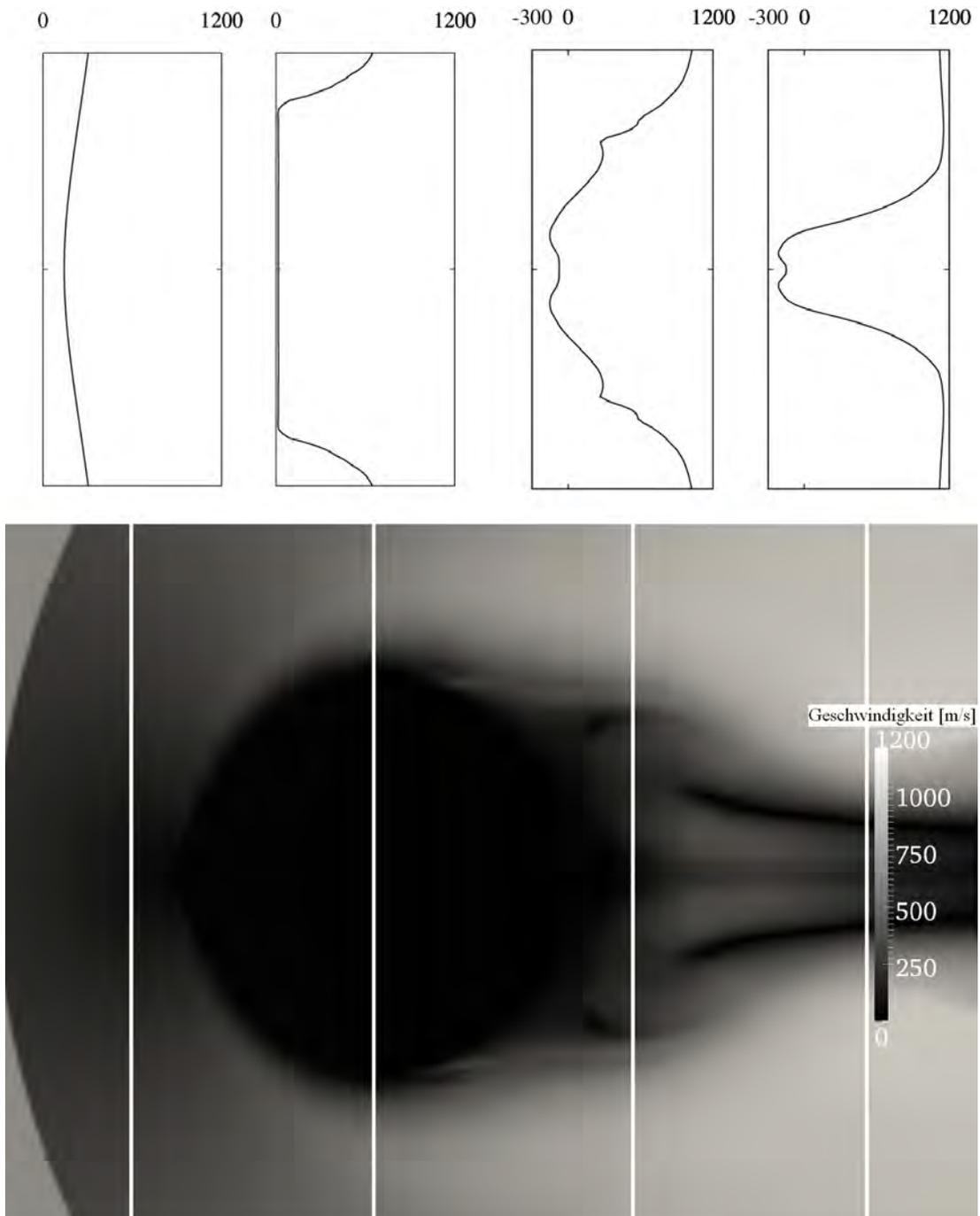


Abbildung 5.12: Geschwindigkeitsbetrag und Diagramme mit der x-Komponente der Geschwindigkeit nach $t = 15 \mu\text{s}$ (Skala in (m/s))

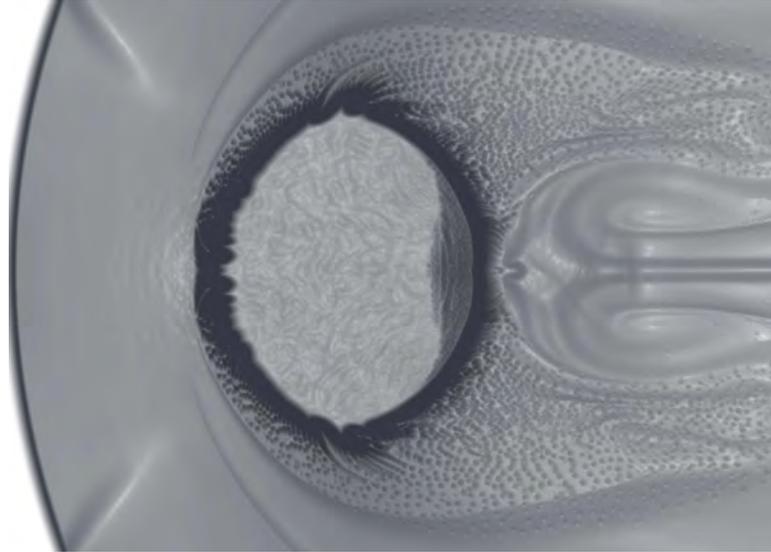


Abbildung 5.13: 'Schlieren' Plot nach $t = 24 \mu\text{s}$ (simuliertes Bild)

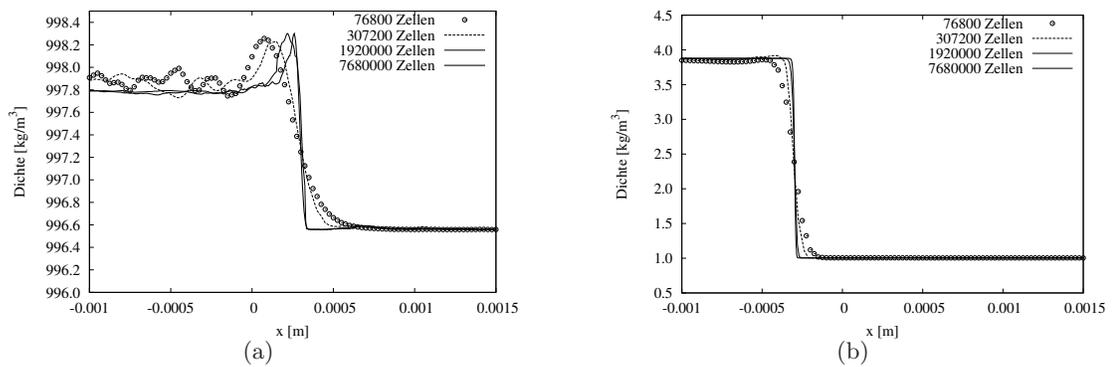


Abbildung 5.14: Dichte entlang der Referenzlinien in Wasser (a) und Luft (b) nach $t = 1.5 \mu\text{s}$ bei Gitterverfeinerung

fand ein Paradigmenwechsel in der experimentellen Untersuchung von Hochgeschwindigkeitstropfenzerfall statt. In (Theofanous und Li, 2008) wurde die Art des Zerfalls in zwei gut unterscheidbare Bereiche unterteilt. Bei niedrigen Weber-Zahlen wird das Regime 'RTP' (Rayleigh-Taylor-Piercing) genannt und bei hohen Weber-Zahlen 'SIE' (shear-induced-entrainment). Eine Beschreibung dieser Regime kann man in Kapitel 3.1.4 finden. In dieser Simulation liegt die Weber-Zahl in der Größenordnung von $\approx 10^5$ (SIE). Aus diesem Grund kann die Simulation mit Experimenten mit $We \geq 1000$ verglichen werden.

In (Theofanous und Li, 2008) wurden die Versuche mit der LIF Methode (laser-induced fluorescence) durchgeführt, die es ermöglicht, direkt die Oberfläche des Tropfens zu visualisieren. Abbildung 5.13 bei $t = 24 \mu s$ zeigt die Strömung bei der dimensionslosen Zeit $T = 0.35$. In (Theofanous und Li, 2008) sind LIF-Aufnahmen bei den dimensionslosen Zeiten von 0.12, 0.24 und 0.36 dargestellt. Beim letzten dimensionslosen Zeitpunkt ist eine Verformung des Tropfens sichtbar. Es entsteht eine 'Muffin'-Form (siehe Abbildung 3.7). Die Autoren in (Theofanous und Li, 2008) beschreiben einen 'spiegelglatten' zentralen Bereich um den vorderen Staupunkt und eine nach außen gerichtete Strömung mit einer signifikanten radialen Komponente mit einer dünnen, stark fragmentierten Struktur. Die Simulationsergebnisse spiegeln diese Form nur in grobem Maßstab wieder.

Da die Reynolds-Zahl der simulierten Strömung $Re = 194012$ ist, kann angenommen werden, dass die Strömung turbulent ist. Aus diesem Grund wird in den nächsten Kapiteln der Einfluss von Turbulenz auf diese Strömungen untersucht.

Man darf auch nicht vergessen, dass die zweidimensionalen Simulationen einen unendlich langen Zylinder untersuchen. Um eine bessere Vergleichbarkeit mit Experimenten zu gewährleisten, muss die Strömung dreidimensional simuliert werden.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass die Simulation die großen Maßstäbe der Strömung abbilden kann. Ergebnisse können mit Simulationen aus der Literatur (Chang und Liou, 2007; Nourgaliev et al., 2006) verglichen werden. Der Vergleich mit experimentellen Ergebnissen (Theofanous und Li, 2008) ist mit Vorsicht zu genießen, da einige physikalische Aspekte zu diesem Zeitpunkt nicht inkludiert wurden (z.B. Turbulenz). Detailliertere Untersuchungen findet man in Kapitel 6.

5.3.3 Dreidimensionale Untersuchung des Solvers mit expliziter Turbulenzmodellierung

Hier folgt eine kurze numerische Validierung des Solvers mit expliziter Turbulenzmodellierung. Diese Untersuchung soll eine anfängliche Abschätzung der möglichen Solvereinstellungen und Fehlergrößenordnungen ermöglichen. Analysiert wurde eine verein-

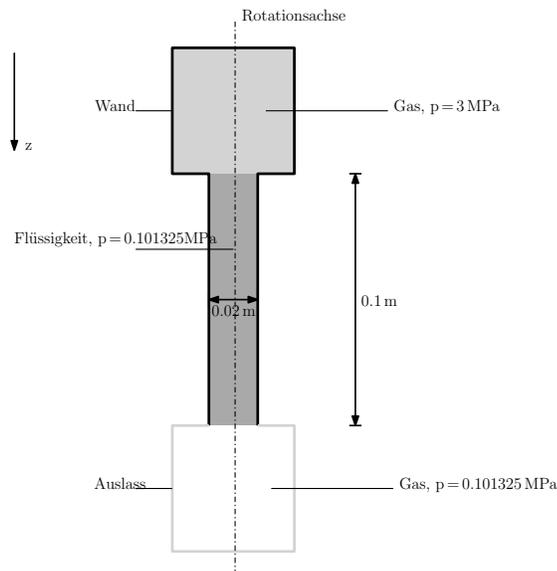


Abbildung 5.15: Schematische Skizze der einfachen Testgeometrie

fachte Geometrie (siehe Abbildung 5.15). In diesem Beispiel treibt ein Gas bei einem Druck von 3 MPa eine Flüssigkeit bei Umgebungsdruck aus einem Rohr. Es wurde ein Gleichgewicht der Temperatur bei 293 K angenommen. Das Gas befindet sich in einem Behälter, der mit dem Rohr direkt verbunden ist. Auf der anderen Seite des Rohres kann die Flüssigkeit das Rohr verlassen. Beim Zeitpunkt $t_0 = 0.0\text{ s}$ wird eine infinitesimal dünne Wand zwischen Gas und Flüssigkeit unendlich schnell entfernt, wodurch der Fluss gestartet wird.

Die Geometrie ist dreidimensional mit einer Rotationsachse. Für die Simulation wird diese Symmetrie nicht verwendet, da man für die Turbulenzmodellierung den vollen dreidimensionalen Vorgang abbilden will. Zielsetzung dieser Untersuchung war, die durch den Druckunterschied bedingte Bewegung der Flüssigkeit abzubilden. Der Durchmesser des Rohres wurde so gewählt, dass der Wert demjenigen des Rohres in Kapitel 9 ($d = 0.02\text{ m}$) entspricht.

Drei unterschiedliche Gitter wurden benutzt (26400, 215400 und 1796800 Hex-Zellen). Dies ergibt mit jedem Mesh einen Verfeinerungsfaktor von zwei. Die Diagramme in den Abbildungen 5.16-5.18 zeigen die Werte entlang der Rotationsachse an. Wie man Abbildung 5.16 entnehmen kann, hat sich die Flüssigkeit nach 1.5 ms um 0.033 m bewegt und diese hat das Rohr (zwischen 0.05 m und 0.15 m) teilweise verlassen. Jedoch hat diese den Auslass des Strömungsvolumens noch nicht erreicht und damit kann man eventuelle randbedingungsbedingte Effekte ausschließen. Der abrupte Sprung der Phasengrenze in Abbildung 5.16 zeigt die Konvergenz der Ergebnisse mit der Gitterverfeinerung gegen

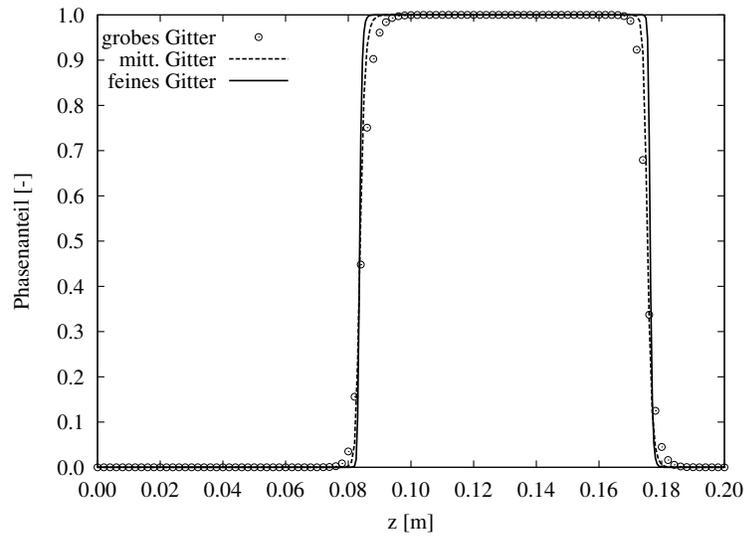


Abbildung 5.16: Gitterkonvergenzuntersuchung nach $t = 1.5 \text{ ms}$

eine asymptotische Lösung.

Als erstes wird die stabile *'upwind'* Diskretisierung von Genauigkeit erster Ordnung für die Divergenzterme verwendet. Für alle anderen Operatoren werden Diskretisierungen zweiter Ordnung verwendet. Da eine Diskretisierung erster Ordnung eine numerische Diffusion verursacht, können unter Umständen unakzeptable Fehler auftreten. Um dies zu untersuchen, wird in einer zweiten Simulation auch die Zentrale-Differenzen-Diskretisierung *'linear'* von Genauigkeit zweiter Ordnung für die Divergenzterme untersucht.

In Abbildung 5.17 kann man die relative Differenz zwischen den Druckverläufen nach 0.1 ms aus diesen beiden Simulationen sehen. Zu diesem Zeitpunkt bewegt sich eine Druckwelle durch die Flüssigkeit, aber diese wird noch nicht reflektiert. Dies ist wichtig, um Reflexionseffekte auszuschließen. Damit sind nur numerische Phänomene sichtbar. Dabei ist der angegebene Wert $(p_{\text{zweite Ordnung}} - p_{\text{erste Ordnung}}) / p_{\text{zweite Ordnung}}$. Die dabei auftretenden Fehler durch Diskretisierung sind in diesem Fall kleiner als 1.5 %.

Eine andere wichtige Fehlerquelle kann aus den unterschiedlichen Turbulenzmodellen entstammen. Dazu werden die Turbulenzmodelle *Smagorinsky* und *Spalart-Allmaras* verwendet, welche jedoch sehr ähnliche Ergebnisse berechnen. In Abbildung 5.18 ist die relative Differenz $(p_{sp} - p_{sm}) / p_{sp}$ sichtbar. Man sieht, dass die Abweichungen um mindestens eine Größenordnung geringer sind als die Fehler durch Diskretisierung. Dies zeigt, dass eine bessere Diskretisierung unter Umständen die Rechenfehler eher verbessert als ein komplizierteres Turbulenzmodell.

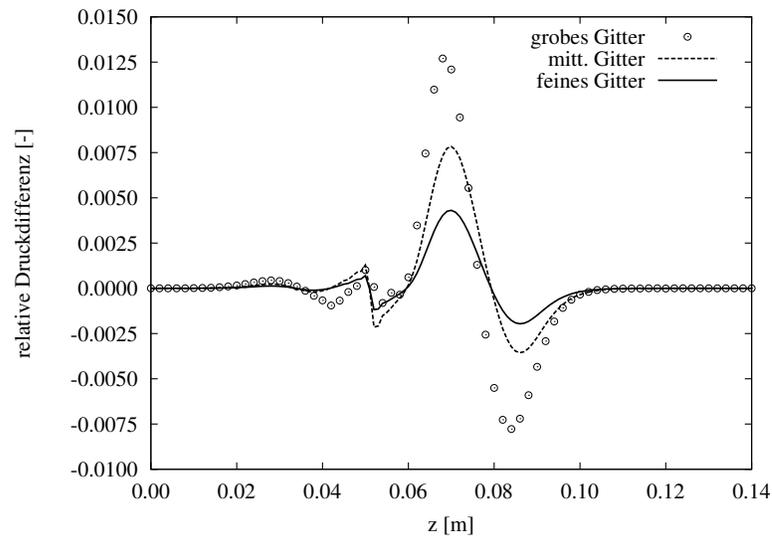


Abbildung 5.17: Relative Druckdifferenz zwischen der Lösungen mit erster Ordnung und zweiter Ordnung Genauigkeit nach $t = 0.1$ ms

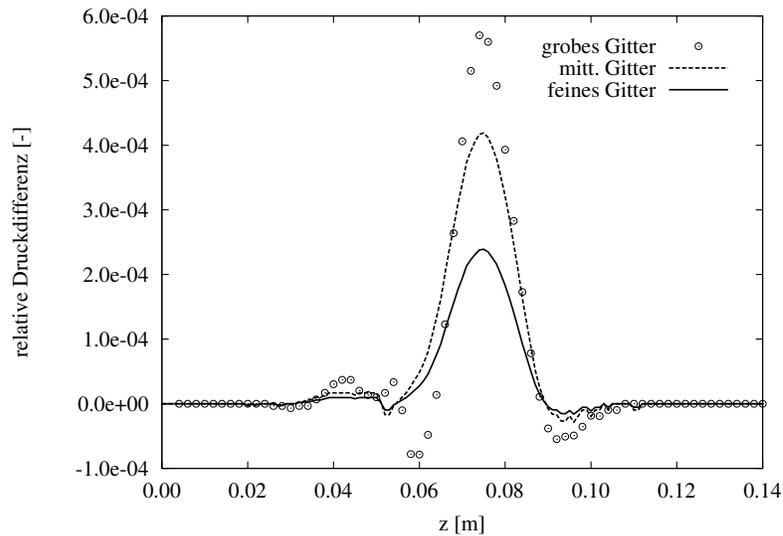


Abbildung 5.18: Relative Druckdifferenz zwischen der Lösungen mit den beiden Turbulenzmodellen Smagorinsky und Spalart-Allmaras nach $t = 0.1$ ms

5.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Mehrphasensolver (mit und ohne expliziter Turbulenzmodellierung) im open source Tool OpenFOAM® näher beschrieben. Es wurde festgestellt, dass die frei verfügbaren Solver nicht in der Lage sind, hoch kompressible Strömungen richtig abzubilden, und es besteht ein Bedarf für solche Solver.

Die implementierten Modelle wie die Zustandsgleichung für die Gas- und Flüssigkeitsphase sowie die implementierten Transportgleichungen wurden präsentiert. Eine ausführliche Validierung wurde mit Hilfe einer eindimensionalen Geometrie durchgeführt. Dabei wurde die Fähigkeit überprüft, diskontinuierliche Sprünge in Feldgrößen richtig abbilden zu können. Dazu wurden unterschiedliche Druckverhältnisse in einem einphasigen sowie in einem mehrphasigen Beispiel analysiert. Die Herangehensweise der direkten Lösung der Gleichungen stellte sich als die richtigste und schnellste Lösung von hochkompressiblen Strömungen heraus.

Ebenfalls wurde eine zweidimensionale Validierung durchgeführt, um Ergebnisse mit Simulationen aus der Literatur vergleichen zu können. Dabei wurde das Auftreffen einer zweidimensionalen Schockwelle auf einen Flüssigkeitszylinder simuliert. Ergebnisse wurden im Detail auf physikalische Phänomene untersucht und die auftretenden Fehler wurden beschrieben und erklärt. Es wurden auch Vergleiche mit Literaturexperimenten gemacht, wobei auf großen Skalen eine gute Übereinstimmung gefunden wurde.

Eine zusätzliche Untersuchung von unterschiedlichen Turbulenzmodellen in einer Mehrphasenströmung zeigte die Größenordnung der Fehler, die in den Simulationen gemacht werden. Dabei stellte sich heraus, dass es wichtiger ist, die richtige Diskretisierungsmethode zu gewährleisten, bevor eine kompliziertere Turbulenzmodellierung gewählt wird.

Mit diesen Ergebnissen wird abgesichert, dass in den folgenden Kapiteln numerisch korrekte Untersuchungen durchgeführt werden können. In jedem Kapitel wird ein zusätzlicher Vergleich mit Experimenten gemacht, um die physikalische Korrektheit der Ergebnisse zu zeigen.

Anwendung 1: Tropfenzerfall bei Überschallbedigungen

6.1 Motivation

Eine der Aufgabenstellungen in dieser Arbeit ist die korrekte Beschreibung von turbulenten Phänomenen in einer turbulenten Hochgeschwindigkeitsströmung und deren Einfluss auf die Strömung. Eine wichtige Anwendung ist der Zerfall eines Flüssigkeitstropfens in einer Überschallgasströmung. Dabei wird der Tropfen von der Gasströmung perfekt umströmt. Solche Prozesse wurden sowohl experimentell (Joseph et al., 1999; Ng und Theofanous, 2008; Theofanous et al., 2004, 2007; Theofanous und Li, 2008; Zhao et al., 2011) als auch simulativ (Chang und Liou, 2007; Liou et al., 2009; Nourgaliev et al., 2005, 2006; Terashima und Tryggvason, 2009, 2010; Theofanous et al., 2006, 2007) untersucht. In den Simulationen dieser Autoren konnte die allgemeine Verformung des Tropfens richtig abgebildet werden, jedoch konnten Detailphänomene nicht abgebildet werden.

In bisherigen Simulationen wurden große Vereinfachungen gemacht. Dieser dreidimensionale Vorgang wurde auf eine zweidimensionale Untersuchung reduziert, wodurch man die Wechselwirkung von einer Schockwelle mit einem unendlich langen Wasserzylinder untersucht. Qualitative Extrapolationen können auf die dreidimensionale Strömung gemacht werden, jedoch können nicht alle Ergebnisse und Schlüsse transferiert werden.

In den meisten Untersuchungen wurde keine explizite Turbulenzmodellierung durchgeführt. Es wurde eine DNS impliziert und vorausgesetzt, dass mit dem verwendeten Rechengitter die Kolmogorov Skalen (siehe Kapitel 4.5) erreicht werden. Da Turbulenz ein dreidimensionales Phänomen ist, kann die zweidimensionale Turbulenzmodellierung unter Umständen inkorrekte Ergebnisse liefern. Im Allgemeinen ist über Turbulenzphänomene in solch einer Strömung sehr wenig bekannt. In diesem Kapitel soll die Wichtigkeit von Turbulenz in der untersuchten Strömung und die Rolle der expliziten Turbulenzmodellierung untersucht werden. Um dies durchführen zu können,

muss zuerst sichergestellt werden, dass turbulente Phänomene in einer Grenzschicht richtig abgebildet werden.

Die Analyse von Schockwellen in einer turbulenten Strömung ist ein weit untersuchtes Thema in der Aerodynamik. Experimentelle (Zheltovodov et al., 1990a,c) sowie simulative (Dussauge et al., 1996; Knight et al., 2001, 2006; Yan et al., 2001) Untersuchungen existieren bereits. Die Reynolds-gemittelten Turbulenzmodelle sind unzureichend, um das untersuchte Phänomen (siehe Kapitel 6.3.2) richtig beschreiben zu können (Knight et al., 2001; Yan et al., 2001). LES und DNS wurden erfolgreich durchgeführt.

Zuerst soll die korrekte Abbildung einer einphasigen Überschallströmung entlang einer Wand untersucht und die erzielten Ergebnisse mit publizierten Resultaten verglichen werden. Zunächst wird die passende Beschreibung von Grenzschichten gezeigt. Danach wird die Wechselwirkung zwischen der gasförmigen und der flüssigen Phase analysiert. Die Untersuchung der Strömung mit expliziter Turbulenzmodellierung kann über die Vorgänge neue Informationen liefern.

6.2 Nachteile der bisherigen Simulationen

In Kapitel 5.3.2 wurde die zweidimensionale Simulation des Tropfenzerfalles zur Validierung des Solvers herangezogen. Diese wurde mit Ergebnissen aus der Literatur verglichen. Es war wichtig, die Zweidimensionalität beizubehalten, um eine ausreichende Vergleichbarkeit zu gewährleisten. Aus dem selben Grund wurde keine explizite Turbulenzmodellierung verwendet. Die Ergebnisse werden in Kapitel 5.3.2 bis $t = 24 \mu\text{s}$ ausgewertet. Es stellt sich die Frage, wie wichtig es ist, die zusätzliche dritte Raumrichtung in die Simulation aufzunehmen beziehungsweise Turbulenz explizit zu modellieren. Für diese Modellierung ist die dreidimensionale Simulation wichtig, da Turbulenz ein dreidimensionales Phänomen ist.

In der Literatur (Knight et al., 2001; Yan et al., 2001) werden diese Punkte meistens nicht berücksichtigt. Die Reynolds-Zahl der untersuchten Strömung ist $\geq 10^5$. Normalerweise würde das auf eine turbulente Strömung hinweisen. Für die direkte numerische Simulation von Turbulenz benötigt man größenordnungsmäßig $\geq 10^8$ - 10^9 Zellen, und somit müsste Turbulenz auf gröberen Gittern modelliert werden. Wenn dies gemacht werden soll, stellt sich die Frage, wie sinnvoll es ist Turbulenzmodellierung zweidimensional durchzuführen, da dieses Phänomen dreidimensional ist. Damit stellt sich gleichzeitig die nächste Frage wie dominant diese beiden Punkte tatsächlich sind.

Bei Betrachtung der Form des Flüssigkeitszylinders in Abbildung 5.13 ist die korrekte Abbildung im Vergleich zu den experimentellen Ergebnissen aus (Theofanous und Li, 2008) deutlich zu erkennen. Jedoch werden Details auf der Oberfläche nicht abgebildet. Es gibt keinen abrupten Wechsel von einem glatten zentralen Bereich zu einem

gewellten Bereich. In (Theofanous und Li, 2008) wird der Zerfall bei dieser Weber-Zahl (≥ 1000) dem Phänomen des *'shear-induced entrainment'* (SIE, deutsch: scher-ratenbedingtes Mitreißen) zugeschrieben. Dies bedeutet, dass die Größe $\partial_i u_j$ für den Prozess zuständig ist. In (Theofanous und Li, 2008) ist zu erkennen, dass im gewellten Bereich die Strukturen sehr statistisch verteilt sind, und die Schlussfolgerung liegt nahe, dass hier nicht nur die physikalischen Scherspannungen, sondern auch Turbulenzphänomene dominant sind. Diese werden in der CFD als zusätzliche modellierte Spannungen angenommen.

Um die Wichtigkeit der Turbulenzmodellierung zu untersuchen, wird in Kapitel 6.3.1 die einphasige turbulente Umströmung einer Kugel simuliert.

6.3 Voruntersuchungen

6.3.1 Turbulente Effekte in der $M = 3$ Umströmung einer Kugel

Um die Rolle der Turbulenz in der Mehrphasenströmung des Tropfenzerfalls einschätzen zu können, wurde eine dreidimensionale Strömungssimulation der Umströmung einer starren Kugel mit den gleichen geometrischen Abmessungen wie der Flüssigkeitstropfen im Anfangszustand durchgeführt (siehe Abbildung 6.9). Dazu wird der Mehrphasen-solver mit expliziter Turbulenzmodellierung verwendet. Im Modell existiert nur die Gasphase in der gesamten Domäne und an Stelle des Flüssigkeitstropfens wird eine starre Kugel in das Rechengitter gestellt. Wo die Phasengrenze Gas/Flüssigkeit wäre, wird eine Wand angenommen. Innerhalb der Kugel wird das Gitter verworfen und die Gleichungen werden dort nicht gelöst. Für die Modellierung der Turbulenz wird das *'DeardorffDiff-Stress'*-DSM-Modell von OpenFOAM® (Deardorff, 1973; Fureby und Grinstein, 2002; OpenCFDLtd, 2012; Weller et al., 1998) verwendet. Um später die Mehrphasensimulation mit den Experimenten vergleichen zu können, fällt die Schockwelle nicht mehr von der linken Seite, sondern von der rechten Seite ein.

Abbildung 6.1 zeigt die starre Kugel im Strömungsvolumen. In der Mitte wird diese von einer Auswerteebene $z = 0$ m durchschnitten. Auf dieser Ebene sind der Betrag der Geschwindigkeit sowie die unskalierten Geschwindigkeitsvektoren dargestellt. Die Ausbildung einer Stagnationszone vor der Kugel, in der die Geschwindigkeit Null wird, ist deutlich zu erkennen. Es kann auch eine nach außen gerichtete Strömung mit einer dominanten radialen Komponente identifiziert werden. Die höchsten Geschwindigkeitswerte werden dort erreicht, wo die Strömung die Ober- bzw. die Unterseite der Kugel verlässt.

Als Beispiel für die turbulenten Größen in der Strömung wird in Abbildung 6.2 die erste Komponente des turbulenten (subgrid-scale) Schubspannungstensors $u'u'$ dargestellt. Hier kann die Stagnationszone vor der Kugel ebenfalls erkannt werden, da dort

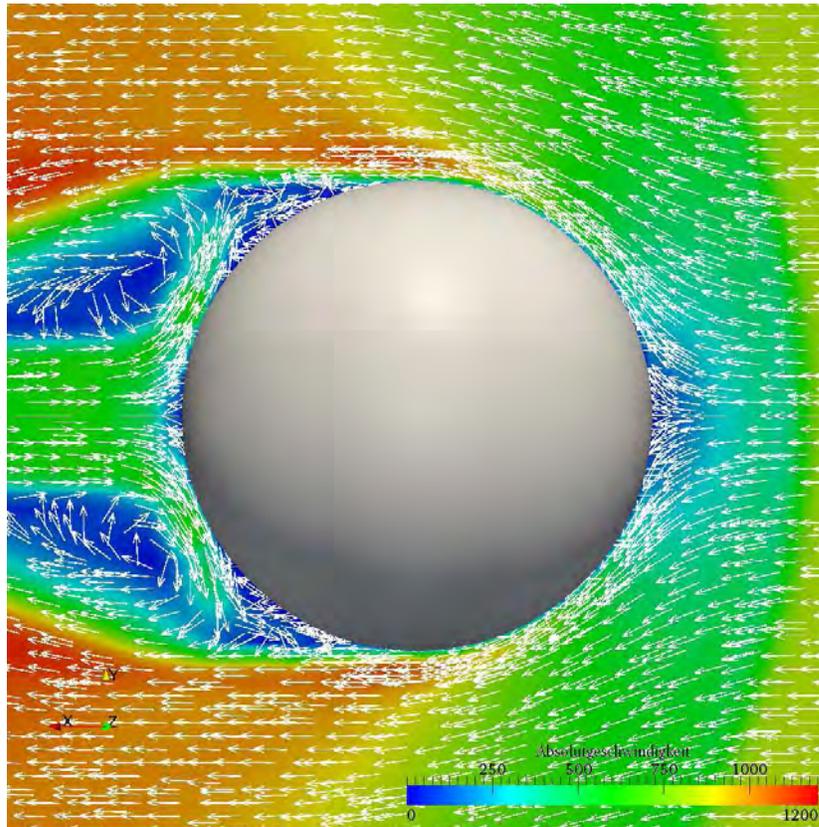


Abbildung 6.1: Geschwindigkeitsbetrag mit den unskalierten Geschwindigkeitsvektoren nach $t = 26 \mu s$

Turbulenzeffekte vernachlässigbar klein sind. Dies lässt sich damit erklären, dass dort die Geschwindigkeitswerte sehr niedrig sind.

Im Gegensatz zu dieser laminaren (oder unwesentlich turbulenten) Zone steigen im Bereich, in dem die Geschwindigkeit vom Betrag her ansteigt, die turbulenten Größen auch an. Ein ähnliches Verhalten wird für die Komponenten $v'v'$, $w'w'$ sowie $u'v'$ gefunden. Die Größenordnung der anderen beiden Komponenten des symmetrischen subgrid-scale Tensors ist um vier bis fünf Größenordnungen kleiner und kann für diese Strömung vernachlässigt werden.

Die Position der Stagnationszone stimmt gut mit der Position der glatten Oberfläche des Tropfens in (Theofanous und Li, 2008) überein, während die Position der turbulenten Zone mit der Position der nach außen gerichteten welligen Strömung an der Oberfläche des Flüssigkeitstropfens vergleichbar ist. Um solche Vergleiche bewerkstelligen zu können, wird im Kapitel 6.4 die mehrphasige Strömung analysiert.

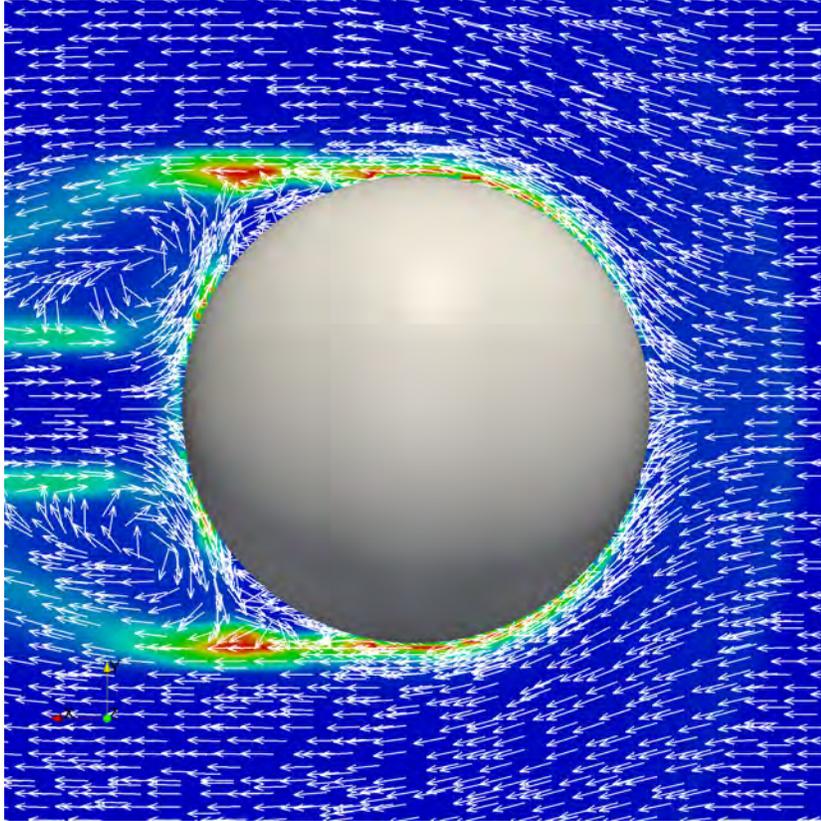


Abbildung 6.2: Verlauf der ersten Komponente des turbulenten Schubspannungstensors $u'u'$ mit den unskalierten Geschwindigkeitsvektoren nach $t = 26 \mu\text{s}$

6.3.2 Expansions-/Kompressionseck

In Kapitel 6.3.1 ist sichtbar, dass turbulente Effekte an der Oberfläche der Kugel dominant sind. Ein stagnanter Flüssigkeitstropfen wirkt in der Anfangsphase des Zerfallsprozesses auch wie eine feste Wand und die Geschwindigkeit fällt an der Phasengrenze auf Null ab. Erst mit der Ausbildung der Strömung wird Masse auf der Oberfläche beschleunigt. Jedoch fällt aufgrund der Trägheit der Flüssigkeit die Geschwindigkeit vom Wert der Hauptströmung auf einen niedrigen Wert ab. In dieser Zone sind Scherspannungseffekte bzw. Turbulenzeffekte dominant (siehe Kapitel 6.4). Um zu gewährleisten, dass der Solver in solchen Bereichen die Strömung richtig abbildet, wird zunächst eine einphasige turbulente Überschallgasströmung an einer Wand untersucht. Auch in diesem Fall wurde im gesamten Strömungsvolumen der Phasenanteil der Flüssigkeit auf Null gesetzt. Die thermophysikalischen Daten von Luft wurden für die Gasphase verwendet.

Eine schematische Zeichnung der untersuchten Geometrie ist Abbildung 6.3 zu entnehmen. Die Wand ist durch die dicke Linie gekennzeichnet. Analysiert wird die turbulente Grenzschicht der Dicke δ einer Überschallströmung ($M = 2.88$) über ein 25° -iges

Expansions- und ein 25° -iges Kompressionseck (für einen Vergleich siehe (Knight et al., 2001, 2006)). In Abbildung 6.3 ist auch die erwartete Form der Entspannungszone, jene des Schocks sowie jene der Separationszone der Strömung eingezeichnet (Knight et al., 2001, 2006).

Die geometrischen Abmessungen des Rechengebietes sind 24δ in die x-Richtung, 6δ in die y-Richtung und 2δ in die z-Richtung. Ergebnisse werden auf der Auswerteebene $z = \delta$ in der Mitte des Volumens in z-Richtung gezeigt (für eine Vergleichbarkeit mit den experimentellen Daten in (Knight et al., 2001, 2006)). 56 Zellen wurden in z-Richtung verwendet und 24000 Zellen in der x-y-Ebene.

Die Reynolds-Zahl $Re_\delta = 20000$ der untersuchten Strömung wurde von Simulationen in der Literatur (Kannepalli et al., 2002; Knight et al., 2001, 2006) übernommen.

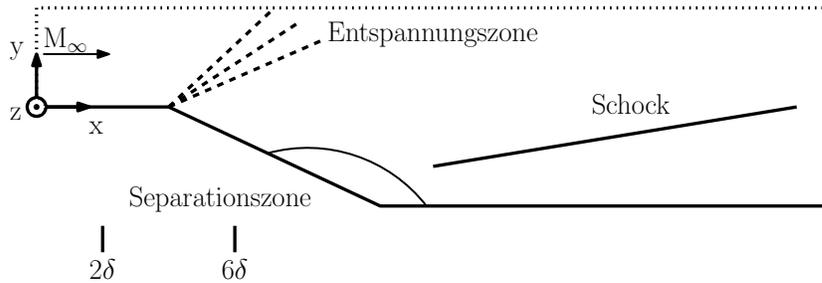


Abbildung 6.3: Schematische Skizze des untersuchten Expansions-/Kompressionsecks

6.3.2.1 Einfluss der Einlassrandbedingungen auf die Grenzschicht

Für die richtige Aufgabe der Grenzschicht am Einlass wurde eine separate Simulation durchgeführt. Dazu wurde die gleiche $M = 2.88$ Strömung über eine ebene Platte betrachtet. In diesem Fall wurden die Strömungsgrößen am Einlass einheitlich über die Gesamtfläche definiert. Dazu wurde ein Strömungsvolumen mit 14.8δ in die x-Richtung, in die y-Richtung 3.4δ und in die z-Richtung 1.925δ ($150 \times 64 \times 56$ Zellen, wie in (Kannepalli et al., 2002) vorgeschlagen) verwendet. Die Rechnung wurde über eine Zeitperiode von $320\delta/U_\infty$ ausgeführt und die Ergebnisse zeitgemittelt. Es stellt sich eine konstante Dicke der Grenzschicht ein. Die Dicke der Schicht ergab sich zu $312.2 \mu\text{m}$, was sehr gut mit dem Wert von $314.6 \mu\text{m}$ in (Kannepalli et al., 2002) übereinstimmt. Solch ein Profil wurde am Einlass des Expansions-/Kompressionsecks aufgegeben.

6.3.2.2 Ergebnisse

Die Simulation wurde über die gleiche Zeitperiode ausgeführt wie in Kapitel 6.3.2.1. Die zeitgemittelten Ergebnisse wurden zur Analyse herangezogen. Abbildung 6.4 zeigt den

gemittelten Druckverlauf im Strömungsvolumen. Man kann klar eine Entspannungszone am Expansionseck erkennen sowie den Drucksprung hinter dem Kompressionseck.

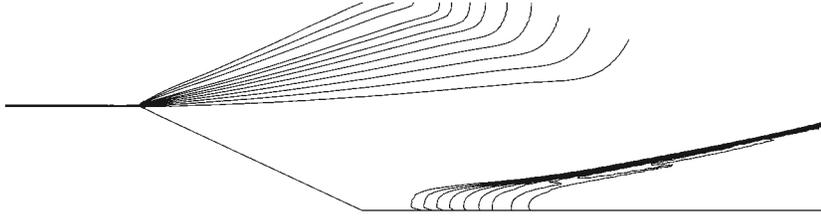


Abbildung 6.4: Iso-Linien des gemittelten Drucks

Die Separationszone zeichnet sich beim zweiten (unteren) Eck mit einer Länge L_{sep} (siehe Abbildung 6.5). Sowohl die Druck- als auch die Geschwindigkeitsverteilung ist gut vergleichbar mit den Simulationsergebnissen in (Knight et al., 2001, 2006), welche selbst in guter Übereinstimmung mit Experimenten stehen (Zheltovodov et al., 1990a,c).

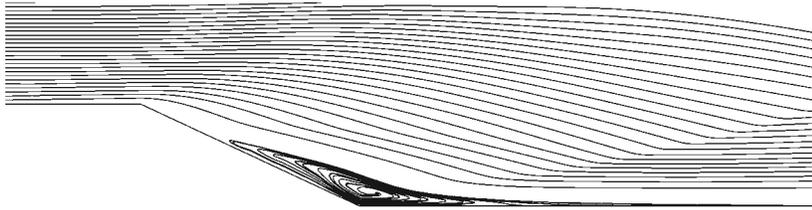


Abbildung 6.5: Gemittelte Stromlinien mit der Separationszone

In (Knight et al., 2001, 2006; Zheltovodov und Schuelein, 1988; Zheltovodov et al., 1993) wurde eine relative Separationslänge L_{sep}/L_c für experimentelle Ergebnisse definiert mit

$$L_c = \frac{\delta_e \left(\frac{p_m}{p_{pl}} \right)^{3.1}}{M_e^3}$$

Dabei ist p_m der Druck hinter dem Schock, p_{pl} der Plateaudruck aus der Formel nach Zukoski ((Knight et al., 2001, 2006; Zheltovodov und Schuelein, 1988; Zheltovodov et al., 1993; Zukoski, 1967) mit $p_{pl} = p_e (2 M_e + 1)$), und M_e , p_e sowie δ_e jeweils die Mach-Zahl, der Druckwert und die Grenzschichtdicke stromaufwärts von der Kompression und stromabwärts von der Expansion. In (Knight et al., 2001) ist diese skalierte Länge mit 11.3 ± 1.2 gegeben (das Fehlerintervall wird aufgrund der Unsicherheit in der Bestimmung der Dicke der Grenzschicht δ_e angegeben). In dieser Simulation wurde dieser Wert zu 14.1 ± 1.4 berechnet. In (Knight et al., 2001) wurde ein Vergleich durch

eine lineare Extrapolation zu experimentellen Ergebnissen bei höheren Reynolds-Zahlen durchgeführt und von einer guten Übereinstimmung berichtet. Bei Annahme eines nicht-linearen Verhaltens der Separationslänge mit der Reynolds-Zahl steht der Wert von 14.1 ebenfalls in guter Übereinstimmung mit Experimenten.

Das Druckprofil an der Wand in Abbildung 6.6 zeigt einen Abfall hinter dem ersten Eck, wobei dieser Abfall vom Wert her richtig vorhergesagt wird. Die Ablösung der Grenzschicht um das zweite Eck verursacht ein Plateau, bevor der Druck wieder hinter dem zweiten Eck ansteigt. Nach dem Druckminimum liegen die Simulationsergebnisse über den experimentellen Daten. Dies erreicht gute Übereinstimmung mit den Experimenten, da diese bei höheren Reynolds-Zahlen durchgeführt wurden. Bei niedrigeren Werten würde der Druckverlauf tiefer liegen (Knight et al., 2006).

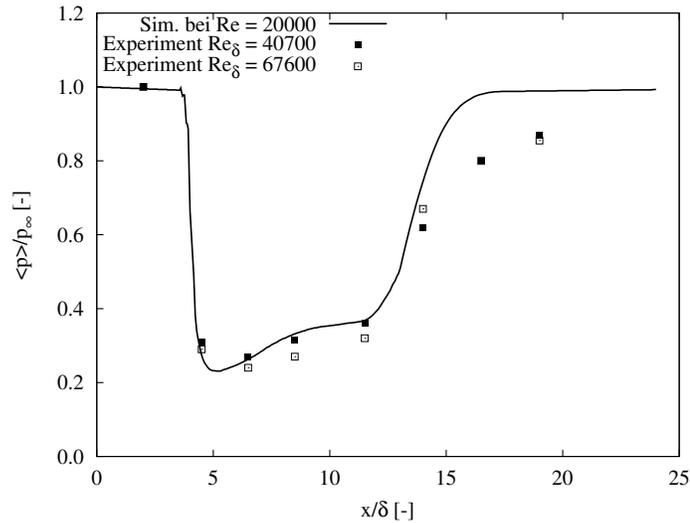


Abbildung 6.6: Gemitteltetes Druckprofil auf der Wand (skaliert), experimentelle daten aus (Knight et al., 2006)

Skalierte gemittelte Geschwindigkeitswerte auf zwei Auswertegeraden bei $x = 2\delta$ und 6δ sind in Abbildung 6.7 dargestellt. Die erste Linie liegt stromaufwärts vom Expansioneck, während die zweite Gerade zwischen Expansion und Kompression liegt (siehe Abbildung 6.3). Diese Ergebnisse sind gut mit experimentellen Ergebnissen aus (Zhel-tovodov et al., 1990b) vergleichbar.

Die wichtigste Frage hier ist die korrekte Behandlung der Turbulenz. Aus diesem Grund wird in Abbildung 6.8 die erste Komponente des turbulenten Spannungstensors auf den beiden gleichen zwei Geraden gezeigt. Stromaufwärts von der Expansion spielen turbulente Effekte nur innerhalb der Grenzschicht eine große Rolle. Dahinter wird Turbulenz über eine größere Fläche verteilt. Im Vergleich mit (Knight et al., 2001) zeigt die Simulation eine gute Übereinstimmung auch in Hinblick auf die Modellierung von Turbulenz.

Damit ist klar, dass der Solver aus Kapitel 5.2 die Verläufe von Druck, von der Geschwindigkeit sowie von den turbulenten Größen in Hochgeschwindigkeitsströmungen gut abbildet. Die Ergebnisse sind vergleichbar mit Werten aus der Literatur. Damit erfüllt der Solver die Kriterien ausreichend, um die turbulente Grenzschicht beim Zerfall von Flüssigkeitstropfen abbilden zu können.

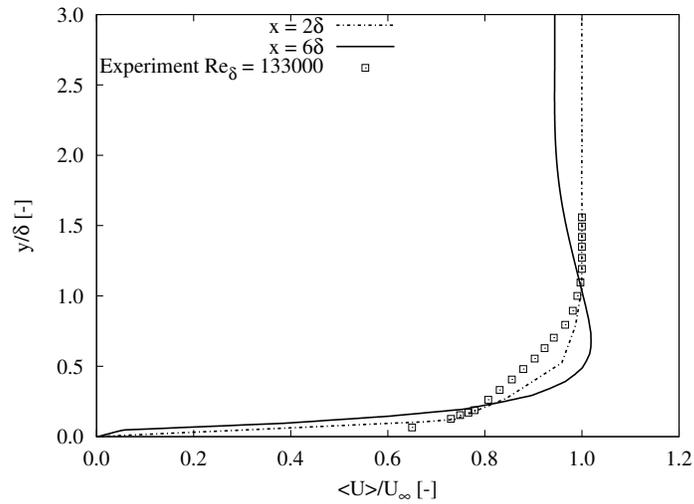


Abbildung 6.7: Mittlerer Geschwindigkeitsbetrag (skaliert)

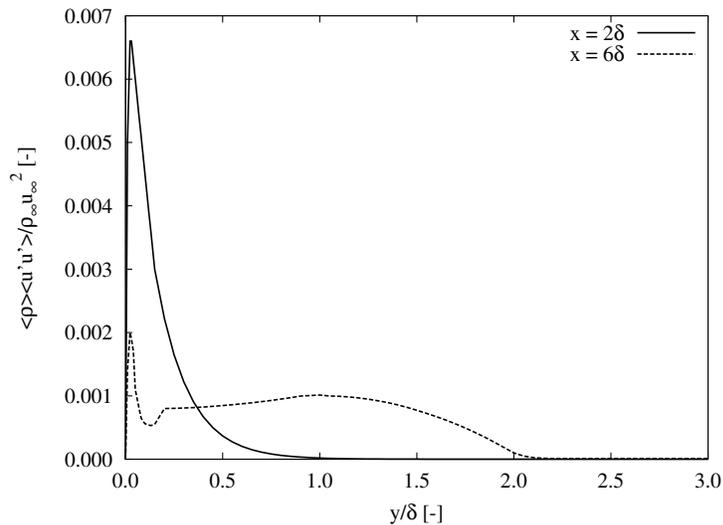


Abbildung 6.8: Erste Komponente des turbulenten Spannungstensors (skaliert)

6.4 Turbulente Simulation des Zerfalls eines Flüssigkeitstropfens

6.4.1 Simulationseinstellungen

In diesem Kapitel wird die dreidimensionale Simulation des Tropfenzerfalls durch eine ebene Schockwelle ($M = 3$) mit dem Anfangstropfendurchmesser von 3.5 mm im Detail diskutiert (schematische Skizze siehe Abbildung 6.9). Die Anfangsbedingungen wurden aus Kapitel 5.3.2 entnommen und in die dritte Dimension erweitert. In diesem Fall fällt die Schockwelle von der rechten Seite ein, damit der Vergleich mit den Experimenten in (Theofanous und Li, 2008) besser gegeben ist. Anfangsbedingungen auf der Niederdruckseite des Schocks sind:

$$p = 0.1 \text{ MPa}, u_i = v_i = w_i = 0 \text{ m/s}, T_i = 346.98 \text{ K}$$

und auf der Hochdruckseite des Schocks:

$$p = 1.0333 \text{ MPa}, u_i = 831.48 \text{ m/s}, v_i = w_i = 0 \text{ m/s}, T_i = 929.57 \text{ K}$$

Der simulierte Bereich hat die Abmessungen 0.024 m in die x-Richtung und 0.008 m in die y- und z-Richtung. Drei unterschiedliche Rechengitter mit 240x80x80, 320x106x106 und 480x160x160 Zellen wurden untersucht. Dies ergibt eine Verfeinerung der Zelllängen in alle kartesischen Richtungen um einen Faktor zwei. Dadurch soll auch die Konvergenz der Ergebnisse mit Gitterverfeinerung untersucht werden.

Da das Simulationsvolumen keinerlei Wände enthält, wurden an den Seiten des Volumens 'von Neumann' Randbedingungen gesetzt (wie in Kapitel 5.3.2). In den folgenden Simulationen wurden alle Operatoren mit Methoden von Genauigkeit zweiter Ordnung diskretisiert. Die Courant-Zahl wurde wiederum auf 0.02 begrenzt.

Es wurden die gleichen thermodynamischen Daten wie in Kapitel 5.3.2 verwendet. Die Simulationen bis zur charakteristischen Zeit von $T = 0.38$ (Realzeit $t = 26 \mu\text{s}$) durchgeführt. Es wurden vier Turbulenzmodelle untersucht.

6.4.2 Einfluss von Scherspannungen auf die Strömung

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse mit dem 'DeardorffDiffStress' Turbulenzmodell präsentiert. Um Experimente mit den Simulationsergebnissen vergleichen zu können, werden die Simulationsergebnisse nach $T = 0.38$ gezeigt. Es werden die Größen auf der mittleren Auswerteebene $z = 0 \text{ m}$ dargestellt. Ebenfalls wird die Fläche mit konstantem Wert für den Phasenanteil der Flüssigkeit $\alpha = 0.9$ präsentiert, um die Verformung des Flüssigkeitstropfens darzulegen. In Abbildung 6.10 ist ein Stagnationsbereich vor dem Tropfen erkennbar. In diesem Bereich hat der Tropfen eine glatte Oberfläche, wie in

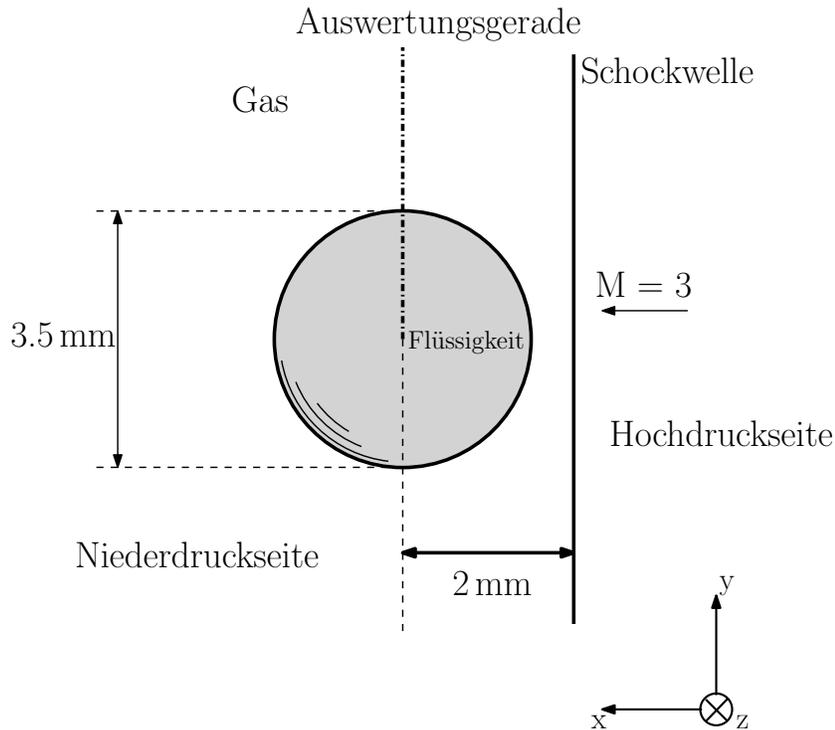


Abbildung 6.9: Schematische Skizze der Anfangsbedingungen (strich-punktierete Linie zeigt die Lage der Auswertungsgerade für Abbildungen 6.13-6.16)

(Theofanous und Li, 2008) berichtet wird. In der Simulation ergibt sich der Durchmesser von dieser Region zu ca. 50 % des Anfangsdurchmessers des Tropfens. In (Theofanous und Li, 2008) werden Werte von 65 % angegeben.

Im Anfangsstadium des Prozesses ist der Tropfen stagnant und die Oberfläche stellt eine Wand dar. Damit fällt die Geschwindigkeit der einfallenden ebenen Schockwelle zunächst auf Null. Mit der Zeit wird auf der Oberfläche Masse mitgerissen. Da die Geschwindigkeit in dieser Grenzschicht stark abfällt, ist in diesem Bereich der Wert der Scherspannungskomponenten $\partial_i u_j$ höher als im sonstigen Strömungsvolumen. Im glatten Stagnationsbereich sind diese Kräfte vernachlässigbar im Vergleich zur Zone stromaufwärts, wo die Geschwindigkeit vom Stagnationswert ansteigt und den Maximalwert am oberen und unteren Ende des Tropfens erreicht (siehe Abbildung 6.10).

Da in der Stagnationszone die Geschwindigkeitswerte klein sind, sind auch die turbulenten Größen klein. In dem Bereich, wo die Geschwindigkeit ansteigt, nehmen auch die turbulenten Größen zu (siehe Abbildung 6.11). In diesem Bereich findet man eine abrupte Veränderung der Oberflächenform des Tropfens in eine gewellte Form (Vergleich mit (Theofanous und Li, 2008)).

Um die Richtigkeit der präsentierten Ergebnisse zu gewährleisten, wird die Konvergenz der Ergebnisse mit der Verfeinerung des Gitters zum Zeitpunkt $T = 0.175$ dargestellt

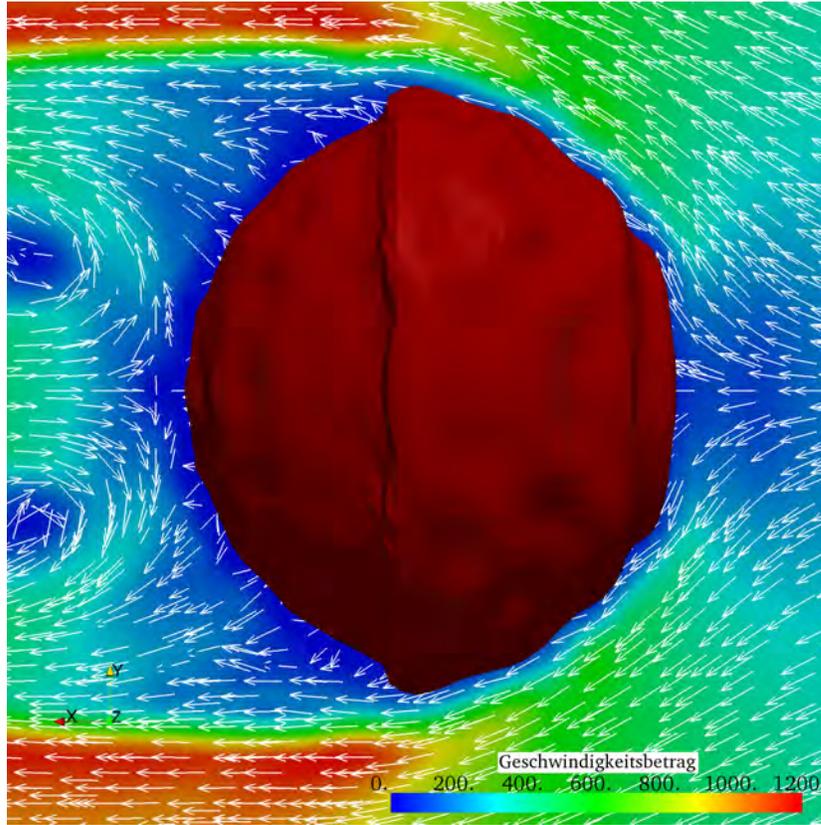


Abbildung 6.10: Verteilung des Geschwindigkeitsbetrages mit konstanter Fläche $\alpha = 0.9$ sowie Geschwindigkeitsvektoren mit konstanter Länge (nach $T = 0.38$)

(siehe Abbildung 6.12). Der Wert der ersten Komponente multipliziert mit der Dichte $\rho u' u'$ skaliert auf das Produkt von Anfangsdichte und dem Quadrat der Anfangsgeschwindigkeit ($\frac{\rho u'_i u'_i}{\rho_i u_i^2}$) wird in Abbildung 6.12 gezeigt. Hierbei wird die Gerade von $x = y = z = 0$ bis $x = z = 0$ m und $y = 0.004$ m (zur Position siehe Abbildung 6.9) zur Auswertung herangezogen. Die Anfangsdichte wird gewichtet $\rho_i = \alpha \rho_{Fl} + (1 - \alpha) \rho_{Gas}$. Der Wert von $\alpha = 0.5$ ist in etwa bei $y = 0.0019$ m. Die Ergebnisse konvergieren auf den drei Gittern gegen eine asymptotische Lösung. In Abbildung 6.12 sind zwei Maxima erkennbar, die aufgrund des unterschiedlichen Anstiegs von $u' u'$ und des Abfalls von ρ entstehen.

Im Vergleich aller sechs Komponenten des turbulenten Spannungstensors sind die dominanten Komponenten identifizierbar. Die diagonalen Komponenten haben den größten Betrag (siehe Abbildung 6.13). Die Komponente $\rho u' v'$ ist bloß um eine Größenordnung niedriger (siehe Abbildung 6.14). Die Komponenten $\rho v' v'$ und $\rho w' w'$ sind praktisch gleich, was auf die gleichmäßige Verteilung der Turbulenz auf diese beiden Komponenten hindeutet. Dies ist wiederum auf den radialen Transport von Turbulenz in der turbulenten Zone stromabwärts von der laminaren Zone zurückzuführen (vergle-

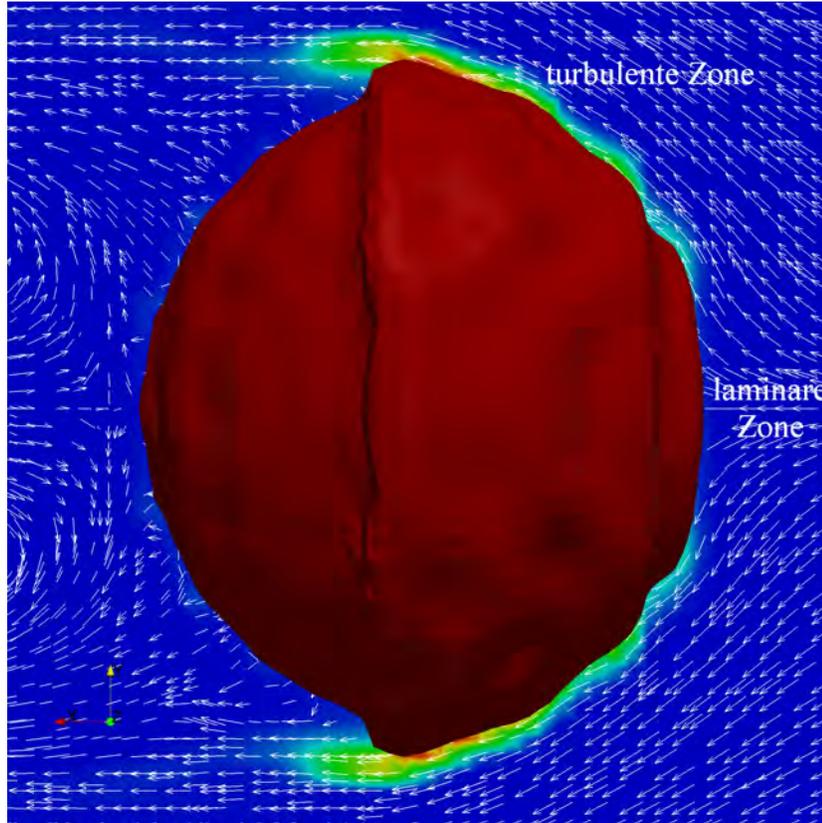


Abbildung 6.11: Verteilung der ersten Komponente des turbulenten (subgrid-scale) Spannungstensors multipliziert mit der mittleren Dichte $\rho u'u'$ mit der Fläche $\alpha = 0.9$ und mit den unskalierten Geschwindigkeitsvektoren (nach $T = 0.38$)

iche (Theofanous und Li, 2008) bezüglich des radialen Transports). Die anderen beiden Nebendiagonalelemente (siehe Abbildung 6.11) sind um fünf Größenordnungen niedriger und können damit vernachlässigt werden.

Damit kann gezeigt werden, dass ein Fehler von mindestens 10% auftritt, sofern isotrope Turbulenz angenommen wird. Der Einfluss von unterschiedlichen Turbulenzmodellen wird in Kapitel 6.4.3 besprochen.

In (Theofanous und Li, 2008) stellen die Autoren fest, dass statt des Phänomens 'Rayleigh-Taylor Piercing' (siehe Kapitel 3.1.4) der dominante Mechanismus für den Zerfall der 'SIE' Mechanismus (shear-induced entrainment, scherratenbedingtes Mitreißen, siehe Kapitel 3.1.4) zuständig ist. In Abbildung 6.15 wird das Verhältnis von $(\rho u'u')/(\mu \partial_x u)$ gezeigt, wobei die gemittelte dynamische Viskosität $\mu = \alpha \mu_{Fl} + (1 - \alpha) \mu_{Gas}$ ist. Dieses Verhältnis soll die viskosen Scherkräfte zu den turbulenten Scherkräften darstellen. Simulationsergebnisse spiegeln die experimentellen Daten insofern wieder, dass die turbulenten (subgrid-scale) Scherspannungen sogar mindestens um eine bis zwei Größenordnungen dominanter sind als die Scherspannungen $\partial_i u_j$.

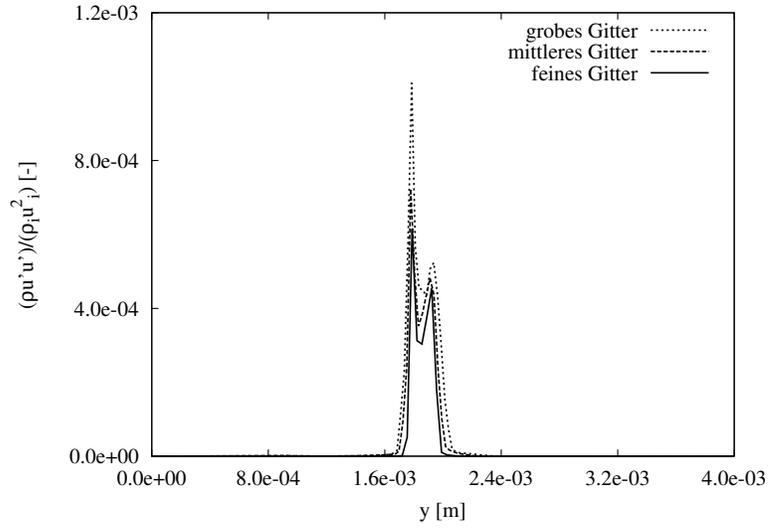


Abbildung 6.12: $\rho u'u' / \rho_i u_i^2$ nach $T = 0.175$ auf der Auswertegerade

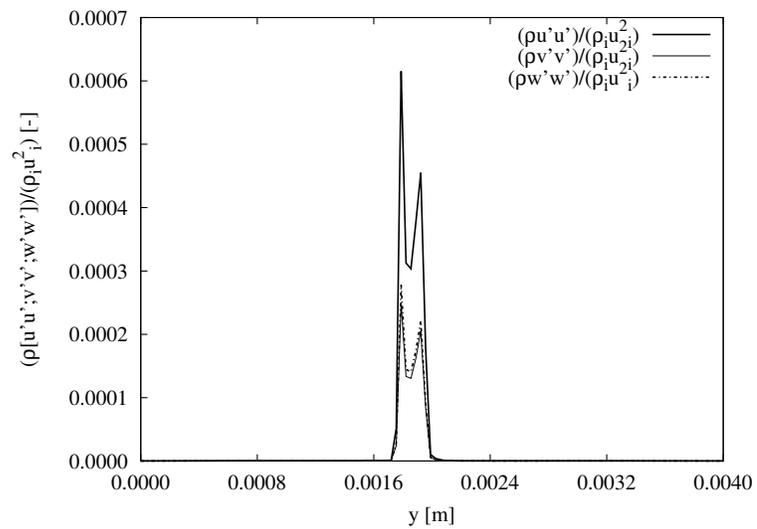


Abbildung 6.13: $\rho u'u' / \rho_i u_i^2$, $\rho v'v' / \rho_i u_i^2$ und $\rho w'w' / \rho_i u_i^2$ nach $T = 0.175$ auf der Auswertegerade

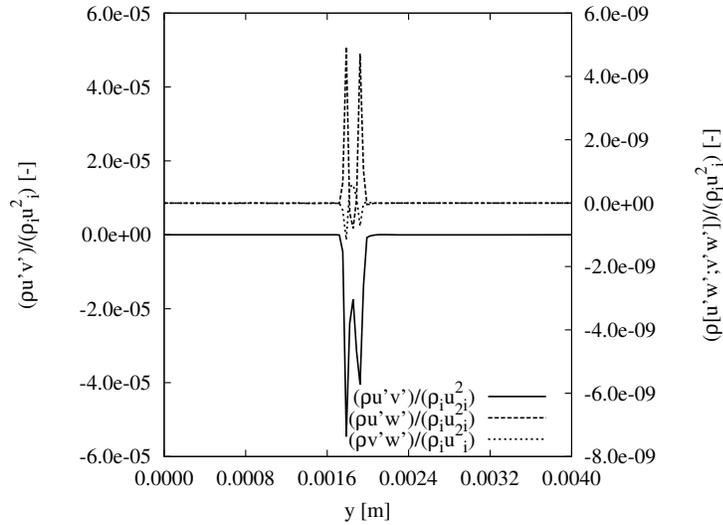


Abbildung 6.14: $\rho u'v'/\rho_i u_i^2$, $\rho u'w'/\rho_i u_i^2$ und $\rho v'w'/\rho_i u_i^2$ nach $T = 0.175$ auf der Auswertegerade

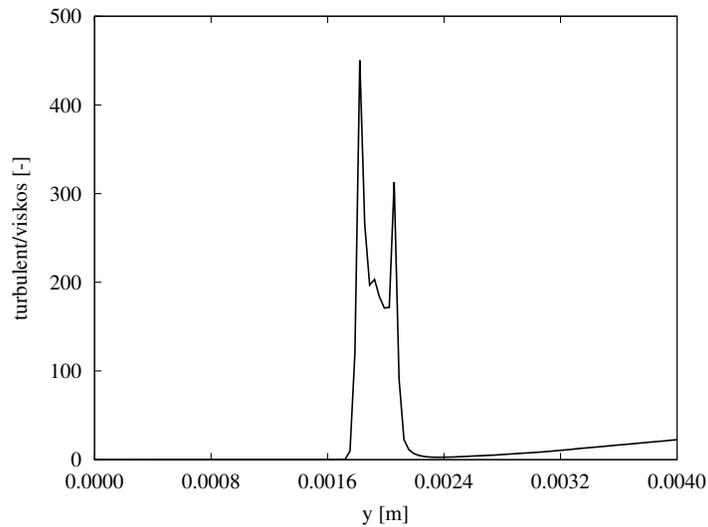


Abbildung 6.15: Vergleich von Turbulenz und Scherspannung nach $T = 0.175$ auf der Auswertegerade

6.4.3 Einfluss von unterschiedlichen Turbulenzmodellen

Beim Vergleich der Ergebnisse unterschiedlicher Turbulenzmodelle (*Smagorinsky*, *oneEqEddy*, *dynOneEqEddy* und *DearDorffDiffStress*, siehe Abbildungen 6.16-6.19 (a)), ist zu erkennen, dass die Geschwindigkeitsverteilung bei allen Turbulenzmodellen sehr ähnlich ist. Die niedrig turbulente (möglicherweise sogar laminare) Stagnationszone findet sich vor dem Tropfen. Ein Vergleich der Tropfen zeigt, dass eine abrupte Veränderung der Form hinter der Stagnationszone existiert.

Für die Modelle '*Smagorinsky*', '*oneEqEddy*' und '*DearDorffDiffStress*' ergibt sich eine gewellte Form, wobei das Modell '*dynOneEqEddy*' die Form in der turbulenten Zone als glatt vorhersagt. Da der Unterschied zwischen den Simulationen bloß die Turbulenzmodellierung ist, liegt der Schluss nahe, dass in diesem Fall die Turbulenz unterschätzt wird. Dies spiegelt sich wider in den Abbildungen 6.16-6.19 (b) und (c) der turbulenten Viskositäten. Anhand der Abbildungen zeigt sich, dass für die Modelle '*Smagorinsky*', '*oneEqEddy*' und '*DearDorffDiffStress*' die Turbulenz in der Stagnationszone niedrig ist und erst in der turbulenten Zone ansteigt, wohingegen im Fall des '*dynOneEqEddy*' Modells die Viskositäten um eine Größenordnung niedriger sind.

Die dynamische Berechnung der Konstanten in Gleichung 4.5.9 verursacht einen Fehler in der Berechnung der turbulenten Viskosität, wodurch die turbulente Viskosität für den untersuchten Fall (Geometrie, thermophysikalischen Daten, Anfangsbedingungen) unterschätzt wird. Dadurch ergibt sich eine unphysikalische Form des Tropfens. Es ist somit klar, dass eines der drei Modelle '*Smagorinsky*', '*oneEqEddy*', '*DearDorffDiffStress*' zu verwenden ist, um physikalisch richtige Simulationsergebnisse zu erhalten.

Die Ergebnisse des Modells '*dynOneEqEddy*' zeigen, dass die Unterschätzung der turbulenten Größen die Form des Tropfens stark beeinflusst, was darauf zurückzuführen ist, dass die turbulenten Scherspannungen die Scherspannungen $\partial_i u_j$ dominieren. Die Komponenten $\partial_i u_j$ reichen in diesen Simulationen nicht aus, um die Wellenform zu erzeugen. Das zeigt, dass eine explizite dreidimensionale Turbulenzmodellierung essentiell ist, um einen weiteren Schritt in die Richtung des vollständigen Verständnisses des Problems machen zu können.

Vergleicht man die Ergebnisse mit den Experimenten, ist es erkennbar, dass die wellige Struktur der Oberfläche in den Simulationen gröber ist als im Experiment (siehe Abbildung 6.20). Dies beruht auf der Auflösung des Rechengitters, die durch die heutige Hardwareleistung begrenzt ist.

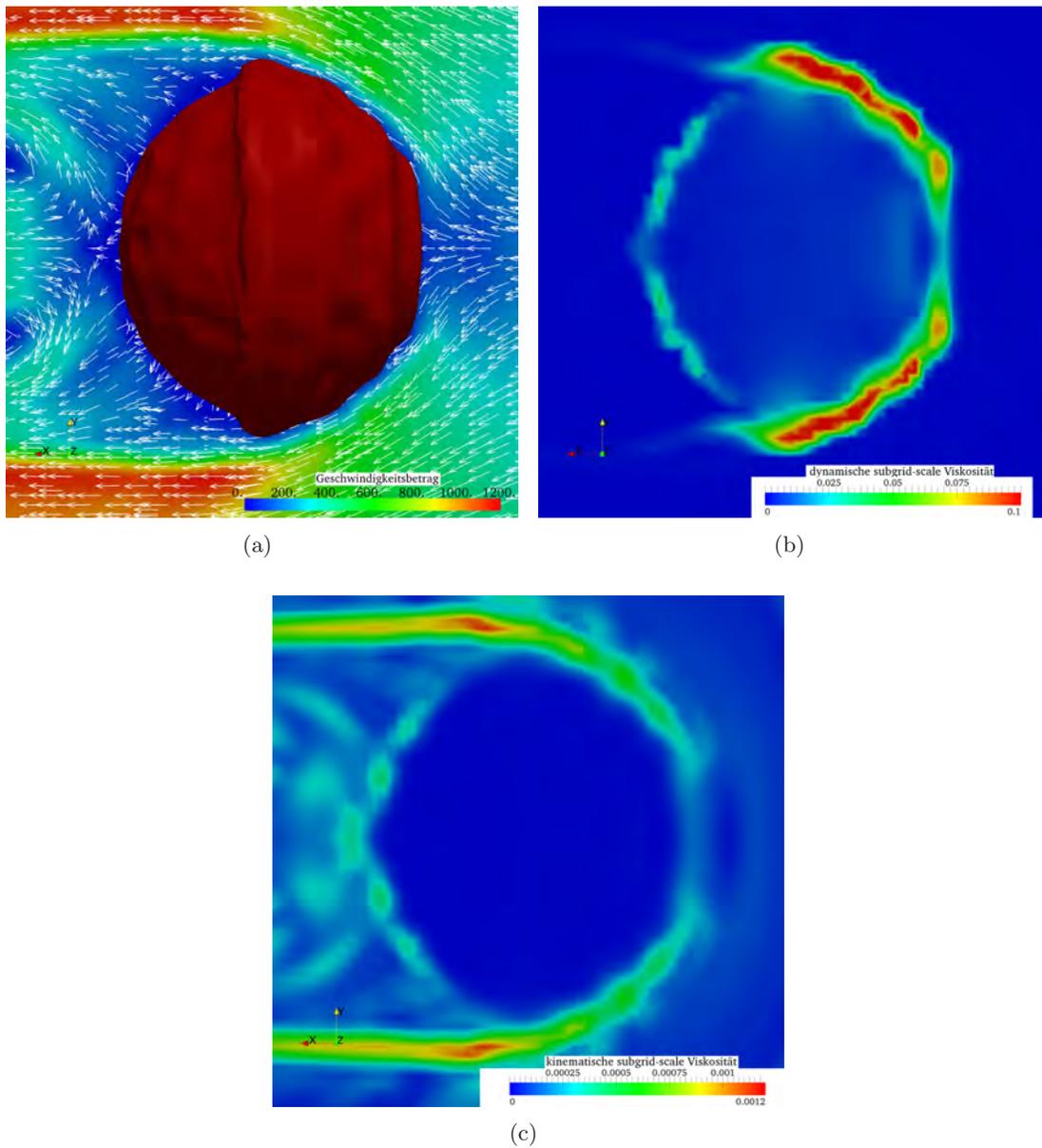


Abbildung 6.16: Geschwindigkeit, Form des Tropfens ($\alpha = 0.9$) (a), dynamische (b) und kinematische (c) turbulente Viskosität mit dem Smagorinsky-Modell

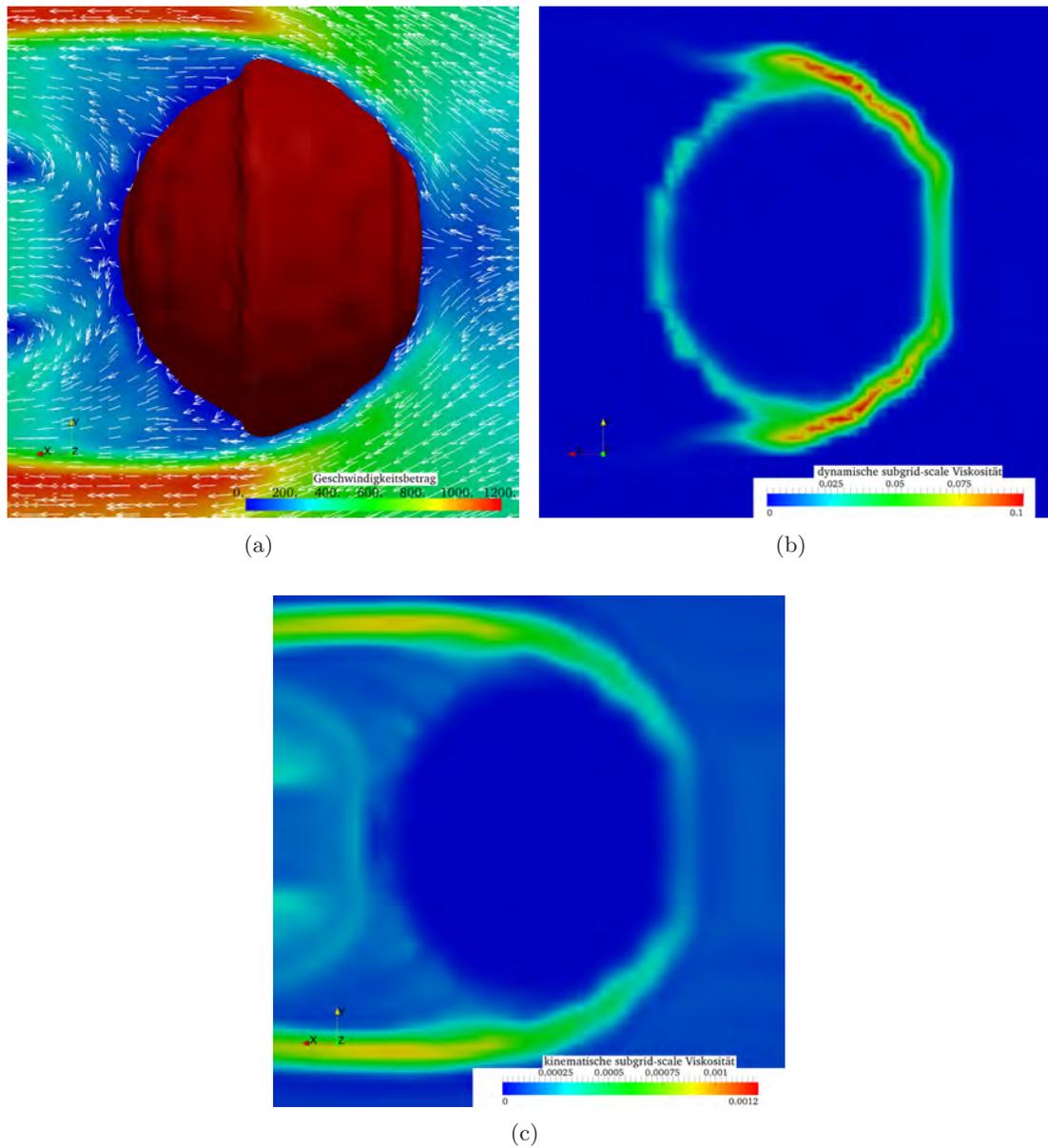


Abbildung 6.17: Geschwindigkeit, Form des Tropfens ($\alpha = 0.9$) (a), dynamische (b) und kinematische (c) turbulente Viskosität mit dem *oneEddy*-Modell

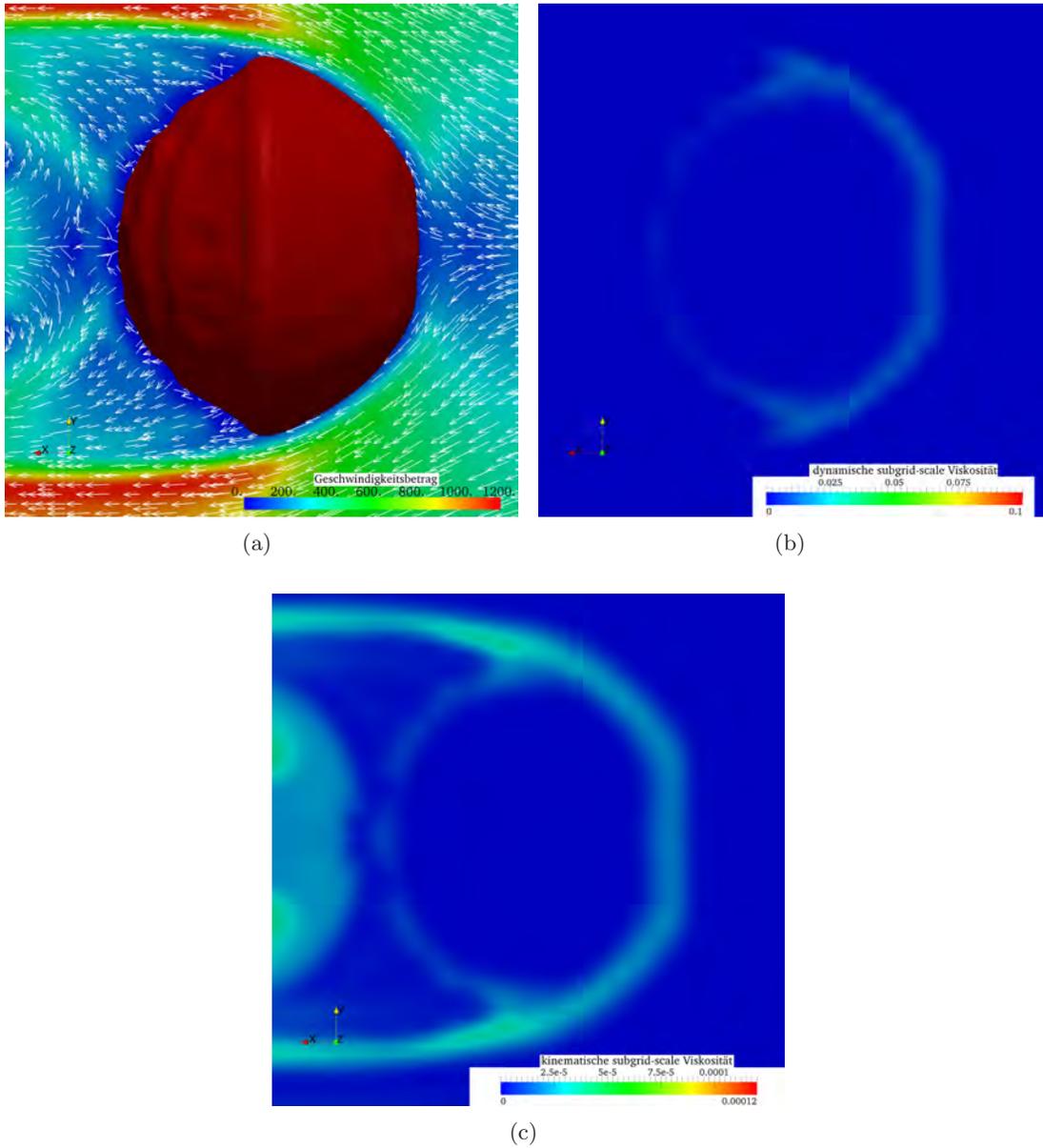


Abbildung 6.18: Geschwindigkeit, Form des Tropfens ($\alpha = 0.9$) (a), dynamische (b) und kinematische (c) turbulente Viskosität mit dem *dynOneEqEddy*-Modell (Skala der dynamischen turbulenten Viskosität ist um eine Größenordnung kleiner als in den anderen Abbildungen)

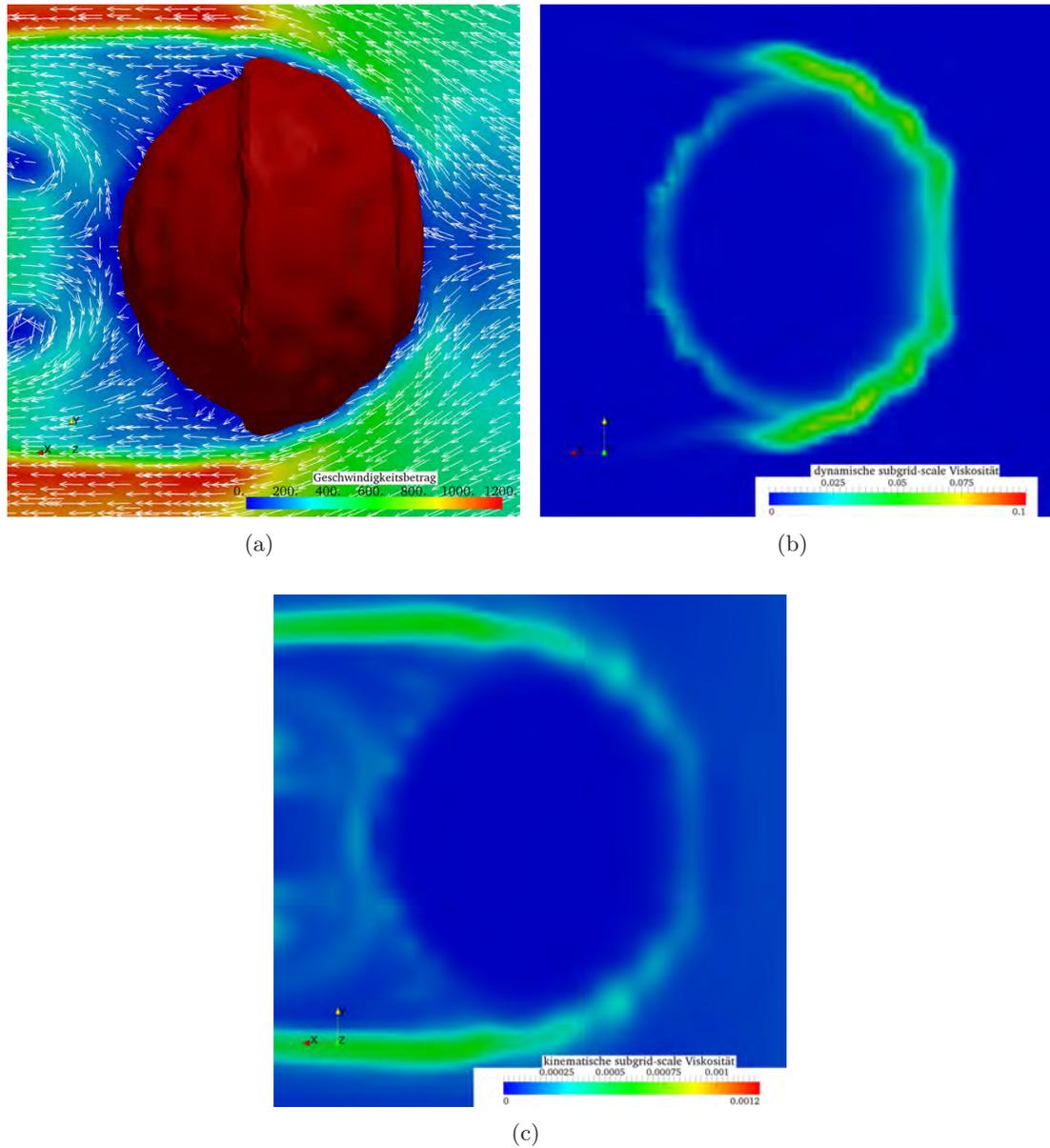


Abbildung 6.19: Geschwindigkeit, Form des Tropfens ($\alpha = 0.9$) (a), dynamische (b) und kinematische (c) turbulente Viskosität mit dem DearDorffDiffStress-Modell

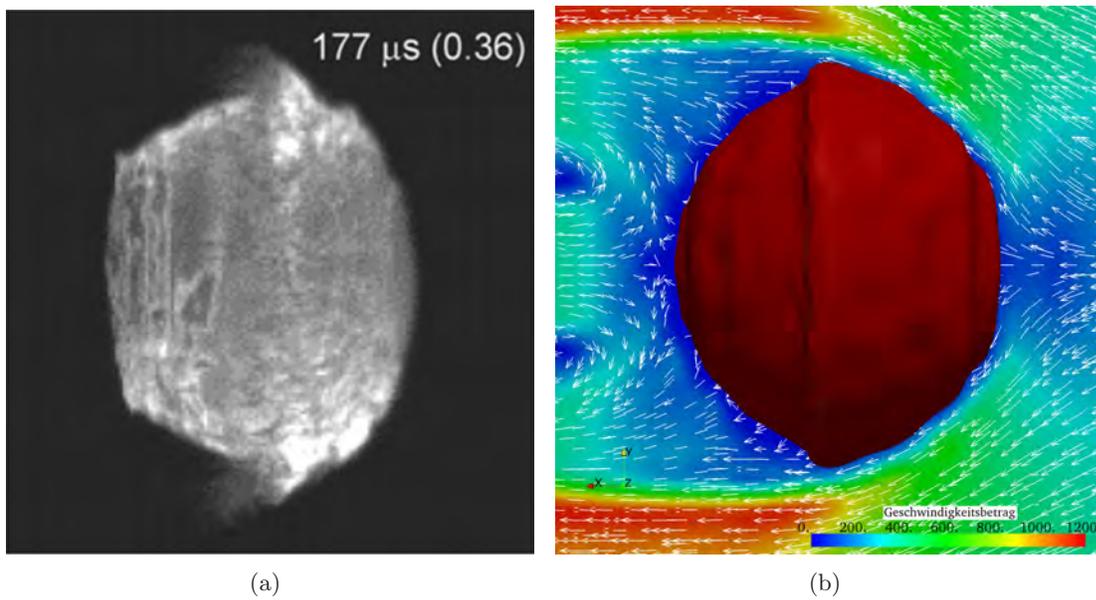


Abbildung 6.20: Vergleich Experiment aus (Theofanous und Li, 2008) mit Simulation

6.5 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde der Zerfall von einem Flüssigkeitstropfen in einer Überschallströmung untersucht. Die bisherigen Untersuchungen haben die Fragestellung auf zwei Dimensionen beschränkt und eine explizite Turbulenzmodellierung vernachlässigt. Um die großen Skalen beschreiben zu können, kann diese Annahme unter Umständen getroffen werden. Um detaillierte Phänomene zu analysieren, wird jedoch eine volle dreidimensionale Simulation mit Turbulenzmodellierung benötigt.

Dazu wurde zuerst die Strömung, um eine starre Kugel untersucht um zu zeigen, dass turbulente Phänomene an einer festen Wand auftreten und auch behandelt werden müssen. Der später untersuchte Flüssigkeitstropfen stellt zwar keine feste Wand dar, jedoch gibt es ein Geschwindigkeitsgefälle der Gasströmung in Richtung der Flüssigkeitsoberfläche. In dieser Zone müssen die Vorgänge richtig abgebildet werden.

Ein Vergleich mit einer anderen Simulationuntersuchung sowie einem Experiment von turbulenten Vorgängen entlang einer festen Wand wurde am Beispiel eines Expansions-/Kompressionsecks durchgeführt. Dabei wurden die richtigen Eingangsgrößen gefunden. Mit der richtigen Zellauflösung wurde der richtige Verlauf der Geschwindigkeit sowie der Komponenten des turbulenten Spannungstensors entlang der Wand gefunden.

Mit diesen Erkenntnissen wurde die Simulation des Tropfenzerfalls eines Flüssigkeitstropfens in einer Überschallströmung aufgesetzt und durchgeführt. Eine laminare Stagnationszone sowie eine turbulente Zone vor dem Tropfen wurden gefunden. Der Anstieg der turbulenten Spannungen wurde als eine der Ursachen für die charakteristische Form des Tropfens während des Zerfalls identifiziert. Für die richtige Beschreibung sind vier unterschiedliche Turbulenzmodelle verwendet worden. Ein Vergleich mit dem Experiment zeigte, dass man auch hier Fehler machen kann. Hierbei wurde wiederum sichtbar, dass die turbulenten Phänomene einen großen Einfluss auf die Form des Flüssigkeitstropfens haben. Das Modell *'dynOneEqEddy'* kann nicht für die Simulation verwendet werden, wohingegen die anderen drei Modelle für die Untersuchung des Tropfenzerfalls in einer Überschallströmung geeignet sind.

Damit wurde gezeigt, dass die explizite Turbulenzmodellierung in der Simulation dieser hoch kompressiblen Strömung ein weiterer Schritt in Richtung des vollständigen Verständnisses des Phänomens darstellt.

Anwendung 2: Tropfenzerfall bei Unterschallbedingungen

7.1 Motivation

In Kapitel 3.1 wurden die Regime für den Zerfall von Flüssigkeitstropfen vorgestellt. Dabei wurde betont, dass der Zerfallsprozess bei gleichmäßiger Umströmung stattfindet. Um herauszufinden, ob die Kurven in Abbildung 3.8, die den Übergang zwischen Tropfenzerfallsregime angeben, auch für Zerstäubungsprozesse gelten, in welchen die Flüssigkeit teilweise nur eine einseitige und asymmetrische Umströmung erfährt (siehe Abbildung 7.1), wird in diesem Kapitel der Zerfall von Flüssigkeitstropfen in einem asymmetrisch heranströmenden Luftstrahl untersucht. Dies soll – im Gegensatz zur gleichmäßigen Umströmung – das andere Extremum der einseitigen Umströmung abbilden. Findet man, dass die Ergebnisse in (Theofanous et al., 2012) auch hierfür geeignet sind, kann man die Kurven auch für die Interpretation von Zerstäubungsprozessen verwenden. Gibt es Abweichungen, so kann man die Kurven neu aufstellen und behaupten, dass im Zerstäubungsprozess die Phänomene zwischen diesen beiden Extrema stattfinden.

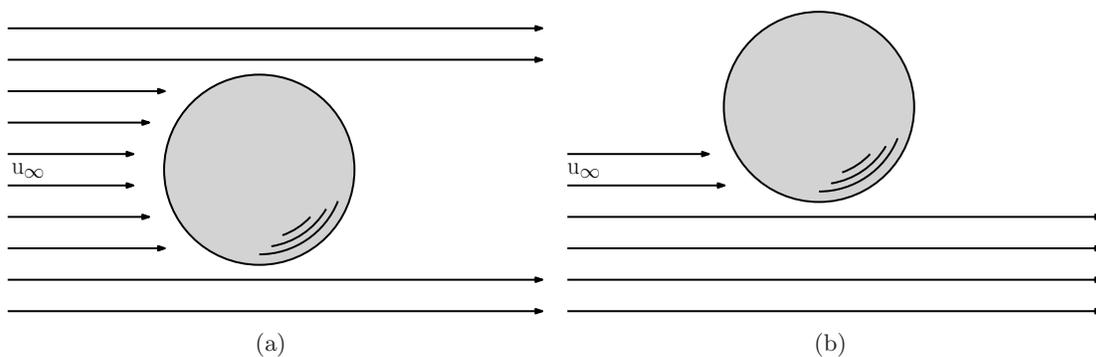


Abbildung 7.1: Schematische Skizze der gleichmäßigen (a) und der asymmetrischen (b) Umströmung eines Tropfens

Dazu wird in erster Linie eine Reihe von Experimenten mit Flüssigkeiten unterschiedlicher Viskosität und Oberflächenspannung durchgeführt. Dabei wird für jede Flüssigkeit der selbe Bereich von Anströmgeschwindigkeiten vermessen. Damit erhält man unterschiedliche Weber- und Ohnesorge-Zahlen, die einen Großteil des Bereiches in Abbildung 3.8 abdecken.

Ebenfalls werden ausgesuchte Experimente mittels CFD-Simulationen untersucht, um detailliert lokale Phänomene, die man experimentell nicht auflösen kann, analysieren zu können. Damit soll ein noch tieferes Verständnis des Vorganges erreicht werden. Damit kann man auch die Interpretation der experimentellen Ergebnisse bestätigen.

Mit diesen Erfahrungen des *Eintropfensystems* kann man dann experimentelle (Zauner, 2010) und simulative (Castaño Martínez, 2012) Ergebnisse des Zerstäubungsprozesses (*'n-Tropfensystem'*) im Detail analysieren und mögliche Erklärungen für bisher unverstandene Phänomene sowie Optimierungsvorschläge angeben.

Kurven wie in Abbildung 3.8 sind sehr hilfreich für die Beurteilung des Zerstäubungsprozesses, da man eine Aussage treffen kann, ob Tropfen noch zerfallen können oder nicht. Dazu muss gewährleistet werden, dass die Kurven nicht nur für den Zerfall bei gleichmäßiger, sondern auch bei einer einseitiger Umströmung stimmen. Sollte es Abweichungen geben, müssen diese erarbeitet werden.

7.1.1 Messaufbau

Zur Realisierung des Konzeptes wurden Flüssigkeitstropfen in einen Luftstrahl getropft. Als Gasstrom wird herkömmliche Druckluft bei konstanten Bedingungen verwendet. Dazu wird der Druck am Auslass der Leitung auf ≈ 0.5 MPa gestellt. Mit einem Rotameter wird der Durchfluss der Luft gemessen und manuell geregelt. Der Gasstrom wird weiter zu einer Düse mit einem Eintrittsdurchmesser von 4.3 mm und einem Austrittsdurchmesser von 3.4 mm geleitet (siehe Abbildungen 7.2 und 7.3). Das Rotameter (Firma Key Instruments) kann einen Gasvolumenstrom von bis zu 100 NL/min messen. Für die Experimente wird ein Bereich zwischen 3 NL/min und 90 NL/min vermessen.

Die Flüssigkeit wird mit einer Spritzenpumpe (Firma Harvard Apparatus) gefördert, um den Flüssigkeitsvolumenstrom exakt regeln zu können. Dabei wird die Pumpe so eingestellt, dass sich einzelne Tropfen an der Spitze der Düse ausbilden können, welche durch die Gravitationskraft in Richtung des Luftstrahls fallen (siehe Abbildung 7.3).

Die Düse und die Flüssigkeitstropfen werden von unten mit einem Scheinwerfer beleuchtet. Für die Aufnahmen wird eine MotionPro High Speed Digital Imaging Kamera der Firma REDFLAME verwendet, wobei die Videoaufnahmen mit 2000 fps (frames per second) aufgenommen wurden. Dadurch ergibt sich eine zeitliche Auflösung von 0.5 ms. Die Auflösung der Bilder ist maximal 1280x256 px.

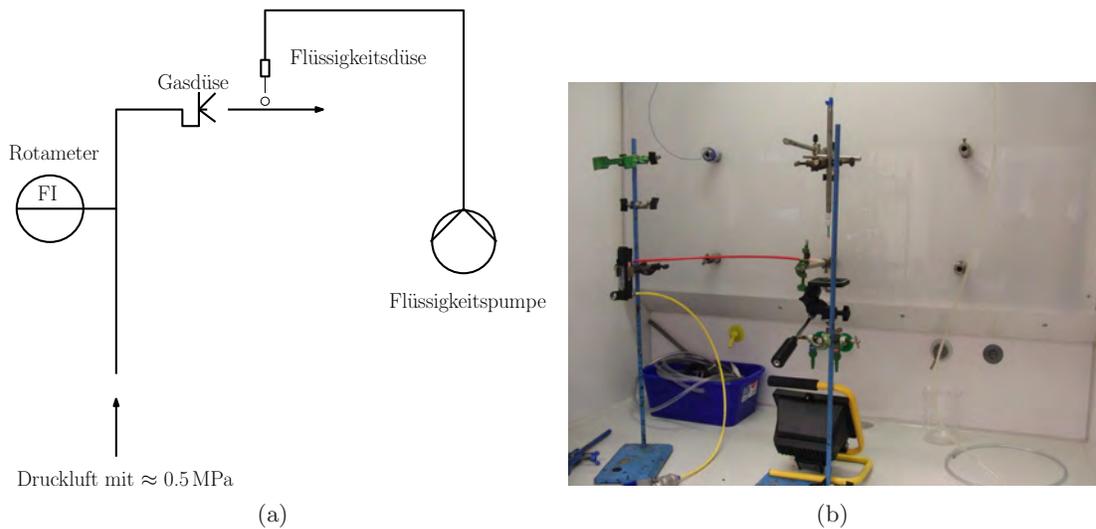


Abbildung 7.2: Schematische Skizze (a) und Foto (b) des Versuchsaufbaus

7.2 Untersuchung der Gasströmung

7.2.1 Vermessung des Strömungsfeldes

Da aus den vom Rotameter abgelesenen Gasvolumenstromwerten lediglich auf mittlere Austrittsgeschwindigkeiten geschlossen werden kann und sich die Luftdüse zusätzlich verjüngt, muss das Geschwindigkeitsfeld aufgenommen werden. Dies erfolgte mit der punkweisen Vermessung des Strömungsfeldes des turbulenten Freistrahls mit Hilfe eines Anemometers, das eine obere Messgrenze von 35 m/s besitzt. Dadurch erhält man punkweise Geschwindigkeitswerte hinter dem Auslass der Düse. Dies ist wichtig, da damit die lokale Anströmgeschwindigkeit der Tropfen angegeben werden kann. Dazu wurde in der Ebene der Mitte der Düse ein Raster erstellt. Fünf Messpunkte wurden auf drei Geraden (Symmetrieachse der Düse und ± 3 mm neben Symmetrieachse) definiert. Der erste Messpunkt lag 16.5 mm, der zweite Messpunkt 20.5 mm, der dritte Messpunkt 24.5 mm, der vierte Messpunkt 28.5 mm und der fünfte Messpunkt 32.5 mm hinter dem Auslass der Düse (siehe Abbildungen 7.4-7.6). Auf der mittleren Gerade wurden an den fünf Messpunkten jeweils sechs Messungen durchgeführt (pro Volumenstrom) und auf den anderen beiden Geraden jeweils drei. Aus diesen Messungen wurde für jeden Messpunkt ein Mittelwert und eine Standardabweichung errechnet.

Drei Volumenströme wurden mit 9 NL/min, 12.5 NL/min und 15 NL/min analysiert. Diese ergeben aus den Volumenströmen errechnete mittleren Austrittsgeschwindigkeitswerte von jeweils 17.97 m/s, 24.96 m/s sowie 29.96 m/s. Die gemessenen Werte mit Standardabweichung sind in den Abbildungen 7.4-7.6 dargestellt. Die vermessenen Werte liegen in der horizontalen Symmetrieebene der Düse (d.h. Blickrichtung der Spritze).

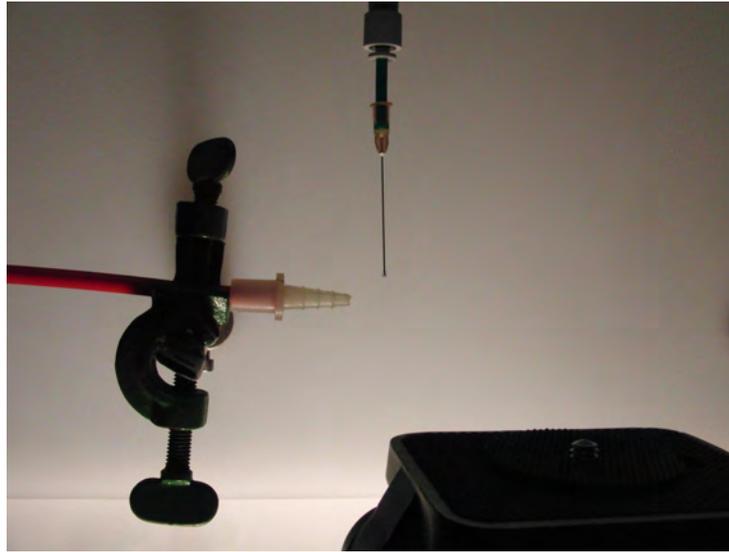


Abbildung 7.3: Detailaufnahme der Luft- (links) sowie Flüssigkeitsdüse (vertikale Spritzennadel)

Diese Messpunkte wurden ausgewählt, da ein turbulenter Freistrahler einen Kernbereich besitzt, der ca. die 3 bis 8-fache Länge des Auslassdurchmessers hat (Gauntner et al., 1970; Boersma und Lele, 1999). Hinter dieser Zone fällt die Geschwindigkeit entlang der Symmetrieachse des Strahls ab und der Strahl weitet auf.

Für höhere Volumenströme werden die Geschwindigkeitswerte aus diesen Werten interpoliert. Dabei werden mögliche Kompressibilitätseffekte bei höheren Geschwindigkeiten (z.B. 90 NL/min entspricht einer mittleren Austrittsgeschwindigkeit von 165.2 m/s) vernachlässigt. Dadurch wird zwar ein Fehler eingetragen. Da die sich daraus ergebenden Auswirkungen auf die Weber-Zahl gering sind, sind die Resultate mit (Theofanous, 2010; Theofanous et al., 2012) dennoch vergleichbar.

Bei den Messungen nach Abbildungen 7.4-7.6 ist zu erkennen, dass in der Symmetrieachse der Düse die Geschwindigkeit höher ist als die berechnete mittlere Geschwindigkeit, was durch den Abfall der Geschwindigkeit am Düsenrand bedingt ist. Auf dieser Gerade fällt durchwegs die Geschwindigkeit in allen Fällen, wobei die Geschwindigkeit nahe dem Auslass langsamer sinkt als weiter entfernt. Auf den beiden seitlichen Geraden steigt die Geschwindigkeit stetig an, was auf die Aufweitung des turbulenten Strahls hinweist. Werte auf dieser Geraden liegen in der Aufweitzzone des Strahls und kleine Unregelmäßigkeiten in der Messposition ergeben große Abweichungen in der lokalen Geschwindigkeit. Im Fall 9 NL/min fällt die Geschwindigkeit an einer Position von 5.53 m/s auf 5.33 m/s, was auf so eine Unsicherheit zurückzuführen ist.

Hierbei soll erwähnt werden, dass die Strömungsgeschwindigkeit aufgrund der turbulenten Eigenschaft an einem Ort um einen mittleren Wert schwankt. Einzelne Mess-

werte stellen einen mittleren Wert innerhalb von ≈ 10 s Messzeit dar, um welchen die Geschwindigkeit zeitlich schwankt. Die mehrfache Vermessung des Strömungsfeldes soll den Fehler, den man dadurch macht, verringern.

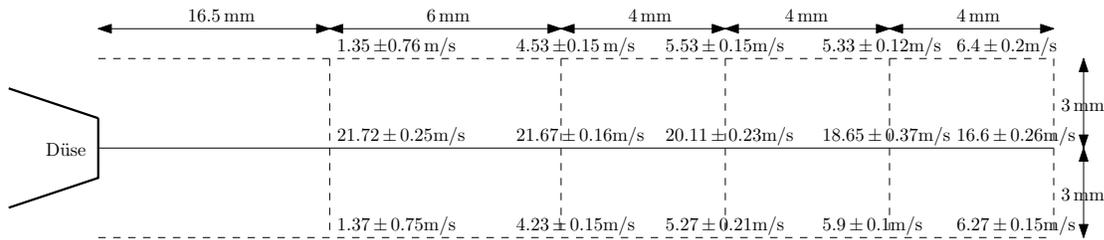


Abbildung 7.4: Messpunkte und -werte im Strömungsfeld bei 9 NL/min

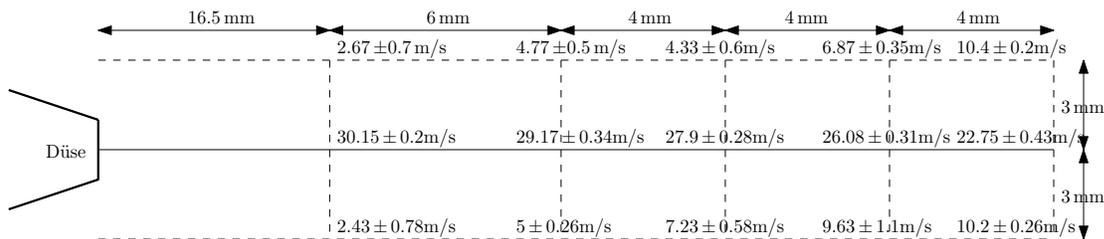


Abbildung 7.5: Messpunkte und -werte im Strömungsfeld bei 12.5 NL/min

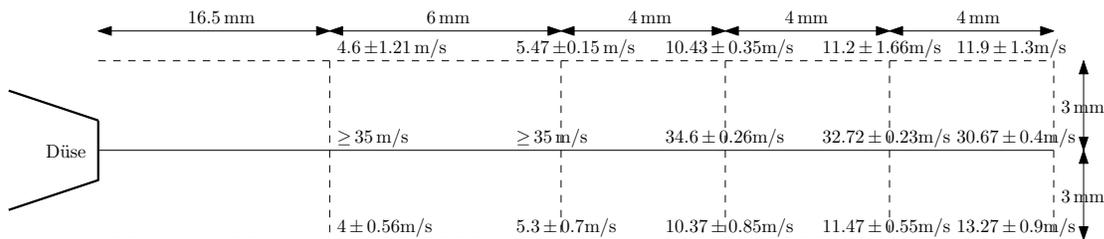


Abbildung 7.6: Messpunkte und -werte im Strömungsfeld bei 15 NL/min

7.2.2 Simulation des Strömungsfeldes

Eine CFD Simulation des Strömungsfeldes für den Fall mit 9 NL/min wurde durchgeführt. Dazu wurde die Strömung innerhalb der Düse aufgelöst. Es wurde die gesamte Verjüngungslänge von 4.3 mm auf 3.4 mm in die Simulation miteinbezogen. Ebenfalls wurde das Volumen bis 36 mm hinter dem Düsenauslass aufgelöst. Dies garantiert, dass alle Messpunkte aus Kapitel 7.2.1 innerhalb des Volumens liegen. Insgesamt wurde das Volumen mit ca. $7.7 \cdot 10^6$ Zellen vernetzt. Diese Auflösung garantiert eine Zellkantenlänge beim Düsenauslass sowie in der Wechselwirkungszone Flüssigkeitstropfen-Luftstrahl von

62.5 μm . In den beiden anderen Raumrichtungen wurden jeweils symmetrisch 30 mm des Volumens um die Düse abgebildet.

Beim Düseneinlass wurde die Geschwindigkeit auf 11.1 m/s gestellt, da sich damit beim Düsenauslass eine mittlere Geschwindigkeit von 17.75 m/s einstellen sollte. Für die Turbulenzmodellierung wurde das einfache LES-Modell 'Smagorinsky' (siehe dazu Kapitel 4.5.3) verwendet.

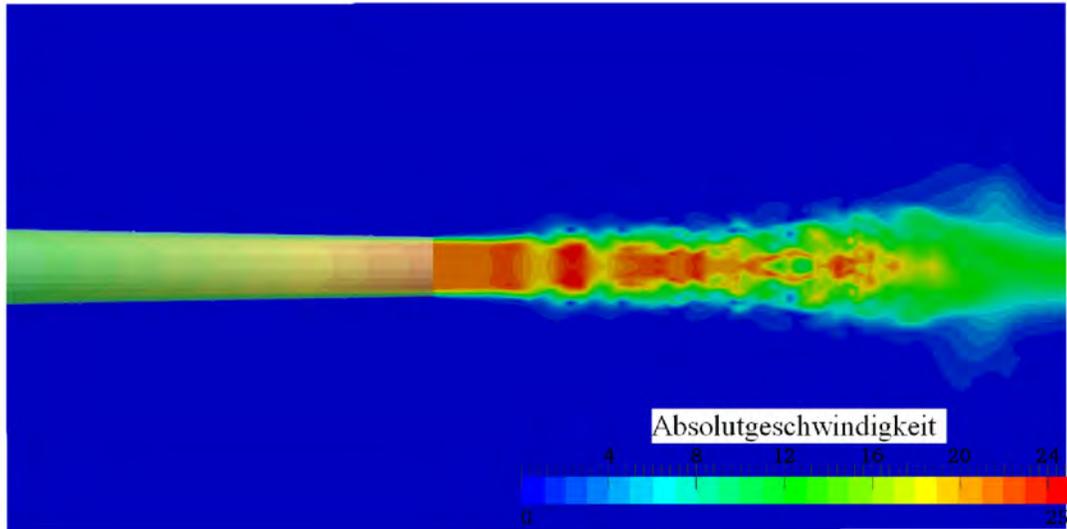


Abbildung 7.7: Instantanes Geschwindigkeitsfeld in der Symmetrieebene der Düse nach $t = 15 \text{ ms}$ bei einem Gasvolumenstrom von 9 NL/min

In den Abbildungen 7.7-7.9 ist die instantane Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene der Düse zu den drei Zeitpunkten $t = 15, 28$ und 40 ms dargestellt, wobei die Blickrichtung wiederum von Richtung der Spritze in Richtung der Düse zeigt. Mit einer Transparenz von 0.7 ist auch die innere Wand der Düse eingeblendet. Dabei ist zu erkennen, dass aufgrund der Verjüngung der Düse die Geschwindigkeit in der Düsenachse auf ca. 21-22 m/s ansteigt. Im Mittel ist die Geschwindigkeit $\approx 17.75 \text{ m/s}$. In der Anfangsphase verlassen lokale Geschwindigkeitsmaxima die Düse, die mit der Zeit abklingen. Nach ca. 40 ms stellt sich ein quasi-konstanter Fluss durch die Düse ein. Dabei schwankt die Geschwindigkeit um eine mittlere Verteilung. Der Bereich vor der Aufweitung des Freistrahles erhält sich bis ca. fünf Durchmesser hinter dem Düsenauslass. Dies steht in sehr guter Übereinstimmung mit den LES Simulationen in (Boersma und Lele, 1999). Dahinter beginnt sich der Freistrahler aufzuweiten und die lokalen Geschwindigkeitswerte schwanken zeitlich um einen mittleren Wert.

Um die Ergebnisse mit den experimentellen Ergebnissen vergleichen zu können, wurden die Geschwindigkeitswerte zwischen $t = 0.015 \text{ s}$ und $t = 0.12 \text{ s}$ in 1 ms Intervallen an den oben definierten Messpunkten herausgelesen. Aus diesen Werten wurde ein zeitlicher

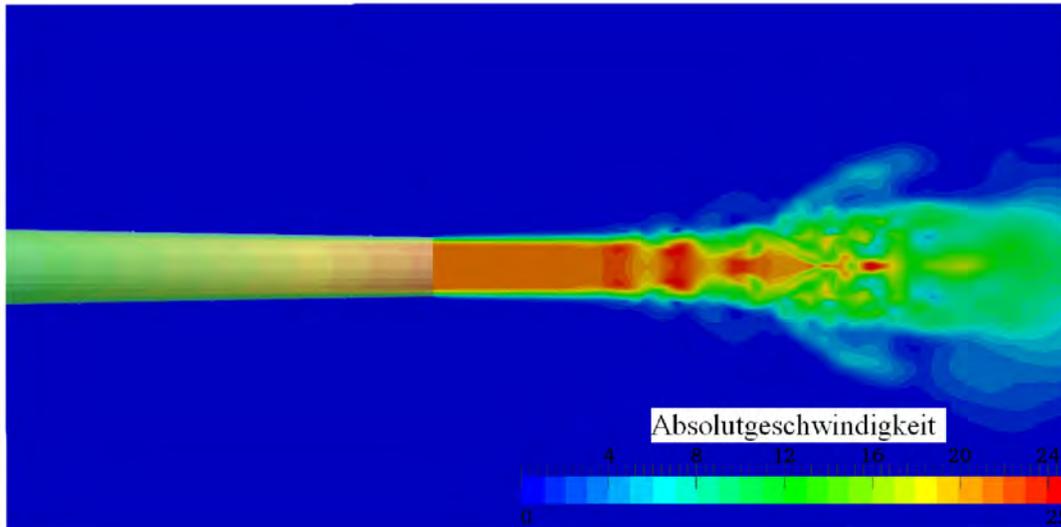


Abbildung 7.8: Instantanes Geschwindigkeitsfeld in der Symmetrieebene der Düse nach $t = 28 \text{ ms}$ bei einem Gasvolumenstrom von 9 NL/min

Mittelwert errechnet und auf den maximalen Wert in der Messung (21.72 m/s) skaliert. In Tabelle 7.1 werden die skalierten und zeitgemittelten Werten miteinander gegenübergestellt.

Tabelle 7.1: Vergleich der skalierten Geschwindigkeitswerte zwischen Simulation und Experiment

| Auswertegerade | 16.5 mm | 20.5 mm | 24.5 mm | 28.5 mm | 32.5 mm |
|------------------|---------|---------|---------|---------|---------|
| -3 mm Sim. | 0.053 | 0.1285 | 0.1895 | 0.2525 | 0.2779 |
| -3 mm Exp. | 0.062 | 0.2086 | 0.2546 | 0.2454 | 0.2947 |
| Symm. Achse Sim. | 1.004 | 0.9934 | 0.9489 | 0.8307 | 0.7181 |
| Symm. Achse Exp. | 1.000 | 0.9977 | 0.9259 | 0.8587 | 0.7643 |
| 3 mm Sim. | 0.0633 | 0.1376 | 0.2208 | 0.2775 | 0.2860 |
| 3 mm Exp. | 0.0631 | 0.1948 | 0.2426 | 0.2716 | 0.2887 |

Dabei herrscht auf der mittleren Gerade zwischen den experimentellen Ergebnisse und den Simulationsergebnisse eine gute Übereinstimmung. Der größte Fehler taucht dabei im letzten Messpunkt auf, wobei die Abweichung 4.6% des maximalen Wertes beträgt.

Auf den beiden seitlichen Geraden ist die Übereinstimmung bis wenige Ausnahmen ebenfalls gut. Dort liegt die Abweichung bei bis zu 7% des maximalen Wertes. Diese Abweichungen ergeben sich aufgrund der Messfehler, die in Kapitel 7.2.1 beschrieben wurden.

Im interessanten Bereich (Mittelachse) ist die Übereinstimmung sehr gut. Dabei

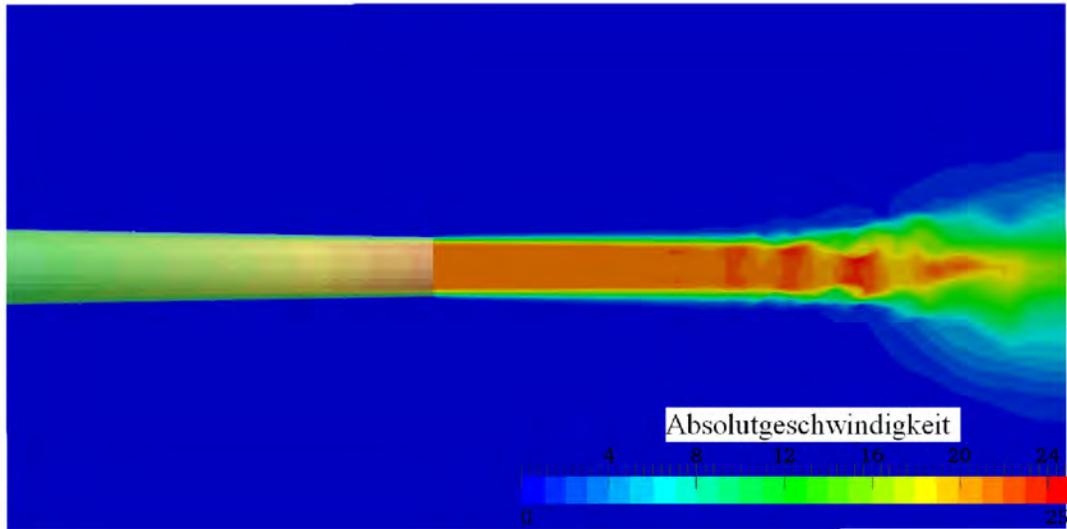


Abbildung 7.9: Instantanes Geschwindigkeitsfeld in der Symmetrieebene der Düse nach $t = 40 \text{ ms}$ bei einem Gasvolumenstrom von 9 NL/min

kann man sagen, dass die Strömung bis 10-16 mm hinter dem Düsenauslass einheitlich ist und dass der Zerfall des Freistrahls hinter diesem Punkt stattfindet. Dies entspricht den Erwartungen nach der Literatur (Gauntner et al., 1970; Boersma und Lele, 1999).

Demnach ist es wichtig, dass bei den Experimenten die Tropfen innerhalb der ersten 16 mm hinter dem Düsenauslass auf der Strahl treffen. Der genaue Ort ist dabei zweitrangig, da in diesem Bereich die Geschwindigkeitsverteilung relativ konstant bleibt. Kleine Abweichungen verursachen keine große Änderungen in der Weber-Zahl und damit auch nicht in der Art des Zerfallprozesses.

7.3 Simulative Untersuchung des Tropfenzerfalls

7.3.1 Einstellungen

In den folgenden Untersuchungen sind vier Flüssigkeiten bei unterschiedlichen Volumenströmen untersucht worden. Für das Verhalten von niederviskosen Fluiden wurde Wasser sowie Ethanol analysiert, während für hochviskose Fluide Paraffinöl, eine Glycerin-Wassermischung im Verhältnis 96 %-4 % und eine Glycerin-Wassermischung im Verhältnis 99 %-1 % verwendet wurde. Die wichtigen physikalischen Eigenschaften der fünf verwendeten Fluide sind in Tabelle 7.3.1 zu finden. Die verwendeten Volumenströme waren 3, 5, 8, 10, 15, 20, 25, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90 NL/min.

In Abbildung 7.10 sind die Kurven der Kritikalitäten aus Abbildung 3.8 dargestellt. Zusätzlich sind die Experimente, die im Rahmen dieser Arbeit mit der asymmetrischen Anströmung der Tropfen durchgeführt wurden, in die Abbildung eingefügt.

Tabelle 7.2: Physikalische Eigenschaften der untersuchte Fluide

| | μ [Pas] | σ [N/m] |
|--------------------|---------------|----------------|
| Wasser | 0.001 | 0.0725 |
| Ethanol | 0.0012 | 0.0226 |
| Paraffinöl | 0.155 | 0.033 |
| Glycerin (96 %-ig) | ≈ 0.7 | 0.062 |
| Glycerin (99 %-ig) | ≈ 1 | 0.062 |

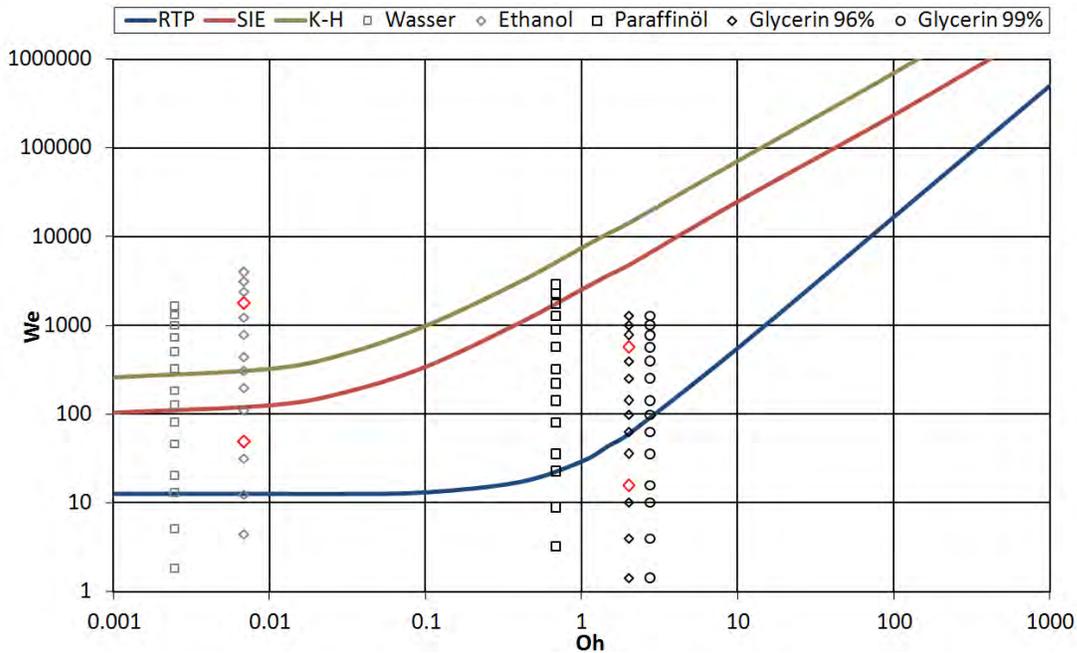


Abbildung 7.10: Oh-We Diagramm der untersuchten Fälle

Für die Simulationen wurden aus diesen 70 Fällen vier ausgewählt und mittels CFD im Detail analysiert. Diese ausgewählten Fälle waren Ethanol bei 10 und 60 NL/min sowie Glycerin (96 %-ig) bei 10 und 60 NL/min. Die experimentellen Ergebnisse sind in Kapitel 7.4 zu finden.

In den Abbildungen 7.11-7.21 (a) werden jeweils die simulativen Ergebnisse dargestellt, während in den Abbildungen 7.11-7.21 (b) jeweils die experimentellen Ergebnisse zu sehen sind. In Kapitel 7.3.2.1 werden die Simulationsergebnisse in Detail beispielhaft ausgeführt. In den nachfolgenden Kapiteln werden die Simulationen mit den Ergebnissen verglichen.

7.3.2 Rayleigh-Taylor Piercing (RTP)

Im Fall des geringeren Volumenflusses (10 NL/min) wird im Diagramm in Abbildung 7.10 für Ethanol RTP und für Glycerin kein Zerfall vorhergesagt (siehe dazu Kapitel

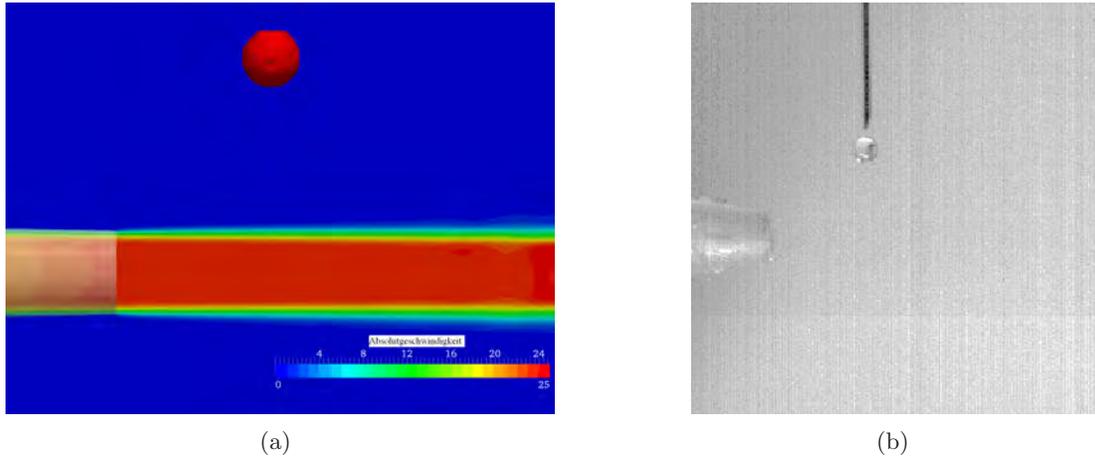


Abbildung 7.11: Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 0$ ms (10 NL/min, Ethanol)

3.1.4).

7.3.2.1 Simulationsergebnisse des asymmetrischen Zerfalls eines niederviskosen Fluids - am Beispiel Ethanol

Hier wird der Zerfall von Ethanol beim niedrigeren Volumenstrom analysiert. Für die Mehrphasensimulationen wurde der Volumsanteil der Flüssigkeit α mit dem Wert 1 in Kugelform mit einem Durchmesser von 2.16 mm in das Strömungsvolumen eingefügt. Der Mittelpunkt des Tropfens wurde 8 mm über der Symmetrieachse der Düse und 6 mm stromabwärts von dem Auslass der Düse gesetzt (siehe Abbildung 7.11 (a)). Für die thermodynamischen Eigenschaften der Gasphase wurden Werte für Luft und für die Flüssigkeit jene von Ethanol herangezogen. Für das initiale Geschwindigkeitsfeld wurde ähnlich wie in Kapitel 7.2.2 0.12 s Realzeit simuliert und das instantane Geschwindigkeitsfeld nach dieser Zeit als Anfangswert verwendet.

Durch die Gravitationskraft fällt der Flüssigkeitstropfen auf den Freistrahл. Abbildung 7.12 (a) zeigt die Form des Tropfens beim Erreichen des Freistrahls. Dabei wird der Tropfen auf der Unterseite abgeflacht und nimmt die Form einer Pilzkappe an. Anhand der Abbildung zeigt sich, dass der Freistrahл gestreut wird. Eine Stauzone entsteht unterhalb der abgeflachten Flüssigkeit und eine sekundäre entgegengesetzte Rückströmung entsteht an der Unterseite des Tropfens.

In Abbildung 7.13 (a) ist ein späterer Zeitpunkt des Zerfalls dargestellt, wo die Flüssigkeit stark zusammengedrückt und in der Mitte durchbohrt wird. Es ist zu erkennen, dass der Zerfall in der Simulation bei dieser Weber- ($We = 49.3$) und Ohnesorge-

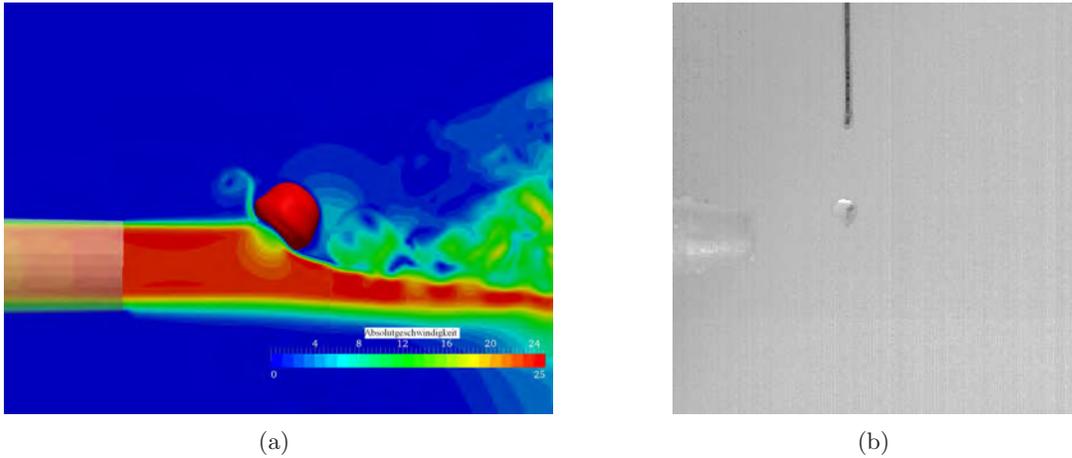


Abbildung 7.12: Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 29 \text{ ms}$ (10 NL/min, Ethanol)

Zahl ($Oh = 0.007$) durch Abflachung und Durchbohrung stattfindet. Das Diagramm in Abbildung 3.8 prognostiziert RTP. Der Freistrah selbst wird durch die Flüssigkeit stark zerstreut. Unterhalb der vollständig flachen Flüssigkeit ist die stärker ausgebildete Sekundärströmung zu sehen. Diese verlässt die Unterseite auf der stromaufwärtsliegenden Seite.

In Abbildung 7.14 sind die zellmittelpunkt-basierten Werte des Volumenanteils α auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens zum letzten Zeitpunkt dargestellt. Dabei ist deutlich die Ausbildung eines Lochs in der Mitte der Flüssigkeit zu erkennen. Der Anstieg des Volumenanteils von 0 (Luft) auf 1 (Ethanol) auf der Grenzfläche Gas-Flüssigkeit ist während der gesamten Simulation auf 1-2 Zellen beschränkt. Damit kann eine scharfe Grenzfläche für die Oberfläche der Flüssigkeit garantiert werden. Von diesem Zeitpunkt an wird die Flüssigkeit in der Simulation stark zusammengedrückt, wodurch die Dicke der flüssigen 'Scheibe' an manchen Stellen nur noch von 5-6 Zellen abgedeckt wird. Auf dieser Weise können von diesem Zeitpunkt an Fehler in der Berechnung der Krümmung an der Peripherie der 'Scheibe' und damit des Wertes der Oberflächenspannung auftreten.

Nichtsdestotrotz sagt die Simulation deutlich eine bestimmte Art des Zerfalls voraus, was gut mit den Ergebnissen in der Literatur (Theofanous (2010); Theofanous et al. (2012)) und ebenso den gemessenen Werten übereinstimmt.

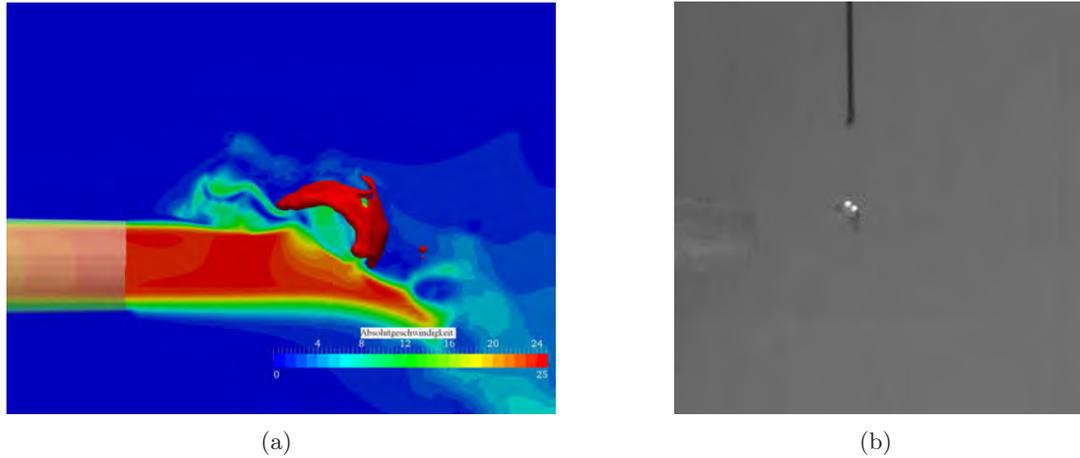


Abbildung 7.13: Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 30 \text{ ms}$ (10 NL/min, Ethanol)

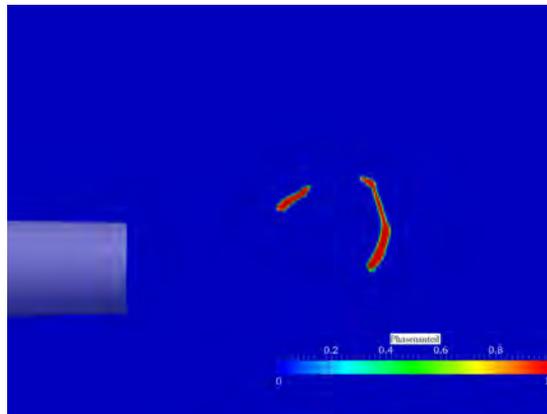


Abbildung 7.14: Zellmittelpunktbasierte Werte des Phasenteils α bei $t = 30 \text{ ms}$

7.3.2.2 Vergleich der Simulation mit den experimentellen Ergebnissen für ein niederviskoses Fluid

In den Abbildungen 7.11-7.13 (b) sind die Ergebnisse der Simulation (wie in Kapitel 7.3.2.1 diskutiert) und des Experiments zum gleichen Zeitpunkt dargestellt. Man kann die ursprüngliche Kugelform des Tropfens (siehe Abbildung 7.11 (b)) erkennen. Nach dem Erreichen des Freistrahls verändert sich die Form des Tropfens in die charakteristische Pilzkappenform (siehe Abbildung 7.12 (b)). Die Unterseite ist abgeflacht, wie in Kapitel 7.3.2.1 gefunden.

Abbildung 7.13 (b) zeigt das Durchbohren des Tropfens. Auf der Rückseite des Tropfens erscheinen zwei helle Punkte, wo das Loch in der Mitte der flachen Flüssigkeit

entsteht. Die Form des Tropfens ist nur in größeren Skalen ähnlich den Ergebnissen der Simulation, was aufgrund der Rechenfehler, die oben diskutiert wurden, entstehen kann. Allerdings wird ein bestimmter Zerfallsprozess in der Simulation vorhergesagt und im Experiment verifiziert. Auch die Vorhersage (siehe Abbildung 7.10) vom *Abflachen* und *Durchbohren* als Hauptursache für den Zerfall bei den gegebenen Bedingungen in dem Diagramm der gleichmäßigen Umströmung in Abbildung 3.8 ist korrekt für den asymmetrischen Zerfall.

7.3.2.3 Vergleich der Simulation mit den experimentellen Ergebnissen für ein hochviskoses Fluid

Für den Tropfenzerfall hochviskoser Fluide werden Ergebnisse der Simulation und des Experiments mit Glycerin beim niedrigen Luftvolumenfluss analysiert (siehe Abbildungen 7.15 und 7.16). In diesen beiden Abbildungen sind der Zeitpunkt vor dem Auftreffen des Flüssigkeitstropfens auf den Freistrahл sowie jener während der vollständigen Umströmung gezeigt. Dabei kann man deutlich sehen, dass sowohl in der Simulation als auch im Experiment der Tropfen in den Freistrahл eindringt, leicht zusammengedrückt wird und anschließend durch den Strahl fällt. Der Tropfen wird aus seiner vertikalen Trajektorie abgelenkt, behält aber im Wesentlichen seine Form.

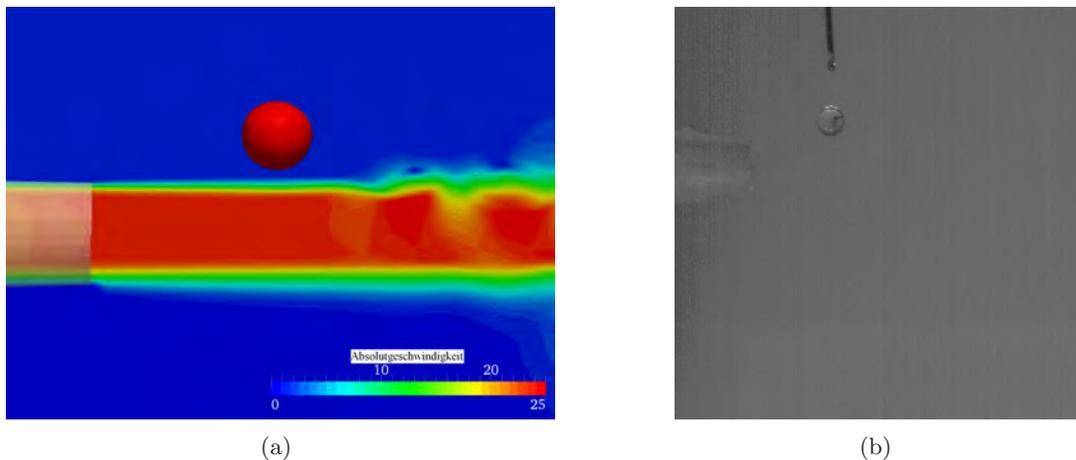


Abbildung 7.15: Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 26 \text{ ms}$ (10 NL/min , Glycerin)

In diesem Fall wird weder durch die Simulation noch durch das Experiment oder das Diagramm in Abbildung 3.8 ein Zerfall bei den gegebenen Bedingungen vorhergesagt. Für das angeführte Beispiel konnte somit eine ausgezeichnete Übereinstimmung erreicht werden.

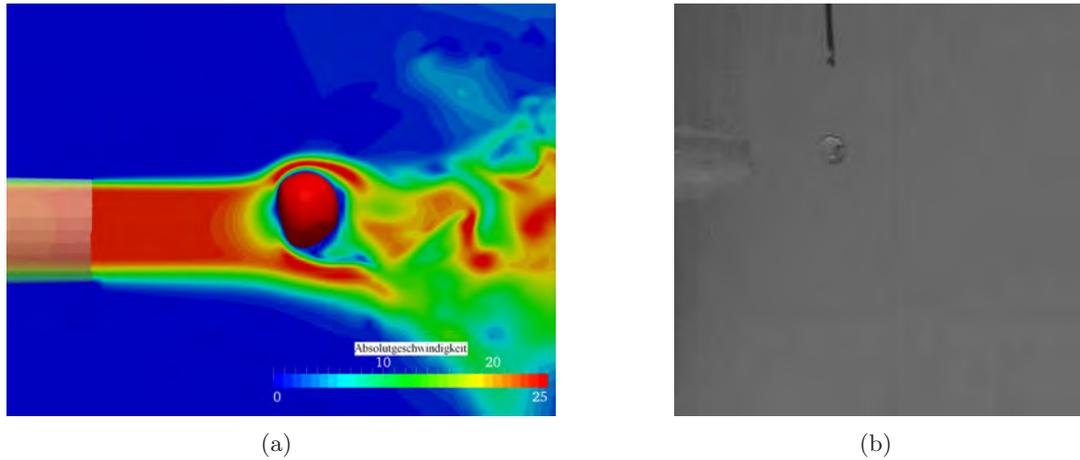


Abbildung 7.16: Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 36.5$ ms (10 NL/min, Glycerin)

7.3.3 Shear-induced entrainment (SIE)

Beim höheren Volumenfluss (60 NL/min) wird durch das Diagramm in Abbildung 3.8 für Ethanol SIE und für den Fall von Glycerin RTP vorhergesagt (siehe dazu Kapitel 3.1.4).

7.3.3.1 Vergleich der Simulation mit den experimentellen Ergebnissen für ein niederviskoses Fluid

In diesem Fall wird der Zerfall eines Ethanol Tropfens bei höheren Volumenflüssen untersucht. In Abbildung 7.17 ist der Zeitpunkt, bevor der Tropfen die Scherschicht des Freistrahls trifft, dargestellt. In den Abbildungen 7.18 und 7.19 dringt die Flüssigkeit teilweise in die Scherschicht des Strahls ein und wird dort stromabwärts auf der unteren Seite des Tropfens bewegt. Die Scherspannungen führen dazu, dass auf der Hinterseite ein dünner Flüssigkeitsfilm entsteht, der dann in der Scherregion in Tochtertropfen zerfällt. Man kann in den Simulationsergebnissen identifizieren, wie die Flüssigkeit im Scherbereich abgeflacht wird und nicht in den Kern des Freistrahls dringt. Der Zerfall des dünnen Filmes ist sowohl in den Simulationen als auch im Experiment schwer aufzulösen, da die räumliche Auflösung in beiden Fällen zu gering ist.

Für den Fall der niedrigen Viskosität kann deutlich gesagt werden, dass sowohl in der Simulation als auch im Experiment Scherspannungen in der Scherzone als Hauptgrund für den Zerfall des Tropfens identifizierbar sind. Auch im Diagramm in Abbildung 3.8 werden Scherphänomene für den Zerfall angegeben.

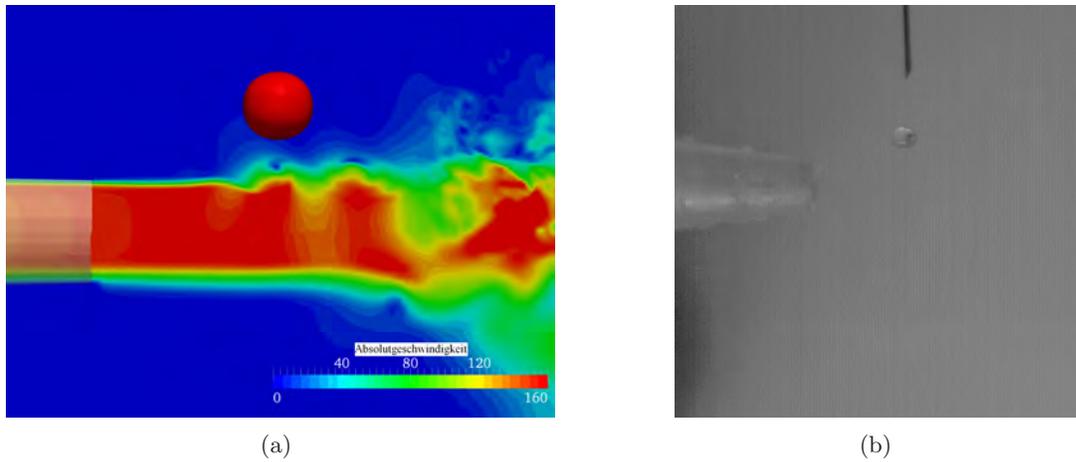


Abbildung 7.17: Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 20$ ms (60 NL/min, Ethanol)

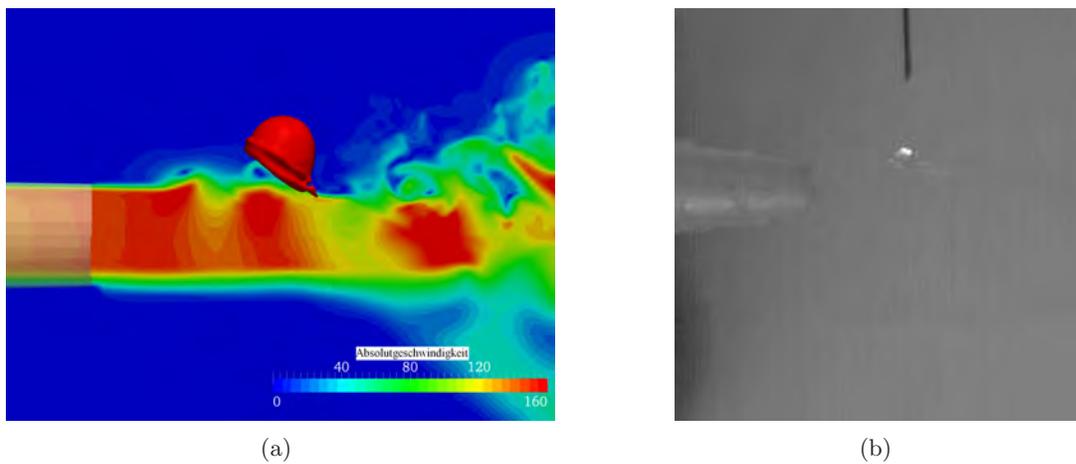


Abbildung 7.18: Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 25.5$ ms (60 NL/min, Ethanol)

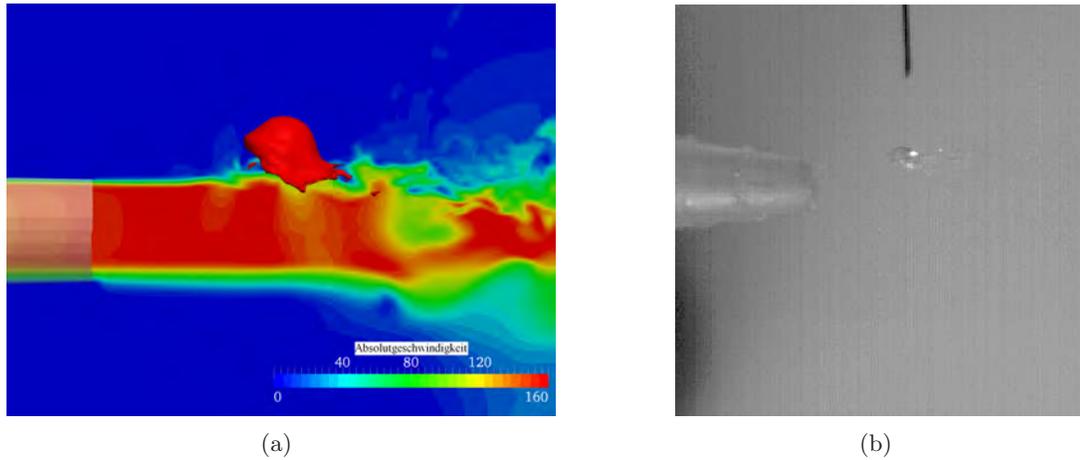


Abbildung 7.19: Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Phasenanteil $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 26$ ms (60 NL/min, Ethanol)

7.3.3.2 Vergleich der Simulation mit den experimentellen Ergebnissen für ein hochviskoses Fluid

Für den Fall hoher Viskosität wird die Strömung mit Glycerin untersucht. In den Abbildungen 7.20 und 7.21 kann man sehen, wie der Tropfen in die Scherschicht des Freistrahls eintritt.

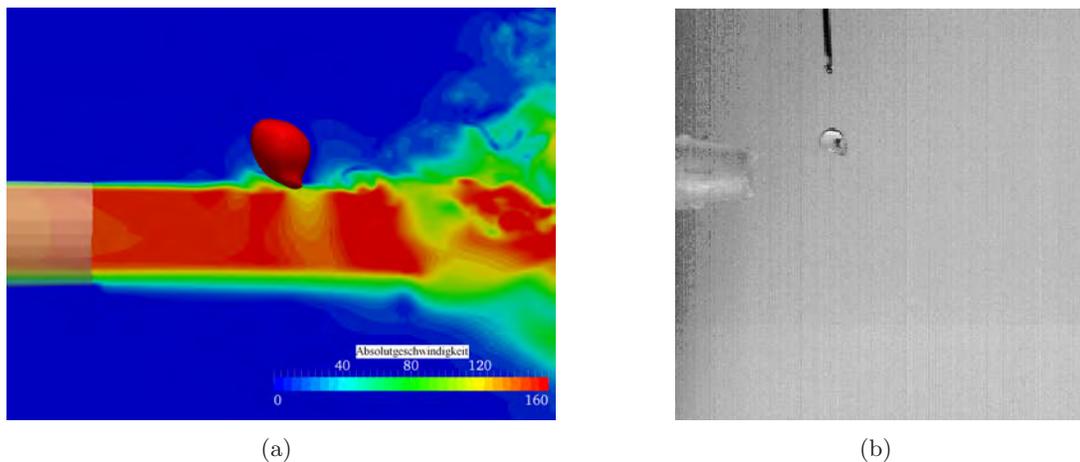


Abbildung 7.20: Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 24$ ms (60 NL/min, Glycerin)

Die Flüssigkeit wird auf der unteren Seite des Tropfens in Strömungsrichtung bewegt. Der Tropfen gelangt nicht in den Kern des Strahls. Die höhere Viskosität verhindert die Erzeugung der dünnen Flüssigkeitsschicht in der Scherzone wie im Fall von

Ethanol, jedoch sind Scherkräfte die Hauptfaktoren für den Prozess. Dies wird sowohl in der Simulation als auch im Experiment gezeigt. Das Diagramm in Abbildung 3.8 prognostiziert Abflachung und Durchbohrung. Dies kann mit den Untersuchungen hier eindeutig widerlegt werden.

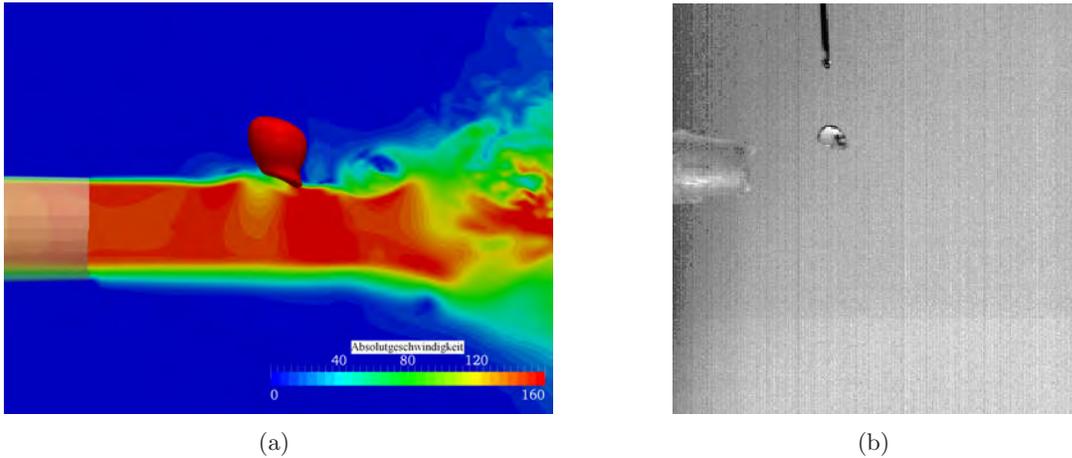


Abbildung 7.21: Geschwindigkeitsverteilung auf der Symmetrieebene des Strömungsvolumens und Isofläche des Phasenanteils $\alpha = 0.5$ (a) und Experiment (b) bei $t = 24.5 \text{ ms}$ (60 NL/min, Glycerin)

Bei der gleichmäßigen Umströmung existiert keine zusätzliche Scherzone, wie im Falle des Freistrahls. Diese zusätzlichen Scherkräfte führen dazu, dass der Übergang bei hochviskosen Fluiden von RTP zu SIE verschoben wird. Um diese Verschiebung besser quantifizieren zu können, werden im nächsten Unterkapitel die Übergangsbereiche zwischen den Zerfallsphänomenen im Detail experimentell untersucht. Diese vier Simulationen stellen erstmals in der Literatur das Strömungsfeld des asymmetrischen Tropfenzerfalls dar. Nach dem Wissen des Autors sind diese die ersten dreidimensionalen Simulationen mit expliziter Turbulenzmodellierung des Tropfenzerfalls im Allgemeinen. Mit diesen Simulationen kann man eine sehr grobe Abtastung des Oh-We Diagrammes erstellen.

Damit kann man sehen, dass bei kleinen Ohnesorge-Zahlen die Übergangsbereiche des asymmetrischen Tropfenzerfalls relativ gut mit jenen der gleichmäßigen Umströmung aus (Theofanous et al., 2012) übereinstimmen. Es ist jedoch zu sehen, dass die Kurven bei hohen Ohnesorgezahlen anders verlaufen. Um eine genaue Beschreibung der Kurven des asymmetrischen Tropfenzerfalls zu gewährleisten, werden 70 Messungen durchgeführt, um sowohl die Kern- als auch die Übergangsbereiche der Zerfallsregime abzudecken. Ergebnisse sind im nächsten Unterkapitel zu finden.

7.4 Experimentelle Untersuchungen des Tropfenzerfalls

In diesem Kapitel werden experimentelle Untersuchungen des Zerfalls von Flüssigkeitstropfen in einer Gasströmung gezeigt. Dabei ist zu bemerken, dass der Tropfen nicht gleichmäßig von der Gasströmung getroffen wird wie in (Theofanous und Li, 2008; Theofanous, 2010; Theofanous et al., 2012), sondern nur einseitig von der Gasströmung berührt wird. Dies ist von höchster Wichtigkeit, da bei der Zerstäubung die Flüssigkeit ebenfalls asymmetrisch angeströmt wird. Ergebnisse aus (Theofanous, 2010; Theofanous et al., 2012) sollen auf ihre Gültigkeit für den Zerfallsprozess durch einseitige Anströmung überprüft werden. Zusätzlich sollen die Erkenntnisse aus den Simulationen einfließen.

In Kapitel 7.2.2 wurde bereits gezeigt, dass der Gasstrahl auf den ersten 10-16 mm gleichmäßig ist, erst dahinter weitet der Strahl auf.

Im Folgenden werden die Ergebnisse der 70 Fälle, die in Kapitel 7.3.1 vorgestellt wurden, näher analysiert. In Abbildung 7.10 sind die Kurven aus Abbildung 3.8 mit den Experimenten zu sehen.

7.4.1 Experimentelle Ergebnisse

7.4.1.1 Wasser

In den Abbildungen 7.22 und 7.23 sind die charakteristischen Zeitpunkte während des Zerfalls eines Wassertropfens bei unterschiedlichen Luftvolumenströmen (3 - 90 NL/min) dargestellt. Die entsprechenden Weber-Zahlen sind in den Abbildungen zu finden. Die Ohnesorge-Zahl ist 0.002 und damit sind viskose Kräfte beim Zerfall nicht ausschlaggebend. Die Abbildungen hier wurden so nachbearbeitet, sodass man die Tropfenform am besten erkennen kann. Der gesamte Prozess aller Zerfälle ist in Kapitel B.1 in den Abbildungen B.1 bis B.14 zu sehen.

Bei den beiden niedrigsten Volumenströmen 3 und 5 NL/min ist in den Experimenten **kein Zerfall** des Tropfens sichtbar. Der Tropfen fällt durch den Freistrahldurch. Weder Normalkräfte noch Scherkräfte sind hoch genug, um die Oberflächenkraft aufzubrechen. Der Tropfen selbst wird durch die Gasströmung leicht verformt und aus der vertikalen Trajektorie abgelenkt.

Bei den Volumenströmen 8 und 10 NL/min wird der Tropfen von Normalkräften abgeflacht und in der Mitte durchbohrt. Hierbei kommt es zum **Taschenzerfall**, wobei eine dünne Flüssigkeitsfilm in der Form einer Tasche oder eines Fallschirms aufgeblasen wird und anschließend in kleinere Tochtertropfen zerfällt.

Bei den Volumenströmen 15 und 20 NL/min wird der Tropfen von den **Normalkräften** abgeflacht (man beachte die Pilzkappenform in Abbildung B.5 (c) und B.6 (c)), jedoch sind die Normalkräfte so hoch (teilweise bereits die Scherkräfte in geringen Men-

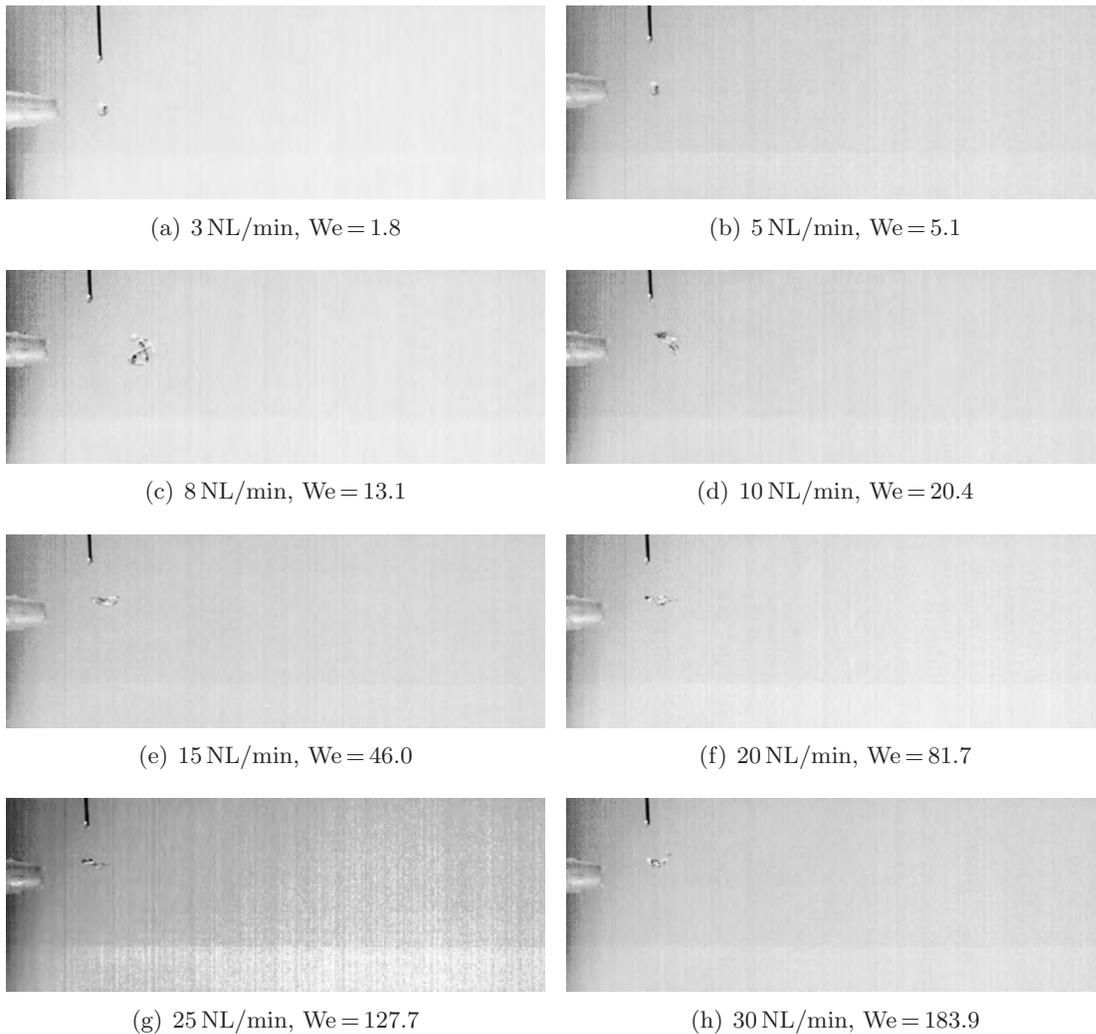


Abbildung 7.22: Zerfall von Wasser

gen), dass die flache Flüssigkeitsscheibe in Strömungsrichtung gedreht wird. Der Zerfall selbst erfolgt nach dem Verlassen des Freistrahls.

Bei den Volumenströmen 25 und 30 NL/min wird der Tropfen ebenfalls abgeflacht und gedreht, jedoch sind in diesen Fällen die **Scherkräfte** stark genug, um Flüssigkeit auf der Unterseite mitzureißen (*shear-induced-entrainment*). Während die obere Seite durch die Gravitation bewegt wird, kommt es auf der Unterseite bereits zum Mitreißen von Flüssigkeit. Jedoch erfolgt der Zerfall auch in diesem Fall außerhalb des Freistrahls.

Bei den Volumenströmen 40 bis 90 NL/min ist der dominante Prozess das **Mitreißen** von Flüssigkeit auf der Unterseite. Dabei zerfällt die Flüssigkeit bereits innerhalb der Scherschicht in Tochtertropfen.

Dabei muss beachtet werden, dass die Kurven in Abbildungen 3.8 und 7.10 für eine

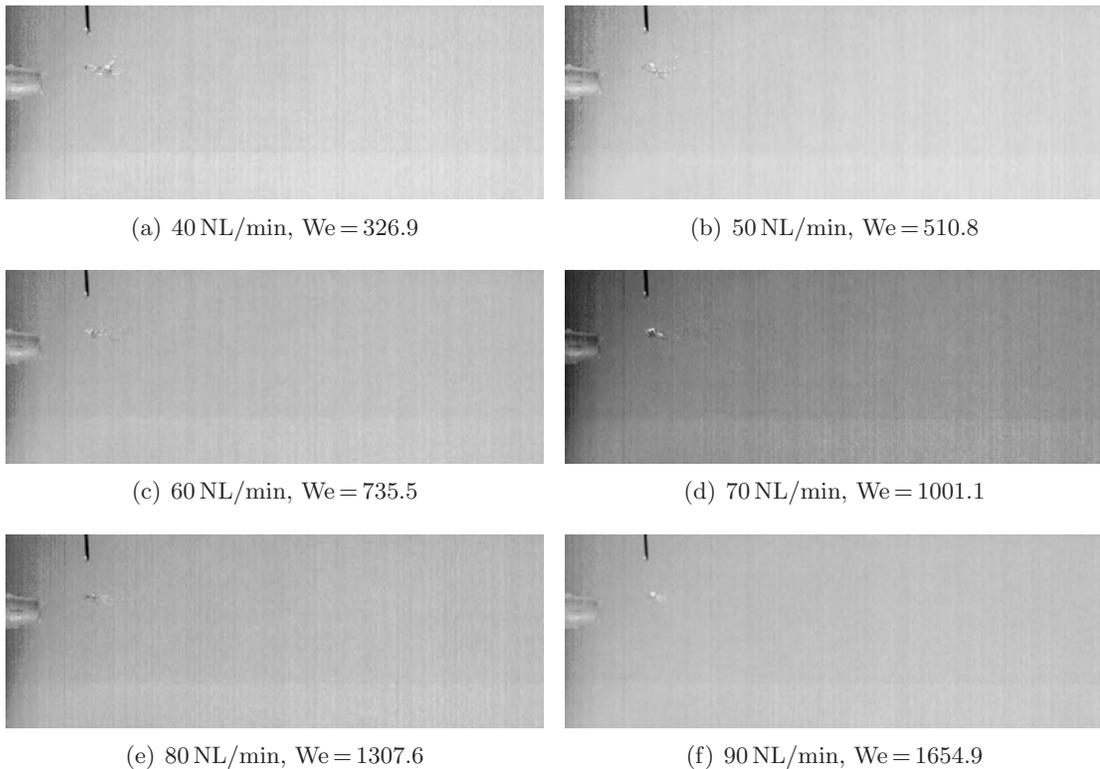


Abbildung 7.23: Zerfall von Wasser

gleichmäßige Umströmung des Tropfens aufgestellt wurden. Die Luftströmung ist symmetrisch und es existieren keine scharfen Scherregionen. Der einzige Geschwindigkeitsgradient entsteht durch den Abfall der Luft- auf die Oberflächengeschwindigkeit des Tropfens. Beim Freistrahls gibt es jedoch eine zylindrische Scherregion um den Freistrahls, die zu zusätzlichen Scherkräften führt (vergleiche dazu Abbildung 7.12 und Abbildung 6.10).

Betrachtet man den Zerfall von Wasser in Abbildung 7.24 in Bezug auf die Grenzkurven aus (Theofanous et al., 2012), so kann man sagen, dass unterhalb der Kurve der ersten Kritikalität auch in einer asymmetrischen Anströmung kein Zerfall existiert. Zwischen der Kurve der ersten und zweiten Kritikalität führen die Normalkräfte erstens zum Taschenzerfall und bei höheren Weber-Zahlen zur Abflachung und Drehung der Flüssigkeit. Zwischen zweiter und dritter Kritikalität werden die Scherkräfte dominant und bei hohen Weber-Zahlen ist das scherungsbedingte Mitreißen der dominante Prozess beim Zerfall von Wasser.

Damit kann gezeigt werden, dass die Übergangsbereiche zwischen den einzelnen Regimen aus (Theofanous et al., 2012) für eine gleichmäßige Umströmung gut mit den experimentellen Ergebnissen von einer asymmetrischen Anströmung übereinstimmen (siehe Abbildung 7.10).

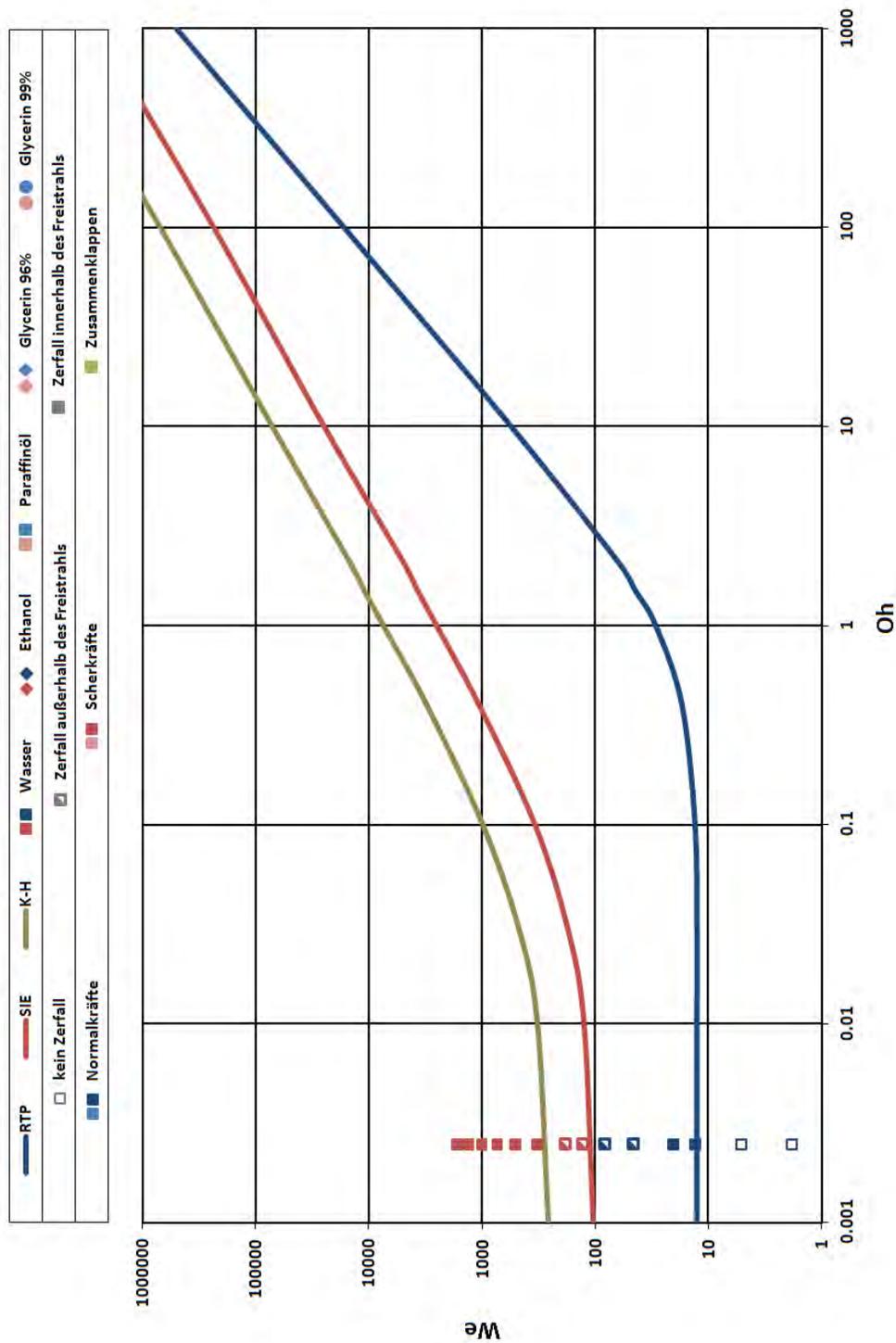


Abbildung 7.24: Oh-We Diagramm der Messungen mit Wasser, offene Punkte - kein Zerfall, halb gefüllte Punkte - Zerfall außerhalb des Freistrahls, gefüllte Punkte - Zerfall im Freistrahls (Kern oder Scherzone), blaue Punkte - Prozesse durch Normalkräfte, rote Punkte - Prozesse durch Scherkräfte

7.4.1.2 Ethanol

In den Abbildungen 7.25 und 7.26 sind die charakteristischen Zeitpunkte während des Zerfalls von Ethanol bei unterschiedlichen Luftvolumenströmen (3 - 90 NL/min) dargestellt. Die entsprechenden Weber-Zahlen sind unter den Abbildungen zu finden. Die Ohnesorge-Zahl ist 0.007, damit sind viskose Kräfte beim Zerfall nicht ausschlaggebend. Bei Ethanol sind die Weber-Zahlen bei gegebenen Volumenströmen höher als die Werte von Wasser. Dies beruht auf der niedrigeren Oberflächenspannung. Damit müssen Normal- und Scherkräfte einen geringeren Widerstand überwinden, um den Tropfenzерfall einzuleiten. Eine detaillierte Zeitauflösung der Prozesse aller Zerfälle ist in Kapitel B.2 in den Abbildungen B.15 bis B.28 zu sehen.

Bei dem Volumenstrom von 3 NL/min findet **kein Zerfall** statt. Der Tropfen fällt durch den Freistrahл durch.

Beim Volumenstrom von 5 NL/min und 8 NL/min findet durch Normalkräfte ein **Taschenzerfall** statt. Beim höheren Volumenstrom wird die Flüssigkeit bereits von der Strömung gedreht.

Beim Volumenstrom von 10 NL/min (siehe Abbildung 7.25 (d)) wird der Tropfen von **Normalkräften** abgeflacht und gedreht. Auch hier kann die Pilzkappenform des Tropfens nach dem Erreichen des Freistrahles beobachtet werden (siehe Abbildung B.18). In der CFD Simulation konnte bei diesen Bedingungen gezeigt werden, dass der Tropfen durchbohrt wird (siehe Kapitel 7.3.2.1). Jedoch wird der Flüssigkeitsfilm nicht mehr so stark aufgeblasen wie beim Taschenzerfall. Der Tropfen wird so stark gedreht, dass sich keine bemerkbare 'Tasche' ausbilden kann.

Beim Volumenstrom von 15 NL/min (siehe Abbildung 7.25 (e)) wird der Tropfen ebenfalls von **Normalkräften** abgeflacht und gedreht. Jedoch kommt es bei diesen Bedingungen nicht mehr zum Durchbohren des Tropfens. Bereits in diesem Fall werden Scherkräfte bemerkbar, die auf der Unterseite des Tropfens Flüssigkeit in die Strömungsrichtung mitreißen.

Ab den Volumenströmen von $20 - 90 \text{ NL/min}$ dominieren Scherkräfte und das **Mitreißen** von Flüssigkeit (siehe dazu die Simulationen aus Kapitel 7.3.3.1) den Zerfallsprozess in der Scherzone des Freistrahls und die Tochtertropfen werden bei den höchsten Geschwindigkeiten so klein, dass diese von der Kamera nur noch als Nebel aufgelöst werden.

Betrachtet man den Zerfall von Ethanol in Abbildung 7.27 in Bezug auf die Grenzkurven aus (Theofanous et al., 2012), so gilt Folgendes. Unterhalb der Kurve der ersten Kritikalität existiert auch in diesem Fall kein Zerfall. Zwischen der Kurve der ersten und zweiten Kritikalität führen die Normalkräfte zuerst zum Taschenzerfall und dann bei höheren Weber-Zahlen zur Abflachung und Drehung der Flüssigkeit, wobei hier

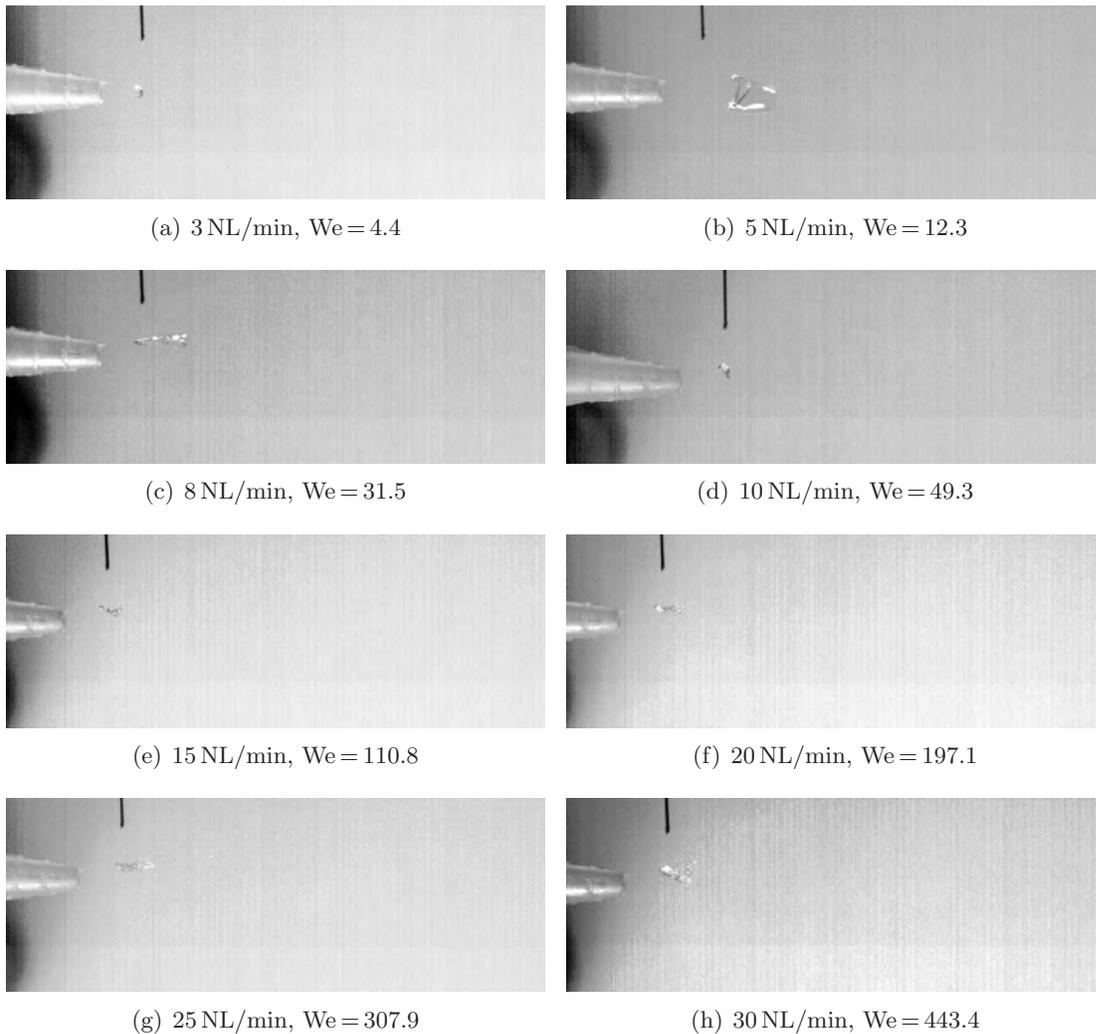


Abbildung 7.25: Zerfall von Ethanol

gezeigt werden konnte (vergleiche dazu Simulation in Kapitel 7.3.2.1), dass zwischen Taschenzerfall sowie Drehung und Abflachung ein fließender Übergang existiert. Auch bei erhöhten Geschwindigkeiten kann eine Durchbohrung der Flüssigkeit auftreten. Dies steht in guter Übereinstimmung mit der Vorhersage von RTP aus der Literatur. Bei Ethanol werden Scherkräfte bereits bei niedrigeren Volumenströmen wichtig. Zwischen zweiter und dritter Kritikalität werden die Scherkräfte dominant. Bei hohen Weber-Zahlen ist das scherungsbedingte Mitreißen der dominante Prozess beim Zerfall von Ethanol.

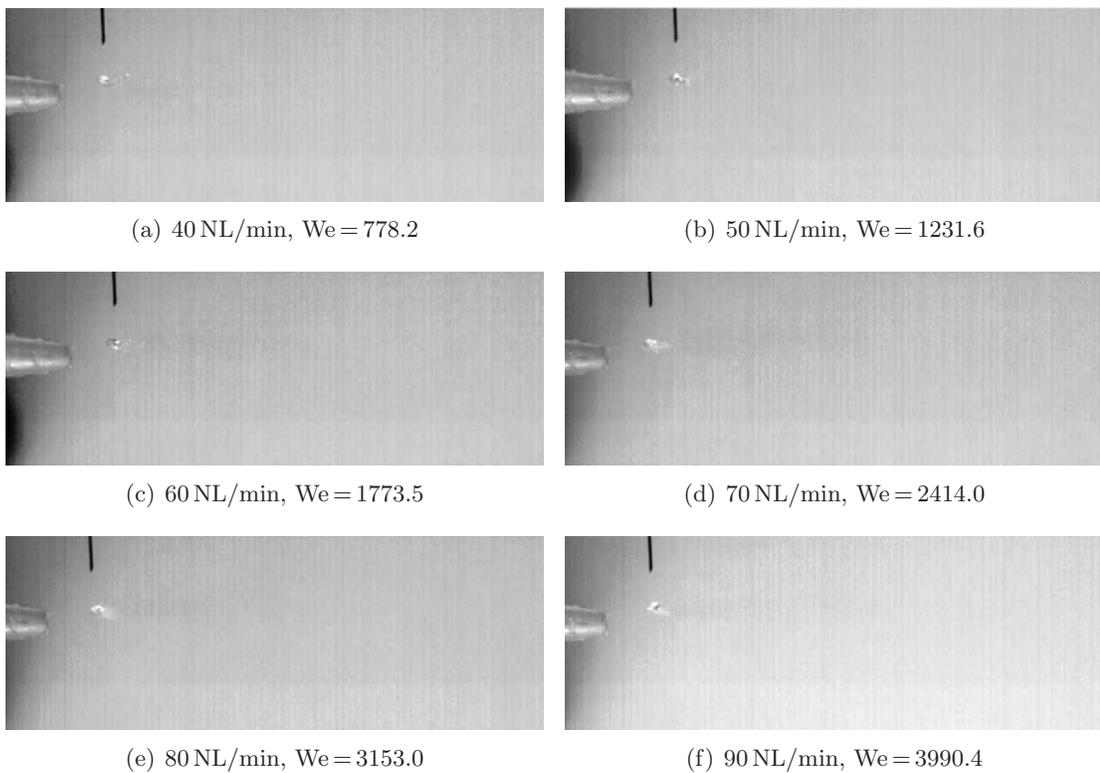


Abbildung 7.26: Zerfall von Ethanol

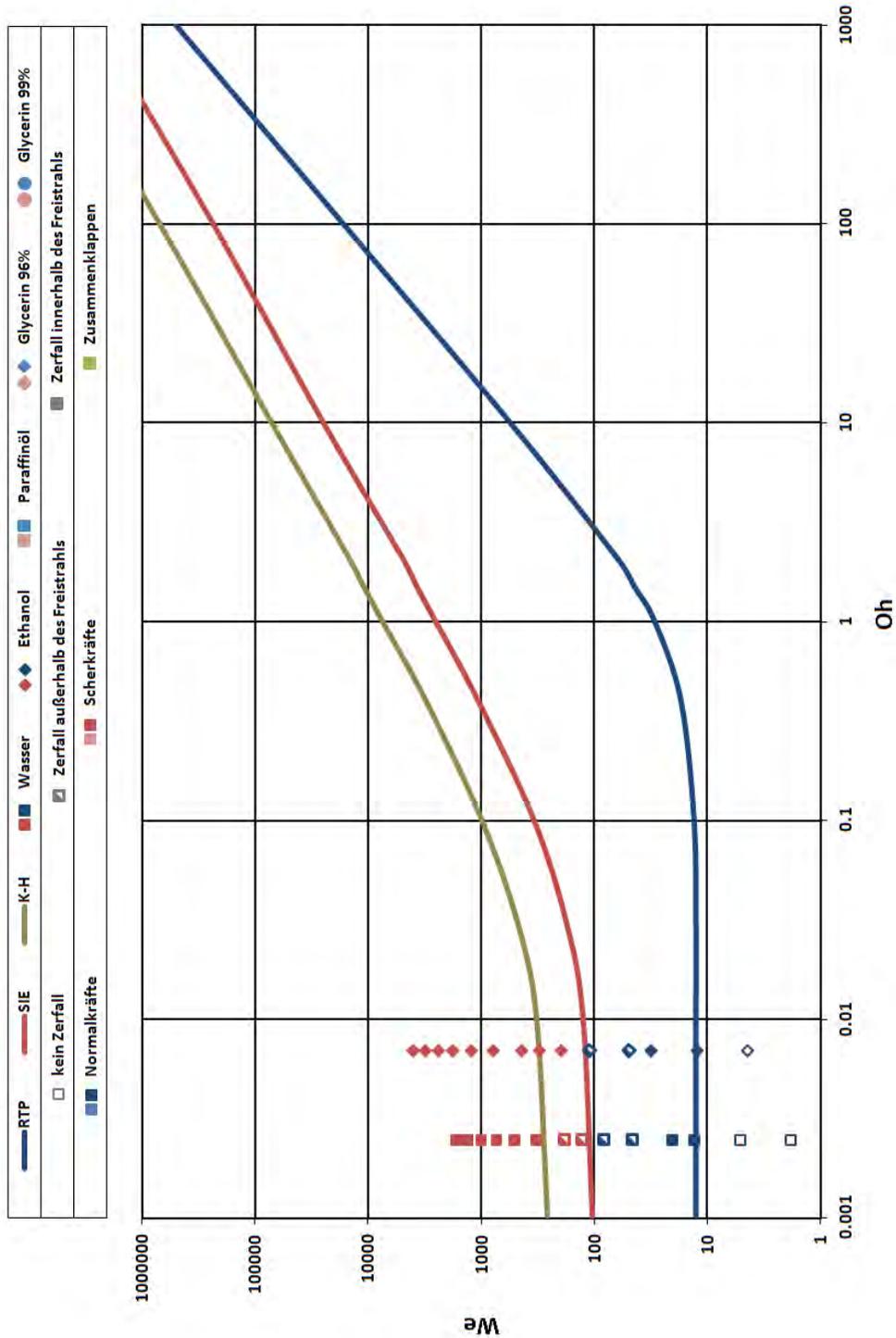


Abbildung 7.27: Oh-We Diagramm der Messungen mit Wasser und Ethanol, offene Punkte - kein Zerfall, halb gefüllte Punkte - Zerfall außerhalb des Freistrahls, gefüllte Punkte - Zerfall im Freistrahls (Kern oder Scherzone), blaue Punkte - Prozesse durch Normalkräfte, rote Punkte - Prozesse durch Scherkräfte

7.4.1.3 Paraffinöl

In den Abbildungen 7.28 und 7.29 sieht man charakteristische Zeitpunkte während des Zerfalls von Paraffinöl bei unterschiedlichen Luftvolumenströmen (3-90 NL/min). Die entsprechenden Weber-Zahlen sind in den Abbildungen zu finden. Die Ohnesorge-Zahl ist 0.683 und damit sind viskose Kräfte beim Zerfall bereits ausschlaggebend. Der gesamte Prozess aller Zerfälle ist im Anhang in Kapitel B.3 in den Abbildungen B.29 bis B.42 zu sehen. Bei Paraffinöl sind die Weber-Zahlen bei gegebenen Volumenströmen höher als die Werte von Wasser, aber niedriger als jene von Ethanol. Dies wird vor allem durch die Oberflächenspannung bedingt. Jedoch liegt die Ohnesorge-Zahl in einem Bereich, wo die Kurven der Kritikalitäten bereits durch viskose Kräfte zu höheren Weber-Zahlen verschoben werden (siehe Abbildung 7.10). Damit müssen Normal- und Scherkräfte einem höheren Widerstand der Viskosität entgegenwirken, um den Tropfenzerfall einzuleiten.

Bei den Volumenströmen von 3 und 5 NL/min findet **kein Zerfall** statt. Der Tropfen fällt durch den Freistrahл durch.

Beim Volumenstrom von 8 NL/min sind noch Charakteristika von **Taschenzerfall** (erkennbare Tasche im zentralen Bereich) zu erkennen, jedoch wird die Flüssigkeit bereits gedreht. Die Tasche wird nicht in den Maßen aufgeblasen, wie zum Beispiel bei Ethanol oder Wasser.

Bei einem Volumenstrom von 10 NL/min wird der Tropfen **scheibenförmig verformt** und **gedreht** und zerfällt außerhalb des Freistrahles.

Beim Volumenstrom von 15 NL/min wird der Tropfen stärker als bei den niedrigeren Gasvolumenströmen gedreht, wobei die untere Hälfte der Flüssigkeit schneller beschleunigt wird. Bereits in diesem Fall machen sich Scherkräfte in geringen Maßen bemerkbar. Hierbei kommt es nicht zur Ablösung von Flüssigkeit auf der Unterseite wie etwa bei Ethanol sondern zum **Zusammenklappen** der schnelleren Unter- und der langsameren Oberseite (siehe Abbildungen 7.28 (e) und B.33 (g), (h)). Dies erfolgt durch die erhöhten viskosen Kräfte. Dadurch findet kein Zerfall bei diesem Volumenstrom statt.

Beim Volumenstrom von 20 NL/min wird ein ähnliches **Zusammenklappen** sichtbar, wobei in diesem Fall Scherkräfte bereits ein wenig stärker ausgeprägt sind. Durch das Zusammenklappen kommt es zu zusätzlichen Instabilitäten des Tropfens, die bei diesen Bedingungen außerhalb des Freistrahls zum Zerfall führen.

Bei den Volumenströmen von 25 und 30 NL/min wird Flüssigkeit auf der Unterseite des Tropfens **mitgerissen** (shear-induced entrainment), jedoch kommt es zu keinem Zusammenklappen sowie aufgrund der erhöhten Viskositätskräfte zu keinem Zerfall innerhalb des Freistrahls. Beim niedrigeren Volumenstrom ($We = 222.8$) sind die Oberflächen- und Viskositätskräfte hoch genug, um den Tropfen nicht zerfallen zu lassen.

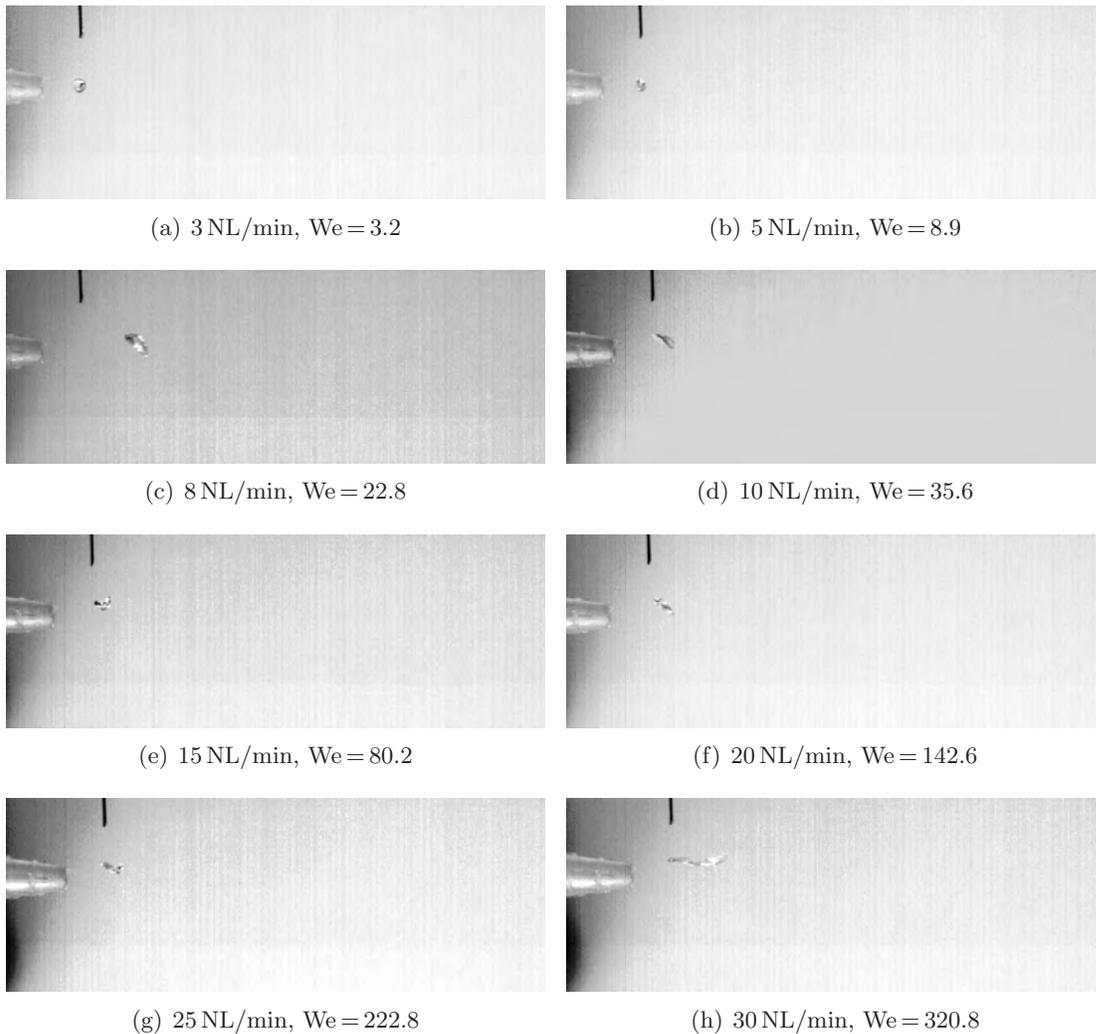


Abbildung 7.28: Zerfall von Paraffinöl

Beim höheren Volumenstrom ($We = 320.8$) kommt es zum Zerfall außerhalb des Freistrahles.

Bei den Volumenströmen 40 bis 90 NL/min ist der dominante Prozess das **Mitreiben** auf der Unterseite. Dabei zerfällt die Flüssigkeit bereits innerhalb der Scherschicht in Tochtropfen.

Betrachtet man den Zerfall von Paraffinöl in Bezug auf die Grenzkurven (Theofanous et al., 2012), zeigt sich, dass unterhalb der Kurve der ersten Kritikalität auch in diesem Fall kein Zerfall existiert. Zwischen der Kurve der ersten und zweiten Kritikalität führen die Normalkräfte zum Taschenzerfall und bei höheren Weber-Zahlen zur Abflachung und Drehung der Flüssigkeit. In Abbildung 7.10 werden für die erhöhte Ohnesorge-Zahl bereits andere Werte für den Übergang zwischen den Zerfallsregimen angegeben.

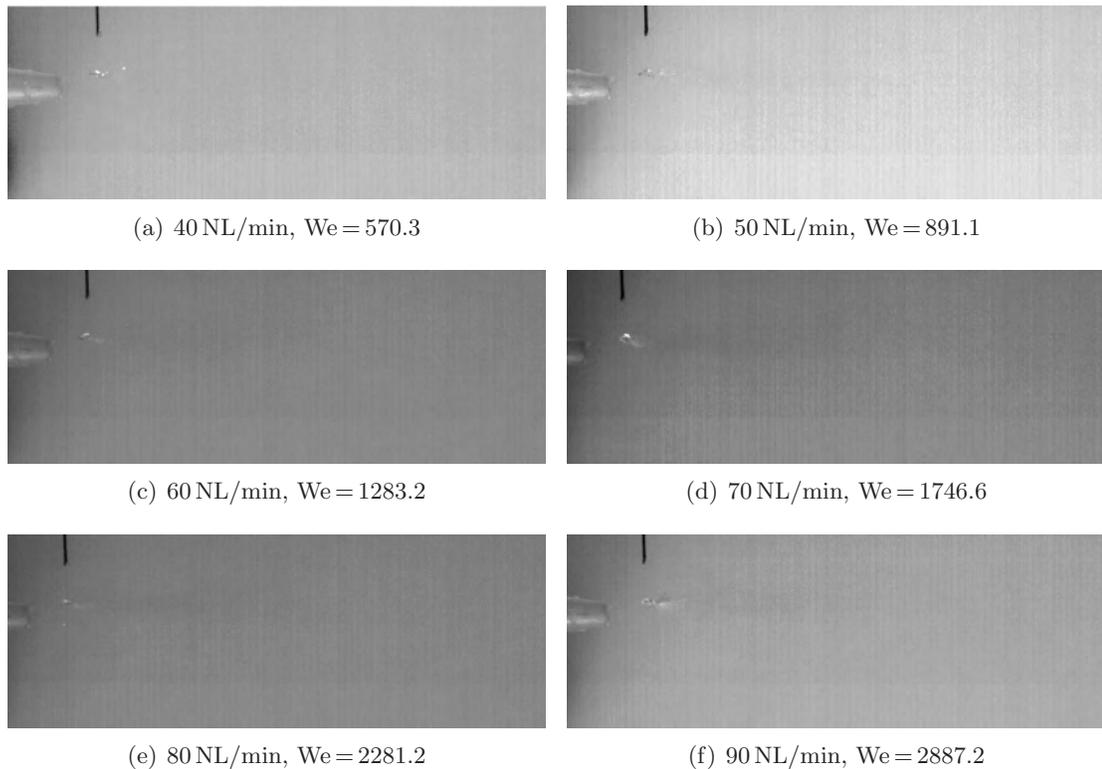


Abbildung 7.29: Zerfall von Paraffinöl

Die Kurve der ersten Kritikalität prognostiziert das richtige Verhalten, jedoch sagt das Diagramm ein Einsetzen der zweiten Kritikalität erst bei einem Volumenstrom von 70-80 NL/min. Man findet in den Experimenten bereits bei 40 NL/min eine dominante Rolle der Scherkräfte beim Zerfall. Der Wert ist aufgrund der viskosen Kräfte im Vergleich zu Wasser und Ethanol (20-25 NL/min) eindeutig erhöht, jedoch ist die Erhöhung geringer als für eine gleichmäßige Umströmung erwartet.

Es ist zu bedenken, dass in diesem Fall eine zusätzliche Scherregion existiert (im Vergleich zu der gleichmäßigen Umströmung). Diese zusätzlichen Scherkräfte führen zur Verschiebung des Übergangs zum scherratenbedingten Mitreißen zu niedrigeren Weber-Zahlen. Damit ist bereits sichtbar, dass die zusätzliche Scherschicht des Freistrahles den Übergangsbereich zwischen Normal- und Scherkräften für die asymmetrische Umströmung verschiebt.

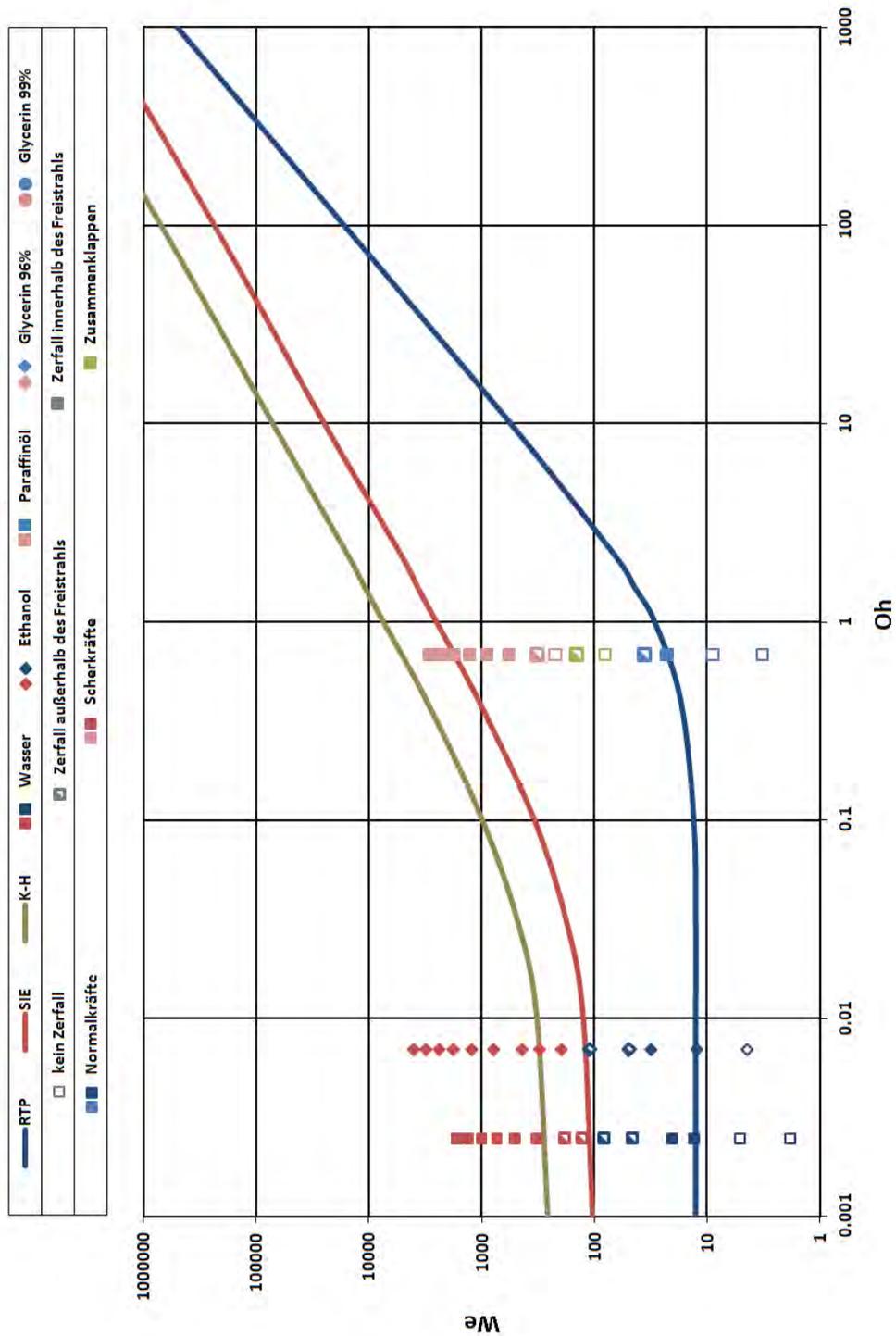


Abbildung 7.30: Oh-We Diagramm der Messungen mit Wasser, Ethanol und Parffinöl, offene Punkte - kein Zerfall, halb gefüllte Punkte - Zerfall außerhalb des Freistrahls, gefüllte Punkte - Zerfall im Freistrahl (Kern oder Scherzone), blaue Punkte - Prozesse durch Normalkräfte, rote Punkte - Prozesse durch Scherkräfte

7.4.1.4 Glycerin (96 %)

Zu diesen Messungen wird eine Glycerin-Wasser-Mischung ($\approx 96\%-4\%$) verwendet. In den Abbildungen 7.38 und 7.39 sind die charakteristischen Zeitpunkte während des Zerfalls von Glycerin bei unterschiedlichen Luftvolumenströmen (3 - 90 NL/min) dargestellt. Die entsprechenden Weber-Zahlen sind unter den Abbildungen zu finden. Die Ohnesorge-Zahl ist 2.0 und damit sind viskose Kräfte beim Zerfall bereits sehr dominierend. Der gesamte Prozess aller Zerfälle ist in Kapitel B.4 in den Abbildungen B.43 bis B.56 abgebildet. Bei Glycerin sind die Weber-Zahlen bei gegebenen Volumenströmen niedriger als die Werte von Paraffinöl. Dies wird vor allem durch die höhere Oberflächenspannung verursacht. Auch in diesem Fall liegt die Ohnesorge-Zahl in einem Bereich, wo die Kurven der Kritikalitäten bereits durch viskose Kräfte zu höheren Weber-Zahlen verschoben werden (siehe Abbildung 7.10). Damit müssen Normal- und Scherkräfte einen höheren Widerstand der Viskosität kompensieren, um den Tropfenzerfall einzuleiten.

Bei den Volumenströmen von 3, 5, 8 und 10 NL/min findet **kein Zerfall** statt. Der Tropfen fällt durch den Freistrah durch, wird jedoch in einem mit der Geschwindigkeit ansteigendem Winkel abgelenkt. Dies wurde auch in der Simulation in Kapitel 7.3.2.3 festgestellt.

Beim Volumenstrom von 15 und 20 NL/min gelangt der Tropfen in den Strahl, wo er bereits **scheibenförmig verformt** wird. Jedoch tragen die viskosen Kräfte dazu bei, dass der Tropfen weder im Strahl noch außerhalb des Strahles zerfällt.

Beim Volumenstrom von 25 NL/min wird der Tropfen **scheibenförmig verformt** und **gedreht** und zerfällt außerhalb des Freistrahles.

Beim Volumenstrom von 30 NL/min wird der Tropfen stärker gedreht, wobei die untere Hälfte der Flüssigkeit schneller beschleunigt wird. Bereits in diesem Fall machen sich Scherkräfte in geringen Maßen bemerkbar. Hierbei kommt es nicht zur Ablösung von Flüssigkeit auf der Unterseite sondern zum **Zusammenklappen** von Unter- und Oberseite (siehe Abbildungen 7.38 (h) und B.50 (e), (f)). Dies erfolgt durch die erhöhten viskosen Kräfte. Dadurch findet kein Zerfall bei diesem Volumenstrom statt.

Bei den Volumenströmen von 40 bis 80 NL/min wird Flüssigkeit auf der Unterseite des Tropfens **mitgerissen** (SIE), jedoch kommt es aufgrund der erhöhten Viskositätskräfte zu keinem Zerfall innerhalb der Scherschicht des Freistrahls. Ein entsprechendes Verhalten wurde in der Simulation in Kapitel 7.3.3.2 für den Volumenfluss von 60 NL/min gefunden. Je höher der Volumenstrom in den Experimenten ist, desto stärker wird Flüssigkeit auf der Unterseite beschleunigt. Weiters werden umso mehr und umso kleinere Tropfen aus der Scherschicht des Freistrahls geschleudert. Diese Tochtertropfen bleiben eine Zeit lang mit 'Tentakeln' an den Muttertropfen verbunden (siehe zum

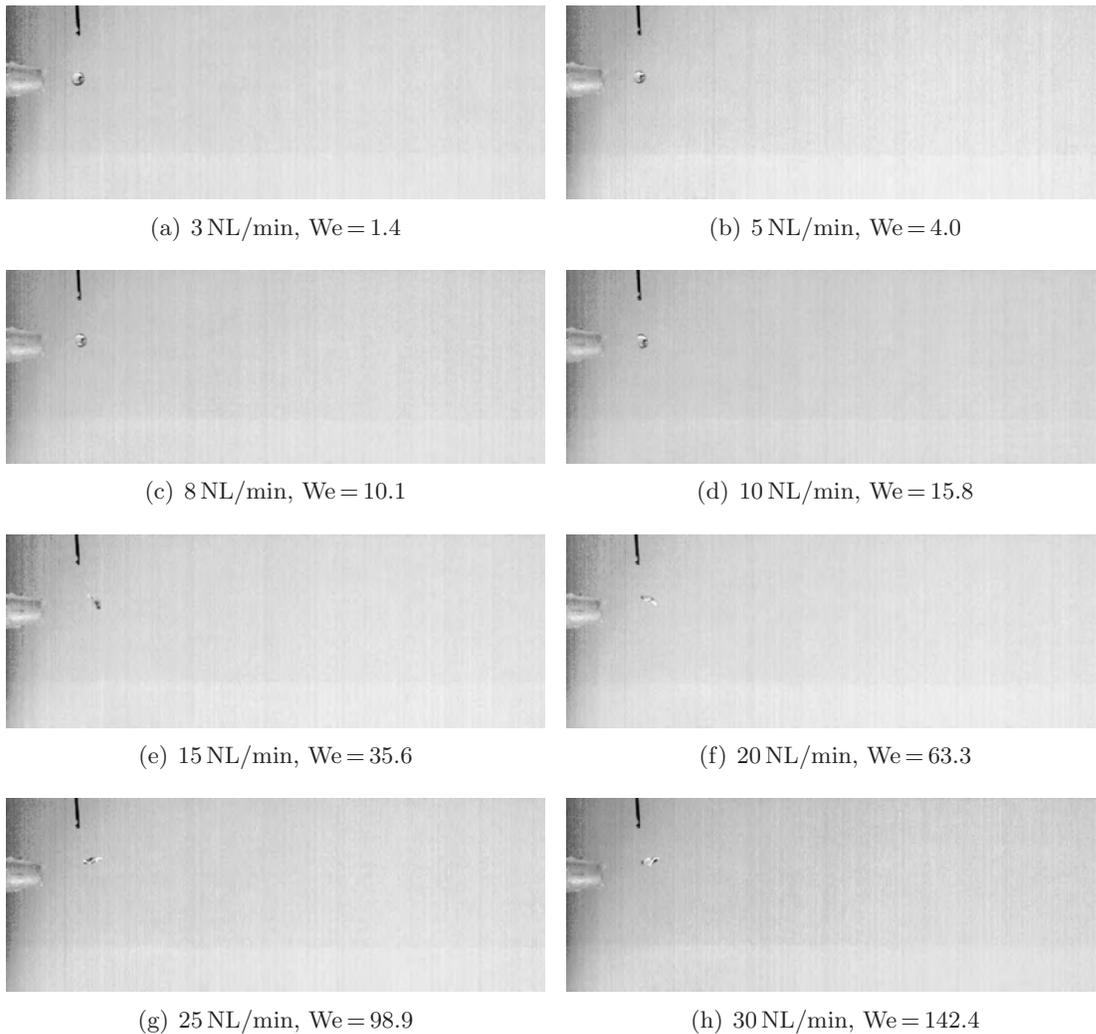


Abbildung 7.31: Zerfall von Glycerin (96 %)

Beispiel Abbildung B.55 (h)). Dabei muss beachtet werden, dass es beim niedrigsten Volumenstrom von 40 NL/min zu keinem Zerfall kommt, wobei der Zerfall bei den anderen Volumenströmen außerhalb des Freistrahles stattfindet.

Beim Volumenstrom von 90 NL/min ist der dominante Prozess das **Mitreißen** auf der Unterseite. Dabei zerfällt die Flüssigkeit bereits innerhalb der Scherschicht in Tochtertropfen (siehe Abbildung B.56 (e)) ähnlich wie z.B. bei Ethanol oder Wasser über einem Volumenstrom von 20-25 NL/min bzw. wie bei Paraffinöl über 40 NL/min.

Betrachtet man den Zerfall der 96 %-igen Glycerinmischung in Abbildung 7.33 in Bezug auf die Grenzkurven (Theofanous et al., 2012), so kann gezeigt werden, dass unterhalb der Kurve der ersten Kritikalität auch in diesem Fall kein Zerfall existiert. Jedoch findet man ein Abflachen des Tropfens bei Volumenströmen von 15 und 20 NL/min,

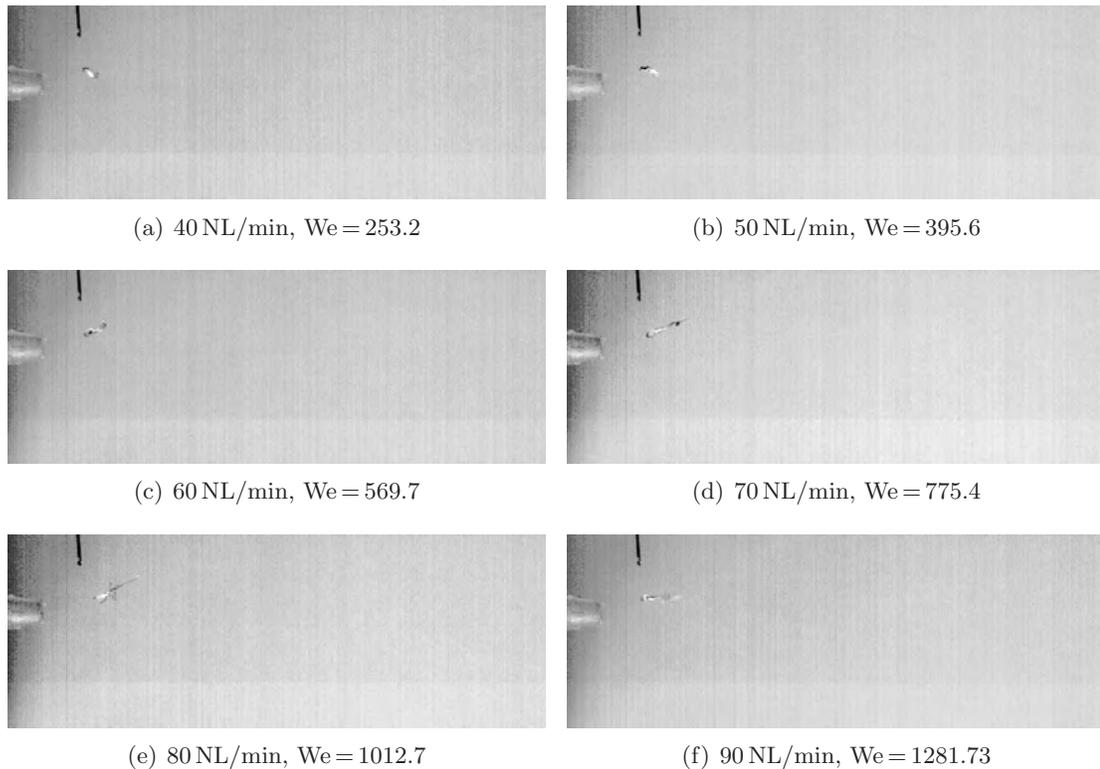


Abbildung 7.32: Zerfall von Glycerin (96 %)

welche unterhalb bzw. auf der ersten Kritikalität liegen. In diesem Fall wird kein Taschenzerfall gefunden, was auf das geringe Verhältnis von Luft- und Tropfendurchmesser bzw. die hohen viskosen Kräfte zurückzuführen ist. Zwischen der Kurve der ersten und zweiten Kritikalität führen die Normalkräfte zum Zusammendrücken des Tropfens und bei höheren Weber-Zahlen zum Zusammenklappen von Ober- und Unterseite, was dem Tropfenzerfall zusätzlich entgegenwirkt. In Abbildung 7.10 werden für die erhöhte Ohnesorge-Zahl bereits andere Werte für den Übergang zwischen den Zerfallsregimen angegeben. Die Kurve der ersten Kritikalität prognostiziert den richtigen Verlauf, jedoch treten Scherkräfte, die den Tropfen bereits im Strahl zerfallen lassen, bereits zwischen 80 und 90 NL/min, was wiederum einen niedrigeren Wert darstellt als der durch die zweite Kritikalität prognostizierte Wert. Der Wert ist aufgrund der viskosen Kräfte eindeutig erhöht im Vergleich zu Wasser und Ethanol (20-25 NL/min) bzw. Paraffinöl (40 NL/min), jedoch ist die Erhöhung geringer als für eine gleichmäßige Umströmung erwartet.

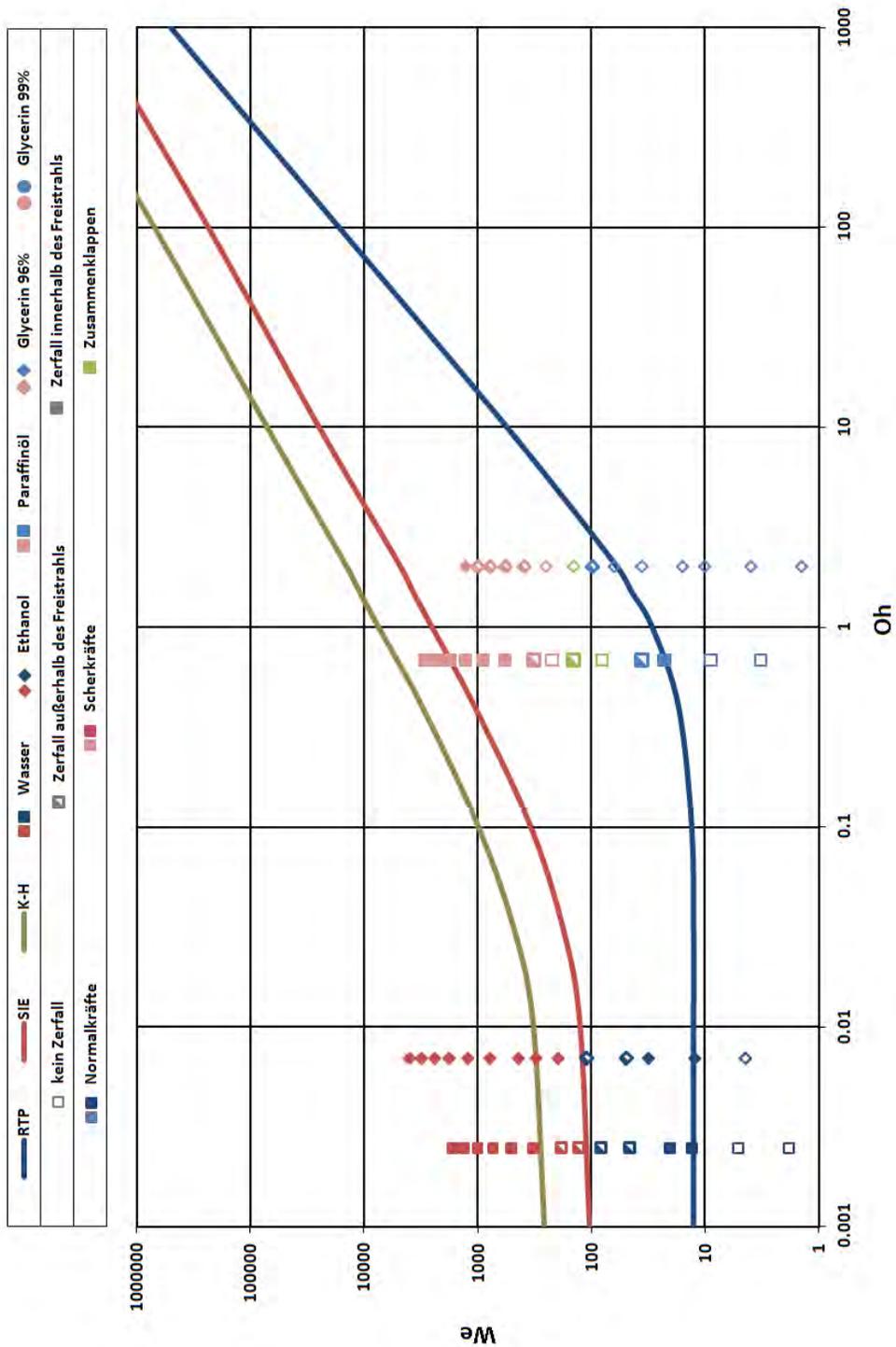


Abbildung 7.33: Oh-We Diagramm der Messungen mit Wasser, Ethanol, Parffinöl und Glycerin (96 %-ig), offene Punkte - kein Zerfall, halb gefüllte Punkte - Zerfall außerhalb des Freistrahls, gefüllte Punkte - Zerfall im Freistrahls (Kern oder Scherzone), blaue Punkte - Prozesse durch Normalkräfte, rote Punkte - Prozesse durch Scherkräfte

7.4.1.5 Glycerin (99 %)

Zu diesen Messungen wird eine Glycerin-Wasser-Mischung ($\approx 99\%-1\%$) verwendet. In den Abbildungen 7.40 und 7.43 sind die charakteristischen Zeitpunkte während des Zerfalls von Glycerin bei unterschiedlichen Luftvolumenströmen (3-90 NL/min) zu erkennen. Die entsprechenden Weber-Zahlen sind unter den Abbildungen zu finden. Die Ohnesorge-Zahl ist 2.75 und damit sind viskose Kräfte beim Zerfall bereits ausschlaggebend. Der gesamte Prozess aller Tropfenzerfälle ist in Kapitel B.5 in den Abbildungen B.43 bis B.56 zu sehen. Bei Glycerin sind die Weber-Zahlen bei gegebenen Volumenströmen niedriger als die Werte von Paraffinöl. Dies wird vor allem aufgrund der höheren Oberflächenspannung bedingt. Auch in diesem Fall liegt die Ohnesorge-Zahl in einem Bereich, wo die Kurven der Kritikalitäten bereits durch viskose Kräfte zu höheren Weber-Zahlen verschoben werden (siehe Abbildung 7.10). Damit müssen Normal- und Scherkräfte einen höheren Widerstand der Viskosität überwinden, um den Tropfenzerfall einzuleiten.

Bei den Volumenströmen von 3, 5, 8 und 10 NL/min findet **kein Zerfall** statt. Der Tropfen fällt durch den Freistrah durch, wird jedoch in einem mit der Geschwindigkeit ansteigenden Winkel abgelenkt.

Bei den Volumenströmen von 15, 20 und 25 NL/min gelangt der Tropfen in den Strahl, wo er bereits **scheibenförmig verformt** wird. Jedoch tragen die viskosen Kräfte dazu bei, dass der Tropfen weder im Strahl noch außerhalb des Strahles zerfällt.

Beim Volumenstrom von 30 NL/min wird der Tropfen **scheibenförmig verformt** und **gedreht**, und er zerfällt außerhalb des Freistrahles.

Beim Volumenstrom von 40 NL/min wird der Tropfen stärker gedreht, wobei die untere Hälfte der Flüssigkeit schneller beschleunigt wird. Bereits in diesem Fall machen sich Scherkräfte in geringen Maßen bemerkbar. Hierbei kommt es nicht zur Ablösung von Flüssigkeit auf der Unterseite, sondern zum **Zusammenklappen** von Unter- und Oberseite (siehe Abbildungen 7.43 (a) und B.50 (f), (g)). Dies erfolgt durch die erhöhten viskosen Kräfte. Dadurch findet kein Zerfall bei diesem Volumenstrom statt.

Bei den Volumenströmen von 50 bis 80 NL/min wird Flüssigkeit auf der Unterseite des Tropfens **mitgerissen** (SIE), jedoch kommt es aufgrund der erhöhten Viskositätskräfte zu keinem Zerfall innerhalb der Scherschicht des Freistrahls. Je höher der Volumenstrom ist, desto stärker wird Flüssigkeit auf der Unterseite beschleunigt. Weiters werden auch in diesem Fall umso mehr und umso kleinere Tropfen (siehe zum Beispiel Abbildung B.70 (e)) aus der Scherschicht des Freistrahls geschleudert. Beim niedrigsten Volumenstrom von 50 NL/min kommt es zu keinem Zerfall, wobei der Zerfall bei den höheren Volumenströmen außerhalb des Freistrahles stattfindet.

Beim Volumenstrom von 90 NL/min ist der dominante Prozess das **Mitreißen** auf

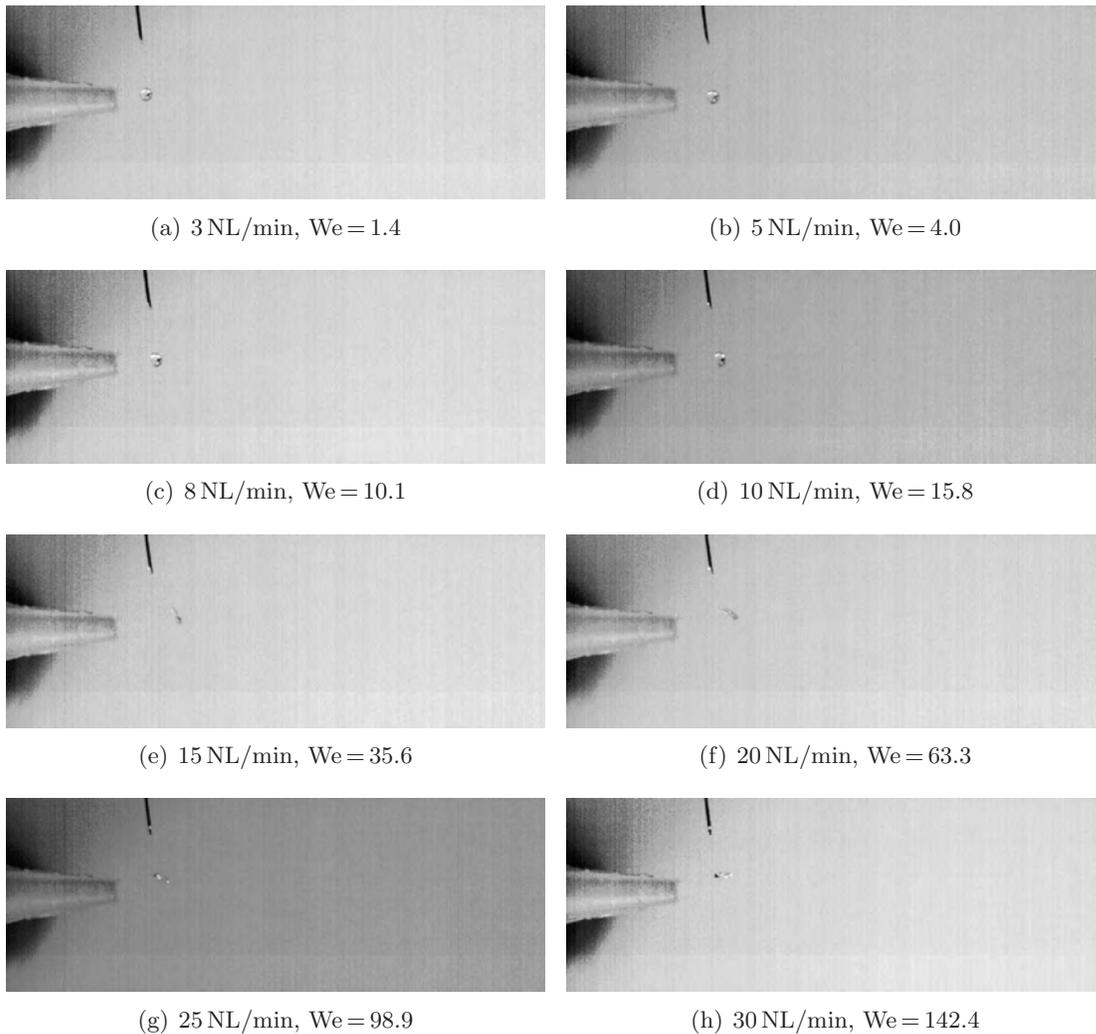


Abbildung 7.34: Zerfall von Glycerin (99 %)

der Unterseite. Dabei zerfällt die Flüssigkeit jedoch nicht innerhalb der Scherschicht in Tochtertropfen (siehe Abbildung B.56 (e)) ähnlich wie z.B. bei Ethanol oder Wasser über einem Volumenstrom von 20-25 NL/min bzw. wie bei Paraffinöl über 40 NL/min. Dieser Zerfall ist ähnlich dem Zerfall der 96 %-igen Glycerin Mischung bei 80 NL/min. Damit zeigt sich, dass der Zerfall des Tropfens innerhalb der Scherzone in Tochtertropfen bei den hier untersuchten Volumenströmen nicht auftritt.

Betrachtet man den Zerfall von der 99 %-igen Glycerinmischung in Bezug auf die Grenzkurven (Theofanous et al., 2012), so kann gezeigt werden, dass unterhalb der Kurve der ersten Kritikalität auch in diesem Fall kein Zerfall existiert. Jedoch findet man ein Abflachen des Tropfens beim Volumenströmen von 15, 20 und 25 NL/min, welche unterhalb bzw. auf der ersten Kritikalität liegen. In diesem Fall wird ebenfalls kein

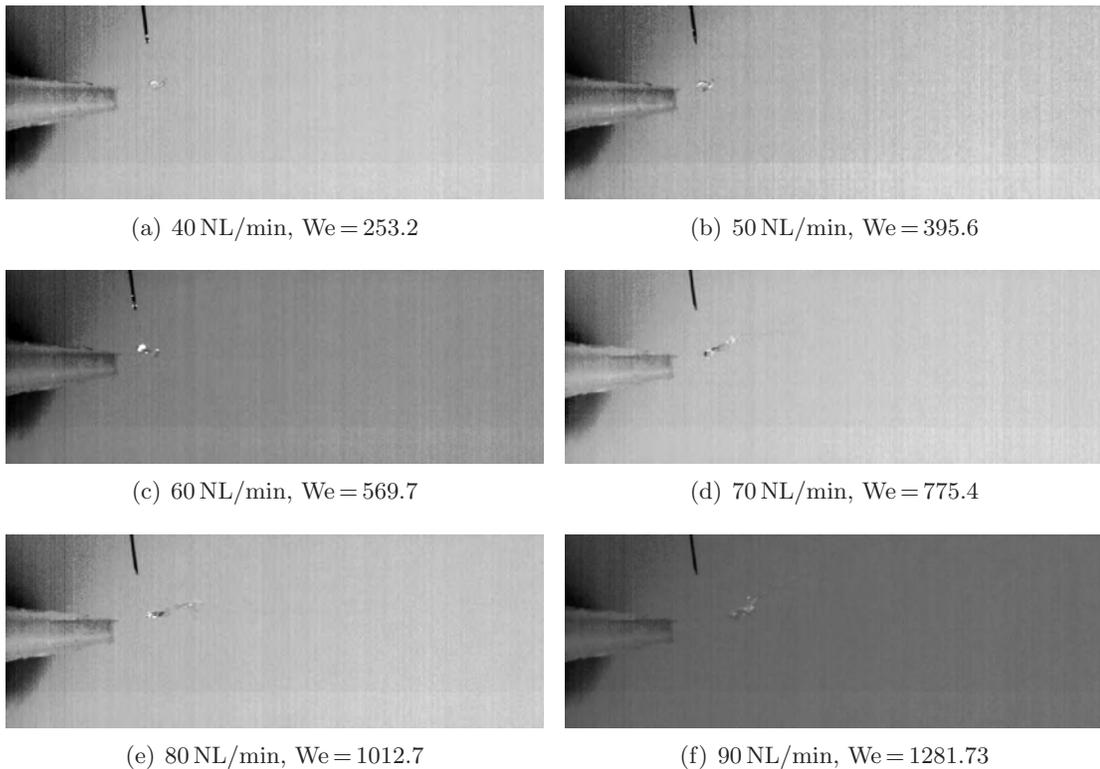


Abbildung 7.35: Zerfall von Glycerin (99 %)

Taschenzerfall gefunden, was auf das geringe Verhältnis von Luft- und Tropfendurchmesser bzw. die hohen viskosen Kräfte zurückzuführen ist. Zwischen der Kurve der ersten und zweiten Kritikalität führen die Normalkräfte erstens zur Verformung des Tropfens und bei höheren Weber-Zahlen zum Zusammenklappen von Ober- und Unterseite, was den Zerfall zusätzlich verhindert. In Abbildung 7.10 werden für die erhöhte Ohnesorge-Zahl bereits andere Werte für den Übergang zwischen den Zerfallsregimen angegeben. Die Kurve der ersten Kritikalität prognostiziert den richtigen Verlauf, jedoch treten Scherkräfte, die den Tropfen bereits im Strahl zerfallen lassen könnten, bis zum Volumenstrom von 90 NL/min nicht auf. Vergleicht man den Zerfall mit der 96 %-igen Glycerinmischung bei 80 NL/min, so kann vermutet werden, dass der Zerfall der 99 %-igen Glycerinmischung in Tochtertropfen innerhalb der Scherzone bereits bei einem Volumenstrom von 100 NL/min auftreten würde. Auch dieser Wert ist wiederum niedriger als der durch die zweite Kritikalität prognostizierte Wert. Der Wert 100 NL/min ist im Vergleich zu Wasser und Ethanol (20-25 NL/min) bzw. Paraffinöl (40 NL/min) aufgrund der viskosen Kräfte eindeutig erhöht.

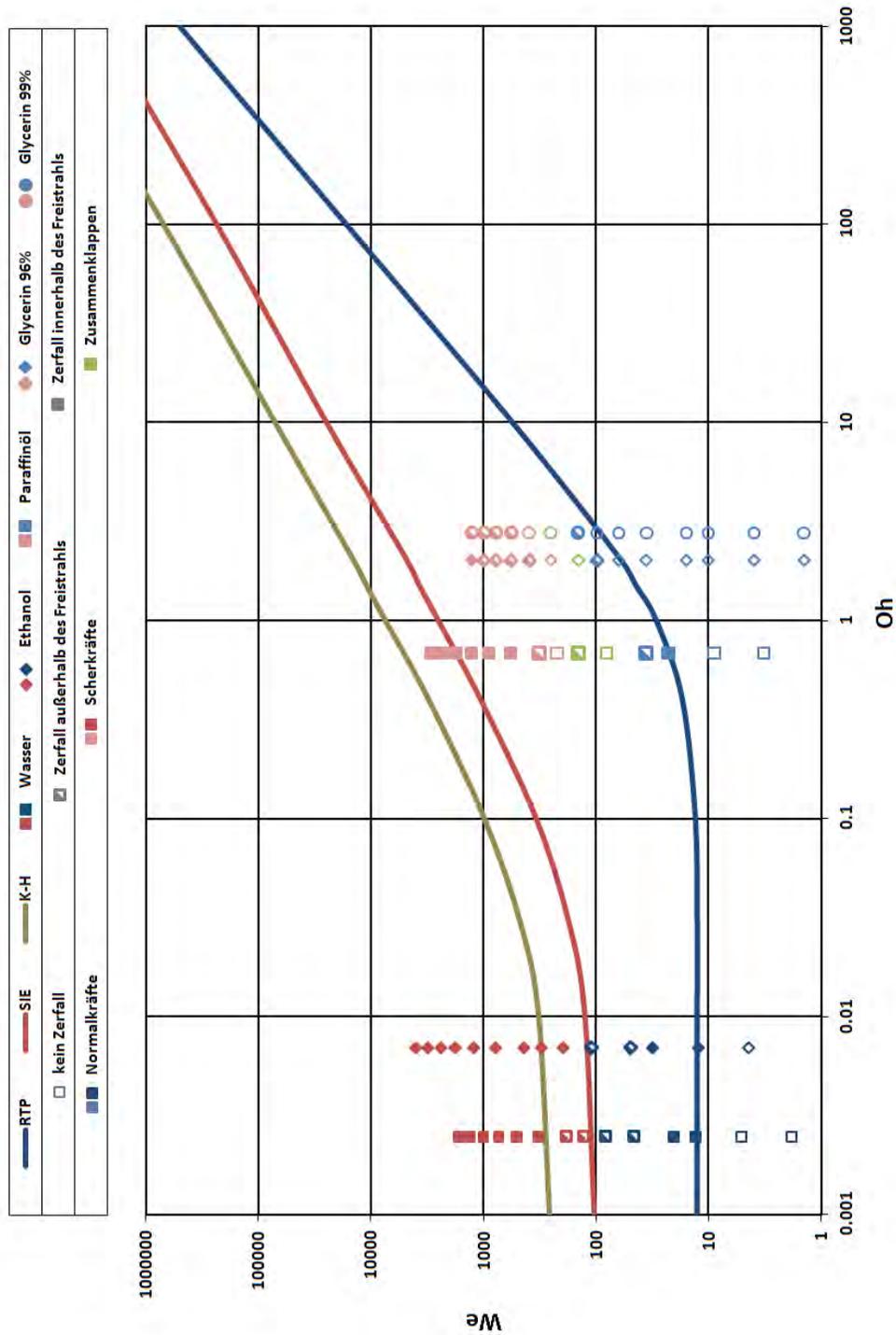


Abbildung 7.36: Oh-We Diagramm der Messungen mit Wasser, Ethanol, Paraffinöl sowie Glycerin (96 und 99%-ig), offene Punkte - kein Zerfall, halb gefüllte Punkte - Zerfall außerhalb des Freistrahls, gefüllte Punkte - Zerfall im Freistrahls (Kern oder Scherzone), blaue Punkte - Prozesse durch Normalkräfte, rote Punkte - Prozesse durch Scherkräfte

7.4.2 Schlussfolgerungen aus den Experimenten

Anhand der experimentellen Ergebnisse zeigt sich, dass die Übergangsbereiche im niederviskosen Bereich für den Zerfall des Tropfens in einer asymmetrischen Anströmung mit den Bereichen in einer gleichmäßigen Umströmung relativ gut übereinstimmen. Sobald viskose Kräfte im Zerfallsprozess ausschlaggebend werden, verschieben sich die Übergangsbereiche. Diese Verschiebung ist bei den beiden Anströmungsvarianten unterschiedlich. Dies wird dadurch bedingt, dass in einer asymmetrischen Strömung immer ein Geschwindigkeitsgradient und damit zusätzliche Scherkräfte existieren.

Die erste Kritikalität wird durch die Asymmetrie der Strömung nicht gestört. Dies ist zu erwarten, da in dem Bereich weder die Scherspannungen, verursacht durch den Abfall von der Gasgeschwindigkeit auf die Oberflächengeschwindigkeit der Flüssigkeit (siehe dazu Kapitel 7.4.1.1 sowie Abbildungen 7.12 und 6.10), noch durch jene in der Scherzone des Freistrahls hoch genug sind, um die Oberflächenkräften sowie die viskosen Kräften aufzubrechen. Hier wirken nur normale Kräfte, die zu den Instabilitäten führen, welche den Zerfall einleiten.

Die zweite Kritikalität wird bei der asymmetrischen Anströmung hingegen verschoben. Um einen Vergleich mit dem aus der gleichmäßigen Umströmung bekannten SIE Bereich durchführen zu können, muss der Zerfall der Flüssigkeit in Tochtertropfen innerhalb der Scherzone herangezogen werden. In Abbildung 7.37 ist der Verlauf dieser neuen Kurve für *asymmetric-shear-induced-entrainment* ASIE zu sehen. Durch die zusätzliche Scherzone im Freistrahls wird diese zu niedrigeren Weber-Zahlen hin verschoben. Jedoch strebt diese gegen den gleichen Punkt für $Oh \geq 1000$. Diese Kurve wird für unterschiedliche Scherzonen unterschiedlich ausfallen, aber eine Verschiebung wird in jedem Fall auftreten.

Im niederviskosen Bereich scheinen die Scherkräfte bedingt durch den Geschwindigkeitsabfall Luft-Flüssigkeitsoberfläche (ähnlich der gleichmäßigen Umströmung) bei niedrigeren Weber-Zahlen stark genug zu sein, um SIE einzuleiten. Hingegen sind diese Scherkräfte aufgrund der höheren Viskosität erst bei größeren Weber-Zahlen ausschlaggebend und im hochviskosen Bereich leiten die Scherkräfte bedingt durch die zusätzliche Scherzone des Freistrahls SIE noch vor den Scherkräften 'Luft-Flüssigkeitsoberfläche' ein.

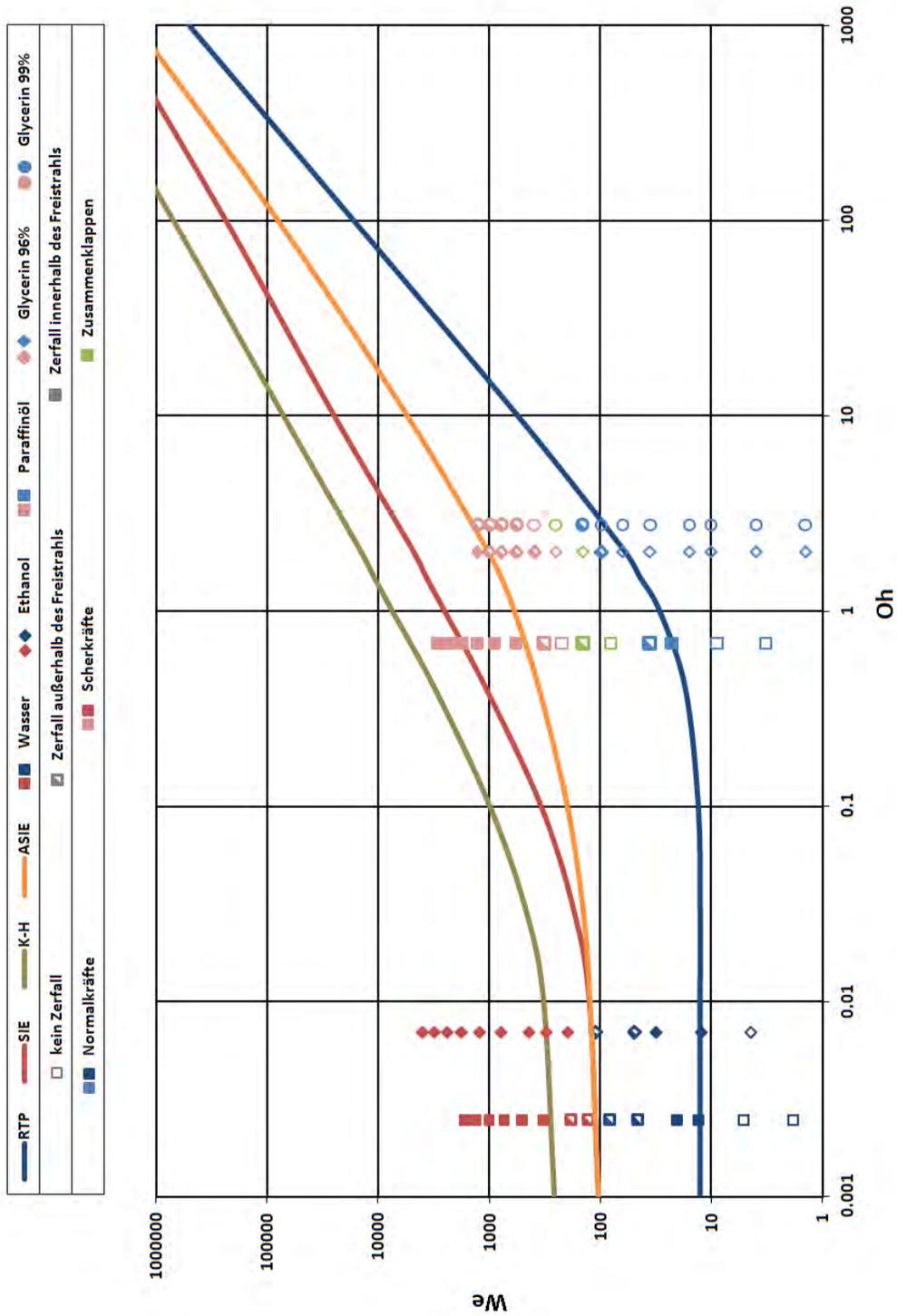


Abbildung 7.37: Oh - We Diagramm mit den Messungen sowie der Kurve für die zweite Kritikalität im asymmetrischen Fall

7.5 Interpretation des Zerstäubungsprozesses im Hochofen

In diesem Kapitel sollen die Ergebnisse und die Erfahrungen aus den vorhergehenden Kapiteln für eine kurze Interpretation des Zerstäubungsprozesses in einem Hochofen benutzt werden. Dazu werden auch die Ergebnisse, gewonnen an einer skalierten Laboranlage, herangezogen.

7.5.1 Laboranlage

Bei der Laboranlage handelt es sich um ein Kaltmodell. Diese wurde in (Zauner, 2010) entworfen und erste Ergebnisse von PIV-Messungen wurden in der selben Arbeit gezeigt. In (Kirchbacher, 2010) wurden weitere Ergebnisse aus Messungen der Laboranlage von Tropfengrößenverteilungen zusammengefasst. In (Castaño Martínez, 2012) wird die Interpretation der Zerstäubung mittels CFD gezeigt.

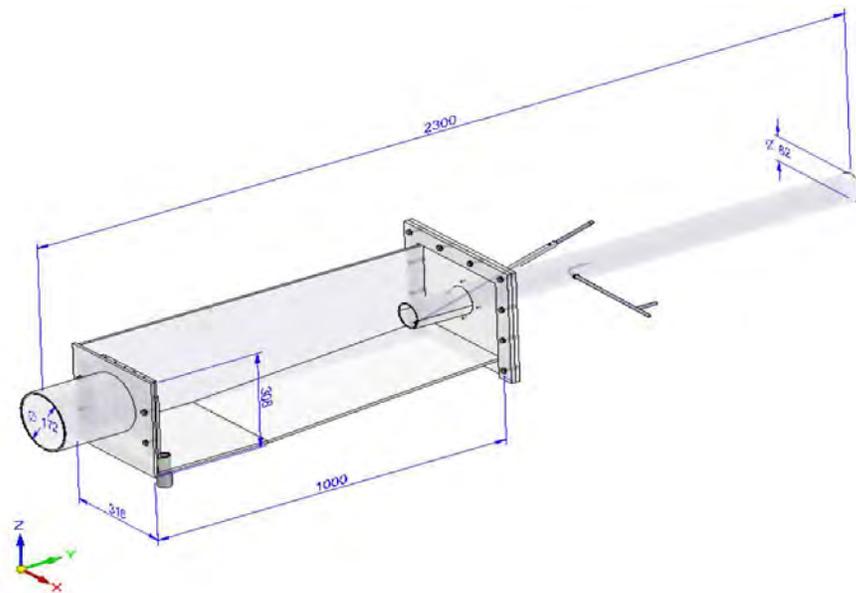


Abbildung 7.38: CAD-Modell der Laboranlage

Dieses Kaltmodell der Zerstäubung im Hochofen wurde im Maßstab 1:2 angefertigt (siehe Abbildung 7.38). Für die optischen Aufnahmen des Tropfenzерfallprozesses wurde die Laboranlage aus Plexiglas gefertigt. Die Abmessungen der Anlage sollen die Größenordnungen der Raceway (siehe dazu Kapitel 3.1.2) im Hochofen abdecken.

Dabei wird die Luft mit einem Gebläse durch das Volumen gesaugt. Das hier untersuchte Paraffinöl wird durch eine schräg eingeführte Lanze in das Volumen gepumpt, wobei auch eine Mantelluftströmung eingeschaltet werden kann (siehe Abbildung 7.38 und 7.39). In diesem Kapitel sollen drei Luftanströmgeschwindigkeiten von 80 m/s,

60 m/s sowie 35 m/s untersucht werden.

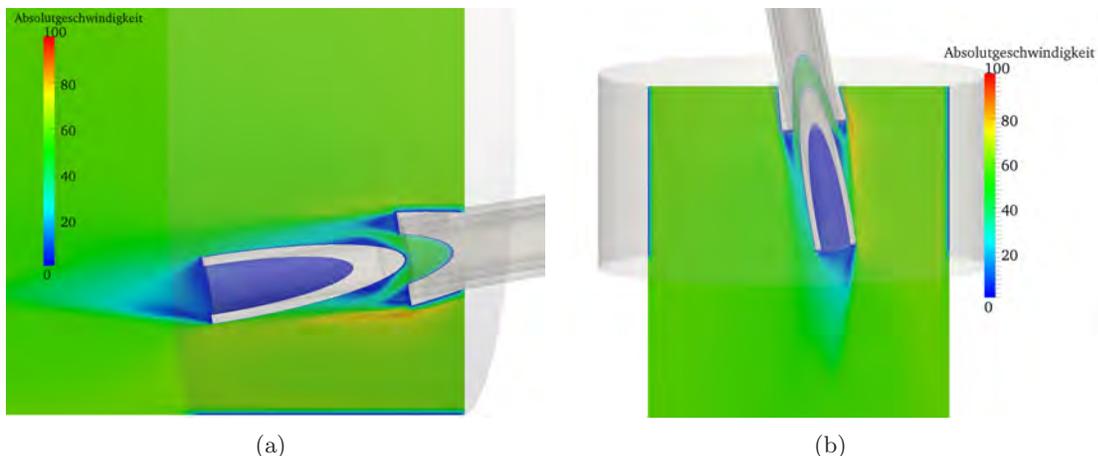


Abbildung 7.39: Geschwindigkeitsverteilung der einphasigen Luftströmung um die Lanze für den Fall mit ≈ 60 m/s aus (Castaño Martínez, 2012)

In Abbildung 7.39 ist die Verteilung der Absolutgeschwindigkeit um die Lanze bei der einphasigen Gasströmung dargestellt. Dabei ist eindeutig zu erkennen, dass die geneigte Position der Lanze einen Geschwindigkeitsschatten wirft und damit eine klar definierte Scherzone beim Auslass der Lanze erzeugt. Dadurch sind in die Analyse dieser Art der Zerstäubung die Erfahrungen aus den Untersuchungen des asymmetrischen Zerfalls von Einzeltropfen einzubinden.

In Abbildung 7.40 bildet sich im Fall der mittleren Anströmgeschwindigkeit von 60 m/s eine Welle direkt hinter dem Auslass der Lanze, die aufgrund von parallelen Scherkräften auf der Flüssigkeitsoberfläche entsteht. Der Flüssigkeitsfilm wird mitgerissen und direkt in der Scherzone in Tochtertropfen zerstäubt. Dies wird im Fall der langsamen Anströmgeschwindigkeit von 35 m/s nicht gefunden (siehe Abbildung 7.41).

In den Abbildungen 7.42 und 7.43 sind mehrere Momentaufnahmen der Zerstäubung dargestellt. Dabei reißt die Luftströmung am Ende der Scherzone (siehe Abbildung 7.39 (a)) auf der Unterseite der Flüssigkeit ein Loch. Dieses Loch wird aufgeblasen, bis Normal- und Scherkräfte in einer gleichmäßigen Umströmung zum Zerfall in Tochtertropfen führen.

Für diese Einstellungen kann man den groben Zerfallsbereich im Oh-We Diagramm angeben. Die dazu benötigten Durchmesser sind der Austrittsdurchmesser der Öllanze (0,008 m, Ausgangszustand für den Zerfall), die Hälfte des Austrittsdurchmessers der Öllanze, da die Dicke des Flüssigkeitsstrahls zwischen diesen beiden Werten schwankt, und der Sauterdurchmesser der Tochtertropfen (Endzustand). Dabei beschreibt dieser das Verhältnis des Gesamtvolumens aller untersuchten Tochtertropfen zur Gesamt-

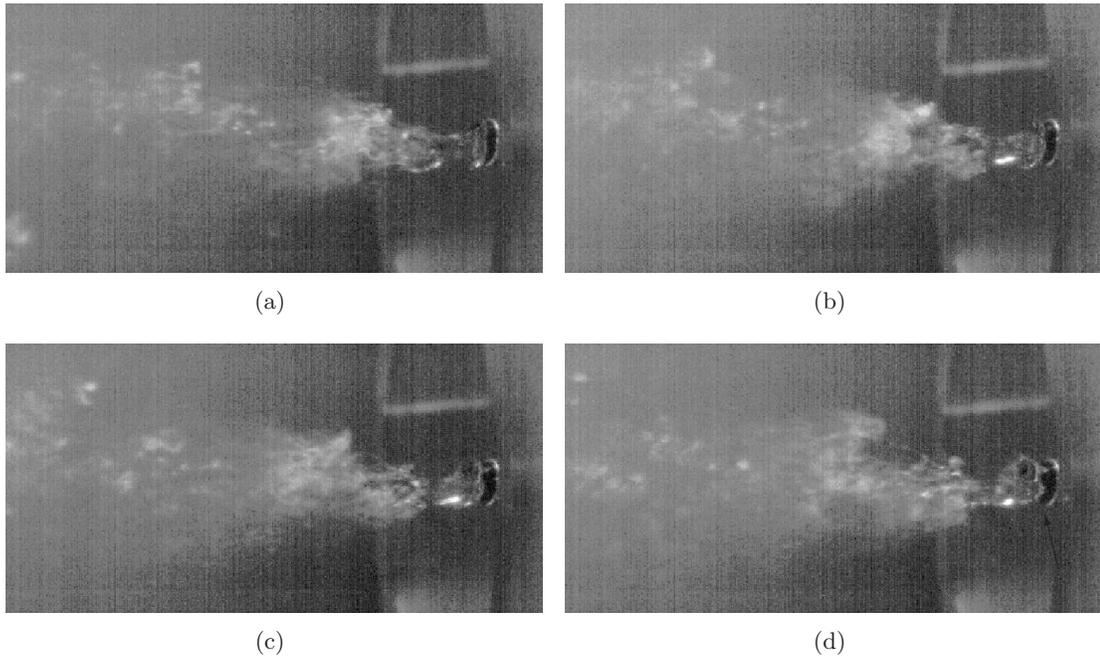


Abbildung 7.40: Mitreißen während der Zerstäubung von Paraffinöl direkt hinter dem Auslass der Lanze bei einer Anströmgeschwindigkeit von 60 m/s

oberfläche aller Tropfen. Der Sauterdurchmesser wurde bereits in (Kirchbacher, 2010) zu $\approx 200 \mu\text{m}$ bestimmt. Dieser Wert wurde mit geringen Abweichungen für alle Anströmgeschwindigkeiten gefunden.

Damit ergibt sich z.B. im Fall 60 m/s ein Weber-Zahl Intervall von 393-785 sowie ein Ohnesorge-Zahl Intervall von 0.37-0.53 für den Ausgangszustand und eine 'Sauter' Weber-Zahl von 26. Die 'Sauter' Ohnesorge-Zahl liegt bei 2.1 für die Tochtertropfen. Die Werte für alle drei Fälle sind in Tabelle 7.3 zu finden.

Tabelle 7.3: Weber- und Ohnesorge-Zahlen

| Fall | $We(d_{\dot{o}l})$ | $We(d_{\dot{o}l}/2)$ | $We(d_S)$ | $Oh(d_{\dot{o}l})$ | $Oh(d_{\dot{o}l}/2)$ | $Oh(d_S)$ |
|------|--------------------|----------------------|-----------|--------------------|----------------------|-----------|
| 80 | 1396 | 698 | 47 | 0.37 | 0.53 | 2.1 |
| 60 | 785 | 393 | 26 | 0.37 | 0.53 | 2.1 |
| 35 | 267 | 134 | 9 | 0.37 | 0.53 | 2.1 |

In Abbildung 7.44 sind drei Anfangszustandsquadrate im Oh-We Diagramm dargestellt. Dabei gilt das durch die roten Kreuze definierte Quadrat den Zerfall bei einer Luftströmung mit einer mittleren Anströmgeschwindigkeit von 80 m/s. Die grünen Kreuze definieren einen Anfangsbereich mit einer Luftgeschwindigkeit von 60 m/s und die blauen Kreuze definieren einen Anfangszustand mit einer Geschwindigkeit von 35 m/s. Die Dreiecke definieren die Endzustände der drei Fälle.

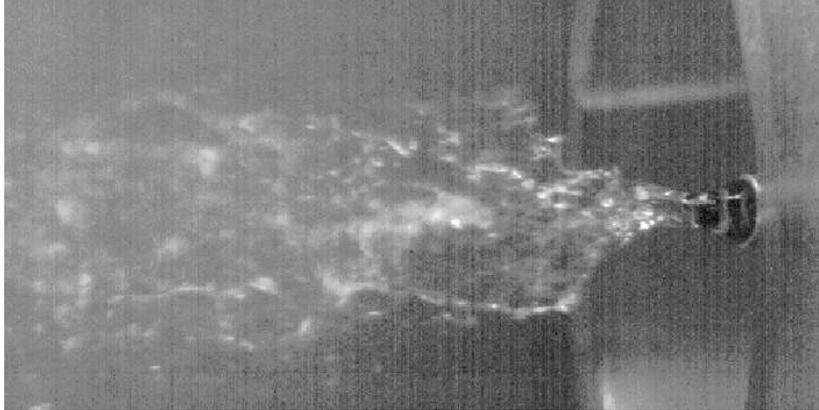


Abbildung 7.41: Kein Mitreißen während der Zerstäubung von Paraffinöl direkt hinter dem Auslass der Lanze bei einer Anströmgeschwindigkeit von 35 m/s

Es zeigt sich, dass das Anfangszustandsquadrat im Oh-We Diagramm bei der höchsten Geschwindigkeit einen Bereich abdeckt, der sowohl durch Scherkräfte als auch durch Normalkräfte dominiert ist (laut Kritikalitäten mit gleichmäßiger Umströmung). Bei der zweiten Geschwindigkeit liegt das Quadrat im RTP Bereich, wenn man die Kritikalitäten der gleichmäßigen Umströmung heranzieht. Jedoch liegt das Quadrat noch im SIE Bereich, sofern die Kritikalität der ASIE herangezogen wird. Bei den niedrigsten Geschwindigkeit liegt der Anfangszustand bereits vollständig im RTP Bereich (gleichmäßige und asymmetrische Anströmung).

Dies erklärt, warum bei der geringsten Luftgeschwindigkeit kein Mitreißen an der Oberfläche des Flüssigkeitsstrahls gefunden wird (siehe Abbildung 7.41). Bei der Geschwindigkeit von 60 m/s ist die Weber-Zahl bereits hoch genug, um das scherratenbedingte Mitreißen einzuleiten (nur für ASIE!, siehe Abbildung 7.40). Währenddessen findet man das Mitreißen von Tropfenschwärmen durch gleichmäßige Umströmung bei beiden Geschwindigkeiten.

Der Endzustand (Sauterzustand) befindet sich im Bereich unterhalb der ersten Kritikalität. Demzufolge können Tochtertropfen mit dem Sauterdurchmesser nicht mehr weiter zerfallen. Dies ergibt einen kleinsten möglichen Durchmesserbereich. Bei niedriger Viskosität würde bei diesen Werten noch Zerfall stattfinden, jedoch wirken die viskosen Kräfte des Paraffinöls dem Zerfall entgegen. Anhand der Ergebnisse zeigt sich die Notwendigkeit, die Verschiebung der Übergangskurven für die Zerstäubung von Paraffinöl zu berücksichtigen. Dies ermöglicht, dass Phänomene ausreichend beschrieben werden können.

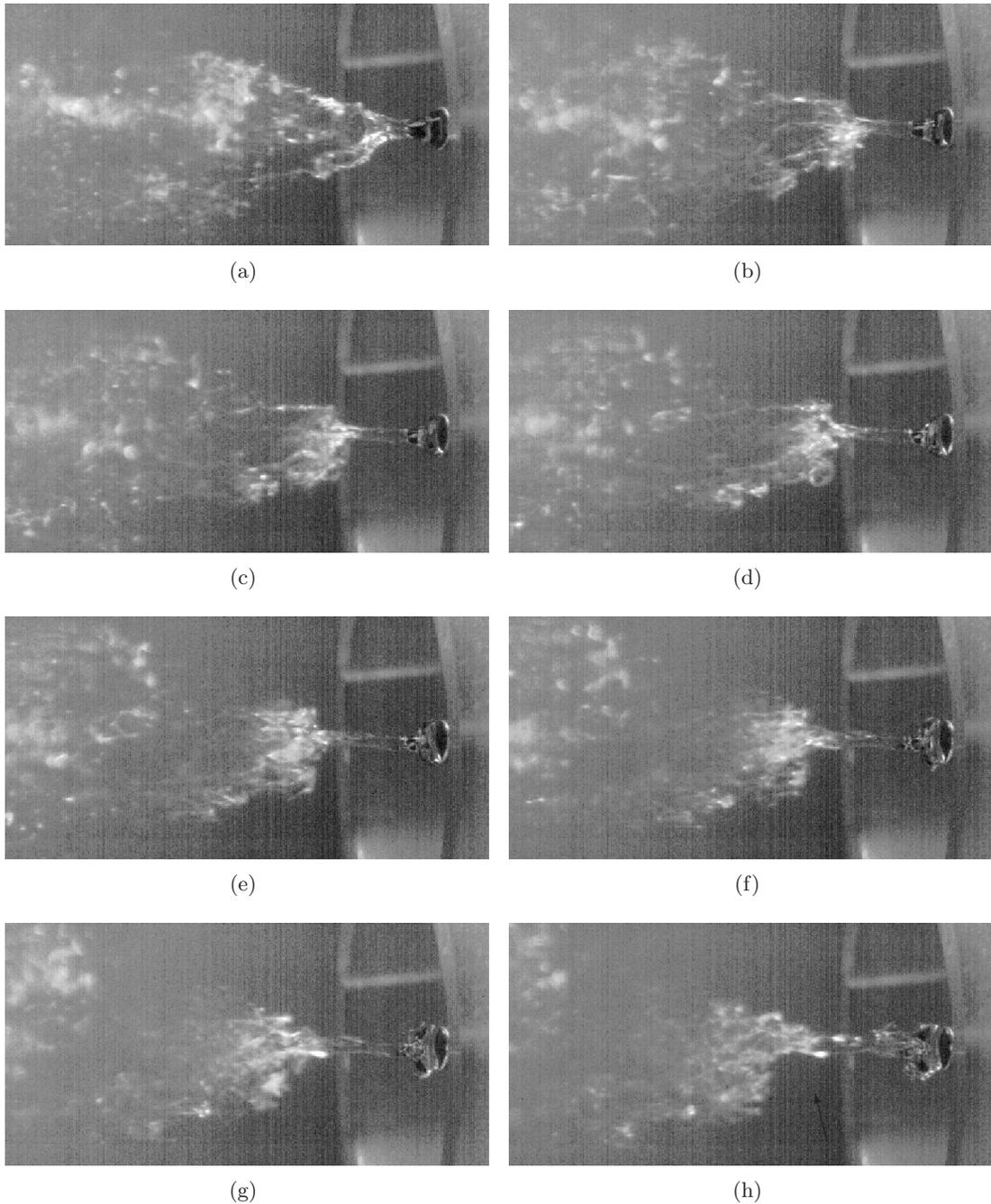


Abbildung 7.42: Schwarmbildung während der Zerstäubung von Paraffinöl bei einer Anströmgeschwindigkeit von 35 m/s

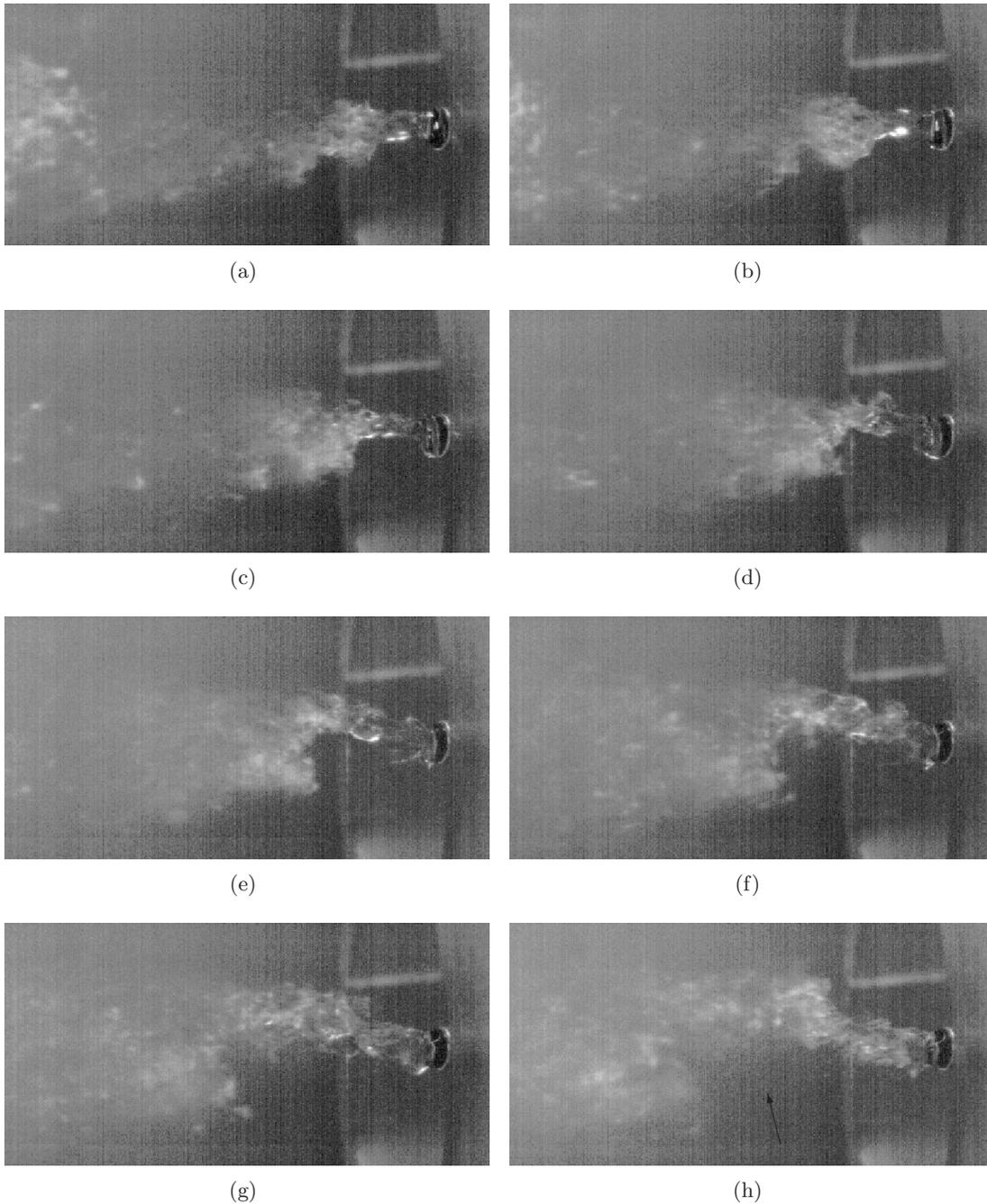


Abbildung 7.43: Schwarmbildung während der Zerstäubung von Paraffinöl bei einer Anströmgeschwindigkeit von 60 m/s

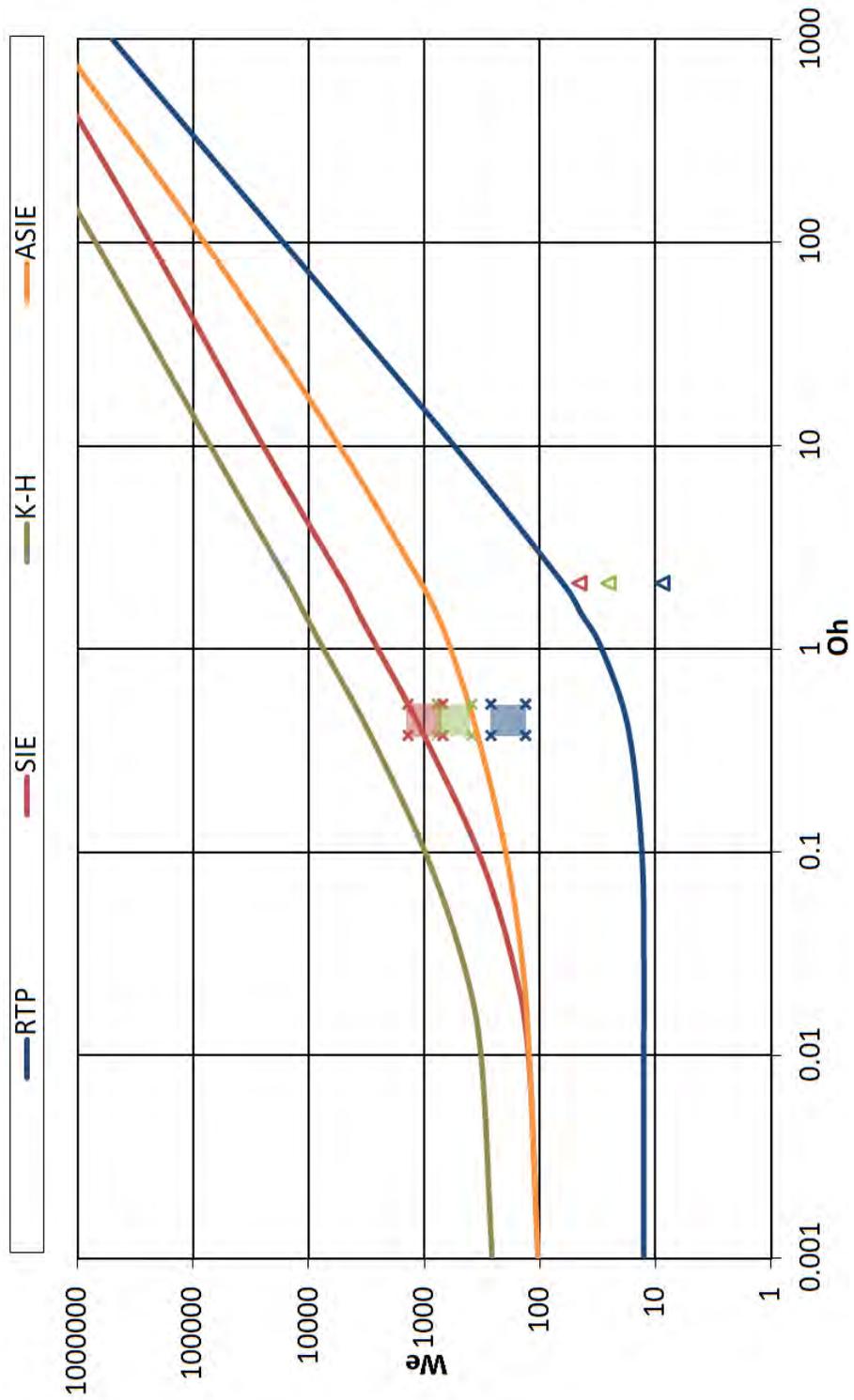


Abbildung 7.44: Ausgangs- und Endzustand der Zerstäubung im Oh-We Diagramm

7.5.2 Auswirkungen auf die Zerstäubung

Im Hochofen wird nach einer gewissen Entfernung von der Lanze ein definierter Zustand benötigt, bei welchem man sagen kann, dass ab diesem Punkt kein Zerfall stattfindet und die dort auftretenden Öltropfen nur noch durch Verbrennung verändert werden.

Für möglichst kleine Tochtertröpfen werden hohe Weber-Zahlen (d.h. hohe Geschwindigkeiten) bzw. eine starke zusätzliche Scherzone benötigt. Die Anzahl an Öllanzen erhöht die Anzahl der Scherzonen und damit auch das von diesen aufgenommene Volumen. Dies kann dazu führen, dass die Flüssigkeit eine kürzere Länge für die Zerstäubung braucht (vergleiche dazu 3.1.2 sowie (Paloposki und Hakala, 1996)). Weitere Interpretationen sind aus den Arbeiten (Hársfalvi, 2013; Kiss, 2013) zu entnehmen.

7.6 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde der Zerfall von Flüssigkeitstropfen in einer asymmetrischen Strömung experimentell und simulativ untersucht. Simulative und experimentelle Voruntersuchungen des Zerstäubungsprozesses an einer Laboranlage, welche die Raceway eines Hochofens modellieren soll, zeigten, dass man die Problemstellung von einem n-Tropfen-System auf ein Eintropfen-System reduzieren muss, um die Vorgänge im Detail verstehen zu können. Als Vergleich wurden ebenfalls die Übergangskurven der einzelnen Zerfallsphänomene aus der Literatur herangezogen. Diese wurden jedoch für eine gleichmäßige Umströmung des Tropfen aufgestellt. Unterschiede zur asymmetrischen Anströmung sollten erarbeitet werden.

Im ersten Schritt wurde die einphasige Gasströmung untersucht. Experimentell wurde die horizontale Symmetrieebene der verwendeten Luftpüse bei drei unterschiedlichen Luftvolumenströmen punktuell vermessen. In den Simulationen wurde einer dieser Volumenströme simuliert und mit dem Experiment verglichen. Es wurde eine gute Übereinstimmung gefunden, Abweichungen wurden auf diverse Messfehler zurückgeführt. Dabei wurde gefunden, dass ein Bereich direkt hinter dem Auslass der Düse existiert, wo sich die Geschwindigkeitsverteilung des austretenden Freistrahls nur in geringen Mengen verändert. Damit kann dieser Bereich in den Tropfenzerfallsmessungen verwendet werden, um definierte Bedingungen zu gewährleisten.

Insgesamt wurden Experimente mit fünf Flüssigkeiten unterschiedlicher Viskosität bei 14 unterschiedlichen Luftvolumenströmen durchgeführt. Von diesen 70 Versuchen wurden vier in CFD-Simulationen im Detail analysiert. Dabei wurde gesehen, dass für niederviskose Flüssigkeiten (hier Ethanol) die beiden Simulationen gut mit den Ergebnissen der Experimente übereinstimmen. Im Vergleich zur Literatur wird die Art des Zerfalls in beiden Untersuchungen richtig vorhergesagt. Bei höherer Viskosität (hier

Glycerin) stimmten Simulationen und Experiment ebenfalls überein. Jedoch wurde eine Abweichung zur Vorhersage des dominierenden Phänomens zur Literatur gefunden.

Mit den 70 Experimenten wurden sogar die Grenzbereiche zwischen den einzelnen Zerfallsregimen von sowohl nieder- als auch hochviskosen Flüssigkeiten abgedeckt. Für niedrigere Ohnesorge-Zahlen wurde sogar in den Übergangsbereichen eine gute Übereinstimmung der experimentellen Ergebnisse in dieser Arbeit mit den Literaturwerten gefunden. Bei hohen Viskositätswerten stellt sich eine Abweichung der zweiten Kritikalität ein, da die zusätzliche Scherzone in einer asymmetrischen Anströmung bereits bei niedrigeren Geschwindigkeiten Scherkräfte einführt. Es wurde eine neue Kurve für die zweite Kritikalität gefunden, die für Zerstäubungsprozesse herangezogen werden kann.

Im Anschluss wurde kurz versucht, die Erkenntnisse für den Zerstäubungsprozess anzuwenden. Dabei wurde im Experiment scherratenbedingtes Mitreißen für eine bestimmte Anströmgeschwindigkeit gefunden, das mit der Kurve der zweiten Kritikalität nach der Literatur nicht erklärt werden kann. Jedoch gibt die in dieser Arbeit aufgestellte Kurve eine Erklärung für dieses Phänomen.

Mit diesen Erfahrungen kann man zukünftige Untersuchungen der Zerstäubung im Hochofen in einem neuen Licht sehen und grundlegende physikalische Phänomene beim Zerfallsprozess besser verstehen.

Anwendung 3: Berührungsloser Bohrkopf für die geothermische Industrie

8.1 Motivation

Die Geothermie ist eine vielversprechende Alternative zu fossilen und nuklearen Brennstoffen, da weder CO₂ noch toxische oder radioaktive Stoffe für die erzeugte Energie verwendet werden. Die hier verwendete Energie entstammt aus Gestein oder Wasser im Erdboden, der durch den Wärmefluss aus dem flüssigen Kern des Planeten erhitzt wird. Die Schwierigkeit der Erschließung dieser Art von Energie ist, dass an den meisten Standorten die benötigten Temperaturen nur in weiten Tiefen aufzufinden sind. Um diese umweltfreundliche Technologie der Geomthermie auch an solchen Standorten anbieten zu können, muss ein einfaches und kostengünstiges Verfahren für die Bohrung entwickelt werden.

Bis zum heutigen Tag wird der Bohrprozess in harten Materialien in der Öl- bzw geothermischen Industrie mit mechanischen Mitteln erledigt, wobei man dazu spezielle Bohrköpfe aus extrem langlebigen Materialien verwendet. Der Einsatz solcher Bohrer ist ab einer bestimmten Bohrtiefe eine sehr herausfordernde Aufgabe, und die wirtschaftliche Verwendung des Bohrwerkzeugs in einer gewissen Tiefe ist der begrenzende Faktor der erreichbaren Tiefe eines solchen Bohrvorganges. Ein neues System und Verfahren wurde entwickelt (GeothermalAnywhere, 2012), das möglicherweise einen Paradigmenwechsel in der Geothermie und vielleicht sogar in der Ölindustrie einführen kann.

Es wurde ein besonderer Bohrkopf entwickelt, der nicht auf mechanischen Kontakt mit dem Gestein beruht. Stattdessen wird Wasser verwendet, das im Bohrkopf von einem gezündeten Kraftstoff beschleunigt wird, um Gestein außerhalb des Bohrkopfes zu zerstören. Die wiederholte Verwendung des Verfahrens soll eine kontinuierliche Abtragung vom Gestein gewährleisten. Die Verwendung von Wasser als Arbeitsstoff ist umweltfreundlich und trägt zu einem *'grünen'* Prozess bei.

In diesem Kapitel soll untersucht werden, ob ein einzelner Prozess des vorgeschlagenen Verfahrens theoretisch das Potenzial besitzt, hartes Gestein abtragen zu können. Dies wird durch Vergleich mit publizierten Ergebnissen abgeschätzt.

8.2 Prozesskonzept

Das vorgeschlagene Verfahren ist aus mehreren Gründen als Ganzes schwer zu modellieren. Einerseits beinhaltet die Deflagration komplizierte chemische Reaktionen, die zu einem Druckanstieg führen. Andererseits führt der Druckanstieg zu Druckwellen und zu einer kompressiblen Hochgeschwindigkeitsströmung, die zwei Phasen beinhaltet. Die Produktgase sollen dabei ihre kinetische Energie an die Flüssigphase möglichst effizient übertragen, die mit der erhaltenen kinetischen Energie Gestein abtragen soll. Die Kombination all dieser Prozesse ist in einer Simulation eine anspruchsvolle Aufgabe. Deswegen soll die Untersuchung durch Aufteilung der Vorgänge vereinfacht werden.

Für die simulative Analyse des Prozesses ist ein Solver erforderlich, der sowohl die kompressible gasförmige als auch die flüssige, ebenfalls kompressible Phase in einer mehrphasigen Strömung richtig behandeln kann. Der Solver aus Kapitel 5.2 wurde zu diesem Zweck eingesetzt. Aufgrund der Komplexität des Prozesses ist es wichtig, das Modell so weit zu vereinfachen, dass nur die dominanten Phänomene abgebildet werden.

Eine schematische Skizze eines Schnittes durch die dreidimensionale Geometrie ist Abbildung 8.1 zu entnehmen. Dabei werden Brennstoff und Oxidationsmittel in die Deflagrationskammer gebracht, wo die chemischen Reaktionen stattfinden. Dadurch soll abrupt ein Druckanstieg erreicht werden, dessen Zeitskala um mindestens eine Größenordnung schneller sein sollte als jene der anschließenden Strömung. Solch ein abrupter Druckanstieg erzeugt eine Schockwelle, die durch das ringzylinderförmige, axialsymmetrische Strömungsvolumen fließt und in der Impulsaustauschkammer den physikalischen Impuls und die kinetische Energie an die dort vorhandene flüssige Phase übertragen soll. Somit wird die Flüssigkeit (hier Wasser) in kleine Flüssigkeitspakete zerteilt und der wiederholte Prozess soll repetitiv solche Wasserpakete in Richtung des Auslasses und damit in Richtung des Gesteins befördern. Die Wasserpakete mit hoher kinetischer Energie sollen Gestein abtragen können. In diesem Kapitel wird untersucht, ob ein solches Wasserpaket rein theoretisch durch den Deflagrationsprozess genug kinetische Energie erhält, sodass Gestein damit abgetragen werden kann. Dazu wird ein einzelner Prozess und die kinetische Energie des Wasserpaketes am Auslass analysiert und mit der kinetischen Energie des Wassers in einem konventionellem Wasserschnidegerät verglichen (Chillman et al., 2010).

Um die Analyse des Prozesses weiter zu vereinfachen, wird die Simulation in zwei Teile gegliedert:

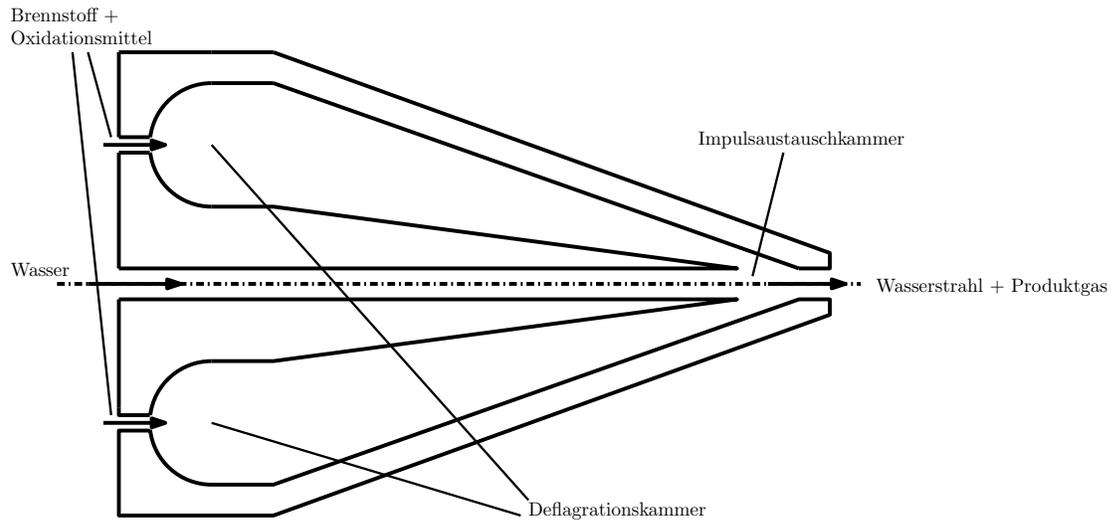


Abbildung 8.1: Schematische Skizze des Deflagrations- und Strömungsvolumens

- Deflagration: Hier wird eine 'Energiequelle' (gebräuchlicher Kraftstoff wie Benzin, explosive Flüssigkeit, etc.) gesucht, wobei dieser Stoff folgende Anforderungen erfüllen sollte: hohe Leistung, niedriger Zündverzug für kurze Wiederholungszeiten des repetitiven Prozesses, Stabilität bei Transport und Lagerung und kein Gefahrgut. Das Hauptziel dieses Teils der Untersuchung ist die Simulation der Deflagrationsvorgänge. Dabei muss ein belastbarer Mechanismus (Kinetik) erarbeitet werden. Damit sollen vertretbare Anfangsbedingungen für die kompressible Mehrphasensimulation errechnet werden. Dabei wird angenommen, dass die Deflagration im Vergleich zur Strömung unendlich schnell abläuft. Diese Annahme ist akzeptabel, wenn die Zeitskala der Strömung mindestens um eine Größenordnung langsamer ist als die Zeitskala der Deflagration. Diese Arbeit wurde von Voglsam durchgeführt (Nagy et al., 2012d; Voglsam, 2012). Aus diesem Grund wird hier nur auf die wesentlichen Ergebnisse eingegangen.
- Strömungssimulation (CFD): Hierbei sollen die Auswirkungen der Deflagration auf die Strömung der Produktgase und des Wassers simuliert sowie die Berechnung der Energie am Ausgang der Geometrie durchgeführt werden.

Durch die Trennung der Simulation kann eine angemessene Komplexität gewährleistet werden und die Ausführungszeit der Simulationen in realistischen Zeitskalen durchgeführt werden.

Zu diesem Zeitpunkt wird das Potenzial untersucht, der vorgeschlagenen Geometrie die benötigte kinetische Energie am Auslass in einem einzelnen Prozess aufbringen zu können. Der repetitive Prozess soll in einem zukünftigen Schritt analysiert werden.

8.3 Deflagrationssimulation

8.3.1 Kurze Beschreibung

Die Berechnungen wurden von Voglsam (Nagy et al., 2012d; Voglsam, 2012) durchgeführt. Um die optimale 'Energiequelle' zu finden, wurden verschiedene kinetische Mechanismen mehrerer Brennstoffe analysiert, wobei der Schwerpunkt auf dem Zündungsverhalten und auf der Nutzbarkeit des Mechanismus lag. Das beste Verhalten zeigten Mischungen von n-Heptan bzw. Iso-Oktan (Voglsam und Winter, 2012). Einer der größten Vorteile besteht darin, dass die Kinetik von Benzin (Curran et al., 1998) und somit die von Iso-Oktan und n-Heptan in der Literatur detailliert untersucht wurde.

Ein zusätzlicher Vorteil sind die sicherheitstechnischen sowie umweltbezogenen Eigenschaften des Kraftstoffs. Die Lagerung von Benzin ist unproblematisch und es entstehen keine hochgiftigen oder säurehaltigen Endprodukte bei den Reaktionen.

Für die beste Beschreibung der Deflagration ist eine Reihe von 3000 bis 4000 Reaktionen erforderlich, was eine sehr lange Rechenzeit benötigt. Daher ist es notwendig, die Verbrennungsmechanismen zu reduzieren (Lu und Law, 2008). Für diese Anwendung wurde ein stark reduzierter globaler Mechanismus (Voglsam und Winter, 2012) entwickelt. Dieser Mechanismus ist in der Lage, die Zündverzugszeiten und die Volums- bzw. Massenprozentage der wichtigsten Verbrennungsprodukte zu berechnen. Dies ist ausreichend, um Anfangsbedingungen für die Strömungssimulation zu liefern.

Dabei wurden folgende vereinfachende Annahmen getroffen:

- Die Deflagration wurde als ein isochorer Prozess modelliert. Als Reaktor für den Prozess wird ein geschlossener homogener Reaktor verwendet, wobei die Reaktorgröße gleich der durchschnittlichen Gitterzellengröße der CFD-Simulation in der Deflagrationskammer ist. Dadurch ist der Reaktor sehr viel kleiner als das Gesamtvolumen und alle Reaktoren zünden zum gleichen Zeitpunkt. Aufgrund dieser Annahmen erzeugt der gesamte Zündvorgang einen Druckanstieg während einer kurzen Zeitperiode. Der kleine Druckanstieg in der Vorzündphase wird ebenfalls vernachlässigt (siehe Kapitel 8.3.2).
- Für die Erzeugung einer Schockwelle mit hoher kinetischer Energie wird ein abrupter Druckanstieg beim Zündvorgang benötigt. Die Erzeugung des Drucksprungs erfolgt in einem Zeitintervall in der Größenordnung von etwa 10^{-5} s (siehe Abbildungen 8.2 und 8.3). Diese Zeitskala ist mindestens eine Größenordnung schneller als die Zeitskala der Strömung.
- Der Einfluss der Reaktoroberfläche auf die Reaktionen in der Gasphase wird nicht berücksichtigt.

- Während der kurzen Reaktionszeit findet kein Wärmeaustausch zwischen der Umgebung und dem Gas statt (adiabatisches Modell).
- Das Produktgas besteht aus ca. 99 % N₂, CO₂ und H₂O. Nur das Gemisch dieser Substanzen wird in der CFD-Simulation verwendet.
- Ein stöchiometrisches Kraftstoff-Luft-Verhältnis ist beim Start der Deflagration vorhanden.

Nähere Details sind der Publikation (Nagy et al., 2012d) zu entnehmen.

8.3.2 Anknüpfungspunkt Deflagration-Strömung

In Abbildungen 8.2 und 8.3 ist der Druckanstieg während des Zündvorgangs sichtbar. Der gesamte Prozess kann in vier Teilschritte unterteilt werden.

1. Reaktionsbeginn
2. Erste Zündhase
3. Vollzündphase
4. Nachzündphase

Phase 1 und 2 werden als die Vorzündphase definiert, Phase 4 als die Nachzündphase. Die ersten zwei Phasen sind bei hohen Starttemperaturen (≥ 900 K) nicht unterscheidbar. Man sieht, dass der größte Druckanstieg in Phase 3 stattfindet. Dieser Druckanstieg wird als Auslöser für die Schockwelle herangezogen. Die Anfangsbedingungen werden für die Strömungssimulation im gesamten Gasströmungsvolumen verwendet, wohingegen die Endbedingungen der Deflagration nur in der Deflagrationskammer benutzt werden.

Phase 3 wird wie in Abbildung 8.3 definiert. Dort kann man das Maximum von $\partial p/\partial t$ erkennen.

Die Grenzen von Phase 3 werden durch

$$\frac{\partial p}{\partial t}(\text{Grenze von Phase 3}) = \frac{1}{10} \frac{\partial p}{\partial t}(\text{Maximum}) \quad (8.3.1)$$

definiert. Dadurch liegen die Grenzen dort, wo $\partial p/\partial t$ auf 10% des Maximums fällt. Die zeitliche Größenordnung von Phase 3 liegt bei 10^{-5} s. Die Auswirkungen auf die Strömung in dieser Zeit werden vernachlässigt und die Zündung wird als unendlich schnell angenommen. Dies ist akzeptabel, da die Strömung in etwa $2 \cdot 10^{-4}$ s abläuft.

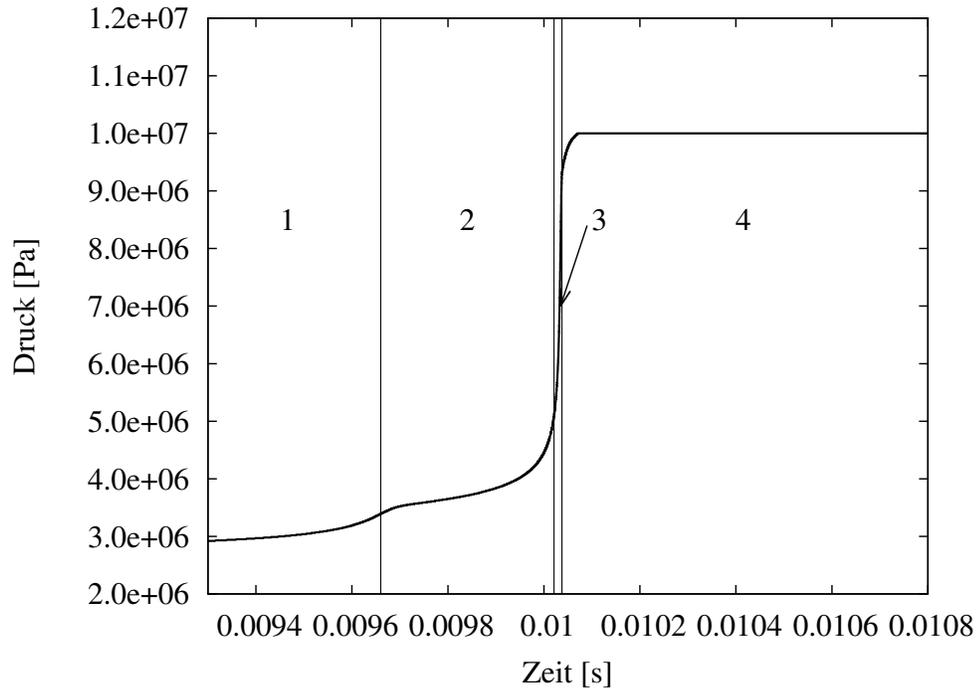


Abbildung 8.2: Zeitskala der Deflagration

8.3.3 Ergebnisse der Deflagrationssimulation

In den Tabellen 8.1 und 8.2 sind die Ergebnisse der Deflagrationssimulation, die für die anschließende CFD Simulation als Anfangsbedingungen dienen, sichtbar. Dabei sind die Ergebnisse nach Phase 3 angegeben (Temperatur, Druck, Dichte der Produktgas-mischung, spezifische Wärmekapazität, Volumsprozente der drei Hauptkomponenten, Massenprozent des Gasgemisches, dynamische Viskosität, Zeitskala von Phase 3).

Es wurden fünf Anfangszustände für die CFD Simulationen ausgewählt (einzelne Zeilen in den Tabellen 8.1 und 8.2). Damit deckt man einen Druckbereich von kleinen (1.6 MPa) bis hohen Drücken (10.1 MPa) ab. Es muss hinzugefügt werden, dass die Anfangsdrücke vor Phase 1 in der Deflagrationssimulation für die fünf Rechnungen unterschiedlich waren. Der Grund dafür war, dass man bei höheren Drücken (z.B. Zeile 4 und 5 in Tabellen 8.1 und 8.2) den Anfangsdruck anheben muss, damit die Zündung startet.

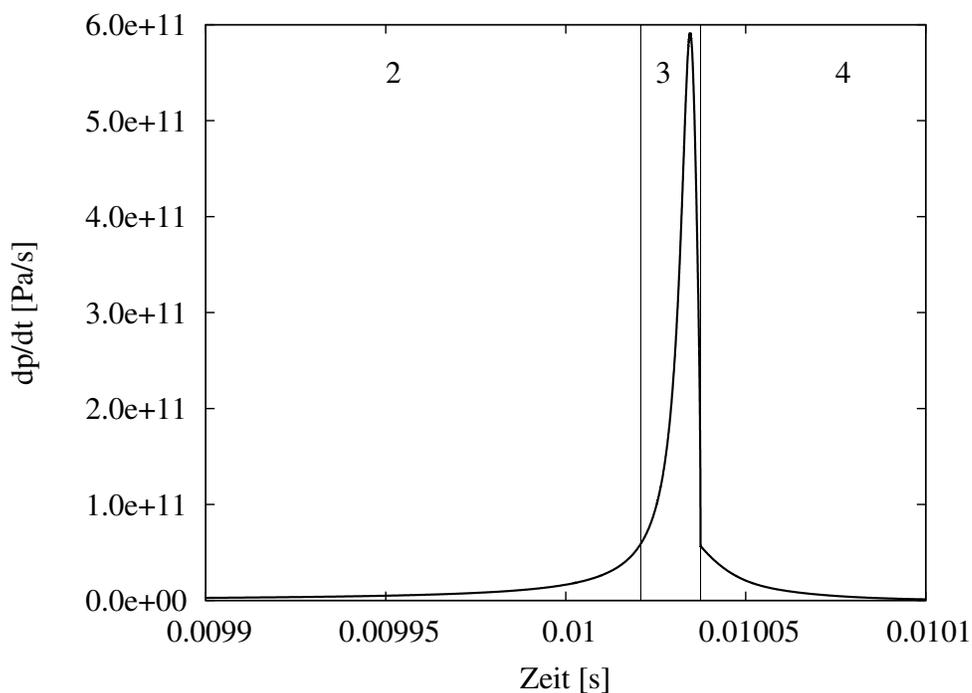


Abbildung 8.3: Detailausschnitt aus der Zeitskala der Deflagration, Definition von Phase 3

Tabelle 8.1: Ergebnisse der Deflagration, die als Anfangsbedingungen für die Strömungssimulation dienen (Teil 1)

| T_0 [K] | p_0 [Pa] | ρ_{Gas} [kg/m ³] | $c_{v,Gas}$ [J/(kg K)] | Y_{H_2O} [-] |
|--------------|---------------|--------------------------------------|---------------------------|-------------------|
| 2995 | 1640807 | 1.84 | 1184 | 0.12 |
| 2939 | 3994846 | 4.59 | 1186 | 0.13 |
| 3058 | 5004330 | 5.51 | 1188 | 0.12 |
| 2981 | 10103470 | 11.48 | 1189 | 0.13 |
| 3085 | 8399891 | 9.19 | 1190 | 0.13 |

Tabelle 8.2: Ergebnisse der Deflagration, die als Anfangsbedingungen für die Strömungssimulation dienen (Teil 2)

| Y_{N_2} [-] | Y_{CO_2} [-] | W_{Gas} [g/mol] | μ_{Gas} [kg/(m s)] | t_3 [s] |
|------------------|-------------------|----------------------|---------------------------|--------------|
| 0.73 | 0.08 | 25.98 | 8.15E-05 | 7.35E-5 |
| 0.73 | 0.09 | 26.73 | 8.22E-05 | 4.30E-5 |
| 0.73 | 0.08 | 26.39 | 8.27E-05 | 2.38E-5 |
| 0.74 | 0.09 | 27.02 | 8.39E-05 | 1.66E-5 |
| 0.73 | 0.09 | 26.57 | 8.51E-05 | 1.40E-5 |

8.4 Strömungssimulation

8.4.1 Vorbemerkung

Um eine Aussage treffen zu können, ob die vorgeschlagene Geometrie (siehe Abbildungen 8.1 und 8.4) das theoretische Potenzial hat, Gestein abzutragen, wird die kinetische Energie des Wasserpaketes für die fünf ausgewählten Anfangszustände mit der kinetischen Energie des Wassers eines Wasserschneidegerätes aus (Chillman et al., 2010) verglichen. In jener Arbeit wird eine spezifische kinetische Energie des Wassers mit 1516 MJ/m^3 angegeben. Dabei wird die Oberfläche einer Titan-Aluminium-Vanadium Legierung abgetragen. Dies stellt einen sehr strengen Benchmarkfall dar. Sind die Größenordnungen der spezifischen Energie des Wasserpaketes am Auslass der vorgeschlagenen Geometrie vergleichbar mit jenen aus (Chillman et al., 2010), kann gesagt werden, dass die vorgeschlagene Geometrie das Potenzial hat, die härtesten Gesteine abzutragen.

8.4.2 Strömungssimulationsergebnisse

In Abbildung 8.4 ist das Strömungsvolumen der untersuchten Geometrie des Bohrkopfes zu sehen. Im Allgemeinen besitzt das Volumen eine axiale Symmetrie. Abbildung 8.5 zeigt einen Schnitt durch die eine Hälfte des Strömungsvolumens. Die unterschiedlichen Zonen sind darin gekennzeichnet:

- Deflagrationszone: Hier werden die Ergebnisse der Deflagrationsrechnung eingesetzt (nach Phase 3).
- Gasströmungsvolumen: Hier breitet sich die Schockwelle aus. Hier werden die Anfangsbedingungen der Deflagrationsrechnung verwendet (Phase 1).
- Flüssigkeitsströmungsvolumen.
- Impulsaustauschkammer: Hier soll der Impuls bzw. die kinetische Energie der Produktgase an die Flüssigkeit übergeben werden.
- Umgebung

In der Simulation wurde die axiale Symmetrie insofern ausgenutzt, dass man einen 90° Ausschnitt des Volumens in Abbildung 8.4 simuliert hat. An den Seitenflächen wurden symmetrische Randbedingungen verwendet, da keine dominante tangentielle Komponente der Geschwindigkeit erwartet wird. Ungefähr 1600000 Zellen wurden als Rechengitter verwendet. Die Simulationen wurden für alle fünf Anfangszustände durchgeführt. Der Druckunterschied zwischen dem Druck in der Deflagrationszone und dem übrigen Strömungsvolumen bewirkt die Bewegung der Schockwelle. Die Abbildungen

8.6 (a) und (b) zeigen den Fall mit dem Anfangsdruck 8.4 MPa. Die flüssige Phase wurde in das Flüssigkeitsströmungsvolumen und in Teile der Mischkammer gepatcht. Die erzeugte Stoßwelle schneidet den unteren Teil des Wassers ab und beschleunigt diesen. Dabei überträgt das Gas die kinetische Energie und die Flüssigkeit, die dann theoretisch diese Energie hinter dem Auslass an das Gestein abgeben kann.

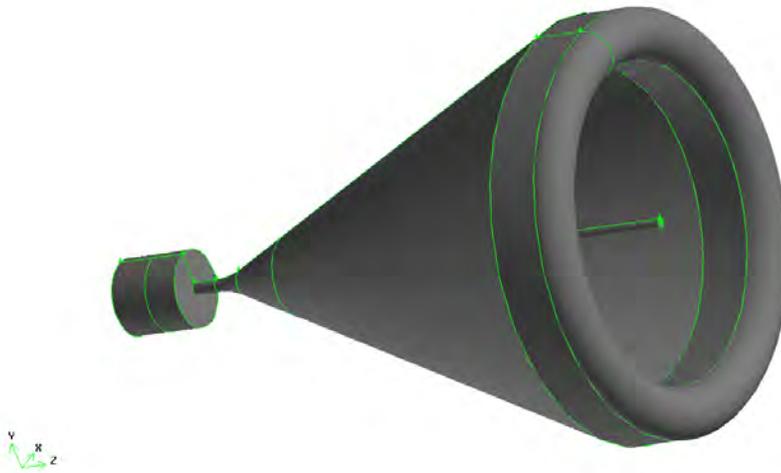


Abbildung 8.4: 360° Geometrie des Strömungsvolumens, 90° wurden simuliert

Aufgrund der unterschiedlichen Zeitskalen der Deflagrations- und Strömungsvorgänge ($\approx 2 \cdot 10^{-5}$ s und $\approx 2 \cdot 10^{-4}$ s), ist die Deflagration bereits nach dem ersten ausgewerteten Zeitschritt von $t = 1.1 \cdot 10^{-4}$ s (siehe Abbildung 8.6) der Strömungssimulation vernachlässigbar.

Abbildung 8.6 zeigt die Ausbreitung der Schockwelle in der axialsymmetrischen Geometrie, bevor diese auf das Wasser trifft. Man sieht, dass die Einengung der Geometrie die Geschwindigkeit zusätzlich erhöht. Die Wechselwirkung zwischen den beiden Phasen findet nach ca. $t = 2 \cdot 10^{-4}$ s statt, was gewährleistet, dass zu diesem Zeitpunkt die Deflagration schon bei Weitem abgeschlossen ist. Ebenfalls ist zu sehen, dass die Strömung eine Überschallströmung ist ($Ma \geq 1$).

In Abbildung 8.7 ist das bereits beschleunigte Wasser zu sehen. In der Mischkammer wird es in Richtung der Auslasses beschleunigt. Im Bild des Phasenanteils ist ein blauer Fleck zu sehen, wo Druck- und Temperaturwerte in Bereiche kommen, wo unter Umständen ein Phasenübergang stattfinden könnte. Dies wird in dem Modell jedoch vernachlässigt, da das Volumen dieses Bereiches im Vergleich zum gesamten Wasservolumen klein ist. In den nächsten Schritten könnte dieses Phänomen näher betrachtet werden.

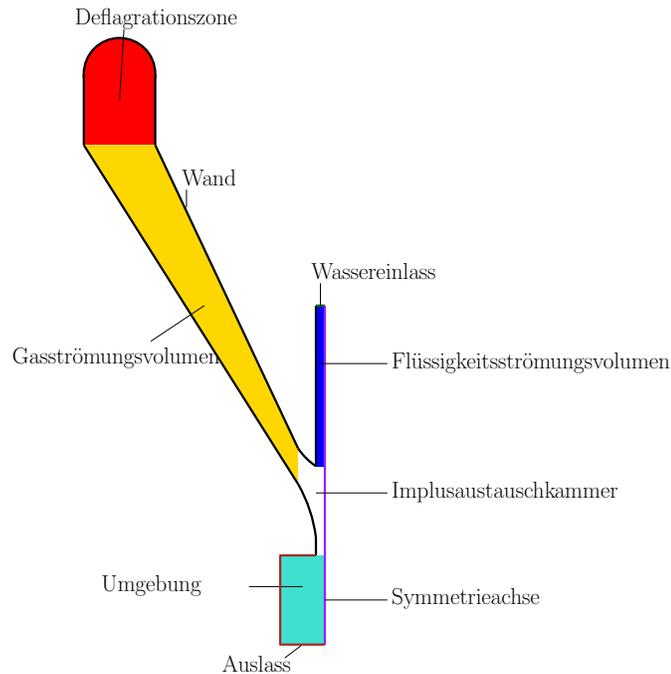


Abbildung 8.5: Schnitt durch die Geometrie

Um die Ergebnisse der fünf Simulationen mit (Chillman et al., 2010) zu vergleichen, muss man die höchste spezifische kinetische Energie der Flüssigkeit, die am Ausgang erreicht wird, auswerten. In Abbildung den Abbildungen 8.8 und 8.9 sieht man die radiale Verteilung der spezifischen kinetischen Energie $\rho u^2/2$. Dazu wird das Maximum des Wasserpaketes (auf der roten Ebene in Abbildung 8.7) über alle Zeiten gesucht und die räumliche Verteilung zu diesem Zeitpunkt analysiert. In Abbildung 8.9 und 8.10 werden die Ergebnisse auf dieser Fläche gezeigt. Die kinetische Energie hat eine radiale Verteilung (siehe Abbildung 8.9), die die Richtigkeit der Annahme der 90° Symmetrie und die Simulation von einem Viertel der gesamten Geometrie bestätigt.

Abbildungen 8.9 und 8.10 zeigen diese radiale Verteilung sowohl der spezifischen kinetischen Energie als auch der Geschwindigkeit (ausgewertet zu dem Zeitpunkt, als die maximalen spezifischen kinetischen Werte auftraten). Ein wichtiges Phänomen ist, dass bei hohen Anfangsdruckwerten (Fälle '8.4 MPa' und '10.1 MPa') bei ungefähr $r = 0.0012$ m ein lokales Maximum in sowohl der Geschwindigkeit als auch der spezifischen kinetischen Energie nahe der Wand entsteht. Dies ist aufgrund der Tatsache, dass bei so einem hohen Druckunterschied und den daraus resultierenden Geschwindigkeitswerten die Trägheit der flüssigen Phase eine Rolle spielt. Die gasförmige Phase muss seinen Weg zwischen der festen Wand und der Flüssigkeit zum Ausgang finden, und somit wird die Energie nicht gleichmäßig auf die flüssige Phase übertragen. Dieses Phänomen wird bei noch höheren Anfangsdruckwerten zur Verringerung der spezifis-

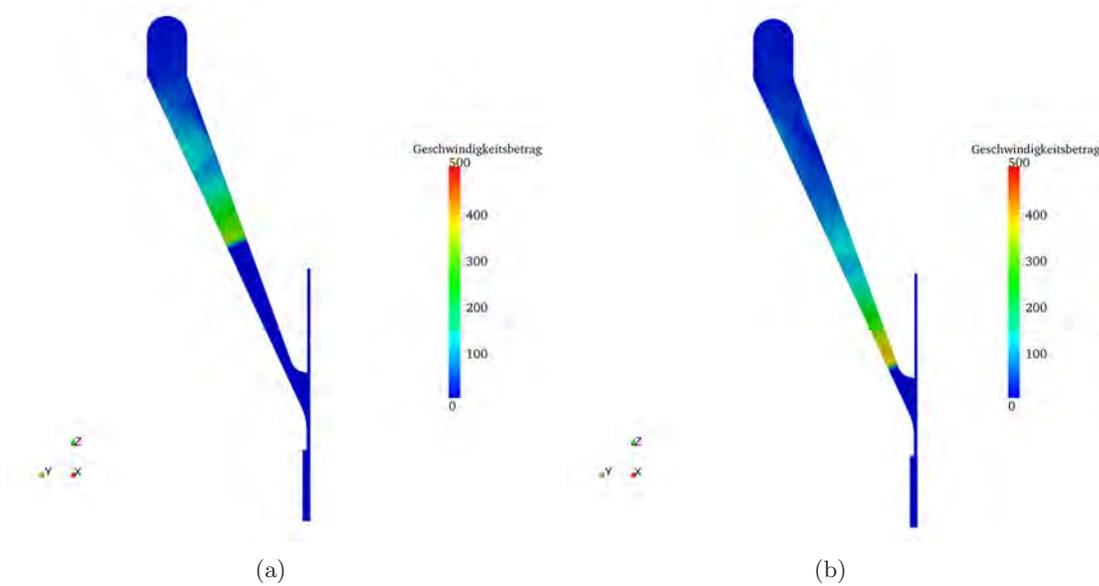


Abbildung 8.6: Geschwindigkeitsverteilung (in m/s) nach $t = 1.1 \cdot 10^{-4}$ s (a) und $t = 1.8 \cdot 10^{-4}$ s (b)

chen kinetischen Energie der flüssigen Phase am Ausgang verursachen, da die kinetische Energie noch ungleichmäßiger und noch uneffizienter an die Flüssigkeit weitergegeben werden kann. Es kann sogar zum völligen Durchbruch der Gasphase entlang der Wand kommen. Es besteht daher ein idealer Wert um ca. 10 MPa für das vorgeschlagene Verfahren.

Um die Simulationsergebnisse mit den Literaturwerten aus (Chillman et al., 2010) vergleichen zu können, müssen die spezifischen kinetischen Energiewerte über eine definierte Fläche integriert werden. Da aus (Chillman et al., 2010) nur ein konstanter Wert bekannt ist, wird dafür ein konstanter Verlauf der spezifischen kinetischen Energie angenommen. Der Durchmesser der hier untersuchten Geometrie beträgt 2.1 mm, wohingegen der Auslassdurchmesser in (Chillman et al., 2010) 0.254 mm ist. Dazu werden beide spezifischen kinetischen Energieverläufe über eine Kreisfläche mit einem Durchmesser von 6 mm integriert. Damit kann angegeben werden, wie viel Energie die beiden Geometrien auf die Fläche bringen können. Somit sind die Werte vergleichbar. Die über die Fläche integrierten spezifischen kinetischen Energiewerte für die fünf Fälle sind Tabelle 8.3 zu entnehmen.

Die integrierte spezifische kinetische Energie des Literaturwertes beträgt 77 J/m. Die spezifische kinetische Energie von 1516 MJ/m³ ist höher als der höchste Wert der spezifischen kinetischen Energie in der simulierten Geometrie. Aber die breitere Austrittsfläche der simulierten Geometrie ergibt insgesamt einen höheren Wert für die kinetische Energie über die Integrationsfläche. Wird für das Abtragen des Materials eine spezifische

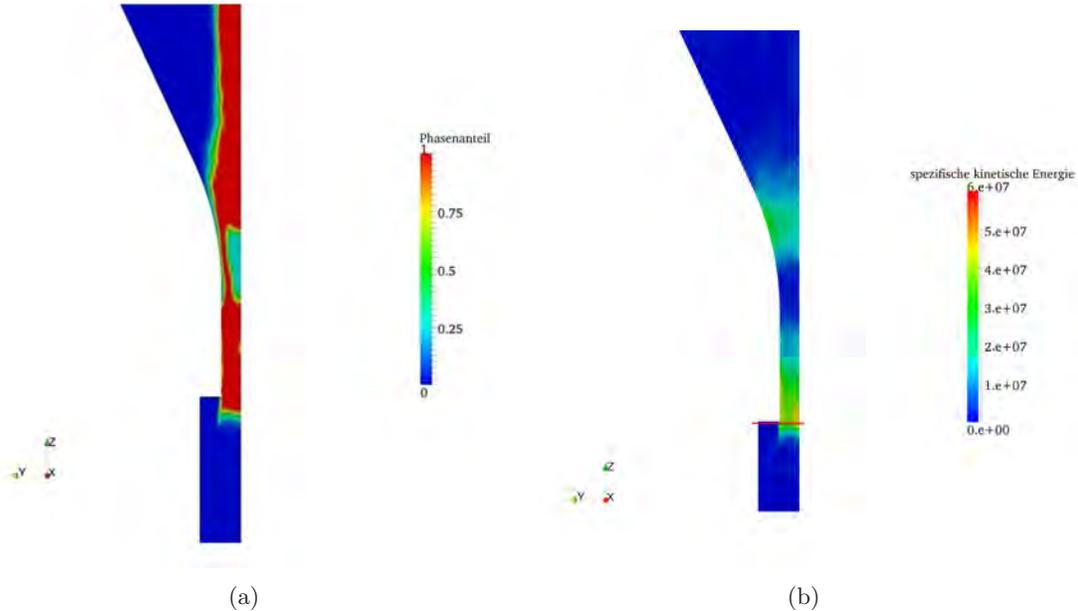


Abbildung 8.7: Flüssigkeitsphasenanteil (a) und spezifische kinetische Energie (b) des bereits beschleunigten Wassers nach $t = 2.3 \cdot 10^{-4}$ s (die rote Linie zeigt die Position der Auswertebene in Abbildung 8.9)

Tabelle 8.3: Integrierte spezifische kinetische Energiewerte für den größeren Austrittsdurchmesser

| | |
|-----------------|---------|
| Fall '1.64 MPa' | 28 J/m |
| Fall '3.99 MPa' | 81 J/m |
| Fall '5.0 MPa' | 122 J/m |
| Fall '8.4 MPa' | 205 J/m |
| Fall '10.1 MPa' | 252 J/m |

kinetische Energie von ca. $10\text{--}80 \text{ MJ/m}^3$ benötigt, ist der größere Austrittsdurchmesser ein Vorteil, da damit eine größere Fläche an Gestein abgetragen werden kann. Benötigen bestimmte Arten von Gesteinen eine höhere kinetische Energie pro Volumeneinheit für die Zerstörung der Struktur des Materials, so ist es sinnvoll, den Auslassdurchmesser zu reduzieren und die Energie auf eine kleineren Fläche zu konzentrieren. Dazu wurden zwei Fälle (Fälle '8.4 MPa' und '10.1 MPa') mit einem Auslassdurchmesser von 0.254 mm gerechnet. Dies ist eine Reduktion um einen Faktor Acht. Dies wurde durch eine stärkere Einengung der Mischkammer erreicht. Die über die Fläche integrierten spezifischen kinetischen Energiewerte für diese beiden Fälle sind Tabelle 8.4 zu entnehmen.

In Abbildung 8.11 sieht man die spezifische kinetische Energie für sowohl die große als auch die kleinere Austrittsfläche. Hier kann man die breitere Verteilung der Energie über eine größere Fläche im Fall des größeren Durchmessers sehen. Im Fall der engen Geometrie ist die Energie konzentrierter. Jedoch wird hierbei das Volumen für

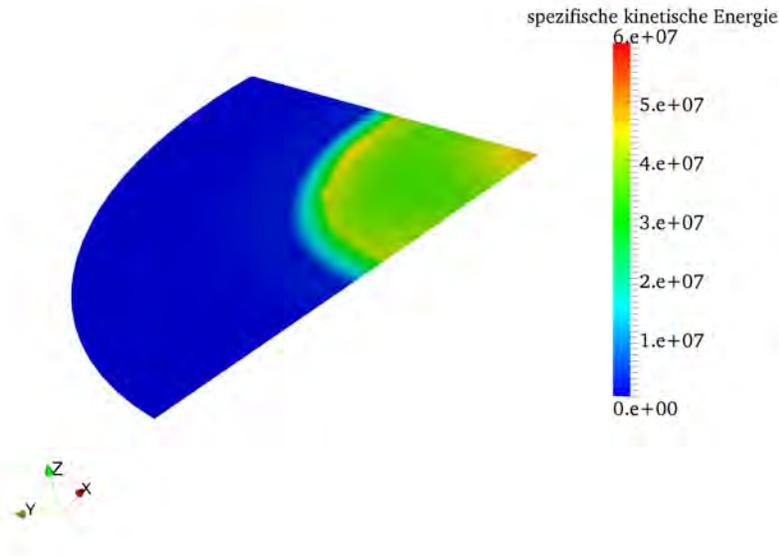


Abbildung 8.8: Verteilung der spezifischen kinetischen Energie (in J/m^3) auf der Auswertebene in Abbildung 8.7

Tabelle 8.4: Integrierte spezifische kinetische Energiewerte für den kleineren Austrittsdurchmesser

| | |
|-----------------|--------|
| Fall '8.4 MPa' | 32 J/m |
| Fall '10.1 MPa' | 46 J/m |

den Austausch von Impuls in der Mischkammer verringert, was zu einer nicht-linearen Änderung im quantitativen Wert der spezifischen kinetischen Energie führt. In beiden Fällen sind die Werte der spezifischen kinetischen Energie geringer als jene in der Literatur ($1516 MJ/m^3$, $77 J/m$).

Dies zeigt eine Verringerung der gesamten Energie über die Integrationsfläche im Vergleich zur größeren Austrittsfläche. Jedoch wird damit die Energie besser auf eine kleinere Fläche konzentriert und über eine größere Zeitspanne verteilt. Das Ergebnis des 10.1 MPa Falls entspricht ca. 58 % des integrierten Literaturwertes (Chillman et al., 2010), sie liegen jedoch in der gleichen Größenordnung.

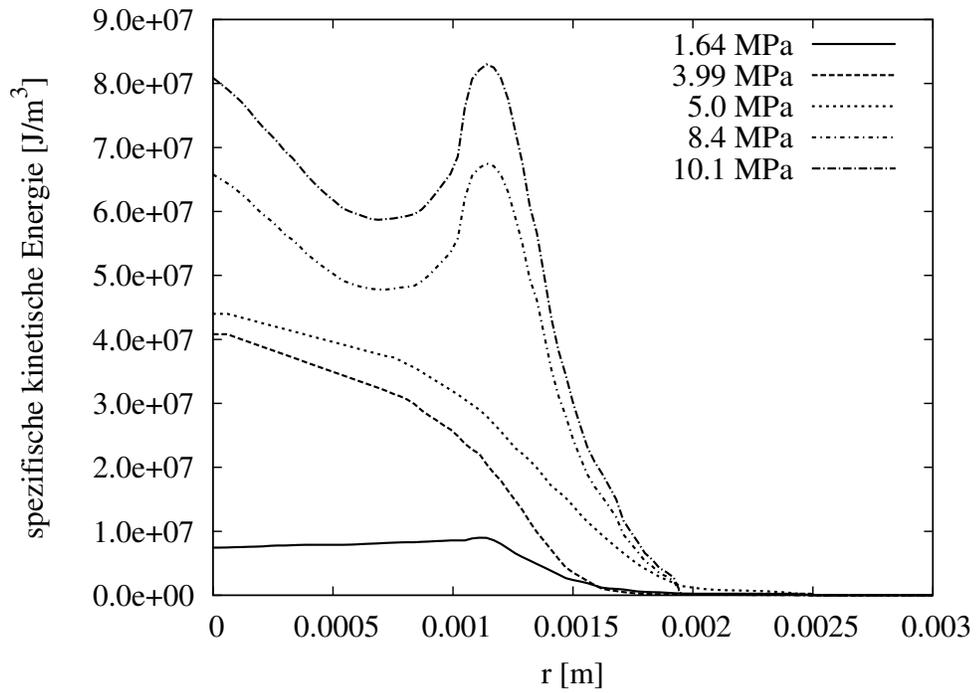


Abbildung 8.9: Radiale Verteilung der spezifischen kinetischen Energie

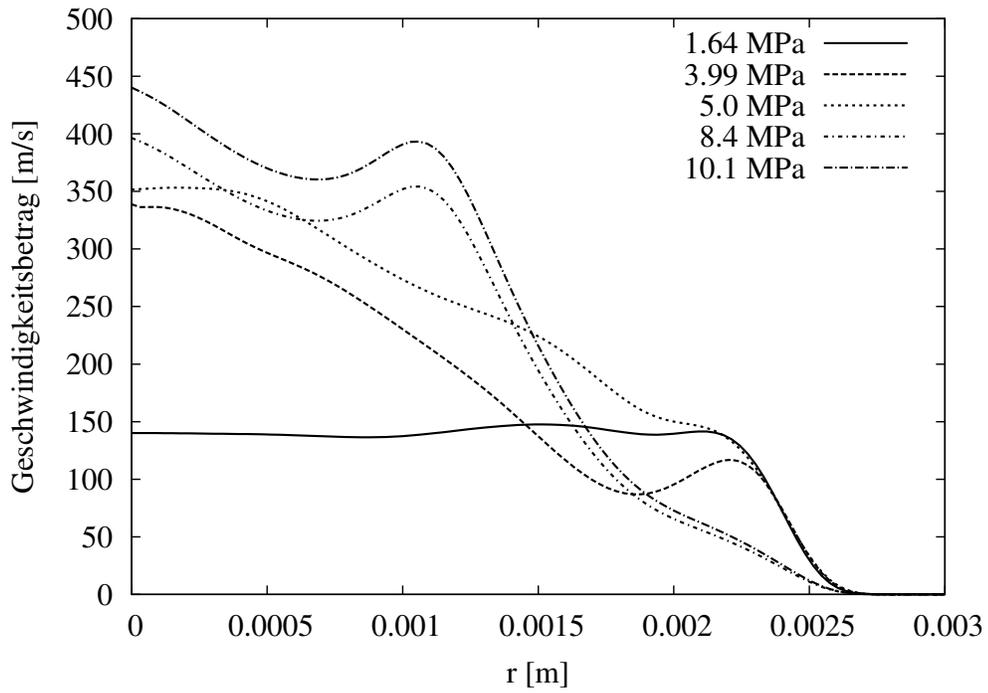


Abbildung 8.10: Radiale Verteilung des Geschwindigkeitsbetrages

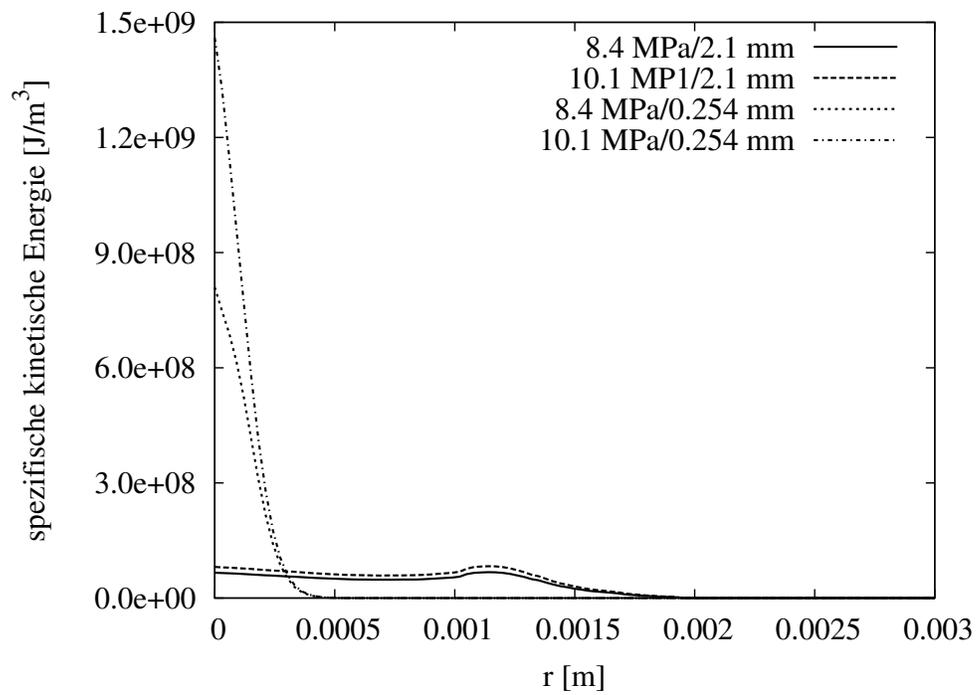


Abbildung 8.11: Radiale Verteilung der spezifischen kinetischen Energie in den Fällen '8.4 MPa' und '10.1 MPa' für beide Austrittsdurchmesser

8.5 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wird ein spezieller Bohrkopf für die geothermische Industrie untersucht. Das theoretische Potenzial sollte analysiert werden, ob der Bohrkopf in der Lage ist, Gestein abtragen zu können. Das grundlegende Konzept ist, dass Mikrodeflagrationsprozesse eine Schockwelle erzeugen, die Wasserpakete beschleunigen soll. Die Untersuchung des Deflagrationsprozesses wird in einer separaten Arbeit (Voglsam und Winter, 2012; Voglsam, 2012) durchgeführt. Die beschleunigten Wasserpakete sollen wiederum Gestein abtragen. Die kinetische Energie der austretenden Wasserpakete wird mit jener von existierenden Wasserschnidegeräten verglichen.

Benzin (n-Heptan und Iso-Oktan Gemische) ist geeignet, genügend Energie für den vorgeschlagenen Prozess im Deflagrationsprozess bereitzustellen. Für die Untersuchung hier wird der größte Druckstoß während der Deflagration herangezogen, dieser wird als Schockwelle in die CFD Untersuchung aufgegeben. Die Zeitskala der Deflagration ist mindestens um eine Größenordnung schneller als jene der Strömung. Durch die Vernachlässigung von Phänomenen wie Phasenänderung oder Verbrennung wird ein gewisser Fehler in den Simulationen gemacht, die Ergebnisse werden jedoch dadurch nicht um Größenordnungen verändert (Chang und Liou, 2007; Nourgaliev et al., 2005, 2006; Saurel und Abgrall, 1999; Theofanous et al., 2007; Theofanous und Li, 2008).

Es werden fünf unterschiedliche Betriebszustände analysiert. Zusätzlich werden zwei von diesen für eine alternative Geometrie ebenfalls betrachtet.

Die Simulationsergebnisse deuten darauf hin, dass die spezifische kinetische Energie des beschleunigten Wassers knapp hinter dem Austritt in einem Einzelprozess mit der vorgeschlagenen Geometrie vergleichbar mit dem strengen Benchmarkwert der spezifischen kinetischen Energie aus (Chillman et al., 2010) ist. Damit hat der Prozess das theoretische Potenzial, als Bohrprozess eingesetzt zu werden. Jedoch ist je nach Gesteinhärte der Austrittsdurchmesser zu verändern.

Anwendung 4: Feuerlöschanlage

9.1 Motivation

In diesem Kapitel soll eine Untersuchung einer mehrphasigen kompressiblen Strömung bei niedrigeren Drücken bis zu etwa 10 MPa gezeigt werden, wobei einerseits die gasförmige Phase kompressibel ist (siehe Abbildung 9.1) und nicht als ein ideales Gas behandelt werden kann. Andererseits kann die flüssige Phase als schwach kompressibel behandelt werden. Die Hauptzielsetzung hier ist die Simulation der Größen wie Druck und Temperatur sowie der Wechselwirkung und Bewegung von der flüssigen Phase durch das Gas mit Hilfe des in Kapitel 5.2 vorgestellten Solvers abzubilden. Dies soll ohne Modellierung von Phasenumwandlung geschehen, um zu gewährleisten, dass der Solver alle anderen Phänomene der Strömung abbilden kann. Ist der Solver in der Lage, die Strömung bis zum Einsetzen der Phasenumwandlung abzubilden, kann die zusätzliche Modellierung im nächsten Schritt hinzugefügt werden.

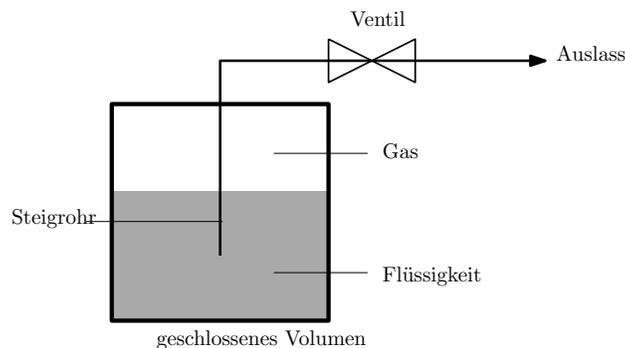


Abbildung 9.1: Schematische Skizze des Prozesses

Zur Analyse der Strömung werden sowohl Simulationen als auch Experimente vorgestellt

und verglichen. Eine wichtige Frage ist, ob und bis zu welchem Zeitpunkt die Simulationen in der Lage sind, Druck und Temperatur innerhalb der Messfehler der Sensoren vorhersagen zu können.

Das untersuchte Problem ist die Strömung während eines Feuerlöschprozesses (siehe Kapitel 3.3). Dabei wird flüssiges Kühlmittel in einer Druckflasche aufbewahrt (z.B. Inertgase, Kohlendioxid oder halogenierte Kohlenwasserstoffe (Andersson und Blomqvist, 2011; Saito et al., 1996)). Bei der Öffnung eines Ventils strömt das Fluid durch ein System von Leitungsrohren und durch speziell konstruierte Düsen in die Umgebung.

In Experimenten können Größen nur an wenigen vordefinierten Stellen erfasst werden, wohingegen die CFD Simulation das gesamte Strömungsvolumen beschreibt. Somit können lokale Phänomene im gesamten Volumen betrachtet werden. Die experimentelle Untersuchung der Anfangsphase ist besonders schwierig. Die Simulation kann diese jedoch auflösen.

9.2 Zustandsgleichung

In den Simulationen übersteigt der Druck den Wert von 5 MPa nicht und die Temperaturen liegen alle zwischen 230 K und 310 K. Aus diesem Grund wurde eine polynomische Zustandsgleichung des verwendeten Fluids für dieses Intervall verwendet. Dazu wurden Daten aus (NISTWebbook, 2012) entnommen. Das Fluid wird unter Druck in einer Druckflasche in flüssiger Form gelagert. Nachdem das Fluid in die Leitungen kommt, verdampft es. Für die Gasphase wurde die Beziehung zwischen Dichte und Druck nicht durch die ideale Gasgleichung beschrieben, sondern es wurde stattdessen ein Polynom vierten Grades verwendet.

$$\rho_g = (a_1 p^4 + a_2 p^3 + a_3 p^2 + a_4 p + a_5) \psi_{Gas} \quad (9.2.1)$$

$$\psi_{Gas} = 1/(\tilde{R}_{Gas} T) \quad (9.2.2)$$

ist indirekt proportional zur Temperatur und $\tilde{R}_g = R/m_{mol, Gas}$.

Der Verlauf des Polynoms beziehungsweise die gemessenen Daten (aus (NISTWebbook, 2012)) im betrachteten Intervall kann man Abbildung 9.2 entnehmen.

Die Zustandsgleichung für die Flüssigkeit ist in Gleichung 9.2.3 angegeben (siehe Abbildung 9.3).

$$\rho_{Fl} = \psi_{Fl} p + \rho_0 \quad (9.2.3)$$

Der Koeffizient ψ_l ist ebenfalls indirekt proportional zur Temperatur

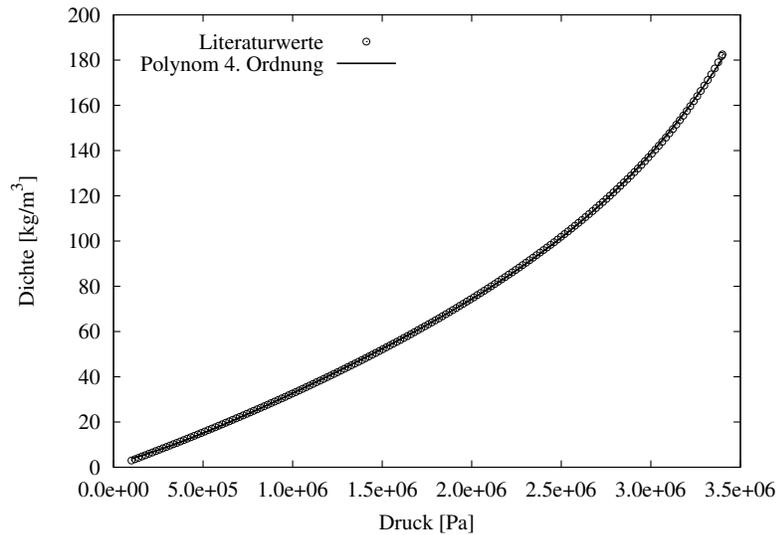


Abbildung 9.2: Beziehung zwischen Druck und Dichte für die Gasphase bei 285 K (NISTWebbook, 2012)

$$\psi_{Fl} = b/(\tilde{R}_{Fl} T), \quad (9.2.4)$$

mit $\tilde{R}_l = R/m_{mol,l}$.

9.3 'Feuerlösch'-Experimente

Der Fluss des Feuerlöschfluids ist in erster Linie bedingt durch den Druckunterschied zwischen Flaschendruck und Umgebungsdruck. Eine schematische Skizze des Equipments ist in Abbildung 9.4 zu sehen. Im Lagerzustand ist das Fluid sowohl in flüssiger als auch in gasförmiger Form anwesend. Dieses wird vor dem Experiment durch ein Ventil in der Flasche gehalten. Wird das Ventil der Flasche geöffnet, treibt das Hochdruckgas über der Flüssigkeit diese in das Steigrohr in die Leitungen und anschließend in die Umgebung. Während das Fluid die Flasche verlässt, fällt der Druck allmählich ab, bis Druck und Temperatur eine gewisse Grenze erreichen, wo Verdampfung auftreten kann. Dieser Prozess beeinflusst die Strömung in zweiter Linie.

9.3.1 Experimenteller Aufbau

Zwei Experimente wurden durchgeführt. Im ersten Experiment wurde die Gasflasche an ein System von Leitungsrohren mit einem Durchmesser von 0.0216 m und einer Gesamtlänge von 16.7 m angeschlossen. Ein gekrümmtes sowie acht gerade Rohre mit Längen zwischen 0.3 m und 4.5 m wurden mit 90° Verbindungsstücken zusammengefügt. Am Ende der Rohre wurde eine spezielle Düse installiert, durch welche das Fluid das

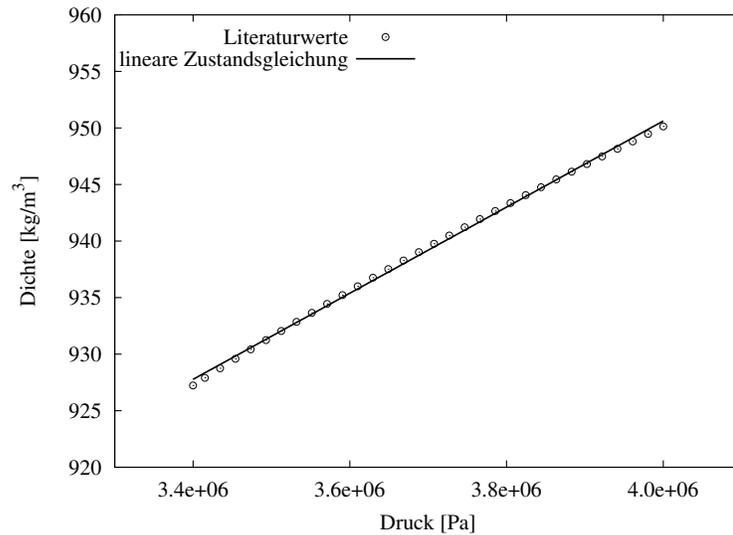


Abbildung 9.3: Beziehung zwischen Druck und Dichte für die Flüssigphase bei 285 K (NIST-Webbook, 2012)

System verlassen kann. Das Hauptaugenmerk in den Untersuchungen liegt auf der Bewegung des Fluids in der Gasflasche und im Steigrohr. Dazu wurde der Gasdruck, der gleich dem Flüssigkeitsdruck (vernachlässigbarer hydrostatischer Druck) ist, und die Temperatur des Gases im oberen Bereich der Flasche außerhalb des Steigrohres aufgezeichnet (siehe Abbildung 9.4). Der Querschnitt des Steigrohres ist nicht ganz kreisförmig, damit die Sensoren durch den Hals der Flasche passen. Ein zusätzlicher Temperatursensor wurde auch im unteren Teil der Flasche platziert, um die Flüssigkeitstemperatur aufzuzeichnen. Die zeitliche Auflösung der aufgezeichneten Werte betrug 0.1 s.

Im zweiten Experiment wurden ein paar Veränderungen vorgenommen. Drei zusätzliche Düsen wurden verteilt über das gesamte Rohrsystem hinzugefügt, um einen realen Feuerlöschprozess in einem kleinen Raum nachzuahmen. Vor dem ersten Experiment wurde die Flasche mit 15 kg Feuerlöschmittel und vor dem zweiten Experiment wurde die Flasche mit 25.2 kg Feuerlöschmittel gefüllt.

Abbildung 9.5 zeigt den Gasdruck sowie die Gas- und Flüssigkeitstemperatur im ersten Versuch. Nachdem sich die Druck- und Temperaturwerte um einen konstanten Wert stabilisierten, wurde das Experiment durch Öffnen des Ventils gestartet (Zeitpunkt $t=0$ s in Abbildungen 9.5 und 9.6). Im Verlauf der Werte kann man drei Regionen erkennen. Während der ersten 0.9 Sekunden zeigt der Druckverlauf die freie Expansion des Gases. Zwischen 0.9 s und 1.2 s steigt der Druck abrupt an und fällt anschließend durch den gesamten weiteren Feuerlöschprozess hindurch wieder ab. Die Flüssigkeitstemperatur ist bis 0.9-1.0 s mehr oder weniger konstant. Ab diesem Punkt nimmt die Temperatur sowohl in der Gas- als auch in der Flüssigkeitsphase ab. An

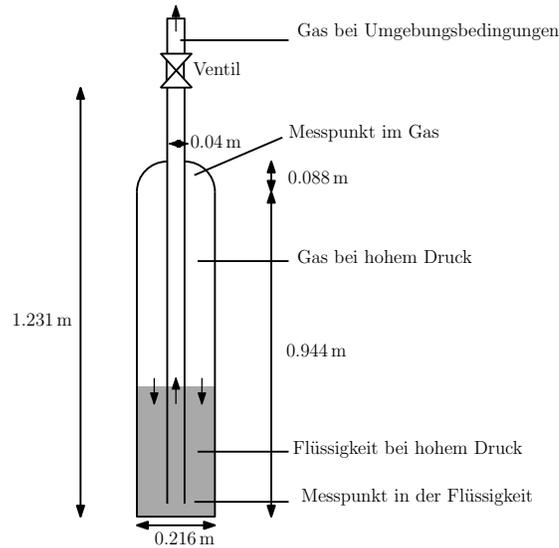


Abbildung 9.4: Schematische Skizze der Druckflasche im Experiment sowie in der Simulation (Anfangsbedingungen)

diesem Punkt werden Druck- und Temperaturwerte erreicht, bei denen Phasenumwandlung stattfinden kann.

In Abbildung 9.6 können die experimentellen Werte im zweiten Lauf gesehen werden. Ein ähnlicher Verlauf ist erkennbar. Die Differenzen ergeben sich durch unterschiedliche Anfangsdruck- sowie -temperaturwerte. In diesem Fall kann die freie Expansion bis 0,6 s identifiziert werden (höherer Fluss aus der Flasche durch höhere Anzahl an Düsen), danach steigt der Druck zwischen 0,6 s und 1,5 s aufgrund der Phasenumwandlung wieder an. Auch in diesem Fall fällt die Flüssigkeitstemperatur ab dem Punkt der Phasenumwandlung ab.

Die Vorhersage der Druck- und Temperaturwerte vor und nach dem Punkt der Phasenumwandlung durch die Simulation ohne Phasenumwandlungsmodellierung ist ein wichtiger Hinweis auf die Richtigkeit des Simulationsmodells abgesehen von der Phasenumwandlung. Aus diesem Grund wurden im ersten Schritt (Kapitel 9.3.2) die ersten beiden Sekunden beider Experimente simuliert, um zu sehen, wie gut der Solver aus Kapitel 5.2 die Strömung abbilden kann und welche Fehler durch die Vernachlässigung der Phasenumwandlung gemacht werden. In einem zukünftigen Schritt wird dann die Modellierung der Verdampfungsprozesse hinzugefügt.

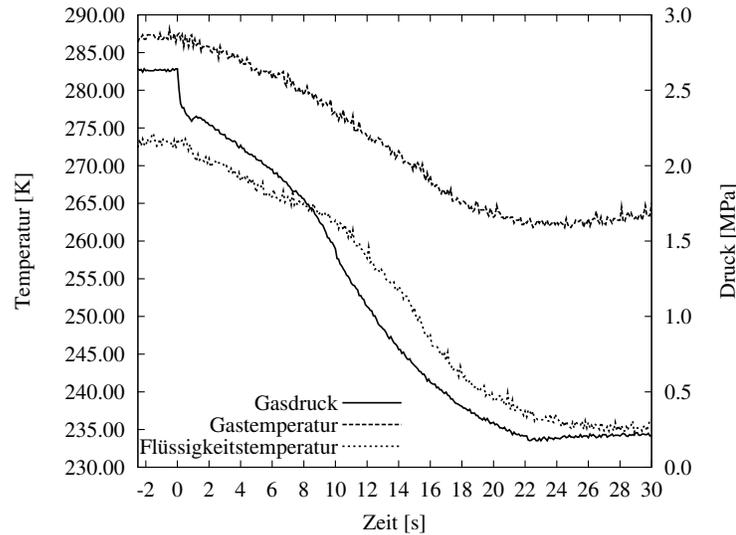


Abbildung 9.5: Experimentelle Daten des Gasdruckes und der Gas- und Flüssigkeitstemperatur im ersten Experiment (ein Detailausschnitt von den ersten zwei Sekunden sind in den Abbildungen 9.7-9.9 zu sehen)

9.3.2 Simulation der Feuerlöschanlage

9.3.2.1 Simulationseinstellungen

Die gesamte dreidimensionale Geometrie der Druckflasche sowie das Rohrsystem wurden implementiert, jedoch ist die Wechselwirkung von Gas- und Flüssigphase in der Flasche von Hauptinteresse.

Für den ersten Lauf wurde die Geometrie mit 1146827 Zellen vernetzt, während die Geometrie für den zweiten Lauf mit 1203041 Zellen vernetzt wurde. Der Unterschied ergibt sich durch die zusätzlichen Düsen. Wie in Kapitel 5.3.3 gezeigt wurde, ergeben sich die größten Fehler in der Simulation solcher Strömungen durch die Diskretisierung. Aus diesem Grund wurden alle Operatoren mit zweiter Ordnung Genauigkeit diskretisiert. Die thermodynamischen Daten wurden aus (NISTWebbook, 2012) entnommen. In der Simulation des ersten Laufs wurden die beiden Turbulenzmodelle *Smagorinsky* und *Spalart-Allmaras* verwendet, um zu sehen, welche Fehler durch die Turbulenzmodellierung gemacht werden. In der Simulation des zweiten Laufs wurde nur das *Spalart-Allmaras* Modell verwendet. Aus Stabilitätsgründen wurde eine Courant-Zahl von 0.3 verwendet.

Eine Vereinfachung wurde im Anfangszustand des Gases in den Leitungen gemacht. In den Experimenten befand sich Luft in den Rohren. Aufgrund des zweiphasigen Ansatzes in den Simulationen wurde das Gas bei Umgebungsbedingungen in der Rohrleitung angenommen. Dies verursacht keinen großen Fehler, da die thermodynamischen

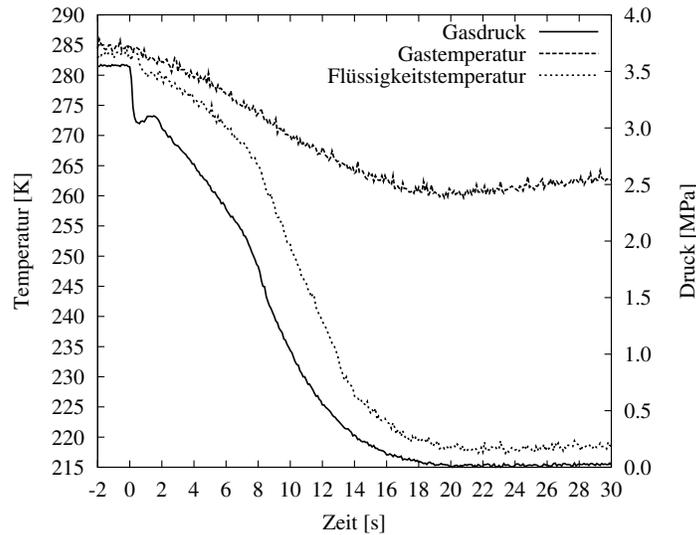


Abbildung 9.6: Experimentelle Daten des Gasdruckes und der Gas- und Flüssigkeitstemperatur im zweiten Experiment (ein Detailausschnitt von den ersten zwei Sekunden sind in den Abbildungen 9.10-9.12 zu sehen)

Größen des gasförmigen Fluids ähnlich sind wie jene von Luft.

Um die Anfangshöhe der Flüssigkeit in der Flasche bestimmen zu können, wurde das Volumen der Flüssigkeit aus der Anfangsmasse m mit der Dichte des Gases sowie der Flüssigkeit bei der gemessenen Anfangstemperatur errechnet. Die Masse m ist gegeben durch

$$m = \rho_{Fl}V_{Fl} + \rho_{Gas}(V_{Flasche} - V_{Fl}) \quad (9.3.1)$$

Durch Umformung der Gleichung nach V_{Fl} kann die Höhe der Flüssigkeit berechnet werden. Die Temperaturwerte von Gas und Flüssigkeit wurden einheitlich mit den gemessenen Anfangswerten initialisiert (erster Lauf: $T_{Gas} = 286.4$ K, $T_{Fl} = 273.3$ K, zweiter Lauf: $T_{Gas} = 284.65$ K, $T_{Fl} = 283.65$ K). Die Temperatur der Außenseite der Flasche wurde ebenfalls gemessen, jedoch stellte sich heraus, dass sich die Temperatur innerhalb der ersten beiden Sekunden nicht messbar ändert. Damit wurde ein fester gemessener Temperaturwert an den Wänden der implementierten Geometrie angenommen. Der Anfangsdruck wurde mit 2.642 MPa für den ersten Lauf und mit 3.54 MPa für den zweiten Lauf bis zur Höhe des Ventils (siehe Abbildung 9.15) verwendet. Auslassflächen wurden an den Positionen der Düsen definiert.

9.3.3 Vergleich von Experimenten mit Simulationsergebnissen

In Abbildung 9.7 sieht man den Verlauf des Druckes während der ersten zwei Sekunden des Prozesses. Man kann den charakteristischen Verlauf der freien Expansion von jenem des durch die Phasenumwandlung bei 0.9 s verursachten Druckanstieges unterscheiden. Simulationsergebnisse mit beiden Turbulenzmodellen folgen den experimentellen Daten sehr gut bis zum Punkt der Phasenumwandlung, wo der Anstieg der Kurve nicht wiedergegeben wird. Dies ist zu erwarten, da die Verdampfung zu diesem Zeitpunkt nicht abgebildet wird. Jedoch kann der Druckverlauf durch die Wechselwirkung zwischen den beiden Phasen innerhalb der Messfehler in der Simulation vorhergesagt werden. Die größten Fehler ergeben sich durch den Fehler der Verdampfungsmodellierung.

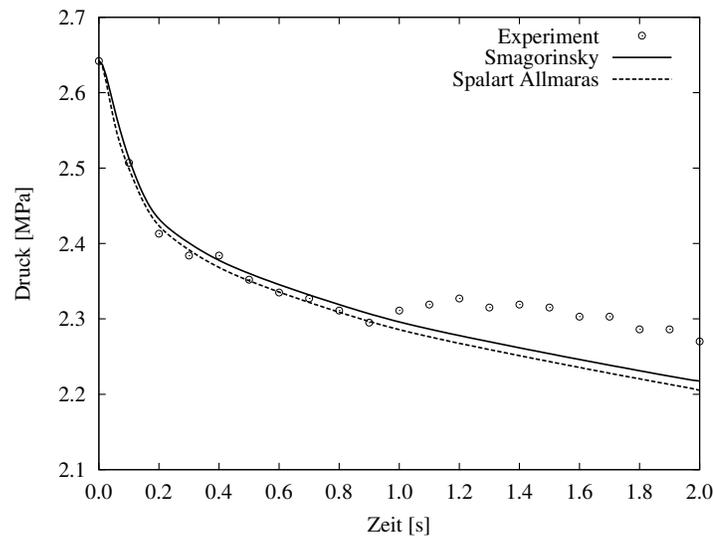


Abbildung 9.7: Experimentelle und simulative Ergebnisse des Druckverlaufes während der ersten zwei Sekunden (erster Lauf)

In Abbildung 9.8 kann man den Verlauf der Temperatur erkennen. Simulationsergebnisse mit beiden Turbulenzmodellen zeigen den gleichen Verlauf, jedoch liegen beide ca. 1 K unterhalb den gemessenen Werten. Die Genauigkeit der eingesetzten Thermoelemente wird vom Hersteller mit ± 1 K angegeben.

Abbildung 9.9 zeigt die Temperatur der Flüssigkeit. Die Simulation sagt mehr oder weniger einen konstanten Wert für die Temperatur der Flüssigkeit voraus. Experimentelle Werte oszillieren um 273 K bis 0.9 s, wo der Wert abrupt abfällt. Hier setzt Verdampfung ein und die freigesetzte Verdampfungswärme führt dazu, dass die Temperatur der Flüssigkeit abnimmt.

Im zweiten Lauf waren die Anfangswerte unterschiedlich. Erstens war der Druck höher, bedingt durch die höhere Fluidtemperatur. Eine gleichmäßigere Temperaturver-

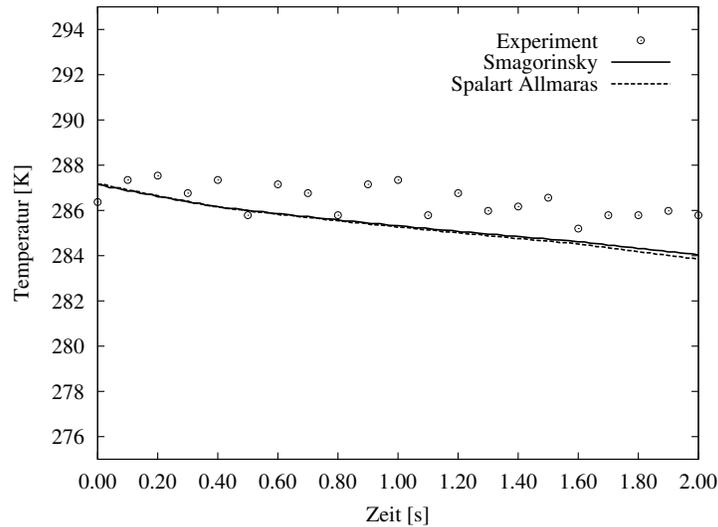


Abbildung 9.8: Experimentelle und simulative Ergebnisse des Gastemperaturverlaufes während der ersten zwei Sekunden (erster Lauf)

teilung konnte vor diesem Versuch erreicht werden, da die Temperatur der Flüssigkeit in diesem Fall nur um 1 K tiefer lag als jene des Gases. Im Gegensatz dazu betrug der Unterschied im ersten Lauf 13 K. Dies führt dazu, dass der Sättigungsdampfdruck erhöht wird und die Verdampfung bereits zwischen 0.5-0.6 s startet. Der Druckverlauf in der Simulation während der ersten zwei Sekunden folgt dem gemessenen Wert bis zum Punkt der Phasenumwandlung (siehe Abbildung 9.10). In diesem Fall fand die Ventilöffnung bei $t = 0.0$ s bei ca. $t = 0.06-0.07$ s statt, aber die zeitliche Auflösung der Sensoren kann dies nicht auflösen. Dies ist der Grund für die leichte Verschiebung der Simulationsergebnisse in den Abbildungen 9.10-9.12.

Abbildung 9.11 zeigt die Temperatur der Gasphase. Auch hier liegen die Simulationsergebnisse knapp um 1 K unter jenen der gemessenen Werte.

Man kann in Abbildung 9.12 den Verlauf der Flüssigkeitstemperatur sehen. Auch in diesem Fall wird in der Simulation ein konstanter Wert errechnet, wobei die Temperatur im Experiment nach dem Startpunkt der Phasenumwandlung abfällt.

In der Anfangsphase nach dem Öffnen des Ventils bewegt sich eine Druckwelle durch das Rohrsystem. Die Ausbildung dieser Welle kann man in den Abbildungen 9.15-9.18 sehen. Da sich während des Anfangszustandes im Rohrsystem keine Luft sondern gasförmiges Feuerlöschfluid befindet, kann diese Druckwelle nur qualitativ abgebildet werden. Man sieht eine Hoch- und Niederdruckzone bei der 90° Drehung am Ende des Steigrohres. Da sich die Druckwelle mit Schallgeschwindigkeit ausbreitet, treten in der Anfangsphase des Prozesses hohe Geschwindigkeiten auf.

Es treten sehr unterschiedliche Geschwindigkeitswerte während des Prozesses auf. In

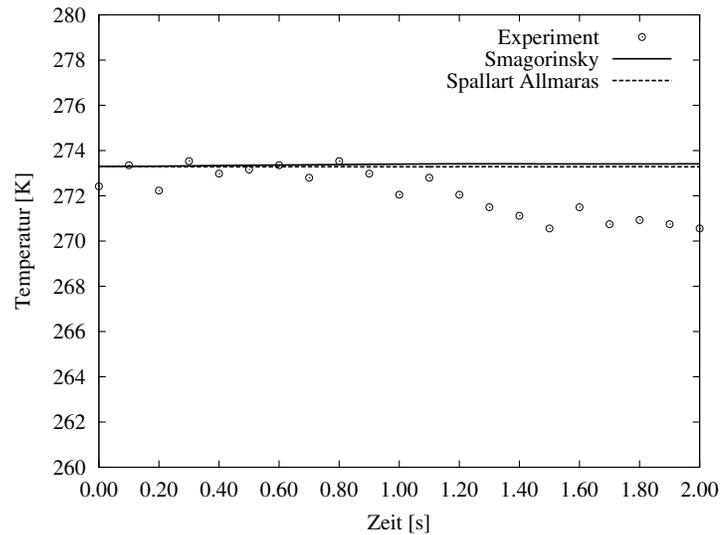


Abbildung 9.9: Experimentelle und simulative Ergebnisse des Flüssigkeitstemperaturverlaufes während der ersten zwei Sekunden (erster Lauf)

Abbildung 9.13 sieht man den Geschwindigkeitsbetrag, die Schallgeschwindigkeit und die Mach-Zahl nach $t = 0.05$ s in einem geraden Rohrsegment zwischen dem zweiten und dritten 90° Verbindungsstück. Nach Öffnung des Ventils fließt das Gas, das sich über der Flüssigkeit bei hohem Druck im Steigrohr befindet, getrieben durch den Druckunterschied zwischen Flaschen- und Umgebungsdruck aus der Flasche. In Abbildung 9.13 ist ersichtlich, dass dadurch am Anfang des Prozesses die Strömung in den Leitungen transsonisch ist und dass auch teilweise die Mach-Zahl $M = 1$ überschritten wird. Mit der Zeit nimmt die Geschwindigkeit ab ($M \leq 0.2-0.3$).

Geschwindigkeiten in der Flasche erreichen diese Größenordnungen nicht. In Abbildung 9.14 sieht man den Geschwindigkeitsbetrag in der Flasche zu einem späteren Zeitpunkt $t = 0.8$ s. Die Geschwindigkeit ist zu diesem Zeitpunkt langsamer als 10 m/s. Man sieht, dass die Geschwindigkeit entlang der Symmetrieachse des Steigrohres allmählich zunimmt. Auf der einen Seite nimmt die Dichte der Flüssigkeit im Steigrohr durch die Abnahme des Druckes und die Zunahme der Temperatur durch die Zunahme der Turbulenzdissipation im oberen Bereich des Steigrohres ab. Auf der anderen Seite verändert sich das Geschwindigkeitsprofil, da die Geschwindigkeit nahe der Wand abnimmt und in der Mitte zunimmt, bis sich ein turbulentes Profil ausgebildet hat. Der integrale Massenfluss über eine Querschnittsfläche im Steigrohr bleibt aufgrund der Kontinuität jedoch erhalten.

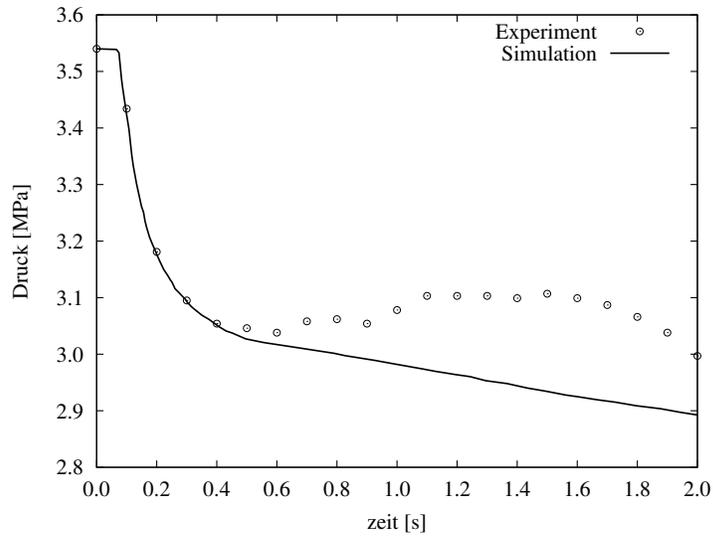


Abbildung 9.10: Experimentelle und simulative Ergebnisse des Druckverlaufes während der ersten zwei Sekunden (zweiter Lauf)

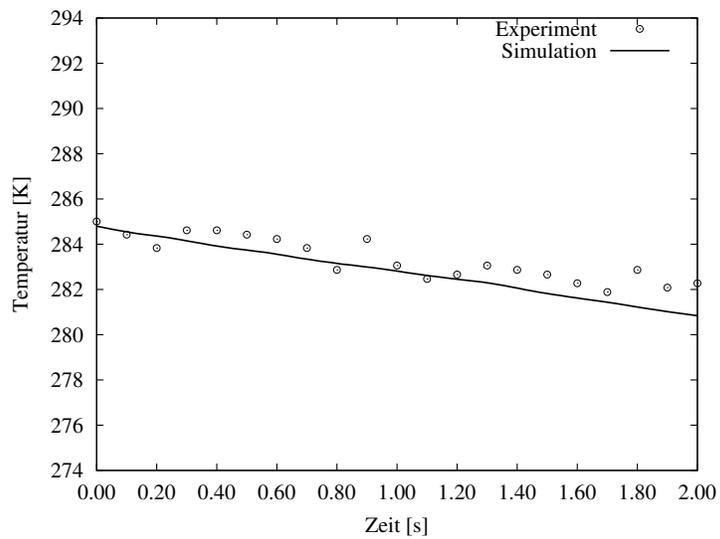


Abbildung 9.11: Experimentelle und simulative Ergebnisse des Gastemperaturverlaufes während der ersten zwei Sekunden (zweiter Lauf)

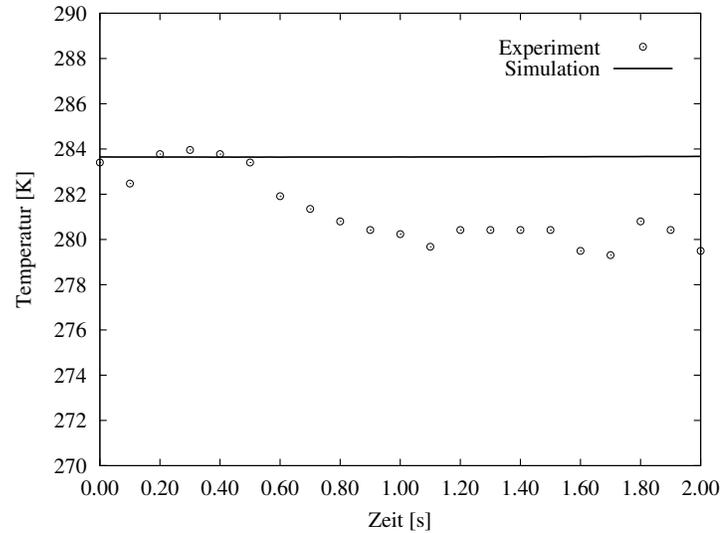


Abbildung 9.12: Experimentelle und simulative Ergebnisse des Flüssigkeitstemperaturverlaufes während der ersten zwei Sekunden (zweiter Lauf)

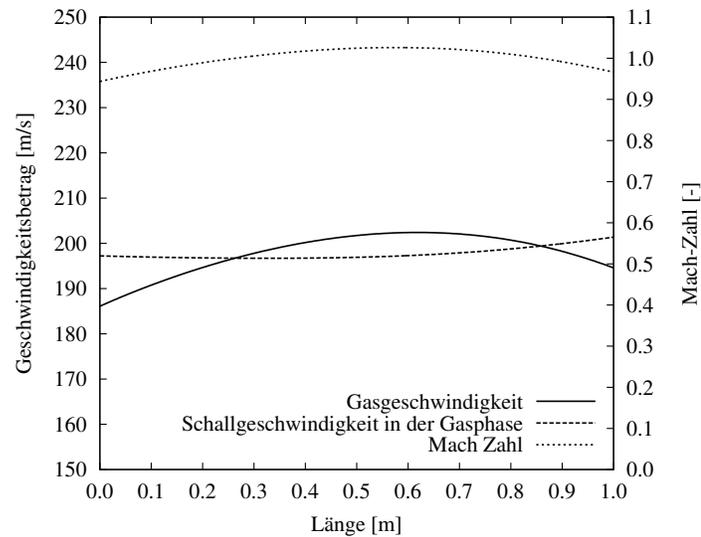


Abbildung 9.13: Geschwindigkeitsbetrag, Schallgeschwindigkeit und Mach-Zahl nach $t = 0.05$ s in der Leitung zwischen zweitem und drittem 90° Verbindungsstück

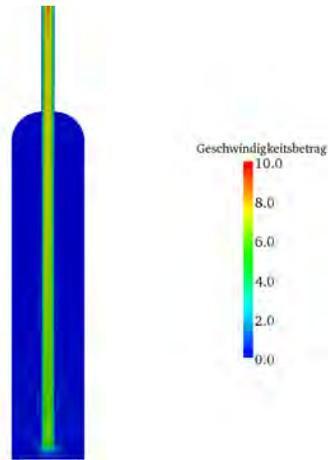


Abbildung 9.14: Geschwindigkeitsbetrag $t = 0.8s$ auf der Mittelebene der Flasche (in m/s)

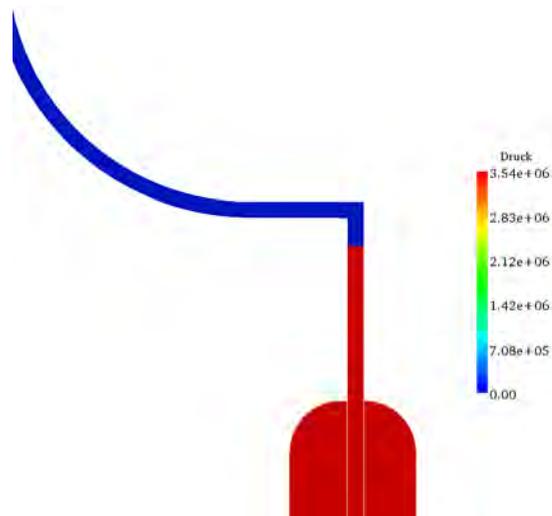


Abbildung 9.15: Druckwelle nach $t = 0s$ (Ventil wird geöffnet, in Pa)

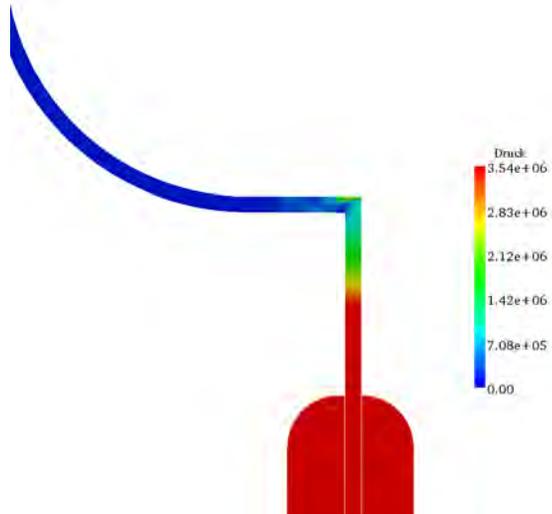


Abbildung 9.16: Druckwelle nach $t = 0.001$ s, in Pa

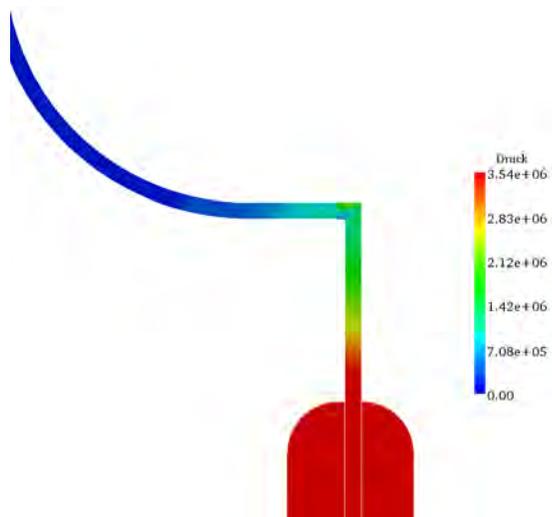


Abbildung 9.17: Druckwelle nach $t = 0.002$ s, in Pa

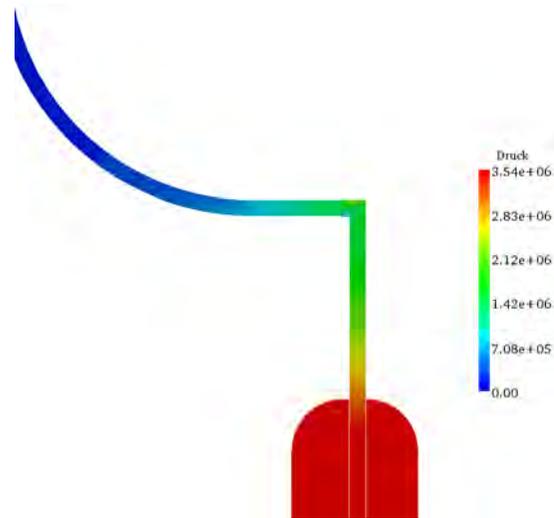


Abbildung 9.18: Druckwelle nach $t = 0.003$ s, in Pa

9.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde der Entleerprozess einer Feuerlöschanlage untersucht. Dazu wurden sowohl Experimente als auch Simulationen durchgeführt. Für das untersuchte Gas musste die verwendete Zustandgleichung modifiziert werden, um physikalische Ergebnisse zu erhalten.

Experimentelle Ergebnisse haben drei Teilbereiche während der Entleerung gezeigt. In der Anfangsphase wird die Behälterflasche durch eine freie Expansion entleert. Hierauf steigt der Druck aufgrund von Verdampfung an und fällt schlussendlich allmählich auf Atmosphärendruck.

Zwei Experimente wurden durchgeführt, welche auch in der Simulation berechnet wurden. Im Solver ist die Modellierung von Phasenumwandlungsphänomenen nicht enthalten. Die Schlussfolgerung beider Läufe ist, dass der Verlauf sowohl des Druckes als auch der Temperatur in der Flasche von der Simulation innerhalb der Messfehler richtig berechnet wird. Dies stimmt bis zum Punkt der Verdampfung, wo die Simulationsergebnisse stark von den experimentell ermittelten Werten abweichen. Diese stellen eindeutig den dominanten Fehler in den Simulationen dar. Im nächsten Schritt sollen diese Abweichungen durch die explizite Phasenumwandlungsmodellierung behoben werden.

So lange die Ergebnisse übereinstimmen, kann man diese für die Optimierung der Anlage heranziehen. Im Anfangszustand läuft zum Beispiel eine Druckwelle durch die Leitungen, welche man während der Experimente akustisch wahrnehmbar war. Dies ist bei der Anlagenauslegung zu beachten.

In dieser Arbeit wurden kompressible Mehrphasenströmungen simulativ und experimentell untersucht. Für die CFD Analysen wurde ein Solver im open-source Tool OpenFOAM[®] entwickelt, in welchem sowohl die flüssige als auch die gasförmige Phase eine beliebige temperatur- und druckabhängige Kompressibilität annehmen kann. Zusätzlich werden die Gleichungen hintereinander ohne Druck-Geschwindigkeitskopplung direkt gelöst.

Dazu wurde der Solver auf die numerische Korrektheit überprüft, um Unstetigkeiten in physikalischen Größen wie Druck oder Geschwindigkeit richtig abbilden zu können. Ebenfalls wurden die Standardsolver von OpenFOAM[®] auf diese Möglichkeit überprüft und der Bedarf nach diesem neuen Solver wurde bestätigt. Mit dem neuen Solver wurden eindimensionale und zweidimensionale Benchmarkfälle aus der Literatur nachgerechnet und die Ergebnisse mit den Ergebnissen aus der Literatur verglichen.

Die zusätzliche Möglichkeit, Turbulenz explizit zu modellieren, gibt den Vorteil gegenüber Eigenimplementierungen, ein gröberes Mesh verwenden zu können beziehungsweise wichtige subgrid-scale Größen nicht vernachlässigen zu müssen.

Der Zerfall von Flüssigkeitstropfen in einer Überschallströmung wurde untersucht und die wichtige Rolle von Turbulenz für die Form des Tropfens während des Zerfalls gezeigt.

Der Zerfall von Flüssigkeitstropfen in einer Unterschallströmung wurde sowohl mittels Simulationen als auch mittels Experimenten analysiert. Dazu wurde die asymmetrische Anströmung der Tropfen analysiert und im Vergleich zur gleichmäßigen Anströmung Unterschiede bei hochviskosen Flüssigkeiten gefunden.

Die Prozesse in einem innovativen Bohrkopf wurden ebenfalls untersucht und das Potenzial wurde bestätigt, dass der Prozess theoretisch in der Lage ist, Gestein abtragen zu können.

Weiters wurde der Entleerprozess einer speziellen Feuerlöschanlage simulativ und

experimentell untersucht und bis zum Punkt der Verdampfung richtig abgebildet.

Damit wurde gezeigt, dass der Solver in der Lage ist, verfahrenstechnisch schwer zugängliche Prozesse im Detail zu analysieren.

Der hier vorgestellte Solver sollte in den nächsten Schritten in die neueste OpenFOAM[®] Version importiert werden, um die neuesten Modelle wie zum Beispiel *Slidingmesh* und n-phasige Simulationen auch mit einbinden zu können. Ebenfalls kann das simultane Neuvernetzen an der Flüssigkeitsoberfläche für Tropfenzerfalls- und Zerstäubungsprozesse eingesetzt werden, um die Oberfläche des Tropfens besser verfolgen zu können. Damit werden das Rayleigh-Taylor-Piercing (RTP) sowie das shear-induced entrainment (SIE) Regime und die dabei auftretenden dünnen Flüssigkeitsfilme besser abgebildet.

Ebenfalls kann versucht werden, eine bessere Beschreibung der Krümmung und damit der Oberflächenspannung zu finden. Weitere simulative Untersuchungen und Veröffentlichungen von Theofanous et al. sollen als Vergleich und Validierung des Solvers sowie der Analysen dieser Arbeit dienen.

Für die Untersuchung der Kelvin-Helmholtz Wellen, die bei sehr hohen Weber-Zahlen auf der Tropfenoberfläche erscheinen, kann mit einem sehr feinen Mesh die benötigte Auflösung garantiert werden. Dabei soll die lokale Auswirkung von subgrid-scale Spannungen auf die Struktur ebenfalls mit in die Untersuchung einbezogen werden.

In der experimentellen Untersuchung des asymmetrischen Zerfallsprozesses sollen Fluide mit mittelmäßiger Viskosität ($Oh \approx 0.1$) und mit sehr hoher Viskosität ($Oh \geq 2.5$) analysiert werden, um den Verlauf der hier aufgestellten Kurve für ASIE näher beschreiben zu können.

Die hier erarbeiteten Erfahrungen und Ergebnisse aus der asymmetrischen Anströmung einer Flüssigkeit können detailliert in die Untersuchung der Zerstäubung einfließen. Dazu sollen Large Eddy Simulationen mit einer feinen Zellauflösung durchgeführt werden, um lokale Phänomene direkt am Auslass der Lanze, die zur Eindüsung verwendet wird, visualisieren und interpretieren zu können.

Ein zusätzlicher Schritt wird es sein, Verdampfung und Kondensation in den Solver einzubauen. Dazu ist es nötig, die existierenden Modelle in OpenFOAM[®] für tempera-

turabhängige Prozesse zu erweitern oder neue Modelle zu implementieren. Damit wird man in der Lage sein, den gesamten Feuerlöschprozess abzubilden.

In der Untersuchung des Bohrkopfes kann die turbulente Wechselwirkung zwischen Produktgasen und Wasser sowie der Transfer der kinetischen Energie des beschleunigten Wasserpakets an einem Feststoff untersucht werden.

Trotz der Komplexität der hier angeführten Beispiele konnte gezeigt werden, dass es möglich ist, experimentell sowie simulativ eine kompressible Mehrphasenströmung physikalisch richtig zu beschreiben. Dies eröffnet eine Vielzahl an Optimierungsaufgaben in der Physik, in der Verfahrenstechnik und in der Industrie. Es ist von höchster Wichtigkeit, dass der hier untersuchte Code für die Untersuchung von weiteren Phänomenen eingesetzt wird und dass dieser weiter ausgebaut wird. Damit soll die Möglichkeit geschaffen werden, bisher nicht verstandene und unzugängliche Vorgänge und Phänomene analysieren zu können.



Source code

A.1 multiRhoSonicFoam

```
/*-----*\
Application
multiRhoSonicFoam
Description
Density-based compressible multiphase flow solver.
\*-----*/

#include "fvCFD.H"

#include "dynamicFvMesh.H"
#include "fvcMeshPhi.H"
#include "fvMesh.H"
#include "fvMesh.C"
#include "MULES.H"
#include „subCycle.H"
#include „interfaceProperties.H"
#include "twoPhaseMixture.H"
// * * * * * //

int main(int argc, char *argv[])
{
    # include „setRootCase.H"

    # include "createTime.H"
    # include "createDynamicFvMesh.H"
    # include „initContinuityErrs.H"
    # include "readThermodynamicProperties.H"
    // * * * * * //

    Info<< "\nStarting time loop... Wait...\n<< endl;

    # include "createFields.H"

    while (runTime.loop())
    {
        scalar CoNum = max
        (
            mesh.surfaceInterpolation::deltaCoeffs()

```

```

*mag(phiv)/mesh.magSf()
).value()*runTime.deltaT().value();
Info<< "\nMax Courant Number = <<< CoNum << endl;
#include \setDeltaT.H"
fvc::makeAbsolute(phi, U);
Info<< "Time = <<< runTime.timeName() << nl << endl;
Info << "This is multiRhoSonicFoam working: <<< endl;
// * * * * * Transport of phase* * * * * //
#include "rhoAlphaEqns.H"
rho=alpha1*rho1+(1.0-alpha1)*rho2;
// * * * * * Continuity equation* * * * * //
solve
(
(
fvm::ddt(rho)
+ fvm::div(phiv, rho)
);
rho == max(rho,rhomin);
schlieren=(1.0+0.2*(1.0-alpha1)*(1.0-alpha1))*log(mag(fvc::grad(rho))+1.0);
p == (rho - alpha1 * rhonull)/(alpha1*psi1+(1-alpha1)*psi2);
p == max(p,pmin);
p == min(p,pmax);
rhoU == rho*U;
Info << "pmax and pmin: <<< max(p) << << min(p) << endl;
// * * * * * Navier-Stokes equation* * * * * //
solve
(
(
fvm::ddt(rhoU)
+ fvm::div(phiv, rhoU)
==
- fvc::grad(p)
+ fvm::laplacian(visc,rhoU)
);
U == rhoU/rho;
magU=mag(U);
surfaceScalarField phiv2
(
IObject
(
"phiv2",
runTime.timeName(),
mesh,
IObject::NO_READ,
IObject::NO_WRITE
),
(fvc::interpolate(rhoU)/fvc::interpolate(rho)) & mesh.Sf()
);
// * * * * * energy equation* * * * * //
solve
(

```



```

# include "createTime.H"
# include "createMesh.H"
# include "readControls.H"
# include "initContinuityErrs.H"
# include "readThermodynamicProperties.H"
# include "createFields.H"
// * * * * * //

Info<< "\nStarting time loop... Wait...\n<< endl;

#include \surfaceInterpolate.H"
while (runTime.loop())
{
    scalar CoNum = max
    (
    mesh.surfaceInterpolation::deltaCoeffs()
    *mag(phi)/mesh.magSf()
    ).value()*runTime.deltaT().value();
    Info<< "\nMax Courant Number = << CoNum << endl;
#include \setDeltaT.H"
    fvc::makeAbsolute(phi, U);
    Info<< "Time = << runTime.timeName() << nl << endl;
// * * * * * Transport of phase* * * * * //
    Info << "This is multiRhoSonicFoam working: << endl;
#include "rhoAlphaEqns.H"
    rho=alpha1*rho1+(1.0-alpha1)*rho2;
// * * * * * Continuity equation* * * * * //
    solve(fvm::ddt(rho) + fvc::div(rhoPhi));
    rho == max(rho,rhomin);
    rho == min(rho,rhomin);
    schlieren=(1.0+0.2*(1.0-alpha1)*(1.0-alpha1))*log(tr*(mag(fvc::grad(rho)))+1.0);
    p == (rho - alpha1 * rhonull)/(alpha1*(psi1)/(16.5)+(1-alpha1)*psi2);
    p == max(p,pmin);
    p == min(p,pmax);
    rhoU == rho*U;

    Info << "pmax and pmin: << max(p) << << min(p) << endl;
// * * * * * Navier-Stokes equation* * * * * //
    surfaceScalarField muEff
    (
    "muEff",
    viscr
    + fvc::interpolate(rho*turbulence->nut())
    ); surfaceScalarField sig
    (
    IOobject
    (
    "sig",
    runTime.timeName(),
    mesh,
    IOobject::NO_READ,

```

```

IObject::NO_WRITE
),
fvc::interpolate(interface.sigmaK())*fvc::snGrad(alpha1)
);
Info << max(mag(phi)) << endl;

solve

(
fvm::ddt(rho, U)
+ fvm::div(rhoPhi, U)
- fvm::laplacian(muEff, U)
- (fvc::grad(U) & fvc::grad(muEff))
==
interface.sigmaK()*fvc::grad(alpha1)
- fvc::grad(p)
);
phi = linearInterpolate(U) & mesh.Sf();
rhoPhi = fvc::interpolate(rho)*phi;
rhoU == U*rho;
gradU == fvc::grad(U);
magU=mag(U);
surfaceScalarField phiv2

(
IObject
(
"phiv2",
runTime.timeName(),
mesh,
IObject::NO_READ,
IObject::NO_WRITE
),
fvc::interpolate(U) & mesh.Sf()
);
// * * * * *energy equation* * * * * //
surfaceScalarField rhoAlphaEff

(
"rhoAlphaEff",
fvc::interpolate(rho)*alphaLam
+ fvc::interpolate(rho)*fvc::interpolate(turbulence->nut())
);
solve

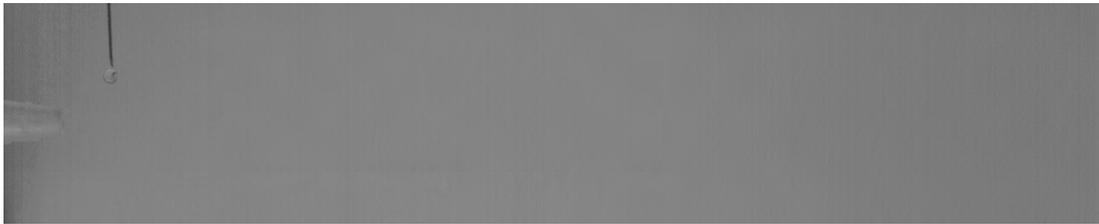
(
fvm::ddt(rho, E)
+ fvm::div(rhoPhi, E)
- fvm::laplacian(rhoAlphaEff/Pr, E)
==
- fvc::div(phiv2, p)
);
kinE == 0.5*rho*magSqr(U);
T == (E - 0.5*magSqr(U))/(alpha1*Cv1+(1-alpha1)*Cv2);
T == min(T,T1);
T == max(T,T2);

```


B

Tropfenzerfall

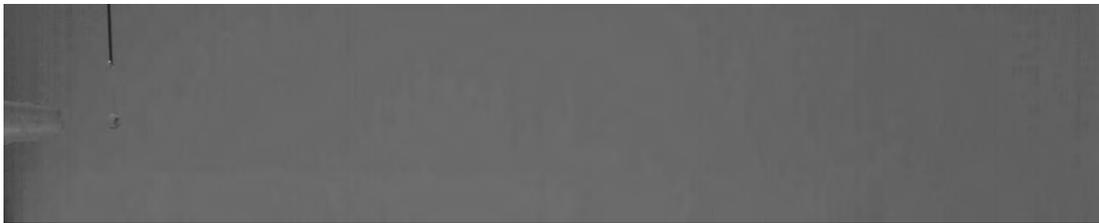
B.1 Wasser



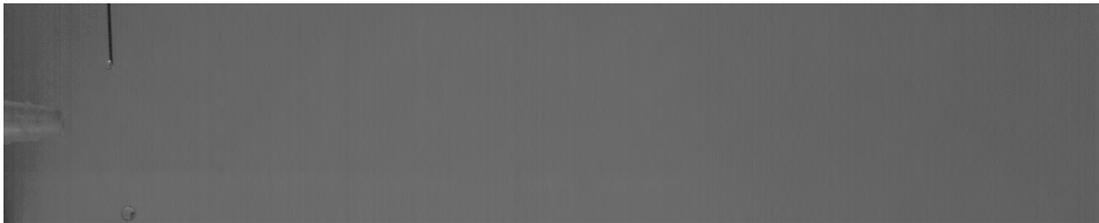
(a)



(b)



(c)



(d)

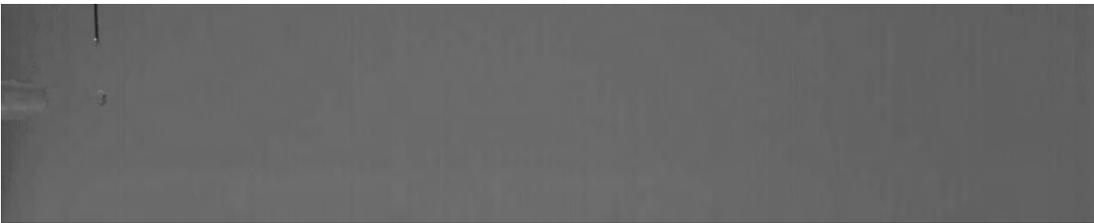
Abbildung B.1: Wasser, 3 NL/min



(a)



(b)



(c)



(d)

Abbildung B.2: Wasser, 5 NL/min

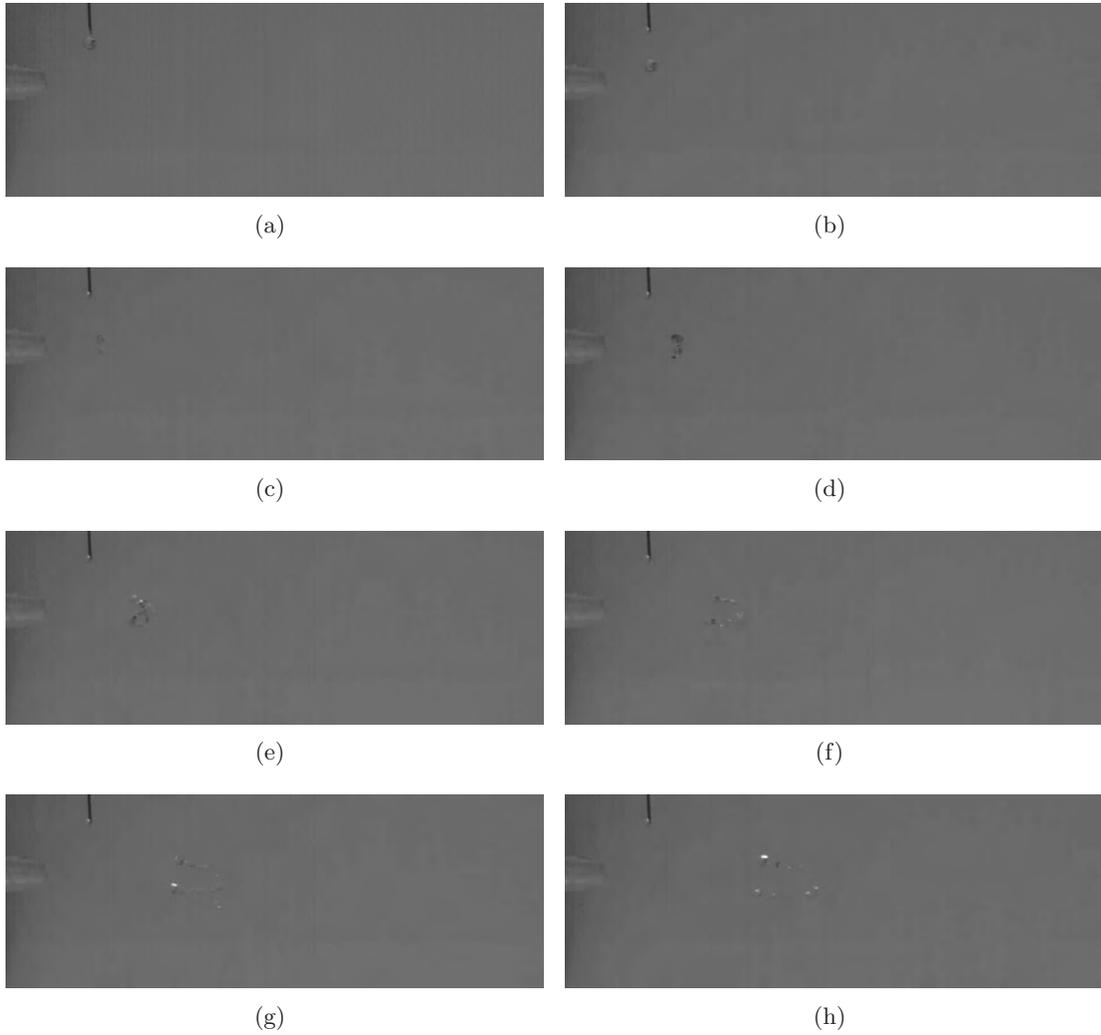


Abbildung B.3: Wasser, 8 NL/min

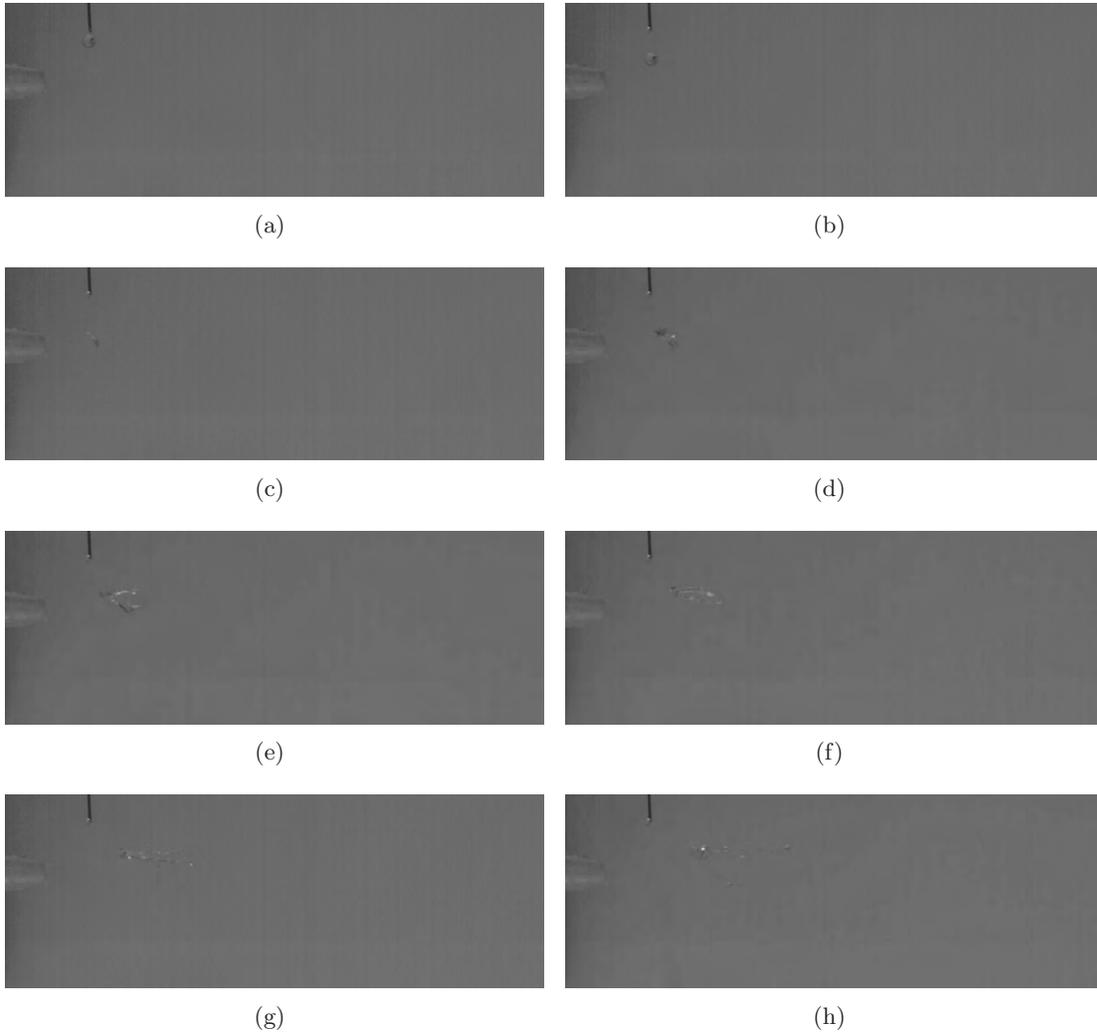


Abbildung B.4: Wasser, 10 NL/min

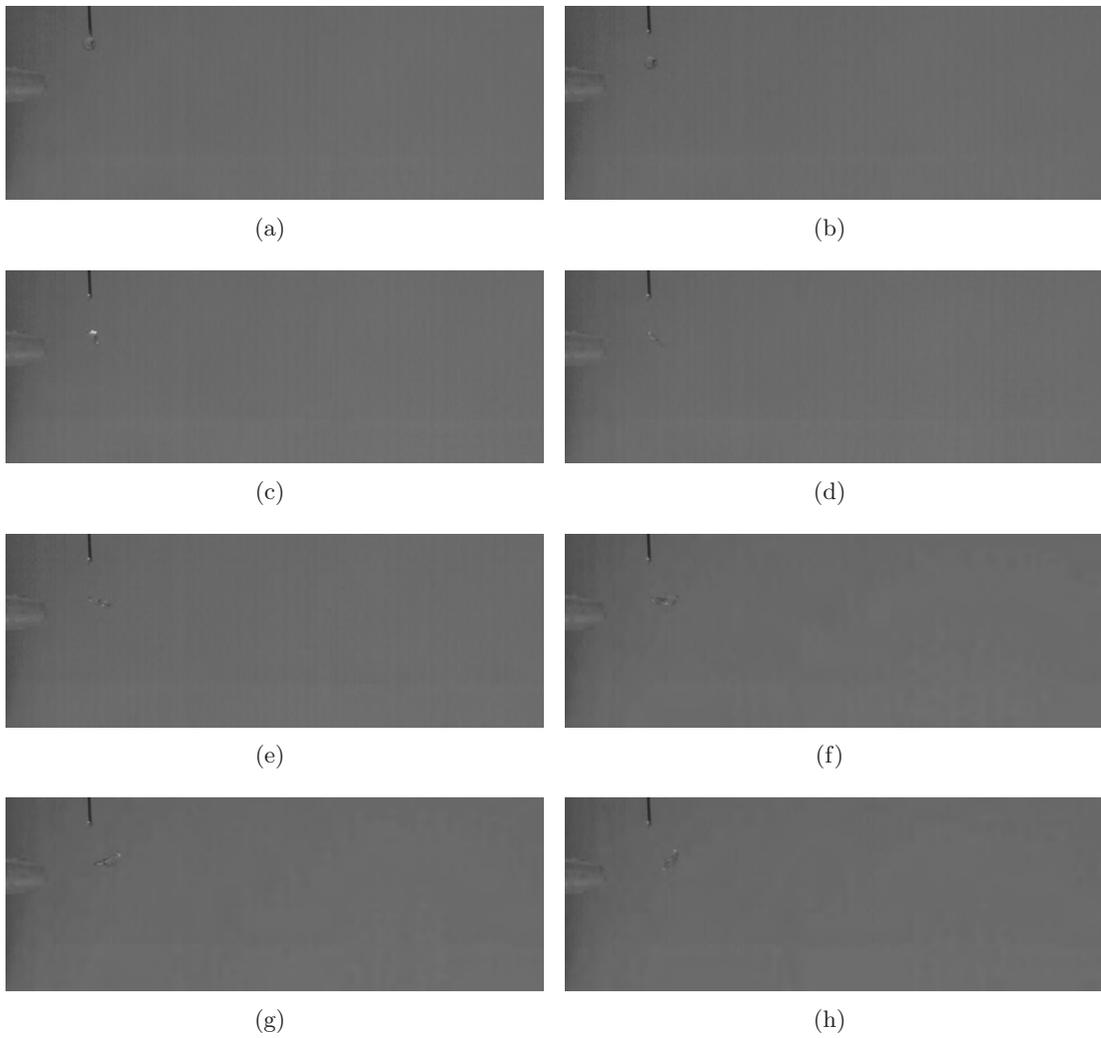


Abbildung B.5: Wasser, 15 NL/min

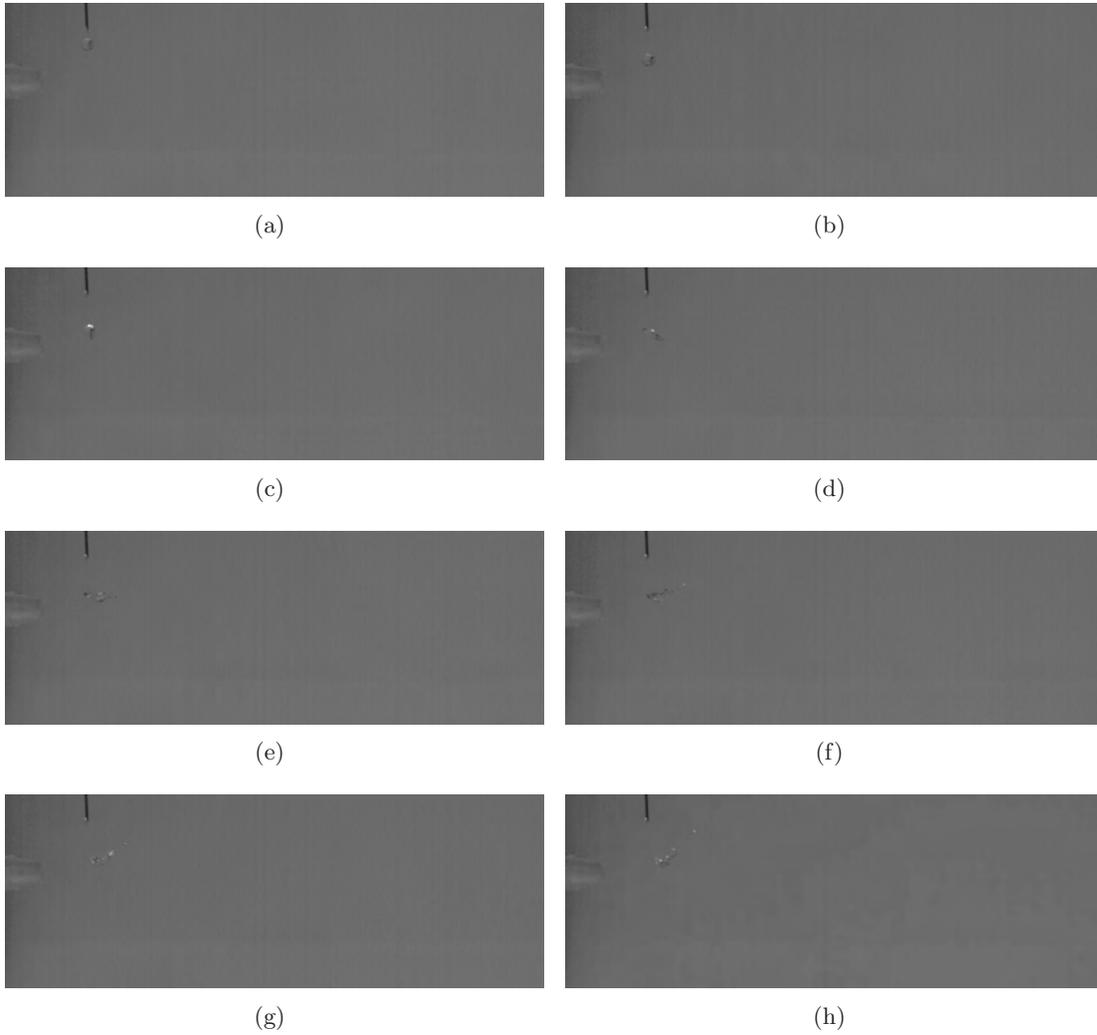


Abbildung B.6: Wasser, 20 NL/min

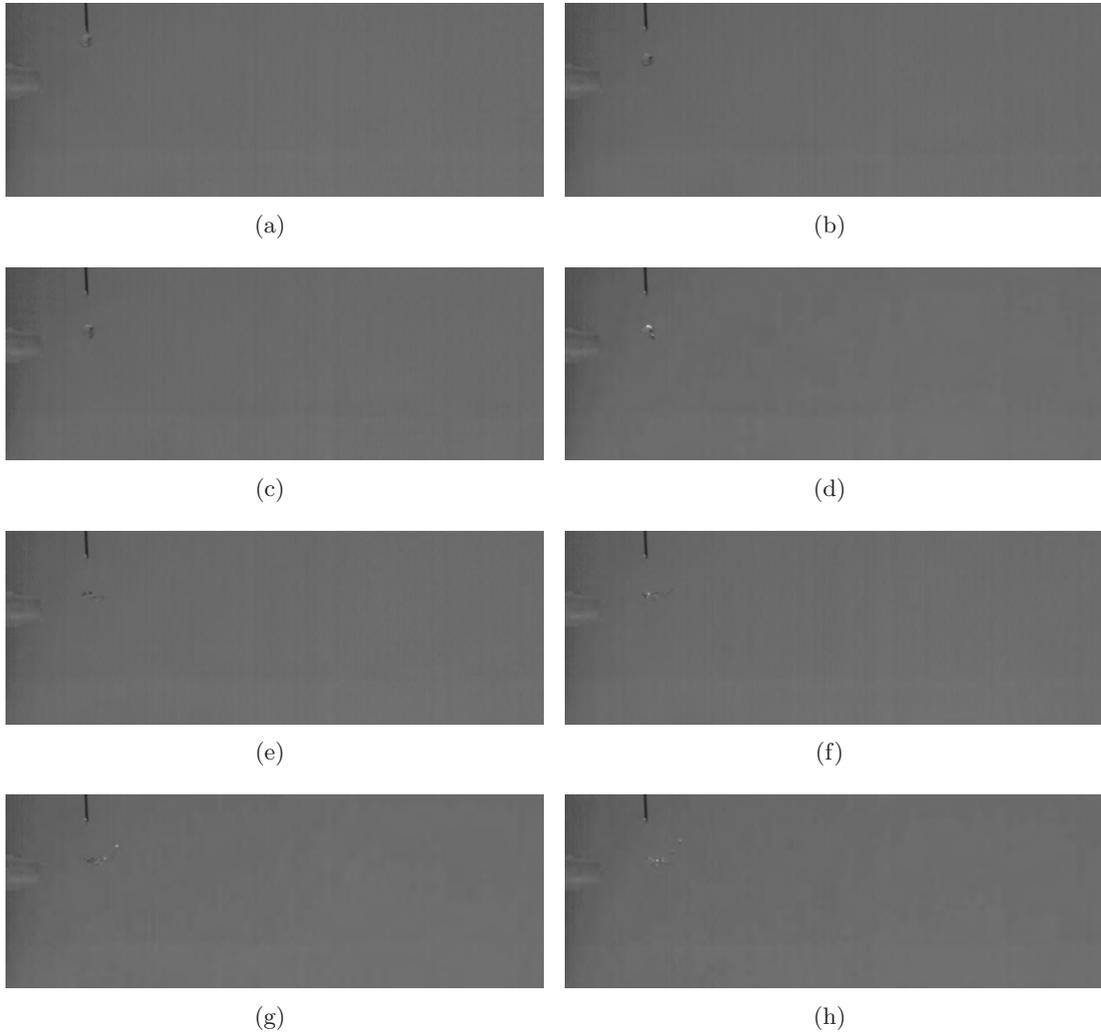


Abbildung B.7: Wasser, 25 NL/min

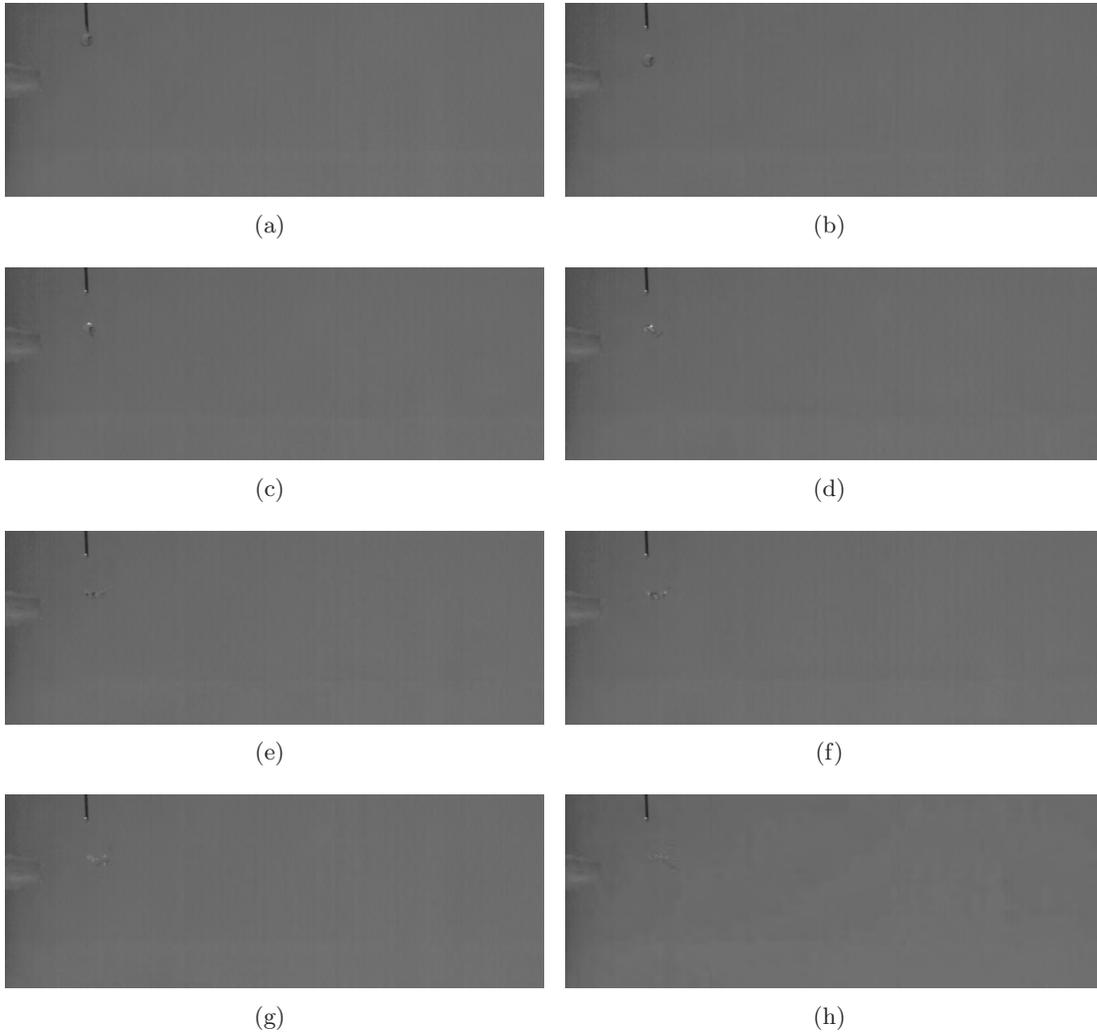


Abbildung B.8: Wasser, 30 NL/min

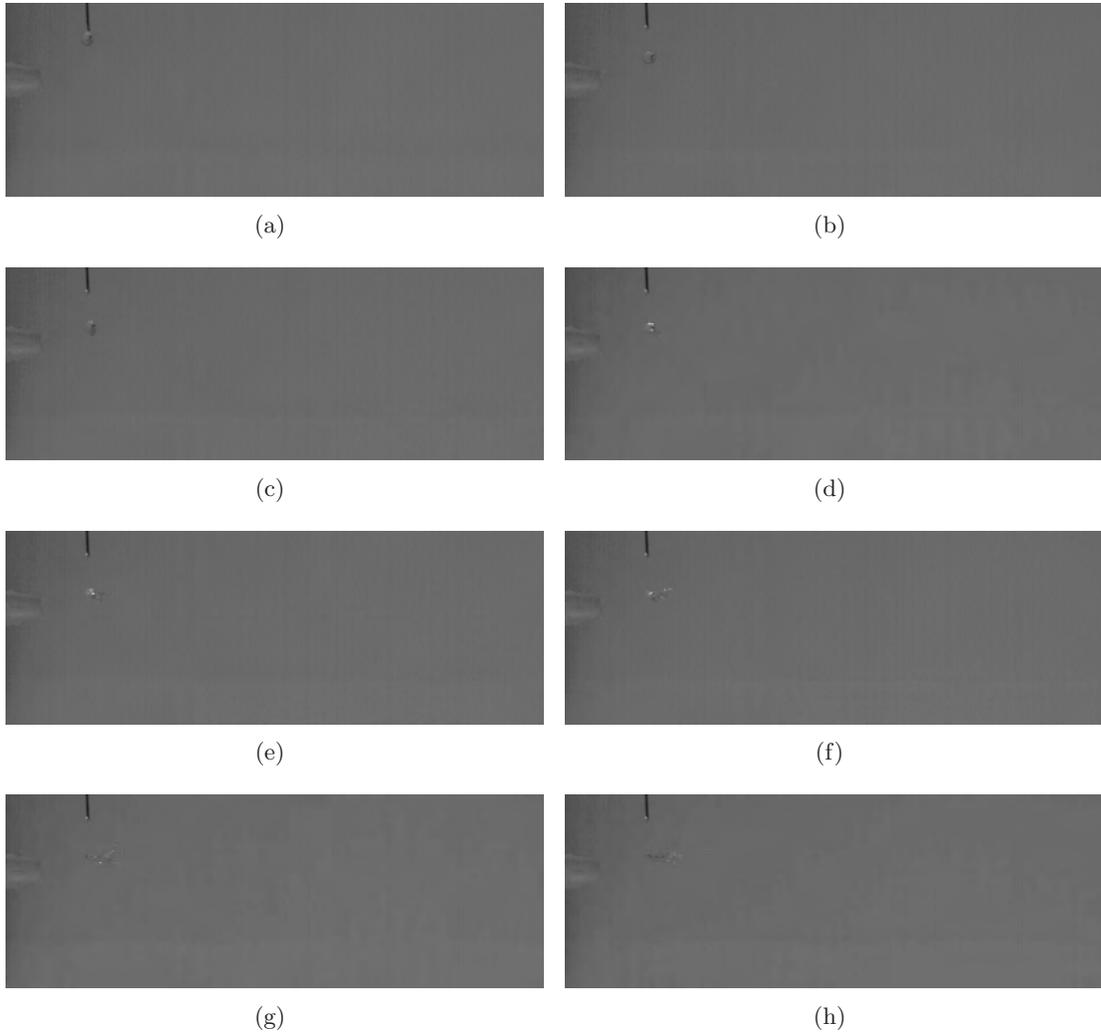
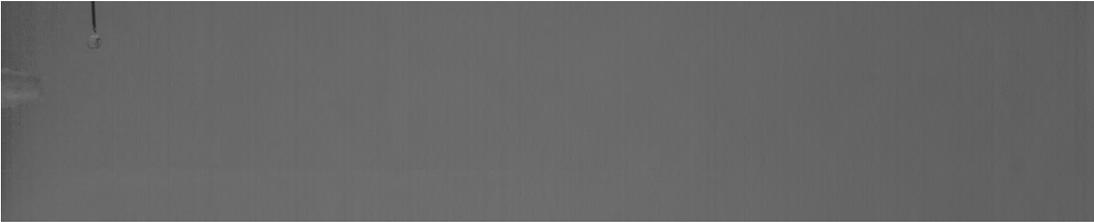


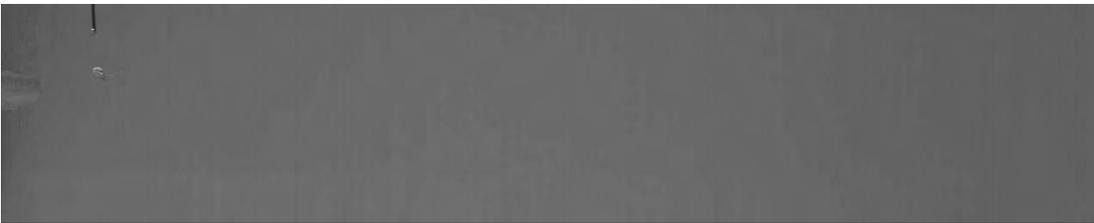
Abbildung B.9: Wasser, 40 NL/min



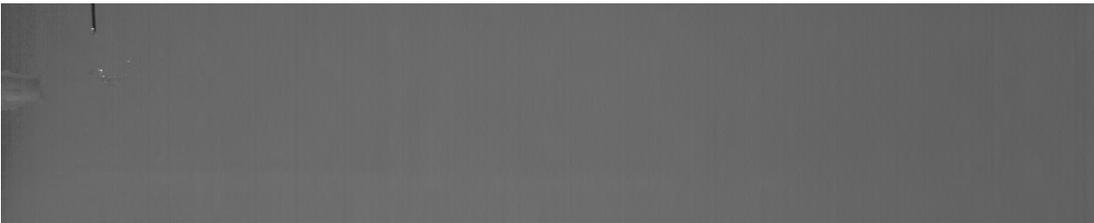
(a)



(b)

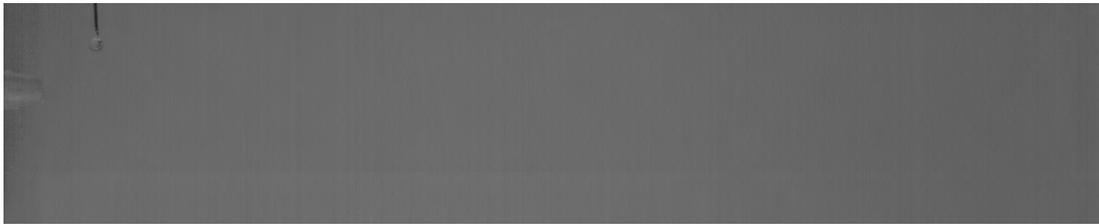


(c)



(d)

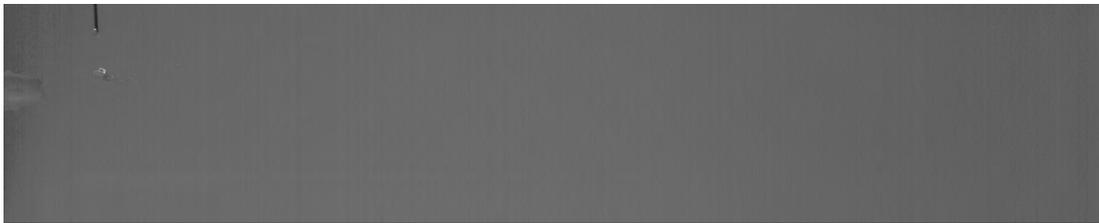
Abbildung B.10: Wasser, 50 NL/min



(a)



(b)

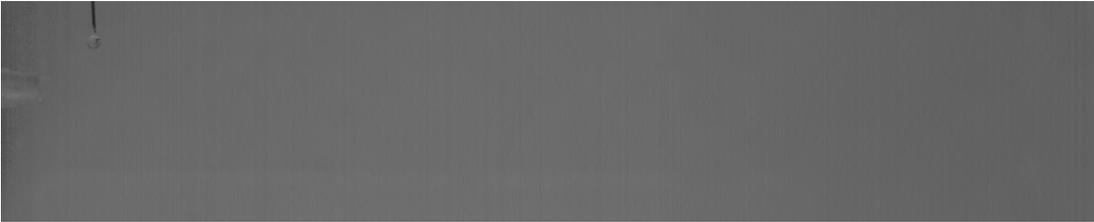


(c)



(d)

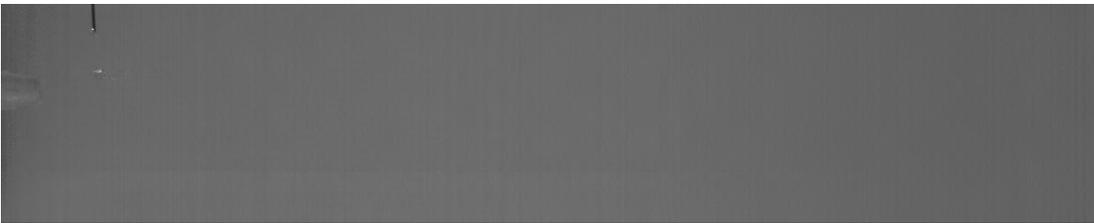
Abbildung B.11: Wasser, 60 NL/min



(a)



(b)

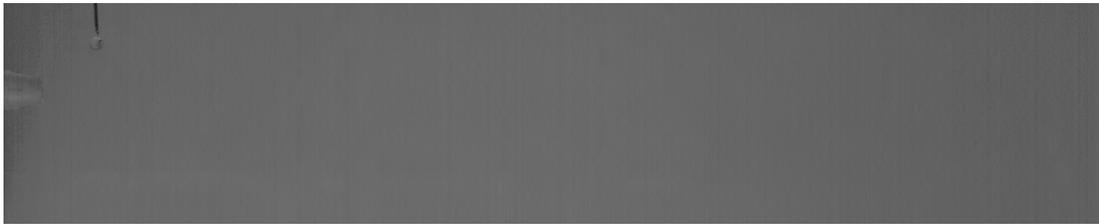


(c)



(d)

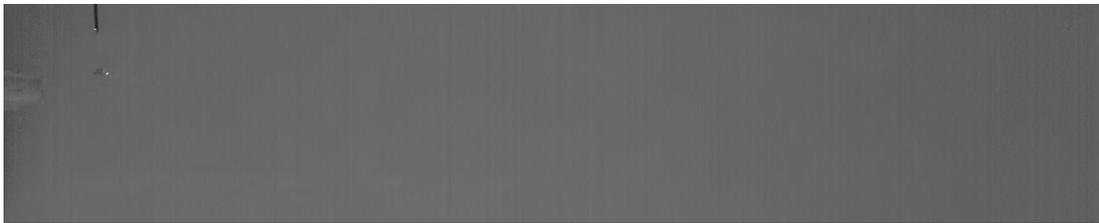
Abbildung B.12: Wasser, 70 NL/min



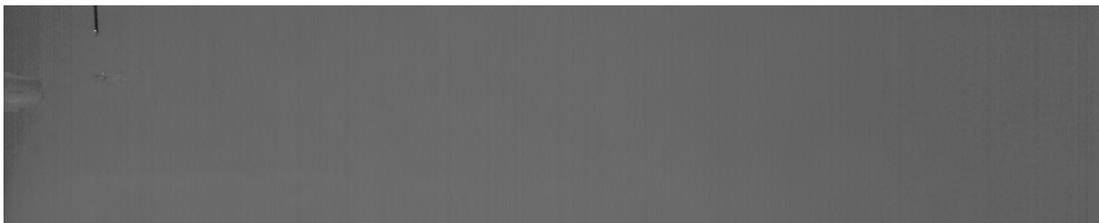
(a)



(b)

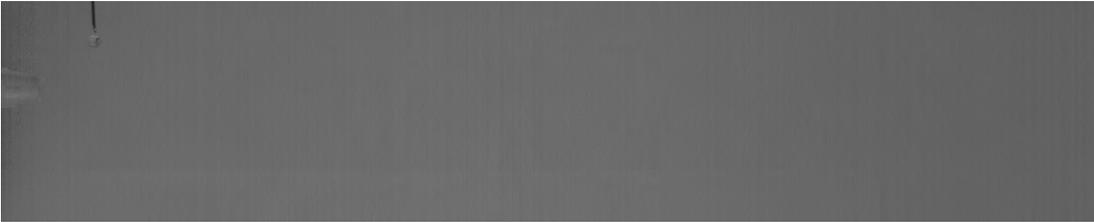


(c)

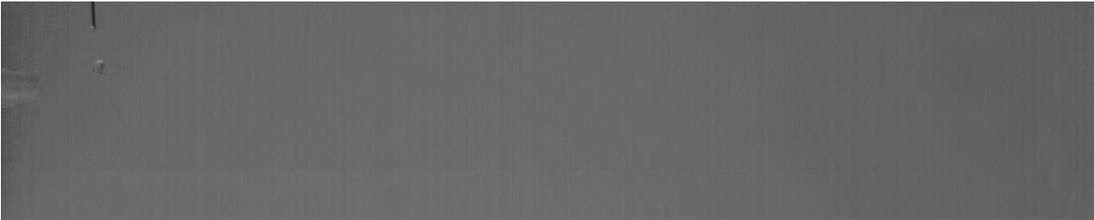


(d)

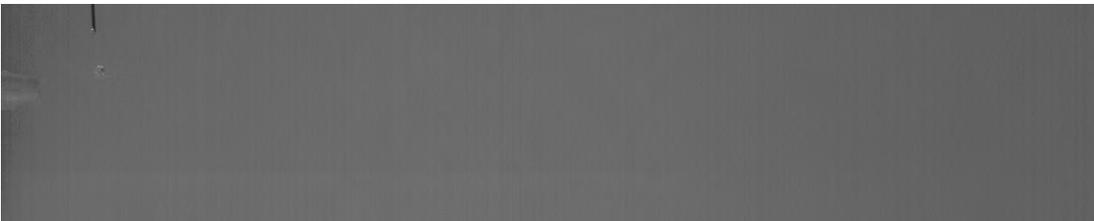
Abbildung B.13: Wasser, 80 NL/min



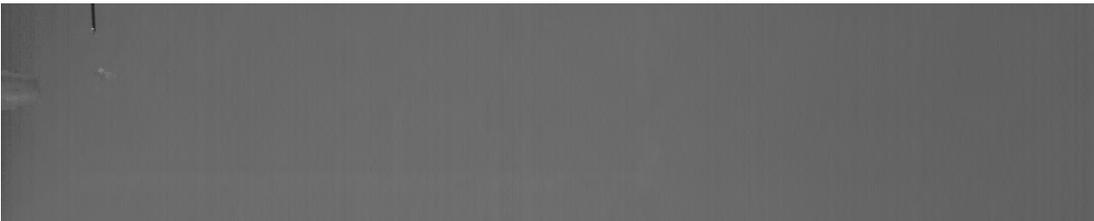
(a)



(b)



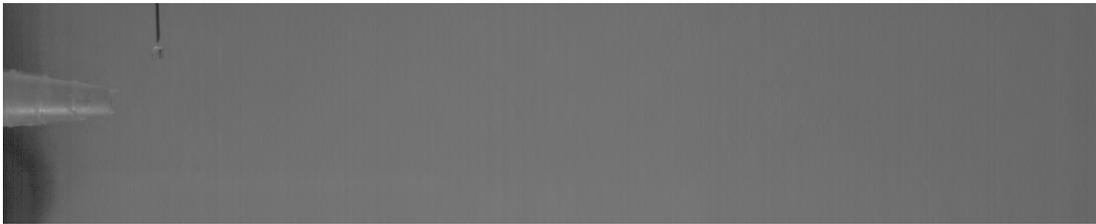
(c)



(d)

Abbildung B.14: Wasser, 90 NL/min

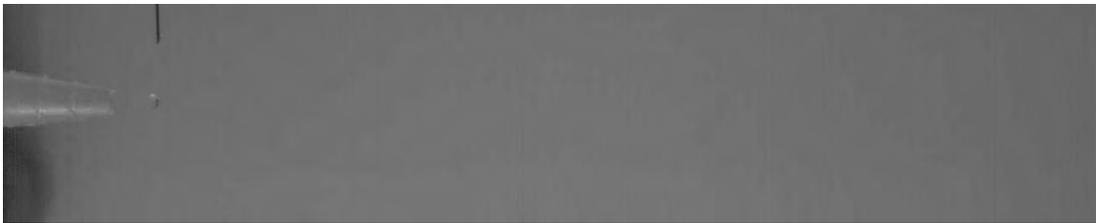
B.2 Ethanol



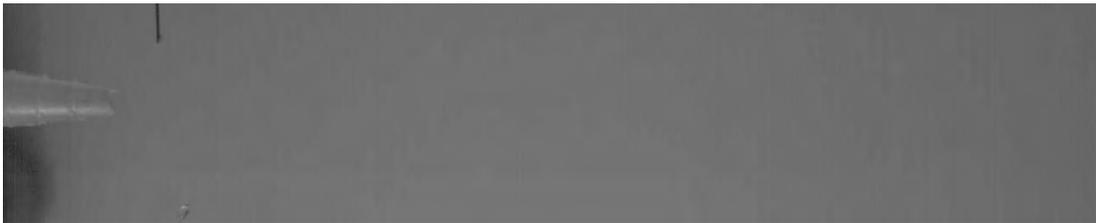
(a)



(b)



(c)



(d)

Abbildung B.15: Ethanol, 3 NL/min

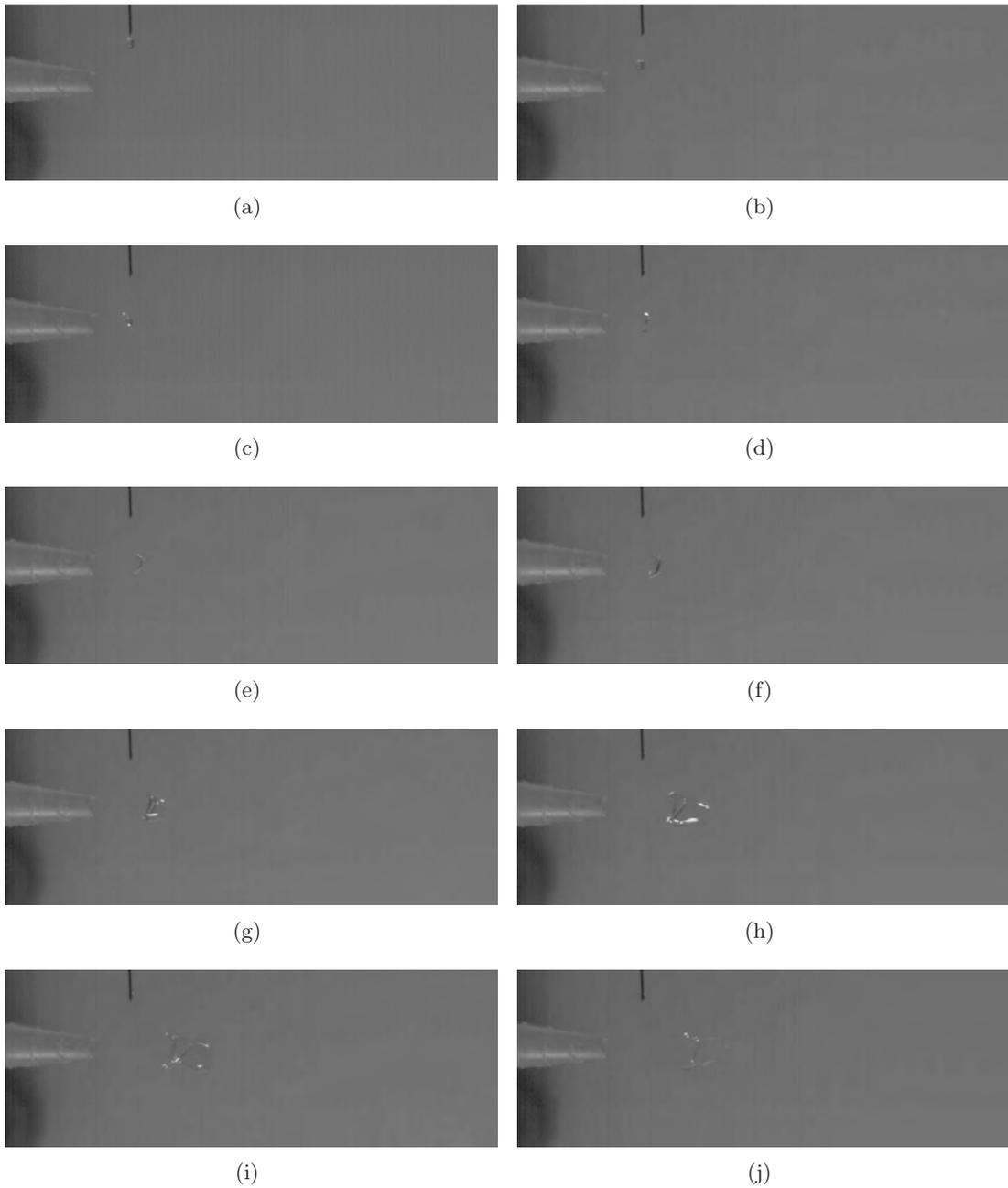


Abbildung B.16: Ethanol, 5 NL/min

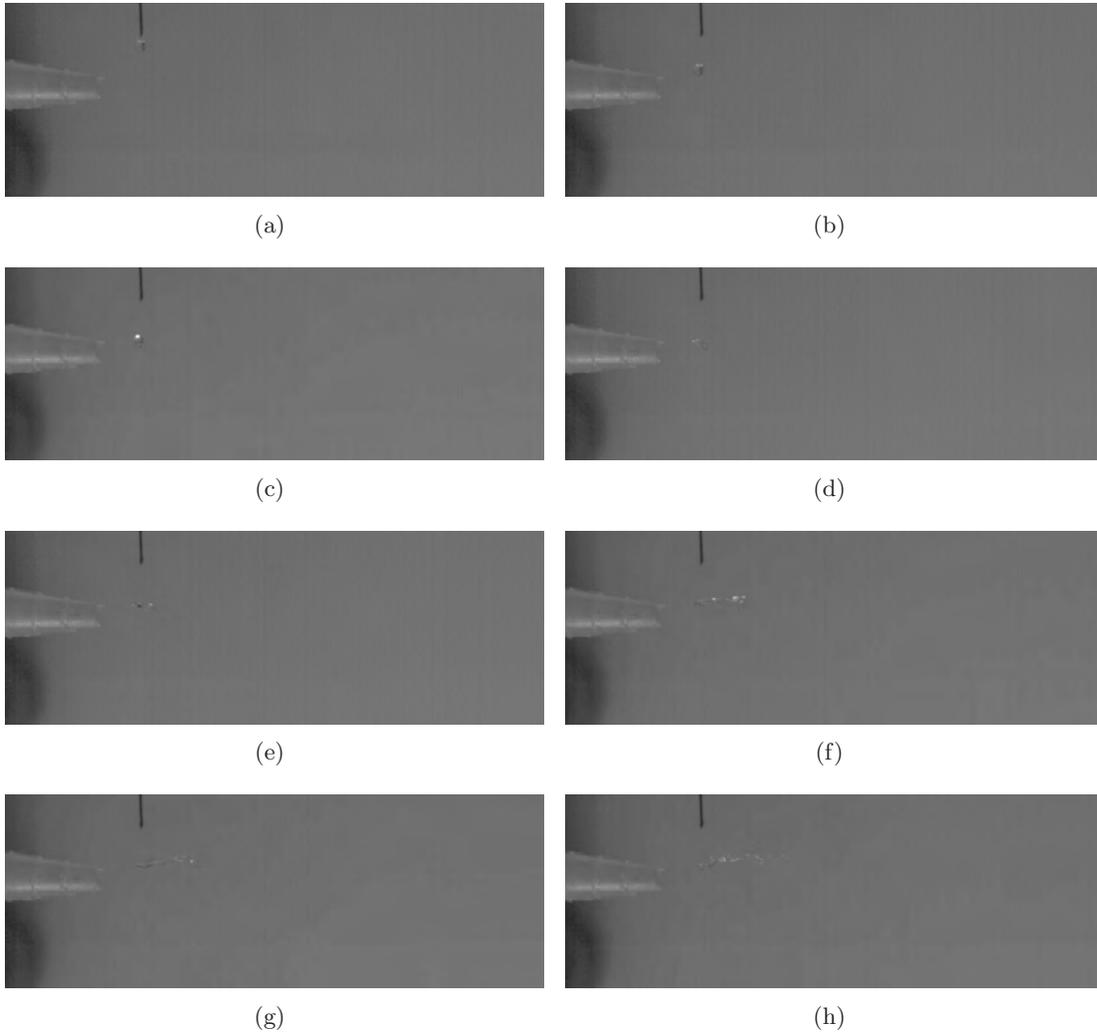


Abbildung B.17: Ethanol, 8 NL/min

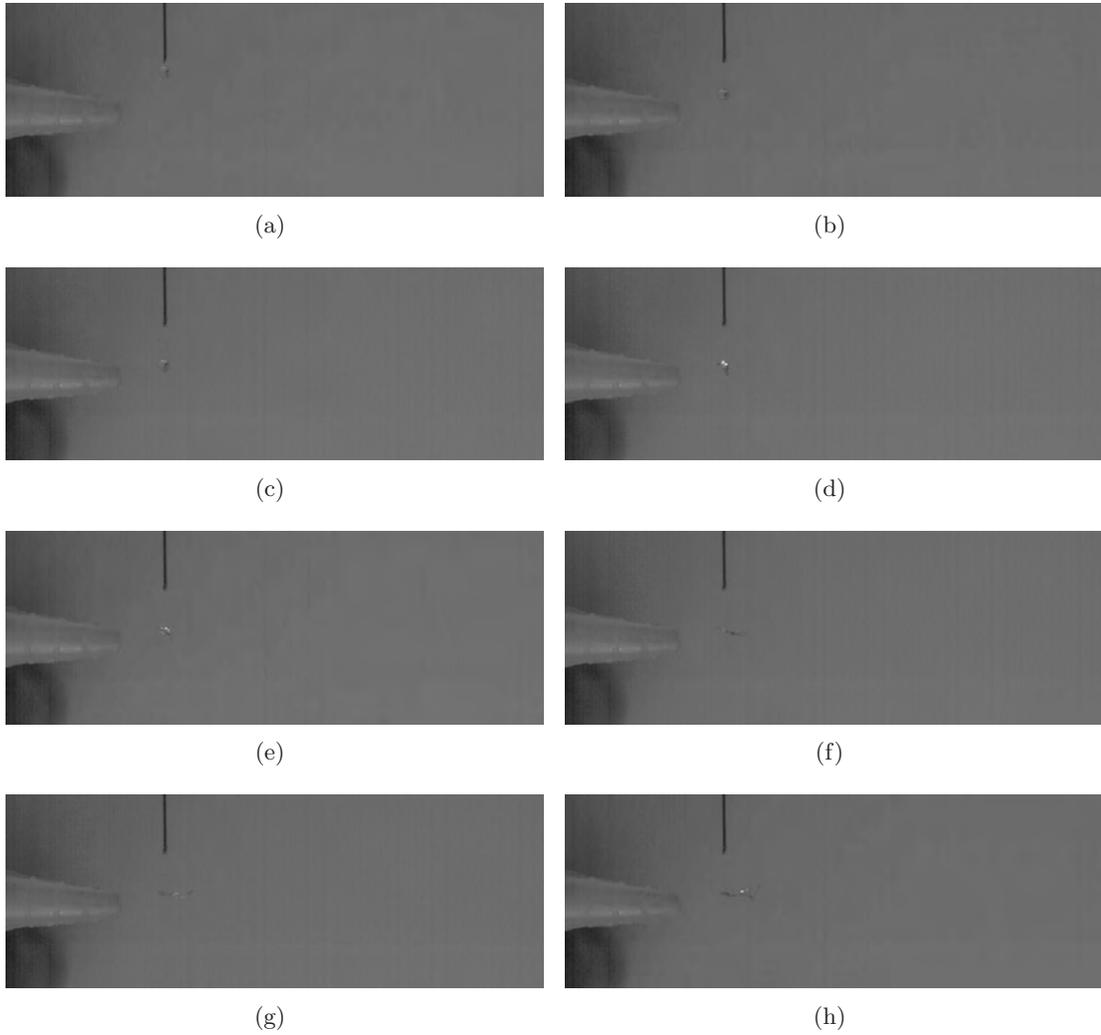


Abbildung B.18: Ethanol, 10 NL/min

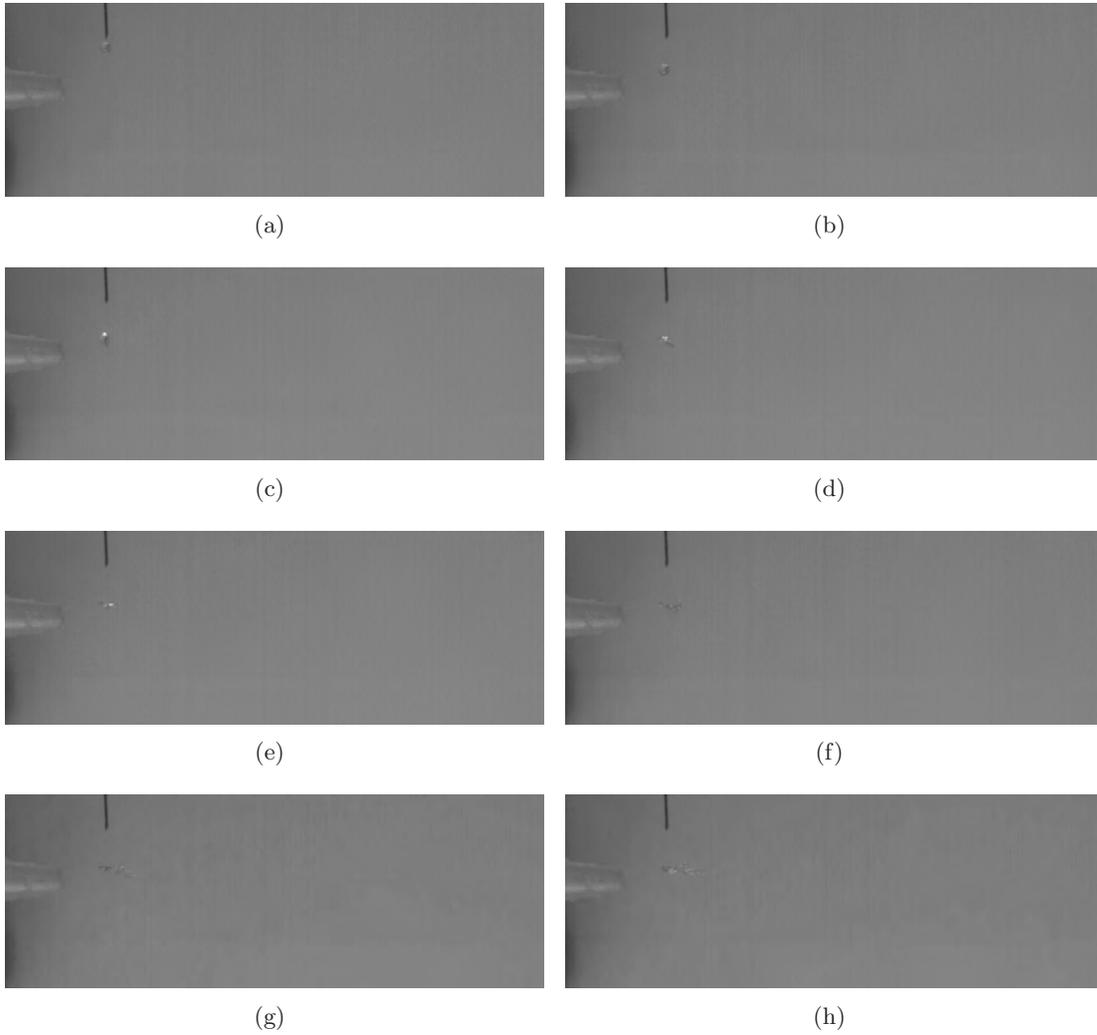


Abbildung B.19: Ethanol, 15 NL/min

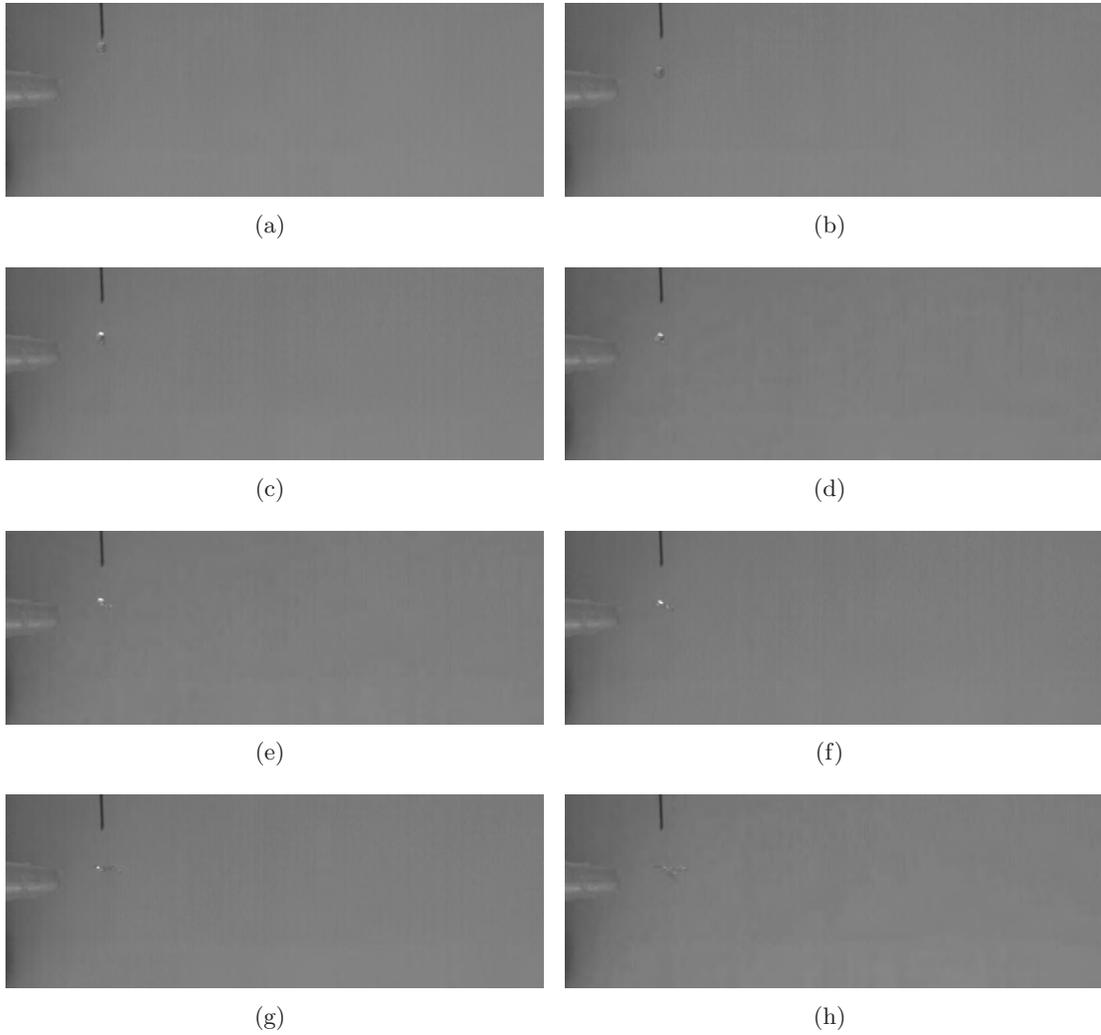
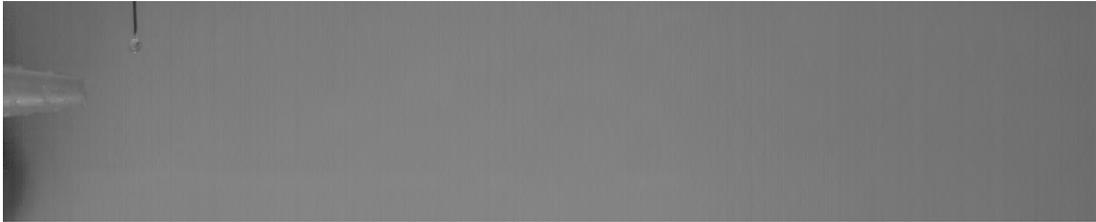


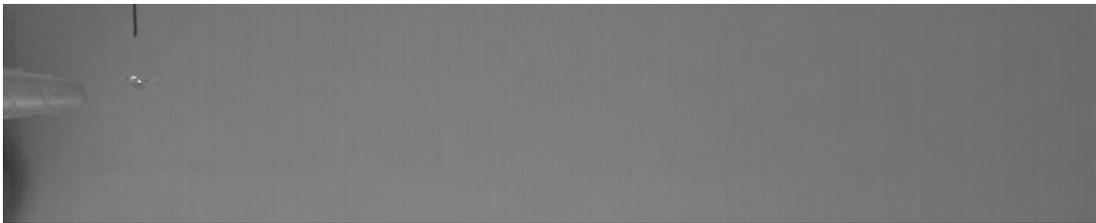
Abbildung B.20: Ethanol, 20 NL/min



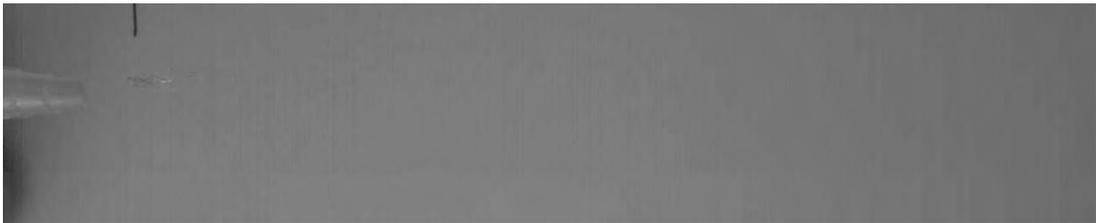
(a)



(b)

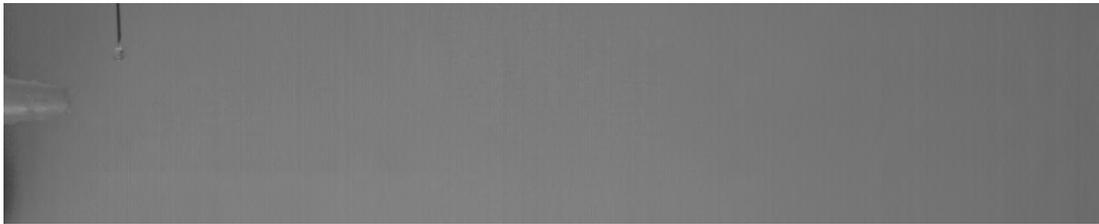


(c)

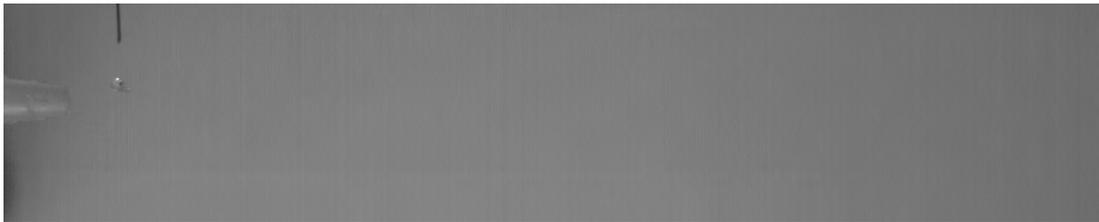


(d)

Abbildung B.21: Ethanol, 25 NL/min



(a)



(b)

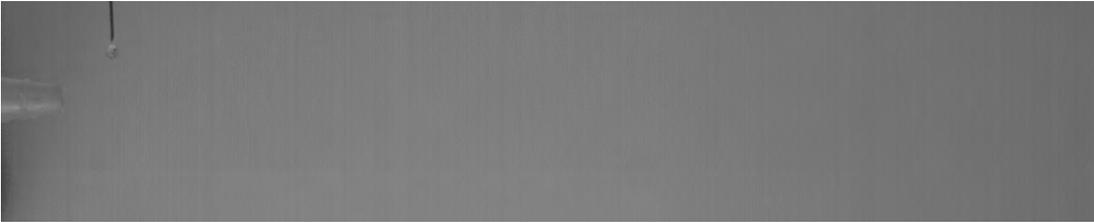


(c)

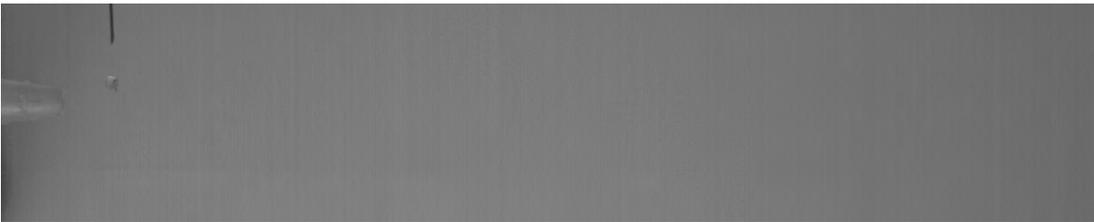


(d)

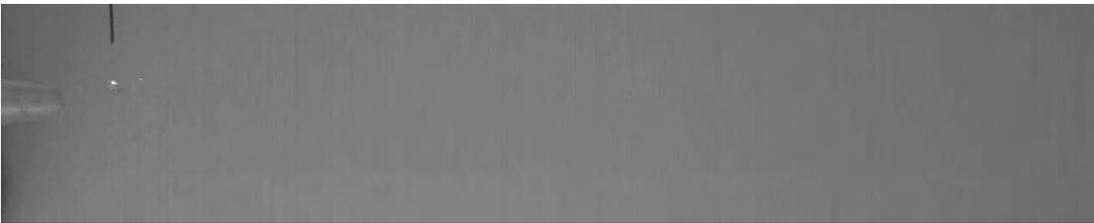
Abbildung B.22: Ethanol, 30 NL/min



(a)



(b)

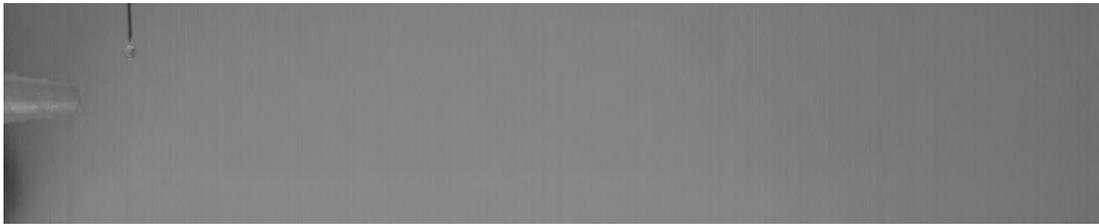


(c)

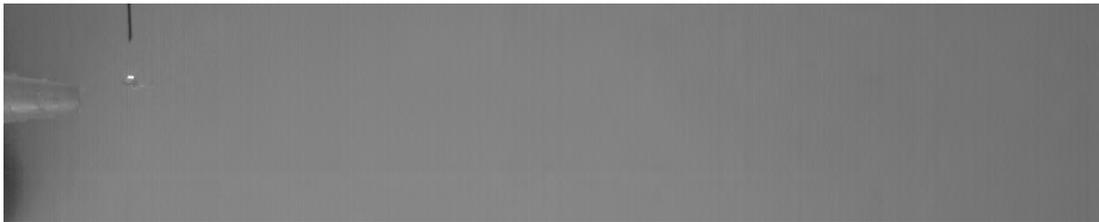


(d)

Abbildung B.23: Ethanol, 40 NL/min



(a)



(b)

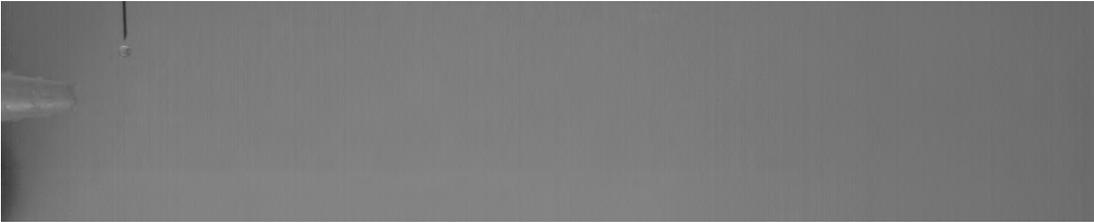


(c)



(d)

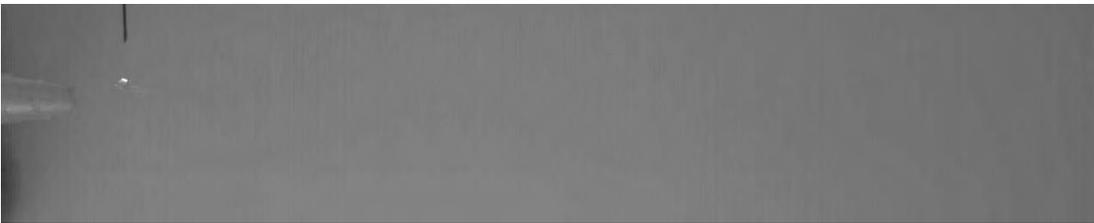
Abbildung B.24: Ethanol, 50 NL/min



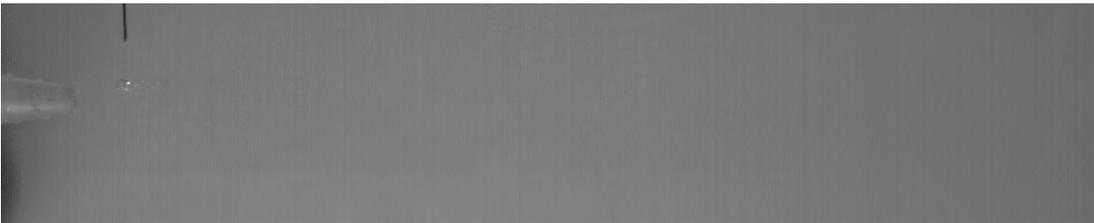
(a)



(b)

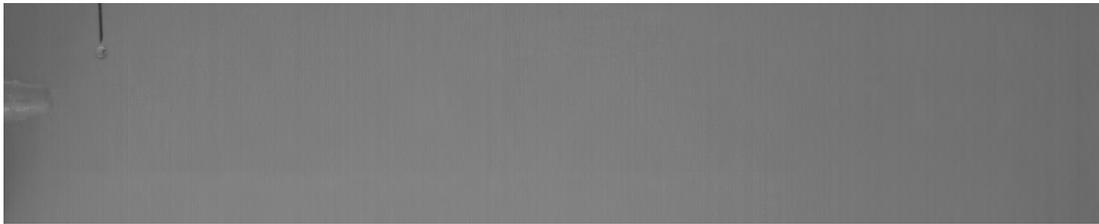


(c)

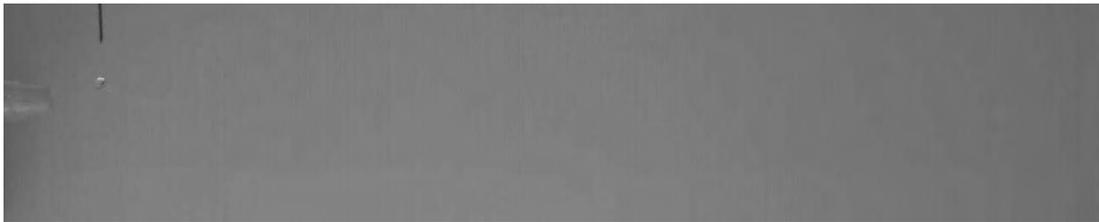


(d)

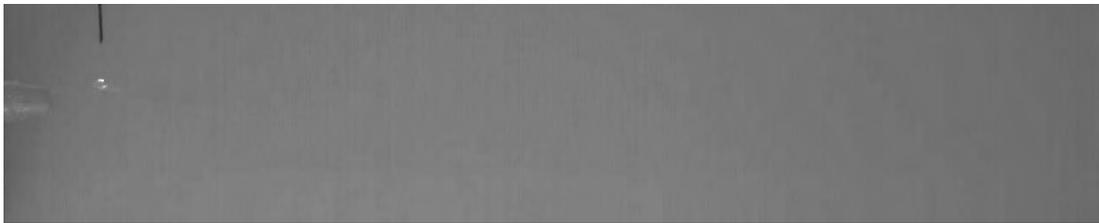
Abbildung B.25: Ethanol, 60 NL/min



(a)



(b)

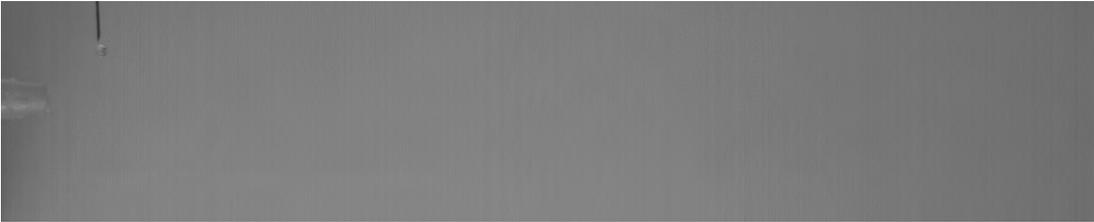


(c)



(d)

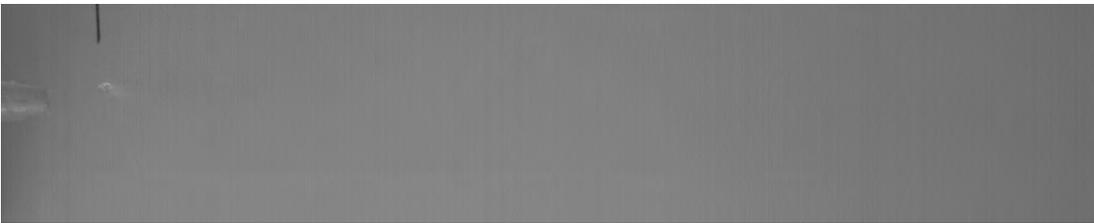
Abbildung B.26: Ethanol, 70 NL/min



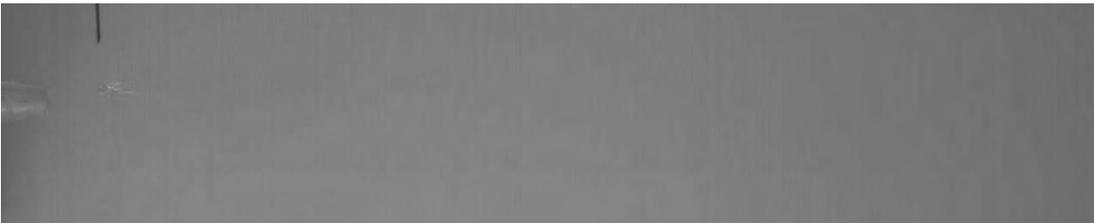
(a)



(b)

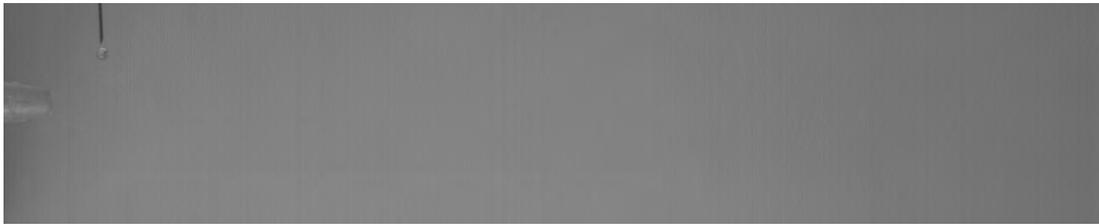


(c)



(d)

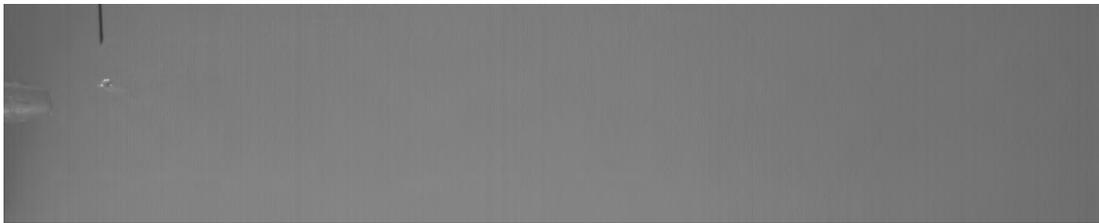
Abbildung B.27: Ethanol, 80 NL/min



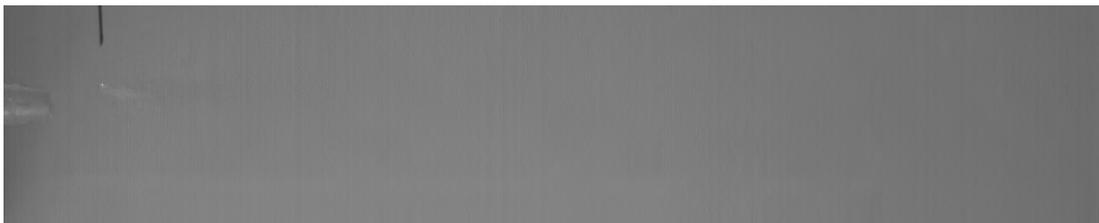
(a)



(b)



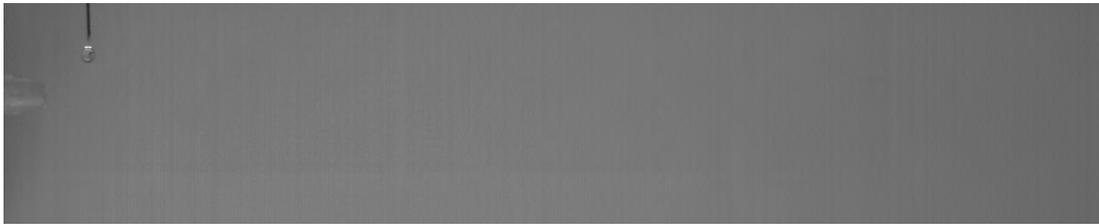
(c)



(d)

Abbildung B.28: Ethanol, 90 NL/min

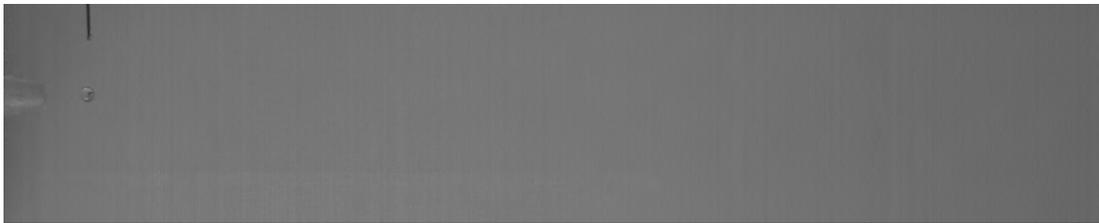
B.3 Paraffinöl



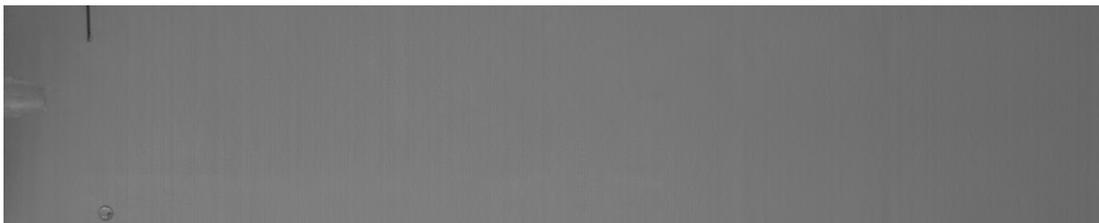
(a)



(b)

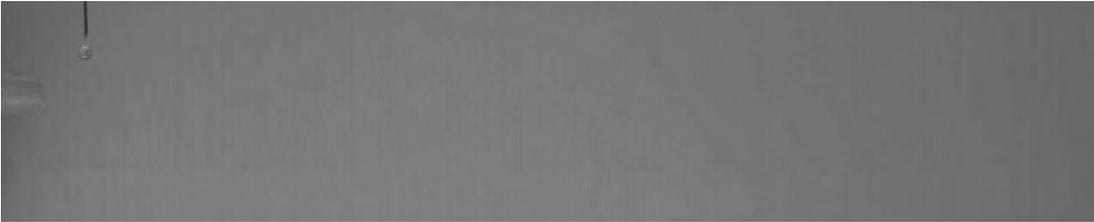


(c)



(d)

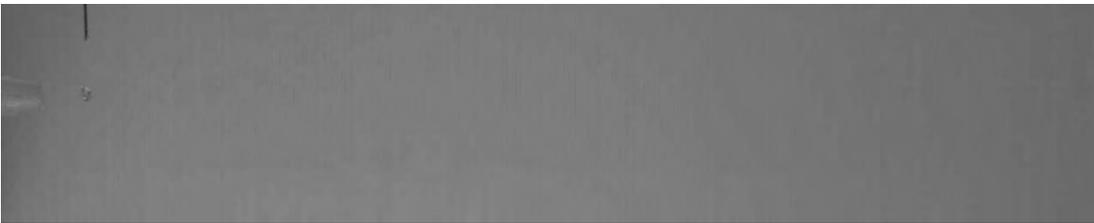
Abbildung B.29: Paraffinöl, 3 NL/min



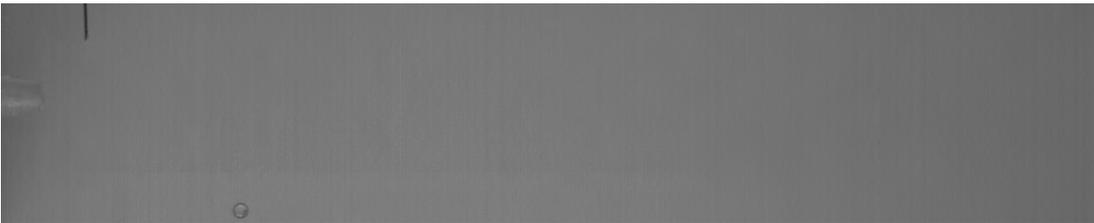
(a)



(b)



(c)



(d)

Abbildung B.30: Paraffinöl, 5 NL/min

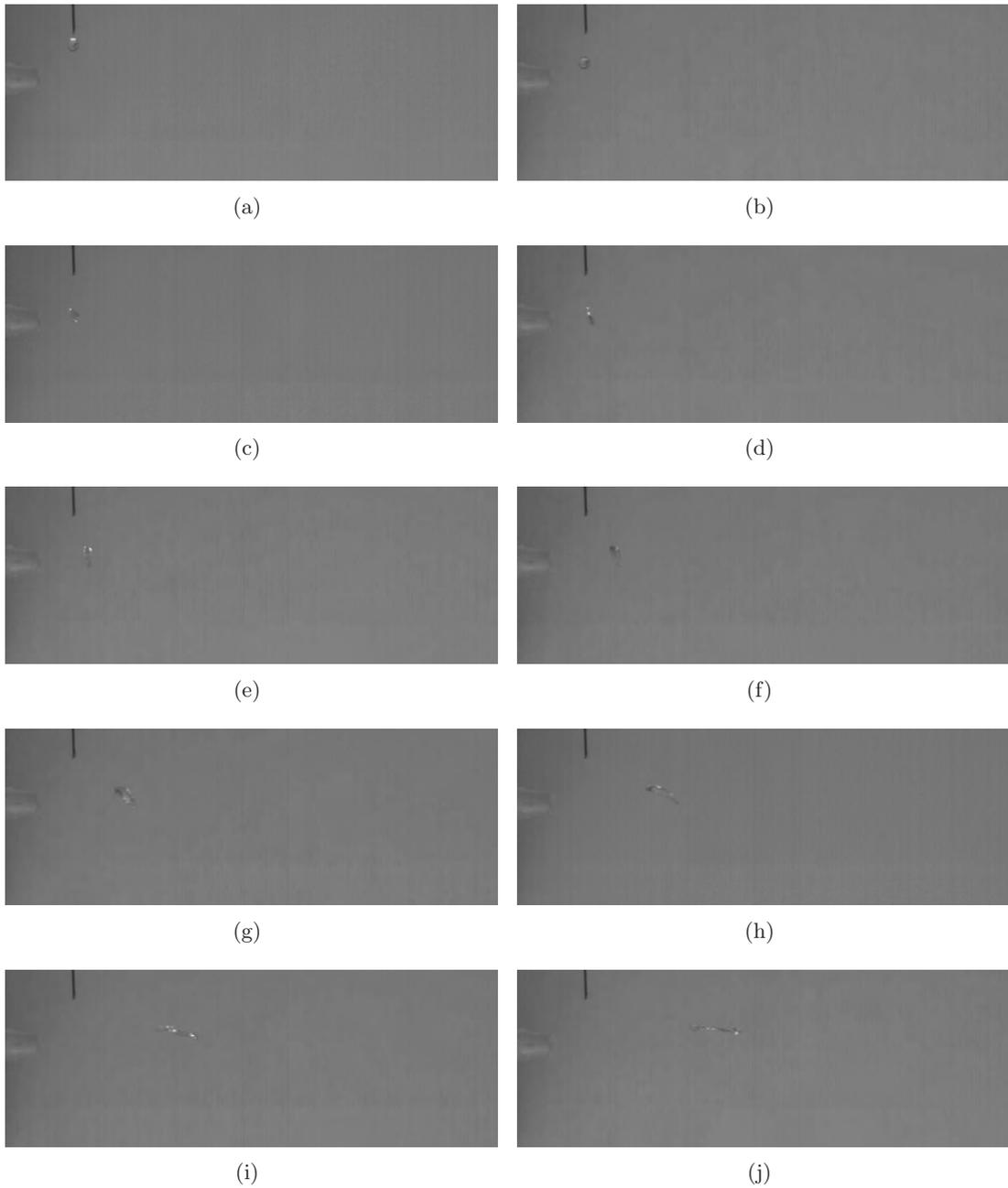


Abbildung B.31: Paraffinöl, 8NL/min

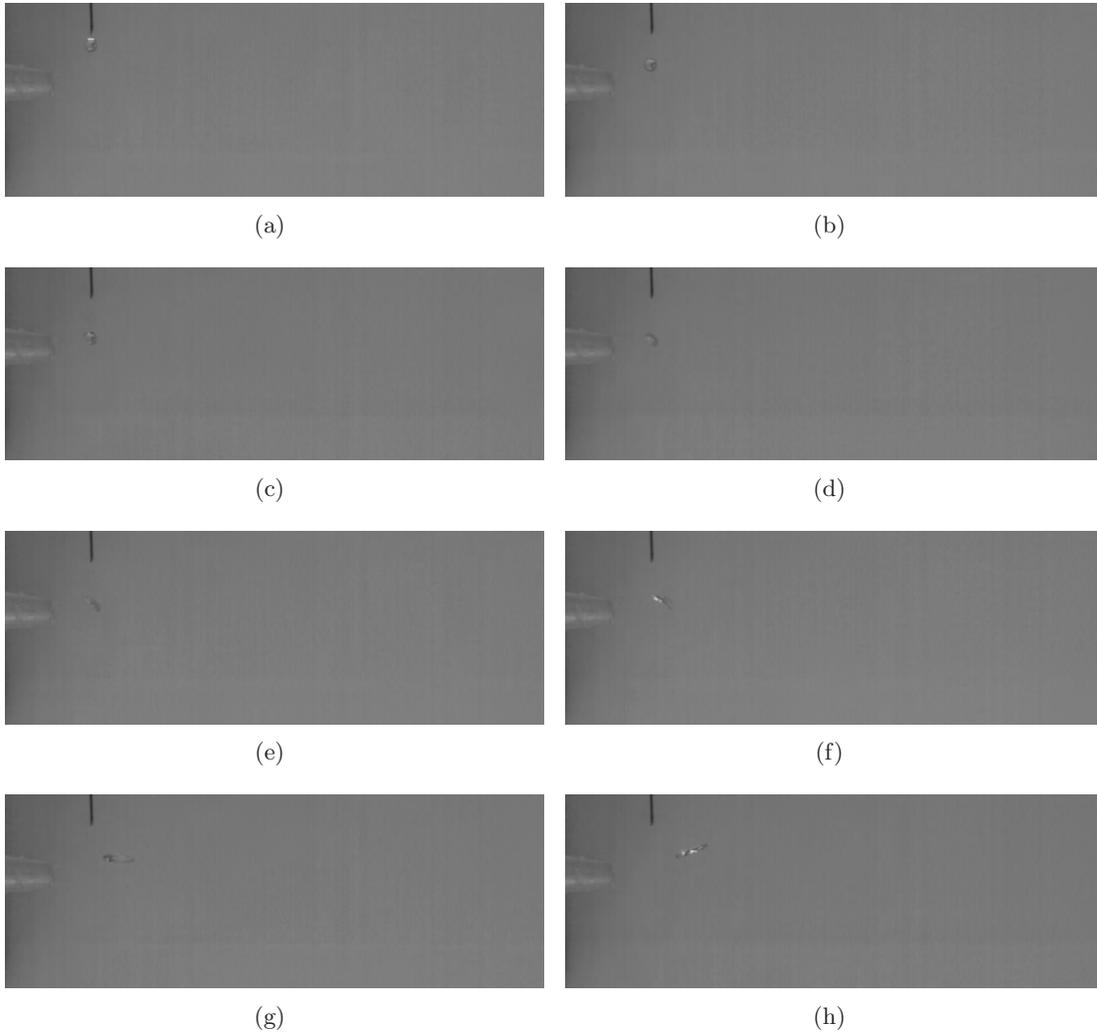


Abbildung B.32: Paraffinöl, 10NL/min

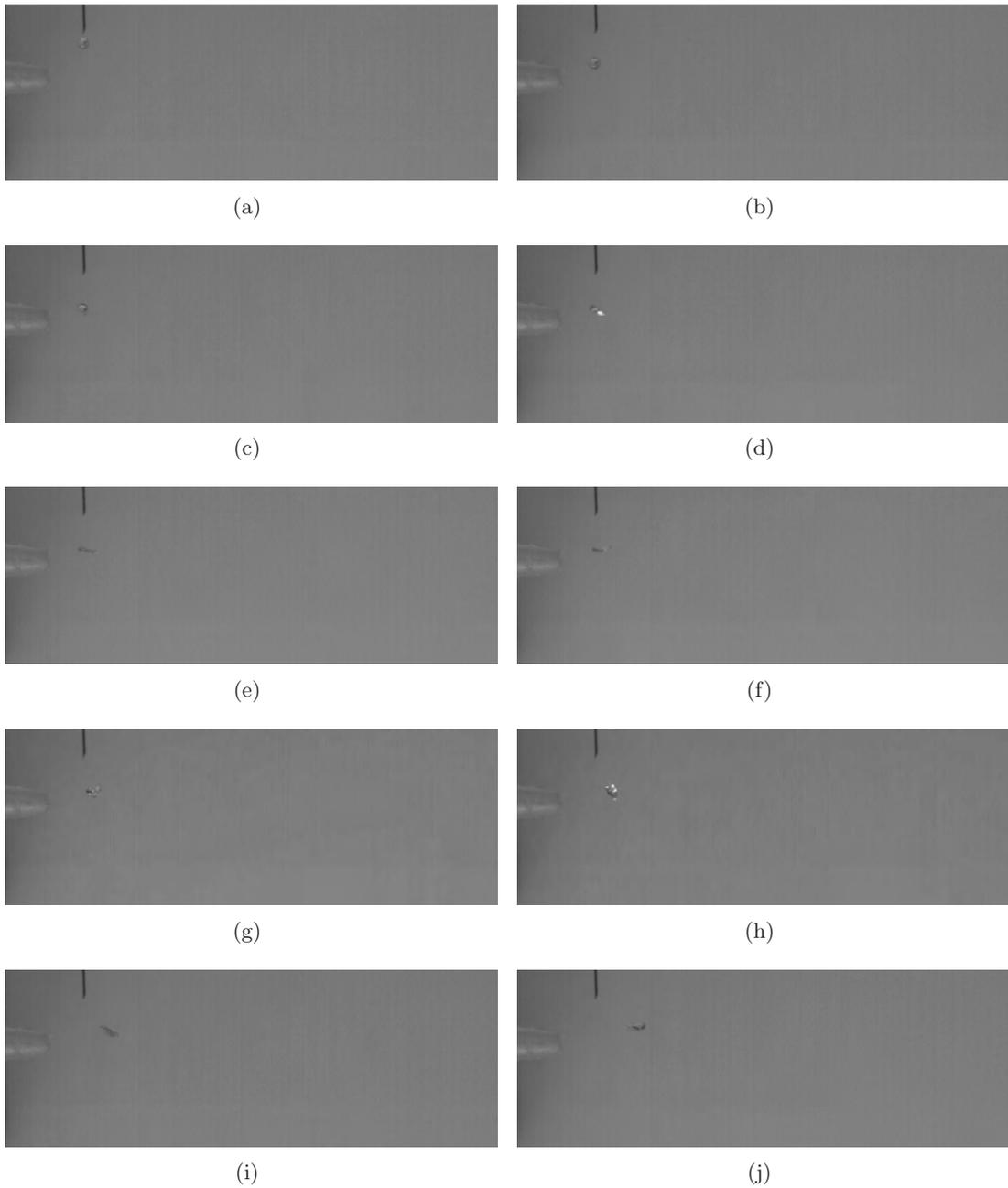


Abbildung B.33: Paraffinöl, 15 NL/min

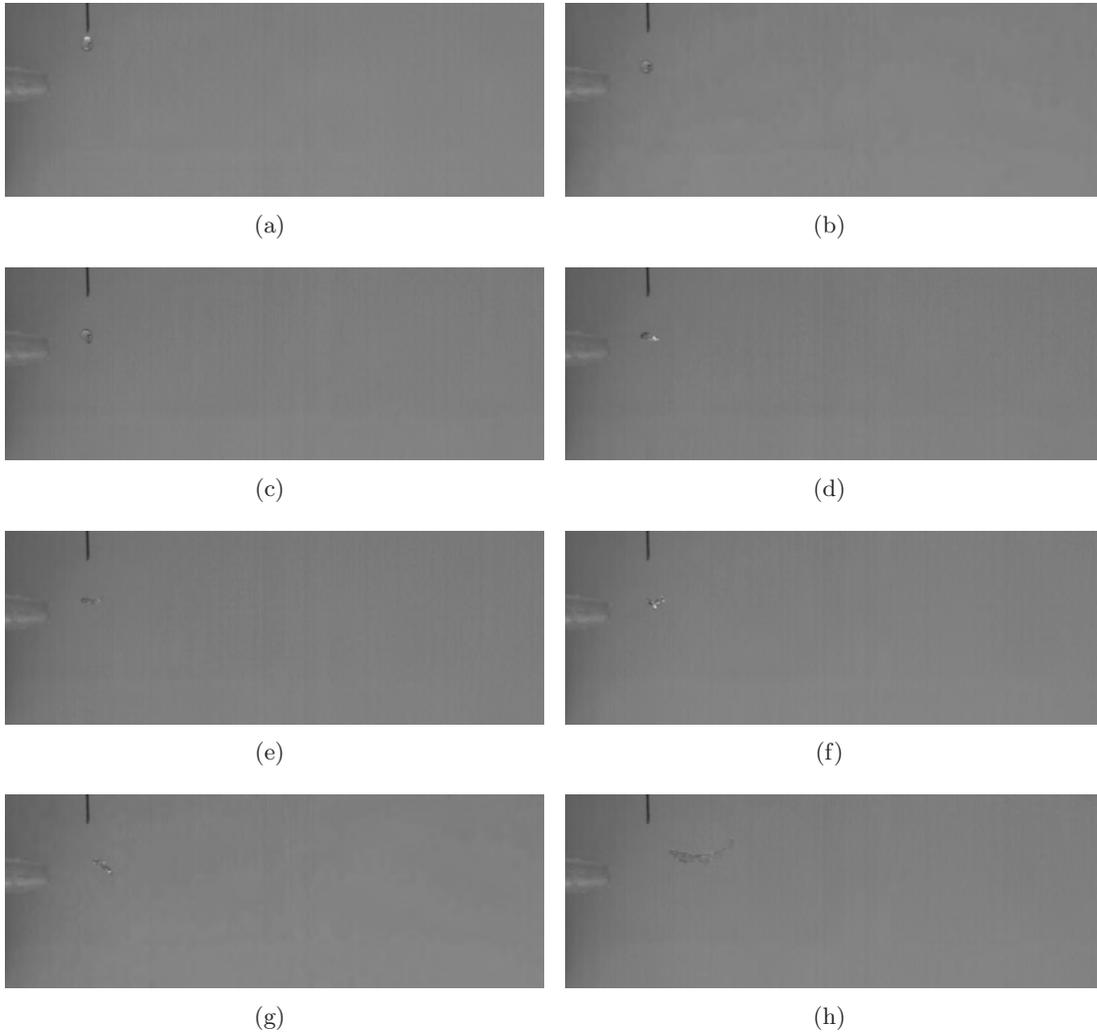


Abbildung B.34: Paraffinöl, 20 NL/min

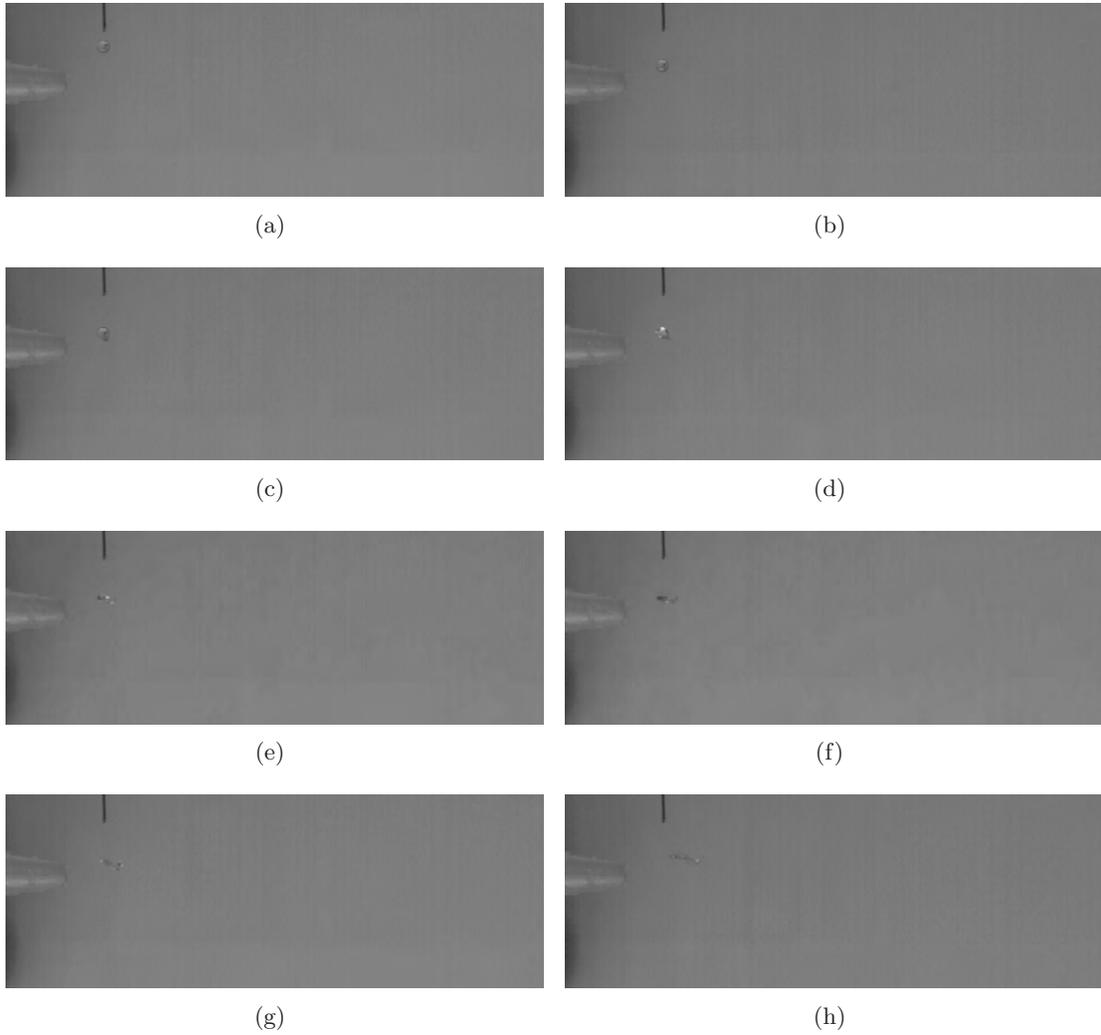


Abbildung B.35: Paraffinöl, 25 NL/min

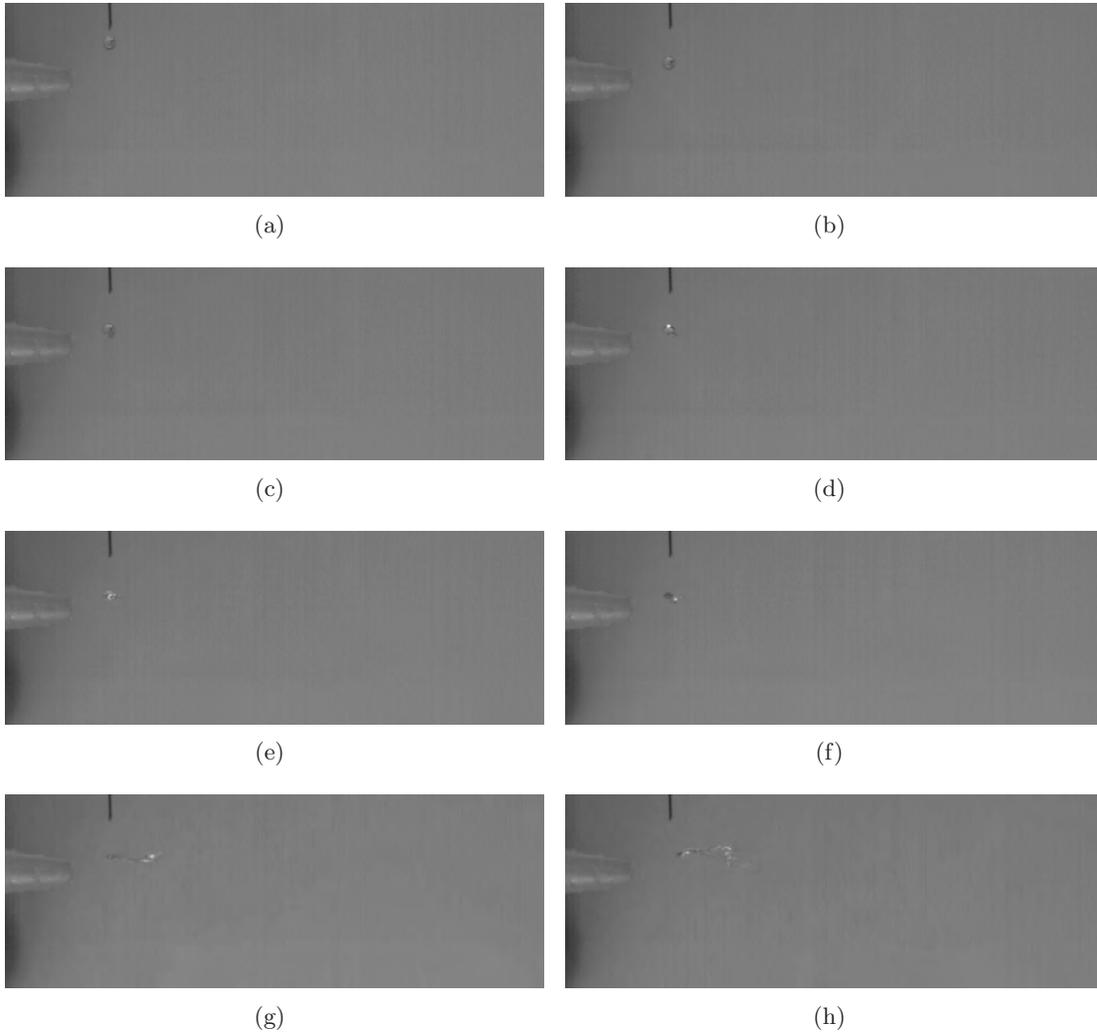


Abbildung B.36: Paraffinöl, 30 NL/min

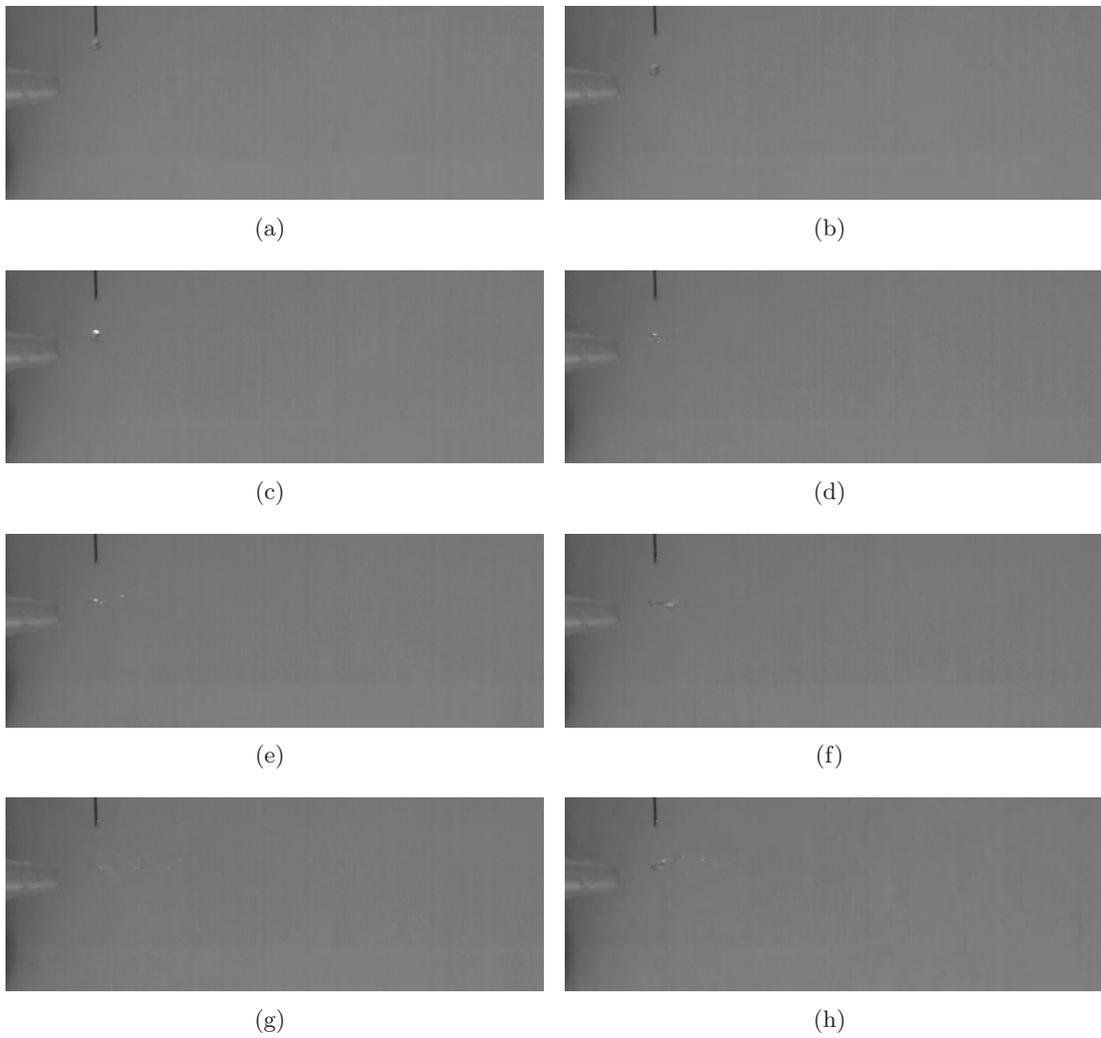
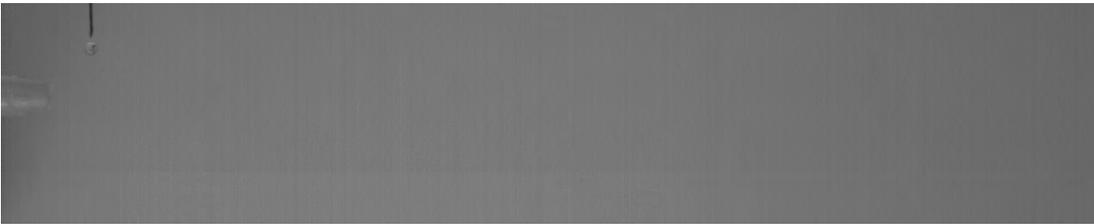
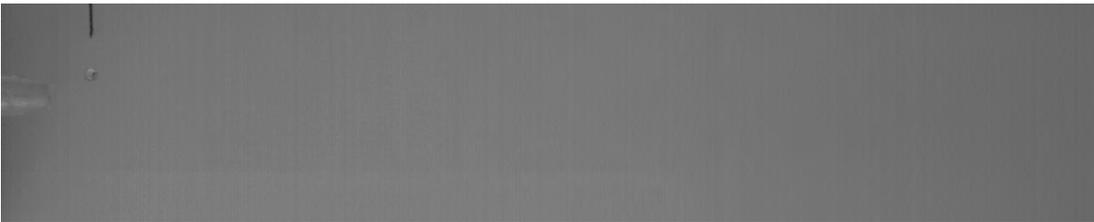


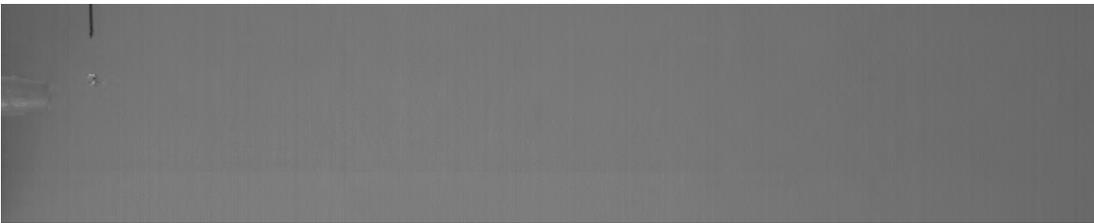
Abbildung B.37: Paraffinöl, 40 NL/min



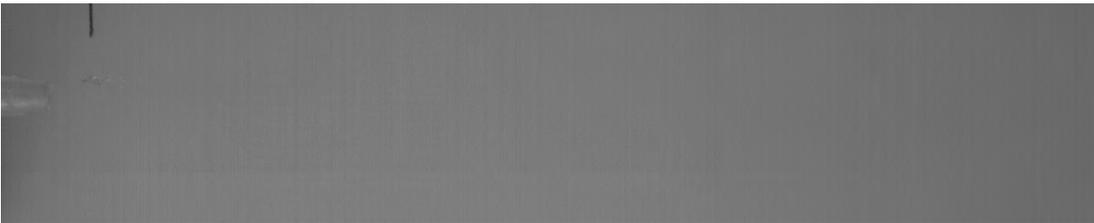
(a)



(b)

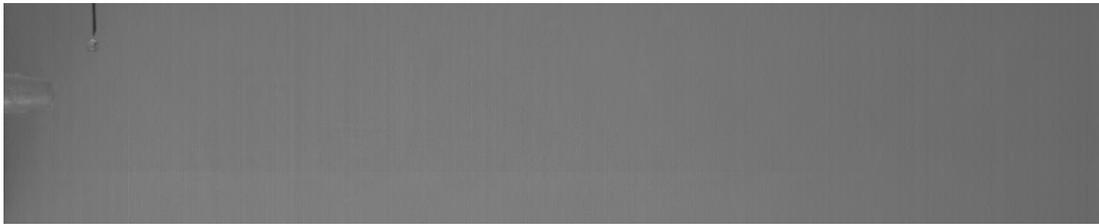


(c)

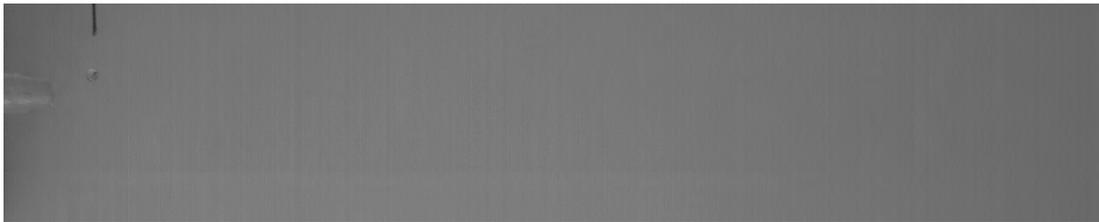


(d)

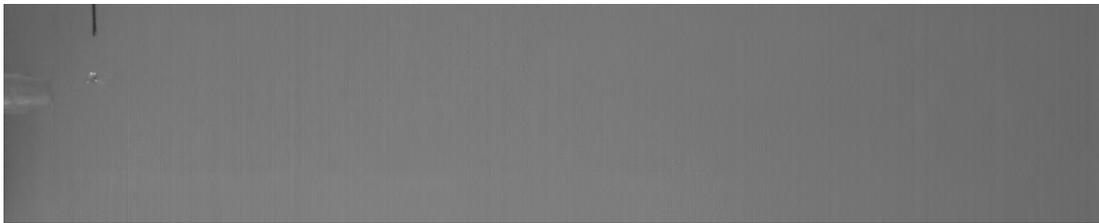
Abbildung B.38: Paraffinöl, 50 NL/min



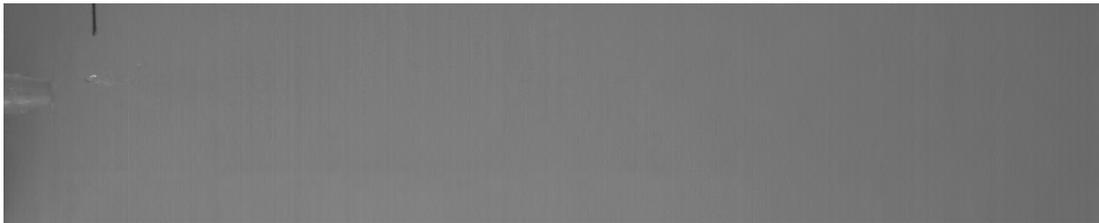
(a)



(b)

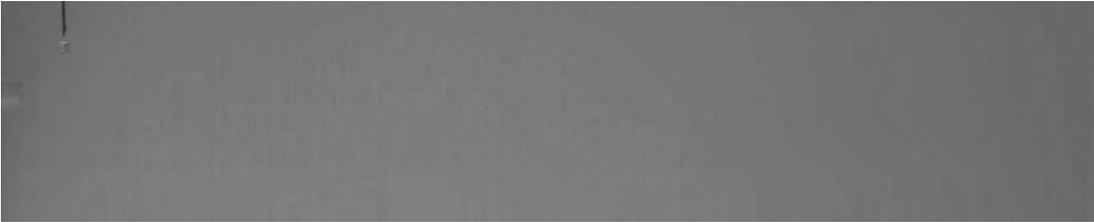


(c)

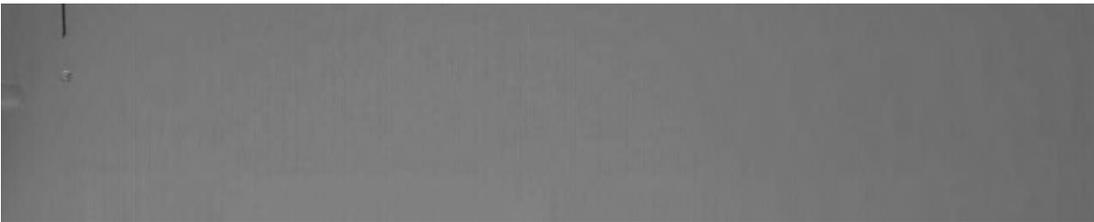


(d)

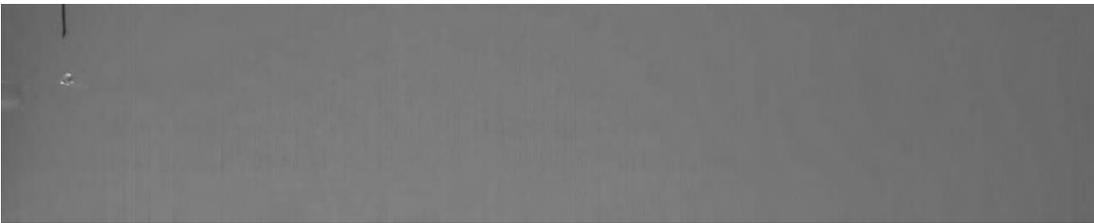
Abbildung B.39: Paraffinöl, 60 NL/min



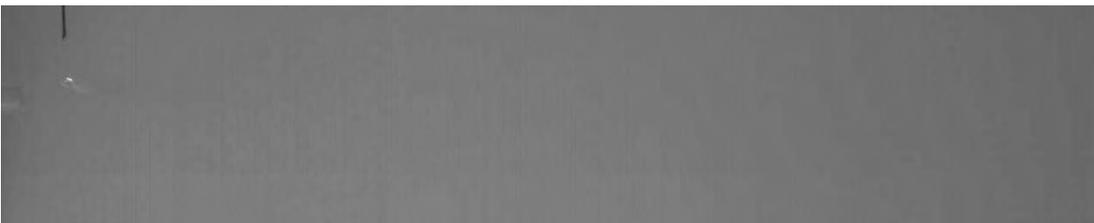
(a)



(b)

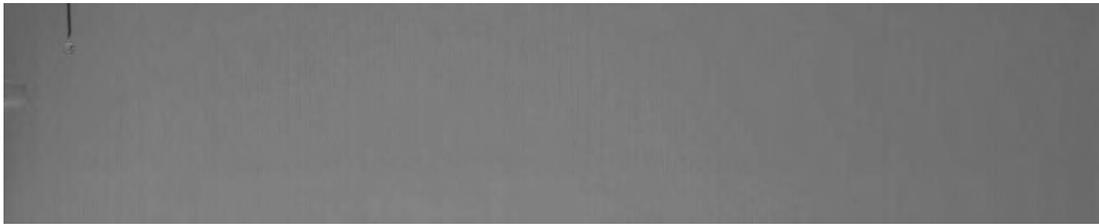


(c)

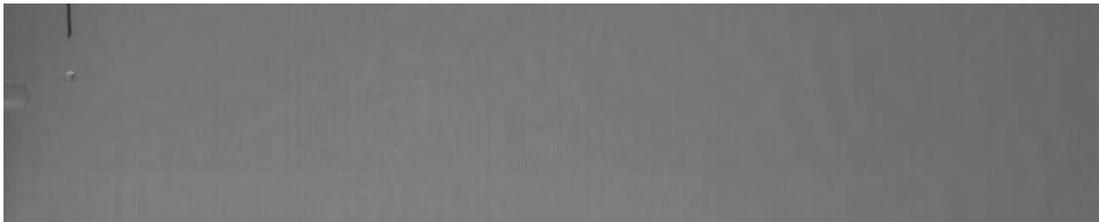


(d)

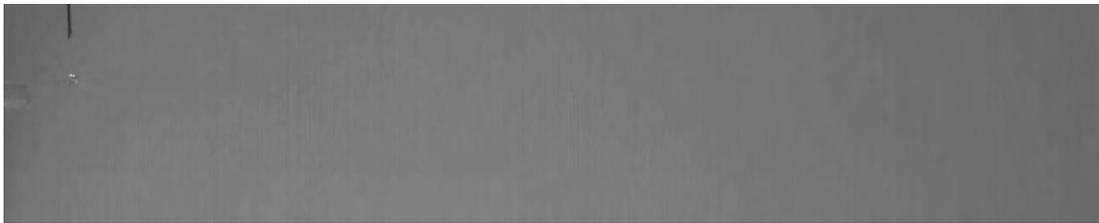
Abbildung B.40: Paraffinöl, 70 NL/min



(a)



(b)

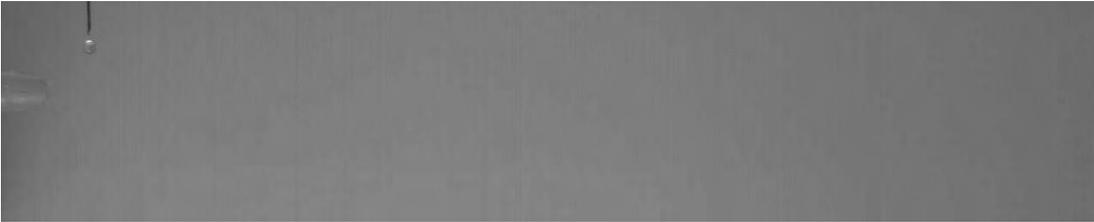


(c)



(d)

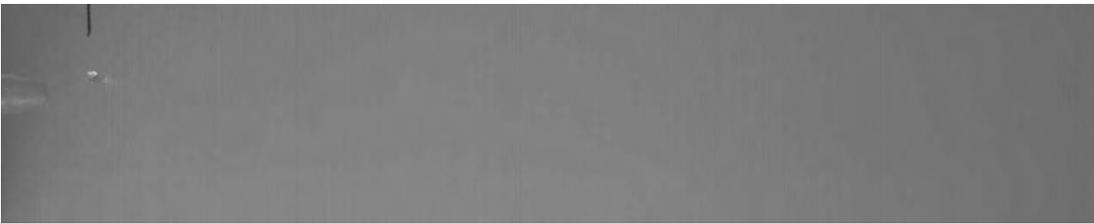
Abbildung B.41: Paraffinöl, 80 NL/min



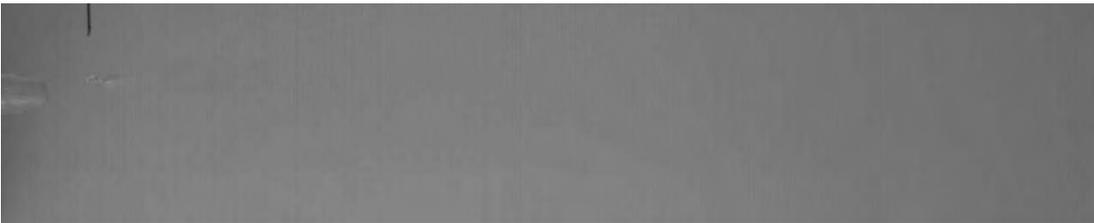
(a)



(b)



(c)



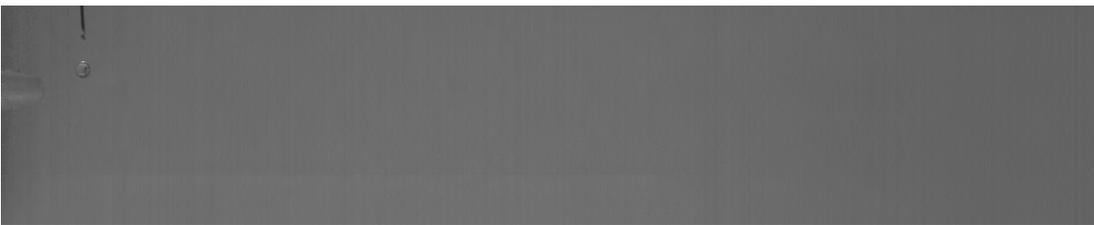
(d)

Abbildung B.42: Paraffinöl, 90 NL/min

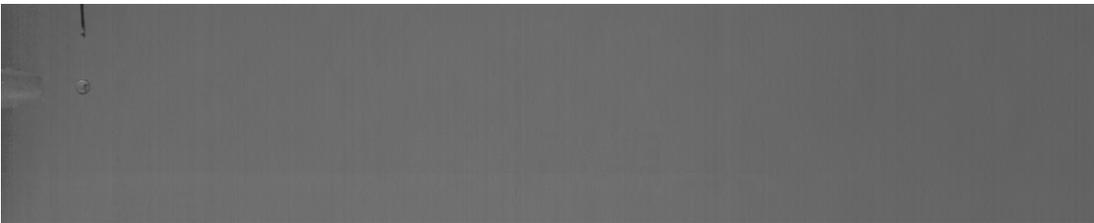
B.4 Glycerin (96 %)



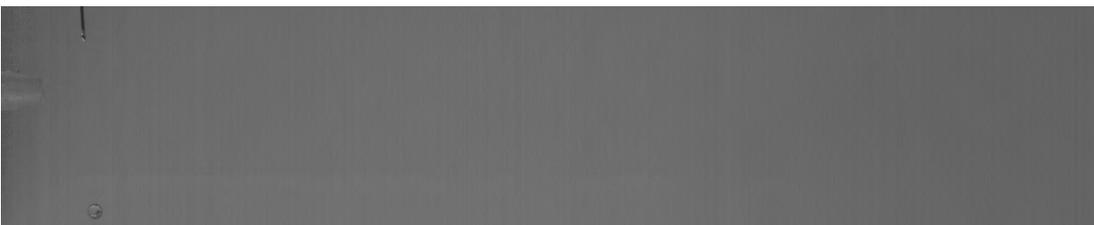
(a)



(b)

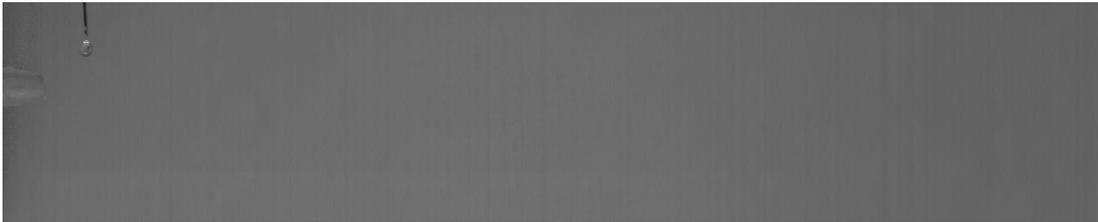


(c)

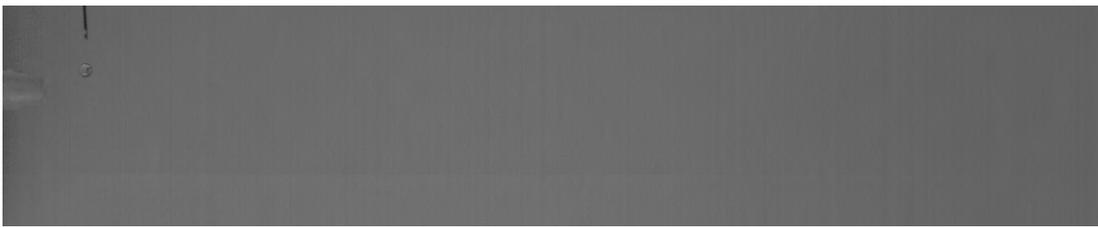


(d)

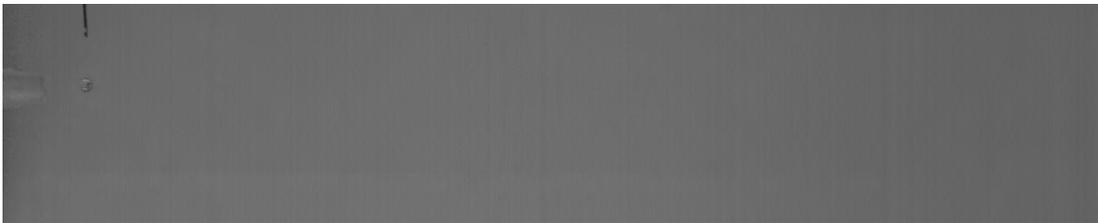
Abbildung B.43: Glycerin (96 %), 3 NL/min



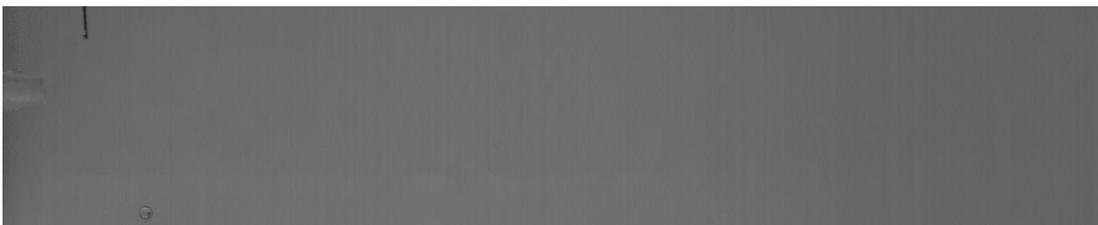
(a)



(b)

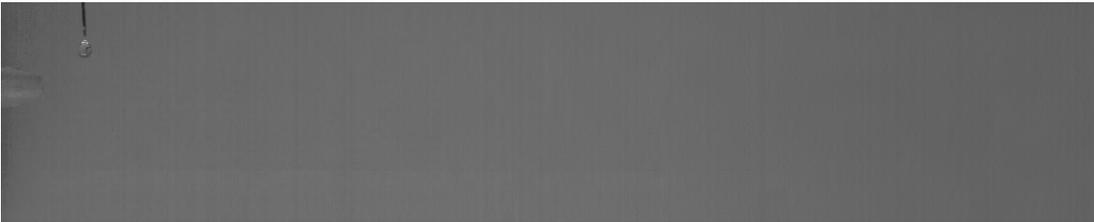


(c)



(d)

Abbildung B.44: Glycerin (96 %), 5 NL/min



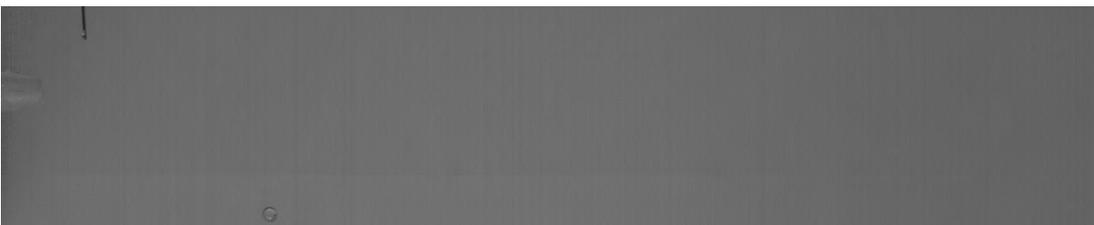
(a)



(b)



(c)

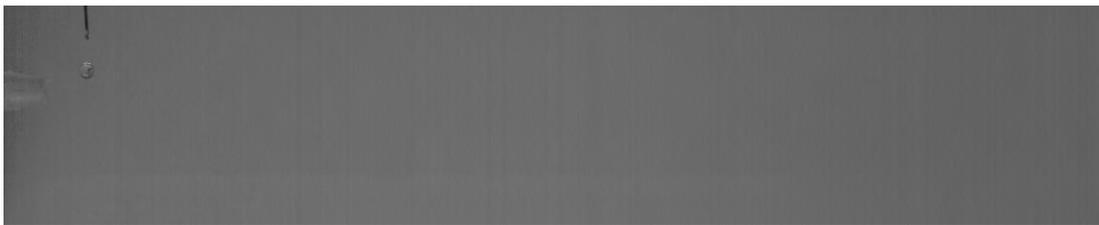


(d)

Abbildung B.45: Glycerin (96 %), 8 NL/min



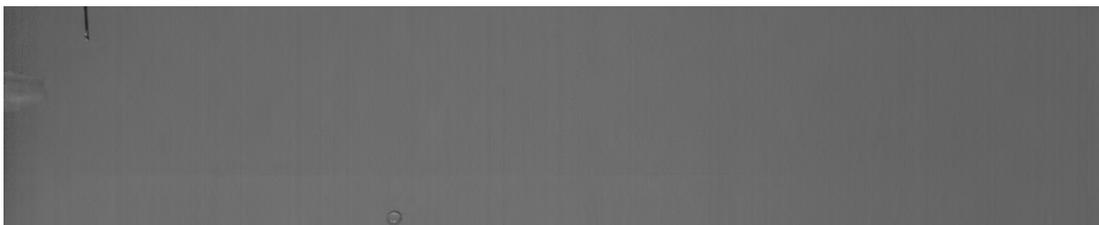
(a)



(b)



(c)



(d)

Abbildung B.46: Glycerin (96 %), 10 NL/min

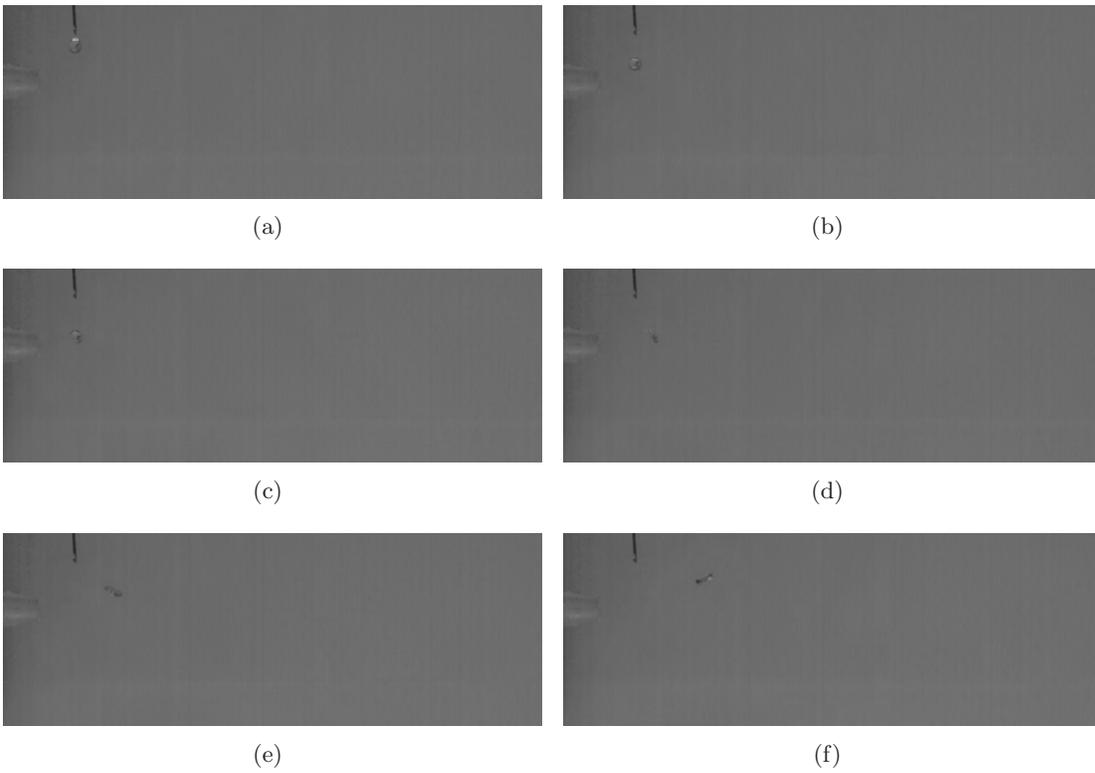


Abbildung B.47: Glycerin (96 %), 15 NL/min

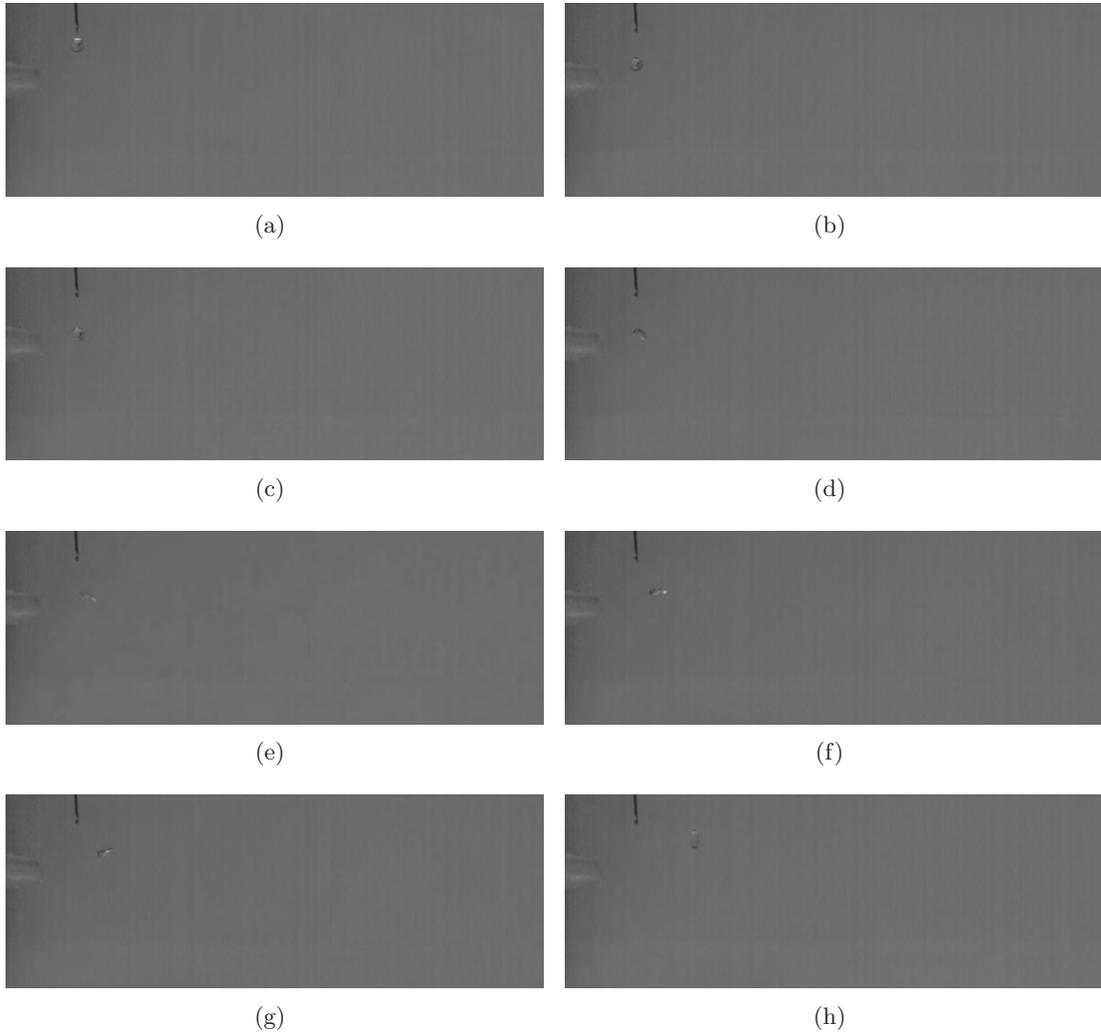


Abbildung B.48: Glycerin (96 %), 20 NL/min

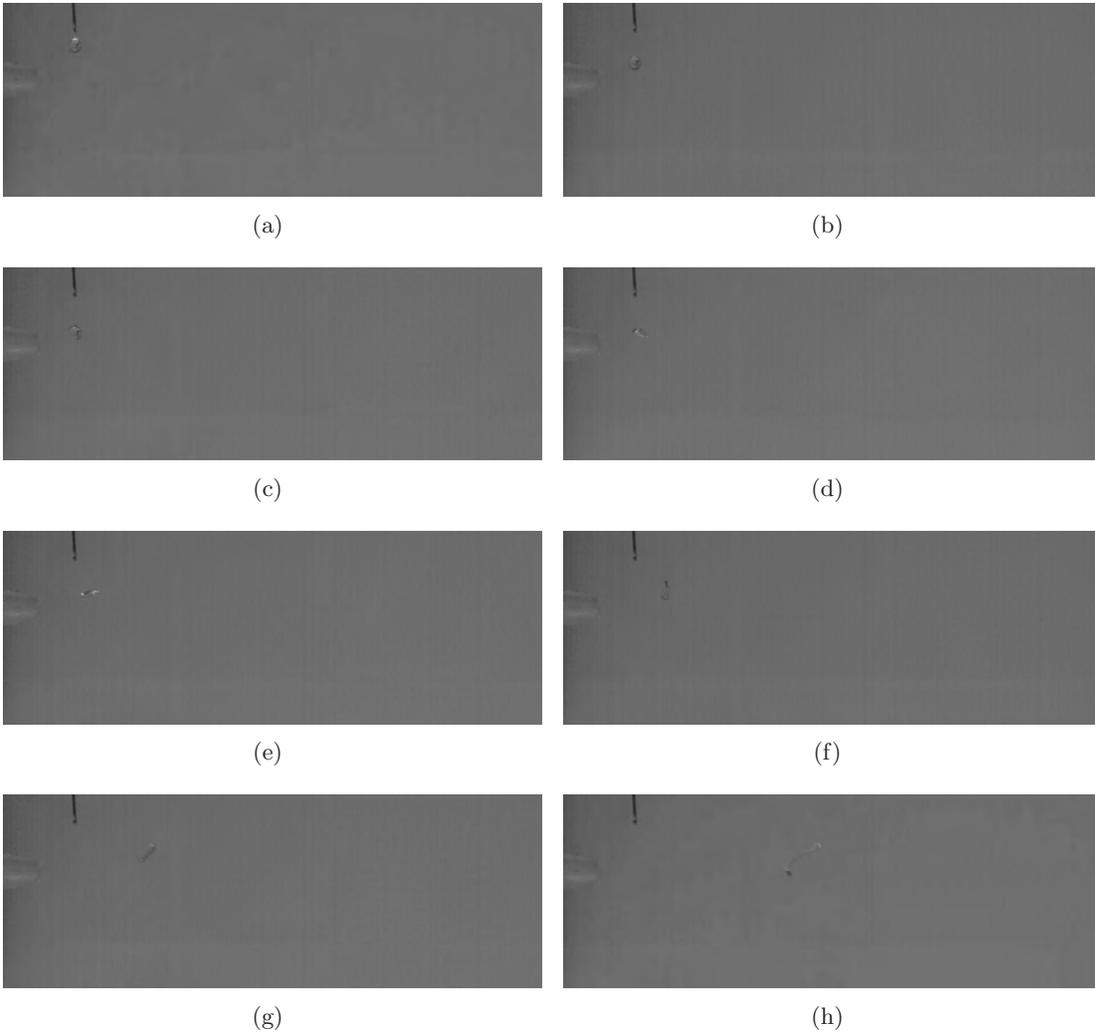


Abbildung B.49: Glycerin (96%), 25 NL/min

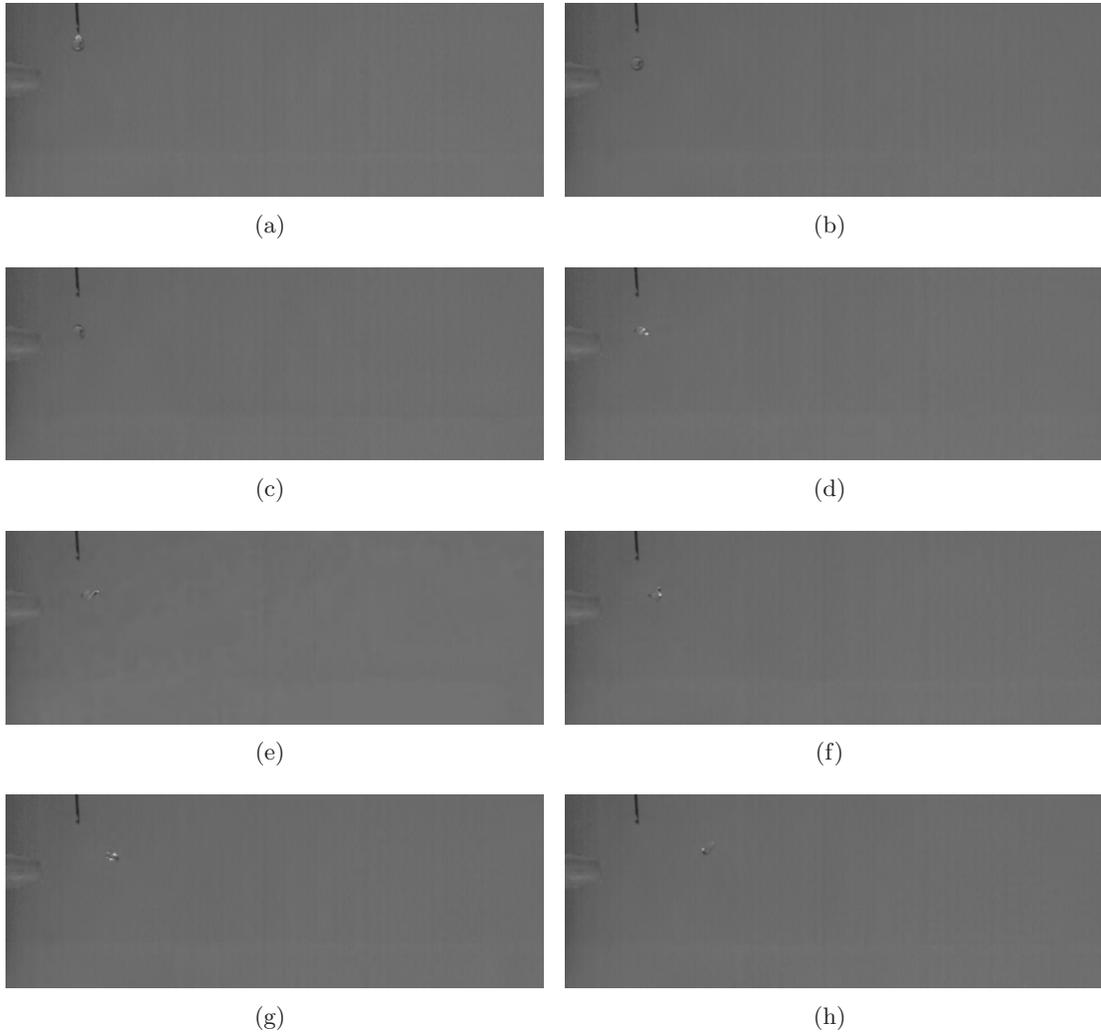


Abbildung B.50: Glycerin (96 %), 30 NL/min

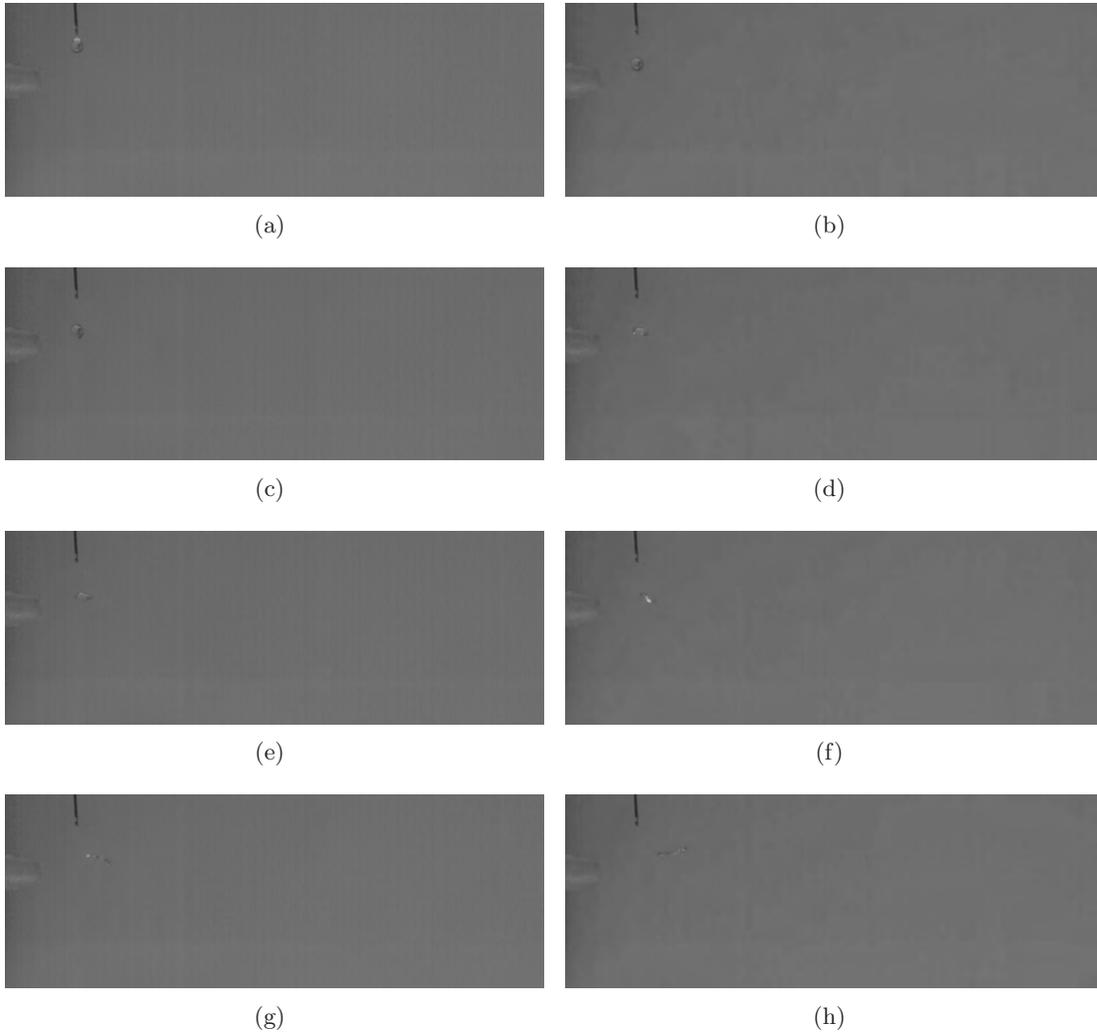


Abbildung B.51: Glycerin (96%), 40 NL/min

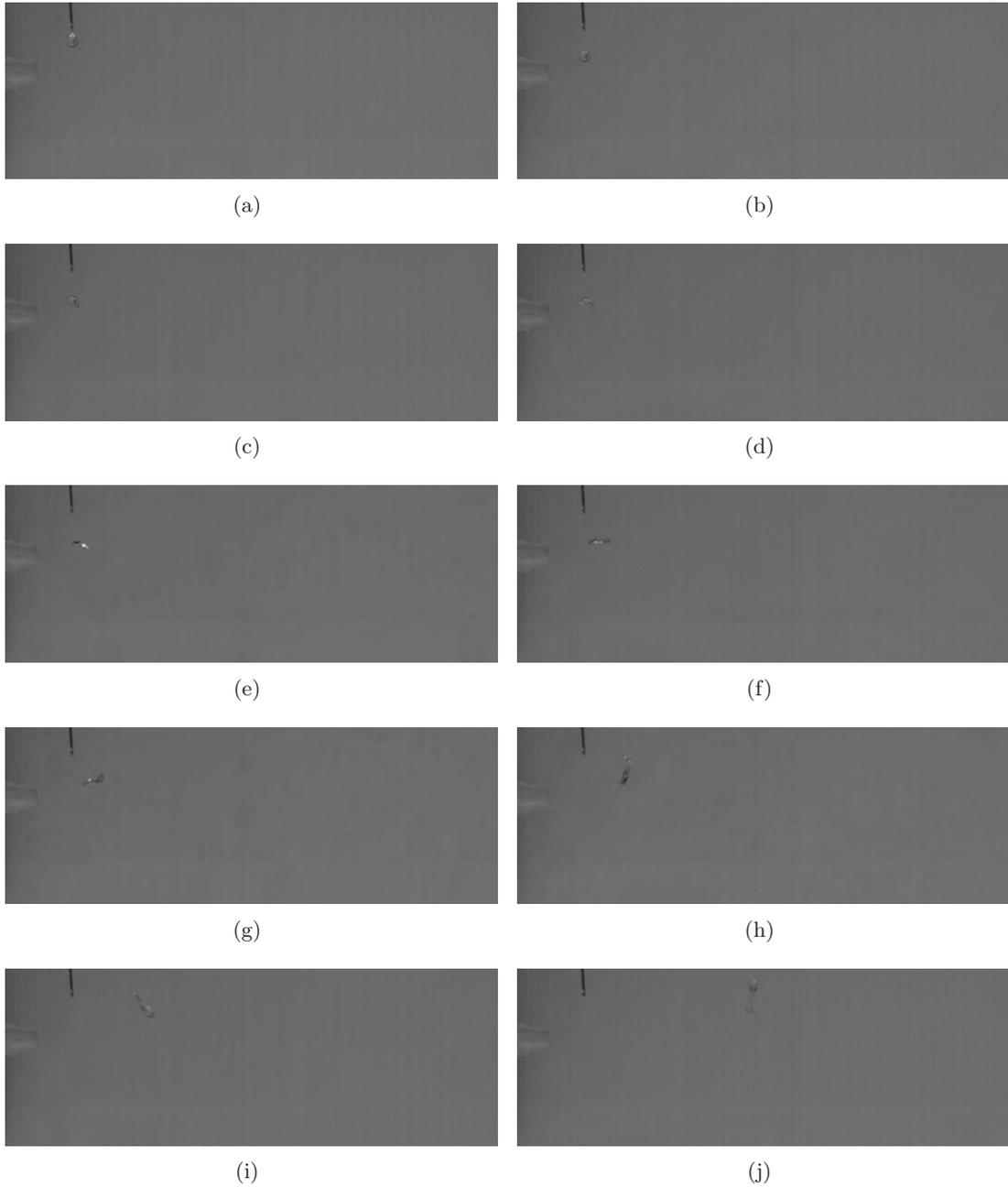


Abbildung B.52: Glycerin (96 %), 50 NL/min

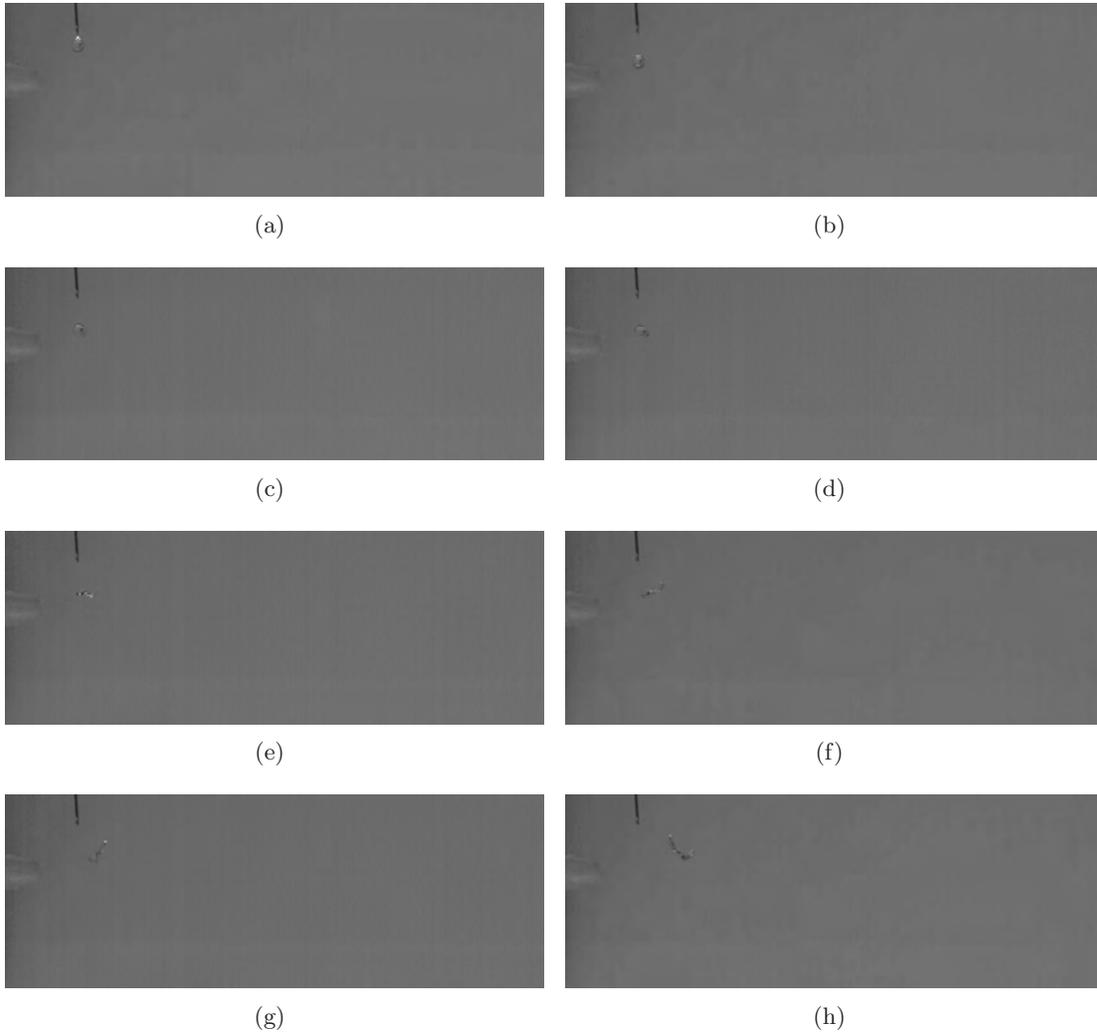


Abbildung B.53: Glycerin (96%), 60 NL/min

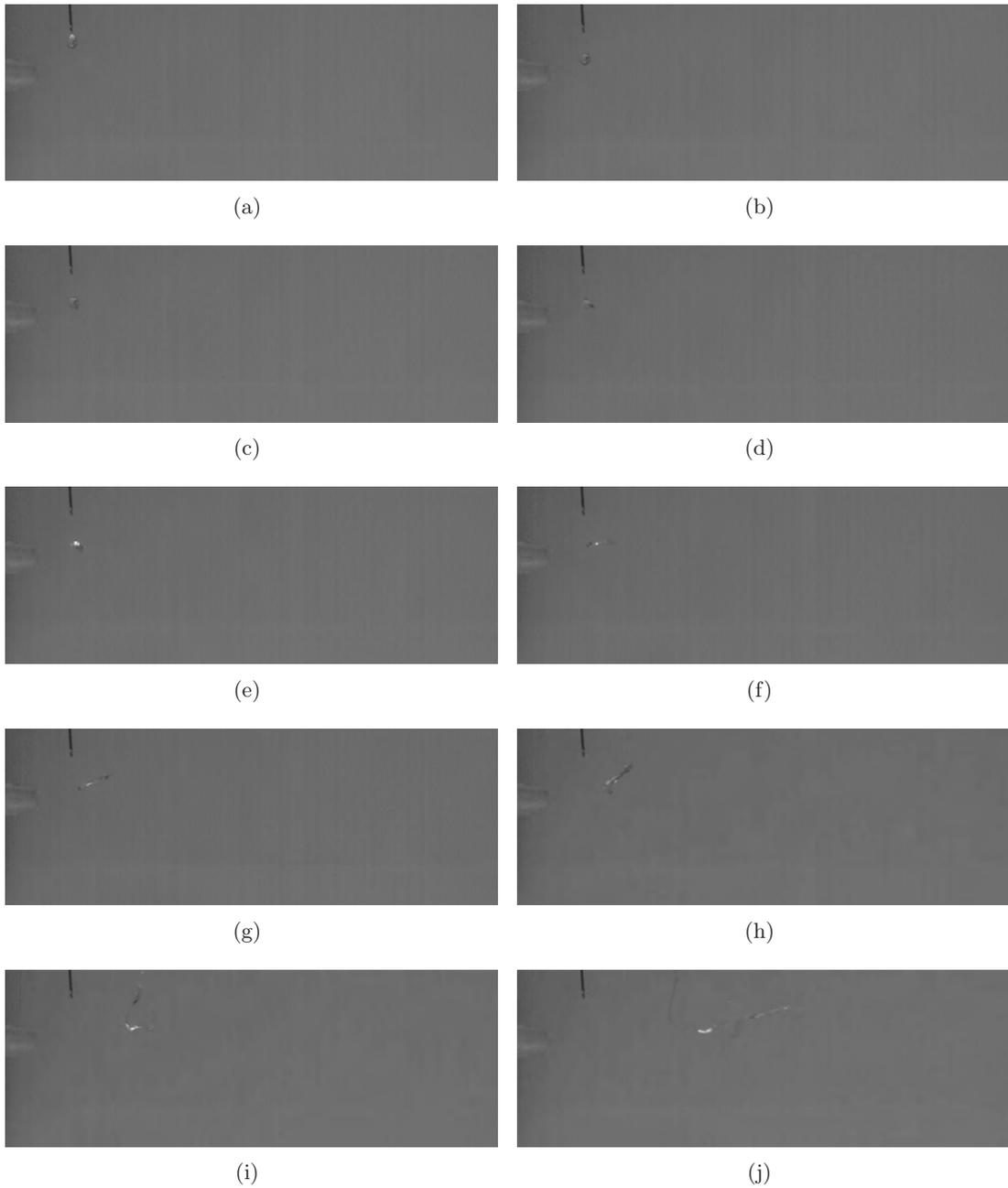


Abbildung B.54: Glycerin (96 %), 70 NL/min

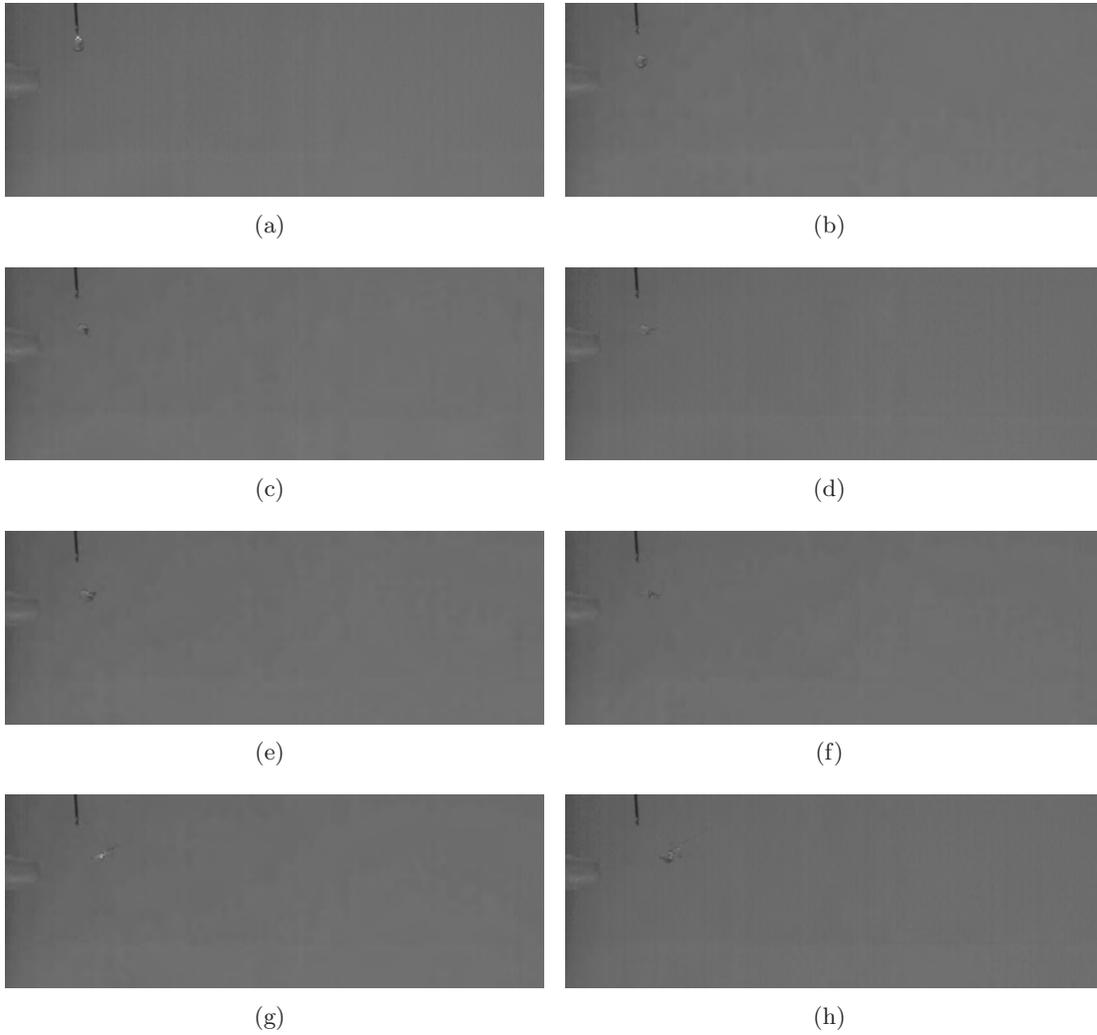


Abbildung B.55: Glycerin (96%), 80 NL/min

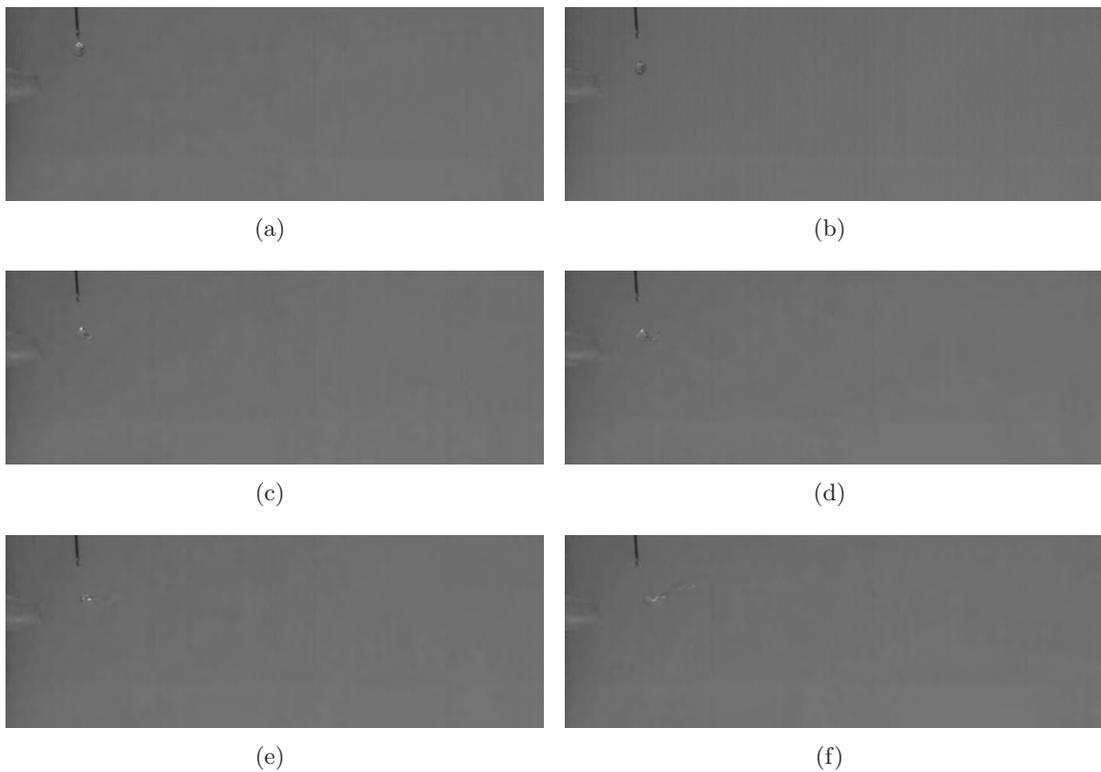
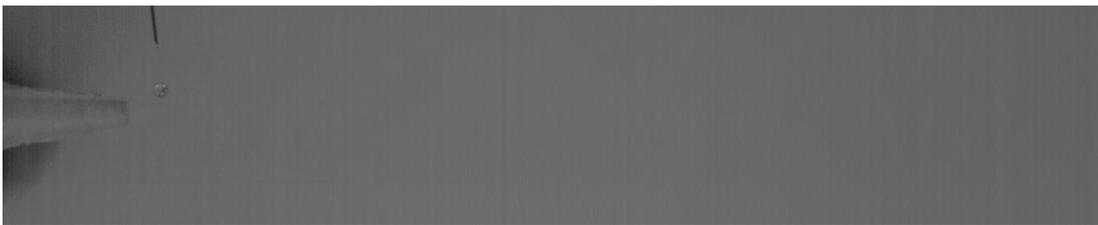


Abbildung B.56: Glycerin (96 %), 90 NL/min

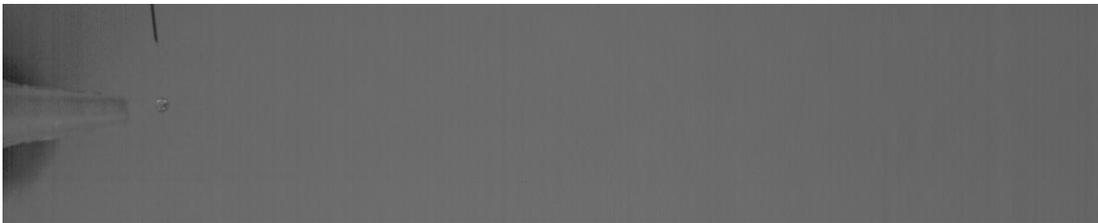
B.5 Glycerin (99 %)



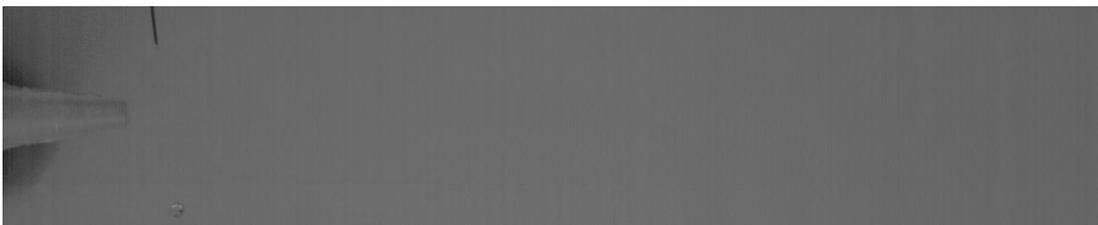
(a)



(b)



(c)



(d)

Abbildung B.57: Glycerin (99%), 3 NL/min



(a)



(b)



(c)



(d)

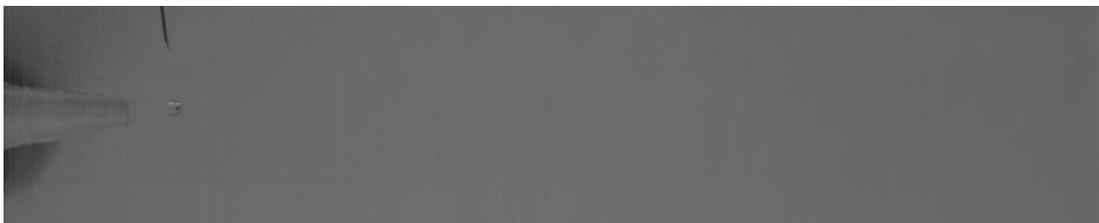
Abbildung B.58: Glycerin (99 %), 5 NL/min



(a)



(b)



(c)



(d)

Abbildung B.59: Glycerin (99%), 8 NL/min



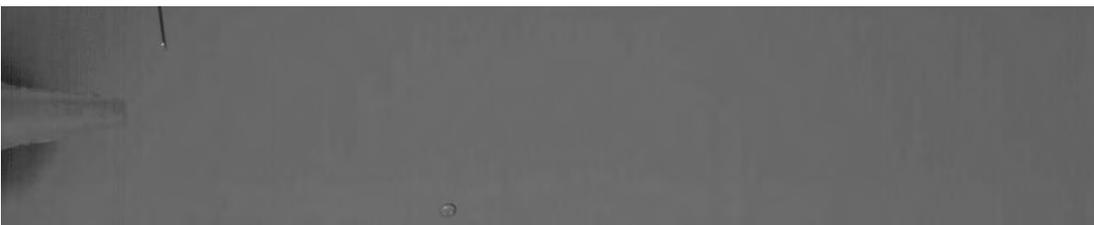
(a)



(b)



(c)



(d)

Abbildung B.60: Glycerin (99%), 10 NL/min

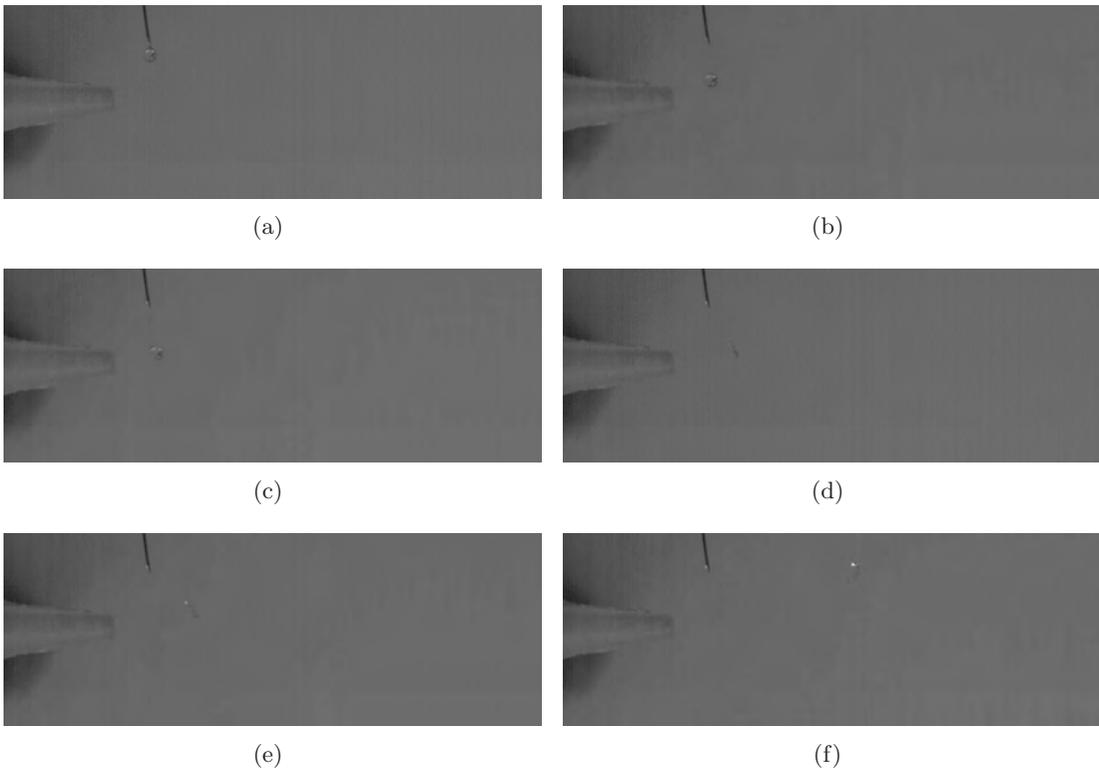


Abbildung B.61: Glycerin (99%), 15 NL/min

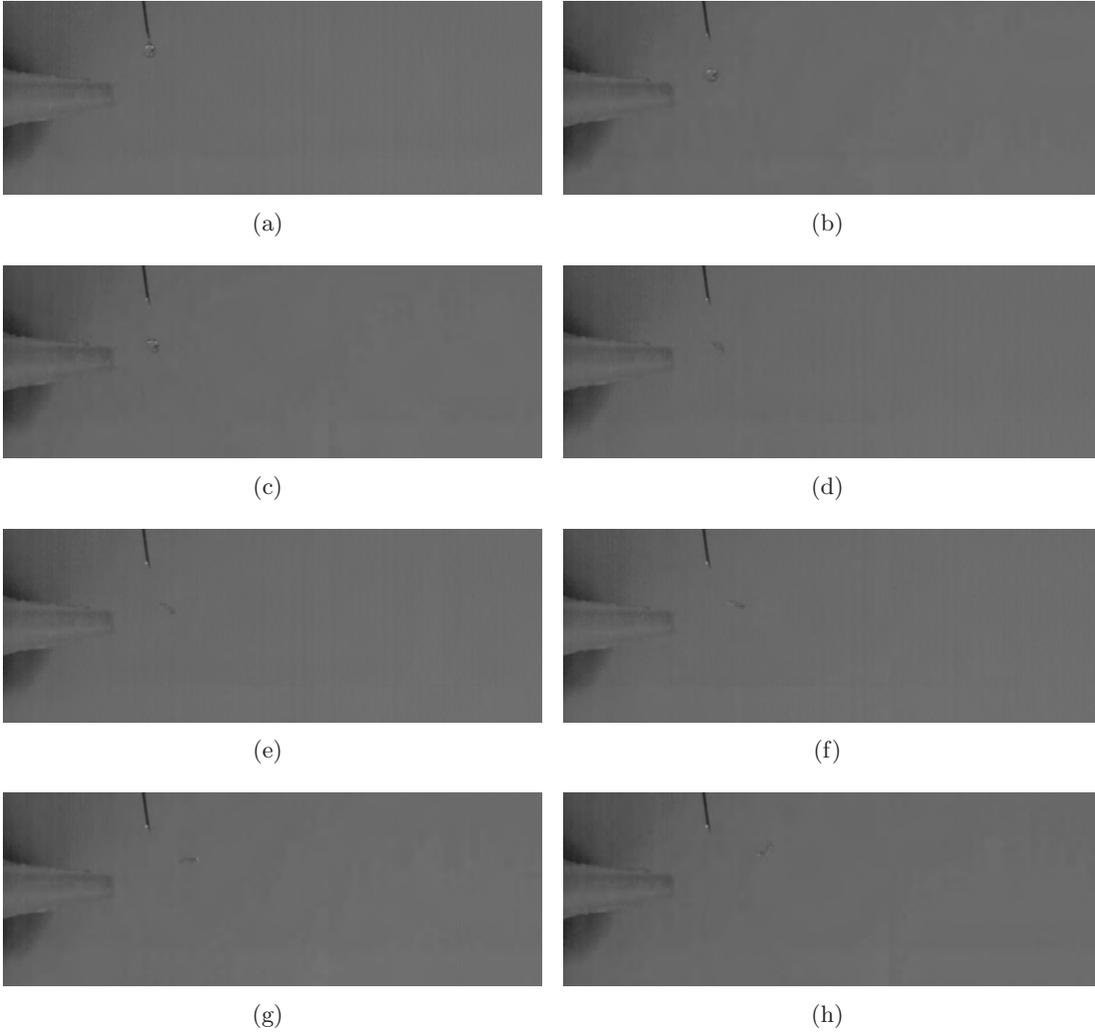


Abbildung B.62: Glycerin (99%), 20 NL/min

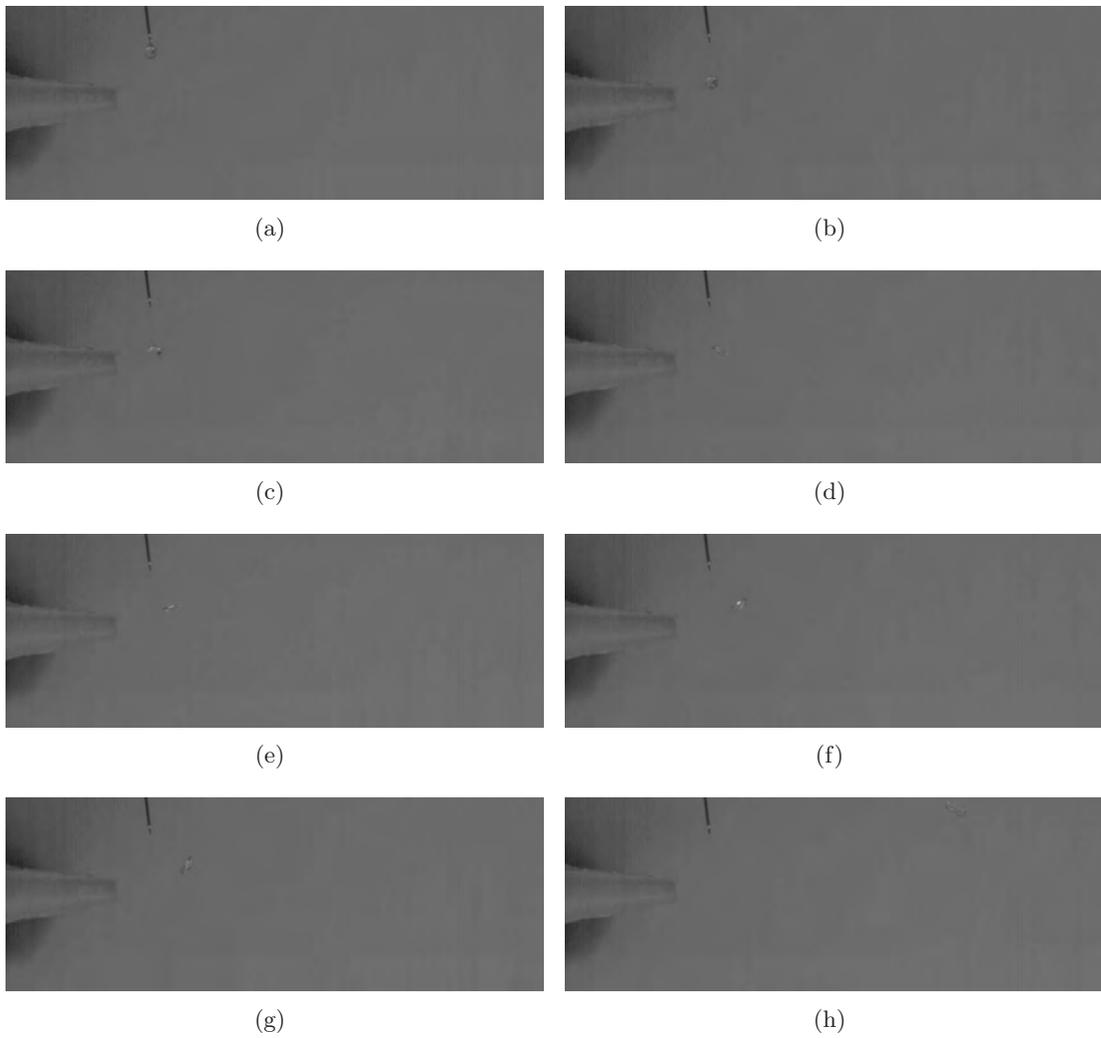


Abbildung B.63: Glycerin (99%), 25 NL/min

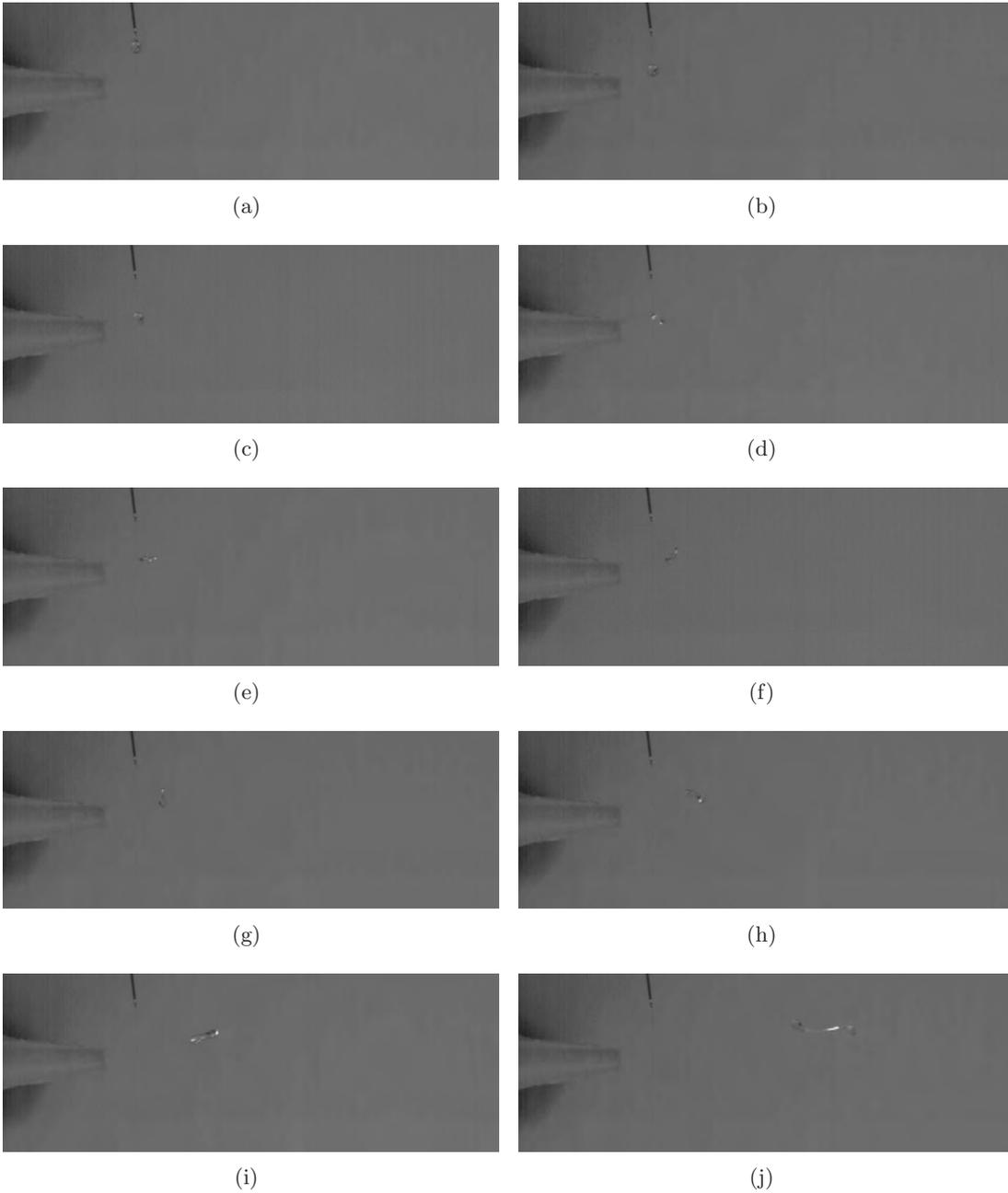


Abbildung B.64: Glycerin (99%), 30 NL/min

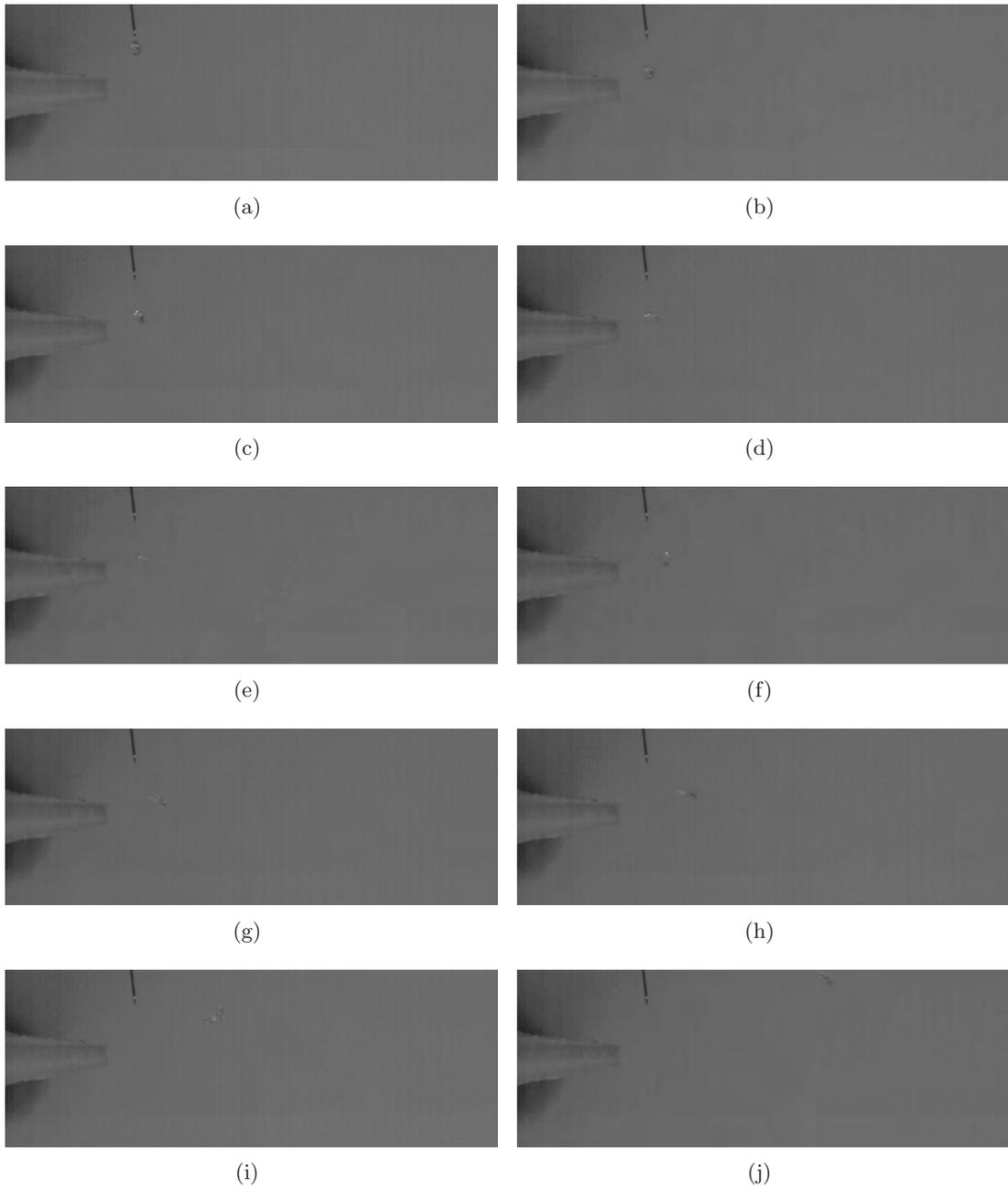


Abbildung B.65: Glycerin (99%), 40 NL/min

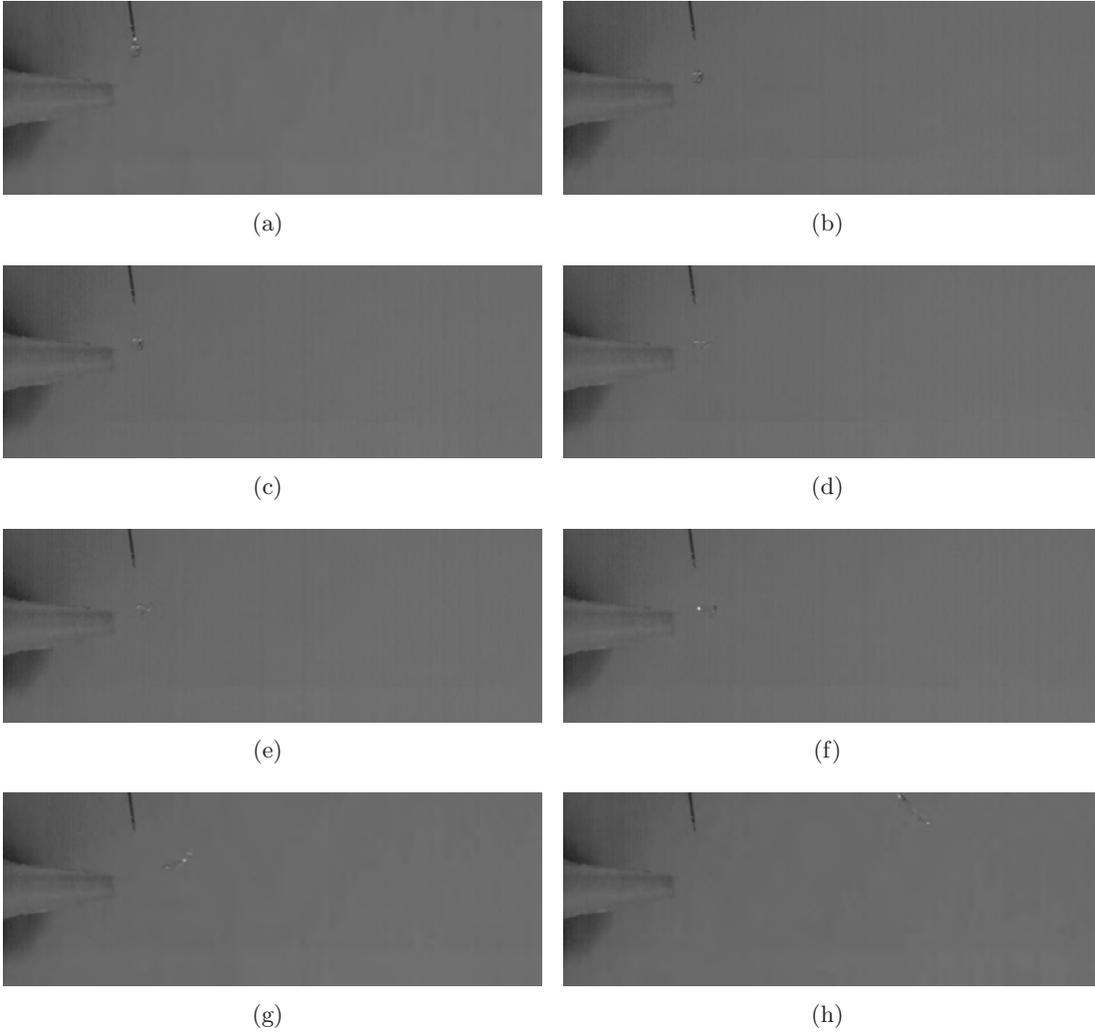


Abbildung B.66: Glycerin (99%), 50 NL/min

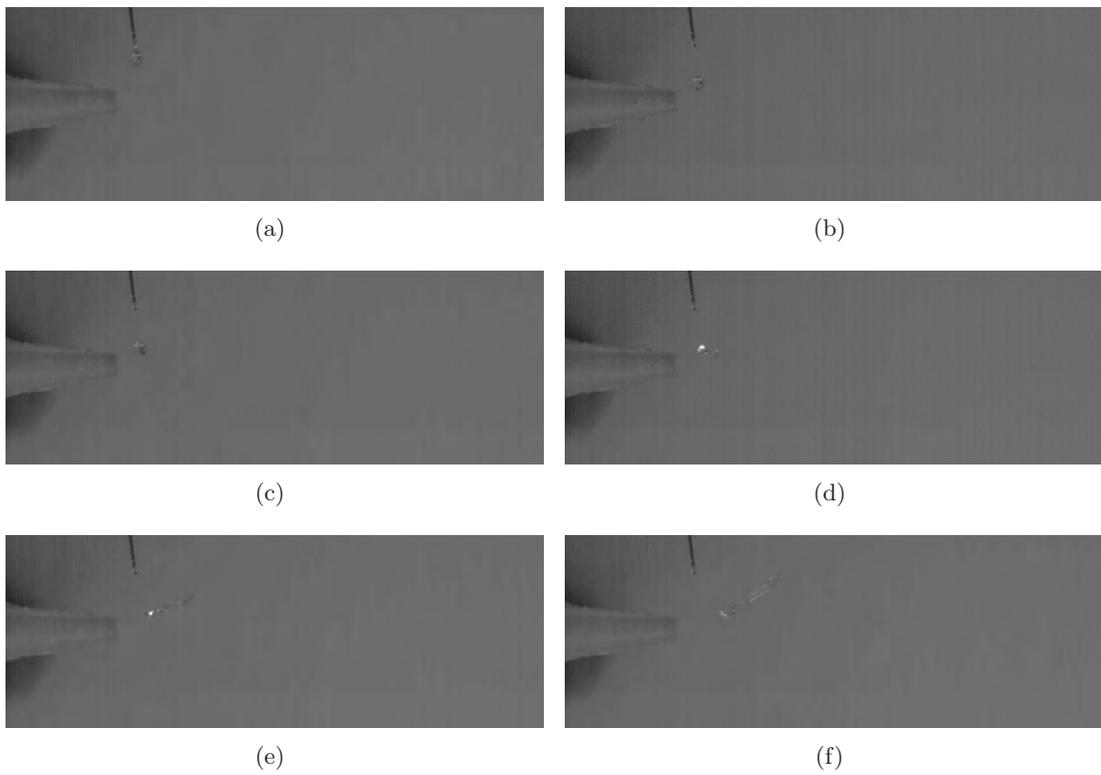


Abbildung B.67: Glycerin (99%), 60 NL/min

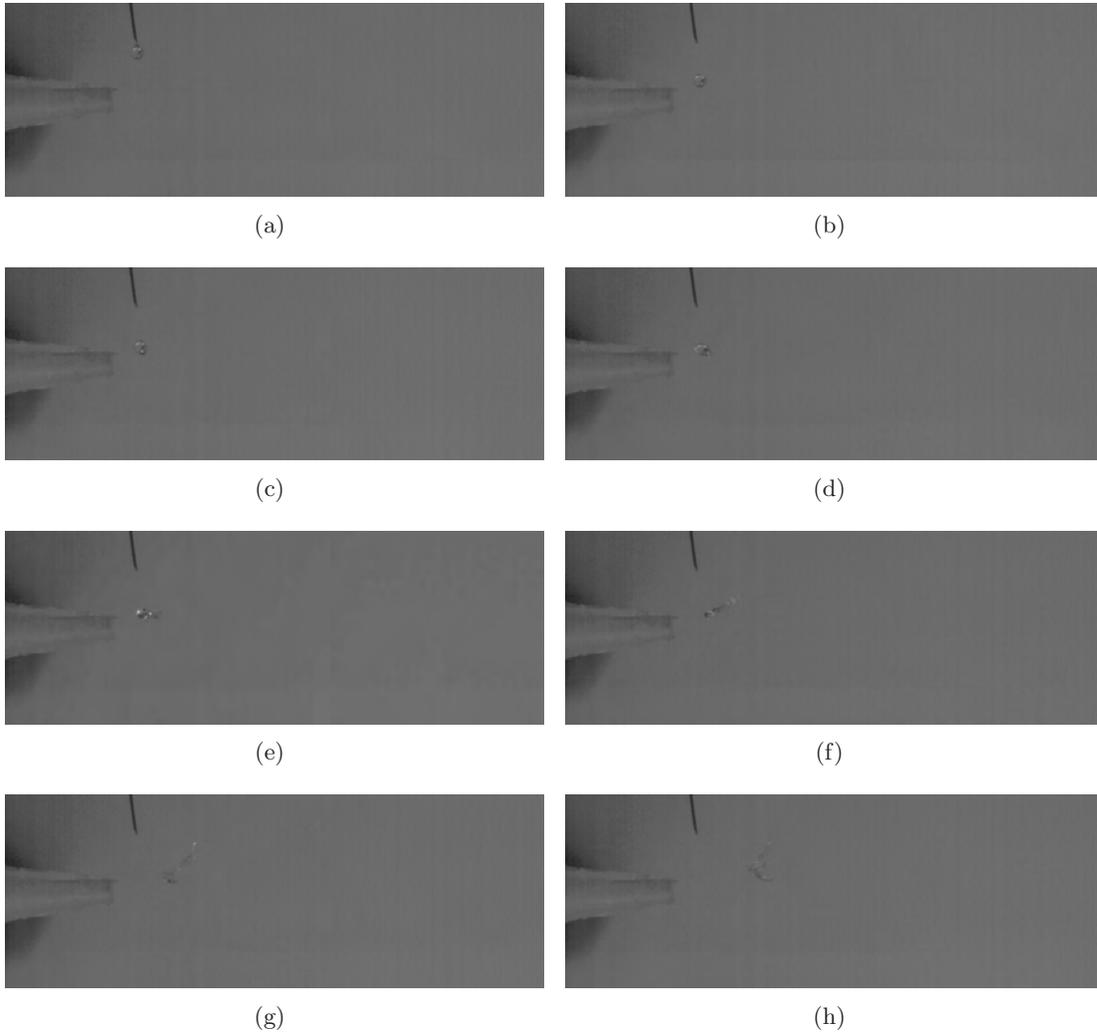


Abbildung B.68: Glycerin (99%), 70 NL/min

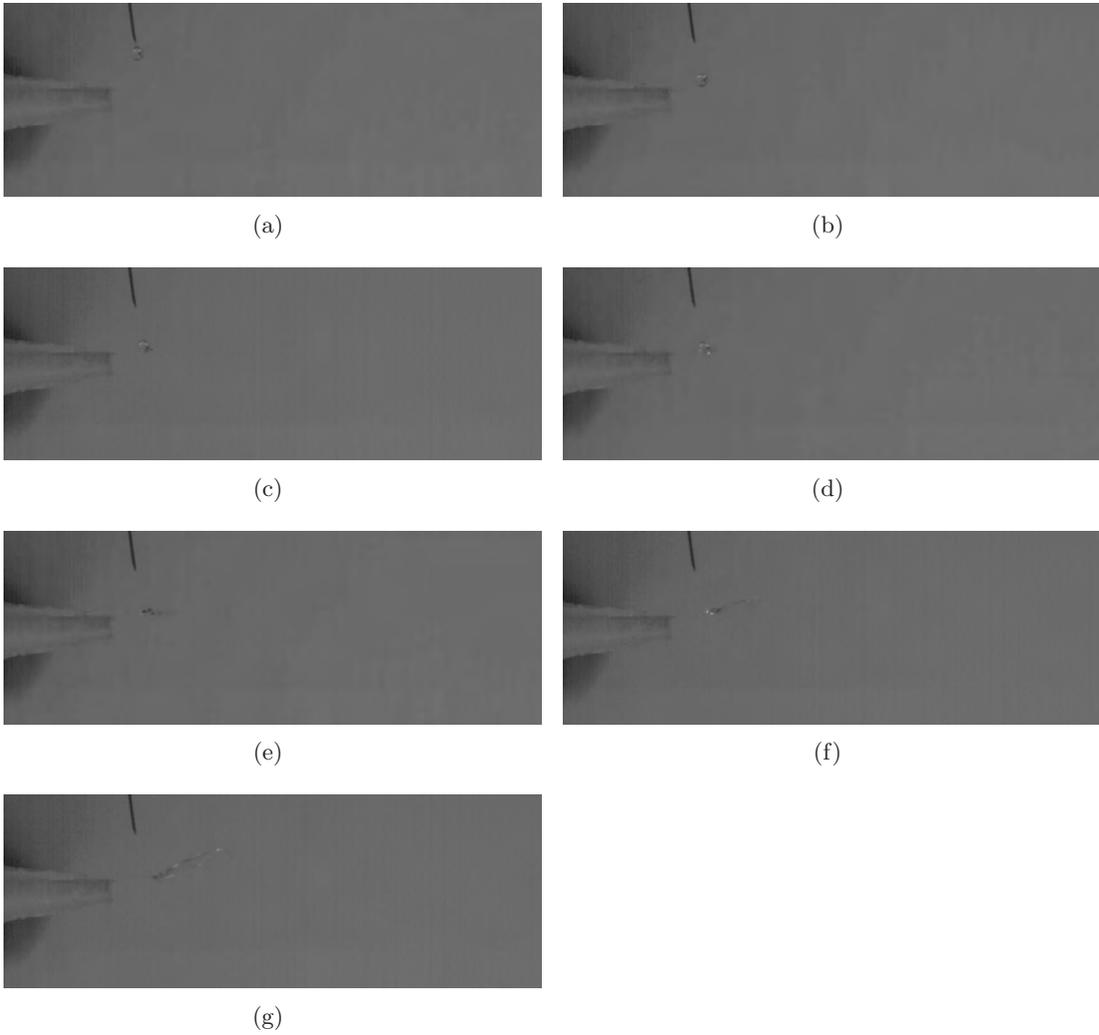


Abbildung B.69: Glycerin (99%), 80 NL/min

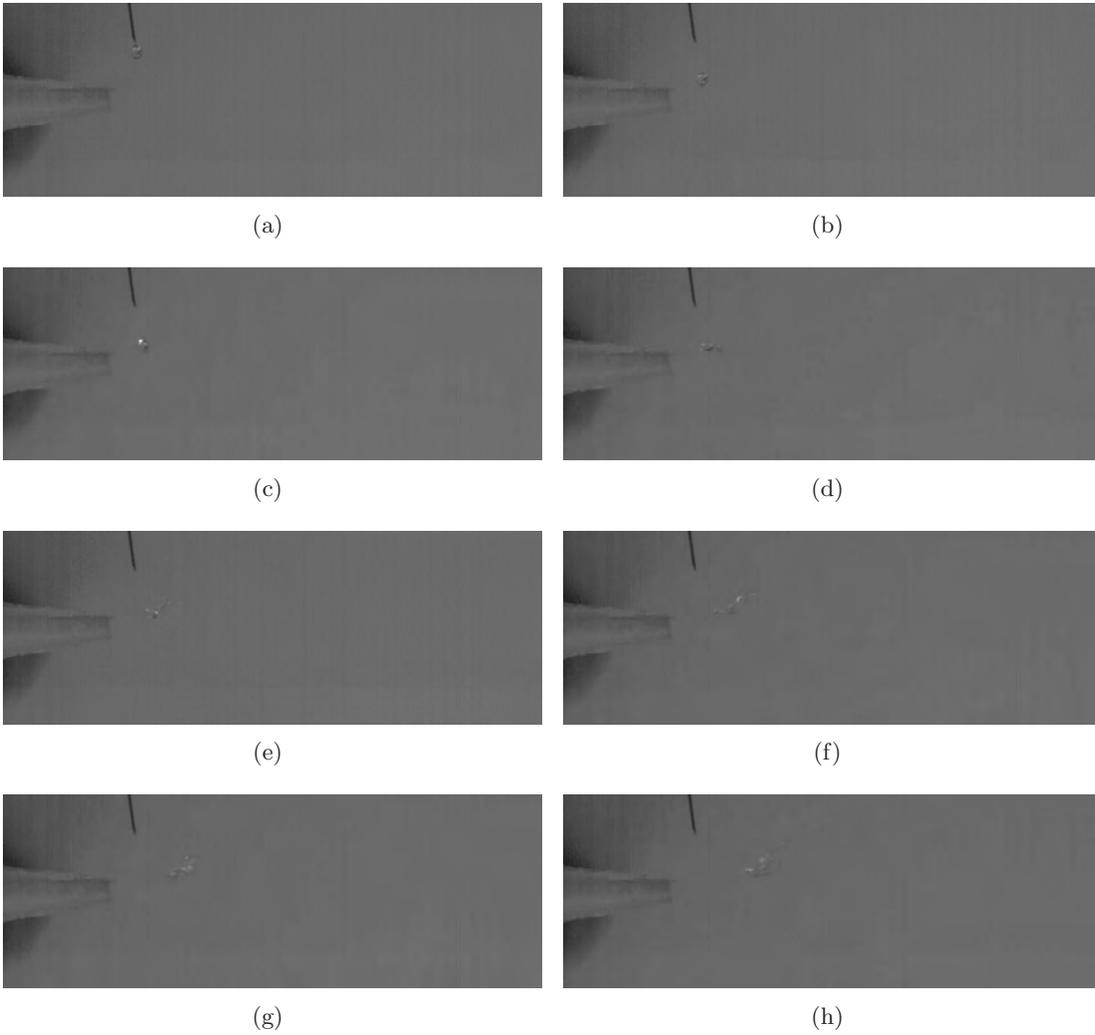


Abbildung B.70: Glycerin (99%), 90 NL/min

Literaturverzeichnis

- R. Abgrall. How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations: a quasi conservative approach, 1994. *Research report for Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique*.
- R. Abgrall und S. Karni. Computations of compressible mult fluids. *J. Comput. Phys.*, 169:594–623, 2001.
- D. Andahazy, S. Slaby, G. Löffler, F. Winter, C. Feilmayr, und T. Bürgler. Governing processes of gas and oil injection into the blast furnace. *ISIJ International*, 46:196–502, 2006.
- B. Andersson und P. Blomqvist. Experimental study of thermal breakdown products from halogenated extinguishing agents. *Fire Safety Journal*, 46(3):104–115, 2011.
- ANSYS. Gambit user’s guide, 2012. URL: <http://www.softscout.com/software/Engineering/Computational-Fluid-Dynamics-CFD/GAMBIT.html/>. [Online; besucht: 22.10.2012].
- M.S. Balasubramanyam und C.P. Chen. Modeling liquid jet breakup in high speed cross-flow with finite-conductivity evaporation. *Int. J. Heat Mass Tran.*, 51:3896–3905, 2008.
- P.A Bhat, A.K. Mitra, und A.N. Roy. Momentum transfer in a horizontal liquid-jet ejector. *Can. J. Chem. Eng.*, 50:313–317, 1972.
- B.J. Boersma und S.K. Lele. Large Eddy Simulation of compressible turbulent jets. Center for Turbulence Research, *Annual Research Briefs*, 1999:365–377, 1999.

- J.U. Brackbill, D.B. Kothe, und C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.*, 100:335–354, 1992.
- S. Browne, Z. Liang, und J.E. Shepherd. Detailed and simplified chemical reaction mechanismus for detonation simulation. *Presented at the Fall 2005 Western States Section of the Combustion Institute, Stanford University*, pages 1–18, 2005.
- J.B. Brzil und D.S. Stewart. The dynamics of detonation in explosive systems. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 39:263–292, 2007.
- S. Chandrasekhar. *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*. Oxford Univ. Press, 1981.
- C.-H. Chang und M.-S. Liou. A robust and accurate approach to computing compressible multiphase flow: Stratified flow model and AUSM⁺-up scheme. *J. Comput. Phys.*, 225:840–873, 2007.
- E.J. Chang und K. Kailasanath. Shock wave interactions with particles and liquid fuel droplets. *Shock Waves*, 2003:333–341, 2003.
- A. Chillman, M. Ramulu, und M. Hashish. Waterjet and water-air jet surface processing of a titanium alloy: A parametric evaluation. *J Manuf Sci E-T Asme*, 132:011012–1, 2010.
- J.-P. Cocchi und R. Saurel. A Riemann problem based method for the resolution of compressible multimaterial flows. *J. Comput. Phys.*, 137:265–298, 1997.
- R.H. Cole. *Underwater explosions*. Princeton Univ. Press, 1948.
- H.J. Curran, W.J. Pitz, C.K. Westbrook, C.V. Callahan, und F.L. Dryer. Oxidation of automotive primary reference fuels at elevated pressures. *Symposium (International) on Combustion*, 27(1):379–387, 1998.
- Dassault Systemes. Solidworks, 2012. URL: <http://www.solidworks.com/>. [Online; besucht: 22.10.2012].
- J. W. Deardorff. Trans. ASME, Ser. I. *J. Fluids Eng.*, 156(55), 1973.
- R. Deiterding. Detonation structure simulation with amroc. *First international conference on high performance computing and communications*, 3726:916–927, 2005.
- W. Dijkhuizen, M. van Sint Annaland, und H. Kuipers. Numerical investigation of closures for interface forces in dispersed flows using a 3d front tracking model. In *Fourth International Conference on CFD in the Oil and Gas, Metallurgical & Process Industries*. SINTEF/NTNU Trondheim, Norway, 2005.

- P. Ding und A. Buijk. Simulation of underwater explosion using msc.dytran. *unpublished*, 2007.
- J.P. Dussauge, R.W. Smith, A.J. Smits, H. Fernholz, P.J. Finley, und E.F. Spina. *Turbulent Boundary Layers in Subsonic and Supersonic Flow*. Advisory Group for Aerospace Research and Development, 1996.
- O. G. Engel. Fragmentation of water drops in the zone behind an air shock. *J. Res. Natl Bur.*, 60:245–280, 1958.
- J. H. Ferziger und M. Peric. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 2002.
- T. Funada und D.D. Joseph. Viscous potential flow of Kelvin-Helmholtz instability in a channel flow. *J. Fluid Mech.*, 445:263–283, 2001.
- C. Fureby und F. F. Grinstein. Large Eddy Simulation of high-reynolds-number free and wall-bounded flows. *Journal of Computational Physics*, 181:68–97, 2002.
- J.W. Gauntner, J.N.B Livingood, und P. Hrycak. Survey on literature on flow characteristics of a single turbulent jet impinging on a flat plate, 1970. *by the National Aeronautics and Space Administration*.
- B.E. Gelfang. Droplet breakup phenomena in flows with velocity lag. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 22:201–265, 1996.
- Geothermal Anywhere. Deep drilling technology, 2012. URL: <http://www.geothermalanywhere.com/>. [Online; besucht: 22.10.2012].
- M. Germano, U. Piomello, P. Moin, und W. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids A*, 3(7):1760–1765, 1991.
- H.-J. Gressmann. *Abwehrender und Anlagentechnischer Brandschutz*. expert verlag, 2005.
- H. Gupta und S. Roy. *Geothermal Energy*. Elsevier, 2007.
- M. Harasek. *Fluiddynamik (CFD) Thermischer Trennverfahren*. Technische Universität Wien, Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und Technische Biowissenschaften, 2012.
- E.Y. Harper, G.W. Grube, und I. Chang. On the breakup of accelerating liquid drops. *J. Fluid Mech.*, 52:565–591, 1972.

- M. Helle und H. Saxén. Identification of the combustion degree of oil in the blast furnace tuyeres. *ISIJ International*, 42:1185–1187, 2002.
- J.O. Hinze. Fundamentals of the hydrodynamic mechanism of splitting in dispersion processes. *AIChE*, 1:289–295, 1955.
- L.P. Hsiang und G.M. Fäth. Near-limit drop deformation and secondary breakup. *Int. J. Multiphase Flow*, 18:635–652, 1992.
- E. Huenges. *Geothermal Energy Systems*. Wiley-WCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2010.
- Z. Hársfalvi. *Visuelle Untersuchung von Mehrphasenströmungen*. Technische Universität Wien, 2013. Masterarbeit.
- H. Jasak. *Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows*. Imperial College of Science, Technology & Medicine, Department of Mechanical Engineering, 1996.
- C. Jordan, M. Harasek, A. El-Gohari, C. Feilmayr, und S. Schuster. Combined injection of plastic particles and heavy fuel oil into a blast furnace raceway - detailed CFD analysis. In *ECCOMAS CFD 2010*, Lisbon, Portugal, 2010.
- D.D. Joseph, J. Belanger, und G.S. Beavers. Breakup of a liquid drop suddenly exposed to a high-speed airstream. *Int J. Multiphase Flow*, 25:1263–1303, 1999.
- C. Kannepalli, S. Arunajatesan, und S.M. Dash. RANS/LES methodology for supersonic transverse jet interactions with approach flow. *AIAA paper*, 2002, 2002.
- S. Karni. Multicomponent flow calculations by a consistent primitive algorithm. *J. Comput. Phys.*, 112:31–43, 1994.
- J.B. Keller und I.I. Kolodner. Damping of underwater explosion bubble oscillations. *J. Appl. Phys.*, 27:1152–1161, 1956.
- J.-H. Kim und H.-C. Shin. Application of the ALE technique for underwater explosion analysis of a submarine liquefied oxygen tank. *Ocean Eng.*, 35:812–822, 2008.
- F. Kirchbacher. *Experimentelle Untersuchung von industriellen Spruehduesen*. Vienna University of Technology, 2010. Bachelorarbeit.
- B. Kiss. *CFD Untersuchung des Zerstäubungsprozesses mit einer Lanze und Tuyère*. Technische Universität Wien, 2013. Masterarbeit.

- D. Knight, H. Yan, , und A. Zheltovodov. Large Eddy Simulation of supersonic turbulent flow in expansion-compression corner. In *Proceedings of the Third AFOSR International Conference on DNS/LES*, Arlington, Texas, USA, 2001.
- D. Knight, H. Yan, A. G. Panaras, und A. Zheltovodov. Advances in CFD prediction of shock wave turbulent boundary layer interactions, 2006. *NATO Report*.
- R. P. Koomullil, B. K. Soni, und R. Singh. A comprehensive generalized mesh system for CFD applications. *Mat. Comput. Simulat.*, 78(5-6):605–617, 2008.
- H. C. Kuhlmann. *Numerische Methoden der Strömungs- und Wärmetechnik*. Technische Universität Wien, Institut für Strömungsmechanik und Wärmeübertragung, 2010.
- M.-S. Liou, C.-H. Chang, H. Chen, und J.-J. Hu. Numerical study of shock-driven deformation of interfaces. *Shock Waves*, XII:919–924, 2009.
- Nabla Ltd. Nabla ltd. homepage, 2012. URL: <http://www.nabla.co.uk/>. [Online; besucht: 22.10.2012].
- T. Lu und C.K. Law. Strategies for mechanism reduction for large hydrocarbons: N-heptane, combustion and flame. *Combustion and Flame*, 154:153–163, 2008.
- H. B. Lungen und J. Yagi. Iron, 2. blast furnace process. *Encyclopedia of Industrial Chemistry*, 2000.
- M. Castaño Martínez. *Simulative analysis of the oil injection process in a lab scale model of an industrial blast furnace*. Technische Universität Wien, 2012. Masterarbeit.
- K. O. Mikaelian. Rayleigh-Taylor instability in finite-thickness fluids with viscosity and surface tension. *PHYSICAL REVIEW E*, 54(4):3676–3680, 1996.
- S. Mueller. Numerical simulation of a single bubble by compressible two-phase fluids. *Int. J. Numer. Meth. Fl.*, 62:591–631, 2010.
- S. Mueller, M. Bachmann, D. Krninger, T. Kurz, und P. Helluy. Comparison and validation of compressible flow simulations of laser-induced cavitation bubbles. *Comput. Fluids*, 38:1850–1862, 2009.
- J. Nagy und M. Harasek. Investigation of the aerobreakup of a liquid droplet at high Weber number with different turbulence models. In *Proceedings of the Fifth International Conference from Scientific Computing to Computational Engineering*, Athens, Greece, 2012.

- J. Nagy, C. Jordan, und M. Harasek. Technical application of a multiphase solver in the compressible flow of a gaseous and a liquid phase. In *Proceedings of the Eighth International Conference on CFD in Oil & Gas, Metallurgical and Process Industries*, SINTEF/NTNU, Trondheim, Norway, June 2011a.
- J. Nagy, C. Jordan, A. Horvath, und M. Harasek. Importance of turbulence in high velocity flows around spherical objects, 2011b. *ZID Bericht 2011*.
- J. Nagy, A. Horvath, C. Jordan, und M. Harasek. Solver implementation and validation methodology for supersonic multiphase flows using arbitrary grids. *Environmental Engineering and Management*, 2012a. in Review.
- J. Nagy, A. Horvath, C. Jordan, und M. Harasek. Turbulent phenomena in the aero-breakup of liquid droplets. *CFD Letters*, 4(3):112-126, 2012b.
- J. Nagy, C. Jordan, und M. Harasek. Numerical and experimental investigation of the role of asymmetric gas flow in the breakup of liquid droplets. In *Proceedings of the Fourth Open Source CFD International Conference London*, The Tower Hotel, London, Great-Britain, Oktober 2012c.
- J. Nagy, S. Voglsam, M. Harasek, und F. Winter. Simulation of deflagration-induced water-jets to realize deep drilling for geothermal applications. 2012d. in Review.
- Ch.-L. Ng und T.G. Theofanous. Modes of aero-breakup with visco-elastic liquids. In *Proceedings of XVth International Congress on Rheology*, Monterey, California, USA, August 2008.
- NIST Chemistry Webbook. U.S. Secretary of Commerce, 2012. URL: <http://webbook.nist.gov/>. [Online; besucht: 22.10.2012].
- R.R. Nourgaliev, S.Y. Sushchikh, T.N. Dinh, und T.G. Theofanous. Shock wave refraction patterns at interfaces. *J. Multiphase Flow*, 31:969–995, 2005.
- R.R. Nourgaliev, T.N. Dinh, und T.G. Theofanous. Adaptive characteristics-based matching for compressible multifluid dynamics. *J. Comput. Phys.*, 213:500–529, 2006.
- Open Cascade EDF CEA. Salome, 2012. URL: <http://www.salome-platform.org/>. [Online; besucht: 22.10.2012].
- OpenCFD Ltd. (ESI Group). *OpenFOAM® User Guide*. OpenCFD Ltd. (ESI Group), 2011. Version 2.1.0.
- OpenCFD Ltd. (ESI Group). OpenFOAM® source code, 2012. URL: <http://www.openfoam.com/>. [Online; besucht: 22.10.2012].

- T. Paloposki und J. Hakala. Injection of residual fuel oil into a blast furnace. In *Finish-Swedish Flame Days*, Naantali, Finland, 1996.
- A. Pecenko, L.G.M. van Deurzen, J.G.M. Kuerten, und C.W.M. van der Geld. Non-isothermal two-phase flow with a diffuse-interface model. *Int. J. Multiphase Flow*, 37: 149–165, 2011.
- M. Raessi, J. Mostaghimi, und M. Bussmann. A volume-of-fluid interfacial flow solver with advected normals. *Computers & Fluids*, 39:1401–1410, 2010.
- W.G. Reinicke und G.D. Waldmann. The study of drop breaking behind strong shocks with applications to flight, 1970. *Rep. SAMCO-TR-70-142*, AVCO Syst. Div.
- J. Riegel und W. Mayer. Freecad, 2012. URL: <http://www.freecad.com/>. [Online; besucht: 22.10.2012].
- G. Rodewald und A. Rempe. *Feuerlöschmittel*. Verlag W. Kohlhammer, 2005.
- H. Rusche. *Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions*. Imperial College of Science, Technology & Medicine, Department of Mechanical Engineering, 2002.
- M.J. Ryan. Cfd prediction of the trajectory of a liquid jet in a non-uniform air crossflow. *Comput. Fluids*, 35:463–476, 2006.
- Naoshi Saito, Yoshio Ogawa, Yuko Saso, Chihong Liao, und Ryuta Sakei. Flame-extinguishing concentrations and peak concentrations of nitrogen, argon, carbon dioxide and their mixtures for hydrocarbon fuels. *Fire Safety Journal*, 27(3):185–200, 1996.
- R. Saurel und R. Abgrall. A simple method for compressible multifluid flows. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(3):1115–1145, 1999.
- P.G. Simpkins und E.L. Bales. Water-drop response to sudden accelerations. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 26:65–102, 1994.
- G.A. Sod. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 27:1–31, 1978.
- Siemens PLM Softwares. Solid edge, 2012. URL: http://www.plm.automation.siemens.com/de_at/products/velocity/solidedge/. [Online; besucht: 22.10.2012].

- P.R. Spalart, W.-H. Jou, M. Stretlets, und S.R. Allmaras. Comments on the feasibility of LES for wings and on the hybrid RANS/LES approach. In *Proceedings of the First AFOSR International Conference on DNS/LES*, 1997.
- M. Stretlets. Detached Eddy Simulation of massively separated flows. In *Proceedings of the 39th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Reno, NV, USA, January 2001.
- G.I. Taylor. *The shape and acceleration of a drop in a high speed air stream*. Cambridge Univ. Press, 1949. In *The Scientific Papers of G.I. Taylor*.
- H. Terashima und G. Tryggvason. A front-tracking/ghost-fluid method for fluid interfaces in compressible flows. *J. Comput. Phys.*, 228:4012–4037, 2009.
- H. Terashima und G. Tryggvason. A front-tracking method with projected interface conditions for compressible multi-fluid flows. *Computers & Fluids*, 39:1804–1814, 2010.
- T. Theofanous, G. Li, und T. Dinh. Aerobreakup in rarefied supersonic gas flows. *J. Fluids Eng.*, 126:516–527, 2004.
- T. Theofanous, R. Nourgaliev, G. Li, und N. Dinh. Compressible multi-hydrodynamics (cmh): Breakup, mixing, and dispersal, of liquids/solids in high speed flows. In *Proceedings of the YUTAM Symposium on Computational Approaches to Disperse Multiphase Flow*, pages 353–369, Dordrecht, Netherlands, 2006.
- T.G. Theofanous, G.J. Li, T.N. Dinh, und C.-H. Chang. Aerobreakup in disturbed subsonic and supersonic flow field. *J. Fluid Mesh.*, 593:131–170, 2007.
- T.G. Theofanous. Aerobreakup of Newtonian and viscoelastic liquids. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 43:661–690, 2010.
- T.G. Theofanous und G.J. Li. On the physics of aerobreakup. *Phys Fluids*, 20:052103, 2008.
- T.G. Theofanous, G.J. Li, T.N. Dinh, und C.-H. Chang. Aerobreakup in disturbed subsonic and supersonic flow field. *J. Fluid Mech.*, 593:131–170, 2007.
- T.G. Theofanous, V.V. Mitkin, C.L. Ng, C.-H. Chang, und X. Deng. The physics of aerobreakup. II. viscous liquids. *Phys Fluids*, 24:022104, 2012.
- U.S. Coast Guard Research and Development Center. An evaluation of the potential failure modes for gaseous agent fire extinguishing systems installed within the protected space. *U.S. Department of Homeland Security*, 2007.

- S. Voglsam. *Globale Verbrennungsmechanismen zur Simulation von Selbstzündung von Kerosin und Benzin für den Einsatz bei CFD-Simulationen (Dissertation)*. Technische Universität Wien, Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und Technische Biowissenschaften, 2012.
- S. Voglsam und F. Winter. A global combustion model for n-heptane and iso-octane mixtures for implementation to CFD-simulations. 2012. unpublished.
- H. Weller, G. Tabor, H. Jasak, und C. Fureby. A tensorial approach to continuum mechanics using object-oriented techniques. *Comput. Phys.*, 12(6):620–631, 1998.
- H. Yan, D. Kight, und A. A. Zheltovodov. Large Eddy Simulation of supersonic compression corner using eno scheme. In *Proceedings of the Third AFOSR International Conference on DNS/LES*, Arlington, Texas, USA, 2001.
- Y.-T. Yang und Y.-X. Wang. Three-dimensional numerical simulation of an inclined jet with cross-flow. *Int. J. Heat Mass Tran.*, 48:4019–4027, 2005.
- F. Zauner. *Experimentelle Analyse von industriellen Sprühdüsen*. Technische Universität Wien, 2010. Diplomarbeit.
- H. Zhao, H.-F. Liu, X.-K. Cao, W.-F. Li, und J.-L. Xu. Breakup characteristics of liquid drops in bag regime by a continuous and uniform air jet flow. *Int J. Multiphase Flow*, 2011.
- A. Zheltovodov und E. Schuelein. Peculiarities of turbulent separation development in disturbed boundary layers. *Modelirovaniye v Mekhanike*, 2(1):53–58, 1988.
- A. Zheltovodov, V. Trofimov, E. Filippova, und Y. Takovlev. Influence of turbulence change on the heat exchange under the conditions of supersonic separated flows. In *Proceedings of the YUTAM Symposium on Separated Flows and Jets*, pages 273–274, USSR Academy of Sciences, Siberian Division, Novosibirsk, 1990a.
- A. Zheltovodov, V. Trofimov, E. Filippova, und Y. Takovlev. Influence of turbulence change on the heat exchange under the conditions of supersonic separated flows. In *Proceedings of the YUTAM Symposium on Separated Flows and Jets*, pages 273–274, USSR Academy of Sciences, Siberian Division, Novosibirsk, 1990b.
- A. Zheltovodov, V. Trofimov, E. Schuelein, und T. Yakovlev. An experimental documentation of supersonic turbulent flows in the vicinity of forward- and backward-facing ramps, 1990c. *ITAM Report*.

- A. Zheltovodov, E. Schuelein, und C. Horstmann. Development of separation in the region of interaction of shock wave with turbulent boundary layer disturbed by expansion. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physic*, 3:58–68, 1993.
- E. Zukoski. Turbulent boundary layer separation in front of a forward facing step. *AIAA Journal*, 5(10):1746–1753, 1967.