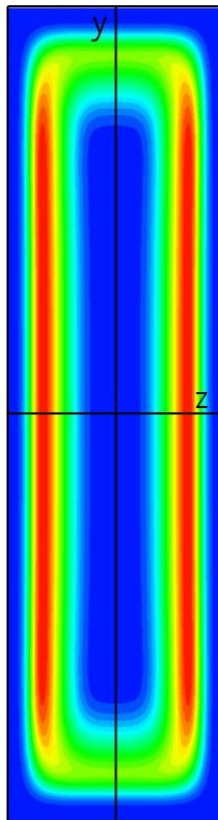


„Untersuchung der turbulenten Grenzschicht einer Lavaldüse mittels CFD-Modellierung“

Bachelorarbeit
Carlo Zimmermann



ETH Zürich
Institut für Energietechnik
Professur für erneuerbare Energieträger
Prof. Dr. Aldo Steinfeld

Auftraggeber: Hansrudolf Tschudi (PSI)
Betreuer: Hansmartin Friess
Abgabe: Juli 2006

Zum Abschluss des Bachelorstudiums als Maschinenbauingenieur am Departement Maschinenbau und Verfahrenstechnik an der ETH Zürich ist eine wissenschaftliche Arbeit zu verfassen. Im diesem Rahmen habe ich im Sommersemester 2006 am Institut für Energietechnik bei der Professur für erneuerbare Energieträger von Aldo Steinfeld eine Bachelorarbeit mit dem Titel „Untersuchung der turbulenten Grenzschicht einer Lavaldüse mittels CFD-Modellierung“ gemacht. Die Arbeit war im Namen des Paul Scherrer Institutes (PSI) ausgeschrieben. Betreut wurde ich von Hansmartin Friess. Vom PSI überwachte der Auftraggeber Hansrudolf Tschudi die Arbeit.

Die Arbeit wurde unter Angabe aller Quellen verfasst.

Carlo Zimmermann, Zürich – Juli 2006

Abbildung Titelseite: Konturplot des Querschnitts am Lavaldüsenausgang der spezifischen turbulenten kinetischen Energie für die verbesserte Düsengeometrie und das SST-Modell

Abstract

In dieser Arbeit geht es um die Untersuchung der turbulenten Grenzschicht in Lavaldüse mittels CFD-Simulationen.

In einer Lavaldüse wird ein Stickstoffdampf-Zinkdampf-Gemisch in einem festen Verhältnis eingeführt. Im divergierenden Teil der Lavaldüse setzt eine Nukleation von Zink ein. Zur Beobachtung der Nukleation existiert eine numerische Simulation, jedoch ohne der Berücksichtigung der Turbulenz. Mittels CFD-Simulationen ist die Dimension der turbulenzunbeeinflussten Strömung ermittelt worden. Dabei wurden drei Turbulenzmodelle eingesetzt. Das Gitter für die Simulation wurde speziell dem Problem angepasst gestaltet. Das Verhältnis des Gemisches ist in der Simulation unveränderlich.

Die Resultate zeigten, dass die geplante Düsengeometrie ungenügend war. Die Düsengeometrie wurde anhand der Simulationsresultate optimiert. Mit der verbesserten Düsenform sind die Chancen einer einsetzenden Nukleation im Experiment gross. Zudem konnte der Einfluss der turbulenten Grenzschicht verringert werden und die Dimension der turbulenzunbeeinflussten Strömung mit einer einfachen Berechnungsvariante ermittelt werden.

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis

Abstract.....	2
Inhaltsverzeichnis.....	3
1.) Nomenklatur.....	7
2.) Einleitung.....	8
2.1.) Motivation.....	8
2.2.) Einleitung.....	8
2.3.) Zielsetzung.....	9
2.4.) Vorgehensweise.....	9
3.) Grundlagen.....	10
3.1.) Theoretische Grundlagen.....	10
3.1.1.) Theoretischer Hintergrund kompressibler Strömungen.....	10
Voraussetzungen.....	10
Thermo- und fluiddynamische Beziehungen.....	10
Grundgleichungen.....	11
Herleitung der Düsgleichung.....	12
Beschleunigen einer Strömung.....	13
Die Lavaldüse.....	13
Lösen der Düsendifferentialgleichung.....	13
Weitere Bemerkungen.....	14
3.2.) Turbulenz und Turbulenzmodelle.....	14
3.2.1.) Gemittelte Transportgleichungen.....	15
3.2.2.) Geschwindigkeitsverteilung in der turbulenten Grenzschicht.....	16
3.2.3.) Das k- ϵ -Modell.....	17
3.2.4.) Das k- ω -Modell.....	18
3.2.5.) SST-Modell.....	19
3.3.) Daten der CFD-Simulation.....	20
3.3.1.) Die Düsengeometrie.....	20
3.3.2.) Überprüfung für axialsymmetrische Modellierung.....	22
3.4.) Stoffdaten.....	23
3.4.1.) Stoffdaten Stickstoffdampf.....	23
3.4.2.) Stoffdaten Zinkdampf.....	24
3.4.3.) Zusammensetzung des Gemisches.....	25
3.5.) Randbedingungen beim Experiment des PSI.....	25
3.6.) Vergleich Handrechnung und CFD – Simulation.....	25
3.6.1.) Handrechnung.....	26
Gegebene Daten.....	26
Berechnung.....	26
3.6.2.) CFD Simulation.....	28
Randbedingungen.....	29
Resultate.....	29
3.6.3.) Fazit.....	29
4.) Axialsymmetrische Simulationen.....	31
4.1.) Tetraedrisches Gitter.....	31
4.2.) Geordnetes Gitter.....	32

4.2.1.) Bildung eines geordneten Gitters.....	32
4.2.2.) Beobachtungen beim geordneten Gitter.....	32
Experimentaufbau.....	32
Experimentausführung.....	32
Auswertung der Simulationen.....	33
4.2.3.) CFD-Simulation	34
5.) Simulationen mit der wahren Geometrie	35
5.1.) Betrachtete Stelle der Resultatauswertung.....	35
5.2.) Bildung eines geordneten Gitters.....	36
5.2.1.) Konvergenztest beim geordneten Gitter	37
5.2.2.) Vergleich halbe Düsengeometrie zu viertel Düsengeometrie.....	43
5.3.) Massenflussminimierung.....	46
5.4.) Die Übersättigungskurve.....	46
5.5.) Simulationen mit der Originalgeometrie.....	48
5.5.1.) Anfangsdaten.....	48
5.5.2.) Ergebnisse mit der Originalgeometrie.....	49
Entlang der Strömungsrichtung.....	49
Entlang konstanter Breite.....	51
Entlang variierender Höhe.....	54
Fazit.....	57
5.6.) Simulationen mit variiertem Divergenzwinkel.....	57
5.6.1.) Anfangsdaten.....	57
5.6.2.) Ergebnisse mit variiertem Divergenzwinkel.....	58
Entlang konstanter Breite.....	59
Entlang variierter Höhe.....	60
Fazit.....	61
5.7.) Simulationen mit neuer Lavaldüse.....	61
5.7.1.) Ergebnisse mit neuer Lavaldüse (sechs Millimeter Breite).....	62
Entlang der Strömungsrichtung.....	62
Entlang konstanter Breite.....	62
Fazit.....	63
5.7.2.) Ergebnisse mit neuer Lavaldüse (fünf Millimeter Breite).....	64
Entlang der Strömungsrichtung.....	64
Entlang konstanter Breite.....	65
Entlang variierender Breite.....	66
Einfluss der Turbulenzmodelle	66
Fazit.....	67
5.7.3.) Verbesserte Düsengeometrie.....	67
Entlang der Strömungsrichtung.....	68
Entlang konstanter Breite.....	69
Entlang variierender Höhe.....	70
Flächenminimierung durch turbulente Grenzschicht.....	72
Fazit.....	74
6.) Zusammenfassung.....	75
6.1.) Ausblick.....	75
7.) Dank.....	76
8.) Quellenverzeichnis.....	77
9.) Anhang.....	78
9.1.) MATLAB-Programme (.m-files).....	78
9.1.1.) Gittergenerierung	78

Axialsymmetrische Geometrie, kubisches Gitter.....	78
Rechteckige Geometrie, kubisches Gitter.....	80
9.2.) Dokumentation der Resultate	82
9.2.1.) Lavaldüse 4 x 4 [mm] – Austrittshöhe 0.0065 [m].....	84
Auswertung Düsenachse.....	84
Auswertung Düsenbreite.....	85
Auswertung Düsenhöhe.....	87
9.2.2.) Lavaldüse 4 x 4 [mm] – Austrittshöhe 0.007 [m].....	89
Auswertung Düsenachse.....	89
Auswertung Düsenbreite.....	90
Auswertung Düsenhöhe.....	92
9.2.3.) Lavaldüse 4 x 4 [mm] – Austrittshöhe 0.008 [m].....	94
Auswertung Düsenachse.....	94
Auswertung Düsenbreite.....	95
Auswertung Düsenhöhe.....	97
9.2.4.) Lavaldüse 4 x 4 [mm] – Austrittshöhe 0.01 [m].....	99
Auswertung Düsenachse.....	99
Auswertung Düsenbreite.....	100
Auswertung Düsenhöhe.....	102
9.2.5.) Lavaldüse 3 x 6 [mm] – Austrittshöhe 0.005 [m].....	104
Auswertung Düsenachse.....	104
Auswertung Düsenbreite.....	105
Auswertung Düsenhöhe.....	107
9.2.6.) Lavaldüse 3 x 6 [mm] – Austrittshöhe 0.006 [m].....	109
Auswertung Düsenachse.....	109
Auswertung Düsenbreite.....	110
Auswertung Düsenhöhe.....	112
9.2.7.) Lavaldüse 3 x 6 [mm] – Austrittshöhe 0.0065 [m].....	114
Auswertung Düsenachse.....	114
Auswertung Düsenbreite.....	115
Auswertung Düsenhöhe.....	117
9.2.8.) Lavaldüse 3 x 5 [mm] – Austrittshöhe 0.005 [m].....	119
Auswertung Düsenachse.....	119
Auswertung Düsenbreite.....	120
Auswertung Düsenhöhe.....	122
9.2.9.) Lavaldüse 3 x 5 [mm] – Austrittshöhe 0.006 [m].....	124
Auswertung Düsenachse.....	124
Auswertung Düsenbreite.....	125
Auswertung Düsenhöhe.....	127
9.2.10.) Lavaldüse 3 x 5 [mm] – Austrittshöhe 0.007 [m].....	129
Auswertung Düsenachse.....	129
Auswertung Düsenbreite.....	130
Auswertung Düsenhöhe.....	132
9.2.11.) Lavaldüse 3 x 5 [mm] – Austrittshöhe 0.012 [m].....	134
Auswertung Düsenachse.....	134
Auswertung Düsenbreite.....	135
Auswertung Düsenhöhe.....	137
9.2.12.) Lavaldüse 3 x 5 [mm] – Austrittshöhe 0.016 [m].....	139
Auswertung Düsenachse.....	139
Auswertung Düsenbreite.....	140

Auswertung Düsenhöhe.....	142
9.2.13.) Lavaldüse 3 x 5 [mm] – Austrittshöhe 0.02 [m].....	144
Auswertung Düsenachse.....	144
Auswertung Düsenbreite.....	145
Auswertung Düsenhöhe.....	147
9.3.) Simulationsvorgehen von A-Z.....	149
9.3.1.) Gittergenerierung.....	149
9.3.2.) CFX-Pre.....	150
Materialdefinition.....	150
Create Domain.....	152
Create Boundary Conditions.....	153
Create Solver – File	154
9.3.3.) CFX-Solver.....	155
Bemerkungen.....	155

1.) Nomenklatur

Adiabatenkoeffizient	γ	[]
Boltzmann-Konstante	k_B	[J K ⁻¹]
Charakteristische Wirbelfrequenz	ω	[s ⁻¹]
Dichte	ρ	[kg m ⁻³]
Druck	p	[Pa]
dynamische Viskosität	μ	[Pa s]
Energie	e	[J kg ⁻¹]
Enthalpie	h	[J kg ⁻¹]
gemittelte Geschwindigkeit	\bar{u}	[m s ⁻¹]
Geschwindigkeit	\vec{u}	[m s ⁻¹]
Geschwindigkeitsfluktuation	\bar{u}'	[m s ⁻¹]
Kroenecker-Delta	δ_{ij}	[]
Machzahl	Ma	[]
Masse	m_i	[kg]
Massenanteil	mf_i	[]
Massenfluss	\dot{m}	[kg s ⁻¹]
Molanteil	y_i	[]
Molanzahl	n_i	[mol]
Molekulare Masse	M	[kg mol ⁻¹]
Moleküldurchmesser	d	[m]
Molekülmasse	m_m	[kg]
Prandtlzahl	Pr	[]
Querschnittsfläche	A_i	[m ²]
Reynoldsschubspannungstensor	τ^{turb}	[kg m ⁻¹ s ⁻²]
Reynoldszahl	Re_D	[]
Schallgeschwindigkeit	a	[m s ⁻¹]
Schubspannungstensor	τ, τ_{ij}	[kg m ⁻¹ s ⁻²]
spezifische Gaskonstante	R	[J mol ⁻¹ K ⁻¹]
spezifische turbulente kinetische Energie	k	[m ² s ⁻²]
spezifische Wärmekapazität (Druck)	c_p	[J mol ⁻¹ K ⁻¹]
spezifische Wärmekapazität (Volumen)	c_v	[J mol ⁻¹ K ⁻¹]
Temperatur	T	[K]
thermische Leitfähigkeit	λ	[J m ⁻¹ K ⁻¹]
Wirbelviskosität	μ_t	[Pa s]

2.) Einleitung

2.1.) Motivation

Die Zersetzung von Zinkoxid in Zink und Sauerstoff mittels konzentrierter Solarstrahlung ist aktueller Forschungsgegenstand des Laboratoriums für Hochtemperaturchemie am Paul Scherrer Institut (PSI). In allen solaren Chemiereaktoren verlässt Zink die Reaktoren als Zinkdampf und muss vom Abgasstrom rausgefiltert werden. Dies geschieht durch rasches Abkühlen um der Oxidation zuvorzukommen. Die Kenntnis der Nukleations- und Kondensationseigenschaften von Zinkdampf ist wichtig, um eine entsprechende Zelle oder Einheit zu konstruieren.

Um die homogenen Nukleationseigenschaften von Zink zu erforschen, hat das PSI ein Projekt aufgelegt, in die Nukleation experimentell untersucht werden kann. Dabei wird die stationäre Expansion einer Mischung von Zinkdampf und einem inerten Trägergas in einer Überschalldüse beobachtet. Das Trägergas ist in diesem Falle Stickstoff.

Das Experiment soll wie folgt ablaufen. Die Mischung wird unter hoher Temperatur und Druck in eine Lavalldüse eingespritzt. In der Verengung der Düse wird das Dampfgemisch beschleunigt und soll am engsten Querschnitt der Düse Schallgeschwindigkeit erreichen. Im folgenden Teil der Düse, der Erweiterung, wird das Gemisch weiterhin beschleunigt, so dass am Ausgang deutliche Überschallgeschwindigkeit herrscht. Dabei werden Temperatur und Druck kontinuierlich abnehmen, so dass eine Nukleation einsetzt. Die Nukleation wird über eine optische Messkette beobachtet. Die Düse ist aus Glas geformt. In der Erweiterung wird die Strömung mit einem Laserstrahl belichtet. Das Licht wird an den nukleierten Zinkmolekülen gestreut. Dieses gestreute Licht wird von den optischen Sensoren über eine bestimmte Länge der Düse erfasst. Je nach Intensität der Streuung kann dann mittels Rechnungen auf das Ausmass und die Geschwindigkeit der einsetzenden Nukleation geschlossen werden.

Um die definitive Form dieser Lavalldüse zu bestimmen, wurden bereits einige Rechnungen und Simulationen durchgeführt. Für die laminare Strömung entlang der Düsenachse ist ein physikalisches Modell sowie eine numerische Simulation gemacht worden, welche die Streuintensität und die Keimbildung als Funktion der Position auf der Düsenachse berechnen. Dieses Modell beinhaltet für eine turbulenzunbeeinflusste Strömung die allgemeinen fluid- und thermodynamischen Eigenschaften sowie die Keimbildungseigenschaften und die Dampfkondensation. Die freien Parameter, welche im Modell noch vorhanden sind, werden über eine Routine bestimmt, in welcher die gemessenen Daten mit den simulierten/berechneten Daten verglichen und optimiert werden.

2.2.) Einleitung

Die genaue Kenntnis der turbulenten Grenzschicht ist für das Gelingen des Experimentes wichtig. An dieser Stelle setzt die vorliegende Arbeit an. Eine Düsengeometrie wurde erarbeitet, jedoch sind die Eigenschaften bezüglich Strömung und turbulenter Grenzschicht nur wage bekannt. Die Randbedingungen der Strömung am Düseneinlass für Druck und Temperatur sind fest gegeben.

Die Datenanalyse des PSI beschränkt sich auf die Zone der turbulenzunbeeinflussten Strömung. Interessant zu wissen ist, in welcher lokalen Ausdehnung die Strömung als turbulenzunbeeinflusst zu betrachten ist. Denn für diese Strömung existiert ein Simulationsprogramm, welches es erlaubt, Experiment und Simulation zu vergleichen. Zu bestimmen ist, welche räumliche Ausdehnung die turbulente Grenzschicht in der Düse hat. Mit Kenntnis der geometrischen Form der Düse sowie der Grösse der turbulenten Grenzschicht kann eine effektive Düsengeometrie bestimmt werden, in welcher die Strömung als annähernd turbulenzunbeeinflusst zu betrachten ist.

Um diese Simulationen durchzuführen wird ein Modell benutzt, welches weder die Keimbildung noch die Dampfkondensation berücksichtigt. Es geht lediglich um die Entstehung und die charakteristischen Eigenschaften der Turbulenz anhand eines bestimmten Gasgemisches zu untersuchen.

Die thermodynamischen und fluiddynamischen Eigenschaften von Stickstoffdampf sind generell gut dokumentiert, während diejenigen von Zinkdampf verhältnismässig schlecht bekannt sind. Der Anteil von Zinkdampf im Gemisch ist gering (kleiner als vier Massenprozent).

Eine Besonderheit des Problems ist sicherlich die Düsenform. Es handelt sich bei der am PSI eingesetzten Düse nicht um eine axialsymmetrische Düse, sondern um eine Düse mit einem rechteckigen Querschnitt, welcher sich nur in einer Richtung öffnet.

2.3.) Zielsetzung

Das Ziel der Arbeit ist, die räumliche Ausdehnung der turbulenten Grenzschicht mittels CFD Simulationen zu erforschen. Aus der Kenntnis der Grenzschicht soll eine modifizierte Düsengeometrie für die turbulenzunbeeinflusste Strömung bestimmt werden. Die CFD Simulationen sollen mit verschiedenen Turbulenzmodellen realisiert werden. Ausserdem soll die Düsengeometrie verändert werden, falls die Resultate mit der originalen Geometrie ungenügend sind. Die verbesserte Geometrie der Lavaldüse soll schliesslich Bedingungen liefern, welche eine erfolgreiche Durchführung der Experimente erwarten lassen.

2.4.) Vorgehensweise

Das Einarbeiten in das Problem war der erste Schritt. Bestehende Resultate von David P. Brown [1] dienen dabei als Anhaltspunkt. Zusätzlich wird die Theorie der kompressiblen Strömungen vertieft, und eine Evaluation der Turbulenzmodelle durchgeführt. Schliesslich werden die Resultate einer Handrechnung mit denjenigen einer CFD-Simulation verglichen.

Für eine axialsymmetrische Näherung werden erste Simulationen gemacht, und zwar zuerst mit einem tetraedrischen Gitter und danach mit einem selber generierten, verbesserten Gitter.

Der wichtigste Schritt ist der Wechsel auf die wahre Geometrie. Ein speziell dem Problem angepasstes Gitter wird generiert und ein aufwendiger Konvergenztest wird durchgeführt. Danach folgen Simulationen mit verschiedenen Turbulenzmodellen. Die Daten werden ausgewertet und anhand deren wird die Düsengeometrie optimiert, indem zwei Parameter variiert werden. Dies sind der Divergenzwinkel und die Breite der Lavaldüse.

3.) Grundlagen

3.1.) Theoretische Grundlagen

3.1.1.) Theoretischer Hintergrund kompressibler Strömungen

Düsenströmungen im Überschallbereich sind nur mit kompressiblen Fluiden möglich. Diese verhalten sich zu inkompressiblen Fluiden, wie elastische zu starren Körpern in der Mechanik [7]. Kleine lokal eingebrachte Störungen machen sich nicht mehr instantan überall bemerkbar, sondern haben eine endliche Signal-, Ausbreitungsgeschwindigkeit (Schallgeschwindigkeit). Die Schallgeschwindigkeit ist eine Bezugsgeschwindigkeit, aus der sich eine wichtige und aussagekräftige dimensionslose Kennzahl ergibt – die Machzahl. Die Machzahl ist das Verhältnis von Strömungsgeschwindigkeit zu Schallgeschwindigkeit. Gegenüber dem inkompressiblen Grenzfall ($Ma \rightarrow 0$) treten insbesondere bei Überschallströmungen neue Phänomene auf.

Zentral bei der Theorie von kompressiblen Strömungen ist Stromfadentheorie. Ein Stromfaden mit Querschnittsfläche $A(x)$ bezeichnet eine Stromröhre, wobei x die Bogenlänge entlang der Stromlinie bedeutet. Die Stromfadentheorie, oft auch quasi-eindimensionale Theorie genannt, nimmt an, dass die Strömungseigenschaften über einen Querschnitt $A(x)$ als konstant betrachtet werden können, und die Geschwindigkeit nur eine einzige Komponente hat, die x -Komponente. Die Annahme ist vorallem dann berechtigt, wenn sich der Querschnitt $A(x)$ nur langsam ändert, insbesondere wenn keine sprunghaften Änderungen vorhanden sind. Sie vereinfacht die Beschreibung solcher Strömungen stark.

Voraussetzungen

Die Strömung erfülle folgende Annahmen:

- thermisch ideales Gas
- kalorisch ideales Gas: $c_p, c_v = \text{konstant}$
- quasi-eindimensional (Stromfadentheorie)
- stationär
- reibungsfrei
- keine Volumenkräfte
- adiabat

Thermo- und fluiddynamische Beziehungen

Spezifische Gaskonstante:

$$R = c_p - c_v = 8.31415 \left[\frac{J}{mol \cdot K} \right] \quad (1)$$

Adiabatexponent:

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} \quad (2)$$

spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck:

$$c_p = \frac{\gamma}{(\gamma - 1)} R \quad (3)$$

spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen:

$$c_v = \frac{R}{(\gamma - 1)} \quad (4)$$

Innere Energie:

$$e = c_v T \quad (5)$$

Enthalpie:

$$h = c_p T \quad (6)$$

Schallgeschwindigkeit, als Ausbreitungsgeschwindigkeit kleiner Störungen:

$$a^2 = \left(\frac{dp}{d\rho} \right)_{s=\text{konstant}} = \gamma R T = \gamma \frac{p}{\rho} \quad (7)$$

Machzahl:

$$Ma = \frac{u}{a} \quad (8)$$

Grundgleichungen

Die Grundgleichungen in differentieller Form lauten für die Massenerhaltung (Kontinuitätsgleichung):

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (9)$$

Wobei die substantielle Ableitung wie folgt geschrieben werden kann:

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{d\rho}{dt} + \vec{u} \cdot \nabla \rho \quad (10)$$

Der Impulssatz lautet:

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \rho \vec{f} \quad (11)$$

Eine weitere Grundgleichung ist die Energiegleichung, unten formuliert für die Enthalpie:

$$\frac{D \rho h}{Dt} = \frac{D p}{Dt} + \tau_{ij} \frac{d u_j}{d x_i} - \nabla q + \rho q_{vol} \quad (12)$$

Unten den Annahmen einer stationären, quasi-eindimensionalen, reibungsfreien und adiabaten Strömung ohne Volumenkräfte (Gravitation) lassen sich diese partiellen Differentialgleichungen entscheidend vereinfachen.

Kontinuitätsgleichung:

$$\dot{m} = \rho A u = \text{konstant} \quad (13)$$

Impulserhaltung (Eulergleichung):

$$u \frac{du}{dx} = -\frac{1}{\rho} \frac{dp}{dx} \quad (14)$$

Energieerhaltung:

$$h + \frac{u^2}{2} = c_p T + \frac{u^2}{2} = \text{konstant} \quad (15)$$

Zustandsgleichung:

$$\frac{p}{\rho} = R T \quad (16)$$

Isentropenbeziehung:

$$p v^\gamma = \text{konstant} \quad (17)$$

Herleitung der Düsengleichung

Aus der Eulergleichung erhält man durch Umformen des Druckgradiententermes:

$$u \frac{du}{dx} = -\frac{1}{\rho} \frac{dp}{dx} \quad (18)$$

$$u \frac{du}{dx} = -\frac{1}{\rho} \frac{dp}{d\rho} \frac{d\rho}{dx} \quad (19)$$

$$u \frac{du}{dx} = -\frac{a^2}{\rho} \frac{d\rho}{dx} \quad (20)$$

$$-Ma^2 \frac{du}{u} = \frac{d\rho}{\rho} \quad (21)$$

Die vereinfachte Kontinuitätsgleichung lässt sich umformen in:

$$d(\dot{m}) = 0 = d(\rho A u) = d\rho A u + \rho dA u + \rho A du = 0 \quad (22)$$

$$\frac{-d\rho}{\rho} = \frac{dA}{A} + \frac{du}{u} \quad (23)$$

Setzt man (23) in (21) ein so erhält man:

$$\frac{du}{u}(Ma^2 - 1) = \frac{dA}{A} \quad (24)$$

Durch weiteres Umformen erhält man schliesslich folgende Differentialgleichung:

$$\frac{dMa}{Ma} = \frac{1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma^2}{Ma^2 - 1} \frac{dA}{A} \quad (25)$$

Beschleunigen einer Strömung

Die Gleichung (3) ist ein Ausdruck für die relative Geschwindigkeitsänderung in Abhängigkeit von der relativen Querschnittsänderung.

$$\frac{du}{u}(Ma^2 - 1) = \frac{dA}{A} \quad (26)$$

Will man eine Beschleunigung erreichen ($du/u > 0$), so folgt hieraus für den Querschnittsverlauf:

- $Ma < 1 \Rightarrow dA < 0$ (Querschnittsverengung)
- $Ma = 1 \Rightarrow dA = 0$ (konstanter Querschnitt)
- $Ma > 1 \Rightarrow dA > 0$ (Querschnittserweiterung)

Die Lavaldüse

Kombiniert man diese Teilergebnisse, so erhält man die Strömung in der Lavaldüse. In einem konvergenten Einlass ($dA < 0$) wird die Unterschallströmung ($Ma < 1$) beschleunigt, bis sie am engsten Querschnitt ($dA = 0$) Schallgeschwindigkeit erreicht. Im nachfolgenden divergenten Düsenteil ($dA > 0$) erfolgt die Beschleunigung auf Überschallgeschwindigkeit.

Lösen der Düsendifferentialgleichung

Die Düsendifferentialgleichung lässt sich für einen gegebenen Querschnittsverlauf leicht lösen.

Für den Fall des konvergenten Düseneinlasses bis zum engsten Querschnitt ergibt sich für die Randbedingung ($Ma_2=1$) folgendes Ergebnis:

$$\frac{A_2}{A_1} = Ma_1 \left(\frac{\gamma + 1}{(\gamma - 1) Ma_1^2 + 2} \right)^{\frac{\gamma + 1}{2(\gamma - 1)}} \quad (27)$$

Für den Fall des divergenten Düsentelles vom engsten Querschnitt bis zum Düsenauslass ergibt sich:

$$\frac{A_3}{A_2} = \frac{1}{Ma_3} \left(\frac{(\gamma - 1) Ma_3^2 + 2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma + 1}{2(\gamma - 1)}} \quad (28)$$

Weitere Bemerkungen

Für die theoretische Betrachtung von Düsenströmungen sind wie erwähnt fünf Gleichungen von Bedeutung. Es sind dies die Kontinuitätsgleichung, die Impulsgleichung (Eulergleichung), die Energiegleichung, die Zustandsgleichung sowie die Isentropenbeziehung. Die zentrale Vereinfachung ist die Stromfadentheorie, welche das Problem auf eine Dimension reduziert. Wählt man entsprechende Randbedingungen, so lässt sich die ganze Strömung berechnen und charakterisieren.

3.2.) Turbulenz und Turbulenzmodelle

Turbulente Strömungszustände [1] können das makroskopische Verhalten einer Strömung stark beeinflussen. Notwendige Bedingungen für eine turbulente Strömung sind deren Instationarität, dreidimensionale Geschwindigkeitsfluktuationen und eine rotationsbehaftete Strömung. Damit sind turbulente Strömungen sehr mischungsintensiv. Charakteristisch sind ausserdem auftretende Wirbelstrukturen in verschiedenen Längsskalen, der Übergang von laminarer zu turbulenter Strömung, das Vorhandensein eines externen „Antriebs“ durch den Geschwindigkeitsgradienten, die Selbsterhaltung der Turbulenz sowie die Umwandlung von turbulenter Energie in Reibungswärme. Zudem ist der Übergang vom laminaren zu turbulenten Bereich nicht nur von der Reynoldszahl abhängig, sondern auch vom Strömungszustand am Einlass sowie noch weiteren Faktoren. Grundsätzlich kann man sagen, dass die Reynoldszahl ein Kriterium für den Strömungszustand ist. Sie gibt an, ob eine Strömung laminar oder turbulent ist.

$$Re_D = \frac{\rho u D}{\mu} \quad (29)$$

Die Beschreibung turbulenter Strömungen kann verschieden erfolgen. Es gibt verschiedene Mittelungsmethoden. Über ein Ensemble unabhängiger Realisationen, Large Eddy Simulation (LES), Direkte Numerische Simulation (DNS), Phasenmittlung, Reynolds-Average-Navier-Stokes Gleichung (RANS) bis hin zu einer räumlichen Mittlung.

Die direkte numerische Simulation (DNS) ist das numerische Lösen der dreidimensionalen, instationären Gleichungen [4]. Es werden dabei alle turbulenten Strukturen aufgelöst. Damit kann auf ein Turbulenzmodell verzichtet werden. Dies hat zur Folge, dass bei einer angemessenen Gitterwahl die Rechenzeit enorm gross ist, ausserdem ist die Simulation nur für Reynoldszahlen bis etwa $Re = 20000$ möglich (heutiger Stand).

Bei der Large Eddy Simulation (LES) werden nur die Strömungsgleichungen dreidimensional und instationär gelöst. Die Auflösung der turbulenten Strukturen ist beschränkt, deshalb ist der praktische Einsatz vorerst nur bei Strömungen mit grossen Wirbelstrukturen sinnvoll [4].

Die in dieser Arbeit betrachteten Turbulenzmodelle dienen zur Berücksichtigung von Turbulenzeffekten, ohne die genaue Kenntnis der Wirbelstruktur.

3.2.1.) Gemittelte Transportgleichungen

Aussagekräftige Resultate kriegt man sehr gut über die Reynolds-Average-Navier-Stokes (RANS) Gleichungen. Alle Zustandsgrössen werden dabei aufgeteilt in einen Mittelwert und einen Fluktuationsanteil.

$$u = \bar{u} + \overline{u'} \quad (30)$$

$$p = \bar{p} + \overline{p'} \quad (31)$$

$$\bar{u} = \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} u \, dt \quad (32)$$

Der Einfluss des Schwankungswertes [6] auf das gemittelte Strömungsfeld liefert dann das Turbulenzmodell. Die gemittelten Transportgleichungen (RANS) erhält man, wenn man die momentanen Strömungsgrössen in den Grundgleichungen durch den Mittelwert und den Schwankungswert ersetzt. Nach der zeitlichen Mittlung und einigen Umformungen erhält man:

Massenerhaltung (Kontinuitätsgleichung):

$$\frac{d\rho}{dt} + \nabla \rho \bar{u} = 0 \quad (33)$$

Impulserhaltung:

$$\frac{d\rho \bar{u}}{dt} + \bar{u} \nabla \rho \bar{u} = -\nabla \bar{p} - \frac{d\tau_{ij}}{dx_j} - \frac{d\tau_{ij}^{turb}}{dx_j} \quad (34)$$

$$\tau_{ij} = -\mu \left(\frac{d\bar{u}_i}{dx_j} + \frac{d\bar{u}_j}{dx_i} \right) \quad (35)$$

$$\tau_{ij}^{turb} = \rho \overline{u'_i u'_j} \quad (36)$$

Energieerhaltung:

$$\frac{D\rho h}{Dt} = -\nabla q - \nabla q^{turb} \quad (37)$$

$$q^{turb} = \rho \overline{u' h} \quad (38)$$

Durch das Auftreten der Korrelation zwischen den Schwankungsgeschwindigkeiten bei τ^{turb} ist das Gleichungssystem nicht mehr geschlossen. Das Hauptproblem bei der Berechnung turbulenter Strömungen ist die Bestimmung der Geschwindigkeitsterme, welche quadratisch in die Gleichung einfließen. Man kann zwar exakte Gleichungen herleiten, dabei werden aber neue, unbekannte Korrelationen höherer Ordnung eingeführt. Die Schliessung ist nur durch das Einbringen empirischer Information möglich (empirische Korrelationen, Integralverfahren, Turbulenzmodelle). Die Bestimmung der Turbulenzkorrelationen in jedem Punkt der Strömung wird mit zusätzlichen Modellgleichungen realisiert. Das Turbulenzmodell beschreibt näherungsweise die Auswirkungen der komplexen Turbulenzbewegungen auf die mittlere Strömung. In der Literatur unterscheidet man zwischen Wirbelviskositätsmodellen und Reynoldsspannungsmodellen. Bei Wirbelviskositätsmodellen wird bei der Impulserhaltungsgleichung der Reynoldsschubspannungstensor τ^{turb} wie folgt modelliert:

$$\tau_{ij}^{turb} = -\mu_t \left(\frac{d\bar{u}_i}{dx_j} + \frac{d\bar{u}_j}{dx_i} \right) + \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (39)$$

Die Wirbelviskosität μ_t ergibt sich dann aus dem jeweiligen Turbulenzmodell.

Die Modelle sind alle halb empirisch, das heisst, dass sie immer empirische Konstanten enthalten. Es gibt Eingleichungsmodelle, welche für nur einen Turbulenzparameter (Geschwindigkeitsmasstab oder Längenmass zum Beispiel) den Turbulenztransport durch die Transportgleichungen berücksichtigen.

Eine bessere Modellierung wird jedoch durch Modelle erzielt, bei denen zwei Eigenschaften turbulenter Strömungsfelder berechnet werden. Die beiden wichtigsten Eigenschaften sind die Intensität und die Struktur der Turbulenz. Erstere wird durch die spezifische turbulente kinetische Energie k ausgedrückt. Wichtige Eigenschaften der Struktur sind die räumliche Verteilung der Dissipationsrate ε oder der turbulenten Frequenz ω . Daher wird die Rede sein von k - ε und k - ω Modellen.

Im weiteren Verlauf der Arbeit wird sich mit einer kurzen Einführung der Turbulenzmodelle und einer qualitativen Stärken/Schwächen-Analyse begnügt.

3.2.2.) Geschwindigkeitsverteilung in der turbulenten Grenzschicht

Bei jeder Strömung mit Newtonschen Fluiden wird durch die Haftbedingung eines Fluides die Geschwindigkeit mit Annäherung an die feste Wand den Wert Null annehmen, wenn die Wand selber in Ruhe ist. Der durch die Reibung beeinflusste Teil wird als Grenzschicht bezeichnet.

Die Grenzschicht wird modellhaft in drei Bereiche unterteilt [5]:

- Wandbereich (viskose Unterschicht)
Äusserst dünne Schicht, bei der die viskose Schubspannung dominiert. Die Geschwindigkeit variiert linear zum Abstand zur Wand.

- Wandnaher Bereich (logarithmische Schicht)
Viskose Schubspannung klingt beim Erreichen grösserer Wandabstände ab und wird zunehmend von der Reynoldsschubspannung übernommen. Über Dimensionsanalyse kann das logarithmische Wandgesetz abgeleitet werden.
- Aussenbereich
Schliesst sich an die logarithmische Schicht an. Ein Bereich höherer Reynoldszahlen, welcher den Übergang zum Grenzschichttrand bildet.

3.2.3.) Das k-ε-Modell

Neben der Transportgleichung für den mittleren Impuls (RANS) werden zusätzlich noch zwei Transportgleichungen für die spezifische turbulente kinetische Energie (stkE) und der Dissipation gelöst [6]. Die stkE setzt sich aus den Fluktuationsanteilen der Geschwindigkeit zusammen. Die Dissipationsrate ist die pro Zeit und Masseneinheit in innere Energie (Wärme) umgewandelte kinetische Energie der Turbulenzbewegung. Die Energie wird durch die grossen Turbulenzelemente der Hauptströmung entzogen und an immer kleinere Elemente weitergegeben.

Die k-Gleichung lautet:

$$\frac{d}{dt}(\rho k) + \nabla(\rho \bar{u} k) = \nabla \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + P_k - \rho \epsilon \quad (40)$$

Die ε-Gleichung hat die Form:

$$\frac{d}{dt}(\rho \epsilon) + \nabla(\rho \bar{u} \epsilon) = \nabla \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right) + \frac{\epsilon}{k} (C_{\epsilon 1} P_k - C_{\epsilon 2} \rho \epsilon) \quad (41)$$

Dabei sind $C_{\epsilon 1}$, $C_{\epsilon 2}$, σ_k und σ_ϵ Konstanten. Der Term P_k beschreibt die Turbulenzproduktion und ist in CFD nochmals über eine partielle Differentialgleichung modelliert [2]. Aus den beiden Werten k und ϵ lässt sich nun mit einer weiteren empirischen Konstante c_μ die Wirbelviskosität bestimmen:

$$\mu_t = \rho c_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (42)$$

Diese fünf empirischen Konstanten stammen aus umfangreichen experimentellen Studien turbulenter Strömungen [2] und sind in Tabelle 1 aufgeführt.

$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	c_μ	σ_k	σ_ϵ
1.44	1.92	0.09	1	1.3

Tabelle 1: Konstanten des k-ε-Modells

Das k-ε-Modells ist mit Abstand das am besten getestete und am häufigsten angewandte Zweigleichungsmodell [4]. In der Industrie wird es standardmässig eingesetzt. Probleme treten auf bei Strömungen mit hohen Druckgradienten, wo die Turbulenz zu hoch dargestellt wird [3]. In wandnahen

Bereichen ist die turbulente Strömung unbefriedigend wiedergegeben. Es ist ein guter Kompromiss zwischen Robustheit und Genauigkeit. Besonders wenn die wandnahen Bereiche mit einem feinen Gitter aufgelöst sind, wird die Robustheit deutlich verbessert. Für Strömungen über gekrümmte Oberflächen ist es weniger geeignet. Die Stärken liegen in den wandfernen Bereichen [2].

3.2.4.) Das k- ω -Modell

Das Hauptproblem bei der Modellierung der Turbulenz ist die exakte Vorhersage der Strömungsablösung von einer Wand. Standard-Zweigleichungsmodelle versagen oft in der Vorhersage des Entstehungspunktes und der Menge der Strömungsseparation unter hohen Druckgradienten [6]. Das k- ω -Modell wie das Shear-Stress-Transport-Modell (SST-Modell) wurden entwickelt, um eine genaue Vorhersage der Entstehung und der Menge der Turbulenz unter hohen Druckgradienten zu machen. Dies indem sie Transporteffekte in die Formulierung der Eddy-Viskosität einbeziehen. Die resultierende bessere Leistung wurde auch in vielen Studien bestätigt.

Der Hauptunterschied des k- ω -Modells nach Wilcox zum k- ϵ -Modell ist, dass neben einer Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie eine Transportgleichung für die charakteristische Frequenz der energiedissipierenden Wirbel gelöst wird.

Die k-Gleichung:

$$\frac{d(\rho k)}{dt} + \nabla(\rho \bar{u} k) = \nabla \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + P_k - \beta' \rho k \omega \quad (43)$$

Die ω -Gleichung:

$$\frac{d(\rho \omega)}{dt} + \nabla(\rho \bar{u} \omega) = \nabla \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega \right) + \alpha \frac{\omega}{k} P_k - \beta \rho \omega^2 \quad (44)$$

Der Term P_k ist wiederum ein Mass für die Turbulenzproduktion und wird in CFD im k- ϵ -Modell wie im k- ω -Modell respektive SST-Modell gleich gebildet. Die Wirbelviskosität ergibt sich aus den beiden aus den partiellen Differentialgleichungen erhaltenen Termen [2]:

$$\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} \quad (45)$$

Die empirischen Konstanten im Modell sind in der Tabelle 2 angegeben.

β'	α	β	σ_k	σ_ω
0.09	0.55	0.08	2	2

Tabelle 2: Konstanten des k- ω -Modells

Die Konvergenzeigenschaften des k- ω -Modells sind oft ähnlich zu denjenigen des k- ϵ -Modells. Ausserdem beinhaltet es eine Ablösungsfunktion in der nahen Wandregion, welche eine Funktion der Distanz zu der

Wand ist. Eine zusätzliche Gleichung ist implementiert, welche in den ersten paar Rechenschritten die Wanddistanz berechnet [2].

Nachteilig ist die Abhängigkeit des berechneten Grenzschichtrandes von der Freiströmung. Es bietet jedoch Vorteile in den wandnahen Bereichen des Strömungsfeldes, wo das k-ε-Modell etwas weniger genau ist. In den wandfernen Gebieten ist aber das k-ω-Modell dem k-ε-Modell unterlegen [6].

3.2.5.) SST-Modell

Das SST-Modell ermöglicht die Kombination des k-ω-Modell mit dem k-ε-Modell mit Hilfe einer Funktion, die im Bereich zwischen Null und Eins liegt [2].

Die Tabelle 3 zeigt die Vor- und Nachteile des k-ε- resp. k-ω-Modell in den drei erwähnten und dem vierten oftmals genannten Bereich, dem Grenzschichtrand. Sie zeigt, dass in Wandnähe die Turbulenz durch das k-ω-Modell gut beschrieben wird, und im Aussenbereich das k-ε-Modell eine gute Wahl ist [6].

Modell	k-ω	k-ε
Viskose Unterschicht	Robust Genau Einfach	Steif Wenig genau Komplex
Logarithmischer Bereich	Genau	Zu hohe Turbulenzbildung
Aussenbereich	Keine Transporteffekte	Keine Transporteffekte
Grenzschichtrand	Freistrah- Sensitivität	Keine Abhängigkeit

Tabelle 3: Vergleich der beiden Turbulenzmodellen

Das SST-Modell kombiniert die beiden Modelle, indem es das k-ω-Modell mit einer Funktion F_1 und das transformierte k-ε-Modell mit einer Funktion $(1 - F_1)$ multipliziert. Die Modelle werden in der k-ω-Formulierung addiert und man erhält das SST-Turbulenzmodell [2].

k-Gleichung:

$$\frac{d(\rho k)}{dt} + \nabla(\rho \bar{u} k) = \nabla \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma} - k_3 \right) \nabla k \right) + P_k - \beta' \rho k \omega \quad (46)$$

ω-Gleichung:

$$\frac{d(\rho \omega)}{dt} + \nabla(\rho \bar{u} \omega) = \nabla \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 3}} \right) \nabla \omega \right) + (1 - F_1) \frac{2\rho}{\sigma_{\omega 3} \omega} \nabla k \nabla \omega + \alpha_3 \frac{\omega}{k} \quad (47)$$

Die Koeffizienten mit dem Indizes 3 ergeben sich als Linearkombination der einzelnen Modelle als:

$$\phi_3 = \phi_1 F_1 + \phi_2 (1 - F_1) \quad (48)$$

Die Funktion F_1 erhält an der Wand den Wert Eins. Damit werden nur die Werte des k-ω-Modells verwendet. Im Aussenbereich erhält sie den Wert Null, sodass nur die Werte des k-ε-Modells berücksichtigt werden. Dazwischen wird eine Kombination beider Varianten verwendet.

Φ_1					Φ_2			
β'	α_1	β_1	σ_{k1}	$\sigma_{\omega 1}$	α_2	β_2	σ_{k2}	$\sigma_{\omega 2}$
0.09	0.55	0.08	2	2	0.44	0.08	1	1/0.856

Tabelle 4: Konstanten des SST - Modells

Die Wirbelviskosität ergibt sich dann über eine Reihe von ineinander verschachtelten Beziehungen.

Die Vorteile des SST-Modells liegen neben einer genaueren Beschreibung der Grenzschicht bei der realistischen Modellierung von Staupunkten, starker Stromlinienkrümmung und Strömungen mit Druckgradienten, die bei Simulationen von Düsenströmungen auftreten [6].

Die vorliegende Arbeit beschränkt sich auf die drei oben beschriebenen Turbulenzmodelle. Diese lassen eine differenzierte Betrachtung der turbulenten Grenzschichtentwicklung im divergierenden Düsenteil zu.

3.3.) Daten der CFD-Simulation

3.3.1.) Die Düsengeometrie

Das PSI hat für ihr Experiment eine Düsengeometrie erarbeitet. Für die Beobachtung mit den Kameras ist es notwendig, dass die Lavaldüse einen rechteckigen Querschnitt hat, damit keine optischen Nebeneffekte auftreten. Die vorgesehene Geometrie ist in Tabellenform dokumentiert, ersichtlich in Tabelle 5. Zu beachten ist, dass sich im divergenten Düsenteil nur die Ausdehnung in der Höhe ändert, während die Breite einen konstanten Wert behält.

Länge [m]	Breite [m]	Höhe [m]	Fläche [m ²]
-1.220	0.012	0.020000	2.40E-04
-0.120	0.004	0.020000	8.00E-05
-0.025	0.004	0.020000	8.00E-05
0.000	0.004	0.004000	1.60E-05
0.005	0.004	0.004125	1.65E-05
0.010	0.004	0.004225	1.69E-05
0.015	0.004	0.004350	1.74E-05
0.020	0.004	0.004450	1.78E-05
0.025	0.004	0.004575	1.83E-05
0.030	0.004	0.004675	1.87E-05
0.035	0.004	0.004800	1.92E-05
0.040	0.004	0.004900	1.96E-05
0.045	0.004	0.005025	2.01E-05
0.050	0.004	0.005125	2.05E-05
0.055	0.004	0.005250	2.10E-05
0.060	0.004	0.005375	2.15E-05
0.065	0.004	0.005475	2.19E-05
0.070	0.004	0.005600	2.24E-05
0.075	0.004	0.005700	2.28E-05
0.080	0.004	0.005825	2.33E-05
0.085	0.004	0.005925	2.37E-05
0.090	0.004	0.006050	2.42E-05
0.095	0.004	0.006150	2.46E-05
0.100	0.004	0.006275	2.51E-05
0.105	0.004	0.006375	2.55E-05
0.110	0.004	0.006500	2.60E-05

Tabelle 5: Tabelle der Lavaldüsengeometrie

Um einen Eindruck von der Geometrie unabhängig einer Tabelle zu erhalten, ist in Abbildung 1 die Lavaldüse vermessen dargestellt. Alle Angaben sind in Metern [m].

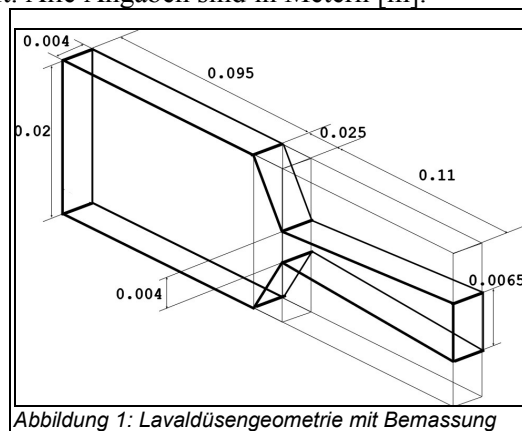


Abbildung 1: Lavaldüsengeometrie mit Bemassung

3.3.2.) Überprüfung für axialsymmetrische Modellierung

Die vorhandene Düsengeometrie rechteckig. In ANSYS ICEM CFD (Programm zum Generieren von Formen und Gittern) ist es einfacher runde Geometrien zu gestalten. Nach welchen Kriterien soll nun einer runde Form (kreisförmige Querschnitte) zu generieren sein? Sinnvoll erscheint, und so wurden auch die bisherigen Rechnungen gemacht [1], eine flächentreue Modellierung. Für jede rechteckige Fläche wird ein äquivalenter Radius berechnet, der dann die Düsengeometrie bestimmt.

Der Nachteil dabei ist, dass dieser äquivalente Radius nicht linear anwächst, sondern mit einer Wurzelfunktion ansteigt. Das bedeutet, dass der Öffnungswinkel im divergenten Teil nicht konstant ist. Macht man zwischen den Endpunkten eine lineare Approximation und vergleicht diese Werte mit denjenigen des normalen äquivalenten Radius so stellt man fest, dass die Abweichung zwischen den beiden Varianten klein ist (weniger als ein Prozent). Dies erlaubt die Wahl des äquivalenten Radius und der damit verbundenen Düsengeometrie, dargestellt in Tabelle 6.

Länge [m]	Fläche [m ²]	Äquivalenter Radius [m]	Lin. Approx. [m]	% Fehler
-1.220	0.0002400	0.0087404		
-0.120	0.0000800	0.0050463		
-0.025	0.0000800	0.0050463		
0.000	0.0000160	0.0022568	0.0022568	0.00
0.005	0.0000165	0.0022917	0.0022850	0.30
0.010	0.0000169	0.0023194	0.0023132	0.27
0.015	0.0000174	0.0023534	0.0023413	0.52
0.020	0.0000178	0.0023803	0.0023695	0.46
0.025	0.0000183	0.0024135	0.0023977	0.66
0.030	0.0000187	0.0024398	0.0024259	0.57
0.035	0.0000192	0.0024722	0.0024541	0.74
0.040	0.0000196	0.0024978	0.0024823	0.62
0.045	0.0000201	0.0025294	0.0025104	0.76
0.050	0.0000205	0.0025545	0.0025386	0.63
0.055	0.0000210	0.0025854	0.0025668	0.73
0.060	0.0000215	0.0026160	0.0025950	0.81
0.065	0.0000219	0.0026403	0.0026232	0.65
0.070	0.0000224	0.0026702	0.0026513	0.71
0.075	0.0000228	0.0026940	0.0026795	0.54
0.080	0.0000233	0.0027233	0.0027077	0.58
0.085	0.0000237	0.0027466	0.0027359	0.39
0.090	0.0000242	0.0027754	0.0027641	0.41
0.095	0.0000246	0.0027983	0.0027923	0.21
0.100	0.0000251	0.0028266	0.0028204	0.22
0.105	0.0000255	0.0028490	0.0028468	0.08
0.110	0.0000260	0.0028768	0.0028768	0.00

Tabelle 6: Überprüfung für eine axialsymmetrische Modellierung

3.4.) Stoffdaten

Um die Simulationen durchzuführen, sind die Stoffdaten in CFX-Pre einzugeben. Im Experiment tritt ein Gemisch aus Zink- und Stickstoffdampf in die Düse ein. Beide Stoffe stehen in einem bestimmten Massenverhältnis zueinander. Im Experiment wird der Zinkdampf teilweise nukleieren, was das Zusammensetzungsverhältnis verändern wird. Diese Tatsache wird in dieser Arbeit vernachlässigt. Die ganze Simulation wird also mit einem festen Zinkdampf-Stickstoffdampf-Verhältnis gerechnet.

Während die Stoffdaten für Stickstoffdampf sehr gut dokumentiert sind, ist dies bei Zinkdampf nicht der Fall. Hier musste aufgrund lückenhafter Literaturangaben auf Beziehungen der kinetischen Gastheorie zurückgegriffen werden. Die Grundgleichungen wurden mir vom Auftraggeber der Arbeit, Hansrudolf Tschudi vom PSI, bekannt gegeben.

3.4.1.) Stoffdaten Stickstoffdampf

Alle Daten aus [8].

Molmasse M :	28.0	$[\text{g mol}^{-1}]$
Adiabatexponent γ :	1.4	$[-]$
Prandtl – Zahl Pr :	0.71	$[-]$
Spezifische Wärmekapazität c_p :	$A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ $A = 25.84546229 \quad [\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}]$ $B = 0.008900406 \quad [\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-2}]$ $C = 2.34795 \cdot 10^{-6} \quad [\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-3}]$ $D = 2.1164 \cdot 10^{-10} \quad [\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-4}]$ $E = 47860.76772 \quad [\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-5}]$ (bei konstantem Druck)	
Dynamische Viskosität μ :	$A + B T + C T^2$ $A = 42.606 \cdot 10^{-6} \quad [\text{Pa s}]$ $B = 4.75 \cdot 10^{-7} \quad [\text{Pa s K}^{-1}]$ $C = -9.88 \cdot 10^{-11} \quad [\text{Pa s K}^{-2}]$ (gültig im Intervall 150 $[\text{°K}]$ bis 1500 $[\text{°K}]$)	
Thermische Leitfähigkeit λ :	$A + B T + C T^2$ $A = 0.00309 \quad [\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}]$ $B = 7.5930 \cdot 10^{-5} \quad [\text{W m}^{-1} \text{K}^{-2}]$ $C = -1.1014 \cdot 10^{-8} \quad [\text{W m}^{-1} \text{K}^{-3}]$ (gültig im Intervall 78 $[\text{°K}]$ bis 1500 $[\text{°K}]$)	

3.4.2.) Stoffdaten Zinkdampf

Die ersten drei Werte aus [1], die spezifische Wärmekapazität für konstanten Druck aus [8].

Molmasse M:	65.64	[g mol ⁻¹]
Adiabatexponent γ :	1.67	[]
Prandtl – Zahl Pr:	0.69	[]
Spezifische Wärmekapazität c_p :	$A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ $A = 21.128$ [J mol ⁻¹ K ⁻¹] $B = -1.3303 \cdot 10^{-03}$ [J mol ⁻¹ K ⁻²] $C = 7.3647 \cdot 10^{-07}$ [J mol ⁻¹ K ⁻³] $D = -1.78 \cdot 10^{-10}$ [J mol ⁻¹ K ⁻⁴] $E = 1.6481 \cdot 10^{-14}$ [J mol ⁻¹ K ⁻⁵] (gültig im Intervall von 50 [°K] bis 1500 [°K]) (bei konstantem Druck)	

Für die thermische Leitfähigkeit und die dynamische Viskosität musste wie erwähnt auf die kinetische Gastheorie zurückgegriffen werden. Hier findet man die Beziehungen [10] :

$$c_v \frac{\lambda}{\mu} = \text{konstant} = 2.52 \quad (49)$$

$$\eta = \frac{\sqrt{m_m k_B T}}{d^2} \quad (50)$$

Moleküldurchmesser d:	$1.35 \cdot 10^{-12}$	[m]
Boltzmannkonstante k_B :	$1.380658 \cdot 10^{-23}$	[J K ⁻¹]
Molekülmasse m:	$1.086143 \cdot 10^{-25}$	[kg]

Alle drei Angaben aus [11].

Damit ergeben sich für die dynamische Viskosität und für die thermische Leitfähigkeit durch umformen und linearisieren die Relationen.

Dynamische Viskosität μ :	$A T^{-1/2}$ $A = 0.0000672$ [kg m ⁻¹ s ⁻¹ K ^{-1/2}]	
Thermische Leitfähigkeit λ :	$A T + B$ $A = 1.53 \cdot 10^{-8}$ [W m ⁻¹ K ⁻²] $B = 0.0000132$ [W m ⁻¹ K ⁻¹]	

3.4.3.) Zusammensetzung des Gemisches

Komponenten mit Massenanteil	$mf_{\text{Stickstoff}}$	0.96
	$mf_{\text{Zinkdampf}}$	0.04

3.5.) Randbedingungen beim Experiment des PSI

Der Experimentaufbau wurde bereits teilweise realisiert und ist als fest vorgegeben zu betrachten. Das Gemisch wird mit einer Temperatur von 1100 [°K] und einem Druck von 9 [bar] in die Düse eingeführt. Diese Bedingungen sind nicht leicht zu handhaben und dementsprechend muss man dadurch auf ungewöhnliche Konstruktionsmaterialien zurückgreifen. Deswegen ist man natürlich bestrebt, die minimale Durchflussrate zu finden, bei der sich gerade noch eine Überschallströmung einstellt. Dies umso mehr, als dass sich nicht beliebig viel Zinkdampf herstellen lässt. Die Zinkdampf-Produktionsrate ist begrenzt. Dadurch ist der Volumenfluss im Experiment begrenzt und beträgt maximal 500 [lt/min]. In Abbildung 2 ist der Experimentaufbau des PSI schematisch dargestellt.

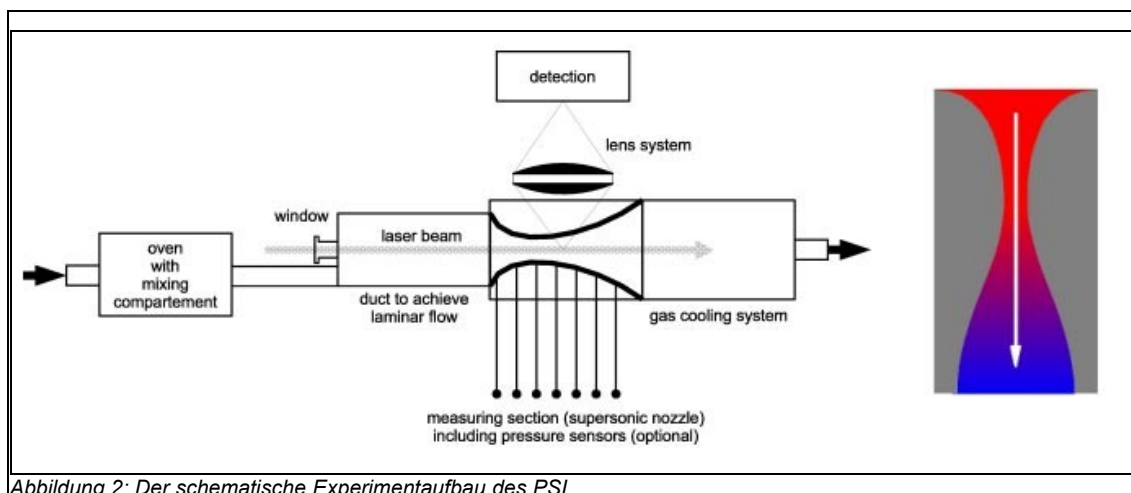


Abbildung 2: Der schematische Experimentaufbau des PSI

3.6.) Vergleich Handrechnung und CFD – Simulation

Um einen ersten Eindruck von der Zuverlässigkeit der CFD-Software zu erhalten werden die Resultate einer Simulation mit denjenigen einer Handrechnung verglichen. Dabei wird die axialsymmetrische Näherungsgeometrie benutzt, in welcher eine Überschallströmung simuliert wird.

Als Fluid wird Stickstoffdampf eingesetzt, dessen thermo- und fluiddynamischen Eigenschaften als temperaturunabhängig angenommen werden, da auch die Theorie der kompressiblen Strömung bei der Entstehung diese Annahme macht. Damit wird die Simulationslösung vergleichbar sein mit der Handrechnung.

3.6.1.) Handrechnung

Mit der Theorie der kompressiblen Strömungen lassen sich mit geeigneten Randbedingungen alle Zustände berechnen, da die ganze Geometrie bekannt ist. Die Indizes wurden wie folgt vergeben:

Einlass:	Indizes 1
Engster Querschnitt:	Indizes 2
Auslass:	Indizes 3

Gegebene Daten

Fläche Einlass A_1 :	$8 \cdot 10^{-5}$	$[m^2]$
Fläche Engster Querschnitt A_2 :	$1.6 \cdot 10^{-5}$	$[m^2]$
Fläche Auslass A_3 :	$2.6 \cdot 10^{-5}$	$[m^2]$
Temperatur Einlass T_1 :	1100	$[^\circ K]$
Druck Einlass p_1 :	900000	$[Pa]$
Bedingung für Überschallströmung:	$Ma_2 = 1$	
spezifische Wärmekapazität $N_2 c_p$:	38.7982	$[J \text{ mol}^{-1} \text{ } ^\circ K^{-1}]$
Adiabatexponent γ :	1.4	
Molare Masse M :	0.028	$[kg \text{ mol}^{-1}]$

Berechnung

Gaskonstante:

$$R = \frac{\gamma - 1}{\gamma} c_p = 395.9 \left[\frac{J}{kg \text{ } ^\circ K} \right] \quad (51)$$

Aus der Düsendifferentialgleichung ergibt sich die Machzahl am Einlass:

$$\frac{A_2}{A_1} = Ma_1 \left(\frac{\gamma + 1}{(\gamma - 1) Ma_1^2 + 2} \right)^{\frac{\gamma + 1}{2(\gamma - 1)}} \quad (52)$$

$$Ma_1 = 0.1166889$$

Aus der Einlasstemperatur lässt sich die Schallgeschwindigkeit am Einlass ermitteln:

$$a_1 = \sqrt{\gamma R T_1} = 780.8239 \left[\frac{m}{s} \right] \quad (53)$$

Mit diesen zwei Werten ergibt sich die Einlassgeschwindigkeit:

$$u_1 = Ma_1 a_1 = 91.11348 \left[\frac{m}{s} \right] \quad (54)$$

Über die Zustandsgleichung lässt sich schliesslich die Dichte am Einlass errechnen:

$$\rho_1 = \frac{p_1}{R T_1} = 2.067 \left[\frac{kg}{m^3} \right] \quad (55)$$

Damit ist der Zustand am Einlass komplett bestimmt. Mittels der Energieerhaltung lässt sich die Temperatur am engsten und somit kritischen Querschnitt ermitteln:

$$h_1 + \frac{u_1^2}{2} = h_2 + \frac{u_2^2}{2} \quad (56)$$

Die Geschwindigkeit im Quadrat lässt sich ersetzen durch:

$$u_2^2 = Ma_2^2 a_2^2 = Ma_2^2 \gamma R T_2 = \gamma R T_2 \quad (57)$$

woraus sich folgende Gleichung für die Temperatur am engsten Querschnitt ergibt:

$$c_p T_1 + \frac{u_1^2}{2} = c_p T_2 + \frac{\gamma R T_2}{2} \quad (58)$$

$$\frac{2 c_p T_1 + u_1^2}{2 c_p + \gamma R} = T_2 = 919.16 [^\circ K] \quad (59)$$

Für die Geschwindigkeit, welche Schallgeschwindigkeit erreicht ergibt sich:

$$a_2 = u_2 = \sqrt{\gamma R T_2} = 713.76 \left[\frac{m}{s} \right] \quad (60)$$

Der Druck im engsten Querschnitt ergibt sich aus der Isentropengleichung:

$$p_1 \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma_1^2 \right)^{\frac{\gamma}{\gamma+1}} \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} = p_2 = 4.5 * 10^{05} [Pa] \quad (61)$$

Über die Zustandsgleichung erhält man die Dichte zu:

$$\rho_2 = \frac{p_2}{R p_2} = 1.319 \left[\frac{kg}{m^3} \right] \quad (62)$$

Für den Ausgang gilt, dass das Fluid Überschallgeschwindigkeit haben muss. Um diese Bedingung zu erreichen, löst man die Düsendifferentialgleichung mit entsprechenden Randbedingungen auf:

$$\frac{A_3}{A_2} = \frac{1}{Ma_3} \left(\frac{(\gamma-1) Ma_3^2 + 2}{\gamma+1} \right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}} \quad (63)$$

$$Ma_3 = 1.954244$$

Aus der Energieerhaltung in der Strömung ergibt sich für die Temperatur folgendes:

$$\frac{2c_p T_2 + a_2^2}{2c_p + Ma_3^2 \gamma R} = T_3 = 625.3469 [^\circ K] \quad (64)$$

und die Schallgeschwindigkeit nimmt den Wert

$$\sqrt{\gamma R T_3} = a_3 = 588.73 \left[\frac{m}{s} \right] \quad (65)$$

an, für die Düsenaustrittsgeschwindigkeit erhält man

$$Ma_3 a_3 = u_3 = 1150.53 \left[\frac{m}{s} \right] \quad (66)$$

Der Druck rechnet mit Hilfe der Isentropie-Bedingung aus:

$$\frac{p_2}{\left(\left(1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma_3^2 \right) \frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}} = p_3 = 1.247 * 10^5 [Pa] \quad (67)$$

und schliesslich den Druck mit Hilfe der Zustandsgleichung:

$$\rho_3 = \frac{p_3}{R T_3} = 0.504 \left[\frac{kg}{m^3} \right] \quad (68)$$

Diese aus der Düsentheorie der kompressiblen Strömungen erhaltenen Werte sind nun mit einer Simulation zu Vergleichen.

3.6.2.) CFD Simulation

Es ist interessant zu sehen und festzustellen, wie genau die Handrechnung mit einer CFD Simulation übereinstimmt. Ausgehend von der Handrechnung setzt man die Randbedingungen für die simulierte Rechnung fest. Die mit CFD generierten Daten können anschliessend in ein Tabellenverarbeitungsprogramm wie z.B. Microsoft Excel exportiert und dort ausgewertet werden.

Randbedingungen

Adiabatexponent γ :	1.4	[-]
Prandtl-Zahl Pr :	0.69	[-]
Spezifische Wärmekapazität c_p :	38.7982 1385.65	[J mol ⁻¹ K ⁻¹] [J kg ⁻¹ K ⁻¹]
Dynamische Viskosität μ :	0.0004456	[Pa s]
Thermische Leitfähigkeit λ :	0.0732861	[W m ⁻¹ K ⁻¹]
Eingangsgeschwindigkeit u_1 :	92	[m s ⁻¹]
Einlasstemperatur T_1 :	1100	[K]

Die Eingangsgeschwindigkeit wurde basierend auf der Handrechnung gewählt. Als Turbulenzmodell kommt das k- ϵ -Modell zum Einsatz.

Resultate

In der Tabelle 7 sind für den Eingangsquerschnitt, den engsten Querschnitt und den Ausgangsquerschnitt die Machzahl, Temperatur, Druck, Geschwindigkeit und Dichte eingetragen. Damit lassen sich Handrechnung und Simulation vergleichen.

	Druck			Geschwindigkeit			Temperatur		
	Hand	CFD	Fehler	Hand	CFD	Fehler	Hand	CFD	Fehler
Eingang	900000	913003	1.4	91.1	90.9	0.2	1100	1100	0.01
Engster Querschnitt	480000	617477	28.6	713.8	503.5	29.5	919	1011	9.97
Ausgang	124700	259226	107.9	1150.5	712.1	38.1	625	915	46.37
	Dichte			Machzahl			Schallgeschwindigkeit		
	Hand	CFD	Fehler	Hand	CFD	Fehler	Hand	CFD	Fehler
Eingang	2.07	2.89	39.6	0.12	0.15	28.5	780.8	780.9	0.0
Engster Querschnitt	1.32	2.13	61.3	1.00	0.82	18.0	713.8	748.5	4.9
Ausgang	0.5	1.04	107.3	1.95	1.22	37.6	588.7	712.3	21.0

Tabelle 7: Vergleich der Handrechnung mit der CFD-Simulation

3.6.3.) Fazit

Es drängt sich nun der Vergleich der Daten auf. Auf der einen Seite die Werte aus der Handrechnung, auf der Anderen diejenigen der CFD Simulation. Stellt man diese Daten gegeneinander, so werden doch markante Unterschiede sichtbar. Deutlich erkennbar ist die Übereinstimmung der Temperatur und der Schallgeschwindigkeit am Düseneingang und am engsten Querschnitt. Jedoch treten grosse Abweichungen bei der Dichte und dem Druck auf. Eine offensichtlichere Aussage ist jedoch über den Ausgangsquerschnitt

zu machen. Die Unterschiede in allen Werten ist sehr markant. Abweichungen von mehr als 100% verdeutlichen dies.

Worauf sind diese Abweichungen zurückzuführen? Ein Grund ist die Genauigkeit mit der die Resultate zu betrachten sind. Die Handrechnung basiert auf grossen Vereinfachungen, wie die Annahme des Stromfadens. Die Wärmeleitung wird nicht berücksichtigt. Die quasi-eindimensionale Strömungsbetrachtung vernachlässigt Turbulenzbetrachtungen. Die viskose Reibung und damit erzeugte Wärme wird zusätzlich vernachlässigt. Alle diese Vereinfachungen in der Handrechnung summieren sich zu einer Gesamtdifferenz im Vergleich mit der CFD Simulation auf.

Es ist also wichtig, dass man bei einer schnellen Handrechnung die gemachten Vereinfachungen und Nicht-Berücksichtigungen immer im Hinterkopf hat und weiss, wo potentielle Fehlerquellen liegen können. Weiter ist zu sagen, dass auch die CFD Simulation nicht fehlerfrei ist. Vorallem die nichtlinearen Terme in der Navier-Stokes-Gleichung, die Wahl des Turbulenzmodells und das numerische Rechnen an und für sich machen diese Ungenauigkeit und Abweichungen zu der Praxis aus.

4.) Axialsymmetrische Simulationen

4.1.) Tetraedrisches Gitter

Bei der weiteren Einführung in die Problemstellung ging es um das bessere Kennenlernen des Programms ANSYS CFX 10.0. Dabei wurde zuerst eine axialsymmetrische Geometrie mit ANSYS ICEM CFX erstellt, und darin ein tetraedrisches Gitter gelegt. Die Simulationen wurden danach mit den originalen Stoffdaten gemacht.

Aufgrund der Tatsache, dass diese Simulationen nur zur Einführung in das Programm und die Problemstellung dienten, werden keine Resultate dargestellt. Jedoch einige Tatsachen, welche beobachtet wurden.

Aufgefallen bei den Simulationen mit dem tetraedrischen Gitter ist, dass die Konvergenz der Lösung bei der Simulation in Strömungsrichtung, das heisst für die x-Komponente der Geschwindigkeit, praktisch nicht erreicht wird. Dies hatte zur Folge, dass die Simulationen viel Zeit in Anspruch nahmen. Bei einer Verfeinerung des Gitters war die Entwicklung dieses Problems nicht viel besser.

Das zweite Problem war die Feinheit des Gitters. Die Gitterfeinheit, das heisst die Grösse der tetraedrischen Zellen lässt sich nur universell festlegen. Alle Zellen sind für die Geometrie der Düse gleicher Grösse. Das Interesse dieser Arbeit ist die Betrachtung der Entwicklung der Turbulenz in der Nähe der Wand, deshalb besteht dort Wunsch einer kleinen Zellengrösse. Die Feinheit des Gitters ist zudem unwiederbringlich mit der Rechenzeit gekoppelt. Eine Halbierung der Zellengrösse gibt die vierfache Anzahl Zellen und damit auch ein rund die vierfache Rechenzeit.

Aus diesen zwei Gründen ergab sich zu einem relativ frühen Zeitpunkt der Arbeit der Wunsch, ein Gitter selber zu generieren, damit selber bestimmt werden kann, welche Teile wie fest aufgelöst werden sollen. Zudem lässt sich damit die Zellengrösse in Strömungsrichtung und senkrecht dazu nach Begehren anpassen und so kann sich abhängig von der Wahl der Zellen in Strömungsrichtung auch schneller eine Konvergenz der Lösung einstellen.

Die Simulationen zeigten, dass es möglich ist, Überschallströmungen zu simulieren. Denn anfänglich bestand Ungewissheit darüber, ob sich eine solche Strömung einstellt. Dies aus dem Grund, da es sich um eine Strömung mit grossen Reynoldszahlen handelt, welche im divergenten Düsenteil zwischen 5000 und 1000 liegen (Reynoldszahl bezogen auf den Durchmesser der Düse).

Der nächste Schritt ist folglich die Generierung eines dem Problem angepassten Gitter, dessen Zellengrösse in Strömungsrichtung und senkrecht dazu frei und unabhängig voneinander wählbar ist.

4.2.) Geordnetes Gitter

4.2.1.) Bildung eines geordneten Gitters

Die Simulation mit einem speziell dem Problem angepassten Gitter ist wie erwähnt wünschenswert. Es geht um die Verfeinerung der Stellen mit grossem Interesse, sprich die Wand und den divergierenden Teil der Düse.

Von der Problemstellung her gesehen ist die Wand und das angrenzende Fluidgebiet aus Gründen der Turbulenz genauer zu betrachten. Eine feine Auflösung des Gitters (kleine Zellengrösse) ist von Vorteil, um präzise Aussagen zu machen. Ausserdem ist es sinnvoll, den divergierenden Düsenteil zu verfeinern, zumindest eine deutlich feinere Auflösung als im Düseneinlauf zu wählen. Mit MATLAB wurde so eine Routine geschrieben (siehe Anhang), welche Gitterpunkte in einer Ebene generiert. Mit einem FORTRAN-Programm [9] wird die CFX-Datei nach Einlesen der MATLAB Daten gemacht.

4.2.2.) Beobachtungen beim geordneten Gitter

Von grundsätzlichem Interesse ist eine möglichst geringe Rechenzeit bei grosser Gitterauflösung. Hierzu existieren im axialsymmetrischen Fall zwei Möglichkeiten. Anstelle einem azimuthalen Winkel von 360 [grad] kann nur ein Keil gewählt werden. Dieser Keilwinkel sollte mit geeigneten Symmetrie-Randbedingungen beliebig klein wählbar sein. Zusätzlich zur Keilwinkelidee kann man die Anzahl der Intervalle azimuthal verkleinern. Es sollte möglich sein, die Intervallanzahl 1 zu wählen.

Die Kombination von einem kleinen Keilwinkel und der azimuthalen Intervallanpassung wird die Rechenzeit stark verkleinern. Es bleibt zu überprüfen, welchen Einfluss auf die Resultate die Anzahl azimuthaler Intervalle hat. Insbesondere ob es möglich ist, mit einem einzigen azimuthalen Intervall auszukommen.

Experimentaufbau

Die Gitterwahl für die vorherige Simulationsbeschreibung ist 60x24 ([x-Richtung]x[r-Richtung]), d.h. 61 Gitterpunkte in Strömungsrichtung (x-Richtung) und 25 Gitterpunkte in Radialer Richtung (r-Richtung). Die Einlassgeschwindigkeit von 500 [m/s], wurde durch Ausprobieren gefunden, das heisst durch Heraufsetzen der Einlassgeschwindigkeit bis sich die gewünschte Strömung einstellt. Die Stoffdaten wurden gemäss dem Kapitel Stoffdaten gewählt. Als weitere Randbedingung in CFX-Pre muss man den zwei Ebenen, welche den Keil azimuthal abschliessen eine Symmetriebedingung aufzwingen.

Experimentausführung

Beim Simulieren wurde der Keilwinkel diskret minimiert. Ausgehend von einem Winkel von 60 [grad] wurde der Winkel jeweils um eine Zehnerpotenz verkleinert worden. Zwischen den Keilwinkeln 0.1 [grad] und 0.01 [grad] wurden noch drei Werte zusätzlich gewählt, da sich eine Unstetigkeit in den Lösungen zeigte. Als beobachtete Stellen wurden der Eingang ($x = -0.12$ [m]), ein Punkt im Einlass ($x = -0.05$ [m]), der engste Querschnitt ($x = 0$ [m]), ein Punkt im divergierenden Teil der Düse ($x = 0.03$ [m]) sowie der Düsenauslass ($x = 0.11$ [m]) auf der Düsenachse gewählt. Als Konvergenzkriterium dient die Machzahl.

Auswertung der Simulationen

Deutlich sichtbar ist, dass der Winkel eine wesentliche Rolle bei der Simulation hat. Grosse Keilwinkel ergeben andere Resultate als kleine Keilwinkel. Bei der Strömungsvisualisierung mit der Betrachtung der Machzahl zeigt sich dies eindeutig. Je kleiner die Keilwinkelwahl, desto verlässlicher wird das Resultat. Diese Aussage wird aufgrund qualitativer Betrachtung über die Machzahl gemacht. Bei grossen Keilwinkeln fällt die Strömung im divergierenden Teil zurück in eine Unterschallströmung.

Betrachtet man die Entwicklung der Werte eines Gitterpunktes, kann eine konvergente Tendenz festgestellt werden. Wird der Keilwinkel zu klein gewählt, beginnen die Werte verrückt zu spielen. Gut ersichtlich aus der Tabelle 8 ist dies bei Keilwinkeln welche kleiner als 0.02 [grad] sind.

Gitter: 60x24									
Anzahl Intervalle: 1									
Winkel [Grad]									
x[m]	60	6	0.6	0.100	0.060	0.020	0.015	0.014	0.010
-0.12	0.7	0.78	0.78	0.79	0.78	0.88	0.87	0.89	0.82
-0.05	0.19	0.62	0.78	0.79	0.79	0.8	0.84	0.88	1.11
0	0.72	0.63	0.77	0.85	0.85	0.83	0.95	0.99	1.07
0.03	1.07	1	0.87	0.8	0.8	0.91	0.92	1.35	1.01
0.11	0.89	0.8	0.78	0.78	0.79	0.8	0.88	0.87	0.82

Tabelle 8: Die Machzahl betrachtet an fünf Stellen auf der Düsenachse bei den simulierten Keilwinkeln.

Aus dieser Analyse ist nun zu bestimmen, welcher Keilwinkel für eine schnelle, präzise und zuverlässige Simulation zu wählen ist. Offensichtlich liefert ein Winkel zwischen 0.1 [grad] und 0.02 [grad] gute Resultate.

Bezüglich der Anzahl azimuthaler Intervalle hat sich die Vermutung bestätigt, dass ein kleiner Keilwinkel die Simulation mit nur einem Intervall ermöglicht. Die Auswertung der Daten, insbesondere der prozentuale Fehler der Machzahl mit fünf Intervallen bezogen auf diejenigen mit einem Intervall, belegt diese Tendenz einwandfrei, ersichtlich in Tabelle 9.

Gitter 60x24									
60 Grad			6 Grad			0.6 Grad			
Intervalle			Intervalle			Intervalle			
x[m]	1	5	% Fehler	1	5	% Fehler	1	5	% Fehler
-0.12	0.70	0.74	4.49	0.78	0.78	0.13	0.78	0.78	0.00
-0.05	0.19	0.18	0.54	0.62	0.62	0.00	0.78	0.78	0.38
0	0.72	0.70	2.85	0.63	0.63	0.00	0.77	0.77	0.00
0.03	1.07	1.15	7.07	1.00	1.00	0.10	0.87	0.87	0.11
0.11	0.89	0.90	1.44	0.80	0.79	0.51	0.78	0.78	0.13

Tabelle 9: Gitter 60x24 ; Die Machzahl, betrachtet an fünf Stellen auf der Düsenachse für die simulierten drei Keilwinkel mit jeweils einem oder fünf azimuthalen Intervallen.

4.2.3.) CFD-Simulation

Aufgrund der im vorhergehenden Abschnitt betrachteten Resultate wird die CFD-Simulation für die axialsymmetrische Rechnung mit einem Keilwinkel von 0.02 [grad] und Einem azimuthalen Intervall gemacht. Die Randbedingung der Einlassgeschwindigkeit steht noch nicht fest und muss über ausprobieren gefunden werden, indem sie solange vergrößert wird, bis sich die gewünschte Überschallströmung im divergenten Düsenteil einstellt. Weiter müssen die zwei den Keil azimuthal abgrenzenden Ebenen eine Symmetrierandbedingung erhalten. Als erstes Gitter wurde ein 60x24 Gitter gewählt.

Die Resultate waren ungenügend und ein herber Rückschlag für das Vorankommen der Arbeit. Tabelle 10 verdeutlicht diese Aussage.

Winkel 0.02 Grad								
Gitter: 60x24								
Einlassgeschwindigkeit [m s ⁻¹]								
x[m]	300	400	500	600	612.5	625	637.5	650
-0.12	0.477	0.675	0.880	0.944	0.976	0.981	1.014	1.019
-0.05	0.478	0.649	0.797	0.941	0.961	0.981	1.001	1.021
0	0.577	0.731	0.829	0.990	1.010	1.055	1.061	1.069
0.03	0.471	0.635	0.906	0.950	0.966	0.989	1.005	1.023
0.11	0.472	0.634	0.803	0.981	0.990	1.001	1.016	1.037

Tabelle 10: Die Machzahl an fünf betrachteten Stellen auf der Düsenachse für die jeweilige Geschwindigkeit am Düseneinlass.

Die Machzahlen an den betrachteten Stellen zeigen, dass eine Erhöhung der Einlassgeschwindigkeit nur einen sehr kleinen Effekt hat. Es bildet sich nie eine typische Überschallströmung aus. Diese Erkenntnis konnten wir uns alle nicht erklären. Ein Vermutung könnte man wie folgt formulieren. Das Gitter war mit einem azimuthalen Intervall zu minimalistisch gewählt, die Zellen waren zusätzlich noch zu regelmässig angeordnet, so dass keine konvergierende Lösung gefunden werden kann. Man kam zum Schluss, dass diese alternative Geometrie unbrauchbar ist. Man entschloss sich, den Fokus auf die wahre Geometrie zu legen.

5.) Simulationen mit der wahren Geometrie

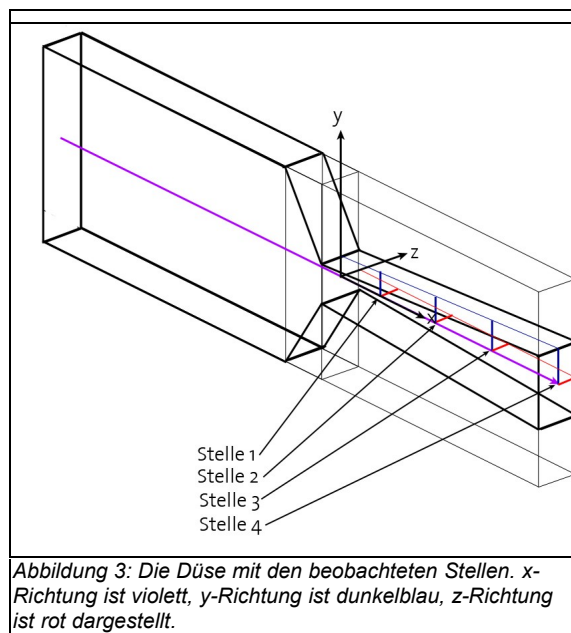
Die wahre Geometrie mit dem rechteckigen Querschnitt ist dadurch gekennzeichnet, dass sich die Düse nur in einer Richtung öffnet. In Strömungsrichtung bleibt die bisherige Düsenlänge identisch. Horizontal senkrecht zur Strömungsrichtung ist die Breite der Düse für die ganze Zeit konstant. Vertikal senkrecht zur Düsenrichtung wird die eigentliche Geometrie der Lavaldüse generiert. Zuerst steht ein horizontaler Einlauf, der sich dann abrupt verkleinert (konvergierender Düsenteil), danach folgt der relativ schmale (im Vergleich zum Einlauf), divergierende Düsenteil, charakterisiert durch einen sehr kleinen Öffnungswinkel der Düse. Der halbe Öffnungswinkel beträgt 0.65 [grad].

5.1.) Betrachtete Stelle der Resultatauswertung

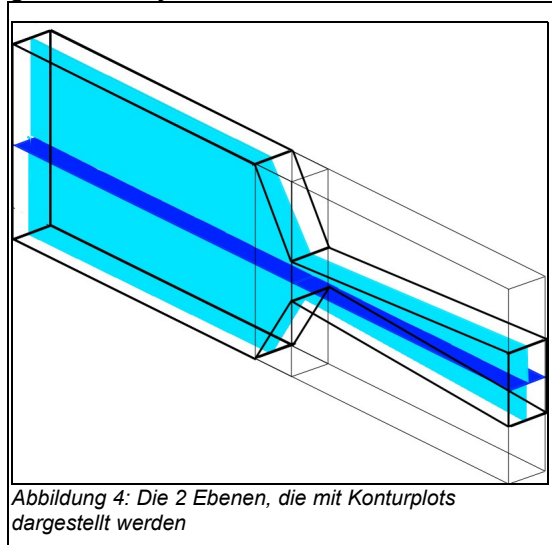
Um die Simulationen auszuwerten und zu besprechen wurden vier Stellen im divergenten Düsenteil gewählt. Die erste Beobachtung wird entlang der Strömungsrichtung gemacht. Eine Achse in der Düsenmitte wurde gewählt. Die Koordinaten lauten $y = 0$ [m] und $z = 0$ [m] und in x -Richtung variabel. In Abbildung 3 kennzeichnet der violette Pfeil in der Düse der Achse.

Um den Einfluss der Turbulenz in z -Richtung in der Düse zu beobachten wurden vier Stellen im divergenten Düsenteil gewählt. Sie liegen auf der Höhe Null der Düse und x -Richtung an den Stellen $x = 0.025$ [m], $x = 0.055$ [m], $x = 0.08$ [m] und $x = 0.11$ [m]. Auf der Höhe $y = 0$ [m] und jeweils in z -Richtung variabel. Die roten Linien in Abbildung 3 zeigen die Position dieser Achsen.

Für die gleiche Beobachtung in y -Richtung wurden die gleichen vier Stellen im divergenten Düsenteil gewählt. Sie liegen in der Breite bei $z = 0$ [m] und in y -Richtung variabel. Die dunkelblauen Linien in Abbildung 3 zeigen die Position dieser Achsen.

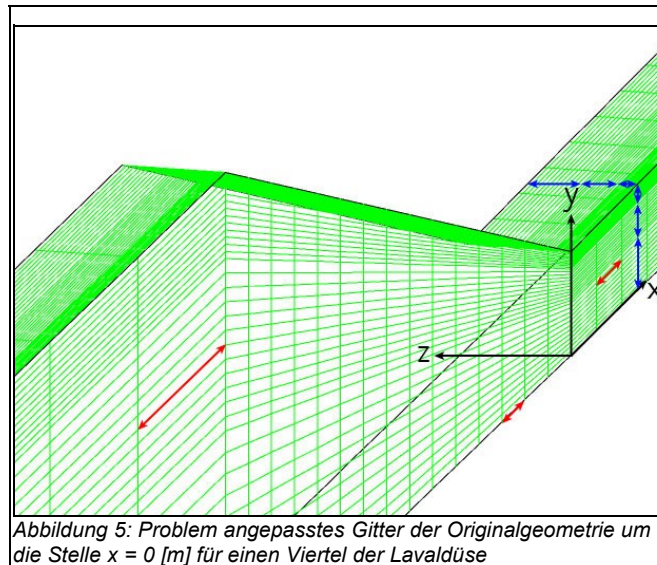


Konturplots wurden in zwei Ebenen realisiert. Dargestellt werden eine horizontale und eine vertikale Ebene in der Düsenmitte. In Abbildung 4 ist die x-y-Ebene hellblau und die x-z-Ebene dunkelblau gezeichnet.



5.2.) Bildung eines geordneten Gitters

Wie schon bei der axialsymmetrischen Simulation ist bei der Rechnung an der wahren Geometrie ein geordnetes, dem Problem angepasstes Gitter wünschenswert. Die Gittergenerierung erfolgt auf ähnliche Weise wie im vorhergehenden Kapitel. Das MATLAB-Programm ist leicht zu verändern, so dass die Randfunktionen f_1 , f_2 und f_3 (siehe Anhang) wieder den äusseren Rand der Düse bilden. Die blauen Pfeile in Abbildung 5 zeigen die drei realisierten Feinheitsstufen. Wandnahe Bereiche sind mit kleinen Zellengrößen gemacht worden, es folgt eine Zone mit etwas grösseren Gitterzellen und im Düsenzentrum liegen die grössten Gitterzellen. Diese Unterteilung ist senkrecht zur Strömungsrichtung in y-Richtung und z-Richtung realisiert worden. Zudem hat das Gitter in diesen zwei Richtungen auch jeweils gleich viele Gitterpunkte. In Strömungsrichtung (x-Richtung) wurde ebenfalls die Zellengrösse nicht über die ganze Düsenlänge gleich gross gewählt. Im Düseneinlauf liegen die grössten Gitterzellen. Etwas feiner sind sie im konvergenten Düsenteil und im divergenten Düsenteil wurden sie am feinsten gewählt. Dies ist in Abbildung 5 dargestellt durch die roten Pfeile.



5.2.1.) Konvergenztest beim geordneten Gitter

Um verlässliche Resultate zu erhalten ist es wichtig, eine geeignete Auflösung des Gitters zu wählen. Damit wird garantiert, dass Resultate die gewünschte Genauigkeit erreichen. Die Auflösung, welche zu genauen Resultaten führt, ist gut über eine Konvergenzreihe ermittelbar.

In einer erste Beobachtung ist festgestellt worden, dass eine Simulation mit der halben Düsengeometrie, sprich mit einer horizontalen Symmetrieebene, nicht zu gleichen Resultaten führt, wie eine Simulation mit einem Viertel der Düsengeometrie, sprich mit einer horizontalen und vertikalen Symmetrieebene. Um den Rechenaufwand gering zu halten, sprich um etwa die Hälfte der Rechenzeit einzusparen, wäre es besser, nur ein Viertel der Düsengeometrie zu benutzen. Aufgrund dieser Überlegung entschloss man sich einen Konvergenztest für die Wahl der Anzahl der Symmetrieebenen und der Gitterauflösung, sprich die Anzahl der Gitterzellen und -knoten, durchzuführen. Die Gitterparameter, welche in diesem Konvergenztest verwendet wurden, sind in Tabelle 11 zusammengestellt.

	Viertel – Düsengeometrie			Halbe – Düsengeometrie		
	x-Achse	y-Achse	z-Achse	x-Achse	y-Achse	z-Achse
Abmessung	0.23 m	Variabel	0.002 m	0.23 m	Variabel	0.004 m
Gitter 1	30	12	12	30	12	24
Gitter 2	38	18	18			
Gitter 3	60	24	24	60	24	48
Gitter 4	72	30	30			
Gitter 5	90	36	36	90	36	72
Gitter 6	120	48	48	120	48	96
Gitter 7	150	60	60			

Tabelle 11: Relevante Gitterdaten für den Konvergenztest

Es wird ersichtlich, dass das Verhältnis zwischen den Achsenauflösungen konstant gehalten wurde. Dies erscheint sinnvoll, denn damit ist das Zellenverhältnis immer gleich. Die Zellen sind über den Querschnitt gesehen im engsten Querschnitt quadratisch, sprich im Verhältnis 1:1, und öffnen sich dann in vertikaler Richtung, bis am Ausgangsquerschnitt ein Breite-zu-Höhe-Verhältnis von 8:13 erreicht ist. Das Verhältnis der Zellenbreite (z-Richtung) zur Zellenlänge (x-Richtung) ist im Düsenanlass bis zum engsten Querschnitt 1:70 und im divergenten Teil 1:30.

Um die im Konvergenztest erhaltenen Resultate zusammenfassend zu bewerten, wurden drei repräsentative Stellen gewählt. Alle drei Stellen liegen auf der Düsenachse im divergierenden Teil der Düse bei $x = 0.0234$ [m], $x = 0.055$ [m] und $x = 0.1018$ [m].

Die Tabellen 12, 13 und 14 zeigen die Entwicklung der Machzahl, Temperatur und Druck, sowie den prozentualen Fehler bezogen auf das feinste Gitter für die Machzahl.

	X	Y	Z	Ma	DP [Pa]	T [°K]	P [Pa]	Prozentualer Fehler
SST-Modell	30	12	12	1.3118	-588501	880.5	311499	2.06
	48	18	18	1.3044	-579925	882.6	320075	1.49
	60	24	24	1.3006	-574334	883.7	325666	1.20
	72	30	30	1.3038	-572824	882.8	327176	1.44
	90	36	36	1.2824	-565139	888.9	334861	0.22
	120	48	48	1.2856	-563335	888.0	336665	0.03
	150	60	60	1.2852	-562597	887.6	337403	0.00

Tabelle 12: Konvergenztest der Gitter für die Stelle $x = 0.0234$ [m]

	X	Y	Z	Ma	DP [Pa]	T [°K]	P [Pa]	Prozentualer Fehler
SST-Modell	30	12	12	1.4447	-640151	842.0	259849	0.61
	48	18	18	1.4350	-636121	844.9	263879	0.06
	60	24	24	1.4361	-633059	844.6	266941	0.01
	72	30	30	1.4354	-630825	844.7	269175	0.03
	90	36	36	1.4458	-635579	841.7	264421	0.69
	120	48	48	1.4382	-630909	843.9	269091	0.16
	150	60	60	1.4359	-629908	844.6	270092	0.00

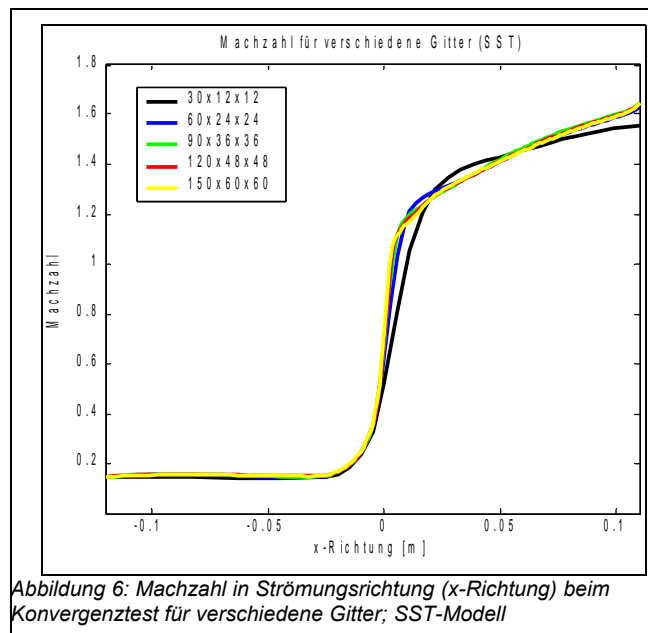
Tabelle 13: Konvergenztest der Gitter für die Stelle $x = 0.055$ [m]

	X	Y	Z	Ma	Dp [Pa]	T [°K]	P [Pa]	Prozentualer Fehler
SST-Modell	30	12	12	1.5476	-683417	811.0	216583	3.29
	48	18	18	1.5735	-690370	803.5	209630	1.67
	60	24	24	1.5953	-691293	797.2	208707	0.31
	72	30	30	1.5958	-691322	797.1	208678	0.27
	90	36	36	1.6058	-693591	794.3	206409	0.35
	120	48	48	1.6029	-690409	795.1	209591	0.17
	150	60	60	1.6002	-692381	795.9	207619	0.00

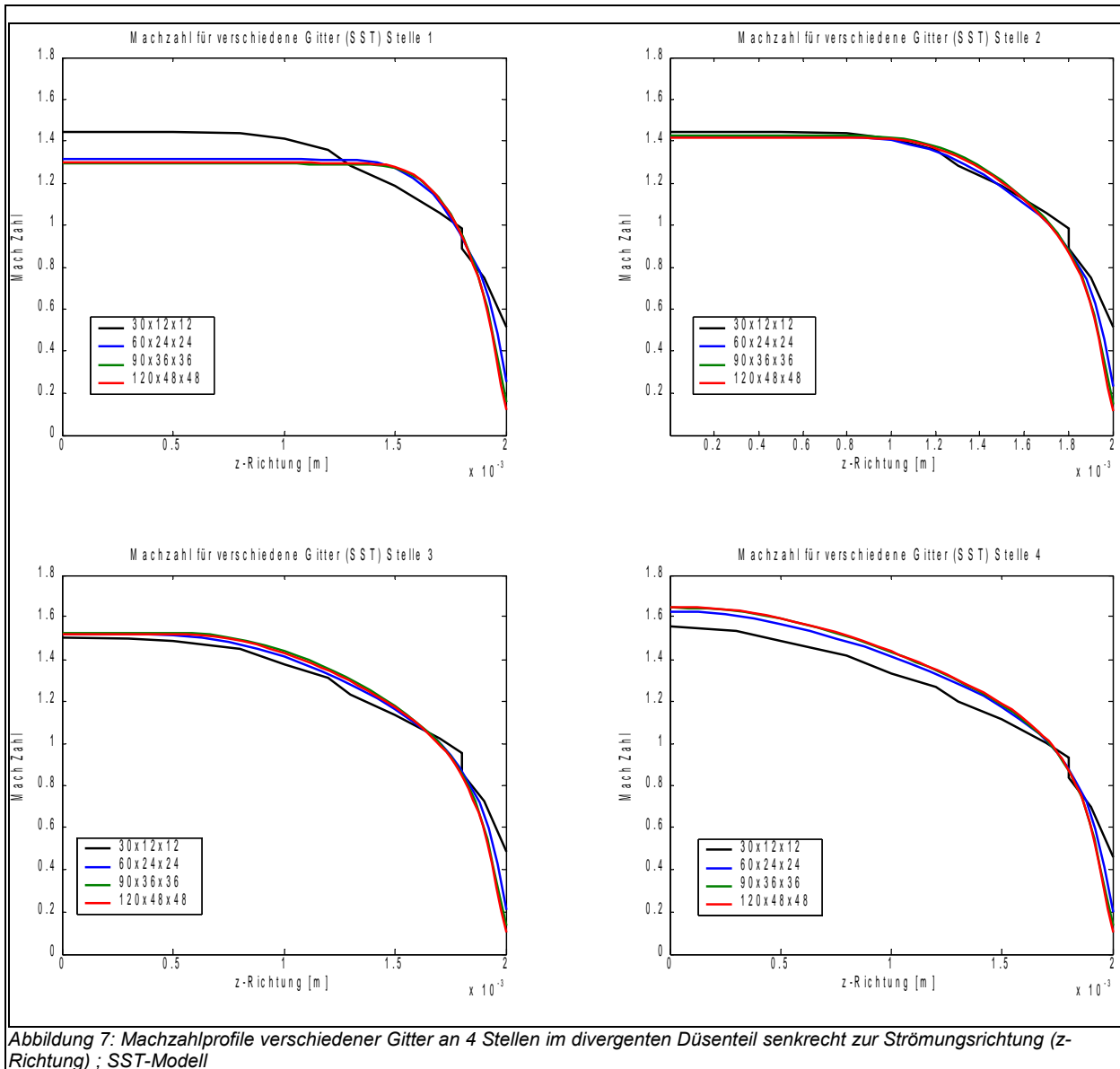
Tabelle 14: Konvergenztest der Gitter für die Stelle $x = 0.1018$ [m]

Die Entwicklung des prozentualen Fehlers zeigt die Konvergenz der Werte deutlich. An allen Stellen ist ab einer Feinheit $90 \times 36 \times 36$ ([x-Richtung]x[y-Richtung]x[z-Richtung]) die Abweichung unter der 1%-Marke. Auffällig ist die grosse Genauigkeit der Gitter an der Stelle $x = 0.055$ [m]. Das Paul Scherrer Institut (PSI) zeigt sich mit dieser Genauigkeit sehr zufrieden und kann sich damit beruhigt auf die Resultate verlassen.

Um den Einfluss des Gitters zu sehen, ist in Abbildung 6 die Machzahl in der Strömungsrichtung aufgetragen.



Betrachtet man Machzahlprofile senkrecht zur Strömung zeigt sich ebenfalls, dass in Resultaten mit feineren Gittern die Kurven konvergieren, ersichtlich in Abbildung 7. Die Diagramme sind an den vier einleitend erwähnten Stellen im divergenten Teil der Düse aufgenommen. Verwendet wurde das SST-Modell. Hier zeigt sich, dass ein zu grobes Gitter Unstetigkeiten verursacht. Diese treten am Düsenrand auf. Der Wechsel der Gitterfeinheit hat offensichtlich einen Einfluss. Beim Übergang der am feinsten unterteilten Gitterzone zu der Mittlerfeinsten tritt die Unstetigkeit auf. Es ist von zentraler Bedeutung, dass die Intervallanzahl in z-Richtung fein genug gewählt wird.



Einen ersten Einblick in die Ausbildung der turbulenten Grenzschicht geben diese Profile ebenfalls. Am Anfang des divergenten Düsentails bildet sich noch merklich ein Plateau aus, welches sich in Wandnähe rasch verkleinert. Eine Verschiebung stromabwärts zeigt, dass sich dieses Plateau allmählich abbaut, sich jedoch das Profil in Wandnähe nur geringfügig ändert.

Die Betrachtung des prozentualen Fehlers an allen vier Stellen zeigt, dass dieser, bezogen auf die Machzahl, bei einem Gittersprung von 90x36x36 auf 120x48x48 bis auf den Rand der Düse unter die 1%-Marke fällt. Dies lässt wiederum den Schluss zu, dass eine Gitterwahl von feiner als 90x36x36 sicherlich nötig ist, um zuverlässige Resultate zu erhalten.

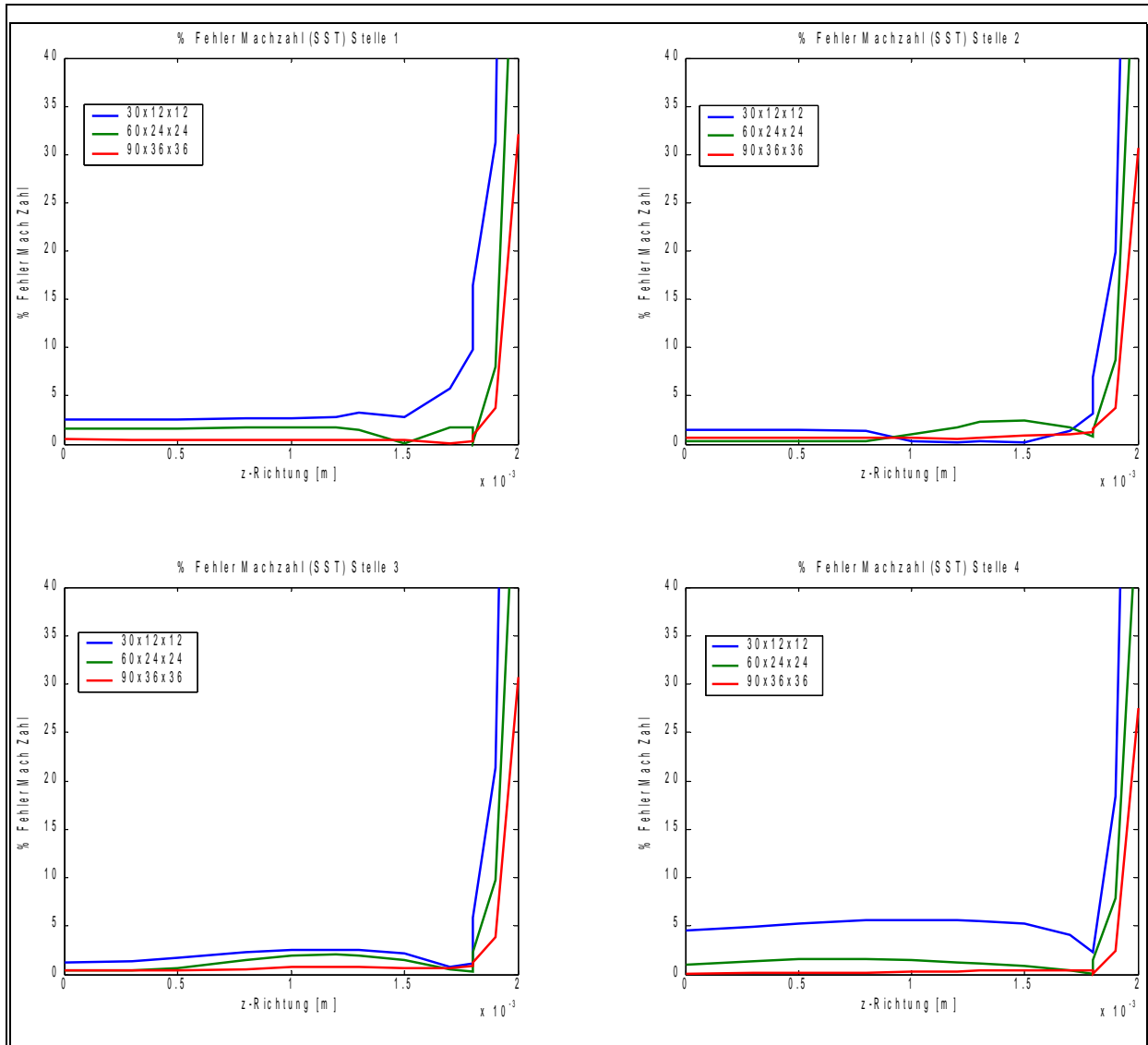
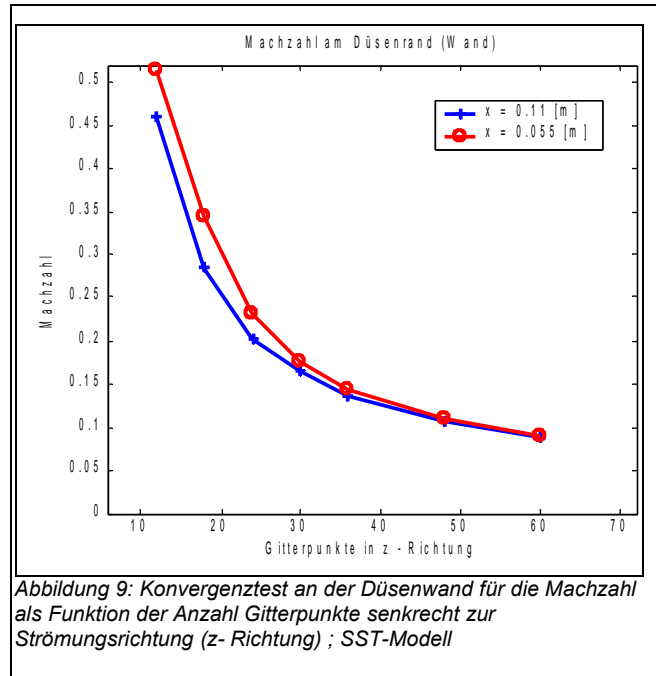


Abbildung 8: Der prozentuale Fehler der Machzahl senkrecht zur Strömungsrichtung (z-Richtung) eines Gitters bezogen auf das nächst Feinere ; SST-Modell

Bei Beobachtung der Abbildung 8, insbesondere der wandnahen Bereichen fällt auf, dass die unterschiedlichen Gitter verschiedene Resultate liefern. Der prozentuale Fehler in Wandregion wird gross und übersteigt die 10%-Marke bei allen Gittern. Zudem ist es erstaunlich, dass die Machzahl, und somit auch die Geschwindigkeit auf der Wand, ungleich Null ist. Dies, obwohl die Randbedingung die Geschwindigkeit an der Wand gleich Null setzen sollte. Dazu ist folgende Untersuchung zusätzlich gemacht worden. Die Machzahl an der Wand an zwei verschiedenen Stellen im divergenten Teil der Düse, $x = 0.055$ [m] und $x = 0.11$ [m] ist ermittelt worden, und zwar für sieben verschiedenen feine Gitter und das SST-Modell. Die Abbildung 9 stellt diese Ergebnisse dar.



An beiden Stellen zeigt sich eine monoton fallende Kurve für immer feinere Gitterwahl. Erstaunlicherweise konvergiert die Machzahl auf der Wand aber nicht gegen den Wert Null, sondern gegen einen Wert zwischen 0.05 und 0.1, dargestellt in Tabelle 15 und 16.

X	Y	Z	Beobachtete Stelle	Ma.	P [Pa]	T [°K]	% Fehler
30	12	12	0.11x0x0.002	0.46114	210951	1095.05	420.97
48	18	18	0.11x0x0.002	0.28534	201693	1175.37	222.36
60	24	24	0.11x0x0.002	0.20234	197614	1259.21	128.59
72	30	30	0.11x0x0.002	0.16557	193741	1296.50	87.06
90	36	36	0.11x0x0.002	0.13580	193672	1307.07	53.42
120	48	48	0.11x0x0.002	0.10648	195607	1319.00	20.29
150	60	60	0.11x0x0.002	0.08852	194210	1323.20	0.00

Tabelle 15: Die Machzahl für verschiedene Gitter an der Wand. Der prozentuale Fehler ist bezogen auf die Machzahl. Stelle $x = 0.11$ [m]

X	Y	Z	Beobachtete Stelle	Ma.	P [Pa]	T [°K]	% Fehler
30	12	12	0.055x0x0.002	0.51528	259780	1084.81	467.21
48	18	18	0.055x0x0.002	0.34468	263827	1136.95	279.41
60	24	24	0.055x0x0.002	0.23177	266894	1212.02	155.12
72	30	30	0.055x0x0.002	0.17698	269113	1250.82	94.81
90	36	36	0.055x0x0.002	0.14472	264380	1288.37	59.30
120	48	48	0.055x0x0.002	0.11096	269061	1295.78	22.14
150	60	60	0.055x0x0.002	0.09084	269451	1297.87	0.00

Tabelle 16: Die Machzahl für verschiedene Gitter an der Wand. Der prozentuale Fehler ist bezogen auf die Machzahl. Stelle $x = 0.055$ [m]

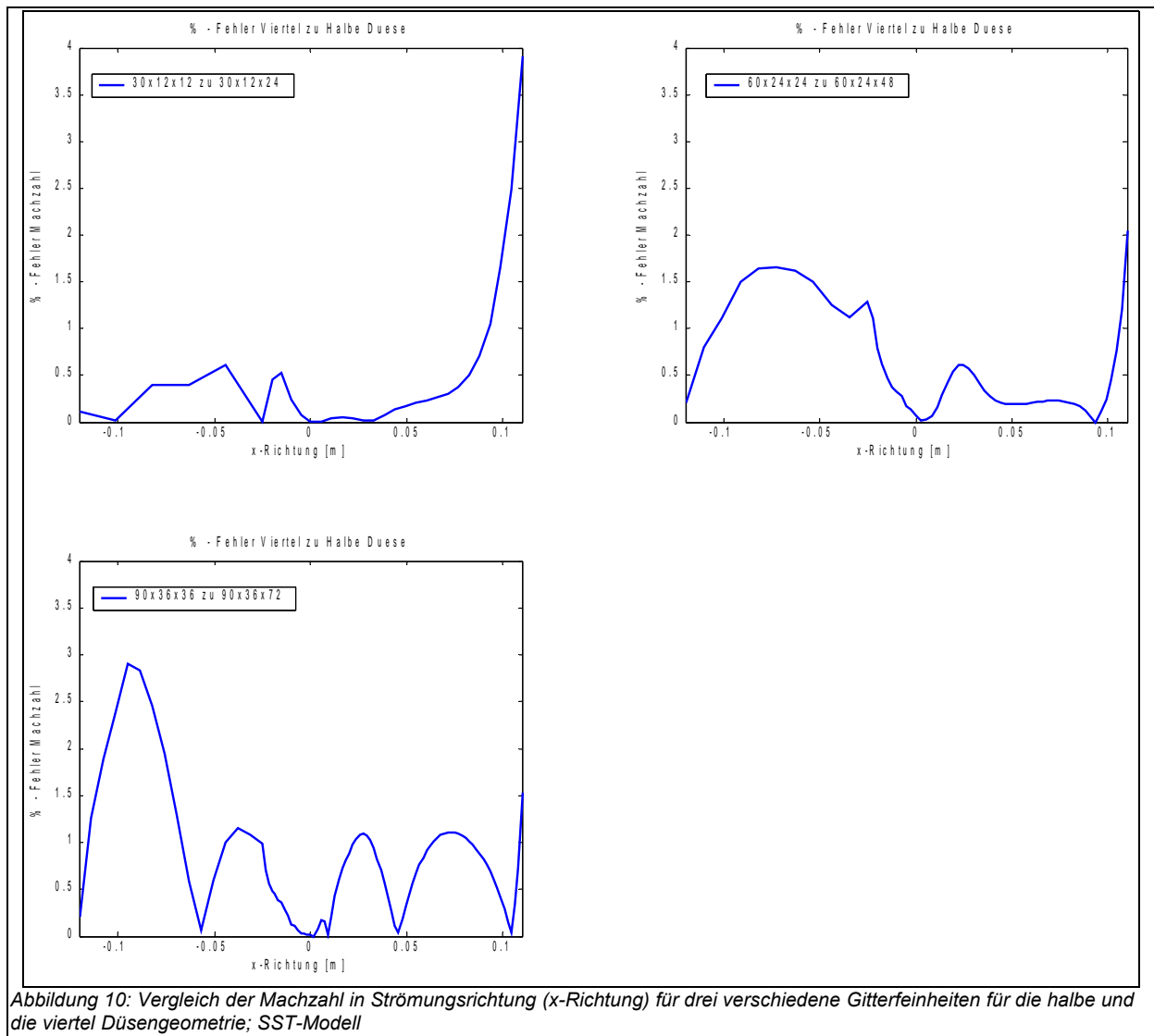
Eine konvergente Tendenz ist vorhanden, jedoch ist der prozentuale Fehler bezogen auf die Machzahl immer noch gross. Dies zeigt, dass für eine Untersuchung der turbulenten Grenzschicht ein feines Gitter verwendet werden muss.

Die konvergente Tendenz ist in x-Richtung zusammenfassend stärker als senkrecht dazu. Bei Betrachtung in x-Richtung kann die Aussage gemacht werden, dass ein Gitter von feiner als 90x36x36 zu wählen ist. Betrachtet man zusätzlich noch die Richtungen senkrecht zur Strömung, so muss die Wahl auf ein Gitter von 150x60x60 fallen, um zuverlässige Resultate auch in Wandnähe zu erhalten.

5.2.2.) Vergleich halbe Düsengeometrie zu viertel Düsengeometrie

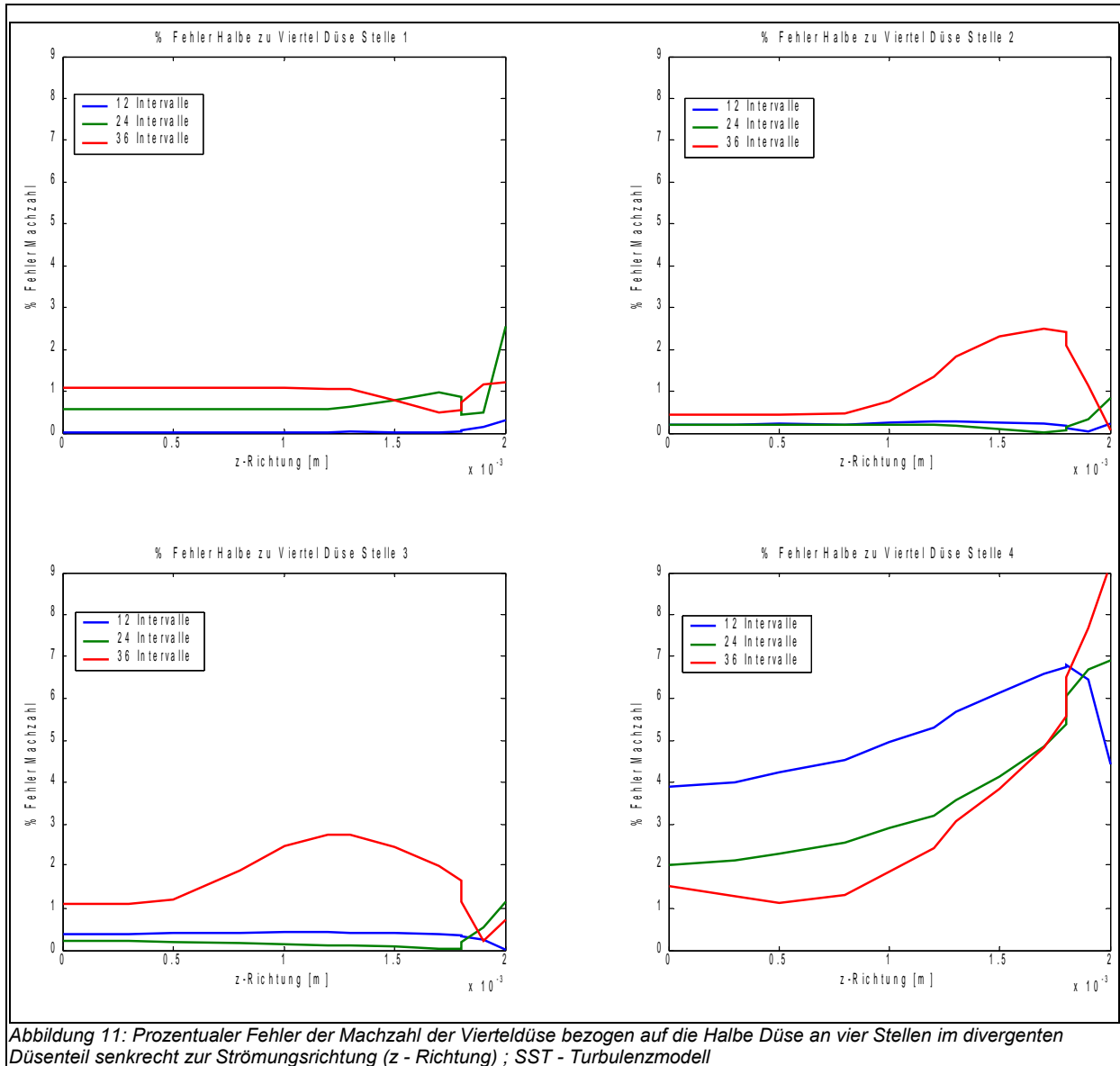
Um zuverlässige Resultate zu erhalten und um sicher zu gehen, dass die Simulation mit zwei Symmetrieebenen möglich ist, bleibt zu überprüfen, inwiefern sich Simulationen mit der halben Düsengeometrie zu Simulationen mit der viertel Düsengeometrie unterscheiden.

Hierzu wurde mit drei Gittern Untersuchungen angestellt. Von einem groben 30x12x12 respektive 30x12x24 über ein feineres 60x24x24 respektive 60x24x48 bis hin zu einem feinen 90x36x36 respektive 90x36x72 Gitter für die viertel Düse beziehungsweise Hälfte. In Abbildung 10 ist der prozentuale Fehler der Machzahl des Viertel Gitters bezogen auf den des halben Gitters. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Vierteldüsengeometrie bei einer groben Gitterwahl von der Halben Geometrie abweicht, dies besonders am Düsenausgang. Bei einer feineren Gitterwahl verschwindet der starke Fehler am Düsenausgang.



Die Darstellung des prozentualen Fehlers bezogen auf die Vierteldüse zeigt, dass die Diskrepanz am Düsenauslass mit der Wahl eines feineren Gitters allmählich verschwindet. Der prozentuale Fehler pendelt sich bei dem feinsten betrachteten Gitter bei der 1%-Marke ein. Dies ist doch eine erstaunliche Erkenntnis. Es müsste doch davon ausgegangen werden können, dass Symmetrien die Resultate nicht verfälschen oder abweichen lassen. Dem ist aber nicht so.

Besser fällt die Beurteilung quer zur Strömung, in z-Richtung, aus. Hier zeigt sich deutlich, dass die Werte weniger abweichen. In Abbildung 11 ist der prozentuale Fehler der Machzahl der halben auf die viertel Geometrie bezogen. Es zeigt sich, dass der Fehler kleiner als 3% ist. Die Differenz kommt aber auch daher, dass schon auf der Düsenachse die Machzahl nicht gleich ist. Dieser Fehler zieht sich dann über die ganze Breite.



Abschliessend ist ein Entscheid zu treffen, mit welcher Gitterauflösung die Simulationen zu machen sind. Wir haben uns in Absprache mit dem PSI für ein 150x60x60 Gitter entschieden. Ein Gitter das in Strömungsrichtung 151, senkrecht dazu, vertikal als auch horizontal 61 Gitterpunkte hat. Es besteht damit aus 540000 Gitterzellen und rund 562000 Knoten. Alle Simulationen werden mit der viertel Düsengeometrie gemacht, was heisst, dass zwei Symmetrieebenen gewählt werden.

5.3.) Massenflussminimierung

Für das Paul Scherrer Institut ist es wichtig, dass der Massenfluss im Experiment möglichst klein ist. Immer im Hinterkopf habend, dass das verwendete Fluid auch für experimentelle Bedingungen speziell ist. Die Temperaturen und Drücke sind hoch und damit nicht ungefährlich.

Um zu gewährleisten, dass die Simulationen möglichst realitätsgetreu sind, ist also der Massenfluss möglichst klein zu wählen. Der Druck und die Temperatur wie auch die Fläche am Eingang sind fest. Es bleibt einzig die Geschwindigkeit zu variieren. Es wurde diejenige Einlassgeschwindigkeit gesucht, bei welcher sich gerade noch eine Überschallströmung einstellt. Ausgehend von einer zu grossen Einlassgeschwindigkeit wurde diese schrittweise minimiert, bis zu dem Punkt, wo die Strömung im divergenten Düsenteil in den Unterschallbereich zurückfällt. Als minimale Einlassgeschwindigkeit wurde so $u = 92 \text{ [m s}^{-1}\text{]}$ ermittelt. Darunter bleibt die Strömung im Unterschallbereich. Damit sind die Simulationen experimentsnahe. Interessant ist, dass diese „experimentell“ gefundene Einlassgeschwindigkeit ungefähr gleich gross ist, wie diejenige bei der Handrechnung.

5.4.) Die Übersättigungskurve

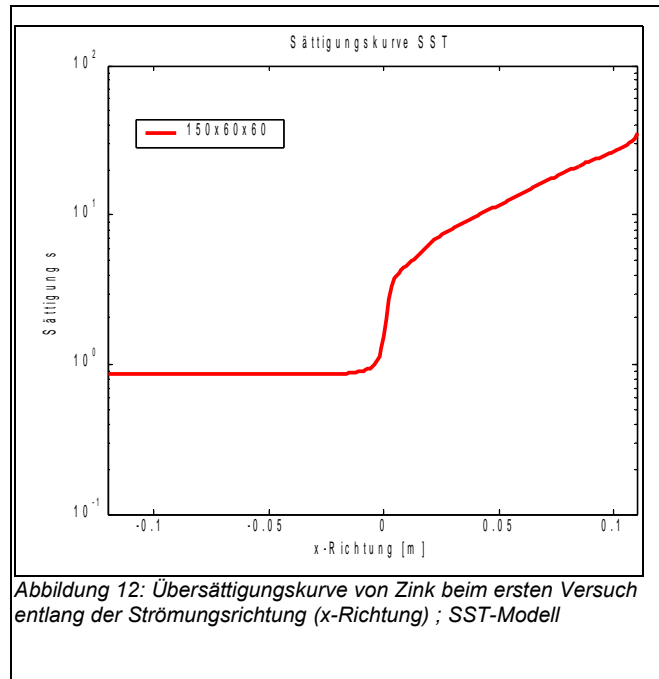
Eine entscheidende Grösse bei der Beobachtung der Nukleation ist die Übersättigung von Zink. Die Übersättigung ist definiert als:

$$s_{\text{zink}}(p, T) = \frac{p_{\text{zink}}}{p_{\text{sat}}(T)} \quad (69)$$

Hierbei ist p_{zink} der Partialdruck des Zinks und p_{sat} der Sättigungsdruck, der wiederum von der Temperatur abhängt [1].

$$p_{\text{sat}} = 16.9 * 10^{-09} e^{\frac{-14200}{T}} \text{ [Pa]} \quad (70)$$

Den bisher besprochenen Resultaten liegt ein Massenanteil von 4% Zinkdampf und 96% Stickstoffdampf zugrunde. Damit erhält man eine Übersättigungskurve wie in Abbildung 12. Die Übersättigung wird in der y-Achse logarithmisch aufgetragen.



Das Paul Scherrer Institut überprüfte die Annahme von einem Massenverhältnis 4% (Massenprozent) Zink nach diesem ersten Resultat. Man kam zum Schluss, dass es für das Experiment von Vorteil ist, wenn die Übersättigung am Einlass der Düse kleiner ist. Dies ist experimentell besser machbar, zumal die Zinkdampfproduktion beschränkt ist. Man entschied sich für einen Übersättigungswert am Einlass der Düse von 0.1. Damit ergibt sich nach folgender Rechnung ein neues Massenprozentverhältnis [12].

$$s_{neu} = \frac{p_{zink}}{p_{sat}} = \frac{y_{zink} p_{einlass}}{p_{sat}} \quad (71)$$

Mit y_{zink} als:

$$y_{zink} = \frac{n_{zink}}{n} = \frac{n_{zink}}{n_{zink} + n_{N_2}} = \frac{\frac{m_{zink}}{M_{zink}}}{\frac{m_{zink}}{M_{zink}} + \frac{m_{N_2}}{M_{N_2}}} = \frac{\frac{mf * m}{M_{zink}}}{\frac{mf * m}{M_{zink}} + \frac{(1 - mf) * m}{M_{N_2}}} = \frac{\frac{mf}{M_{zink}}}{\frac{mf}{M_{zink}} + \frac{1 - mf}{M_{N_2}}} \quad (72)$$

Dies mit den Beziehungen:

$$n_i = \frac{m_i}{M_i} \quad (73)$$

$$n = \sum_{i=1}^N n_i \quad (74)$$

Damit ergibt sich für den prozentualen Massenanteil von Zink folgende Identität:

$$mf = \frac{M_{zink} p_{sat} s_{neu}}{(M_{N_2} - M_{zink}) p_{sat} s_{neu} - M_{N_2} p_{in}} \quad (75)$$

Somit sind die Simulationen von nun an mit den folgenden Massenprozenten gemacht:

Massenanteil Zink	$mf_{zink} = 0.0108$
Massenanteil Stickstoff	$mf_{stickstoff} = 0.9892$

5.5.) Simulationen mit der Originalgeometrie

Im folgenden Abschnitt sind nun die ersten Resultate aufgeführt und ausgewertet.

5.5.1.) Anfangsdaten

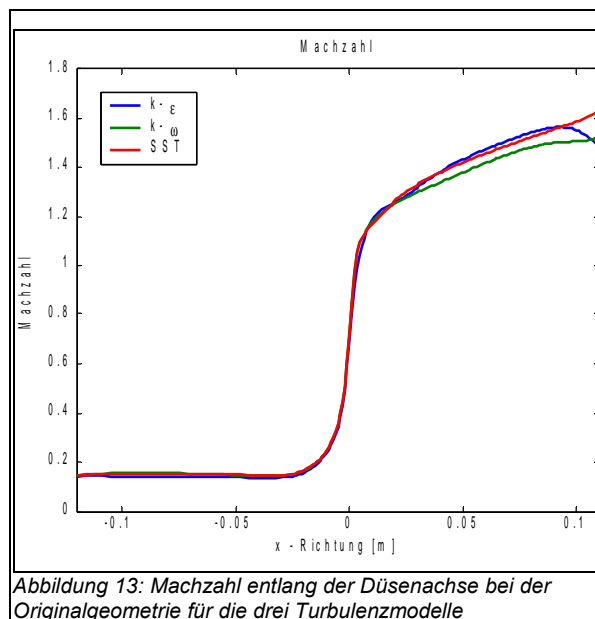
Gitter	150x60x60	
Halber Winkel im divergierenden Teil	0.6512	[grad]
Fläche am engsten Querschnitt	0.000016	[m ²]
Fläche am Ausgang	0.000026	[m ²]
Komponenten mit Massenanteil	mf_{zink} $mf_{stickstoff}$	0.0108 0.9892
Einlassgeschwindigkeit	92	[m s ⁻¹]
Einlasstemperatur	1100	[°K]
Einlassdruck	900000	[Pa]
Wandrandbedingung	„no slip“	
Verwendete Turbulenzmodelle	k-ε k-ω Shear-Stress-Transport (SST)	
Forderung an Residuen	< 10 ⁻⁵	

5.5.2.) Ergebnisse mit der Originalgeometrie

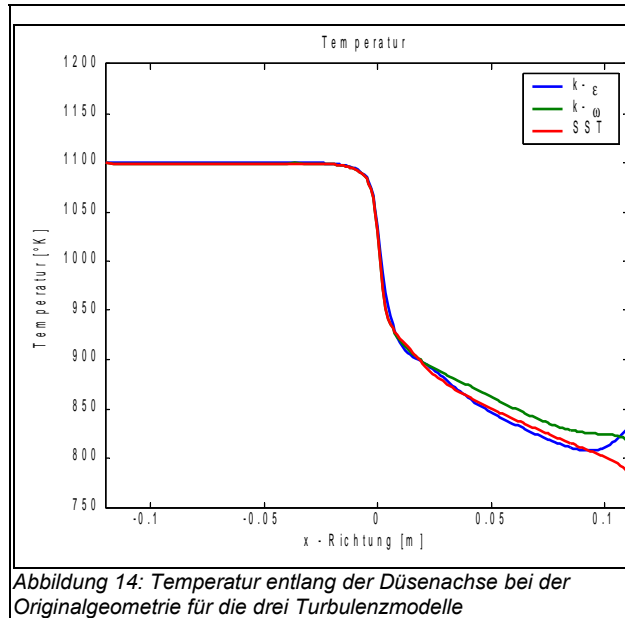
Die Resultate werden wie Eingangs des Teiles erwähnt besprochen. In x-Richtung werden jeweils Machzahl, Druck, Temperatur und Übersättigung von Zink betrachtet. Senkrecht zur Strömung jeweils die Machzahl und die spezifische turbulente kinetische Energie (stkE).

Entlang der Strömungsrichtung

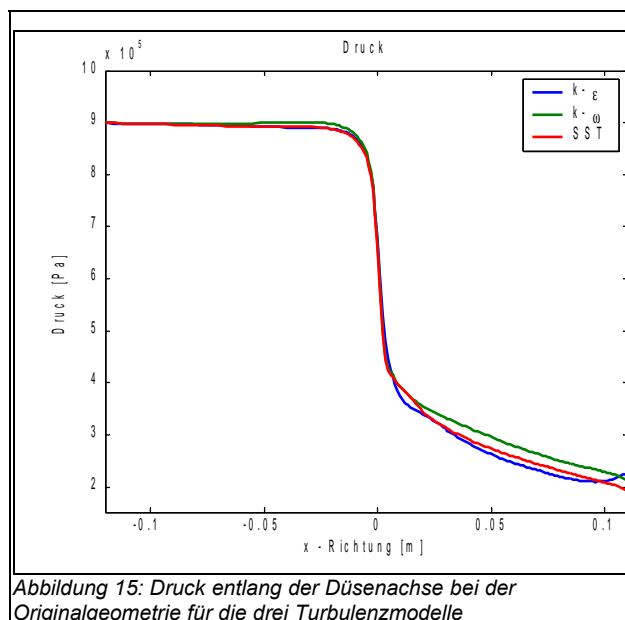
Das Verhalten der Machzahl stromabwärts ist in Abbildung 13 dargestellt. Am Düseneinlass ändert sie sich kaum. Beim Einsetzen der Verengung der Düse wird die Strömung allmählich beschleunigt und erreicht kurz nach dem engsten Querschnitt den Wert 1. Im divergenten Düsenteil wird sie weiter beschleunigt, jedoch nicht mehr so stark wie im konvergenten Düsenteil. Die Zunahme der Machzahl ist im divergenten Teil weitgehend linear. Am Düsenausgang liegt sie dann je nach Turbulenzmodell zwischen rund 1.4 und 1.7. Die verschiedenen Turbulenzmodelle liefern auch etwas unterschiedliche Resultate. Das k- ϵ -Modell und das SST-Modell sind sich weitestgehend ähnlich, was aufgrund der Formulierung auch nicht überrascht. Gegen Düsenende verkleinert sich die Machzahl beim k- ϵ -Modell, während sie beim SST-Modell weiter zunimmt. Das k- ω -Modell liefert im divergenten Düsenteil etwas kleinere Machzahlen, jedoch ist die Strömung ebenfalls konstant beschleunigt..



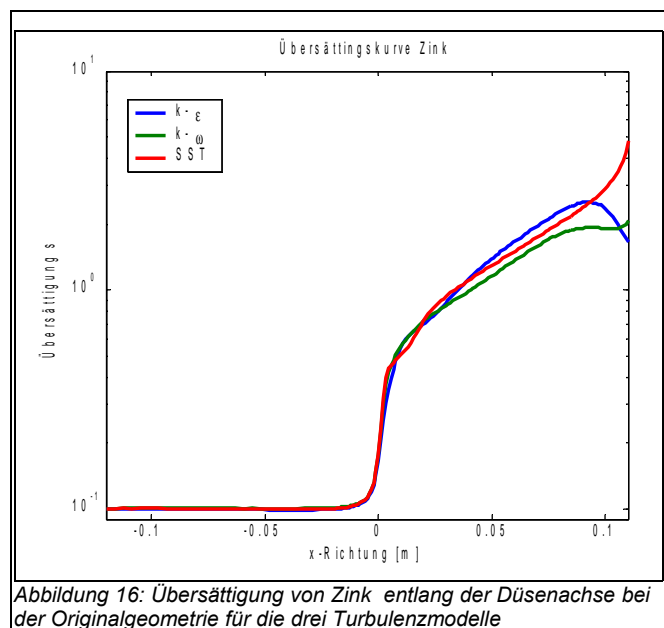
Die Temperatur bleibt im Düseneinlauf konstant auf rund 1100 [°K]. Im konvergenten Teil nimmt sie stark ab und fällt auf 900 – 950 [°K]. Im divergenten Teil nimmt sie weiter ab, jedoch nicht mehr so stark wie vorher. Auch hier ist die Temperaturabnahme stromabwärts ungefähr linear. Am Düsenausgang liegt die Temperatur je nach Turbulenzmodell zwischen 780 [°K] bis 820 [°K]. Auch hier ist wiederum die Ähnlichkeit vom k- ϵ -Modell und dem SST-Modell zu erwähnen. Mit dem Unterschied, dass das k- ϵ -Modell gegen Düsenausgang eine Temperaturerhöhung liefert, während das SST-Modell weiter die Temperatur verringert. Das k- ω -Modell liefert etwas höhere Temperaturen als die zwei anderen Turbulenzmodelle, jedoch ist der Temperaturverlauf konstant fallend, dargestellt in Abbildung 14.



Beim Druck zeigt sich ein ähnliches Bild wie bei der Temperatur. Nach anfänglichem starkem Druckabfall im konvergenten Düsenteil ist der Druckabfall im divergenten Teil weniger stark. Am Düsenausgang werden Werte zwischen 180000 [Pa] und 220000 [Pa] erreicht. Auch die Abhängigkeit des Druckverlaufs vom Turbulenzmodell ist ähnlich zu denjenigen mit der Temperatur, dargestellt in Abbildung 15.



Der wichtigste Faktor für das Gelingen des Experimentes ist die Übersättigung von Zink, welche am Düseneingang bei 0.1 liegt. Sie verändert sich im Düseneinlauf nicht. Ein starker Anstieg erfolgt im konvergenten Düsenteil und am Anfang des divergenten Teils. Hier steigt sie sprunghaft auf 0.7 an. Weiter stromabwärts ist der Anstieg wiederum weniger stark. Der Wert 1 erreicht die Übersättigung nach rund einem Drittel im divergenten Düsenteil. Am Düsenausgang werden wiederum je nach Turbulenzmodell Werte zwischen 1 und 6 erreicht, dargestellt in Abbildung 16.



Entlang konstanter Breite

Bei der Betrachtung der Machzahl in Abbildung 17 an der Stelle 1 in z-Richtung zeigt sich, dass sich die beiden wandstarken Turbulenzmodelle ähnlich sind, während das $k-\epsilon$ -Modell im wandnahen Bereich völlig abweicht. Es erreicht am äussersten Gitterpunkt, das heisst auf der Düsenwand, nicht den erwarteten Wert von Null, sondern weicht deutlich davon ab. Bei den wandstarken Modellen ($k-\omega$, SST) wird ein Wert nahe bei Null erreicht. Ausserdem bildet sich ein gut sichtbares Plateau, und erst bei starker Wandannäherung verringert sich die Machzahl deutlich und in Wandnähe ganz stark. Diese Tendenz ist an allen Stellen zu beobachten. Allerdings ist die ausgeprägte Bildung des Plateaus stromabwärts abnehmend.

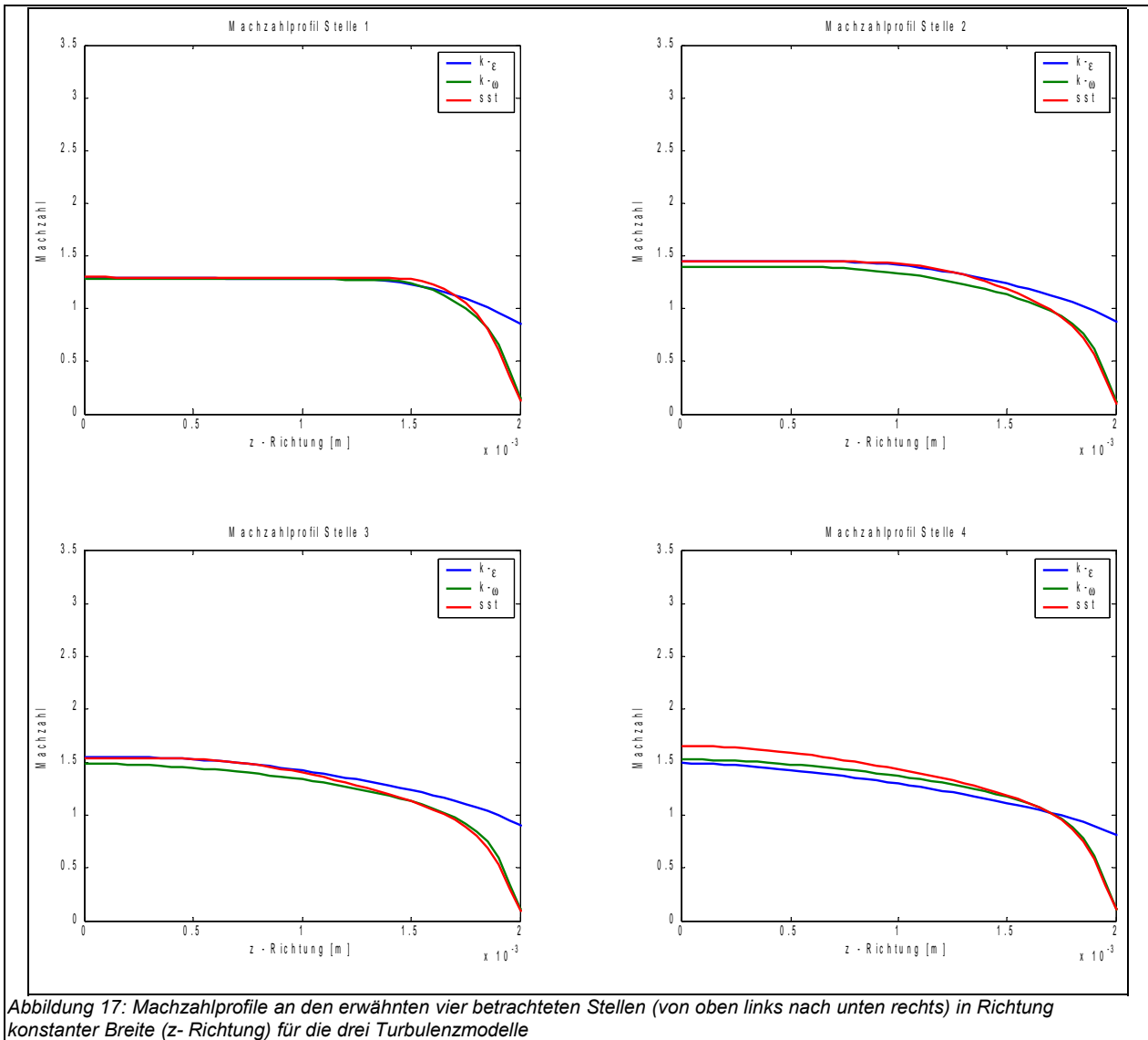


Abbildung 17: Machzahlprofile an den erwähnten vier betrachteten Stellen (von oben links nach unten rechts) in Richtung konstanter Breite (z- Richtung) für die drei Turbulenzmodelle

Für weitere Interpretationen ist die Betrachtung der spezifischen turbulenten kinetischen Energie (stKE) aussagekräftig. Sie wird gebildet aus den Fluktuationsanteilen der Geschwindigkeit und ist massenunabhängig. Zudem wird sie in allen drei Turbulenzmodellen in der ersten Gleichung verwendet. Als Mass für die Intensität der Turbulenz ist sie ein guter Anhaltspunkt.

$$k = \frac{1}{2} (\overline{u_1^2} + \overline{u_2^2} + \overline{u_3^2}) \quad (76)$$

In Abbildung 18 an der Stelle 1 ist die stKE nur in Wandnähe stark. Sie erreicht ihre grössten Werte in nach drei Vierteln der Distanz zur Wand. Bewegt man sich weiter stromabwärts, so ist die Zunahme markant. An der Stelle 2 beginnt sie bereits nach der Hälfte der Breite stark zuzunehmen. An der Stelle 3 steigt sie schon nach 0.5 [mm] stark an und am Düsenausgang beginnt der Anstieg schon gleich nach der Düsenmitte.

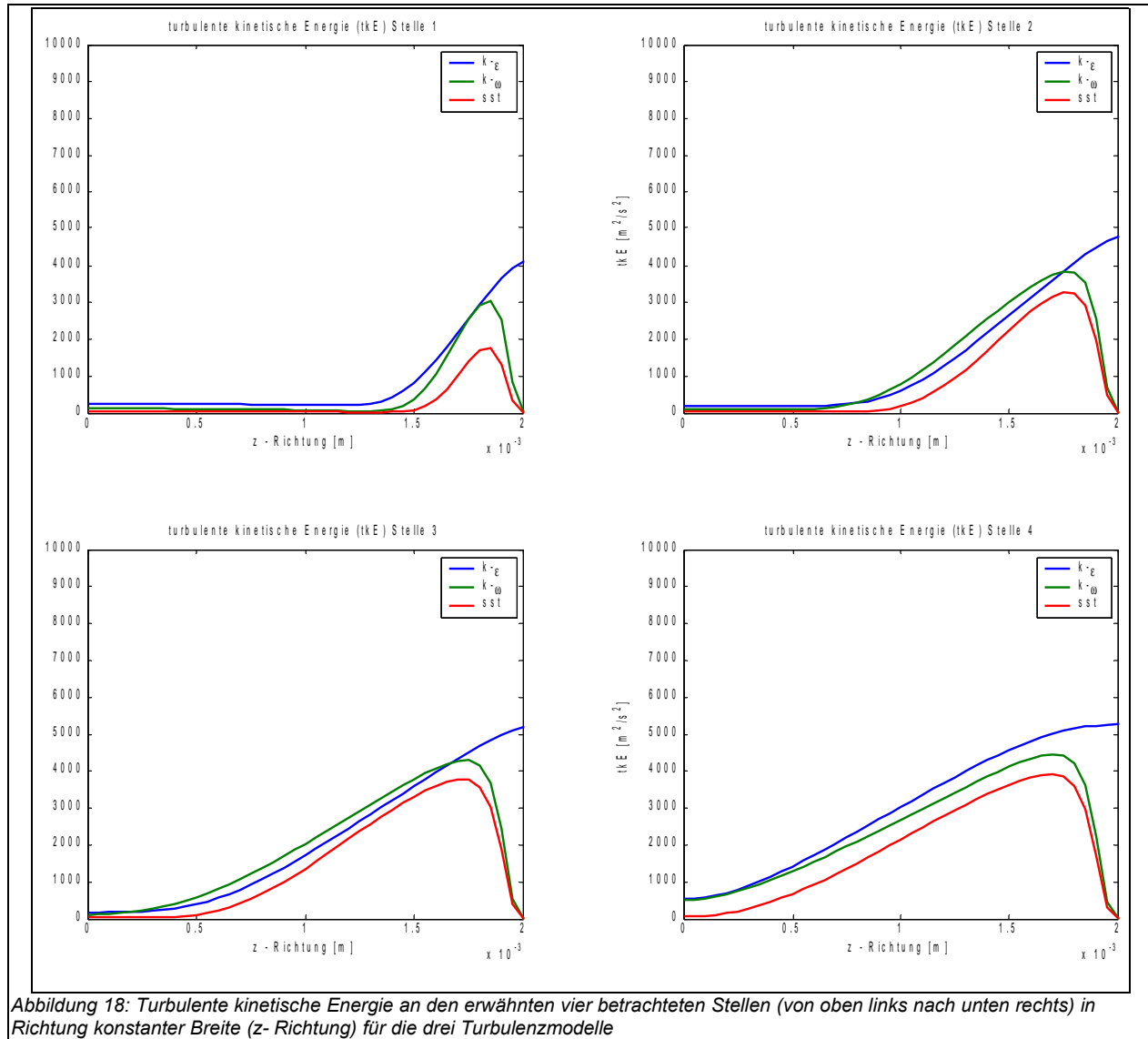


Abbildung 18: Turbulente kinetische Energie an den erwähnten vier betrachteten Stellen (von oben links nach unten rechts) in Richtung konstanter Breite (z-Richtung) für die drei Turbulenzmodelle

Entlang variierender Höhe

Die Entwicklung der Machzahl stromabwärts zeigt, dass das anfängliche Plateau weniger stark abgebaut wird. Auch noch am Düsenausgang ist beim SST-Modell noch über die Hälfte der Höhe die Machzahl beinahe auf dem gleichen Wert. Wiederum deutlich ist die Ungenauigkeit des $k-\epsilon$ -Modells in Wandnähe. Der Wert der Machzahl liegt dort immer um rund 0.7 herum. Die beiden wandstarken Modelle fallen in Wandnähe stark ab und erreichen einen sehr kleinen Wert, dargestellt in Abbildung 19.

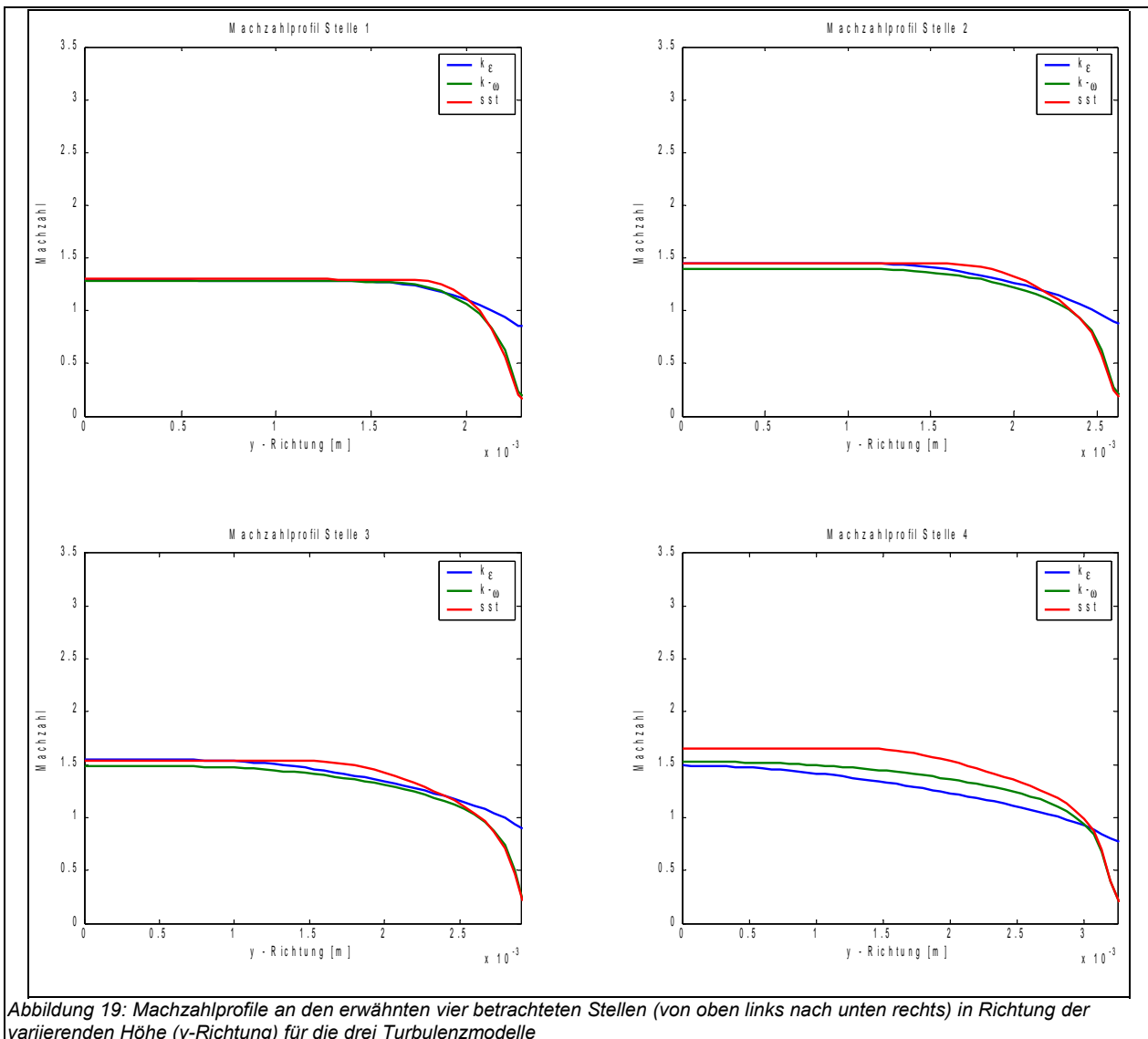
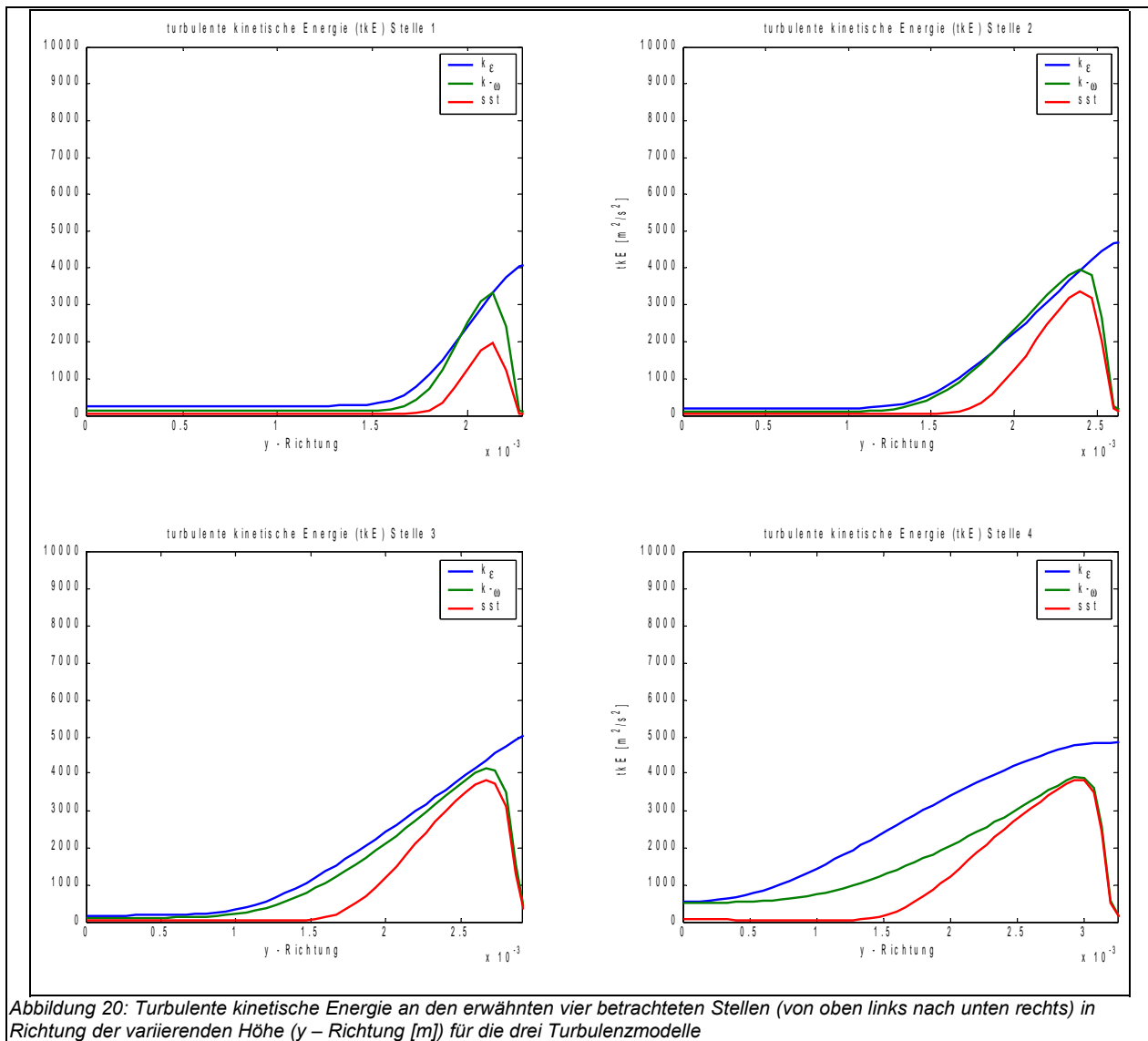


Abbildung 19: Machzahlprofile an den erwähnten vier betrachteten Stellen (von oben links nach unten rechts) in Richtung der variierenden Höhe (y-Richtung) für die drei Turbulenzmodelle

Bei der Betrachtung der stkE in Abbildung 20 zeigt sich an der Stelle 1 ein ähnliches Bild wie in der Richtung der konstanten Breite. Ihre Zunahme beginnt erst ungefähr nach Drei Vierteln der Höhe. Stromabwärts beginnt der Anstieg der stkE allerdings erst später. An den Stellen 2 und 3 beginnt sie bei 1 [mm] stark anzusteigen. Am Düsenausgang zeigt sich eine grosse Diskrepanz der drei Turbulenzmodelle. Das $k-\epsilon$ -Modell beginnt gleich nach der Düsenmitte stark anzusteigen und liefert im Vergleich zu den beiden Anderen relativ hohe Werte. Das $k-\omega$ -Modell hat schon auf der Düsenmitte einen bestimmten Wert, der Anstieg beginnt bei 1 [mm], ist aber weniger stark als derjenige beim $k-\epsilon$ -Modell und auch die Werte sind deutlich kleiner. Das SST-Modell hat anfänglich eine kleine stkE. Der Anstieg ist rund bei der Hälfte der Höhe und die Werte gleichen sich dann denjenigen des $k-\omega$ -Modells an.



Die Abbildungen 21 und 22 zeigen jeweils einen Konturplot für die Machzahl und die stke in zwei Ebenen. Dargestellt wird das SST-Modell. Die Darstellung der Machzahl als auch der stke zeigen die turbulente Grenzschicht gut. Besonders gut sichtbar ist die Zunahme der stke als Indikator für die Dimension der turbulenten Grenzschicht. Es zeigt sich wirklich, dass der Einfluss der Grenzschicht in z -Richtung deutlich ausgeprägter ist als in y -Richtung. Die z -Richtung als auch die y -Richtung wurden bei den beiden Abbildungen stark gestreckt.

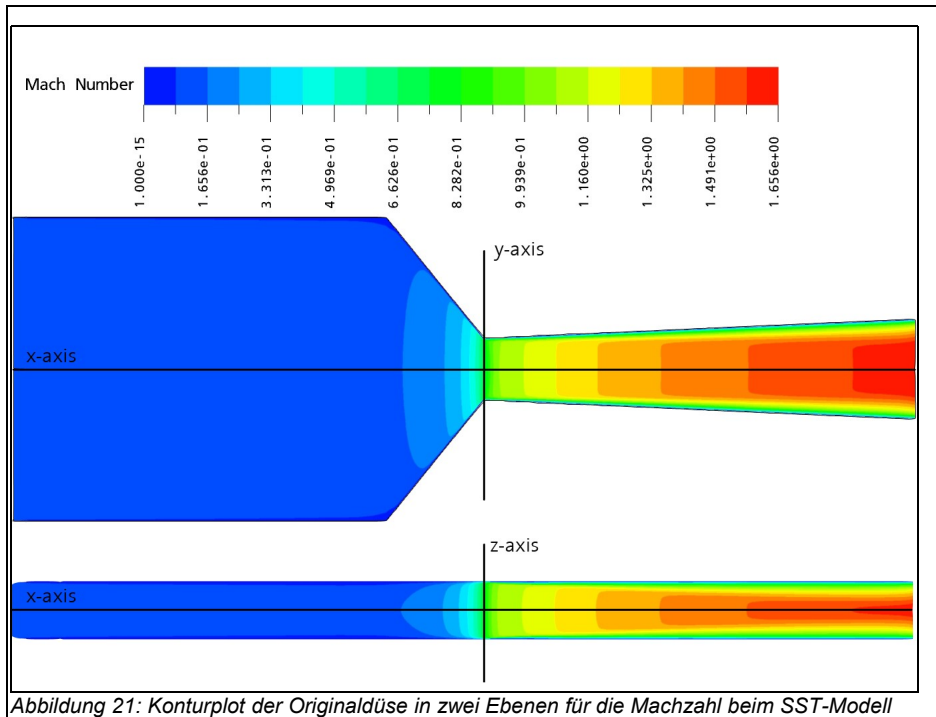


Abbildung 21: Konturplot der Originaldüse in zwei Ebenen für die Machzahl beim SST-Modell

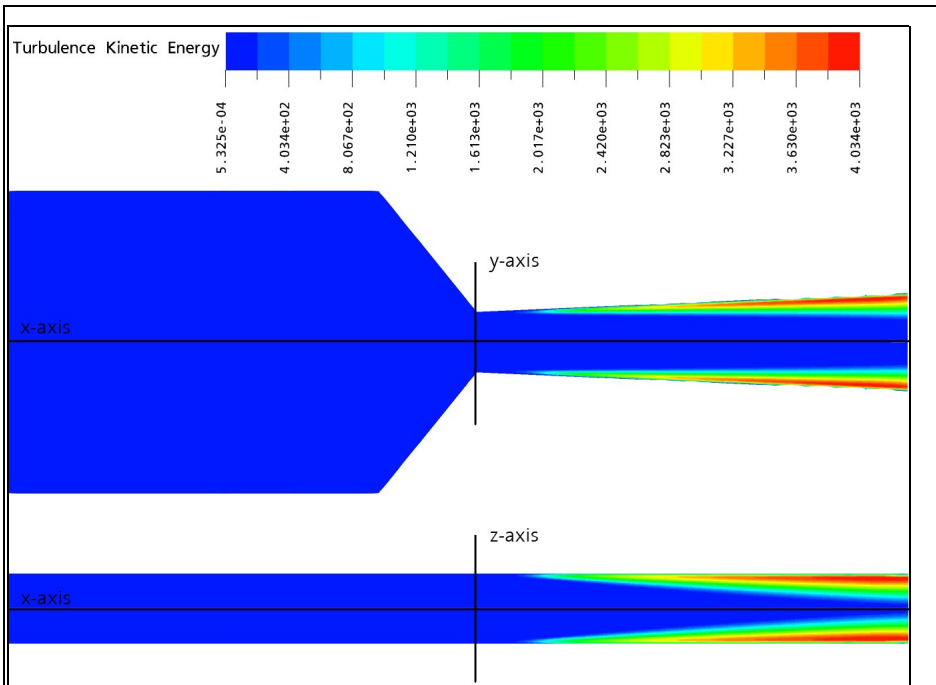


Abbildung 22: Konturplot der Originaldüse in zwei Ebenen für die stke beim SST-Modell

Fazit

Der Verlauf der Übersättigung stromabwärts ist wie erwähnt im Bereich zwischen 1 und 6. Das PSI besitzt Resultate für ein anderes Fluid, welche zeigen, dass die Übersättigung deutlich höher sein muss. Bei Zinkdampf erwartet man, dass sie nochmals um einiges höher sein muss, als diejenige des Referenzfluides. Es besteht die Möglichkeit, die Eingangssättigung zu erhöhen. Damit wird die Übersättigung höher, ohne dass die Düsengeometrie verändert werden muss. Jedoch werden die Werte so nur um einen bestimmten Wert nach oben verschoben. Ausserdem ist man bestrebt, den Zinkdampfanteil im Gemisch möglichst klein zu halten. Zudem ist vorallem die Temperatur für den Übersättigungsgrad entscheidend, da sie exponentiell in die Beziehung der Übersättigung einfließt.

Eine Verbesserung, namentlich deutlich höhere Werte, der Übersättigung kann also nur durch einen grösseren Temperaturabfall im divergenten Düsenteil erreicht werden. Dieser wird über eine stärkere Strömungsbeschleunigung erreicht, welcher wiederum durch einen grösseren Divergenzwinkel erreicht wird.

Der zweite beunruhigende Punkt ist die Entwicklung der turbulenten Grenzschicht in der z-Richtung. Zwar wird die Düse durch die Grenzschicht nicht verschlossen, jedoch ist der Einfluss gross. Damit man sich auf der sicheren Seite befindet, wäre es geschickt, die Düse etwas breiter zu gestalten, damit dieser Effekt reduziert werden kann. Ausserdem ist für die optische Messapparatur eine möglichst grosse Zone der turbulenzunbeeinflussten Strömung von Vorteil.

Die bisherigen Resultate der Simulationen haben gezeigt, dass die gewünschte oder angestrebte hohe Übersättigung als Bedingung für das Einsetzen der Nukleation nicht erreicht wird. In einem nächsten Schritt muss erreicht werden, dass die Übersättigung im divergenten Düsenteil deutlich höher ist. Dies geschieht mit einer Vergrösserung des Divergenzwinkels.

5.6.) Simulationen mit variiertem Divergenzwinkel

5.6.1.) Anfangsdaten

Die Anfangsdaten und Randbedingungen sind identisch zu denjenigen der originalen Geometrie. Die einzige Änderung ist der Divergenzwinkel und damit auch die Querschnittsvergrösserung im divergenten Düsenteil. Die in Tabelle 17 zeigt die Geometrien, mit welchen Simulationen durchgeführt wurden.

	Breite [m]	Höhe Ausgang [m]	Fläche Ausgang [m ²]	Halber Divergenzwinkel [grad]
Original	0.004	0.0065	0.000026	0.65
	0.004	0.0070	0.000028	0.78
	0.004	0.0080	0.000032	1.04
	0.004	0.0100	0.000040	1.56
Variationen	0.004	0.0130	0.000052	2.34

Tabelle 17: Realisierte Simulationen mit den variierten Geometrien

Dies geschah immer mit den drei Turbulenzmodellen k- ϵ , k- ω und SST.

5.6.2.) Ergebnisse mit variiertem Divergenzwinkel

Um einen Anhaltspunkt für die Güte der Wahl des Divergenzwinkels zu haben, wird an der Stelle $x = 0.055$ [m], d.h. in der Mitte des divergenten Düsentails die Übersättigung betrachtet. Die Tabelle 18, 19 und 20 zeigen die Ergebnisse für die verschiedenen Divergenzwinkel. Es wird die Temperatur, der Druck und die Übersättigung in der Mitte des divergenten Düsentails betrachtet. Zusätzlich noch den Druck und die Machzahl am Düsenausgang.

KE					
A_out [m ²]	T_mitte [°K]	p_mitte [Pa]	s_mitte []	p_out [Pa]	Ma_out []
0.00002600	841.0	257701	1.52	225696	1.49
0.00002800	822.3	230136	1.99	269020	1.37
0.00003200	792.8	202656	3.34	128470	1.89
0.00004000	744.4	147116	7.76	328287	0.92
0.00005200	691.0	105144	24.28	185492	1.47

Tabelle 18: Resultate in der Mitte des divergenten Düsentails und am Ausgang in Abhängigkeit der Ausgangsfläche für das k-ε-Modell

KW					
A_out [m ²]	T_mitte [°K]	p_mitte [Pa]	s_mitte []	p_out [Pa]	Ma_out []
0.00002600	856.7	283170	1.23	209341	1.53
0.00002800	834.5	253216	1.71	176414	1.64
0.00003200	789.9	198164	3.49	126857	1.89
0.00004000	744.0	150901	8.04	98449	1.95
0.00005200	687.0	107330	27.94	54473	2.28

Tabelle 19: Resultate in der Mitte des divergenten Düsentails und am Ausgang in Abhängigkeit der Ausgangsfläche für das k-ω-Modell

SST					
A_out [m ²]	T_mitte [°K]	p_mitte [Pa]	s_mitte []	p_out [Pa]	Ma_out []
0.00002600	842.7	268452	1.53	192656	1.65
0.00002800	821.9	237891	2.08	164482	1.74
0.00003200	796.2	207205	3.16	134567	1.82
0.00004000	736.4	146108	9.50	85203	2.11
0.00005200	685.0	105476	29.13	50483	2.37

Tabelle 20: Resultate in der Mitte des divergenten Düsentails und am Ausgang in Abhängigkeit der Ausgangsfläche für das SST-Modell

Der Divergenzwinkel hat einen grossen Einfluss auf die Werte in der Düse. Die Strömung wird stärker beschleunigt, was die Temperatur und den Druck stärker Abfallen lässt, zugleich die Geschwindigkeit und damit die Machzahl deutlich erhöht. Damit wird auch die Übersättigung höher.

Für die Betrachtung der Diagramme für die Strömungsgrössen entlang der Düsenachse (Machzahl, Druck, Temperatur und Übersättigung), die Strömungsgrössen und Indikatoren für die Grösse der turbulenten Grenzschicht (Machzahl, turbulente kinetische Energie) in z-Richtung und in y-Richtung wird auf den Anhang verwiesen, wo alle Diagramme zusammengestellt sind.

Entlang konstanter Breite

Die vier betrachteten Stellen in z-Richtung verdeutlichen, dass sich die stkE ähnlich verhält, wie bei der originalen Düsengeometrie. Der Beginn des Anstiegs der stkE ist stromabwärts im divergenten Düsenteil immer früher. Die Grösse der Werte der stkE im Vergleich mit der originalen Geometrie ist etwas höher. Dies ist auf die höhere Geschwindigkeit im divergenten Düsenteil zurückzuführen. Es ist aber keine Vergrößerung oder Verkleinerung des Bereiches der ungestörten Strömung feststellbar. Als Beispiel dafür dient die Abbildung 23, welche eine Geometrie mit einer Austrittshöhe von 0.008 [m] zeigt.

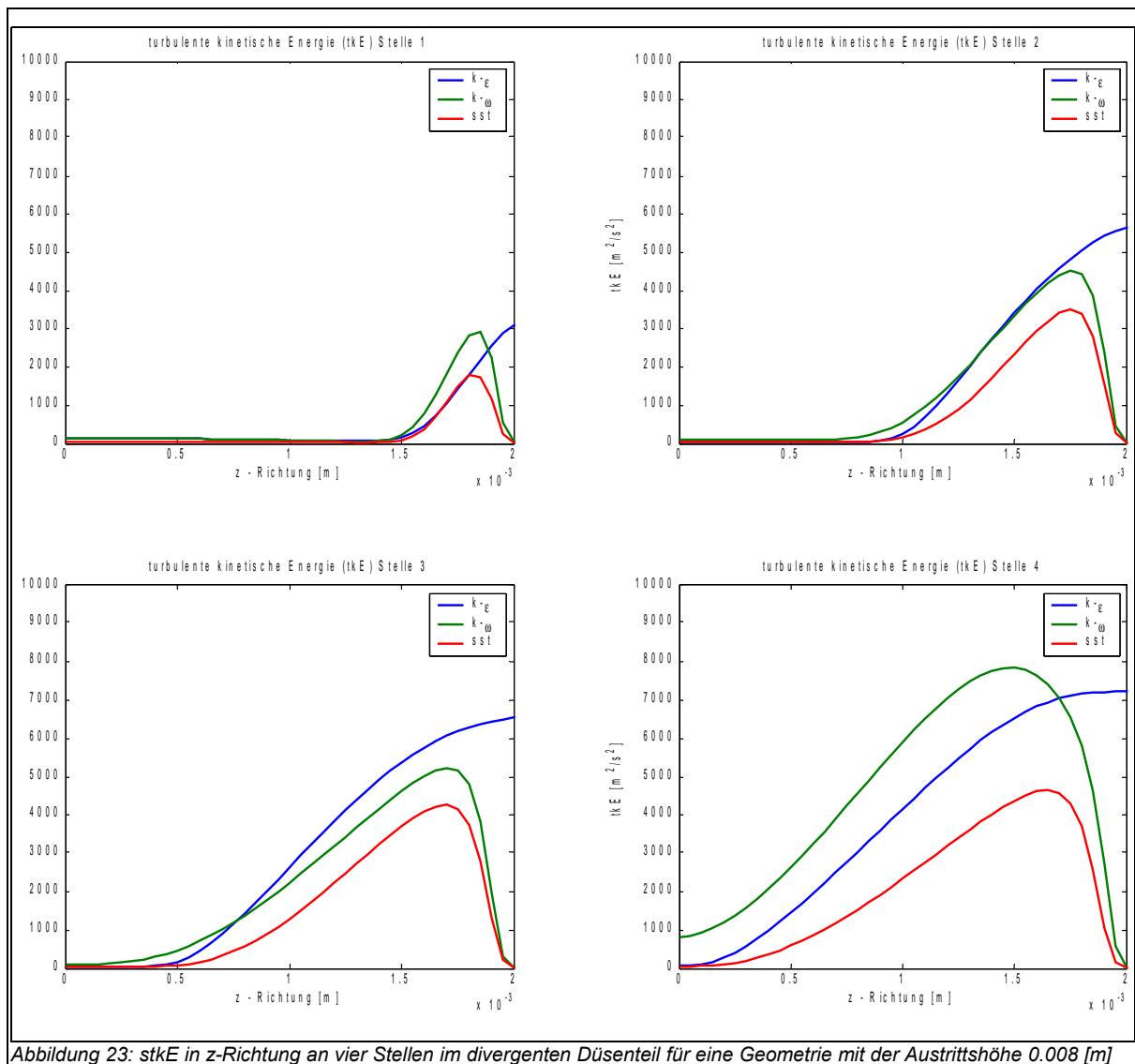


Abbildung 23: stkE in z-Richtung an vier Stellen im divergenten Düsenteil für eine Geometrie mit der Austrittshöhe 0.008 [m]

Entlang variierter Höhe

Betrachtet man die $stKE$ in Abbildung 24 in y -Richtung stromabwärts kann festgestellt werden, dass der Einfluss der Turbulenz geringer ist. Der Bereich der turbulenzunbeeinflussten Strömung ist grösser, dass heisst, dass der Anstieg der $stKE$ immer etwa an der gleichen Stelle ist. Dies ist bei ungefähr $y = 0.002$ [m] der Fall. Damit bestätigt sich die Vermutung, dass diese Richtung bezüglich Turbulenz unkritisch ist.

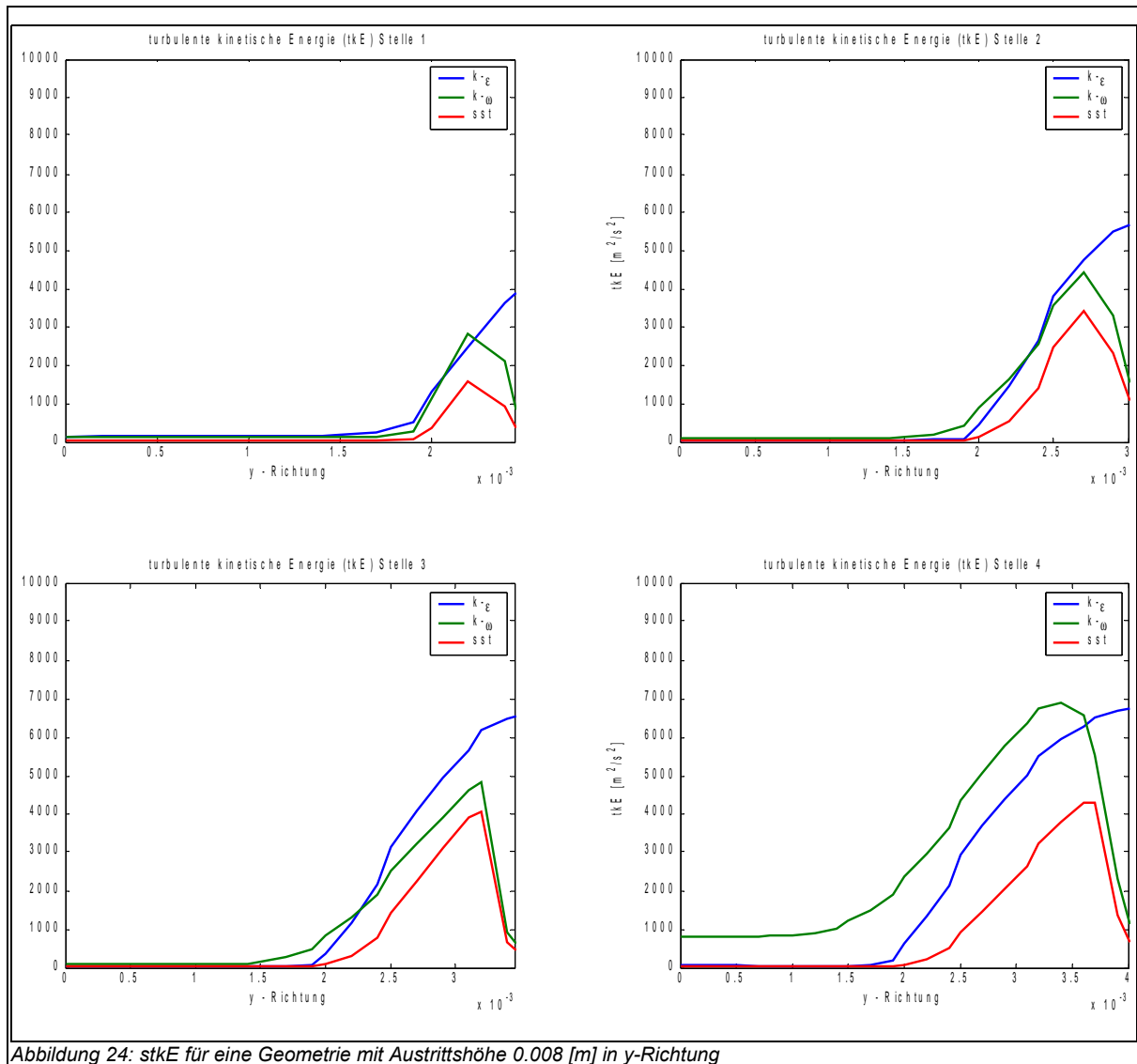


Abbildung 24: $stKE$ für eine Geometrie mit Austrittshöhe 0.008 [m] in y -Richtung

Fazit

Es zeigt sich, dass die Variation des Divergenzwinkels, insbesondere eine Vergrößerung, die Übersättigung erhöht. Je grösser man den Divergenzwinkel wählt, desto höher wird die Übersättigung. Damit können hohe Übersättigungen erreicht werden. Es existiert jedoch eine obere Schranke für die Wahl des Divergenzwinkels, damit keine Ablöseeffekte der Strömung stattfinden. Solche Ablöseeffekte treten ab Winkeln von ungefähr 8 [grad] auf [5].

Die Entwicklung der $stkE$ als Indikator für die turbulente Grenzschicht in Richtung konstanter Breite verändert sich bei den verschiedenen Divergenzwinkeln kaum oder nur geringfügig. Einzig erhöhen sich die Werte bei grösseren Winkeln, nicht aber der Ort, wo die Turbulenzbeeinflussung der Strömung beginnt. Der Einfluss der Turbulenz in z -Richtung kann also nur über eine Verbreiterung der Düse reduziert werden.

5.7.) Simulationen mit neuer Lavaldüse

Die Düse muss breiter gestaltet werden, um den Einfluss der Grenzschicht zu verkleinern. Dies geschah ausgehend vom engsten Querschnitt. Es wurden zwei Breiten realisiert.

Die erste Variante ist der Wechsel vom engsten Querschnitt 4x4 [mm] auf 3x5 [mm]. Bei der ersten Geometrie mit diesem Querschnitt wurde ein Flächenverhältnis von Einlass zum engsten Querschnitt und vom engsten Querschnitt zum Auslass gemäss der Originalgeometrie realisiert. Danach ist die Ausgangsfläche in relativ groben Schritten vergrössert worden.

Die zweite Variante ist der Wechsel vom engsten Querschnitt 4x4 [mm] auf 3x6 [mm]. Auch hier wurde ausgehend vom Flächenverhältnis der Originaldüse die Ausgangsfläche in groben Schritten vergrössert. Die Tabellen 21 und 22 zeigen alle realisierten Geometrievariationen.

	Breite [m]	Höhe Ausgang [m]	Fläche Ausgang [m ²]	Halber Divergenzwinkel [grad]
Variationen	0.005	0.0050	0.000025	0.52
	0.005	0.0060	0.000030	0.78
	0.005	0.0070	0.000035	1.04
	0.005	0.0120	0.000060	2.34
	0.005	0.0160	0.000080	3.37
	0.005	0.0200	0.000100	4.39

Tabelle 21: Realisierte Geometrien mit der Breite der Düse von 5 [mm].

	Breite [m]	Höhe Ausgang [m]	Fläche Ausgang [m ²]	Halber Divergenzwinkel [grad]
Variationen	0.006	0.0050	0.000030	0.52
	0.006	0.0060	0.000036	0.78
	0.006	0.0070	0.000042	1.04

Tabelle 22: Realisierte Geometrien mit der Breite der Düse von 6 [mm].

5.7.1.) Ergebnisse mit neuer Lavaldüse (sechs Millimeter Breite)

Alle Resultate mit einer Lavaldüse der Breite 6 [mm] sind im Anhang aufgeführt. Eine allgemeine Beschreibung der Resultate mit Schlussfolgerungen folgt in diesem Kapitel.

Entlang der Strömungsrichtung

Wiederum wurde als Kriterium die Übersättigung, der Druck, die Temperatur in der Mitte des divergierenden Düsentails und der Druck und die Machzahl am Ausgang der Düse genommen. Die Tabellen 23, 24 und 25 zeigen jeweils für die drei Turbulenzmodelle die relevanten Werte.

KE					
A_out [m ²]	p_mitte [Pa]	T_mitte[°K]	s_mitte []	p_out [Pa]	Ma_out []
0.000030	243832	832.5	1.71	173144	1.67
0.000030	196159	790.5	3.41	388237	0.87
0.000035	181944	781.4	3.89	417502	0.69

Tabelle 23: Resultate in der Mitte des divergenten Düsentails und am Ausgang in Abhängigkeit der Ausgangsfläche für das k-ε-Modell; Engster Querschnitt 3x6 [mm]

KW					
A_out [m ²]	p_mitte [Pa]	T_mitte[°K]	s_mitte []	p_out [Pa]	Ma_out []
0.000030	271913	846.3	1.44	186772	1.61
0.000030	203884	793.5	3.31	126434	1.89
0.000035	182277	774.4	4.60	108228	1.97

Tabelle 24: Resultate in der Mitte des divergenten Düsentails und am Ausgang in Abhängigkeit der Ausgangsfläche für das k-ω-Modell; Engster Querschnitt 3x6 [mm]

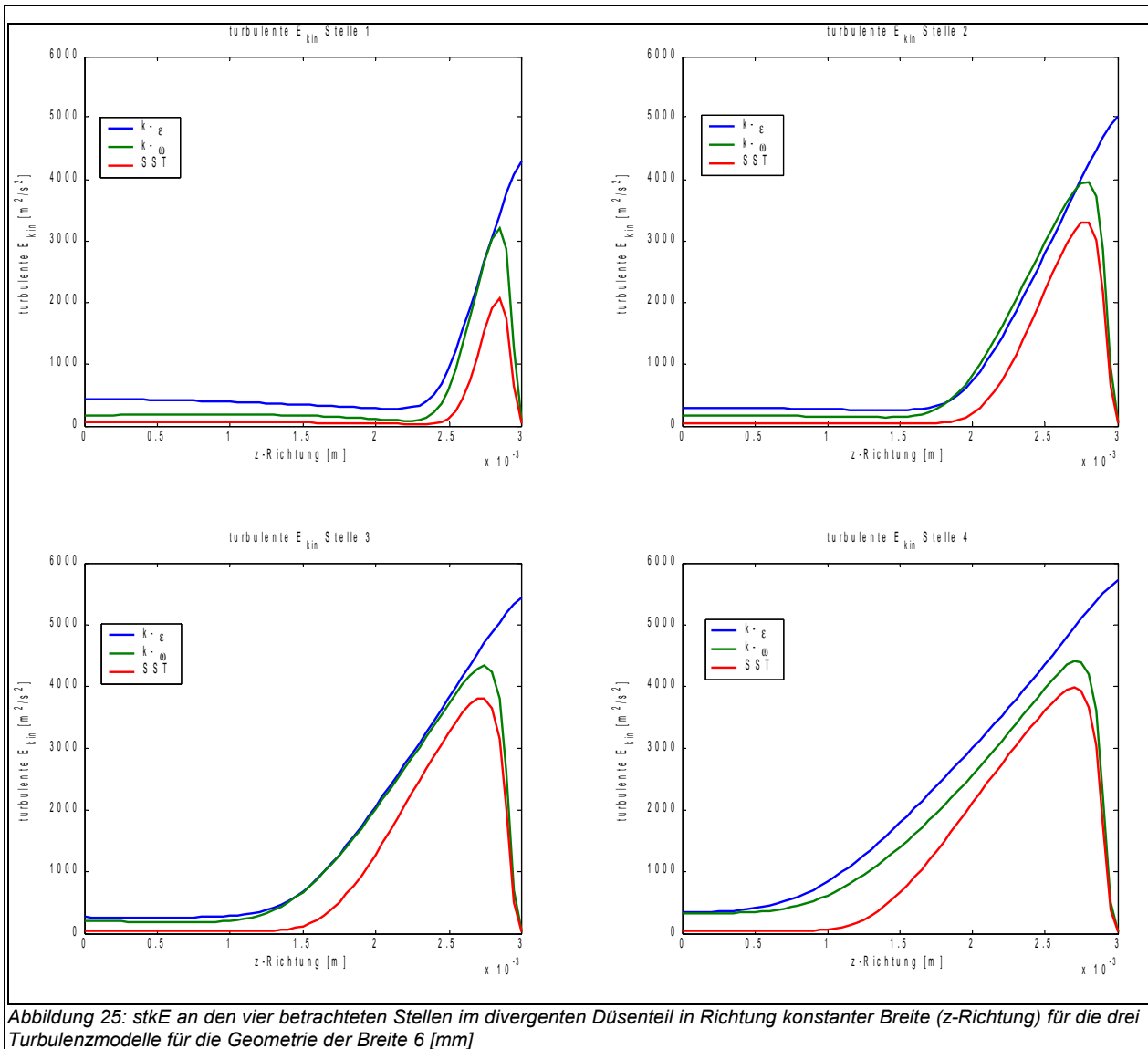
SST					
A_out [m ²]	p_mitte [Pa]	T_mitte[°K]	s_mitte []	p_out [Pa]	Ma_out []
0.000030	257970	837.4	1.64	174353	1.71
0.000030	198029	788.4	3.61	120030	1.93
0.000035	176425	768.6	5.11	101441	2.02

Tabelle 25: Resultate in der Mitte des divergenten Düsentails und am Ausgang in Abhängigkeit der Ausgangsfläche für das SST-Modell; Engster Querschnitt 3x6 [mm]

Es zeigte sich, dass sich durch Variation des Ausgangsquerschnitts beliebige Übersättigungen im divergenten Düsenteil erreichen lassen.

Entlang konstanter Breite

Die st_{kE} in Abbildung 25 in z-Richtung zeigt, dass ihr Anstieg an der Stelle 1 nach fünf Sechsteln beginnt. Stromabwärts an der Stelle 2 nach zwei Dritteln, an der Stelle 3 nach der Hälfte der Breite und an der Stelle 4 nach einem Drittel der Breite, was nach ungefähr $z = 0.001$ [m] ist. Die Werte der st_{kE} nehmen stromabwärts zu.



Fazit

Durch die Verbreiterung der Düse auf sechs Millimeter verkleinert sich der Einfluss der Grenzschicht. Sie lässt der turbulenzunbeeinflussten Strömung mehr Platz. Das Problem, das beim engsten Querschnitt von 3x6 [mm] jedoch besteht, ist, dass der Volumenfluss mindestens 497 [lt/min] betragen muss, damit sich eine Überschallströmung einstellt. Damit gerät man an die Grenzen des machbaren mit der Anlage am PSI. Deshalb wurde der Entscheid gefällt, die definitive Düsengeometrie mit einem engsten Querschnitt von 3x5 [mm] zu gestalten.

5.7.2.) Ergebnisse mit neuer Lavaldüse (fünf Millimeter Breite)

Alle Resultate mit einer Lavaldüse der Breite fünf Millimeter sind im Anhang aufgeführt. Eine allgemeine Beschreibung der Resultate folgt in diesem Kapitel. Zusätzlich noch eine ausführliche Besprechung derjenigen Geometrie, welche von dieser Arbeit als die Beste angesehen wurde.

Entlang der Strömungsrichtung

Als Kriterium ist die Übersättigung, der Druck, die Temperatur in der Mitte des divergierenden Düsentheiles und der Druck und die Machzahl am Ausgang der Düse genommen worden. Die Tabellen 26, 27 und 28 zeigen die Resultate mit den verschiedenen Divergenzwinkeln.

KE					
A_out [m ²]	p_mitte [Pa]	T_mitte [°K]	s_mitte []	p_out [Pa]	Ma_out []
0.000025	249671	837.5	1.58	185419	1.62
0.000030	196048	793.2	3.21	300720	1.28
0.000035	163002	757.2	6.24	270846	1.32
0.000060	69484	624.3	144.04	128628	1.74
0.000080	177494	805.1	2.22	239996	0.76
0.000100	358444	984.1	0.18	384348	0.40

Tabelle 26: Die Temperatur, Druck und Übersättigung in der Mitte und der Druck und die Machzahl am Ende des divergenten Düsentheils bei einer Breite von 5 [mm]; k-ε-Modell

KW					
A_out [m ²]	p_mitte [Pa]	T_mitte [°K]	s_mitte []	p_out [Pa]	Ma_out []
0.000025	269606	846.8	1.42	180757	1.64
0.000030	212368	799.6	3.01	136094	1.85
0.000035	171453	762.2	5.80	100319	2.02
0.000060	78581	641.8	87.70	32069	2.59
0.000080	51969	588.0	438.78	15873	2.86
0.000100	36267	546.5	1919.88	7025	3.11

Tabelle 27: Die Temperatur, Druck und Übersättigung in der Mitte und der Druck und die Machzahl am Ende des divergenten Düsentheils bei einer Breite von 5 [mm]; k-ω-Modell

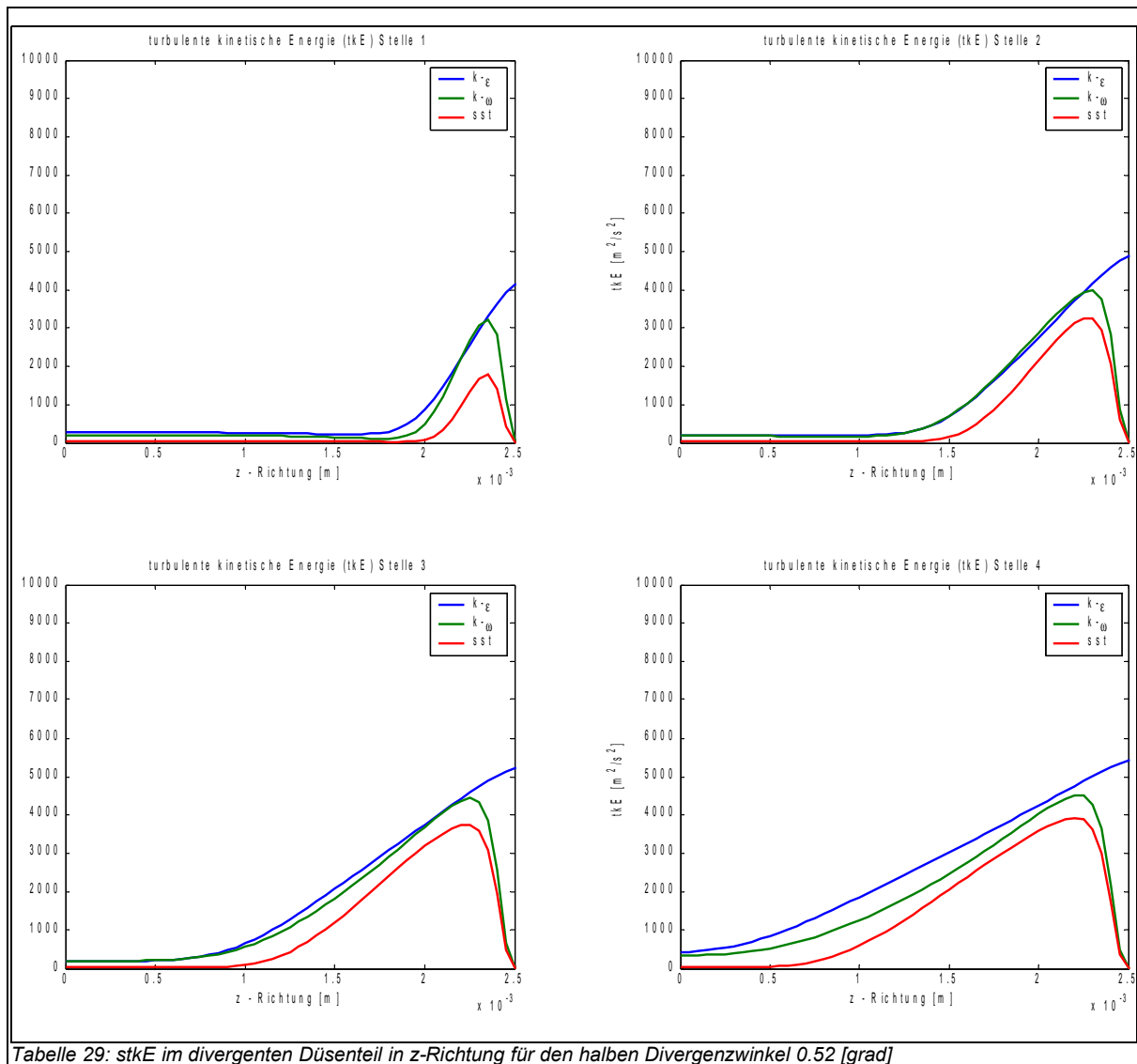
SST					
A_out [m ²]	p_mitte [Pa]	T_mitte [°K]	s_mitte []	p_out [Pa]	Ma_out []
0.000025	265262	842.9	1.51	183368	1.68
0.000030	201686	793.3	3.29	124292	1.90
0.000035	161181	754.9	6.53	89537	2.08
0.000060	77747	639.8	92.84	30215	2.62
0.000080	50630	583.8	508.68	13984	2.93
0.000100	35608	544.0	2123.29	5793	3.18

Tabelle 28: Die Temperatur, Druck und Übersättigung in der Mitte und der Druck und die Machzahl am Ende des divergenten Düsentheils bei einer Breite von 5 [mm]; SST-Modell

Die Übersättigung in der Mitte des divergenten Düsentails nimmt bei den grössten zwei Querschnitten befriedigende Werte an. Insbesondere beim grössten gewählten Ausgangsquerschnitt. Bei den grössten zwei Ausgangsquerschnitten liefert jedoch das $k\text{-}\epsilon$ -Modell unstetige Lösungen, das heisst, dass die Strömung nach rund einem Drittel des divergenten Düsentail zurück in eine Unterschallströmung fällt. Ausserdem zeigt die Betrachtung der $stkE$, dass die Strömung zugleich komplett turbulent wird. Ab einem Ausgangsquerschnitt von grösser als 5×6 [mm] zeigt sich beim $k\text{-}\epsilon$ -Modell auch schon ein ähnlicher Effekt, jedoch fällt die Strömung nicht in den Unterschallbereich zurück, sondern bleibt im Überschallbereich. Die Strömung ist hier charakterisiert mit einer abnehmenden Machzahl und Übersättigung und mit einer zunehmender Temperatur und zunehmenden Druck gegen Ende der Düse.

Entlang konstanter Breite

Die Beobachtung der 4 Stellen zeigt, dass sich die $stkE$ stromabwärts entlang der Wand vergrössert. Nach einem Viertel des divergenten Düsentails sind erste Ansätze von Turbulenz vorhanden. Die $stkE$ nimmt hier rund ein Fünftel der Breite in Anspruch. Weiter stromabwärts an der Stelle 2 hat sich der Einfluss etwas vergrössert. Hier beansprucht sie rund zwei Fünftel in der Breite. An der Stelle 3 nimmt sie rund drei Fünftel und an der Stelle 4 rund vier Fünftel in Anspruch. Interessant ist, dass die maximalen Werte der $stkE$ an den drei letzten Stellen ungefähr gleich gross sind. In Abbildung 29 ist die $stkE$ für die Lavaldüse mit dem kleinsten Divergenzwinkel dargestellt.



Entlang variierender Breite

In der Höhe zeigt sich, dass die Turbulenz eine unkritische Dimension einnimmt. Diese Aussage lässt sich für alle Divergenzwinkel machen. Die Einflüsse bei den einzelnen Geometrievarianten sind jedoch separat zu betrachten. Für eine vollständige Darstellung der Resultate wird auf den Anhang verwiesen.

Einfluss der Turbulenzmodelle

Die Wahl des Turbulenzmodelles scheint nicht unwichtig zu sein. Ab einem halben Divergenzwinkel von 0.78 [grad] ist eine Diskrepanz des $k-\epsilon$ -Modells zu den beiden anderen feststellbar. Die Strömung wird im divergenten Düsenteil, etwa ab der Hälfte (je grösser der Winkel desto früher), komplett turbulent, und

damit auch nicht mehr weiter beschleunigt. Bei den kleineren Divergenzwinkeln ist die Strömung immer noch im Überschallbereich, ab einem halben Divergenzwinkel von 3.37 [grad] fällt sie jedoch in der Unterschallbereich zurück. Die beiden anderen Turbulenzmodelle, k - ω -Modell und das SST-Modell, liefern aber weiterhin ähnliche Resultate. Da das SST-Turbulenzmodell aufgrund der Formulierung als bestes angesehen werden kann, kann man sich getrost auf dieses verlassen.

Fazit

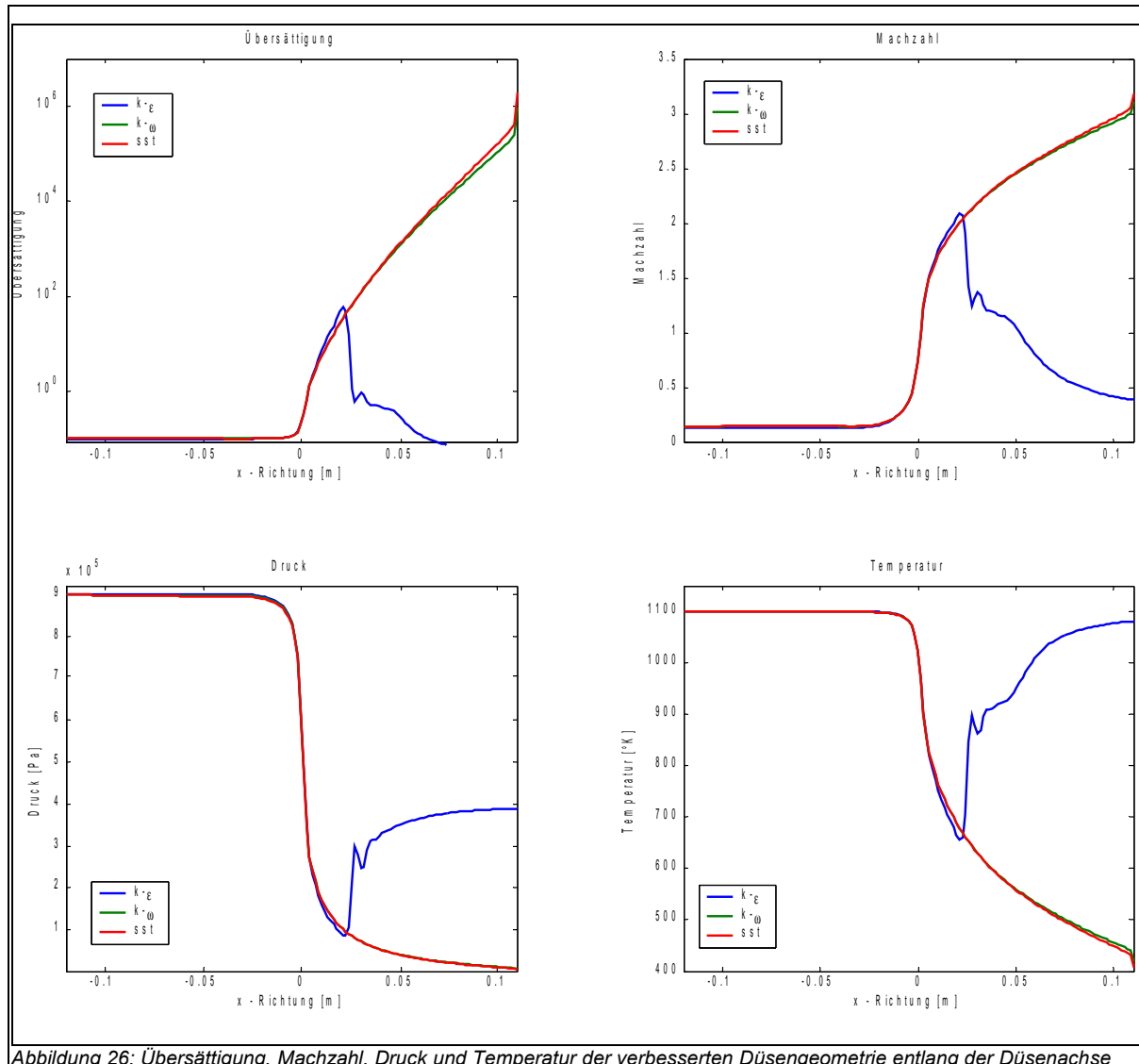
Die Düsengeometrie mit einer Breite von 5 [mm] liefert ebenfalls befriedigende Resultate bezüglich der Entwicklung der Turbulenz stromabwärts in z -Richtung. Der Einfluss der $stkE$ als Indikator für die turbulente Grenzschicht ist verglichen mit der Originalgeometrie etwas kleiner geworden. Im Vergleich mit einer Düse der Breite 6 [mm] jedoch immer noch grösser. Betrachtet man die minimalen Volumenflüsse für die Düsen mit den Breiten 4 [mm], 5 [mm] und 6 [mm] so ergeben sich Werte von 441 [lt/min], 427 [lt/min] und 496 [lt/min]. Mit einer Geometrie der Breite 6 [mm] liegt man somit an der Grenze der experimentellen Machbarkeit. Dies ist ein Grund, warum man sich für eine Geometrie der Breite 5 [mm] entschieden hat.

Für die Wahl des halben Divergenzwinkels der Düse ist die Übersättigung von Zink auf der Düsenachse der wichtigste Anhaltspunkt. Da die Übersättigung beim grössten Divergenzwinkel erwartungsgemäss am grössten ist, entschied man sich vorläufig für diese Geometrie. Im nächsten Abschnitt sind die Resultate für diese Geometrie ausführlich dokumentiert und beschrieben.

5.7.3.) Verbesserte Düsengeometrie

In diesem Abschnitt ist die vorläufige Wahl der Düsengeometrie ausführlich beschrieben. Es handelt sich hier um die Geometrie mit einer konstanten Breite von 5 [mm] und mit einem halben Divergenzwinkel von 4.39 [grad]. Diese Geometrie ist der verbesserte Vorschlag dieser Arbeit. Aufgrund dieser Resultate wird das PSI weitere Abklärungen machen, um dann eine endgültige Fertigung der Geometrie in Auftrag zu geben. Die Betrachtung der Resultate erfolgt wiederum in drei Schritten.

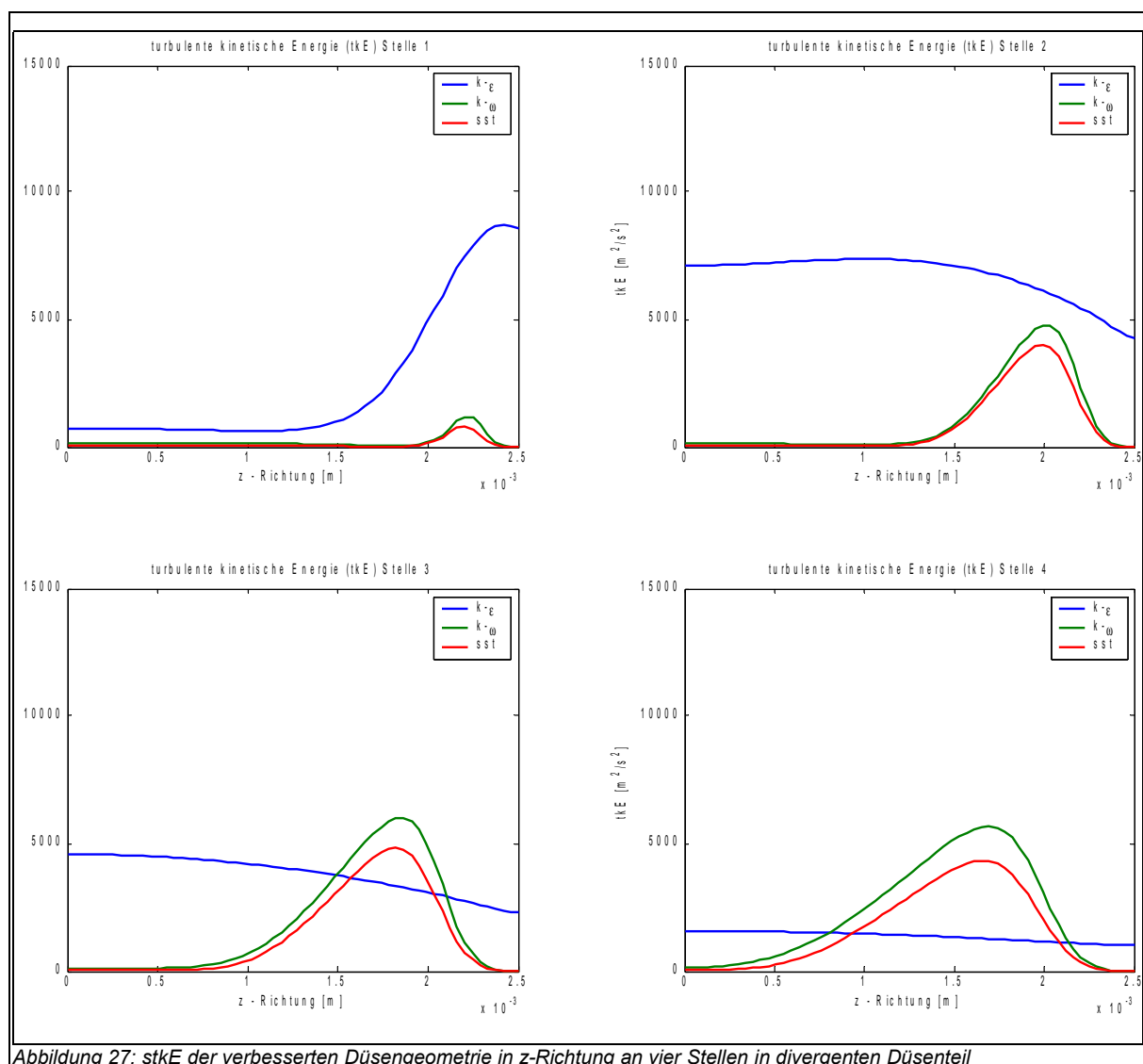
Entlang der Strömungsrichtung



Erneut ist die Diskrepanz des k - ϵ -Modells gegenüber den beiden anderen Turbulenzmodellen gut sichtbar. Besonderer Beobachtung in der Abbildung 26 gilt der Übersättigung. Sie erreicht im divergenten Düsenteil Werte zwischen 1 und 1000000. Dies sind hohe Werte und lassen eine Nukleation von Zink im divergenten Düsenteil im Experiment erwarten. Die Machzahl verdeutlicht, dass die Strömung konstant beschleunigt wird. Gegen Düsenausgang hin erreicht die Strömung grosse Machzahlen, welche um 3 liegen. Bei Beobachtung des Drucks wird festgestellt, dass am Düsenausgang kleine Werte erreicht werden. Die Werte liegen bei rund einem Zehntel des Atmosphärendrucks. Auch die Temperatur ist stark abnehmend und liegt am Düsenausgang bei den wandstarken Turbulenzmodellen bei rund 450 [°K].

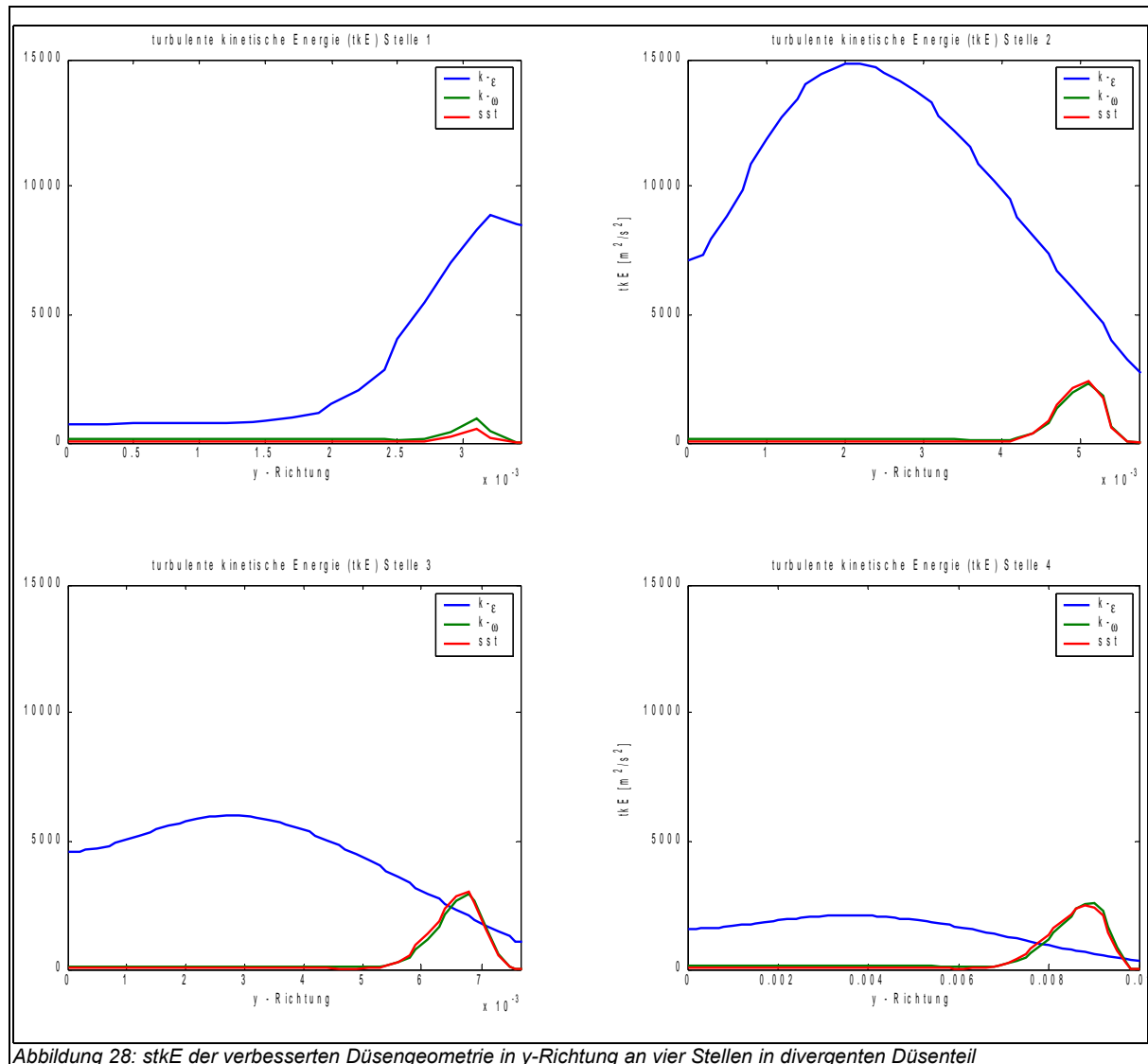
Entlang konstanter Breite

Die $stkE$ in Abbildung 27 im divergenten Düsenteil zeigt die Diskrepanz des $k-\epsilon$ -Modell gegenüber den anderen Turbulenzmodellen erneut. Zudem wird ersichtlich, dass die Strömung dabei komplett turbulent wird. Das SST-Modell und das $k-\omega$ -Modell verhalten sich ähnlich. An der Stelle 1 ist ein kleiner Anstieg von Turbulenz ersichtlich. An der Stelle 2 hat sich die $stkE$ vergrößert und nimmt auch mehr Platz in der Breite in Anspruch. An den Stellen 3 und 4 bleibt die $stkE$ in ihrem Wert etwa gleich gross wie an Stelle 2, jedoch verschiebt sich der Beginn des Anstiegs schrittweise um einen halben Millimeter in Richtung Düsenzentrum. Weiter kann beobachtet werden, dass sich die turbulente Grenzschicht an der Stelle 3 und insbesondere an der Stelle 4 von der Wand löst.

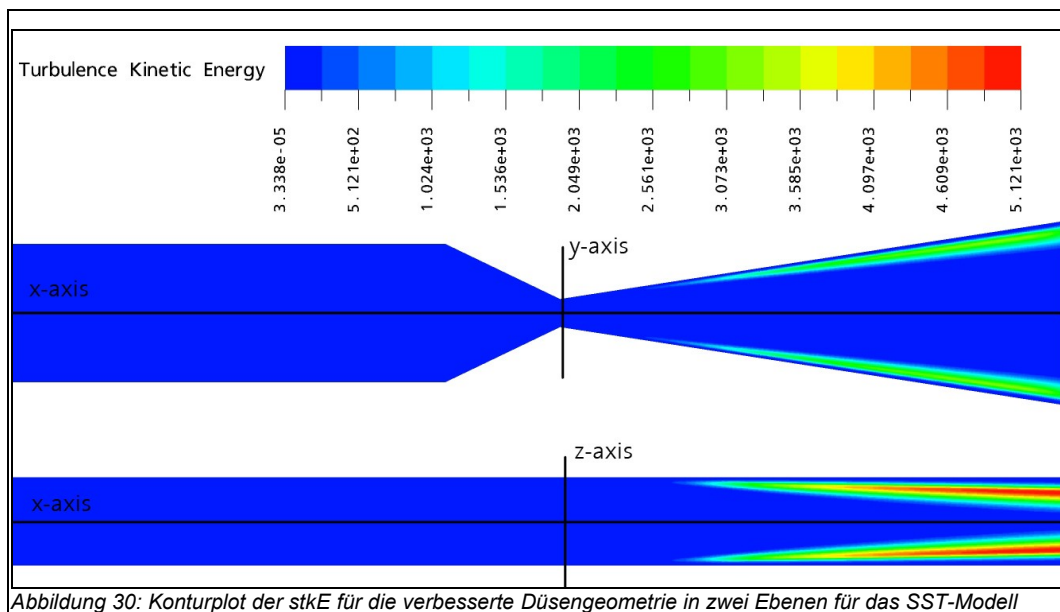
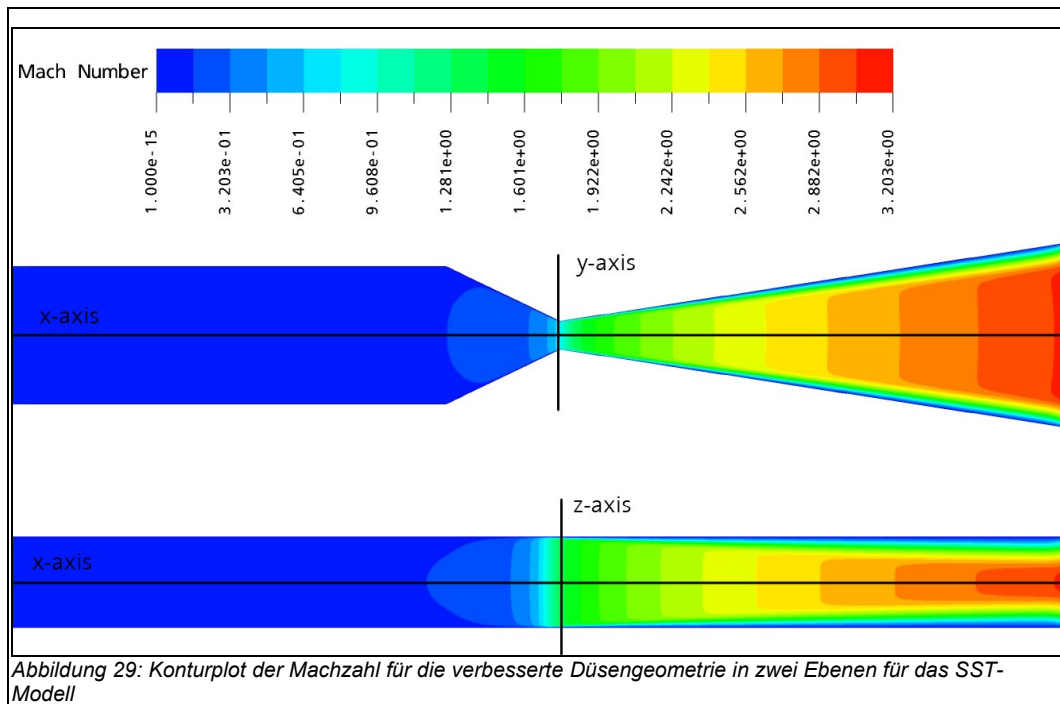


Entlang variierender Höhe

In y-Richtung in Abbildung 28 zeigt sich ein völlig anderes Bild als in z-Richtung bei Beobachtung der stKE. Die Werte der stKE für das $k-\omega$ -Modell und das SST-Modell sind ähnlich und klein. Die räumliche Ausdehnung der Turbulenz in dieser Richtung hat rund einen Wert von 2 bis 3 [mm] und ist damit auf eine Gesamthöhe von maximal 10 [mm] gerechnet klein (halbe Düsenhöhe).

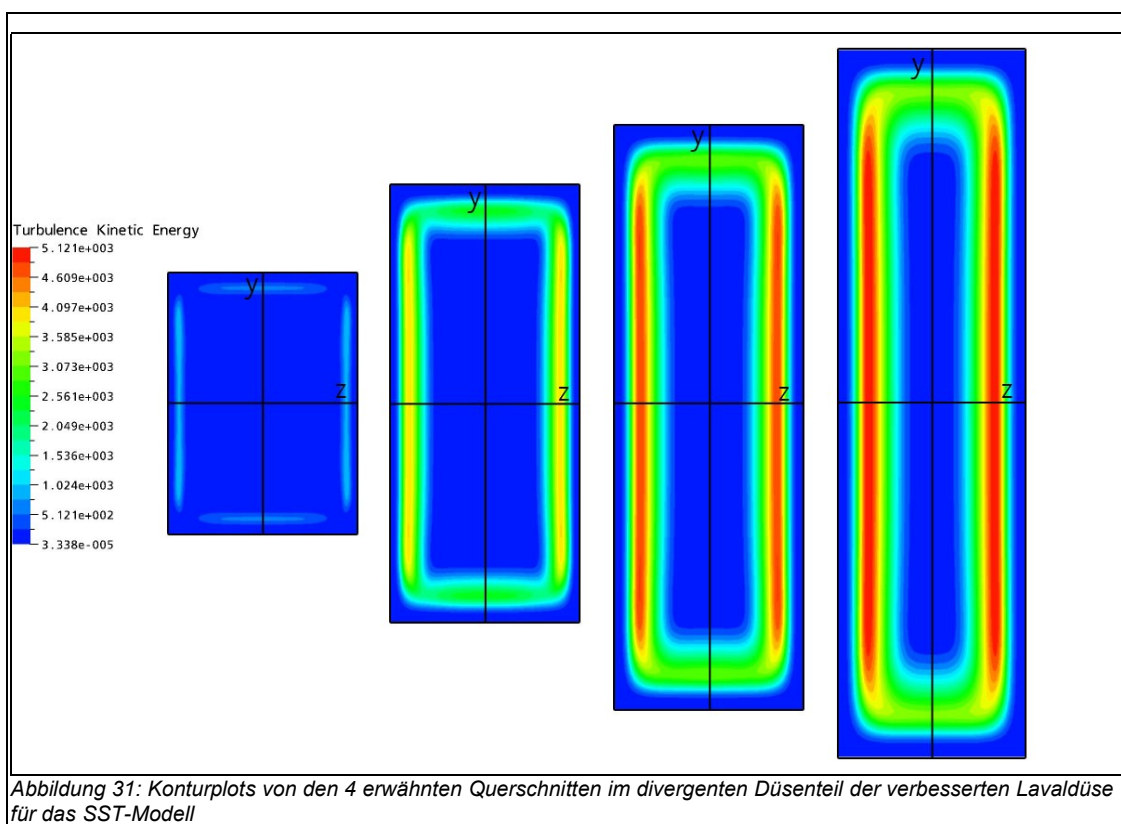


Die Abbildungen 29 und 30 zeigen Konturplots der Machzahl und der stKE in zwei Ebenen der Düse. Dargestellt ist das SST-Modell. In z-Richtung und in y-Richtung sind die Dimensionen gestreckt.



Gut ersichtlich bei der Beobachtung in Abbildung 30 der stKE ist der unterschiedliche Einfluss der Turbulenz. Während die stKE in y-Richtung nur einen kleinen Dimensionsanspruch hat, ist dieser in z-Richtung grösser. Allerdings hat sich der Einfluss der turbulenten Grenzschicht stromabwärts gegenüber der Originalgeometrie verbessert, sprich verkleinert.

Abbildung 31 zeigt vier Querschnitte der verbesserten Düsengeometrie im divergenten Düsenteil und zwar nach den Längen $x = 0.025$ [m] (Stelle 1), $x = 0.055$ [m] (Stelle 2), $x = 0.08$ [m] (Stelle 3) und $y = 0.11$ [m] (Stelle 4). Dies wiederum für das SST-Modell. Dabei verdeutlicht sich noch einmal, dass die $stkE$ als Indikator für die turbulente Grenzschicht erst gegen Düsenausgang grosse Werte annimmt, respektive dass der Bereich der turbulenzunbeeinflussten Strömung stark verkleinert wird. An der Stelle 1 (das erste Bild von links nach rechts (v.l.n.r)) ist wie schon gesehen nur ein Ansatz von Turbulenz vorhanden, welcher sich an der Stelle 2 (2. Bild v.l.n.r) etwas vergrössert. Erst gegen Düsenausgang ist der Einfluss auf die Dimension der Turbulenz deutlich grösser – nicht aber auf die Grösse der Werte, wozu die Abbildung 31 verleiten würde. Dies ist ein Grund dafür, dass Konturplots nur spärlich in der Arbeit vorhanden sind.



Flächenminimierung durch turbulente Grenzschicht

Zum Schluss der Untersuchung für die verbesserte Düsengeometrie geht es darum, eine Aussage über die Grösse der turbulenzunbeeinflussten Strömung zu machen. Für eine rechteckige Geometrie ist dies etwas schwerer als für eine axialsymmetrische, da man pro Querschnitt zwei Freiheitsgrade hat. Es sind dies in diesem Falle die z -Richtung und die y -Richtung, während dem man im axialsymmetrischen Falle nur einen Radius hat.

Man entschied sich, diese Dimension über eine Beziehung aus der Theorie der kompressiblen Strömungen zu errechnen. Es wird dabei auf Gleichung 28 zurückgegriffen.

$$\frac{A(x)}{A_2} = \frac{1}{Ma(x)} \left(1 + \frac{\gamma-1}{\gamma+1} (Ma^2(x) - 1) \right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}} \quad (77)$$

Dabei ist A_2 der engste Querschnitt der Düse und $A(x)$ der jeweilige sich aus $Ma(x)$ ergebende Querschnitt für die turbulenzunbeeinflusste Strömung. Für den Adiabatenkoeffizient muss noch folgende Rechnung gemacht werden.

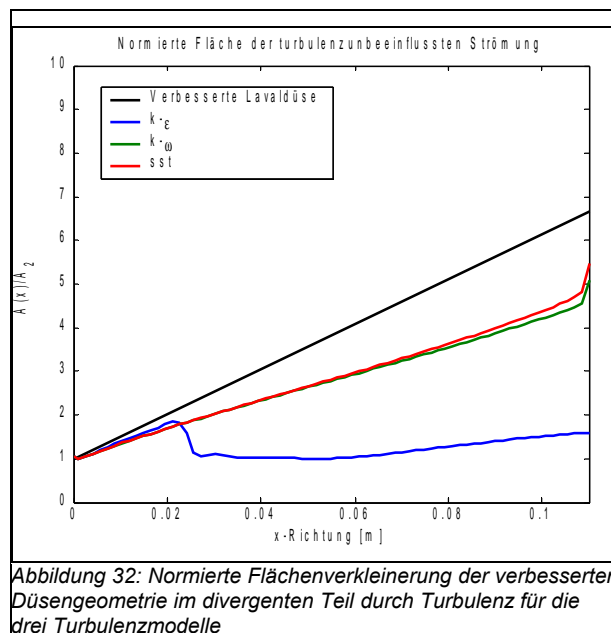
$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} = \frac{c_p}{c_p - R} \quad (78)$$

$$c_p = \sum_{i=1}^N y_i c_{p,i} \quad (79)$$

Die Werte für y_{zink} und $y_{\text{Stickstoff}}$ sind bekannt aus der Rechnung mit der neuen Übersättigung. Die spezifischen Wärmekapazitäten werden entnommen aus den Stoffdaten. Damit ergibt sich für den Adiabatenkoeffizient:

Adiabatenkoeffizient γ_{Mix} : 1.368 []

Die Abbildung 32 zeigt die Flächenverkleinerung durch die Turbulenz für die drei Turbulenzmodelle im divergenten Düsenteil.



Es zeigt sich, dass die Fläche der turbulenzunbeeinflussten Strömung mit dieser Methode rund 80% der effektive Düsenquerschnittsfläche ausmacht. Dies ist eine bequeme Möglichkeit die Flächenminimierung zu berechnen. Wird ein qualitativer Vergleich mit den Konturplots gemacht, so kann gesagt werden, dass man mit dieser Variante eher eine progressive Flächenminimierung als eine konservative hat. Diese Aussage ist basierend auf der Beobachtung der Abbildung 31, wo festgestellt werden kann, dass die stkE als Indikator

für die turbulente Grenzschicht an der Stelle 4 mehr als die Hälfte des Querschnitts beansprucht. Es ist allerdings zu erwähnen, dass es äusserst schwierig ist, die Dimension der turbulenzunbeeinflussten Strömung zu errechnen und Kriterien dafür auszuarbeiten.

Fazit

Mit der verbesserten Düsengeometrie werden deutlich bessere Werte der Übersättigung erreicht. Damit lässt sich im Experiment eine Nukleation erwarten.

Der Einfluss der turbulenten Grenzschicht hat sich mit einem Wechsel der Breite von 4 [mm] auf 5 [mm] etwas verkleinert. In der y-Richtung ist die stk_E klein, und beeinflusst die Strömung kaum.

6.) Zusammenfassung

Zusammenfassend können folgende Beobachtungen und Schlussfolgerungen gemacht werden.

Die geplante Düsengeometrie von PSI lieferte äusserst unbefriedigende Resultate bezüglich der Übersättigung von Zink im divergenten Düsenteil sowie des Einflusses der turbulenten Grenzschicht in z-Richtung der Düse. Der Einfluss gegen Düsenausgang hin war gross und deswegen entschloss man sich, eine Düsenoptimierung respektive Neugestaltung zu realisieren.

Während der Düsenoptimierungsphase zeigte sich, dass das geometrische Verbesserungsfenster stark eingeschränkt ist. Die Übersättigung von Zink lässt nur einen relativ stark divergierende Lavaldüse zu. Weiter ist der Volumenstrom in die Düse experimentell beschränkt, was die Gestaltung der Düsenbreite einschränkte. Es wurden viele Geometrien untersucht und mit der gewählten Düsengeometrie wurden doch Verbesserungen erzielt.

Die verbesserte Düsengeometrie erreicht deutlich bessere Werte der Übersättigung von Zink, was eine Nukleation im Experiment des PSI erwarten lässt. Der Einfluss der turbulenten Grenzschicht konnte durch eine Verbreiterung verkleinert werden, was einen grösseren Bereich der turbulenzunbeeinflussten Strömung zulässt.

6.1.) Ausblick

Die Wahl des PSI für meine in der Arbeit optimierte Düse ist noch nicht endgültig. Wie schon erwähnt müssen noch weitere Simulationen gemacht werden. Besonders im Beobachtungsfeld ist dabei der Druck gegen Düsenausgang hin. Da dieser in meinen Überschallsimulationen am Düsenausgang bei rund einem Zehntel des Atmosphärendrucks liegt, ist in der Realität mit einem senkrechten Verdichtungsstoss in der Düse zu rechnen. Damit wird garantiert, dass auch die Druckrandbedingung am Düsenausgang in der Simulation übereinstimmt mit dem Experiment. Die nächsten Schritte vom PSI werden nun sein, die Position dieses Verdichtungsstosses über Simulationen, falls dies mit ANSYS CFD überhaupt möglich ist, herauszufinden. Damit wird schliesslich festgelegt, ob diese verbesserte Lavaldüse den Anforderungen genügt.

7.) Dank

Ich bedanke mich bei Hansrudolf Tschudi vom PSI für die Möglichkeit, meine Bachelorarbeit unter seiner Aufsicht schreiben zu können. Die Zusammenarbeit war sehr fruchtbar, und unser wöchentliches Meeting war immer äusserst konstruktiv.

Meinem Betreuer Hansmartin Friess danke ich für die kompetente Betreuung in Fragen rund um das Programm CFX und im Bereich der Arbeit sowie für die Zeit, welche er sich jeweils für meine Fragen, Ideen und Anregungen genommen hat. Es war eine sehr interessante Zusammenarbeit.

Ein Dank geht an die Professur von Prof. Dr. Aldo Steinfeld für erneuerbare Energieträger am Institut für Energietechnik. Während der Arbeit hatte ich einen festen Platz zum Arbeiten an der ETH zur Verfügung gestellt bekommen, welchen ich uneingeschränkt benutzen konnte.

8.) Quellenverzeichnis

- [1] „CFD Analysis of Heat Transfer in a De Laval Nozzle for Zinc Particle Production“ Project Final Report, David P. Brown
- [2] „Manual“ ANSYS CFX 10.0
- [3] „Turbulenzmodelle“ Vorlesung Numerik II TU Wien
www.fluid.tuwien.ac.at/lehre/302.043/Numerik_II_11_1.pdf
Stand Juni 2006
- [4] „CFD in der Misch- und Reaktionstechnik“ Vorlesung Universität Dortmund, WS 2004/2005
www.bci.uni-dortmund.de/tcb-new/en/index.php?option=com_docman&task=doc_download&gid=91
Stand Juni 2006
- [5] „Fluiddynamik I“, Vorlesung ETH Zürich, WS 2005/2006
Skript von Prof. Dr. Thomas Rösgen
Stand Juni 2005
- [6] „Vergleich von Strahlungs- und Turbulenzmodellen zur Modellierung von Lichtbögen in SF6 - Selbstblasleitungsschalter“, Dissertation von Diplomingenieur Carsten Lüders, Essen an der Technischen Hochschule Aachen
Stand Juni 2006
- [7] „Fluiddynamik II“ Vorlesung ETH Zürich WS 2005/2007
Skript von Prof. Dr. Leonard Kleiser
Stand März 2006
- [8] Stoffdaten aus Chemical Properties Handbook online ; Knovel Library
www.knovel.com/knovel2/Toc.jsp?SpaceID=10093&BookID=49
Stand Juli 2006
- [9] FORTRAN – Programm von Hansmartin Friess zur Generierung von .cfx5-Files
- [10] „Statistical Mechanics“ Kerson & Huang, John Wiley & Sons, New York 1963
- [11] Stoffdaten Zink von Wikipedia.de
www.de.wikipedia.org/wiki/zink
Stand Juli 2006
- [12] „Thermodynamics III“ Vorlesung ETH Zürich WS 2005/2006
Skript von Prof. Dr. Aldo Steinfeld
Stand März 2006

9.) Anhang

9.1.) MATLAB-Programme (.m-files)

Kommentare stehen hinter dem Prozentzeichen %.

9.1.1.) Gittergenerierung

Axialsymmetrische Geometrie, kubisches Gitter

```
%Äquivalenter Radius für Fläche annehmen
%In der Matrix P stehen alle Gitterpunkte einzeln auf Zeilen!
%Erste Spalte ist der Gitterplatz in Duesenrichtung
%Zweite Spalte ist der Gitterplatz senkrecht zur Duesenrichtung
%Dritte Spalte ist der jeweilige Koordinatenwert in Duesenrichtung
%Vierte Spalte ist der jeweilige Koordinatenwert senkrecht zur
%Duesenrichtung

%Auflösung in Duesenachse (x-Achse) (Teilbar durch 6)
n=180;
%Auflösung senkrecht zur Duesenachse (z-Achse) (Teilbar durch 3)
m=72;

%Bilde Vektor in x-Achsen-Richtung ; Intervall von [-0.12.....0.11]
%Es entstehen so drei Intervalle: [-0.12...-0.025]; [-0.025....0] ; [0...0.11]
%Laenge Intervall 1
x1=0.12-0.025;
%Laenge Intervall 2
x2=0.025;
%Laenge Intervall 3
x3=0.11;

%Bilde Vektor in Duesenachse
x=zeros((n+1),1);

%Intervall 1 und 2 haben je ein Viertel der Datenpunkte zur Verfügung,
%Intervall 3 hat die Hälfte der Datenpunkte zur Verfügung
n1=n/6;
n2=n/6;
n3=2*n/3;

%Abstände in den einzelnen Intervallen
d1=x1/n1;
d2=x2/n2;
d3=x3/n3;

% Fülle den Vektor x mit den axialen Abständen
for i=1:n1,
    x(i)=-0.12 + (i - 1)*d1;
end
for j=(n1+1):(n1+ n2),
    x(j)=-0.025 + (j - (n1 + 1))*d2;
end
for k=(n1 + n2 + 1):(n1 + n2 + n3),
    x(k)=0 + (k - (n1 + n2 + 1))*d3;
end
x(n+1)=0.11;
```

```
% Mache in jedem Intervall die Wandfunktion
xx1=x(1:n1+1);
xx2=x(n1+1:n1+n2+1);
xx3=x(n1+n2+1:n+1);

%Wandfunktionen
f1=0.0050463;
f2=(0.0050463-0.0022568)/(xx2(1)-xx2(n2+1))*xx2 + 0.0050463 - (0.0050463-
0.0022568)/(xx2(1)-xx2(n2+1)) * xx2(1);
f3=(0.0022568-0.0028768)/(xx3(1)-xx3(n3+1))*xx3 + 0.0022568;

% Mache Gitterpunkte senkrecht zu x-Achse
m1=m/3;
m2=m/3;
m3=m/3;

%horizontaler einlauf
G=zeros(n,m+1);
for i=1:n1,
    for j=1:m1,
        G(i,j)=(f1/2)/(m1)*(j-1);
    end
    for j=1:m2,
        G(i,j+m1)=f1/2+(2*f1/6)/m2*(j-1);
    end
    for j=1:m3+1,
        G(i,j+m1+m2)=5*f1/6+(f1/6)/m3*(j-1);
    end
end

%Verengung
for i=1:n2,
    for j=1:m1,
        G(i+n1,j)=(f2(i)/2)/(m1)*(j-1);
    end
    for j=1:m2,
        G(i+n1,j+m1)=f2(i)/2+(2*f2(i)/6)/m2*(j-1);
    end
    for j=1:m3+1,
        G(i+n1,j+m1+m2)=5*f2(i)/6+(f2(i)/6)/m3*(j-1);
    end
end

%Entspannung
for i=1:n3+1,
    for j=1:m1,
        G(i+n1+n2,j)=(f3(i)/2)/(m1)*(j-1);
    end
    for j=1:m2,
        G(i+n1+n2,j+m1)=f3(i)/2+(2*f3(i)/6)/m2*(j-1);
    end
    for j=1:m3+1,
        G(i+n1+n2,j+m1+m2)=5*f3(i)/6+(f3(i)/6)/m3*(j-1);
    end
end

% Matrix P mit jeweils Koordinaten drin!
P=zeros(m*n,4);
for i=1:n1,
```



```

    for j=1:m+1,
        P(j+(m+1)*(i-1),:)= [i,j,xx1(i),G(i,j)];
    end
end

%Jetzt sind wir bei Zeile n1*(m+1)
for i=1:n2,
    for j=1:m+1,
        P((n1*(m+1)) + j + (m + 1)*(i-1),:)= [i+n1,j,xx2(i),G(i+n1,j)];
    end
end

%jetzt sind wir bei Zeile (n1+n2)*(m+1)
for i=1:n3+1,
    for j=1:m+1,
        P((n1+n2)*(m+1) + j + (m + 1)*(i - 1),:)= [i+n1+n2,j,xx3(i),G(i+n1+n2,j)];
    end
end
end

```

Rechteckige Geometrie, kubisches Gitter

```

%In der Matrix P stehen alle Gitterpunkte einzeln auf Zeilen!
%Erste Spalte ist der Gitterplatz in Duesenrichtung
%Zweite Spalte ist der Gitterplatz senkrecht zur Duesenrichtung
%Dritte Spalte ist der jeweilige Koordinatenwert in Duesenrichtung
%Vierte Spalte ist der jeweilige Koordinatenwert senkrecht zur Duesenrichtung
clc;
clear;

%Auflösung in Duesenachse (x-Achse) (Teilbar durch 6)
n=150;

%Auflösung senkrecht zur Duesenachse (z-Achse) (Teilbar durch 3)
m=60;

%Halbe Hoehe am Duesenausgang
aa=0.00325;

%Halbe Breite der Duese
zz=0.003;

%Winkel machen
alpha=atan((aa -0.0015)/0.11)*180/pi;
alpha_rad=pi/180*alpha;

%Bilde Vektor in x-Achsen-Richtung ; Intervall von [-0.12.....0.11]
%Es entstehen so drei Intervalle: [-0.12...-0.025]; [-0.025....0] ; [0...0.11]
%Laenge Intervall 1
x1=0.12-0.025;
%Laenge Intervall 2
x2=0.025;
%Laenge Intervall 3
x3=0.11;

%Bilde Vektor in Duesenachse
x=zeros((n+1),1);

%Intervall 1 und 2 haben je ein Viertel der Datenpunkte zur Verfügung,
%Intervall 3 hat die Haelfte der Datenpunkte zur Verfuegung
n1=n/6;

```

```

n2=n/6;
n3=2*n/3;

%Abstaende in den einzelnen Intervallen
d1=x1/n1;
d2=x2/n2;
d3=x3/n3;

% Bilde Vektor x mit den Punkten in Stroemungsrichtung
for i=1:n1,
    x(i)=-0.12 + (i - 1)*d1;
end
for j=(n1+1):(n1+ n2),
    x(j)=-0.025 + (j - (n1 + 1))*d2;
end
for k=(n1 + n2 + 1):(n1 + n2 + n3),
    x(k)=0 + (k - (n1 + n2 + 1))*d3;
end
x(n+1)=0.11;

%Mache in jedem Intervall die Wandfunktion
xx1=x(1:n1+1);
xx2=x(n1+1:n1+n2+1);
xx3=x(n1+n2+1:n+1);

f1=0.0075;
f2=(0.0075-0.0015)/(xx2(1)-xx2(n2+1))*xx2 + 0.0075 - (0.0075-0.0015)/(xx2(1)-xx2(n2+1)) *
xx2(1);
f3=tan(alpha_rad)*xx3 + 0.0015;

%Mache Gitterpunkte senkrecht zu x-Achse
m1=m/3;
m2=m/3;
m3=m/3;

%horizontaler einlauf
G=zeros(n,m+1);
for i=1:n1,
    for j=1:m1,
        G(i,j)=(f1/2)/(m1)*(j-1);
    end
    for j=1:m2,
        G(i,j+m1)=f1/2+(2*f1/6)/m2*(j-1);
    end
    for j=1:m3+1,
        G(i,j+m1+m2)=5*f1/6+(f1/6)/m3*(j-1);
    end
end

%Verengung
for i=1:n2,
    for j=1:m1,
        G(i+n1,j)=(f2(i)/2)/(m1)*(j-1);
    end
    for j=1:m2,
        G(i+n1,j+m1)=f2(i)/2+(2*f2(i)/6)/m2*(j-1);
    end
    for j=1:m3+1,
        G(i+n1,j+m1+m2)=5*f2(i)/6+(f2(i)/6)/m3*(j-1);
    end
end
end

```

```
%Entspannung
for i=1:n3+1,
    for j=1:m1,
        G(i+n1+n2,j)=(f3(i)/2)/(m1)*(j-1);
    end
    for j=1:m2,
        G(i+n1+n2,j+m1)=f3(i)/2+(2*f3(i)/6)/m2*(j-1);
    end
    for j=1:m3+1,
        G(i+n1+n2,j+m1+m2)=5*f3(i)/6+(f3(i)/6)/m3*(j-1);
    end
end

%Matrix Pa mit jeweils Koordinaten drin!
Pa=zeros(m*n,4);
for i=1:n1,
    for j=1:m+1,
        Pa(j+(m+1)*(i-1),:)= [i,j,xx1(i),G(i,j)];
    end
end
for i=1:n2,
    for j=1:m+1,
        Pa((n1*(m+1)) + j + (m + 1)*(i-1),:)= [i+n1,j,xx2(i),G(i+n1,j)];
    end
end
for i=1:n3+1,
    for j=1:m+1,
        Pa((n1+n2)*(m+1) + j + (m + 1)*(i - 1),:)= [i+n1+n2,j,xx3(i),G(i+n1+n2,j)];
    end
end

%Breitenvektor generieren
zz=0.003;
breite=zeros(m+1,1);
for j=1:m1,
    breite(j)=(zz/2)/(m1)*(j-1);
end
for j=1:m2,
    breite(j+m1)=zz/2+(2*zz/6)/m2*(j-1);
end
for j=1:m3+1,
    breite(j+m1+m2)=5*zz/6+(zz/6)/m3*(j-1);
end
```

9.2.) Dokumentation der Resultate

In diesem Teil des Anhanges sind von allen Simulationen die jeweiligen Resultate aufgeführt. Es wurde im divergenten Düsenteil 4 Stellen gewählt um in horizontaler und vertikaler Richtung die Machzahl und die spezifische turbulente kinetische Energie zu beobachten. Die erste Betrachtung geschah entlang der Strömungsrichtung.

Eine Achse in der Düsenmitte ist gewählt worden. Sie liegt in der Mitte der Düse von der Breite und der Höhe aus gesehen. Die Koordinaten lauten $y = 0$ [m] und $z = 0$ [m] und in x-Richtung variabel. Im unten angefügten Bild kennzeichnet der violette Pfeil in der Düse diese strömungscharakterisierende Achse.

Um den Einfluss der Turbulenz in der Breite der Düse zu betrachten (z-Richtung) wurden vier Stellen im

divergenten Düsenteil gewählt. Sie liegen auf der Höhe Null der Düse und liegen in x-Richtung an den Stellen $x = 0.025$ [m], $x = 0.055$ [m], $x = 0.08$ [m] und $x = 0.11$ [m]. Auf der Höhe $y = 0$ [m] und jeweils in z – Richtung variabel. Die roten Linien im unten angefügten Bild zeigen die Position dieser Achsen..

Um den Einfluss der Turbulenz in der Höhe der Düse zu betrachten (y-Richtung) wurden wiederum vier Stellen im divergenten Düsenteil gewählt. Sie liegen alle in der Breite Null der Düsen und liegen in x – Richtung an den Stellen $x = 0.025$ [m], $x = 0.055$ [m], $x = 0.08$ [m] und $x = 0.11$ [m]. In der Breite $z = 0$ [m] und in y – Richtung variabel. Die dunkelblauen Linien im unten angefügten Bild zeigen die Position dieser Achsen.

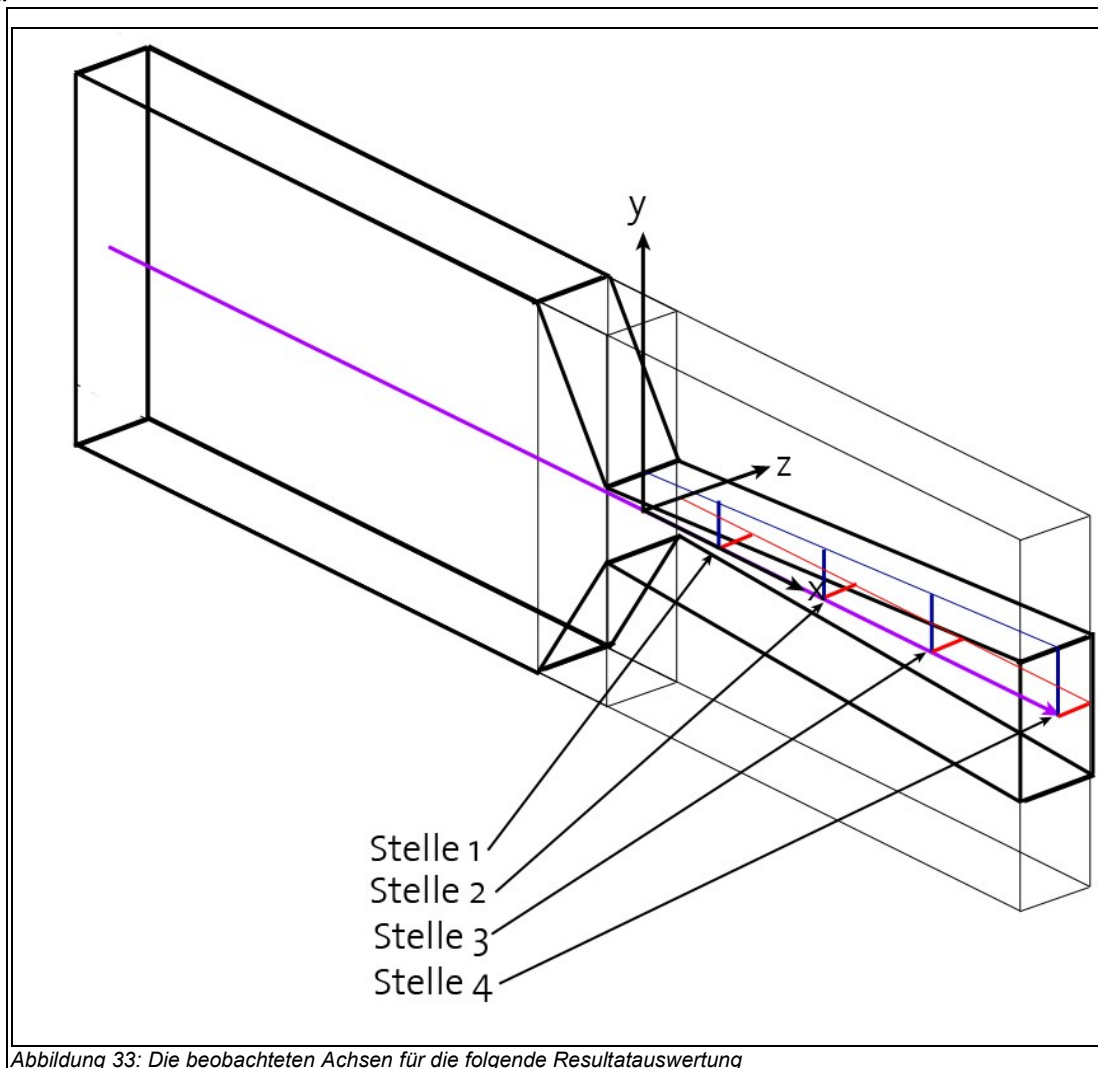


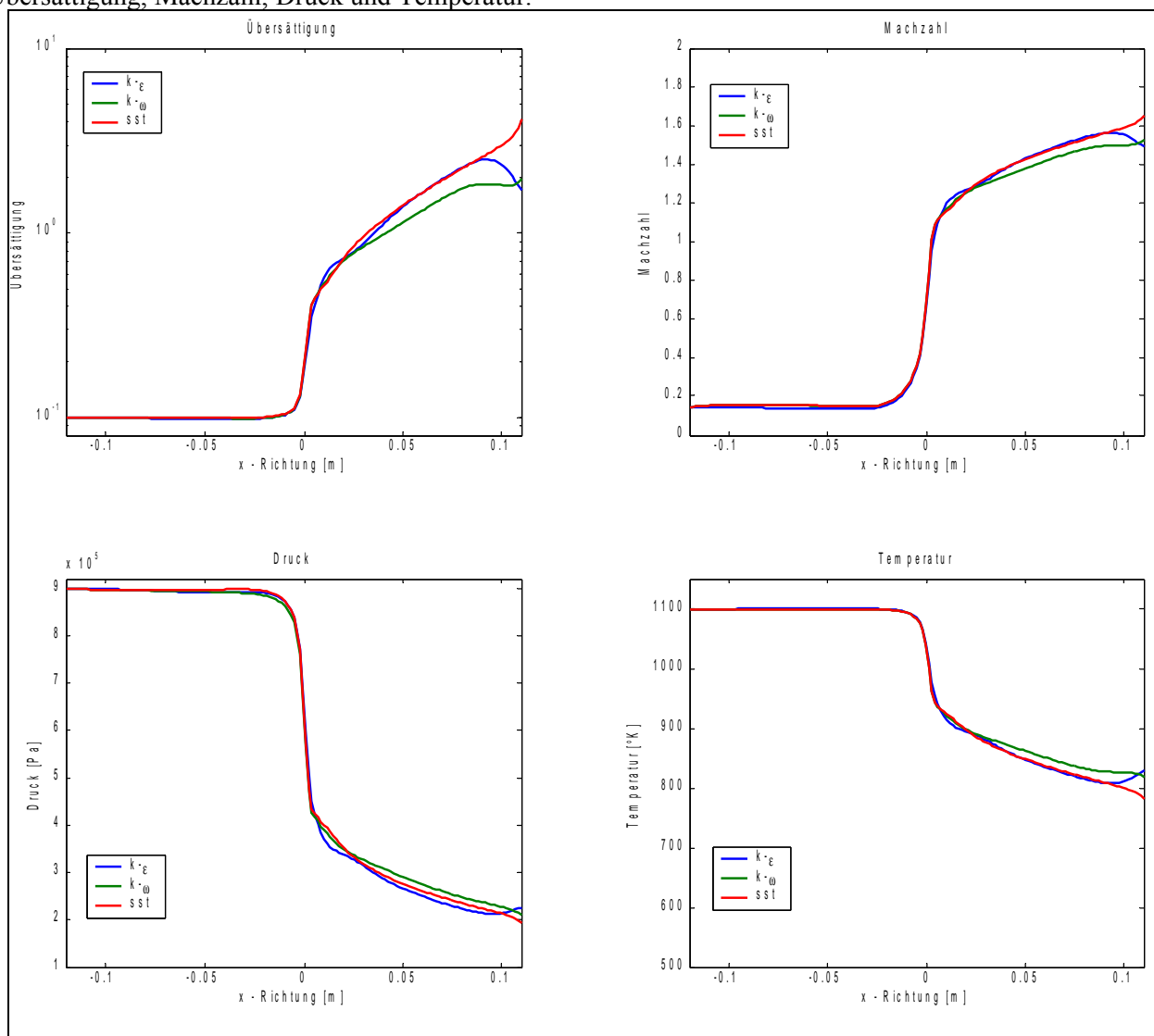
Abbildung 33: Die beobachteten Achsen für die folgende Resultatauswertung

9.2.1.) Lavaldüse 4 x 4 [mm] – Austrittshöhe 0.0065 [m]

Breite: 4 [mm]
Höhe engster Querschnitt: 4 [mm]
Höhe am Austritt: 0.0065 [m]

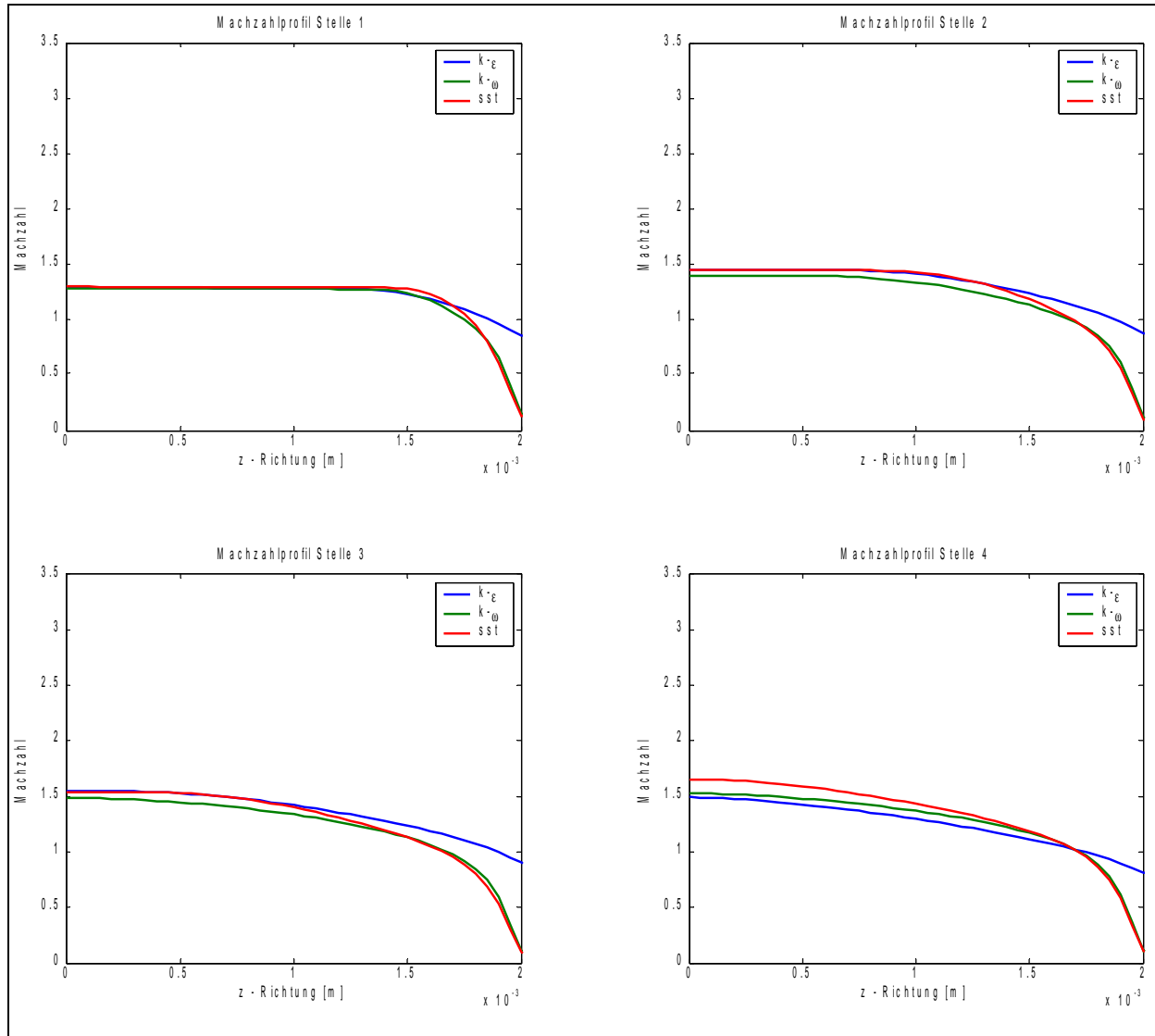
Auswertung Düsenachse

Übersättigung, Machzahl, Druck und Temperatur.

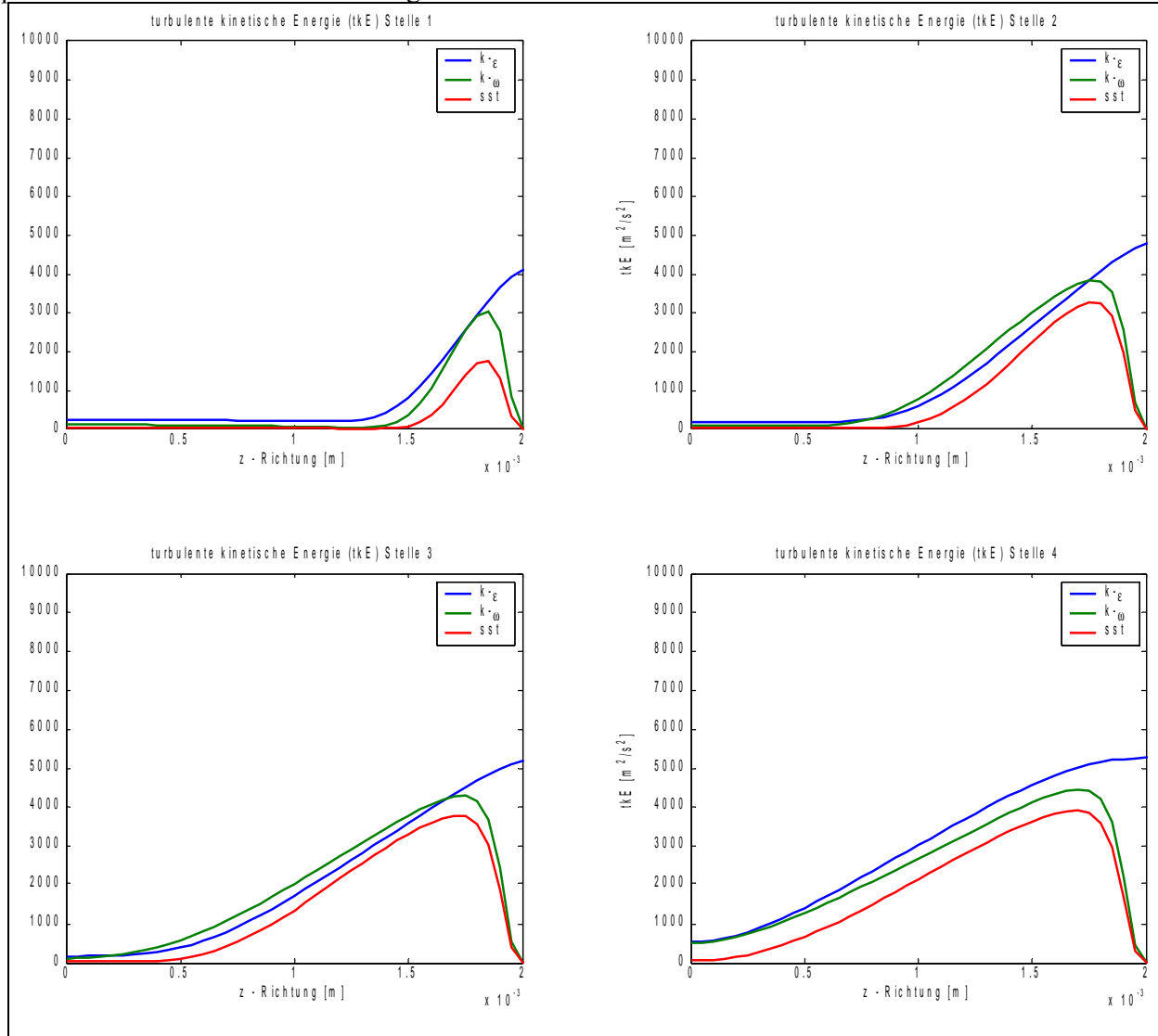


Auswertung Düsenbreite

Machzahl an 4 Stellen.

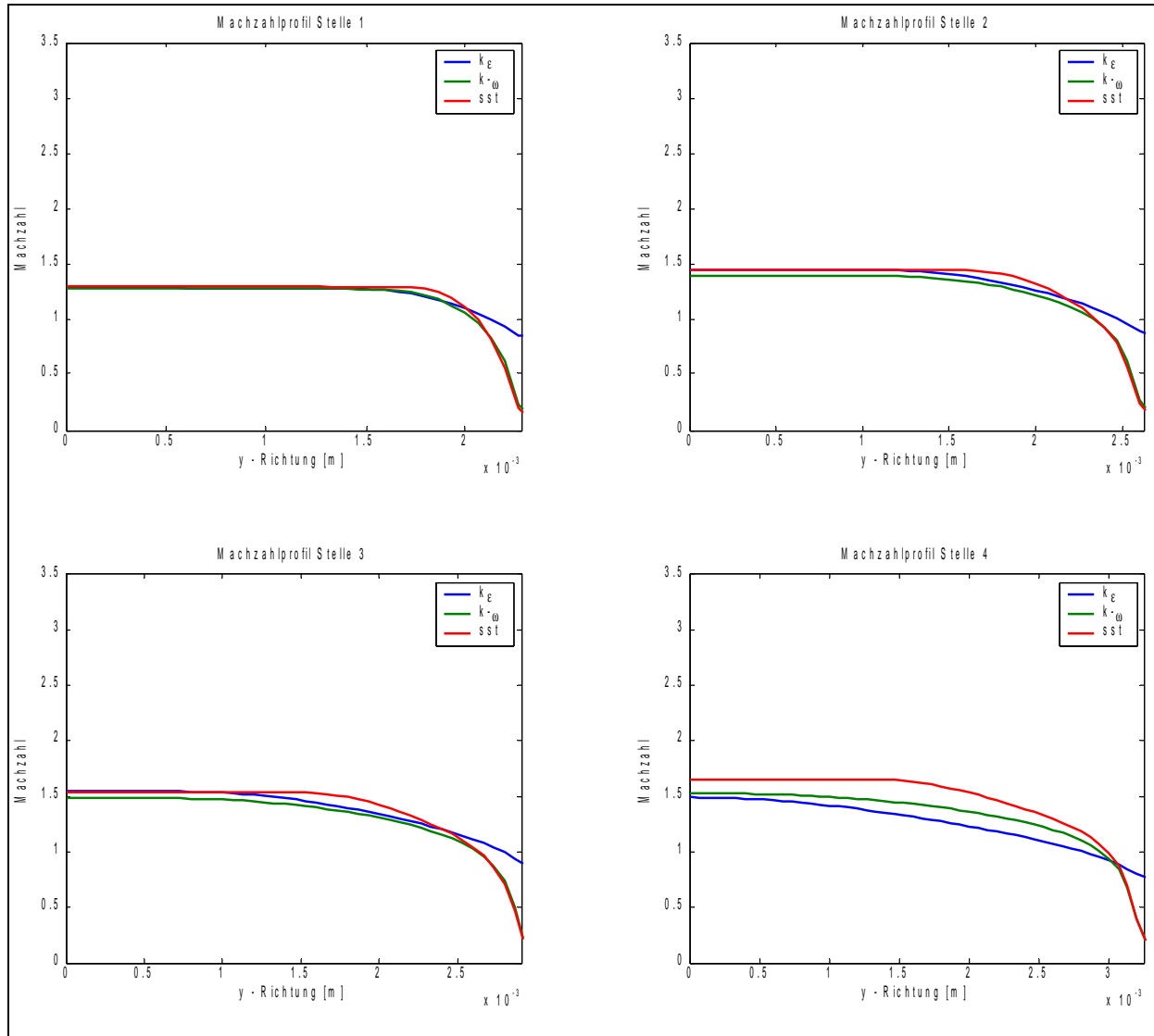


Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

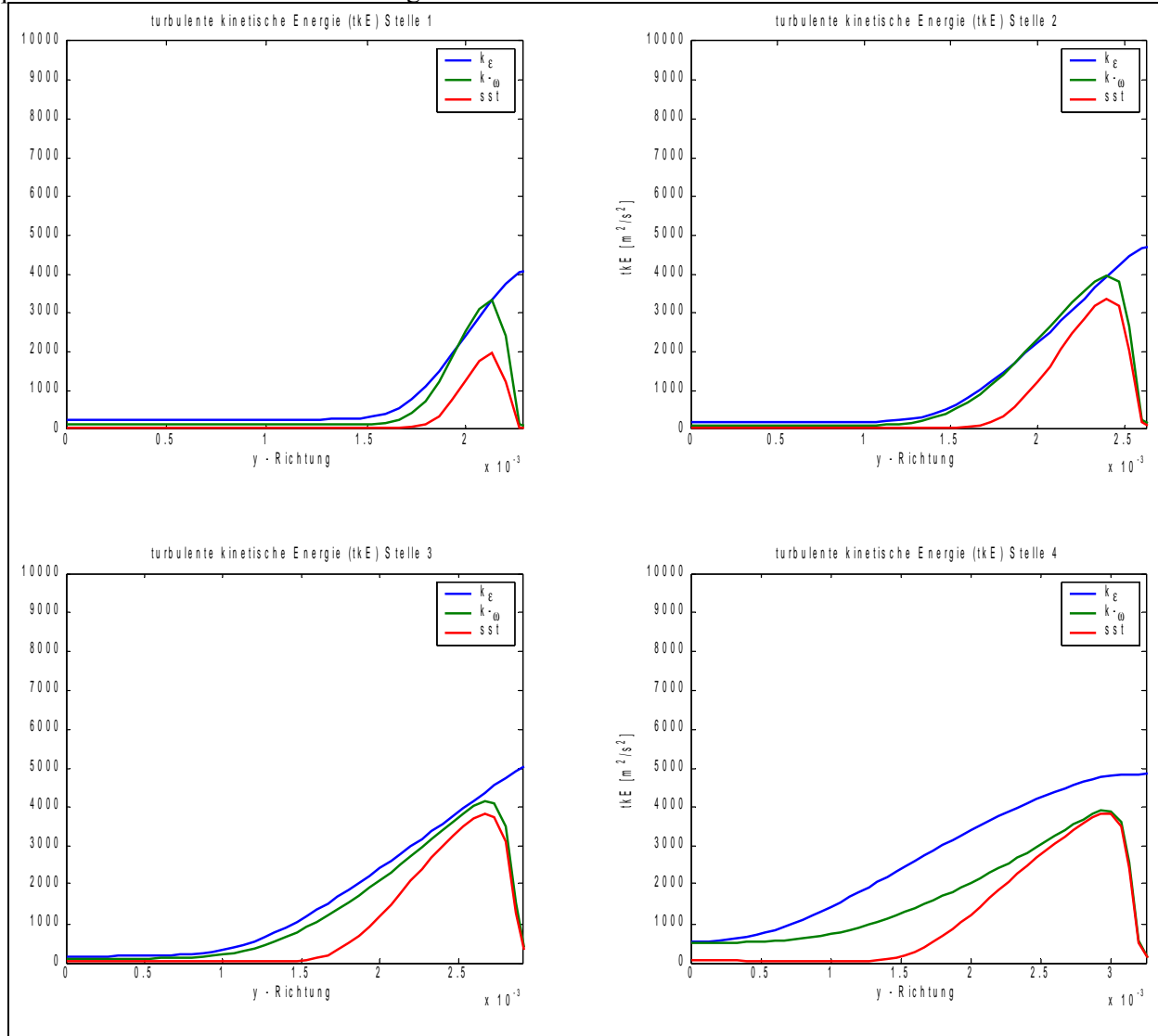


Auswertung Düsenhöhe

Machzahl an 4 Stellen.



Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

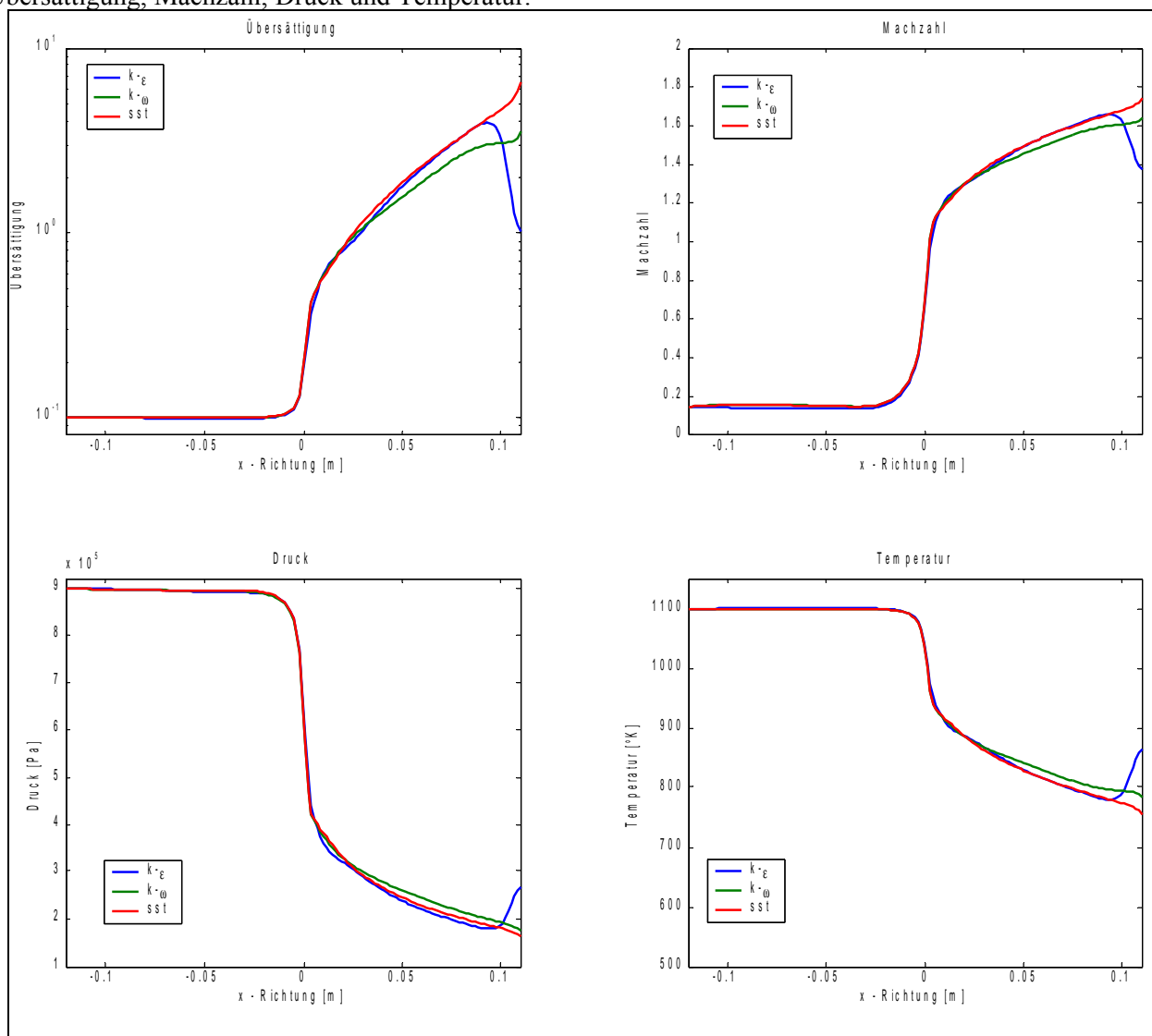


9.2.2.) Lavaldüse 4 x 4 [mm] – Austrittshöhe 0.007 [m]

Breite: 4 [mm]
Höhe engster Querschnitt: 4 [mm]
Höhe am Austritt: 0.007 [m]

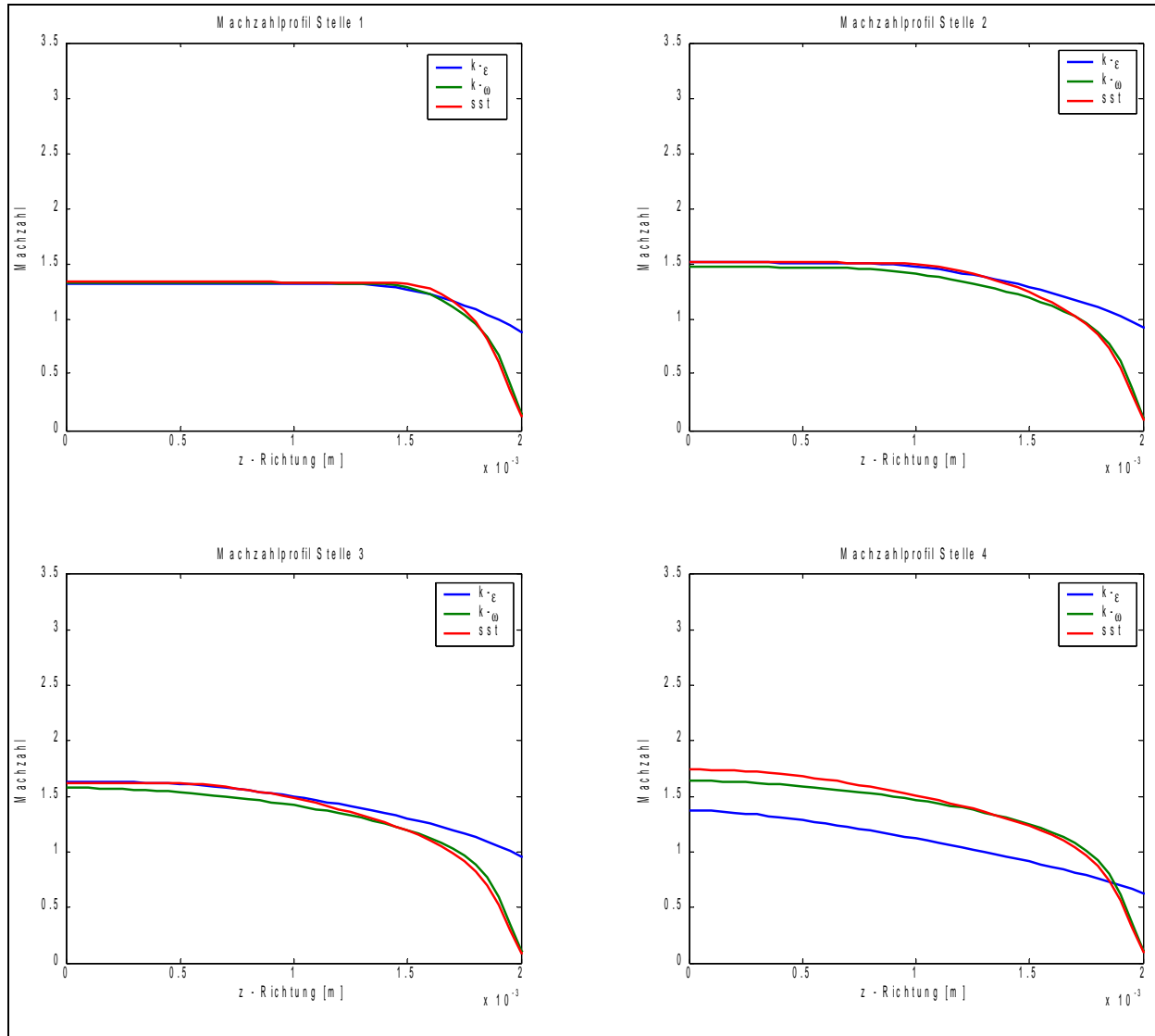
Auswertung Düsenachse

Übersättigung, Machzahl, Druck und Temperatur.

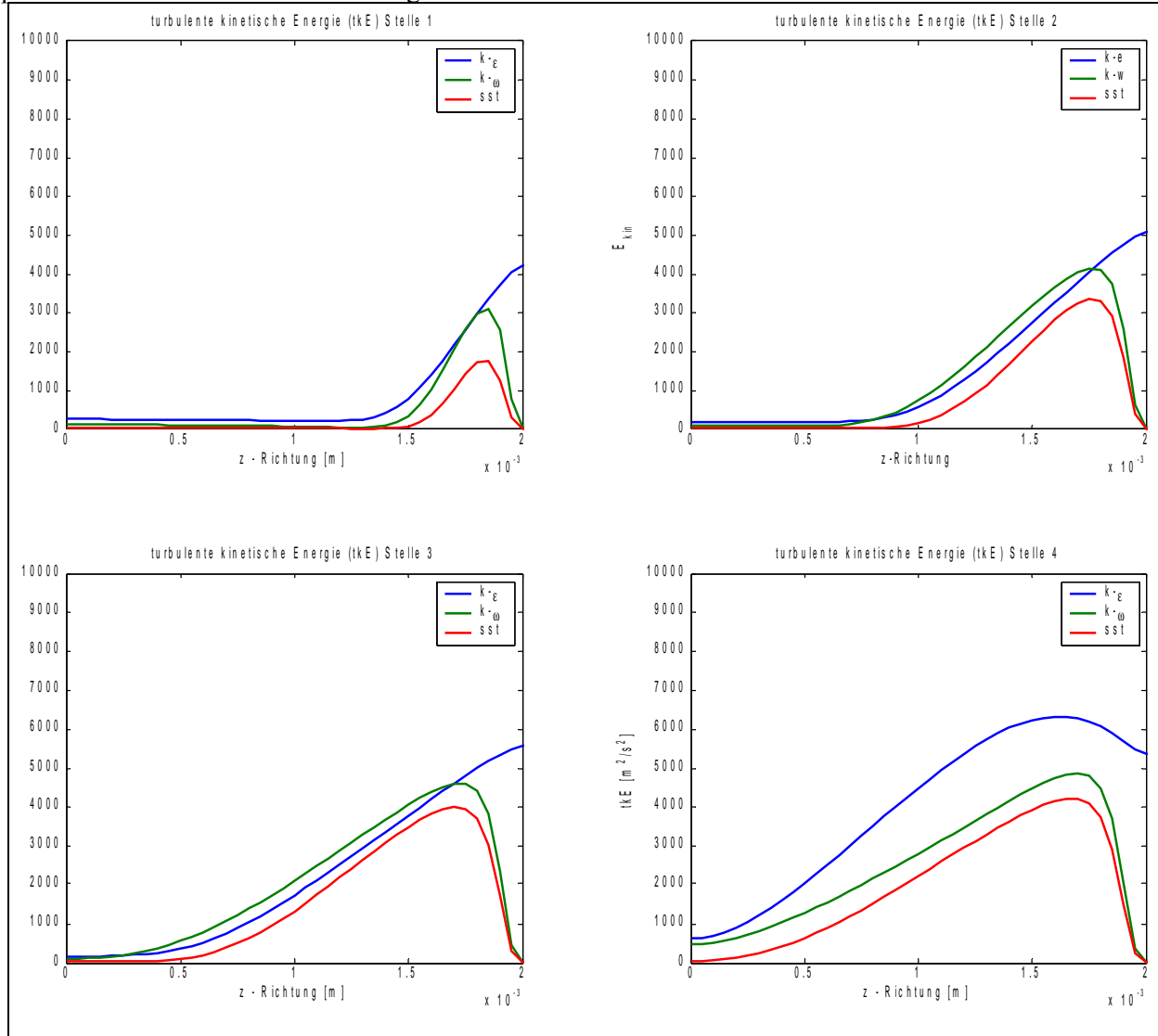


Auswertung Düsenbreite

Machzahl an 4 Stellen.

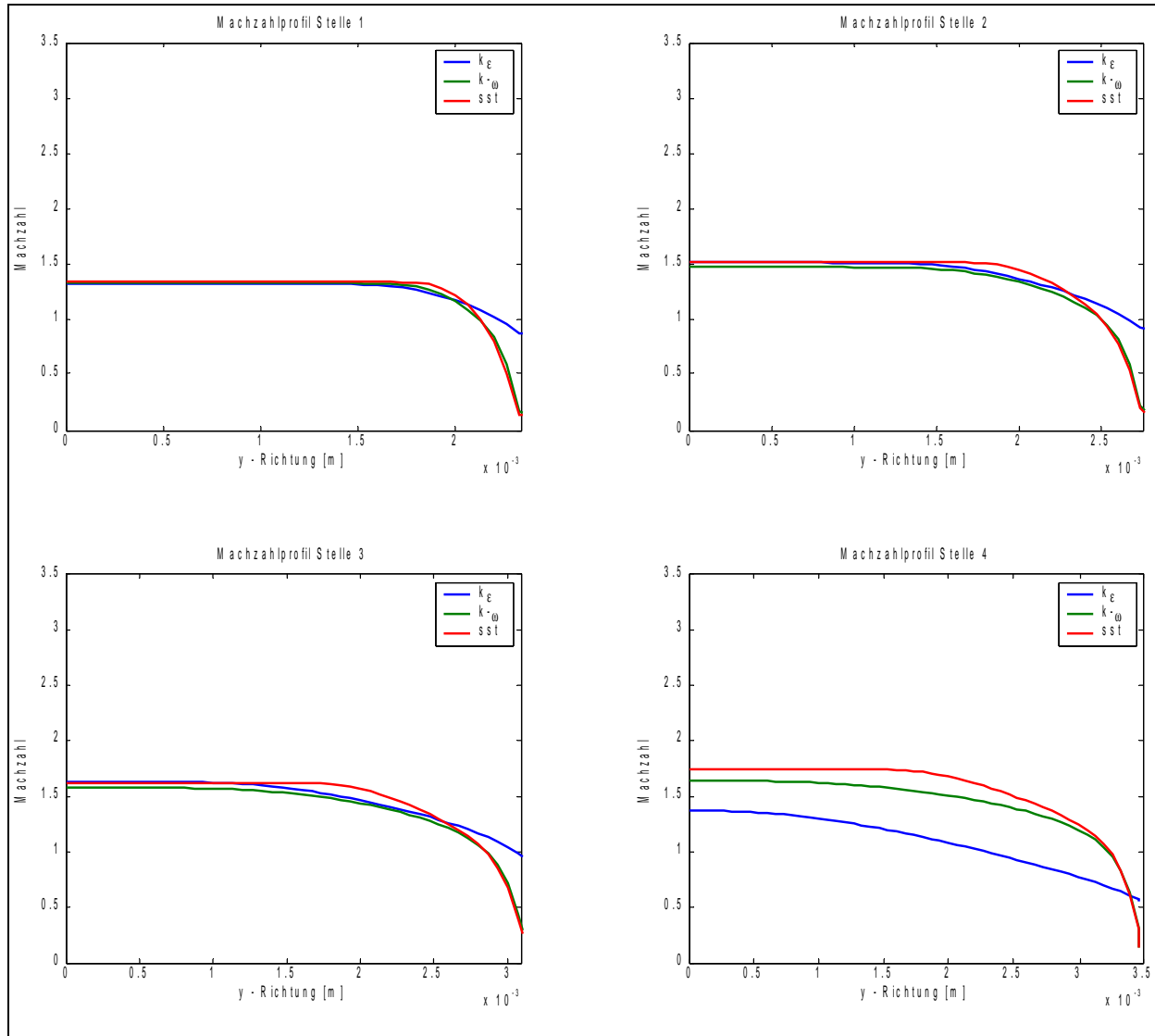


Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

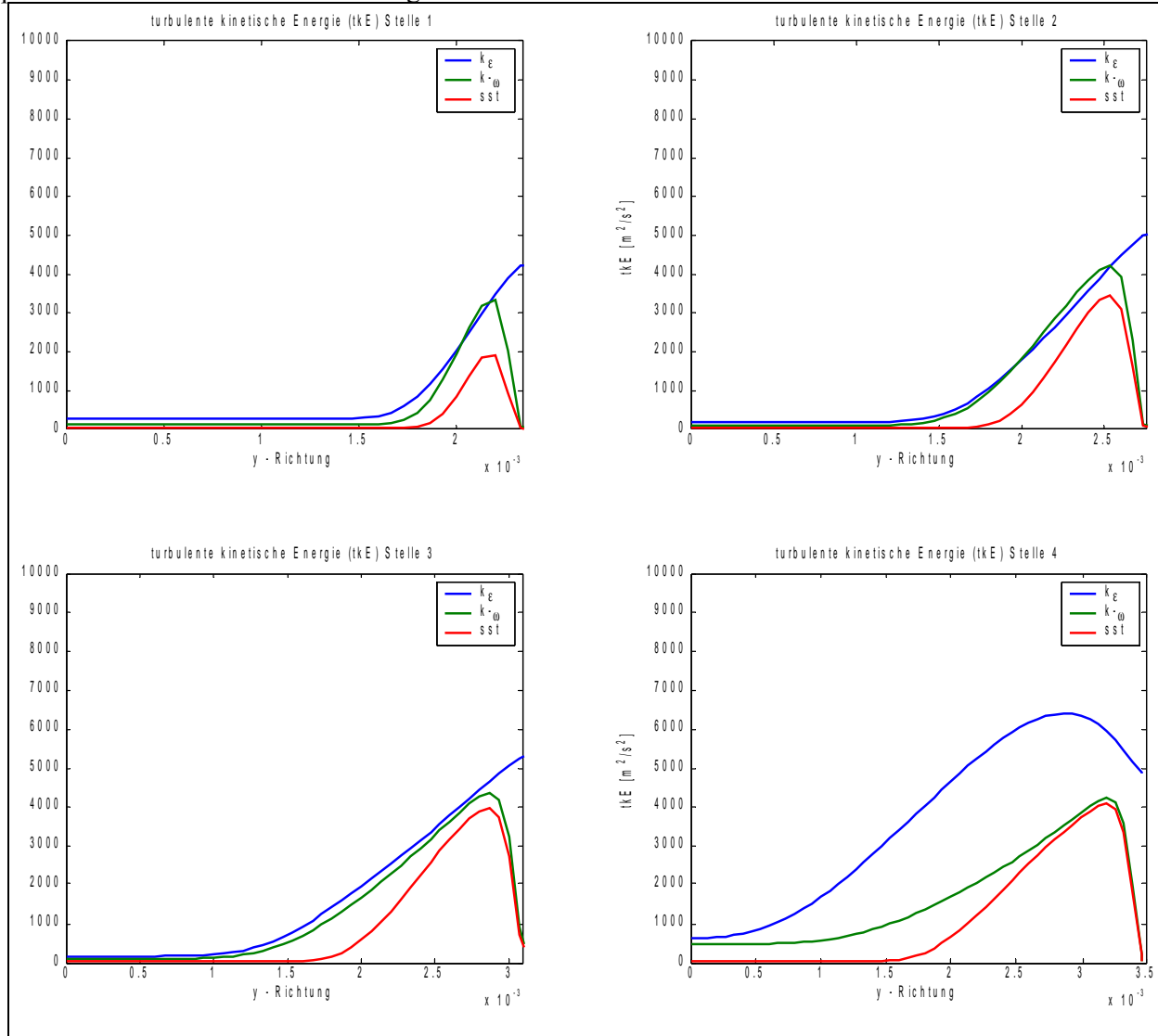


Auswertung Düsenhöhe

Machzahl an 4 Stellen.



Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

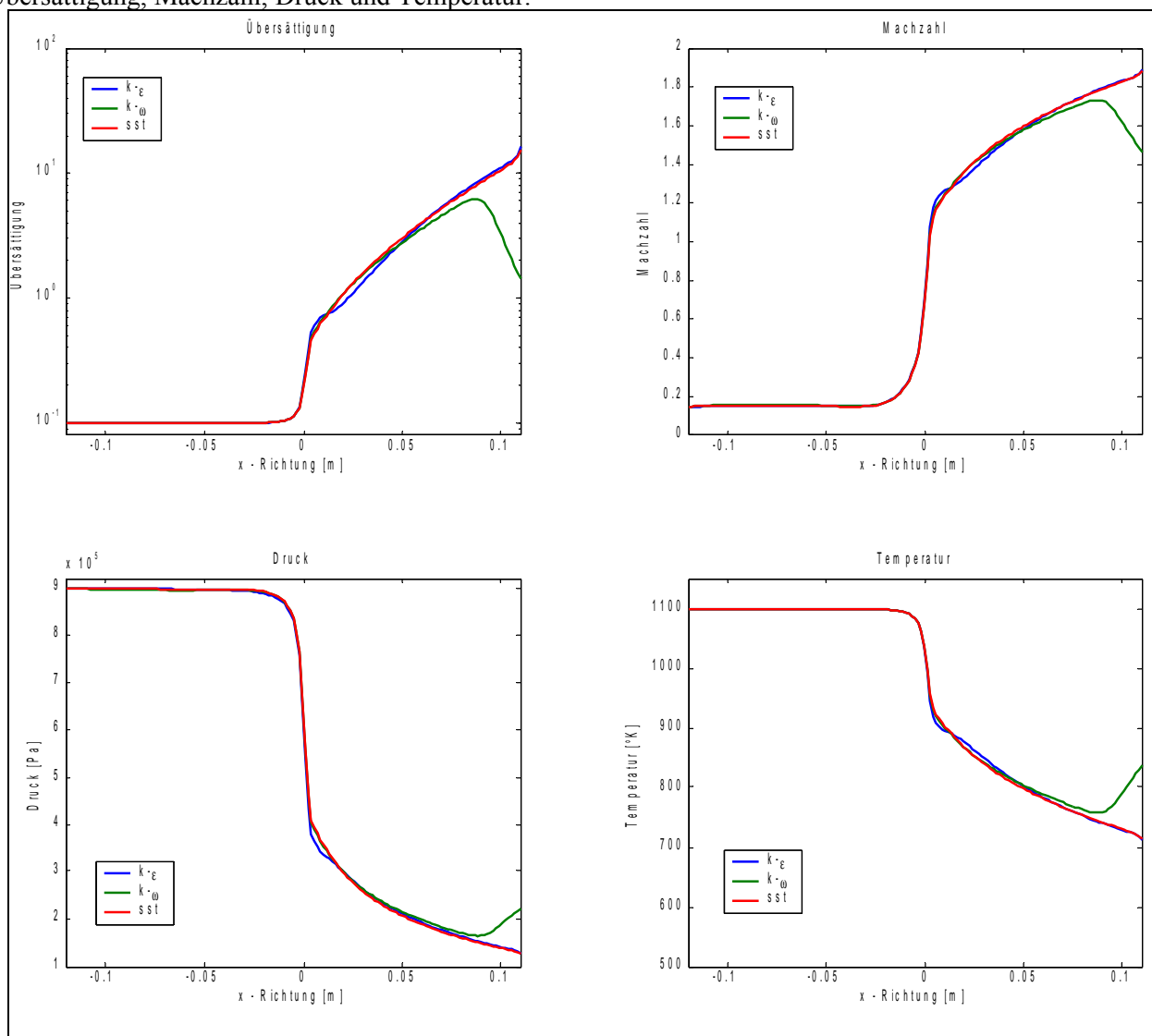


9.2.3.) Lavaldüse 4 x 4 [mm] – Austrittshöhe 0.008 [m]

Breite: 4 [mm]
Höhe engster Querschnitt: 4 [mm]
Höhe am Austritt: 0.008 [m]

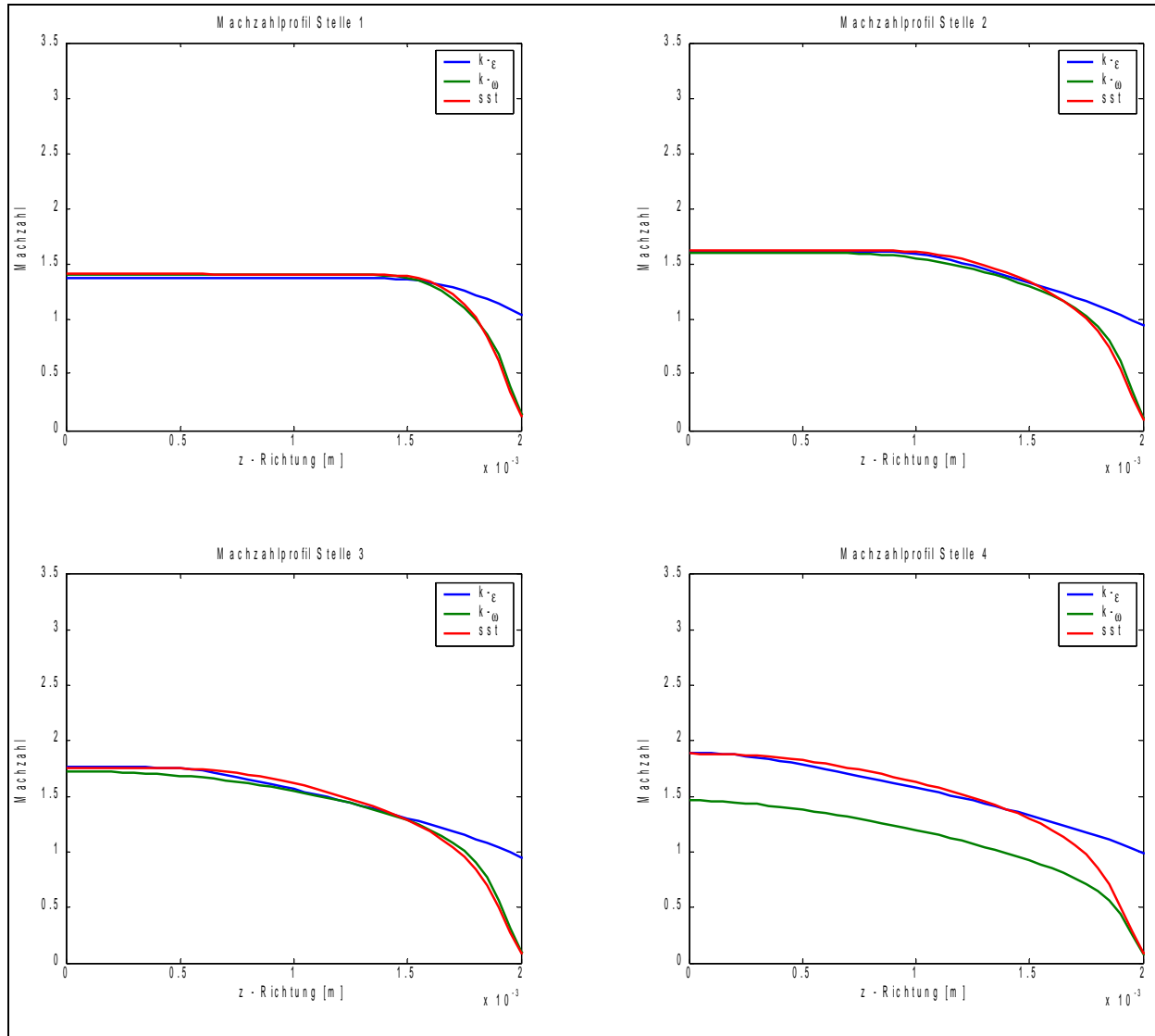
Auswertung Düsenachse

Übersättigung, Machzahl, Druck und Temperatur.

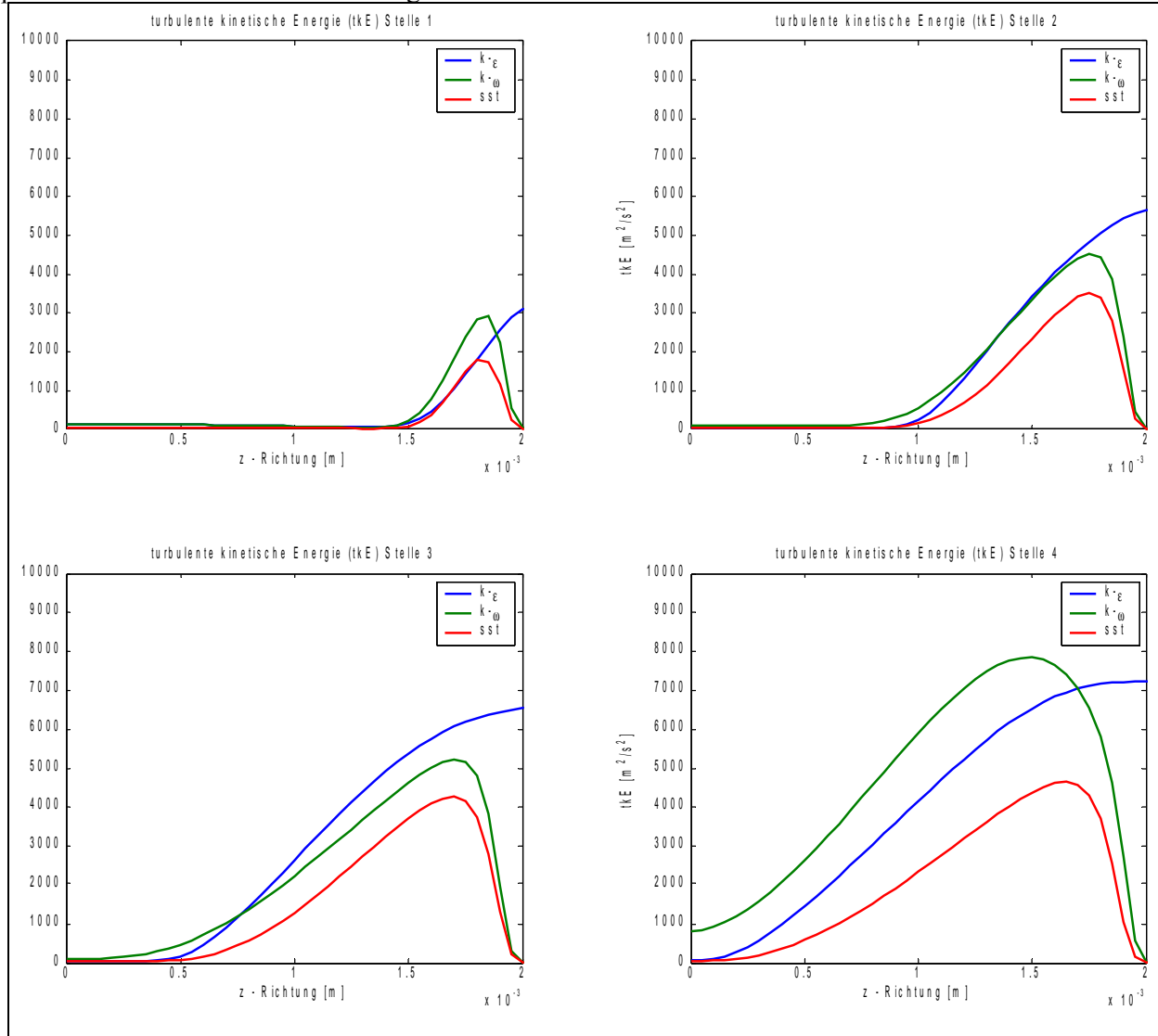


Auswertung Düsenbreite

Machzahl an 4 Stellen.

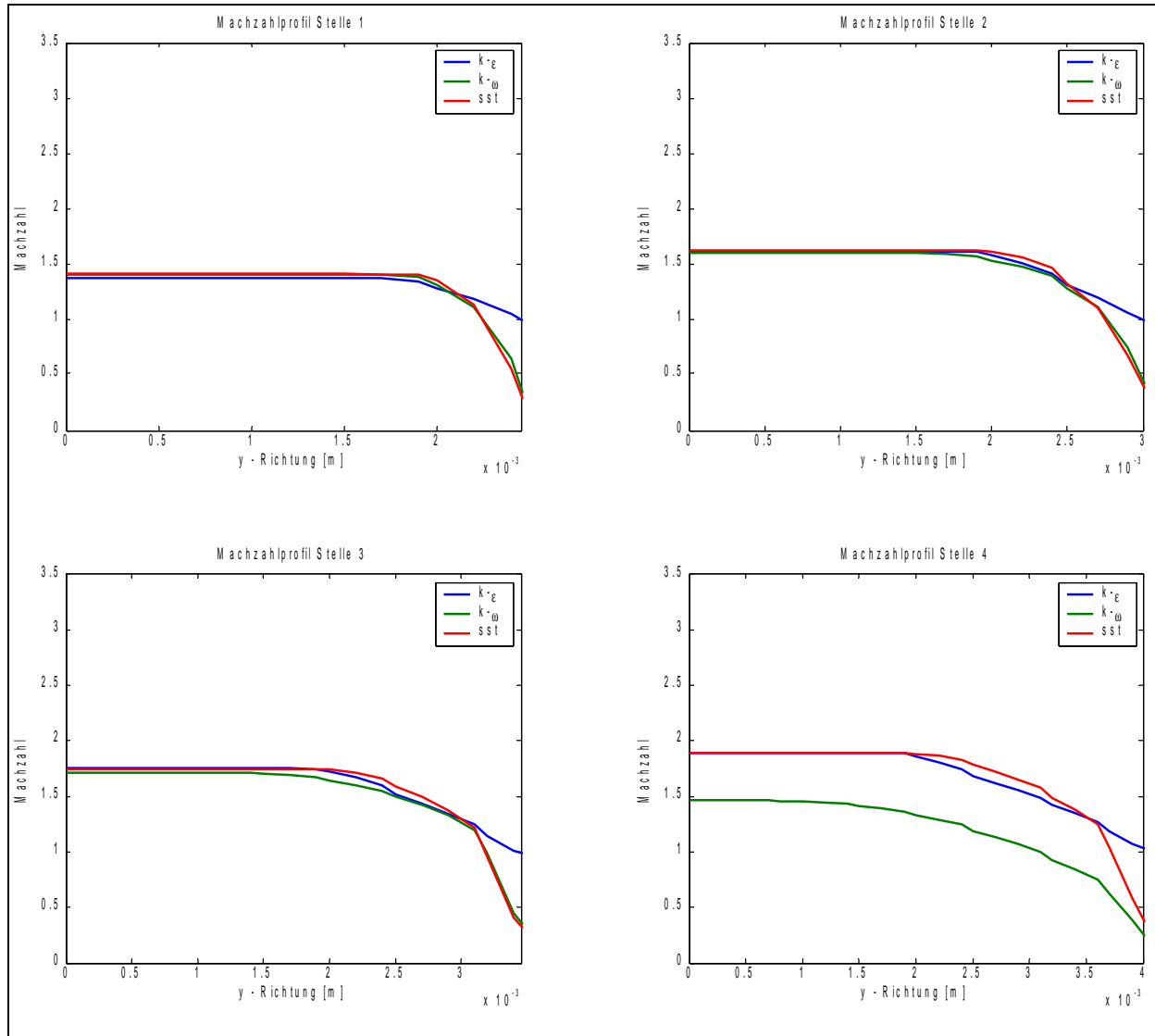


Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

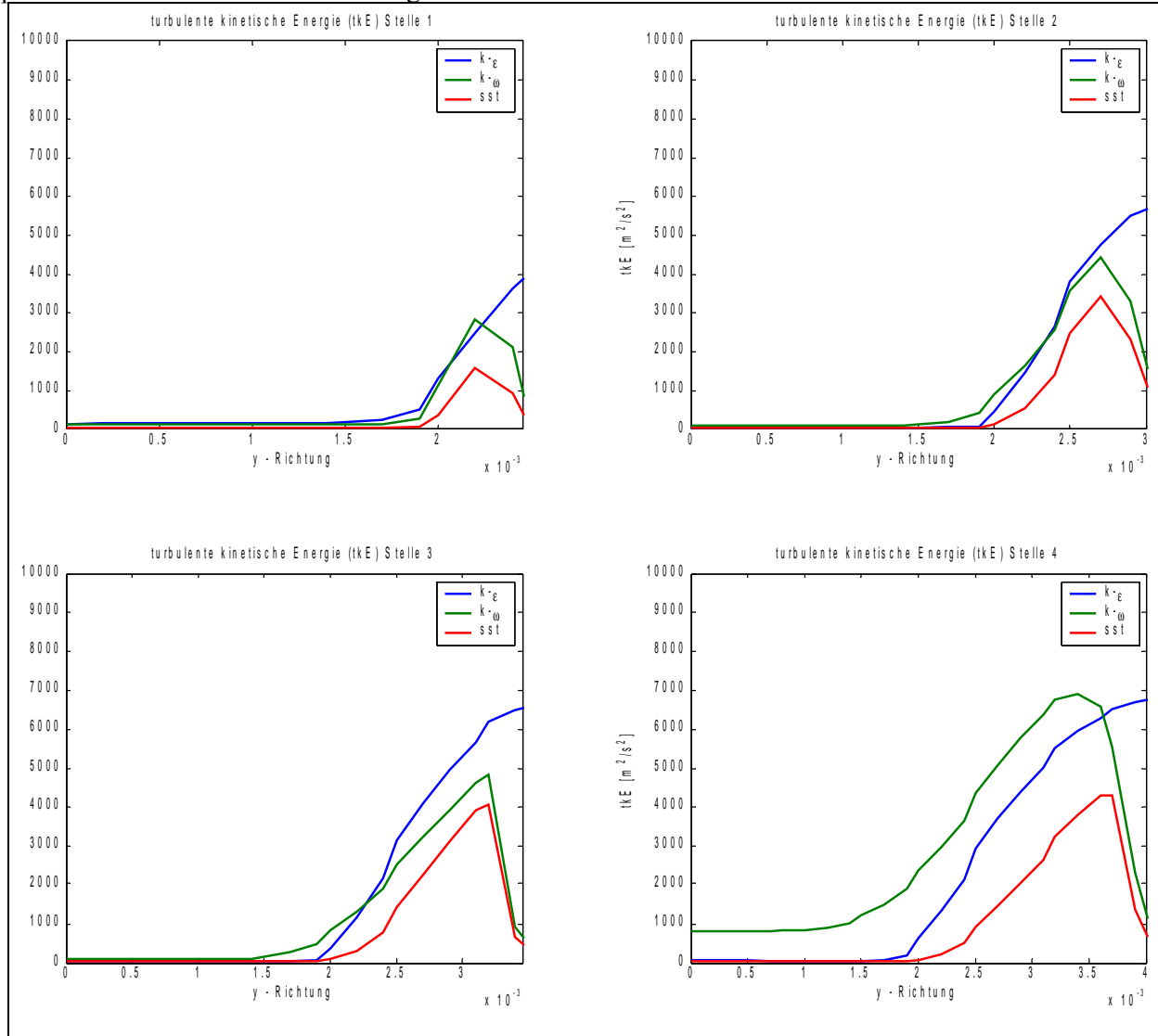


Auswertung Düsenhöhe

Machzahl an 4 Stellen.



Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

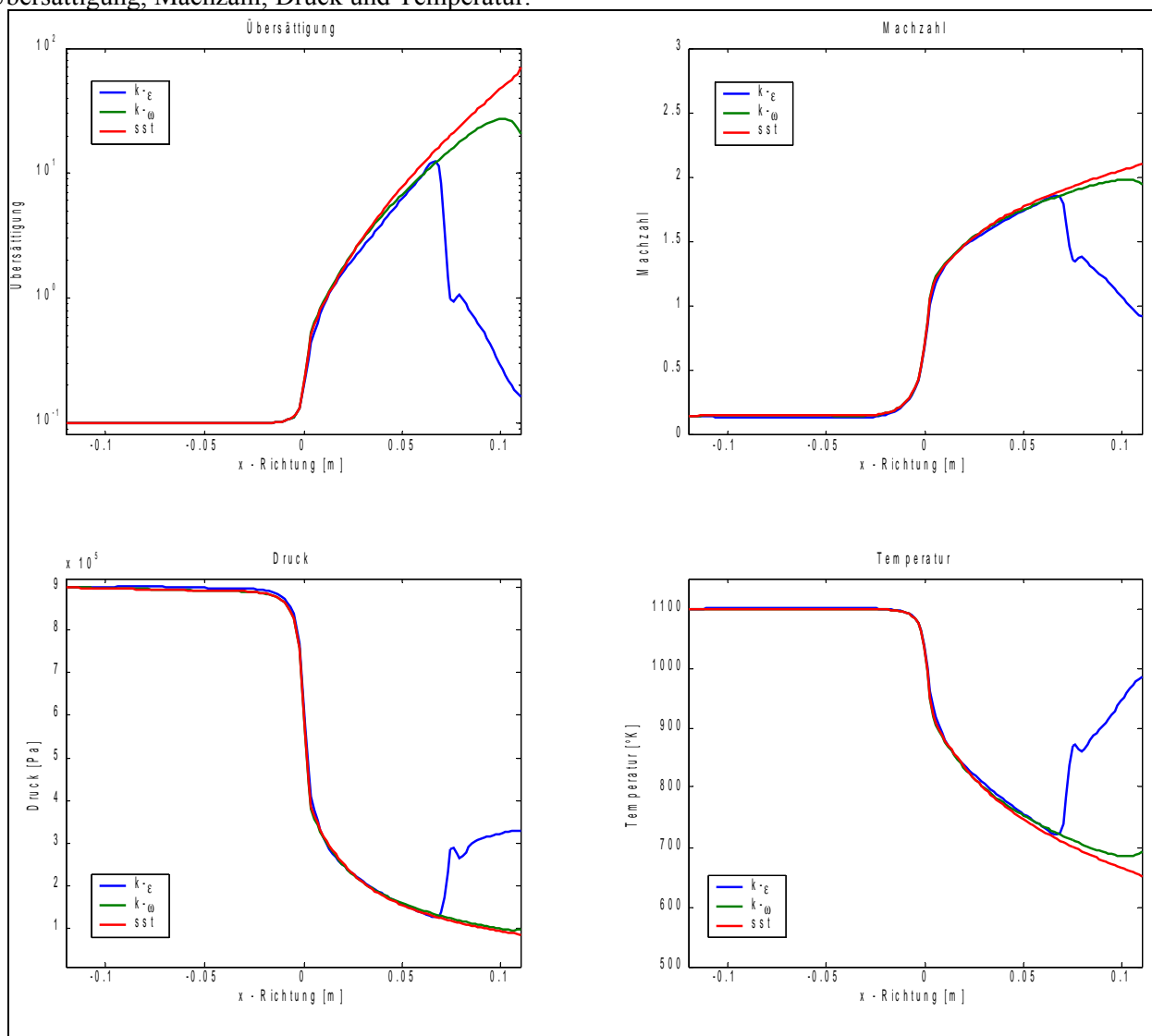


9.2.4.) Lavaldüse 4 x 4 [mm] – Austrittshöhe 0.01 [m]

Breite: 4 [mm]
Höhe engster Querschnitt: 4 [mm]
Höhe am Austritt: 0.01 [m]

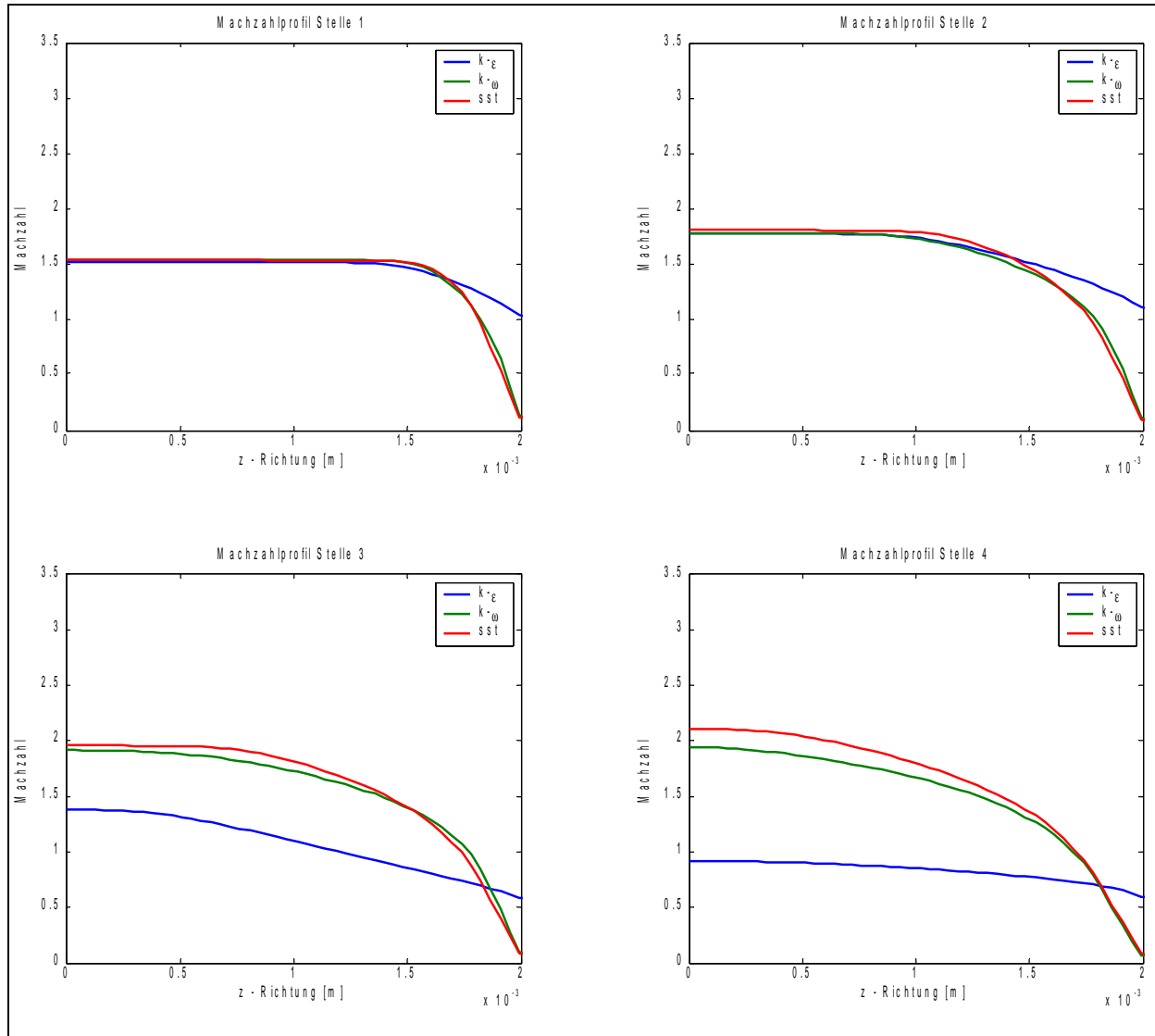
Auswertung Düsenachse

Übersättigung, Machzahl, Druck und Temperatur.

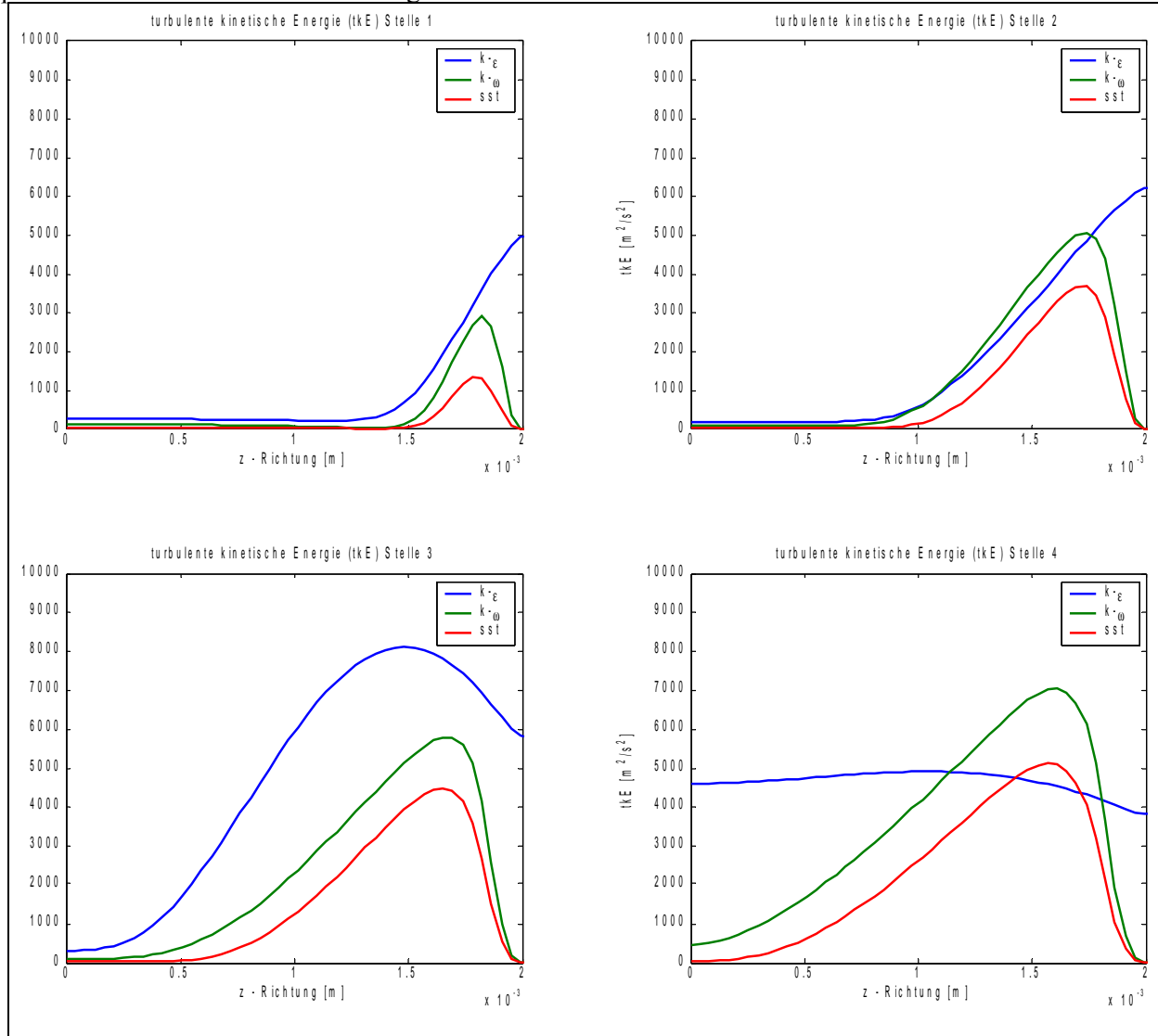


Auswertung Düsenbreite

Machzahl an 4 Stellen.

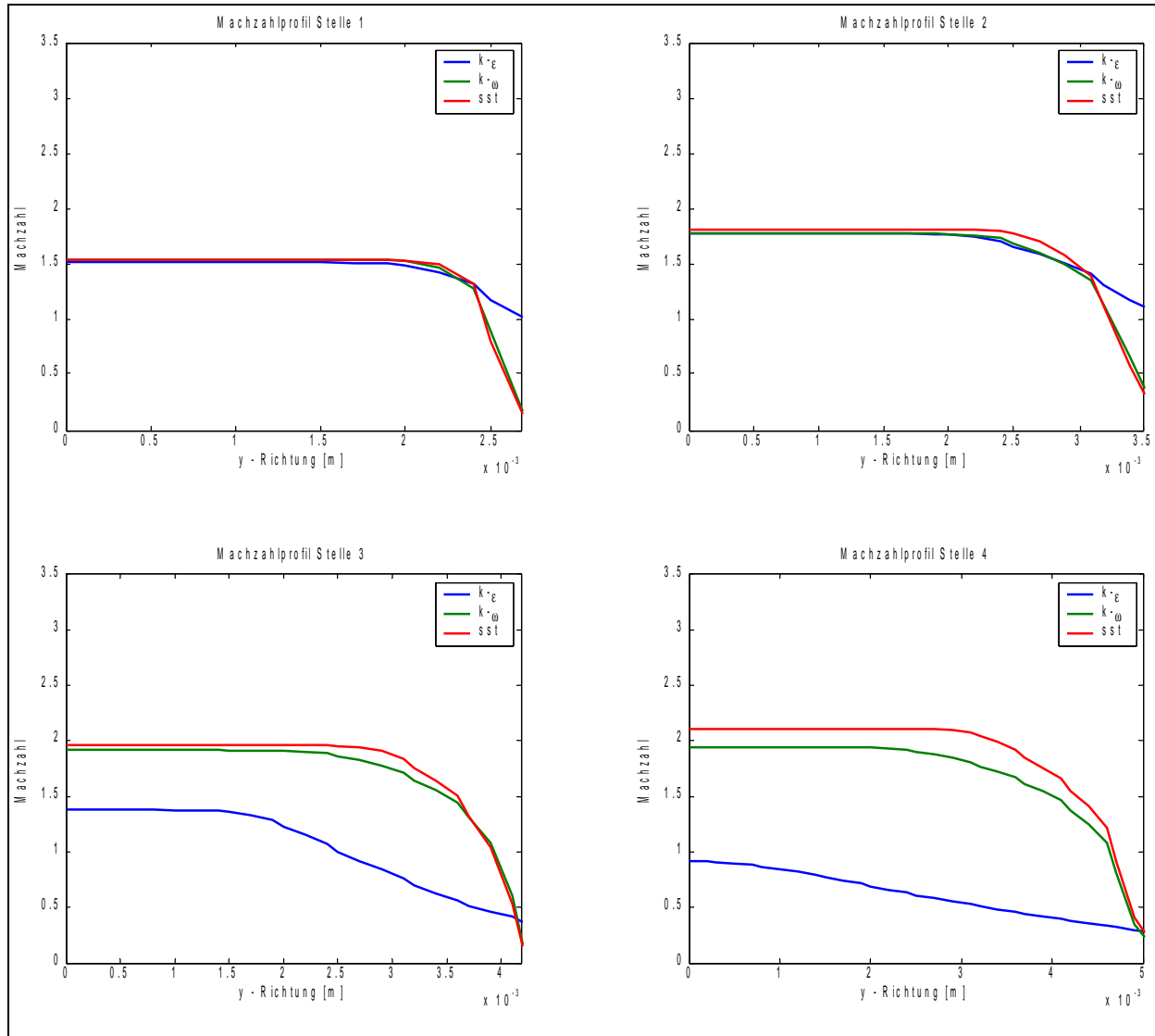


Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

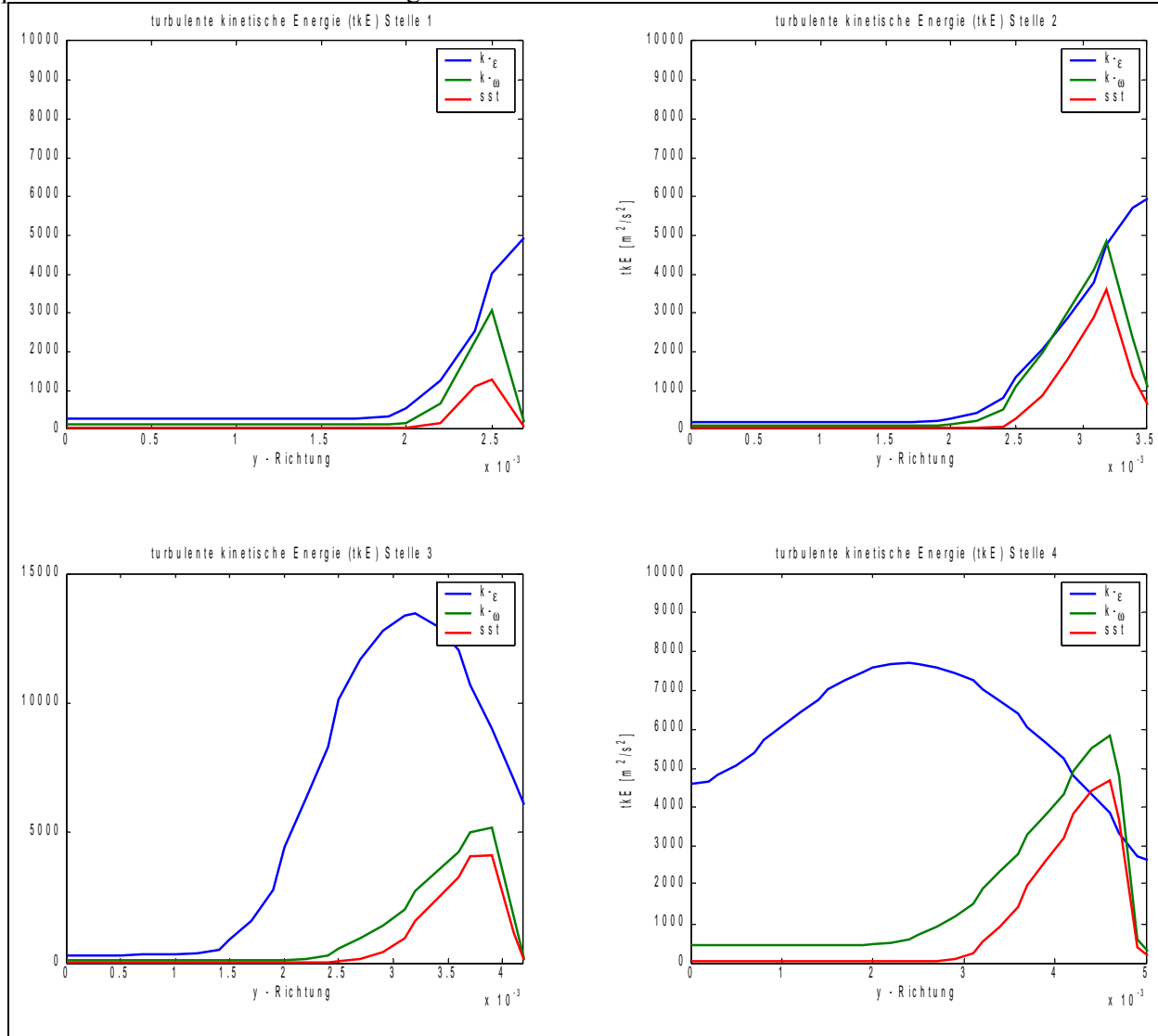


Auswertung Düsenhöhe

Machzahl an 4 Stellen.



Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

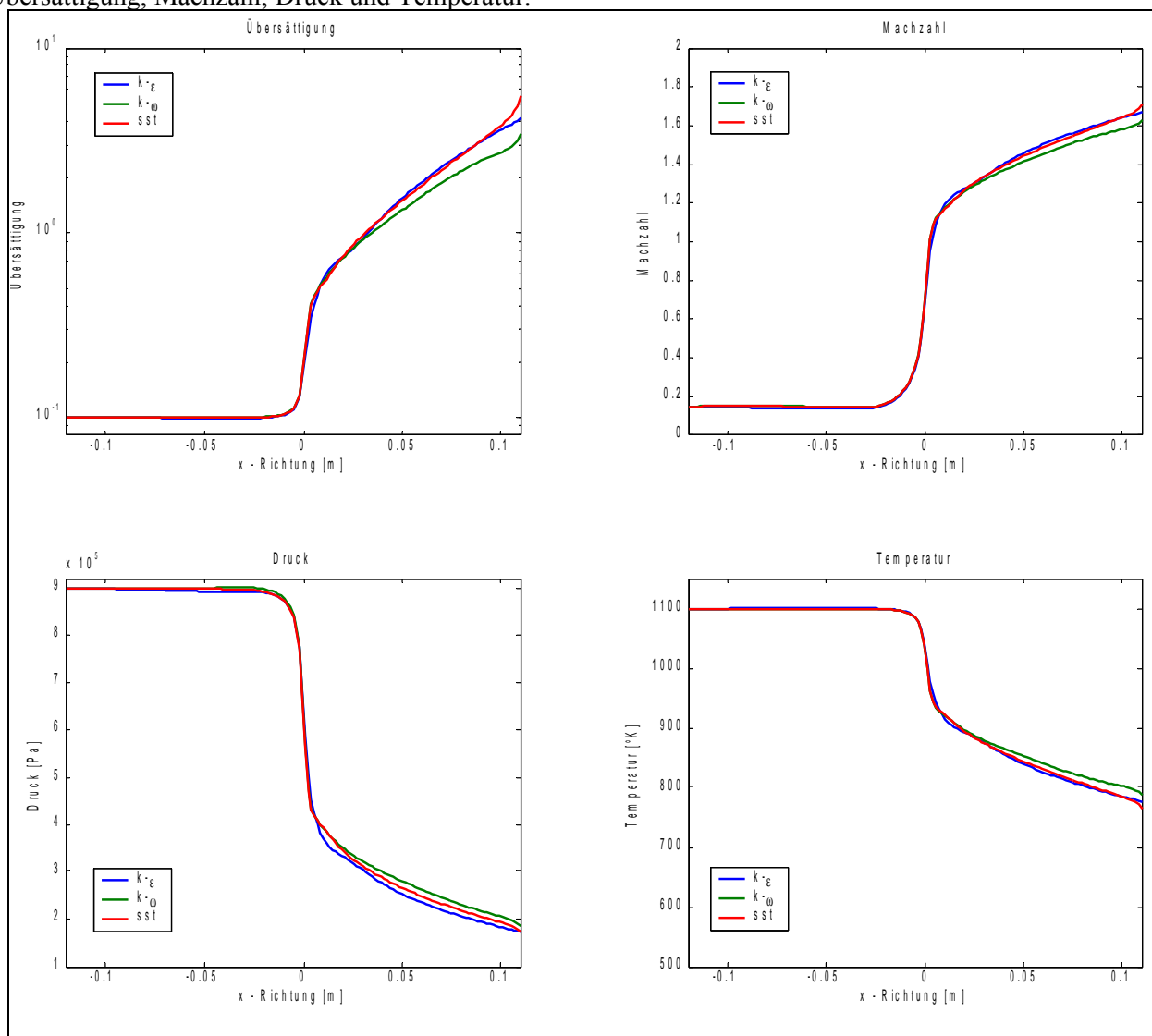


9.2.5.) Lavaldüse 3 x 6 [mm] – Austrittshöhe 0.005 [m]

Breite: 6 [mm]
Höhe engster Querschnitt: 3 [mm]
Höhe am Austritt: 0.005 [m]

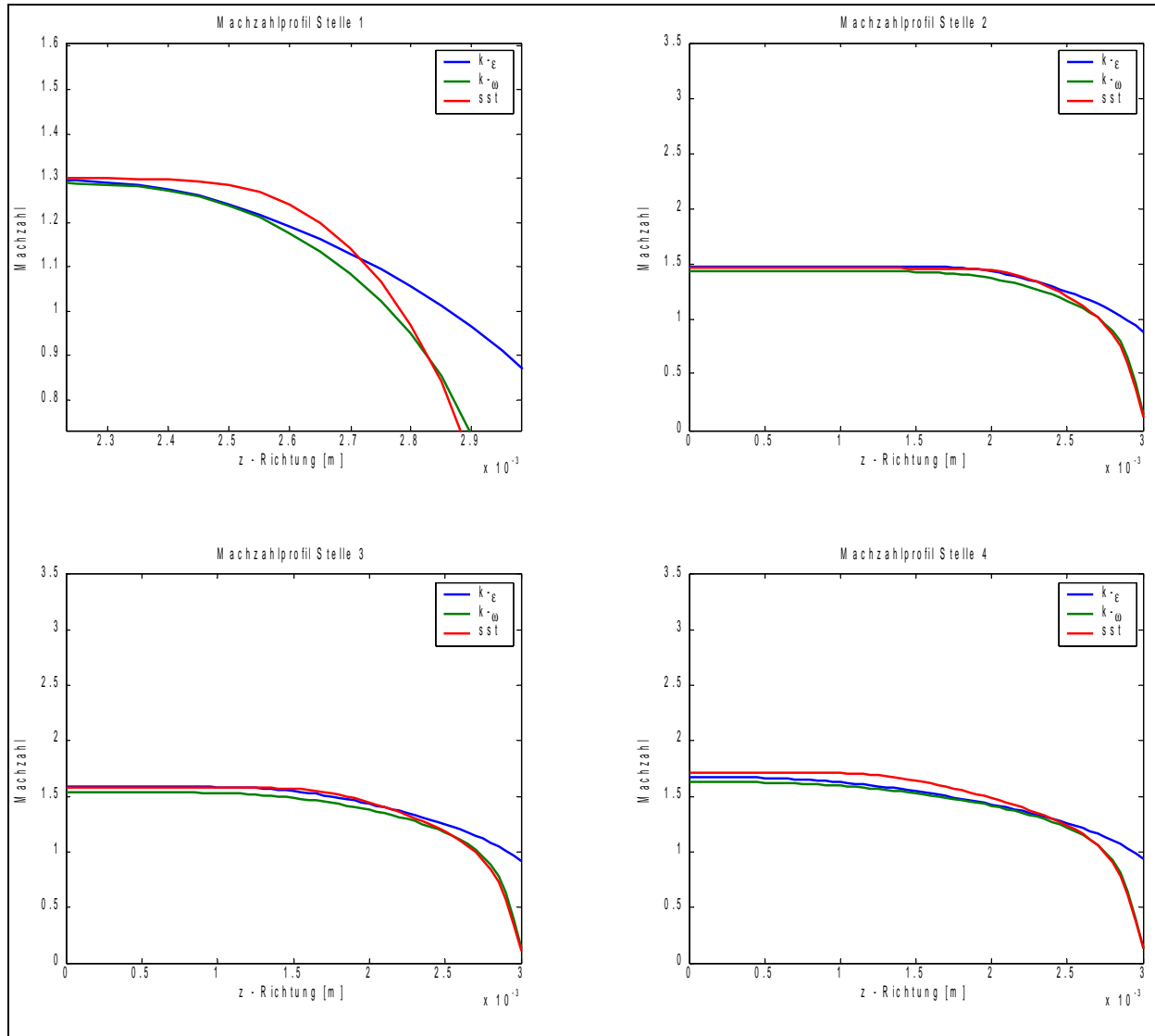
Auswertung Düsenachse

Übersättigung, Machzahl, Druck und Temperatur.

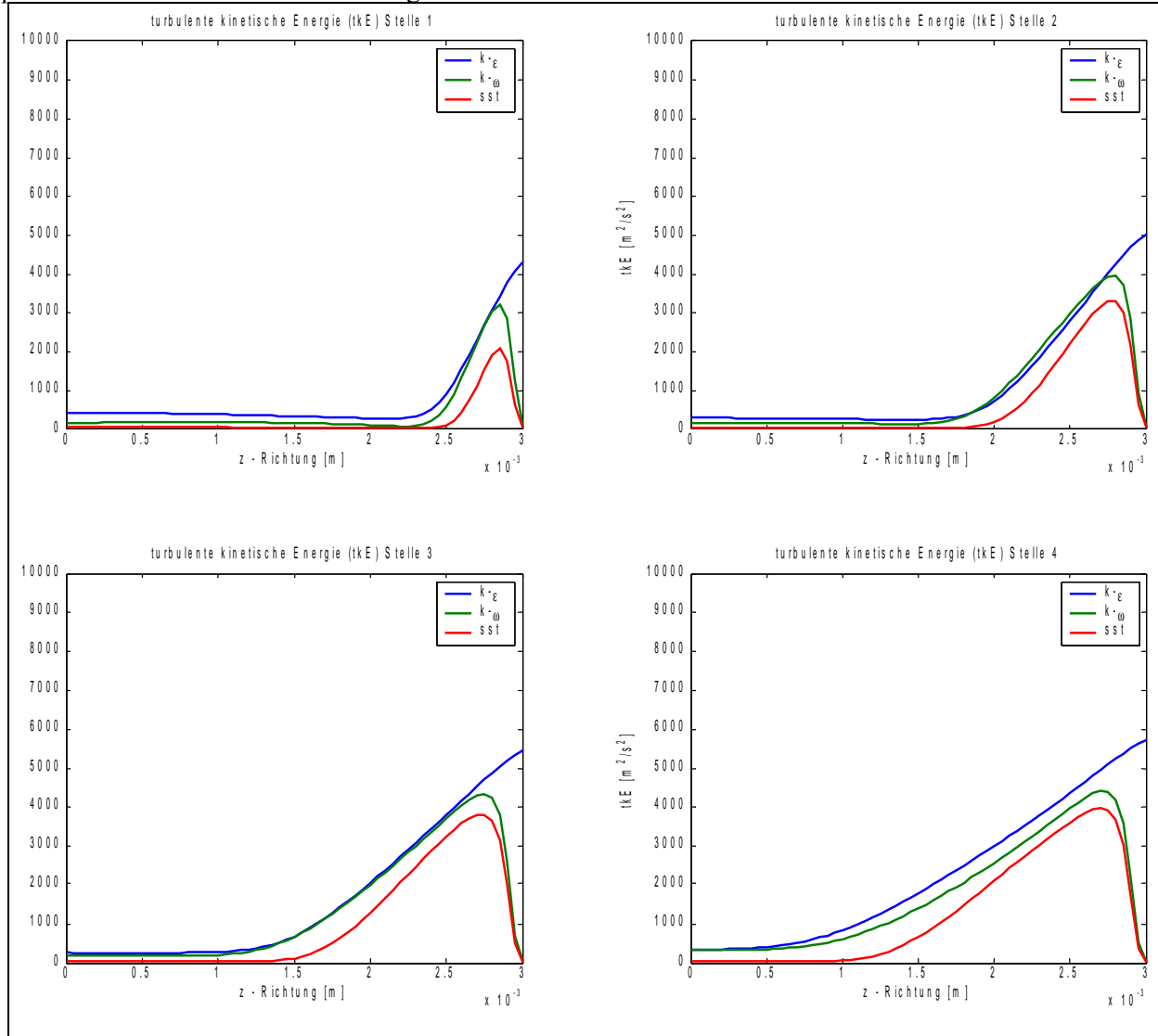


Auswertung Düsenbreite

Machzahl an 4 Stellen.

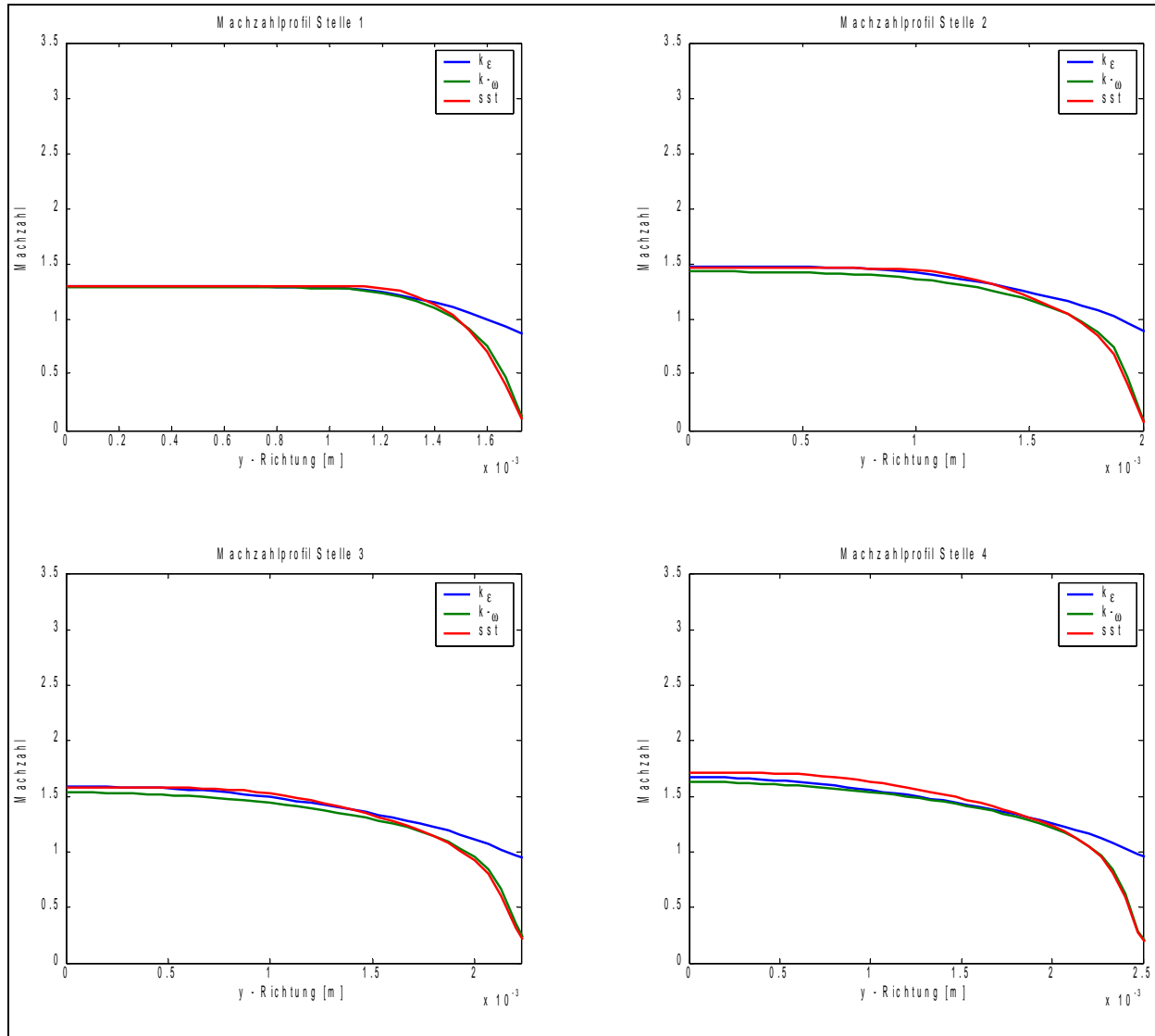


Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

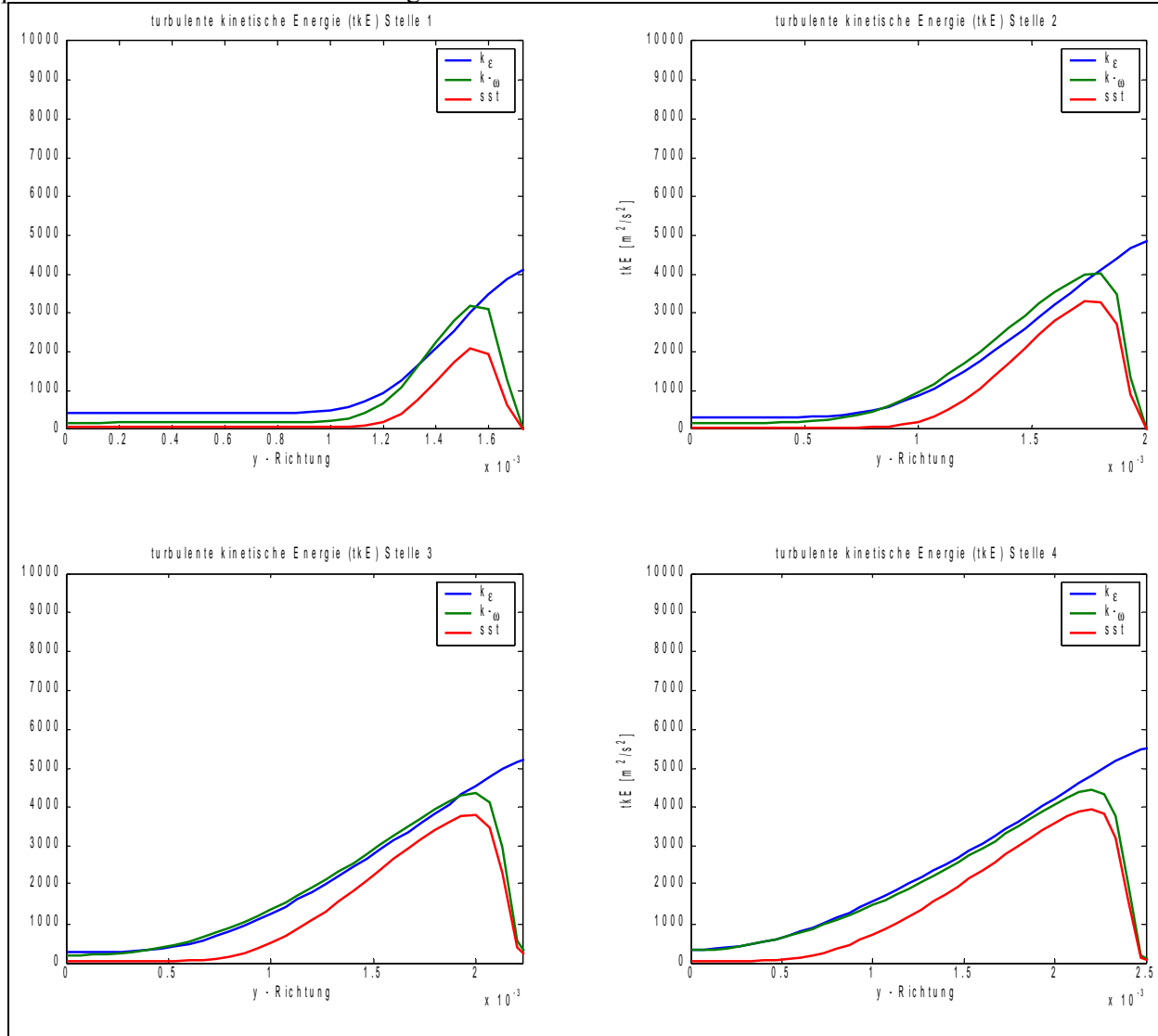


Auswertung Düsenhöhe

Machzahl an 4 Stellen.



Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

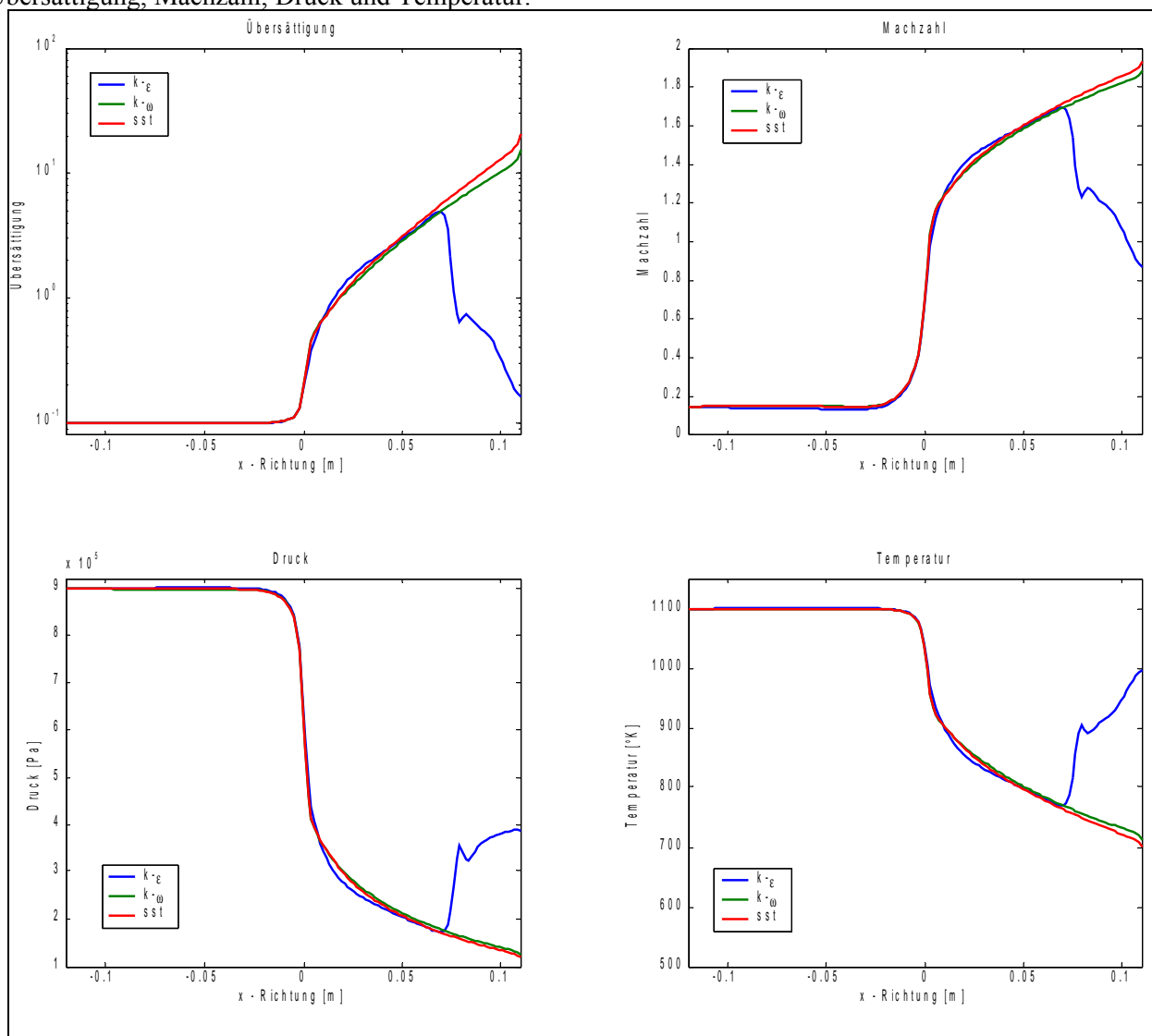


9.2.6.) Lavaldüse 3 x 6 [mm] – Austrittshöhe 0.006 [m]

Breite: 6 [mm]
 Höhe engster Querschnitt: 3 [mm]
 Höhe am Austritt: 0.006 [m]

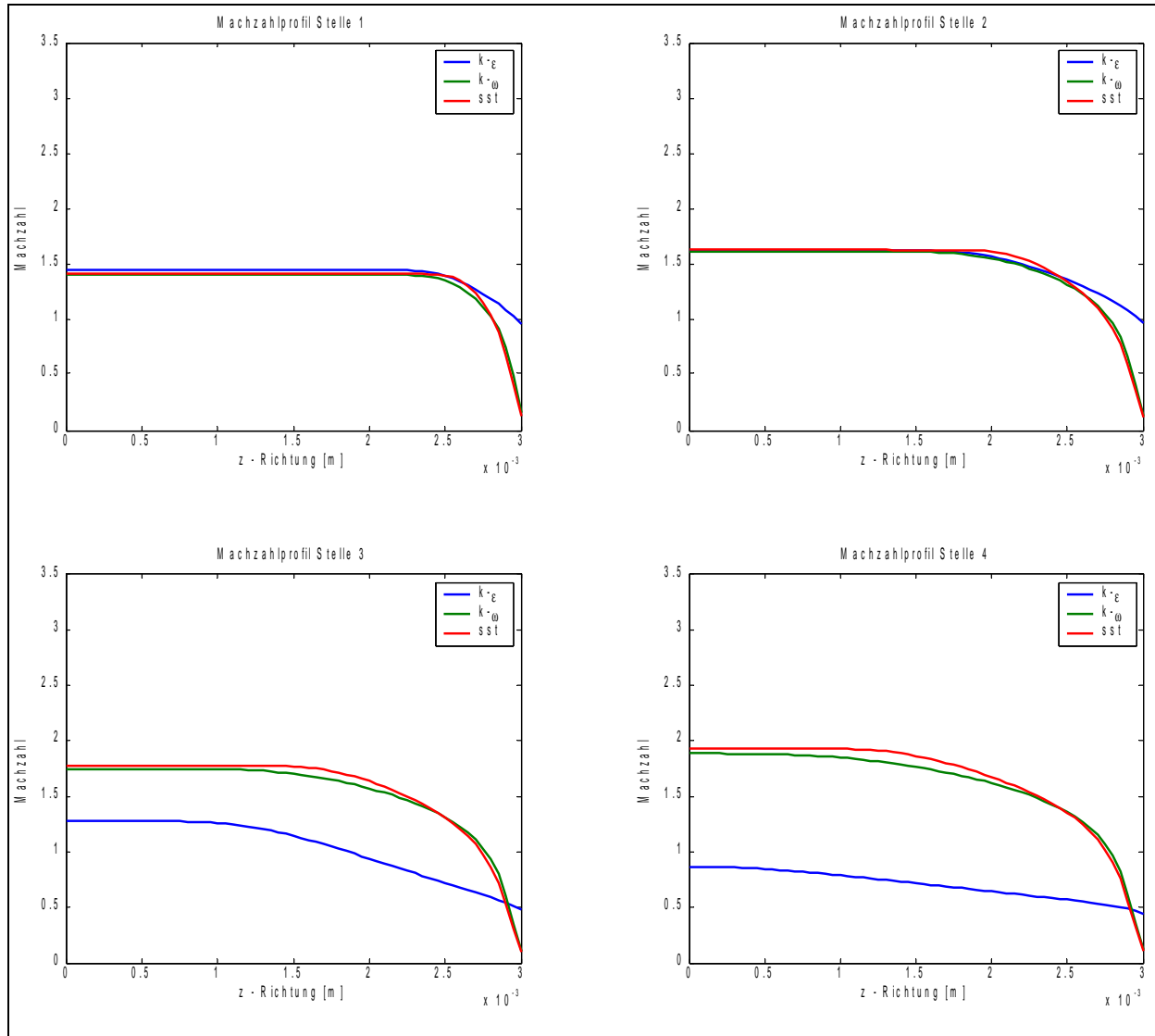
Auswertung Düsenachse

Übersättigung, Machzahl, Druck und Temperatur.

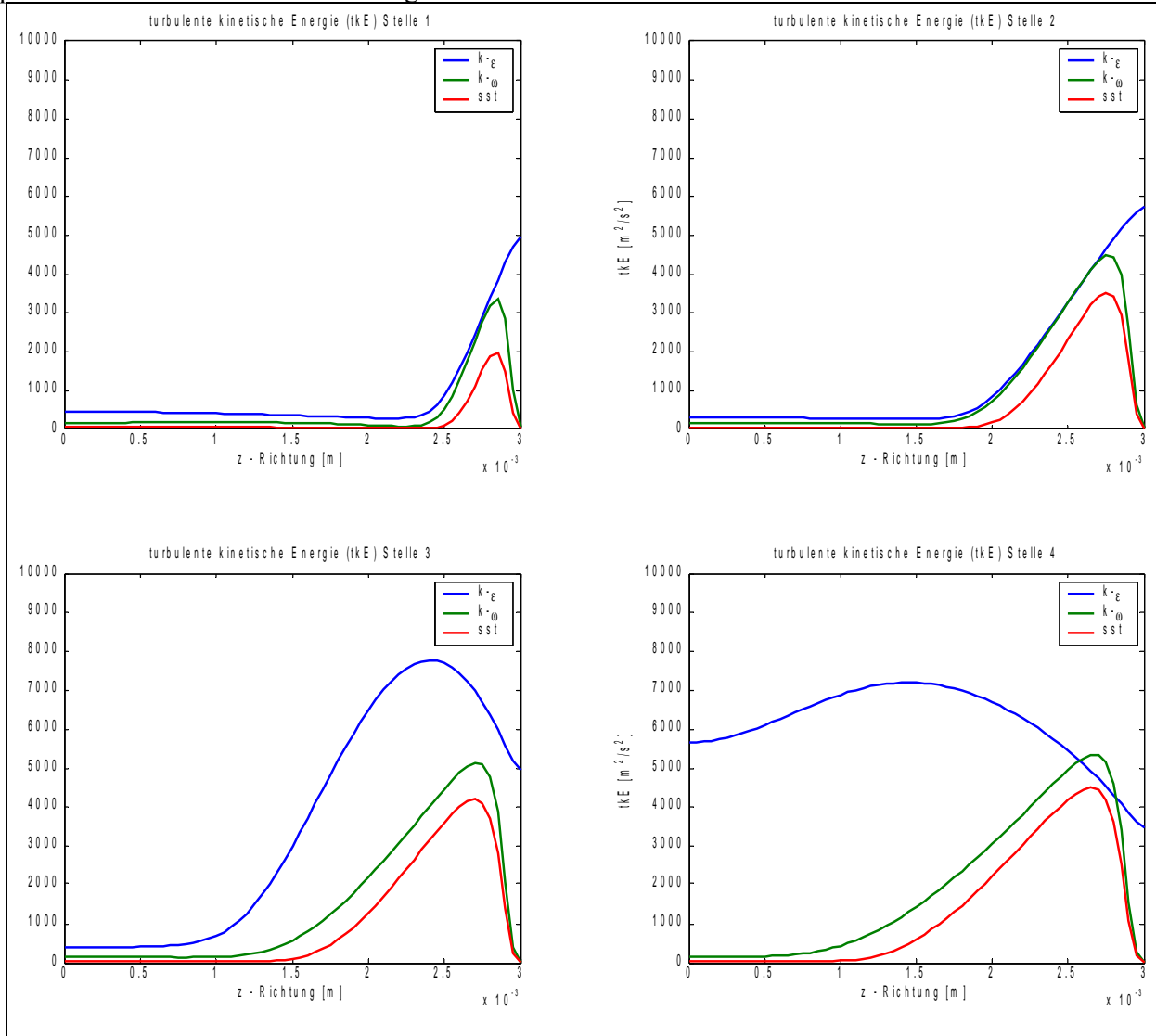


Auswertung Düsenbreite

Machzahl an 4 Stellen.

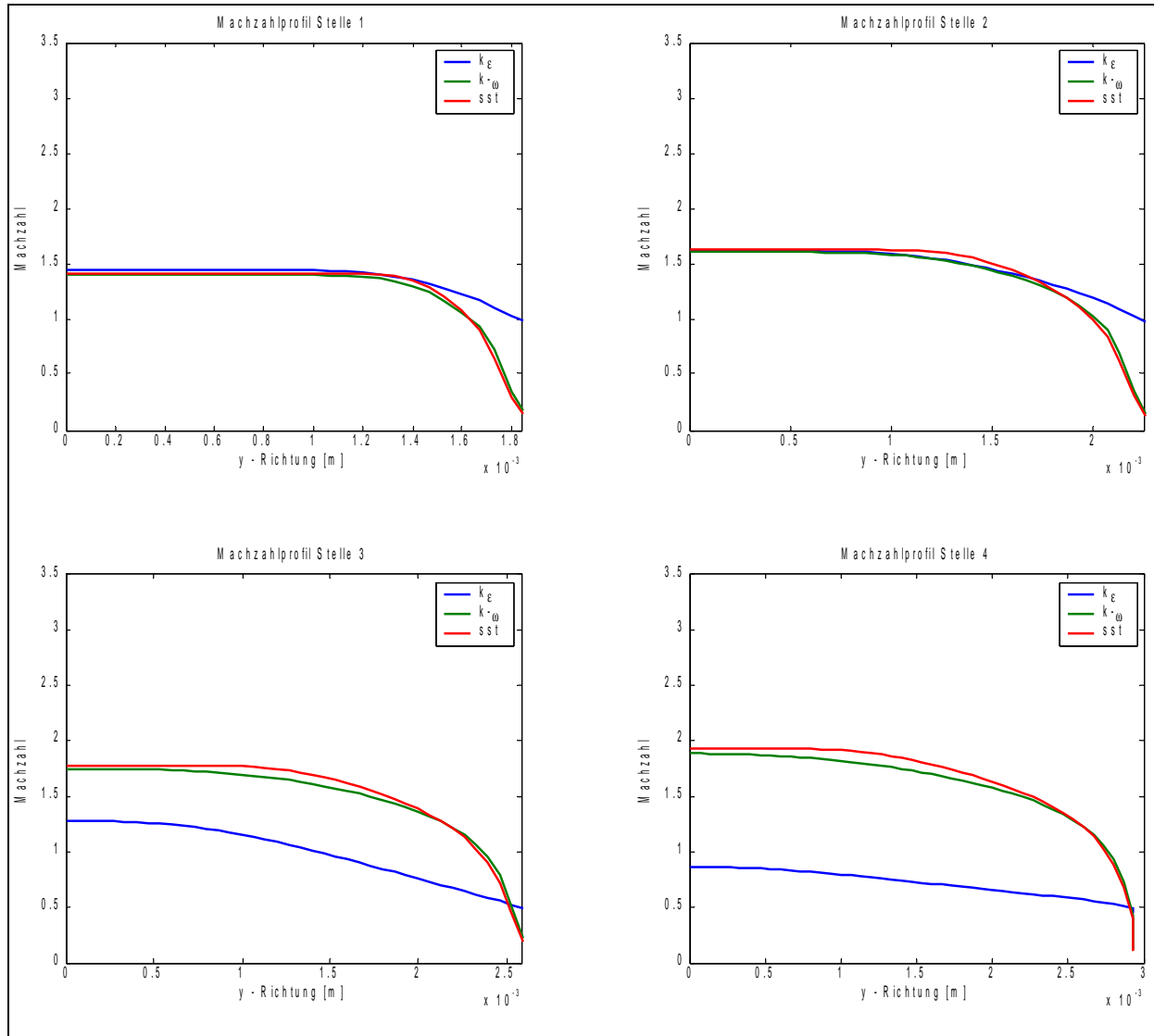


Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

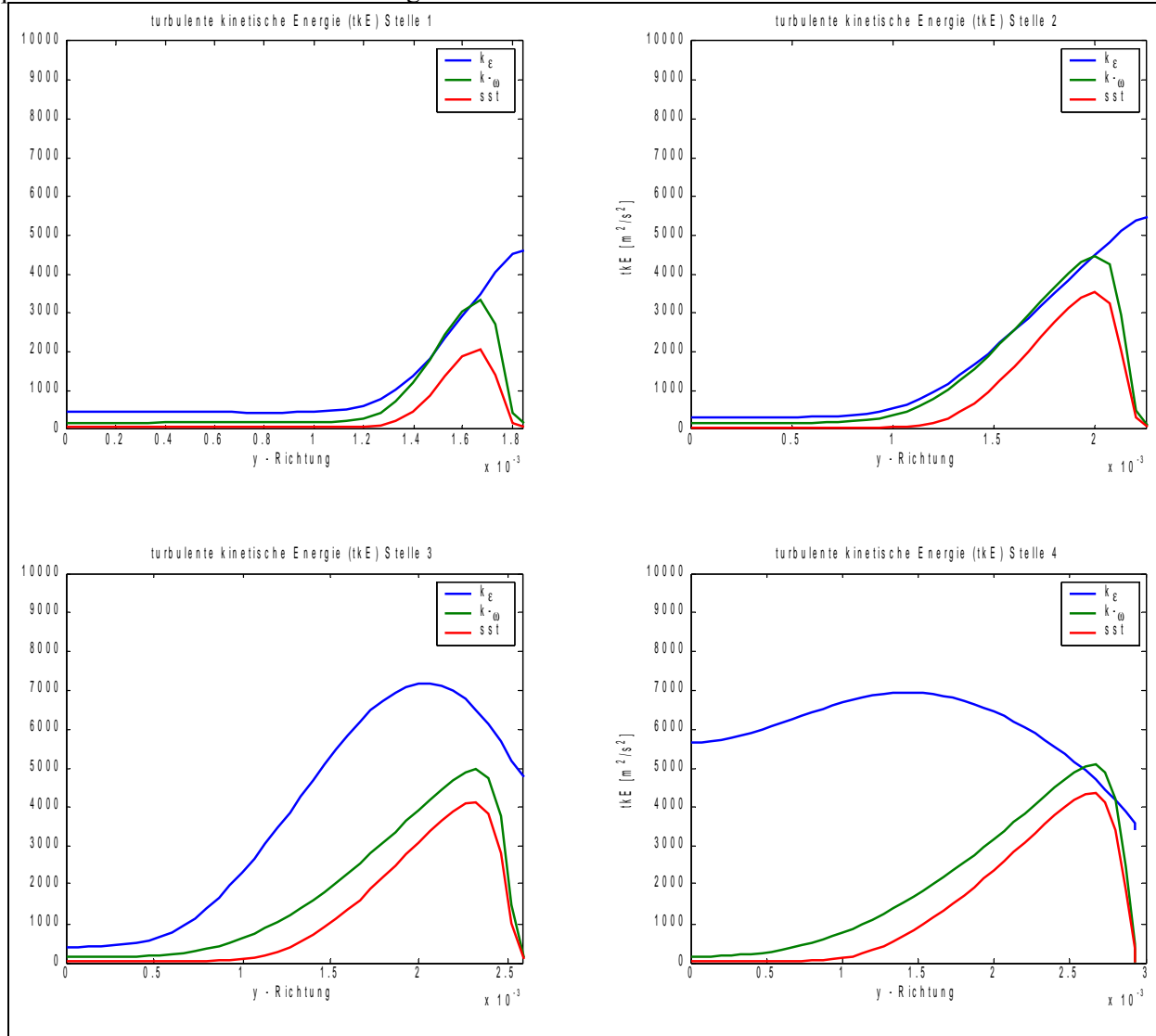


Auswertung Düsenhöhe

Machzahl an 4 Stellen.



Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

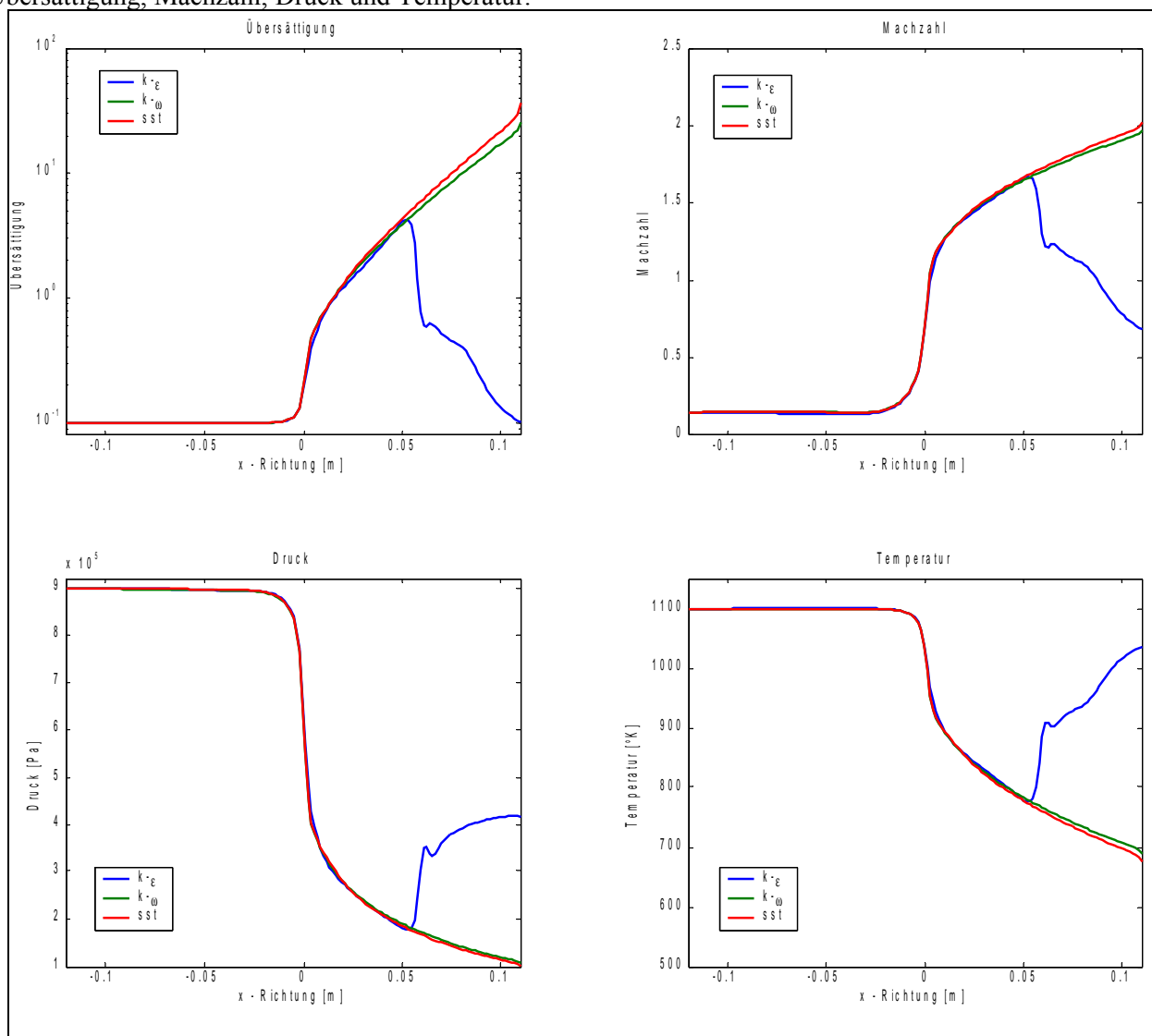


9.2.7.) Lavaldüse 3 x 6 [mm] – Austrittshöhe 0.0065 [m]

Breite: 6 [mm]
Höhe engster Querschnitt: 3 [mm]
Höhe am Austritt: 0.0065 [m]

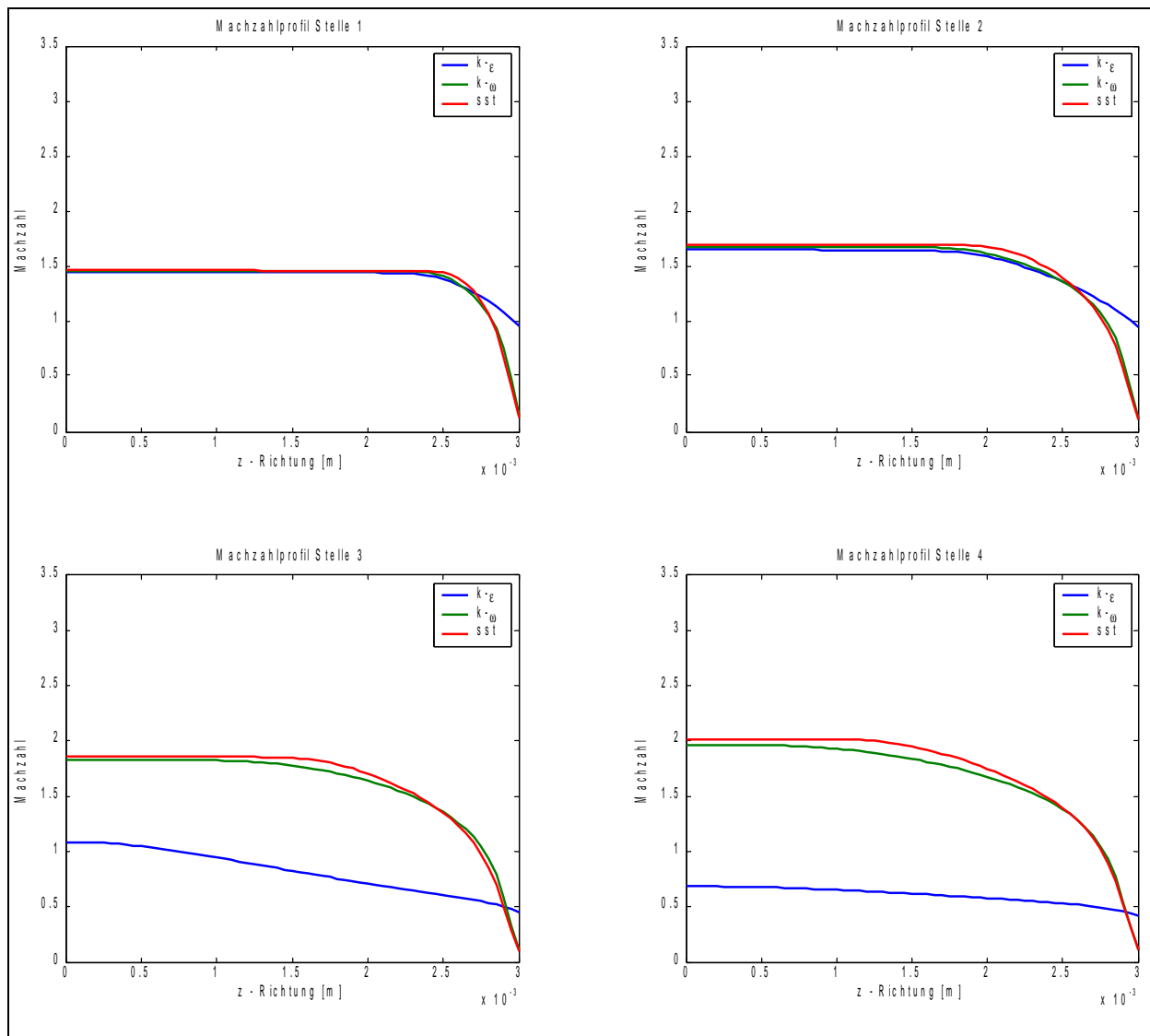
Auswertung Düsenachse

Übersättigung, Machzahl, Druck und Temperatur.

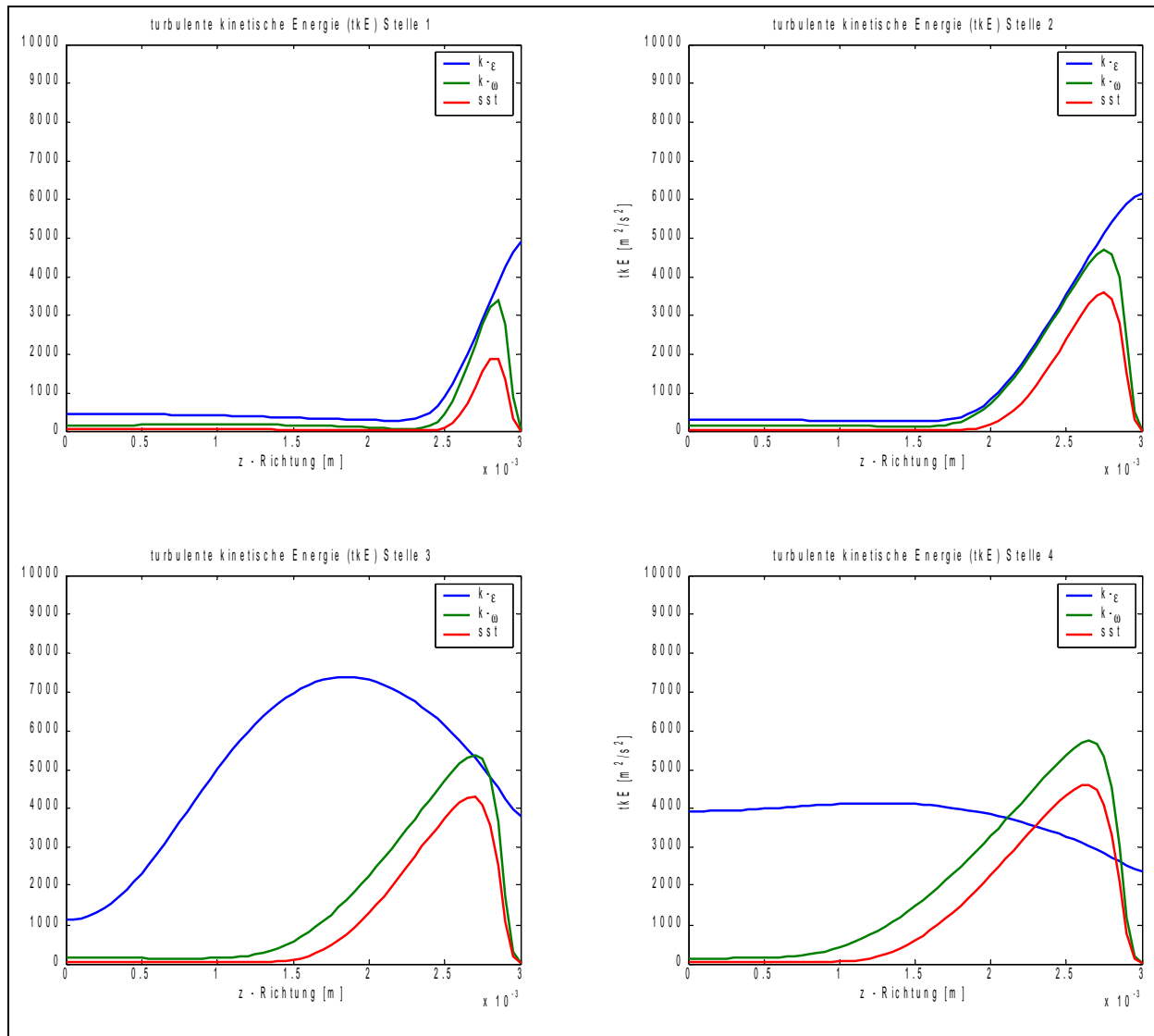


Auswertung Düsenbreite

Machzahl an 4 Stellen.

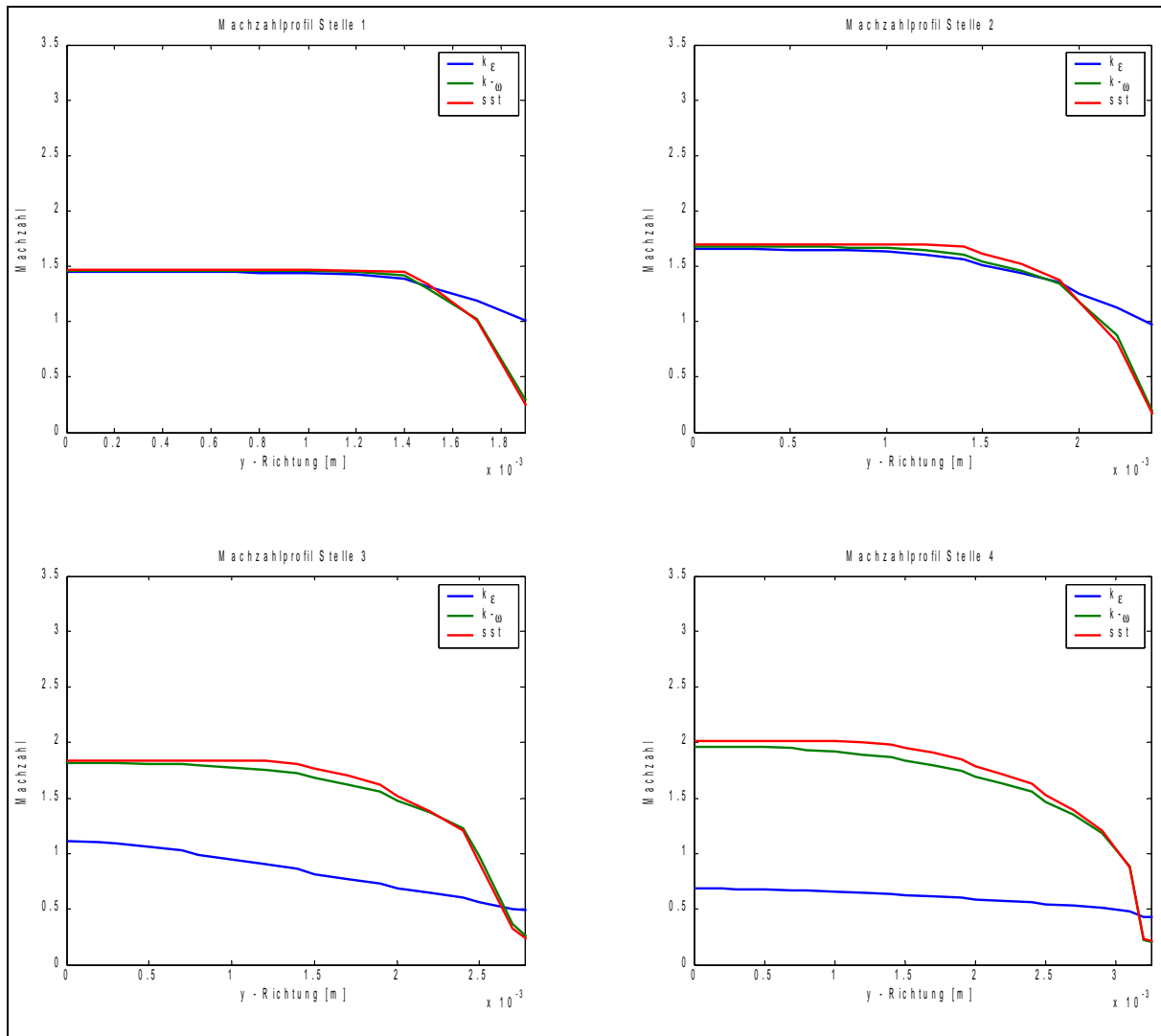


Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

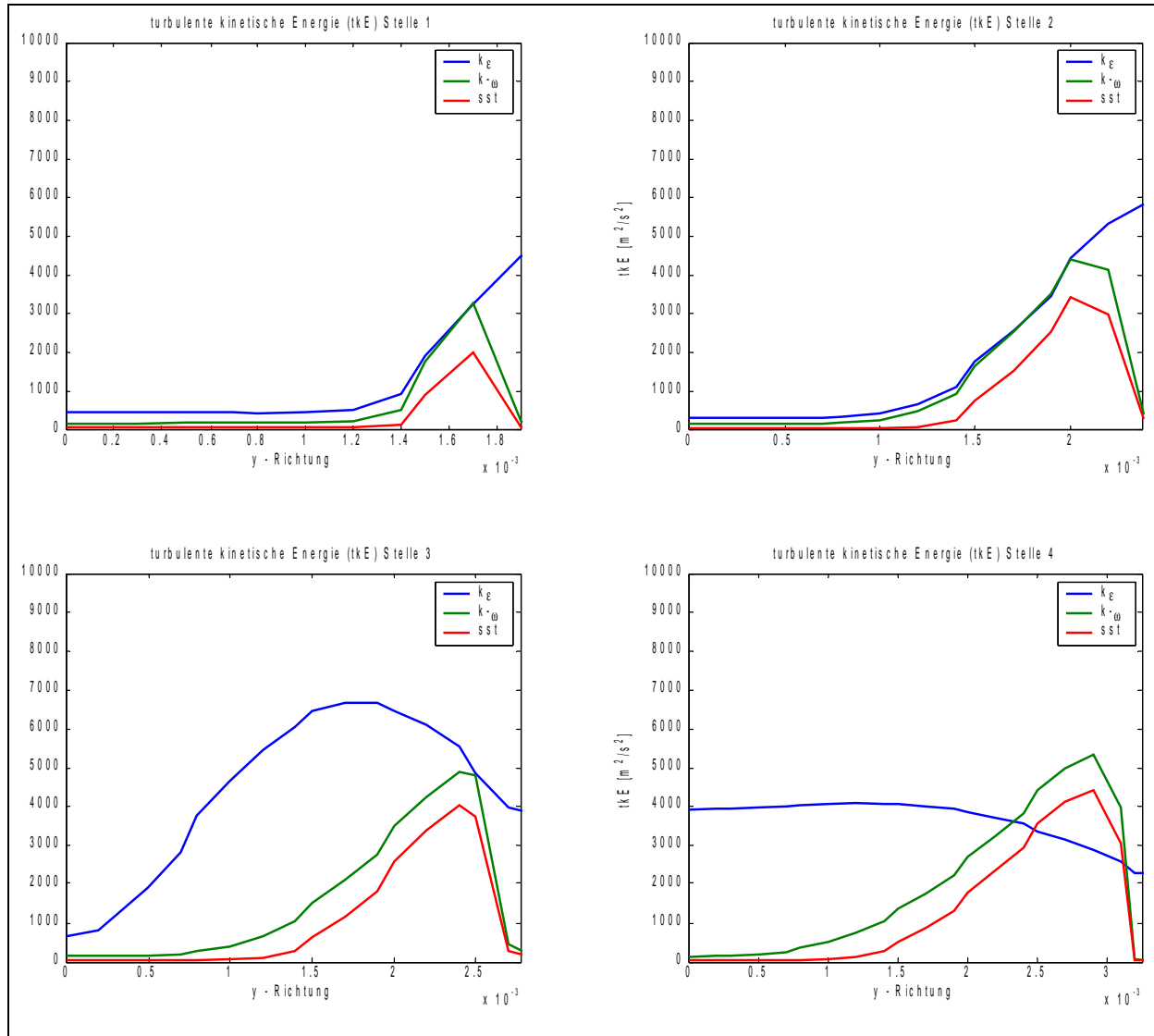


Auswertung Düsenhöhe

Machzahl an 4 Stellen.



Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

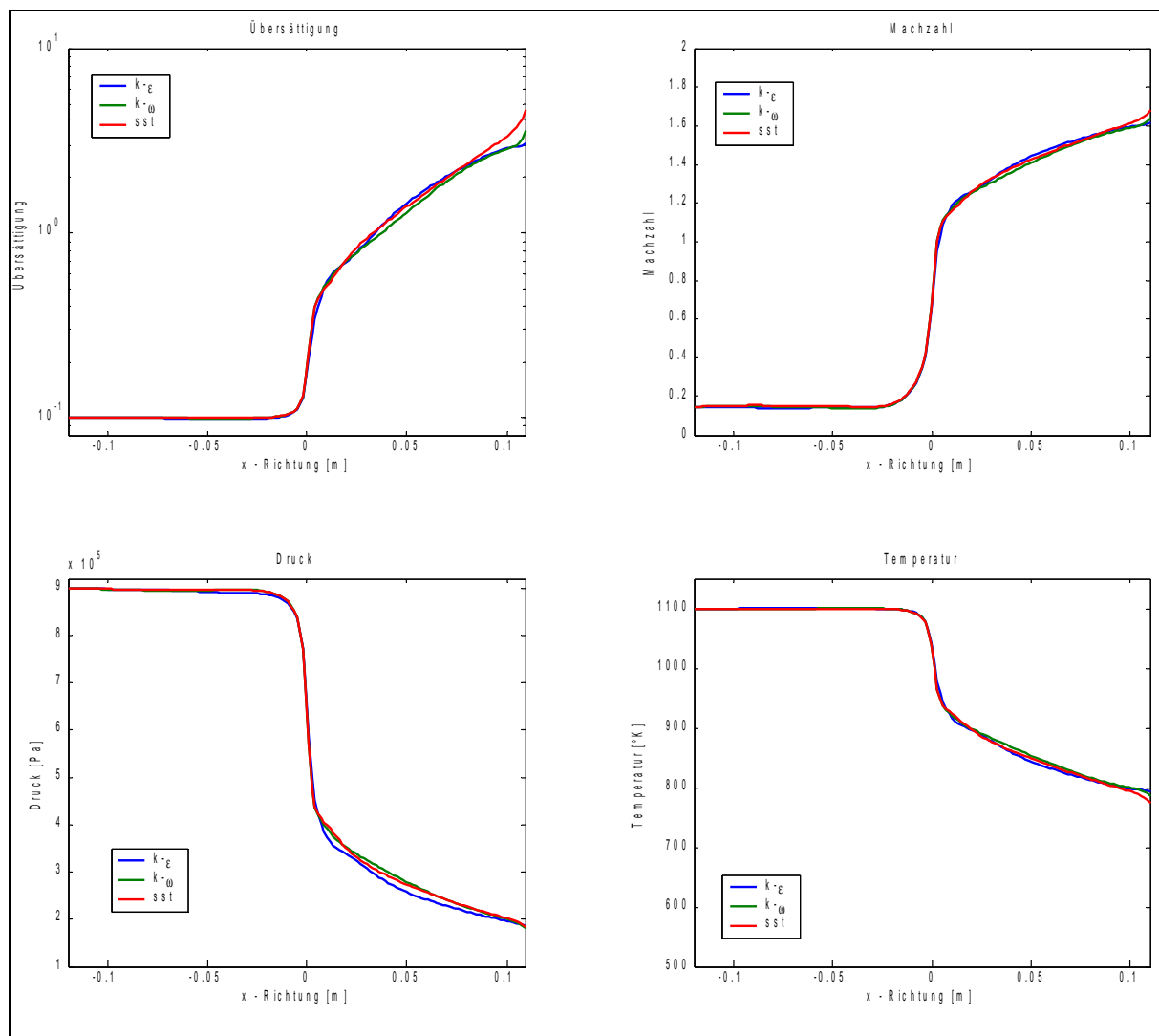


9.2.8.) Lavaldüse 3 x 5 [mm] – Austrittshöhe 0.005 [m]

Breite: 5 [mm]
 Höhe engster Querschnitt: 3 [mm]
 Höhe am Austritt: 0.005 [m]

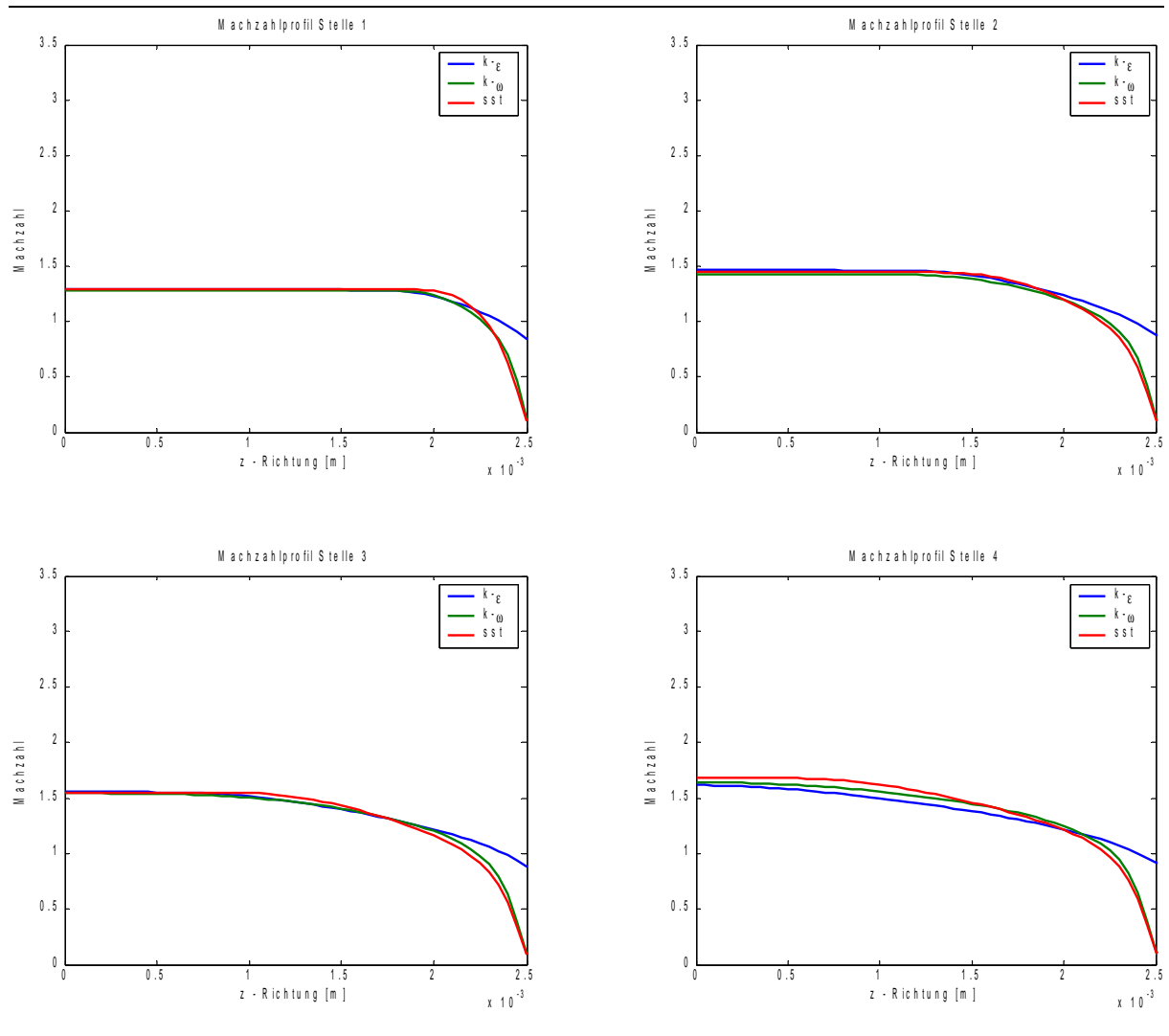
Auswertung Düsenachse

Übersättigung, Machzahl, Druck und Temperatur.

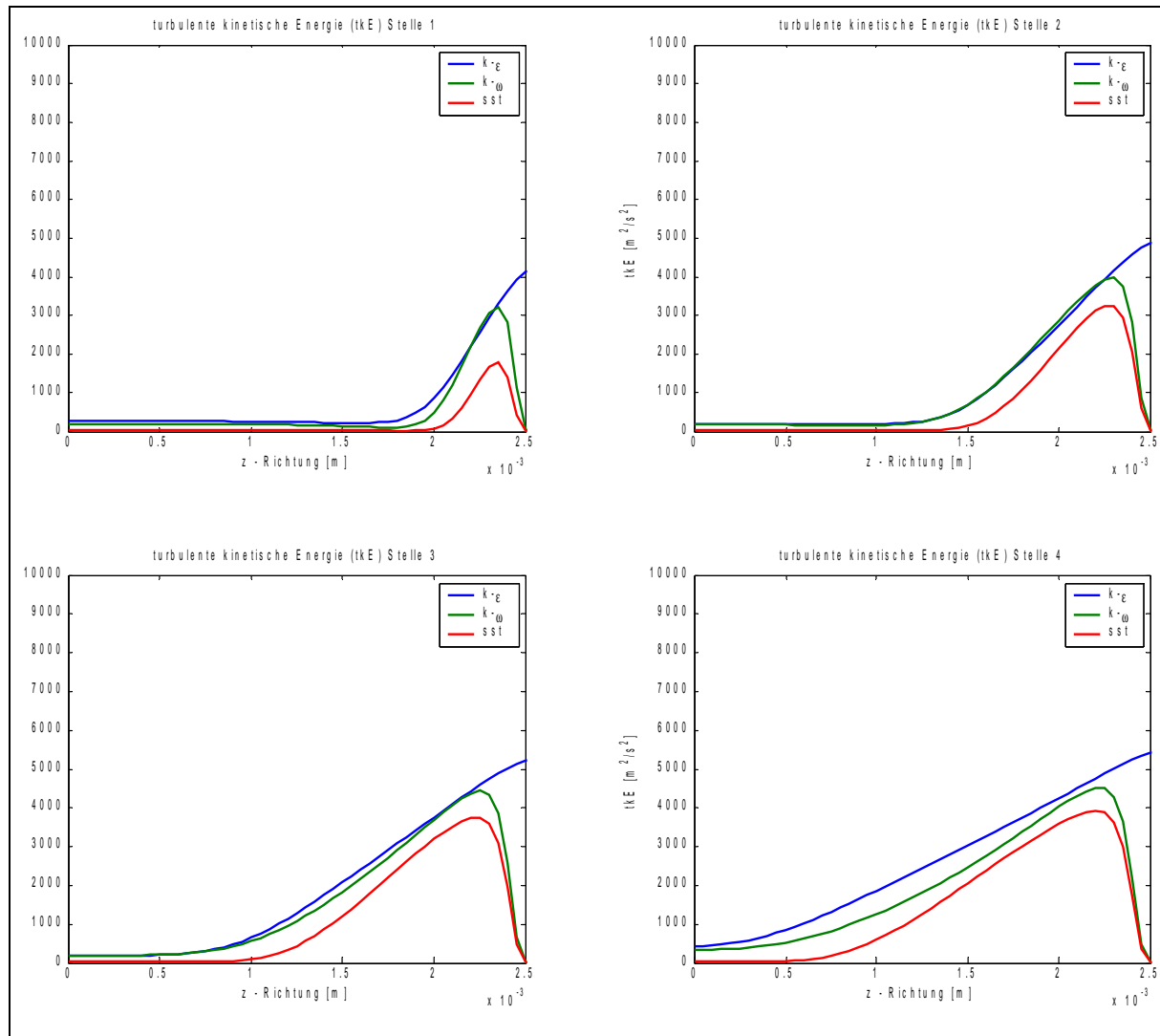


Auswertung Düsenbreite

Machzahl an 4 Stellen.

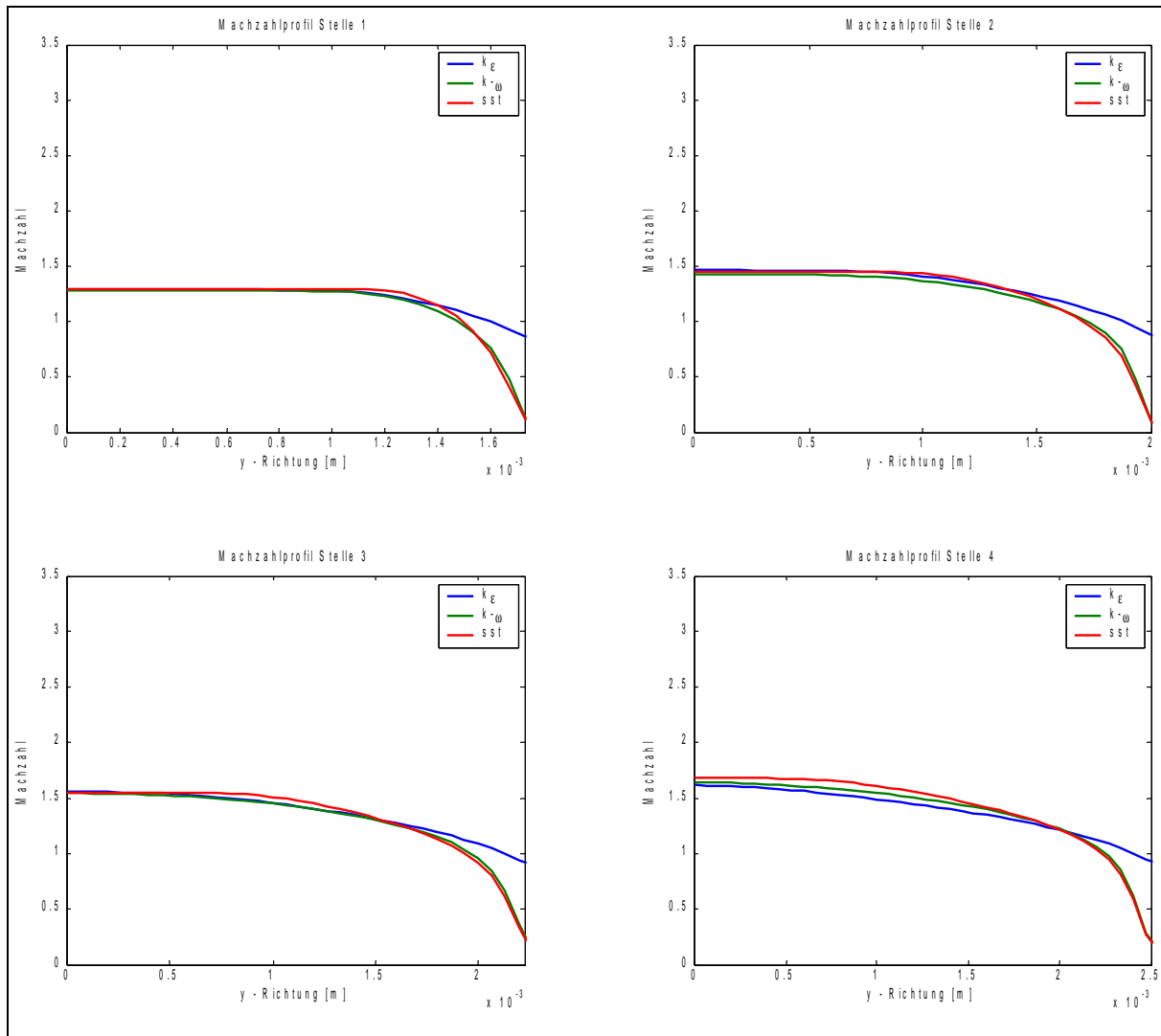


Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

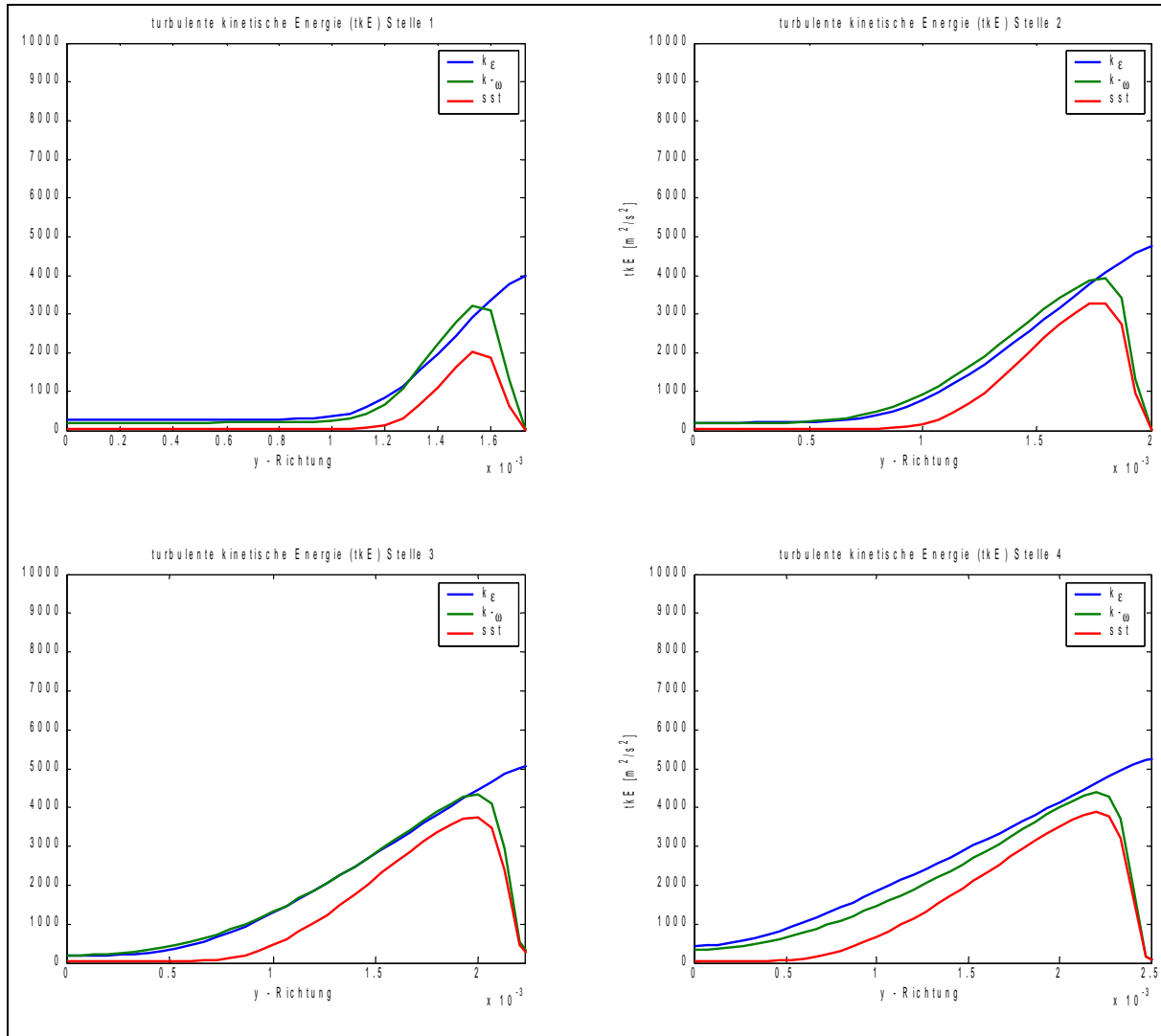


Auswertung Düsenhöhe

Machzahl an 4 Stellen.



Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

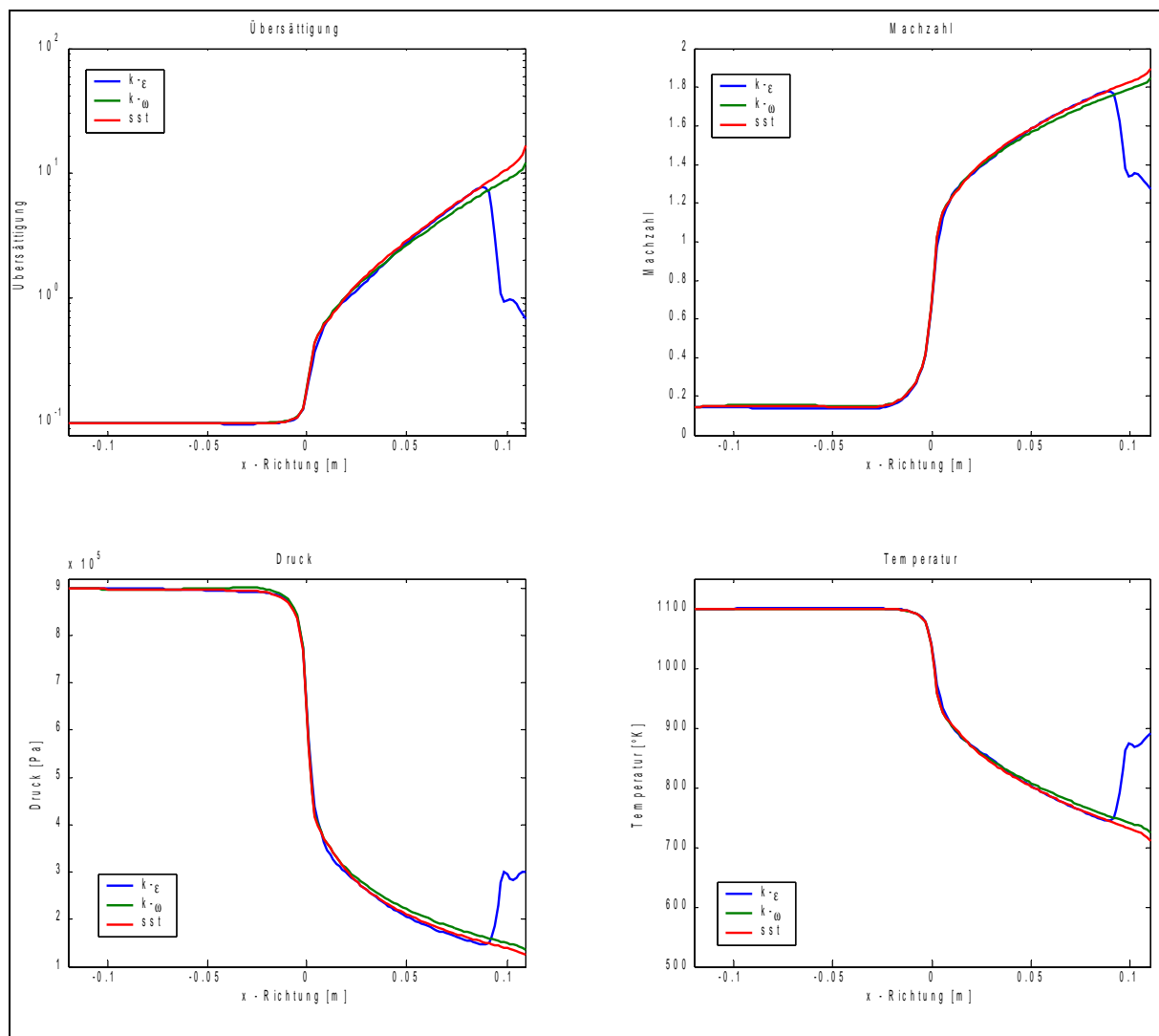


9.2.9.) Lavaldüse 3 x 5 [mm] – Austrittshöhe 0.006 [m]

Breite: 5 [mm]
 Höhe engster Querschnitt: 3 [mm]
 Höhe am Austritt: 0.006 [m]

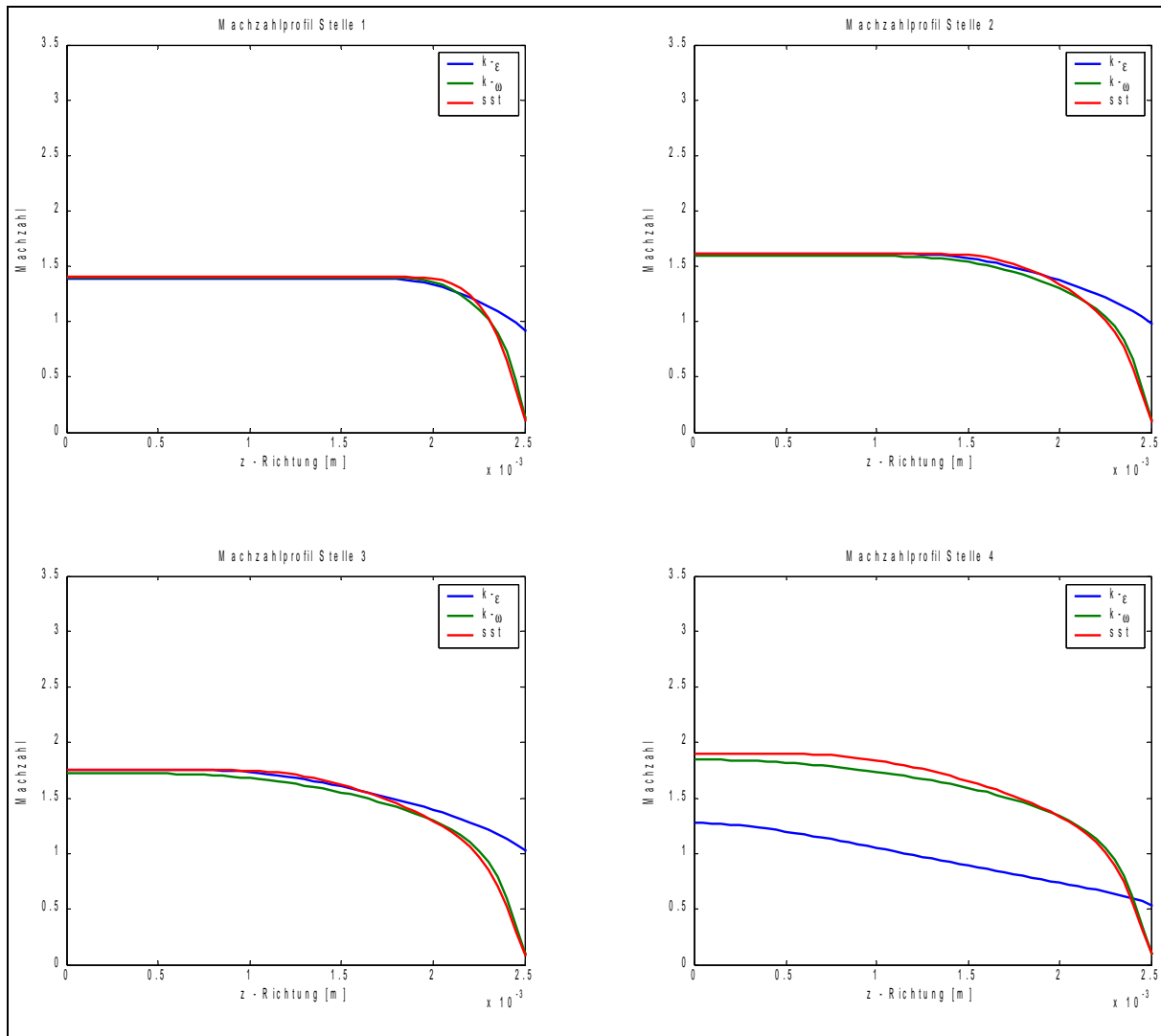
Auswertung Düsenachse

Übersättigung, Machzahl, Druck und Temperatur.

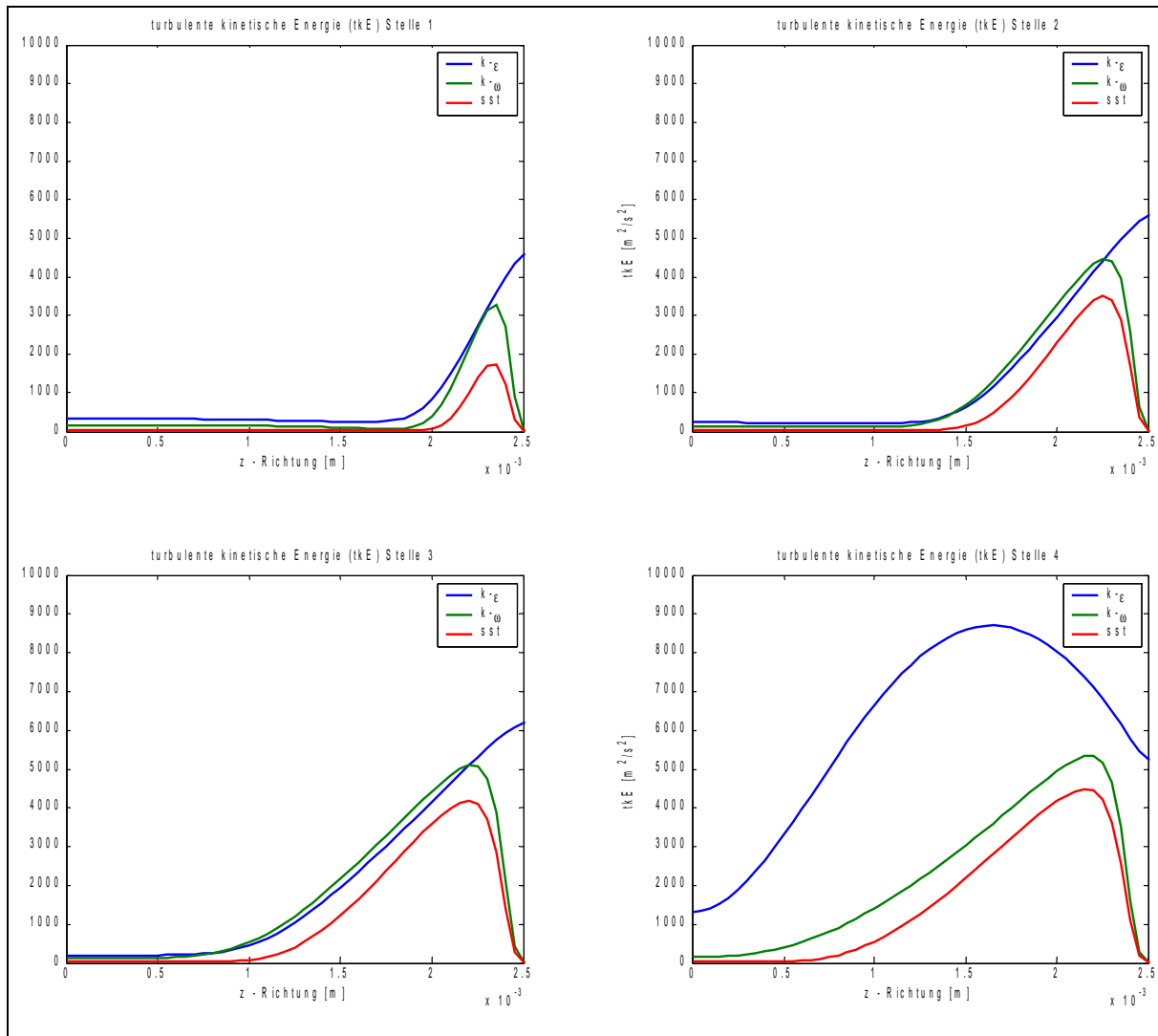


Auswertung Düsenbreite

Machzahl an 4 Stellen.

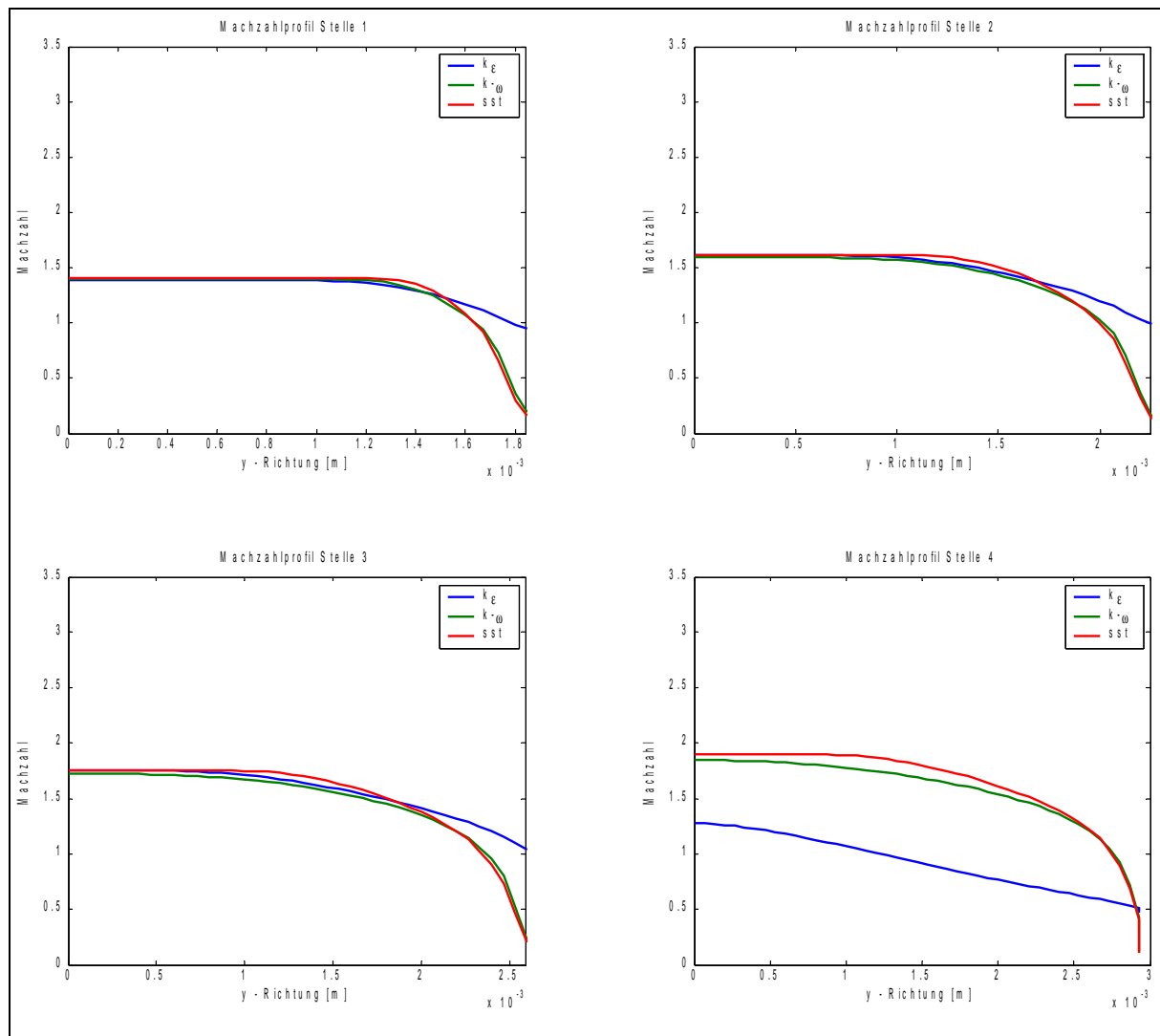


Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

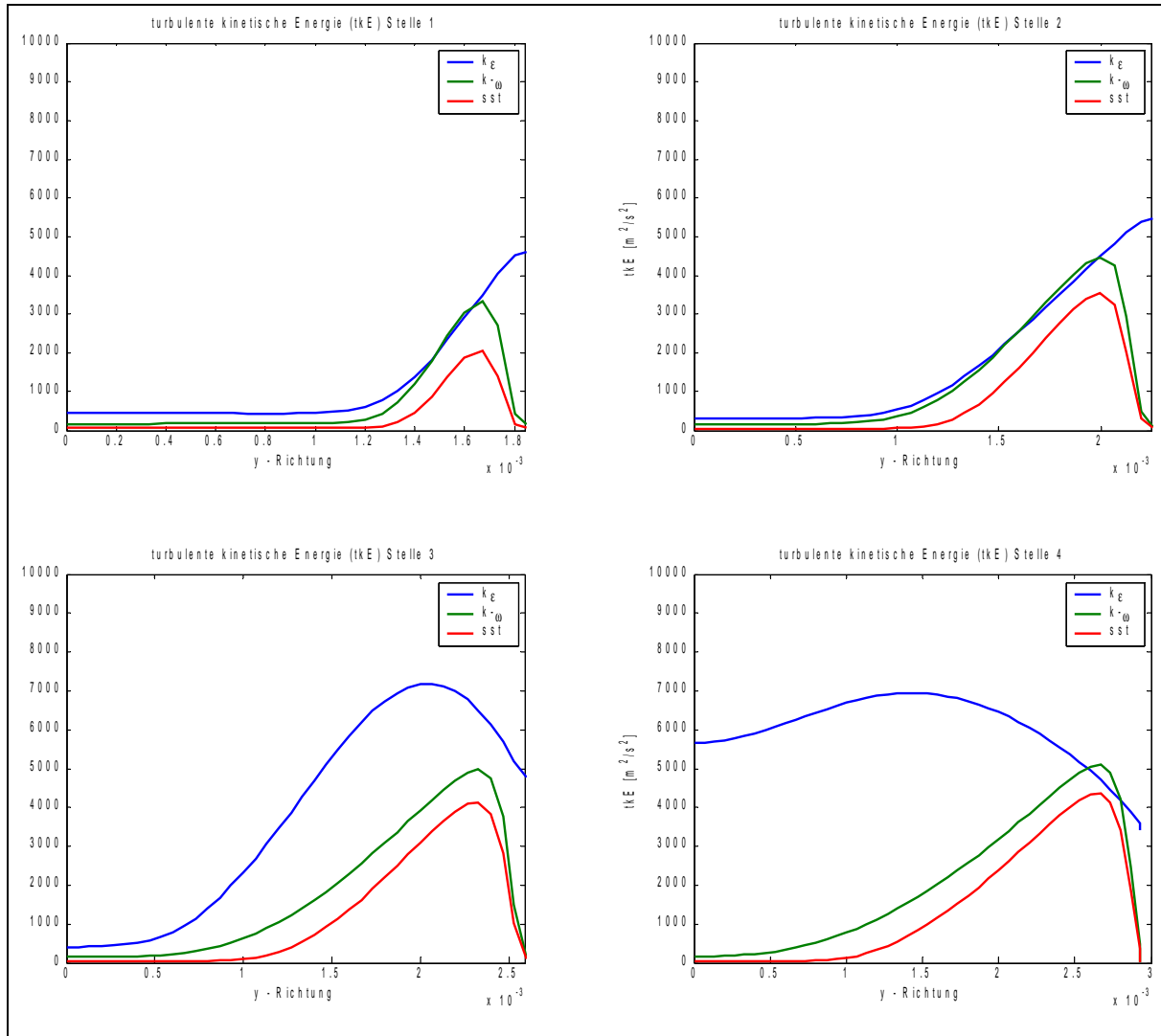


Auswertung Düsenhöhe

Machzahl an 4 Stellen.



Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

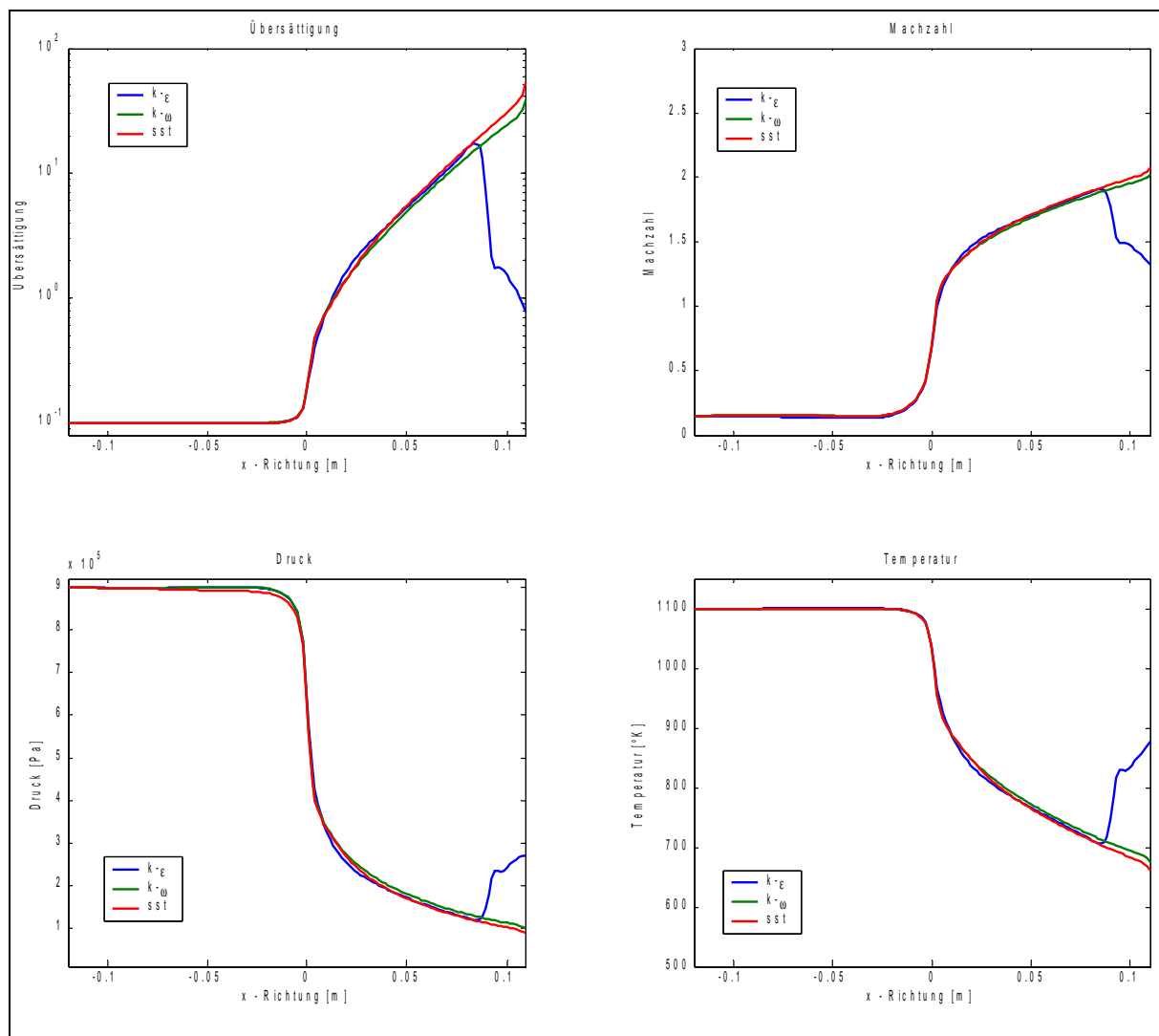


9.2.10.) Lavaldüse 3 x 5 [mm] – Austrittshöhe 0.007 [m]

Breite: 5 [mm]
 Höhe engster Querschnitt: 3 [mm]
 Höhe am Austritt: 0.007 [m]

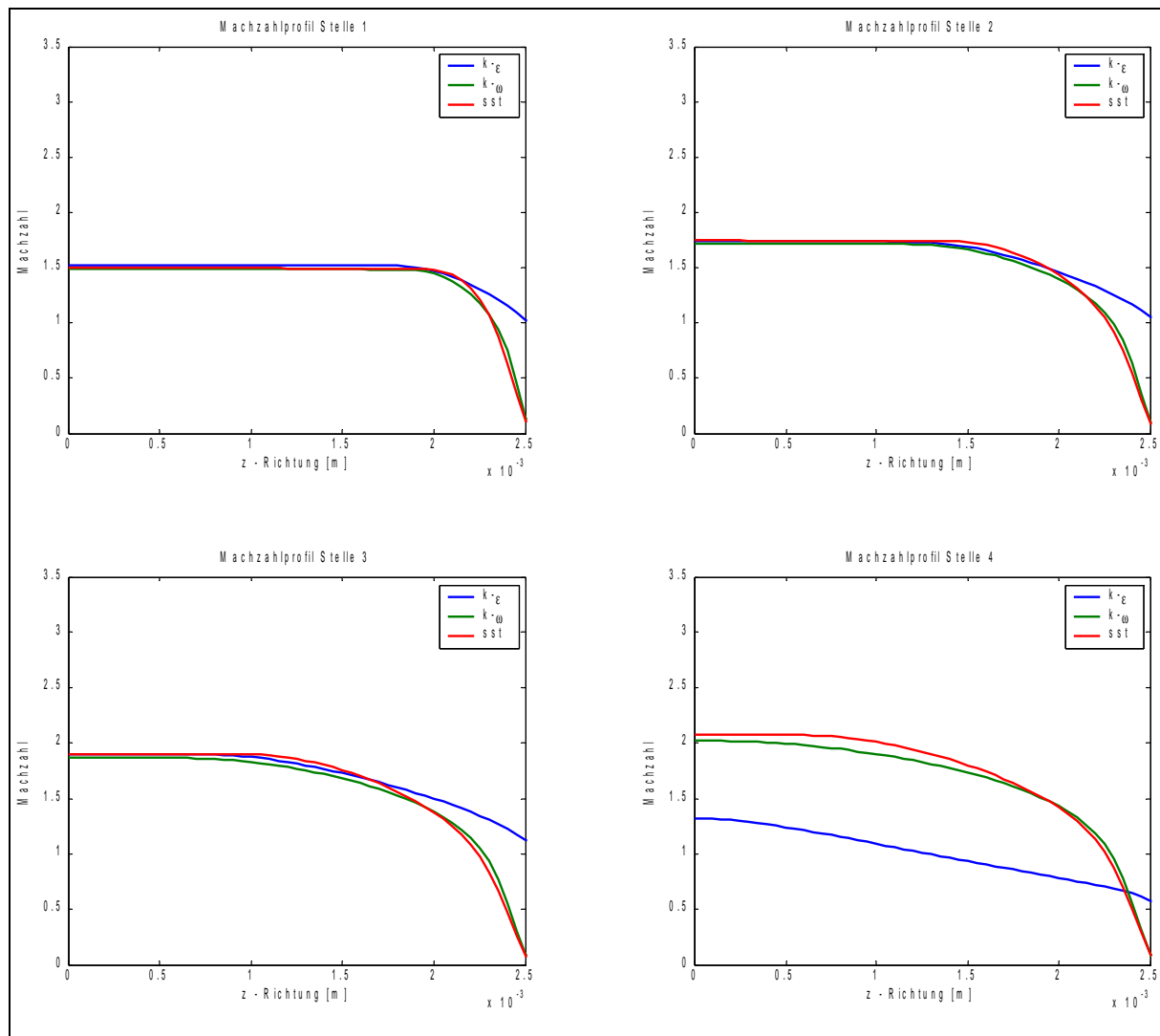
Auswertung Düsenachse

Übersättigung, Machzahl, Druck und Temperatur.

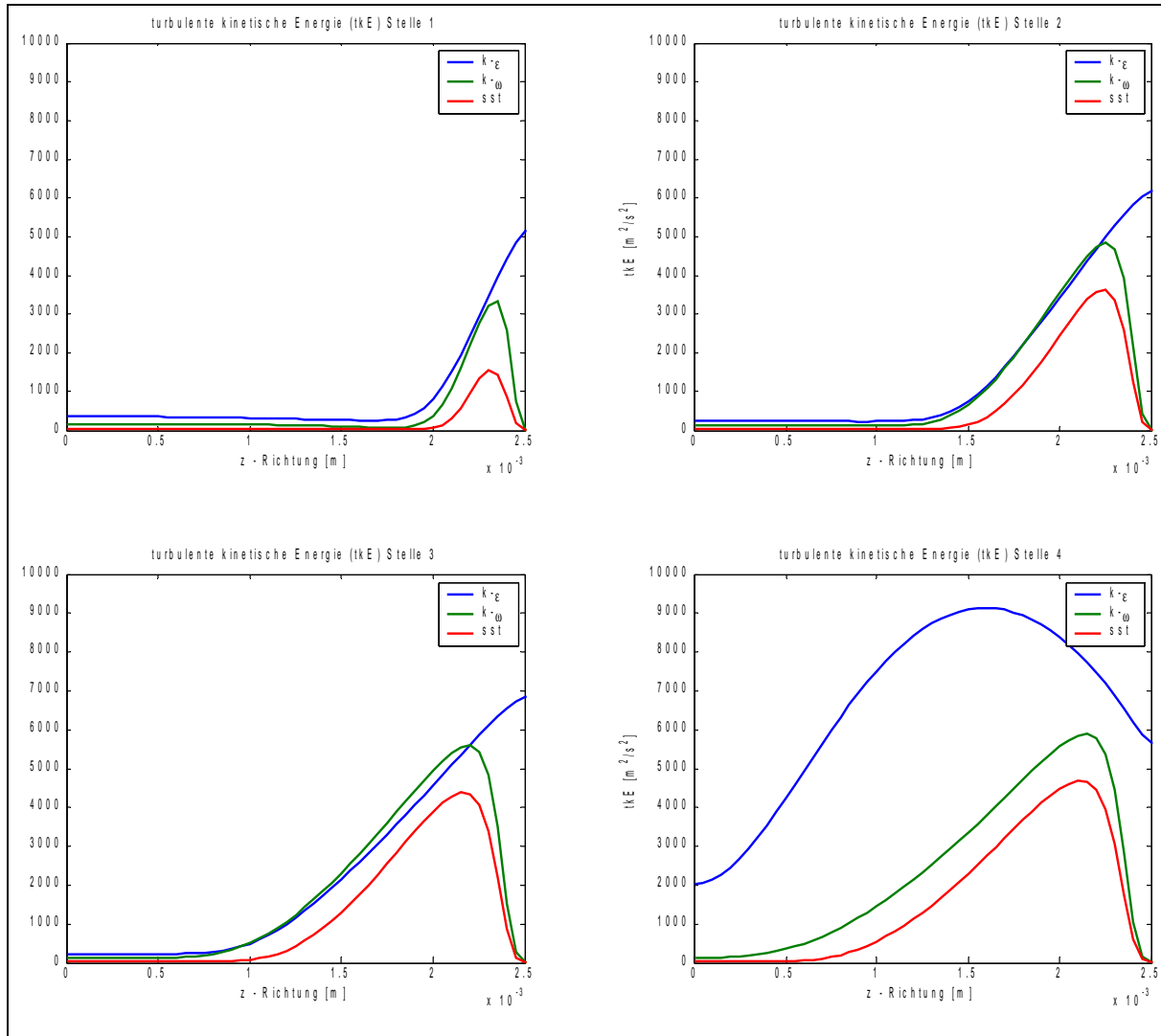


Auswertung Düsenbreite

Machzahl an 4 Stellen.

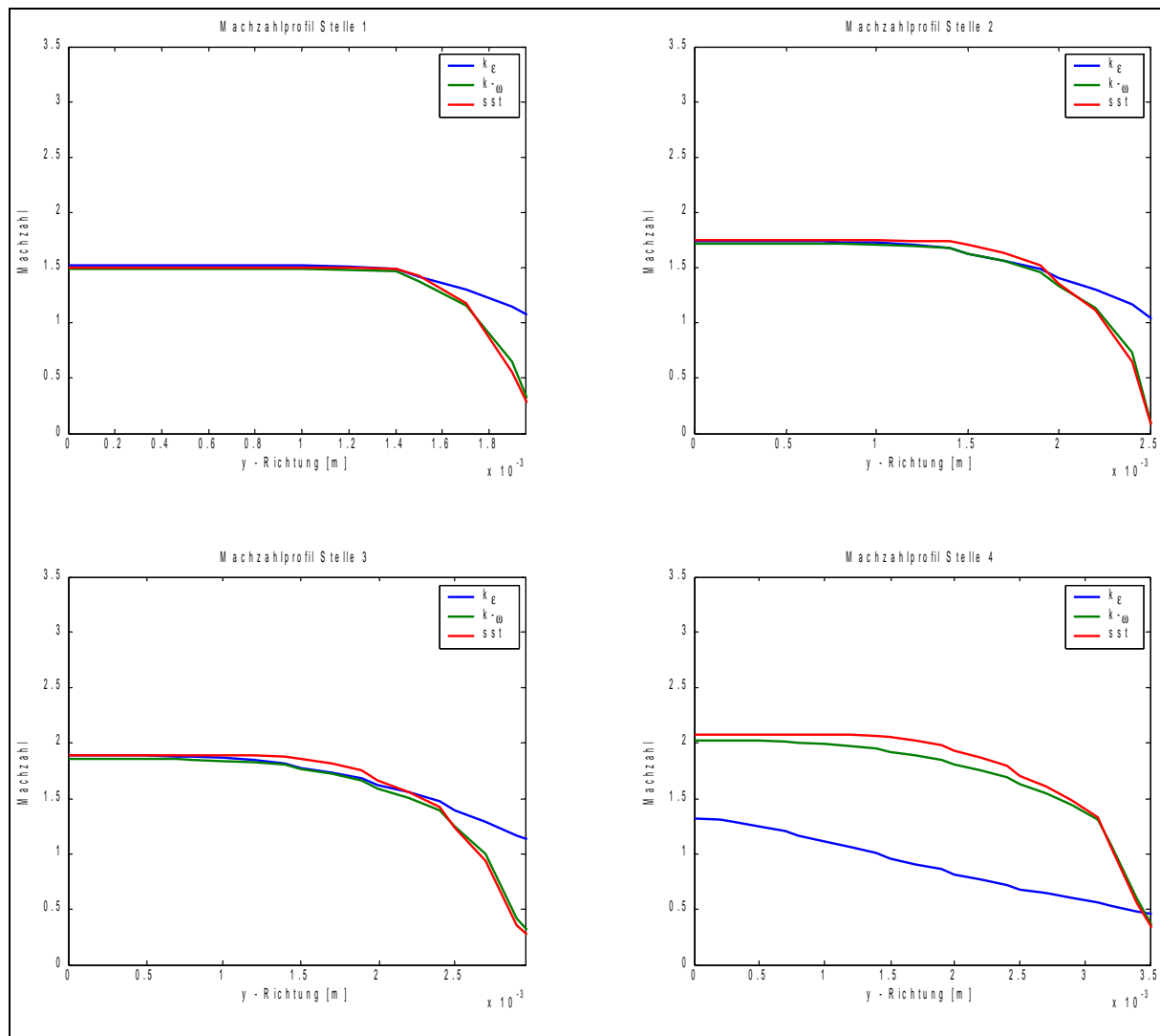


Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

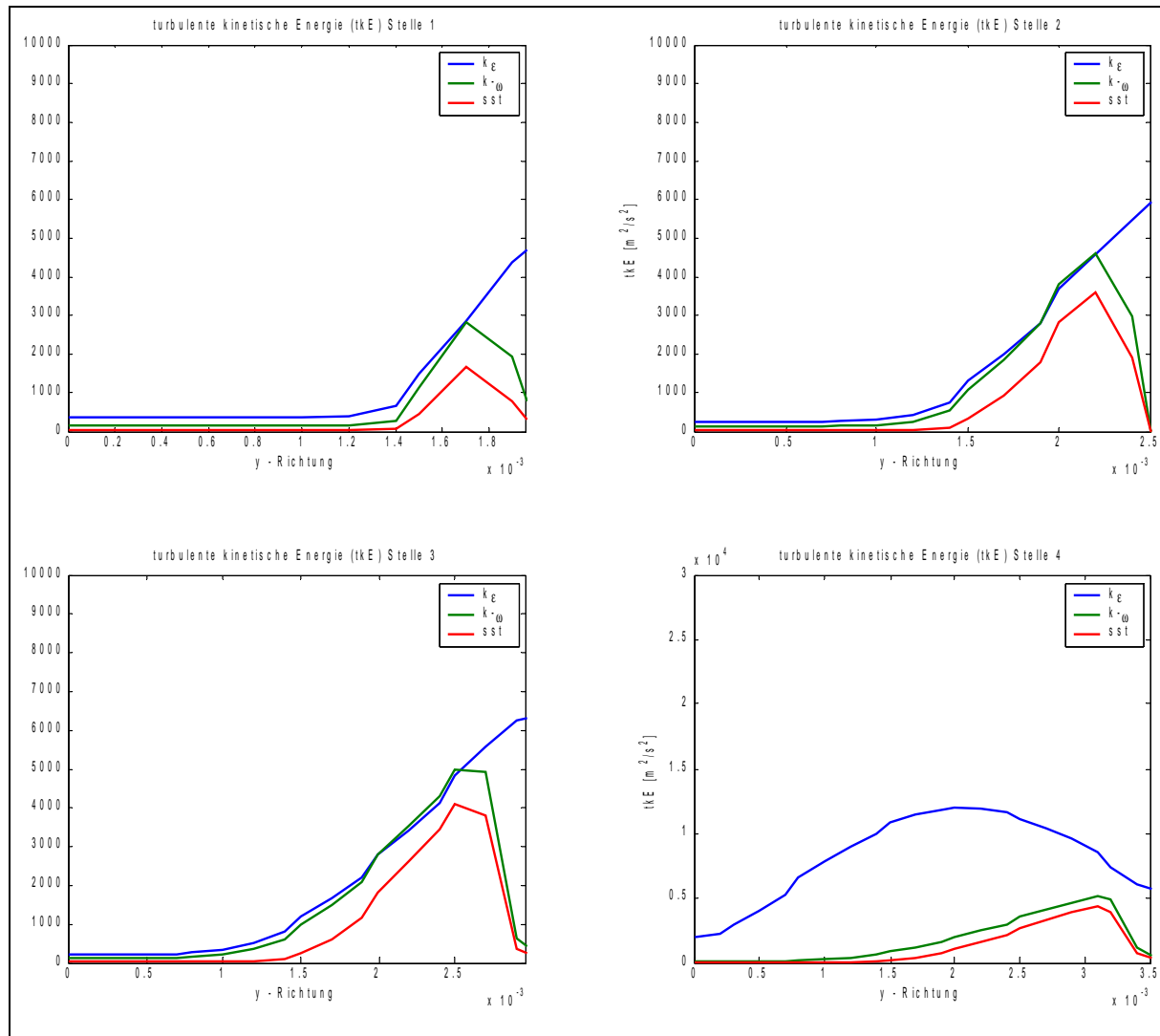


Auswertung Düsenhöhe

Machzahl an 4 Stellen.



Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

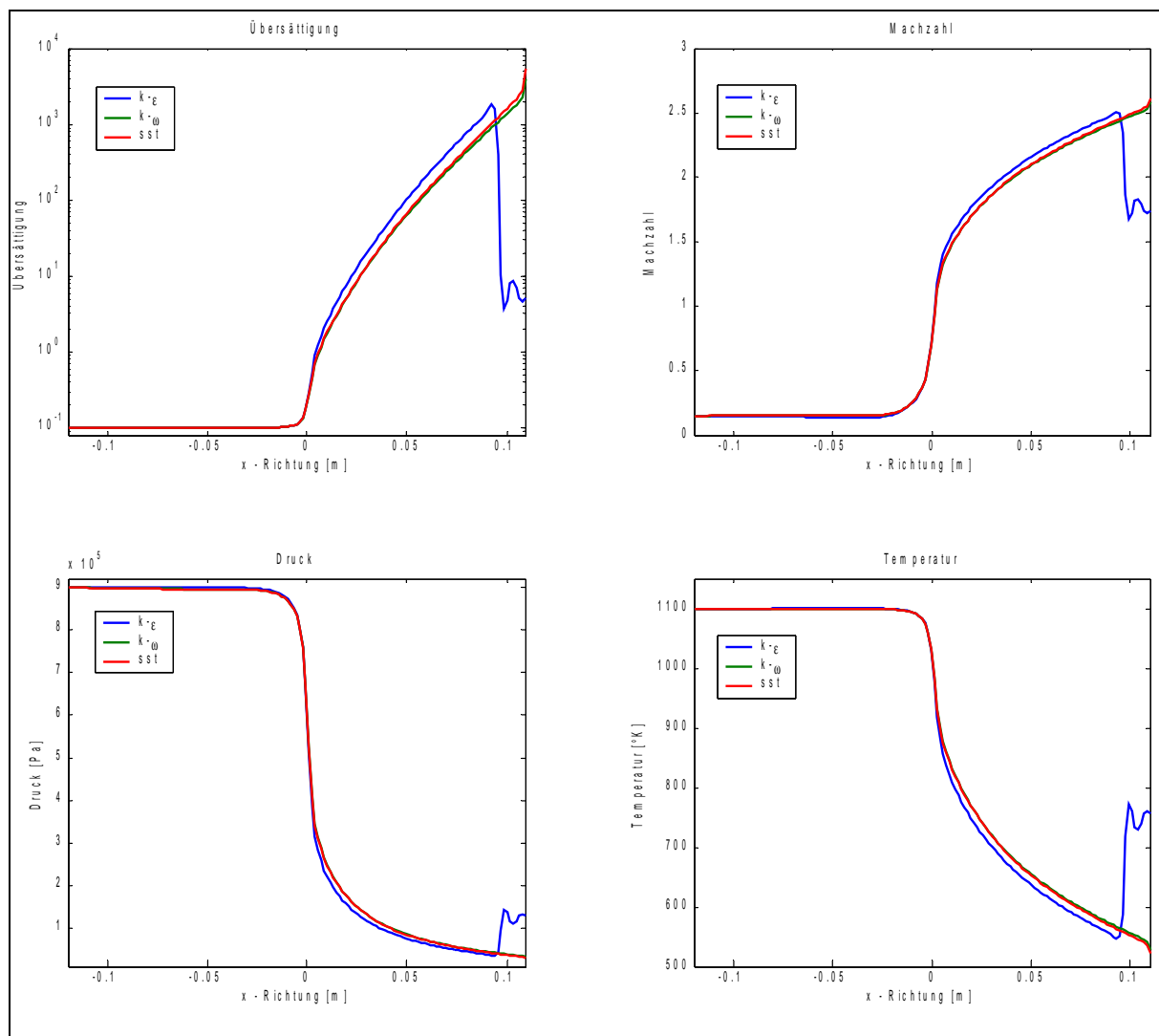


9.2.11.) Lavaldüse 3 x 5 [mm] – Austrittshöhe 0.012 [m]

Breite: 5 [mm]
 Höhe engster Querschnitt: 3 [mm]
 Höhe am Austritt: 0.012 [m]

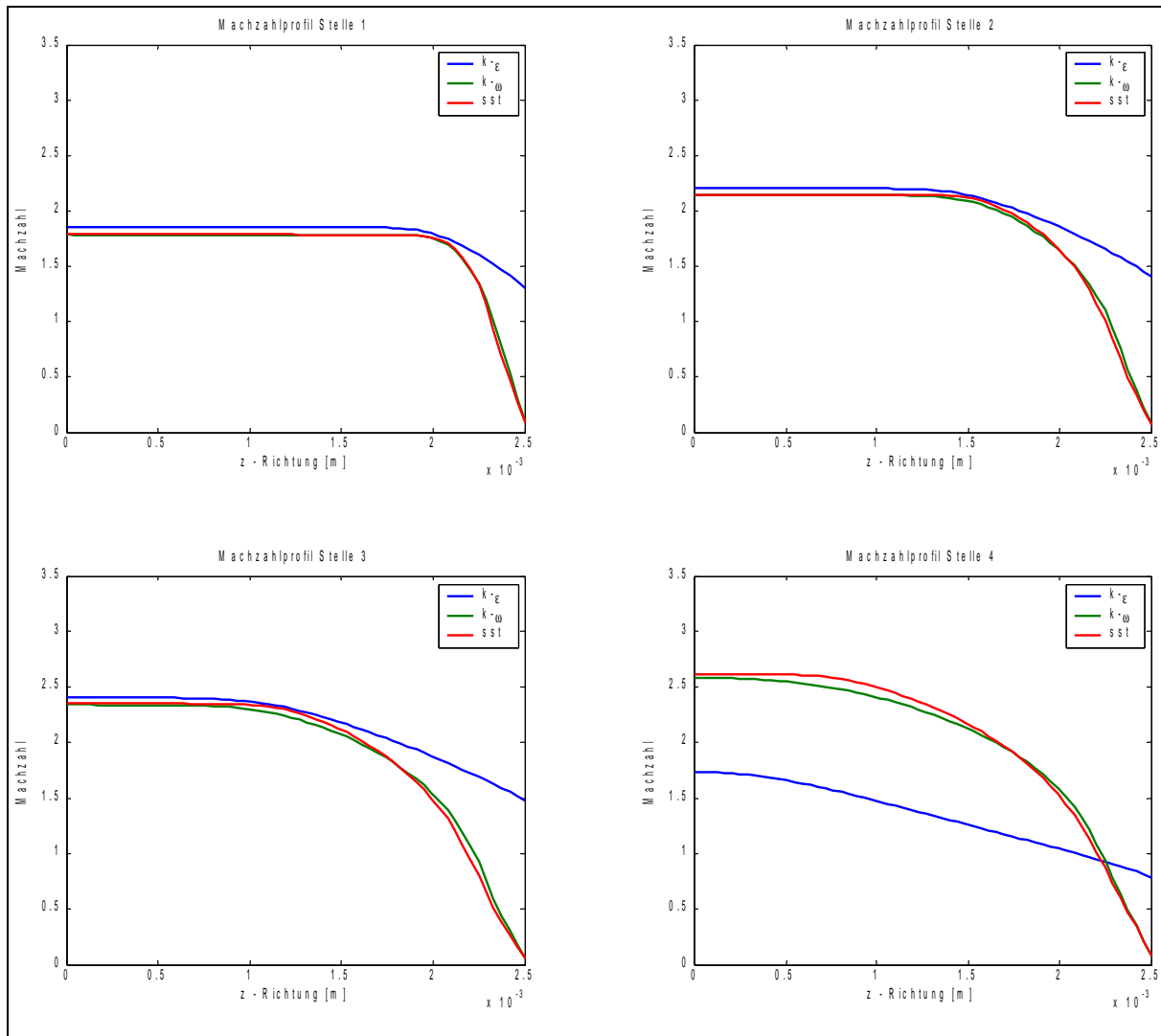
Auswertung Düsenachse

Übersättigung, Machzahl, Druck und Temperatur.

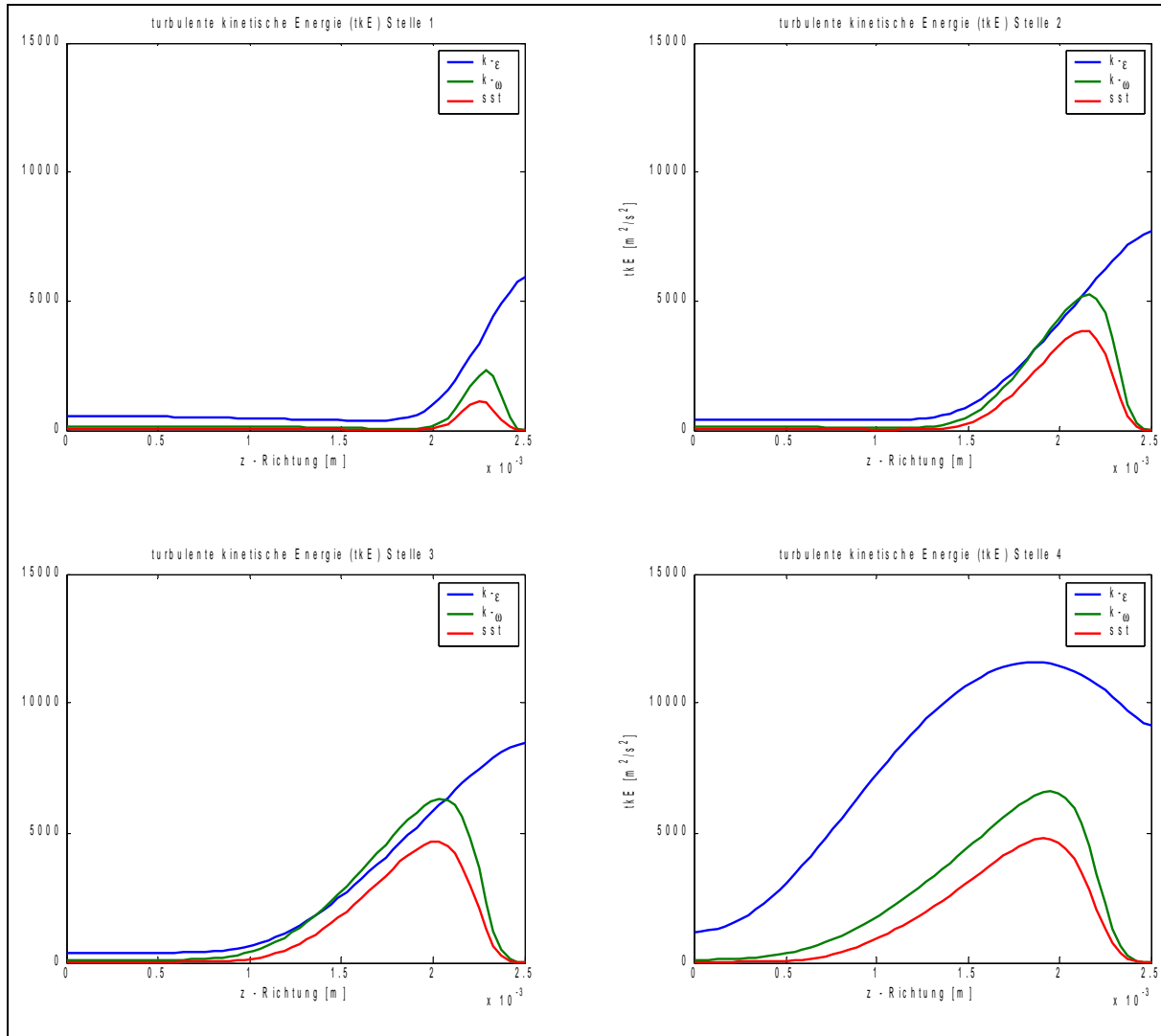


Auswertung Düsenbreite

Machzahl an 4 Stellen.

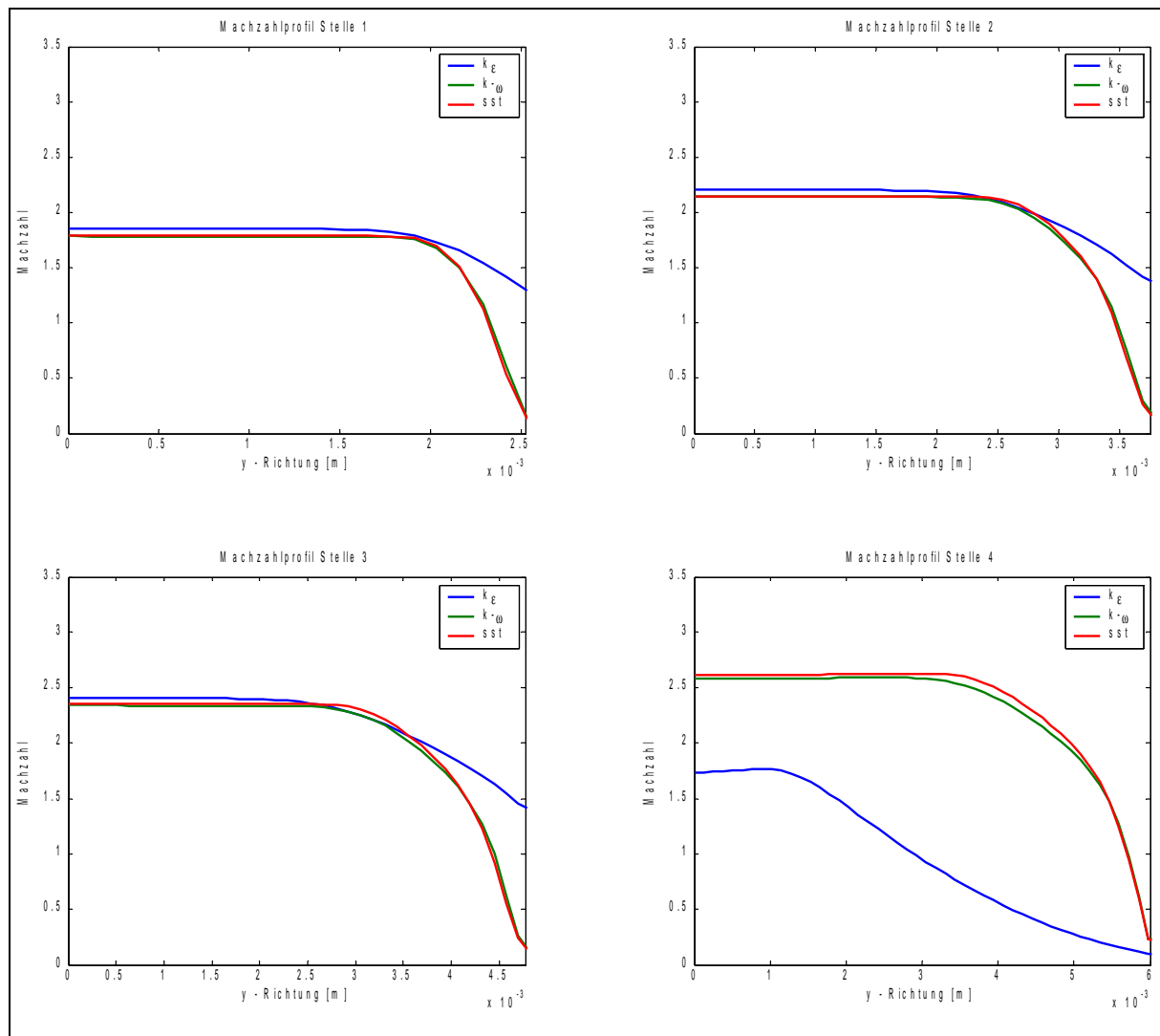


Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

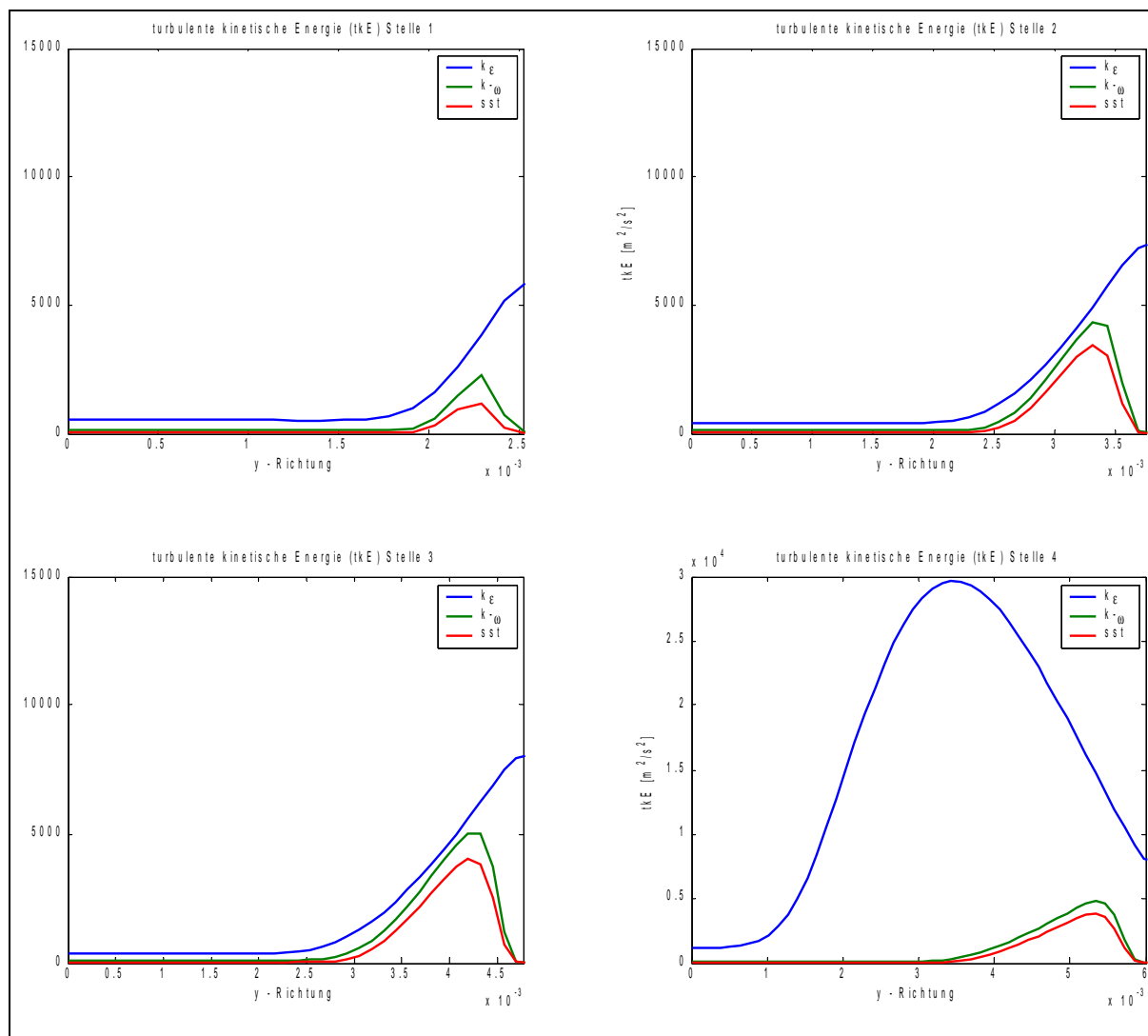


Auswertung Düsenhöhe

Machzahl an 4 Stellen.



Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

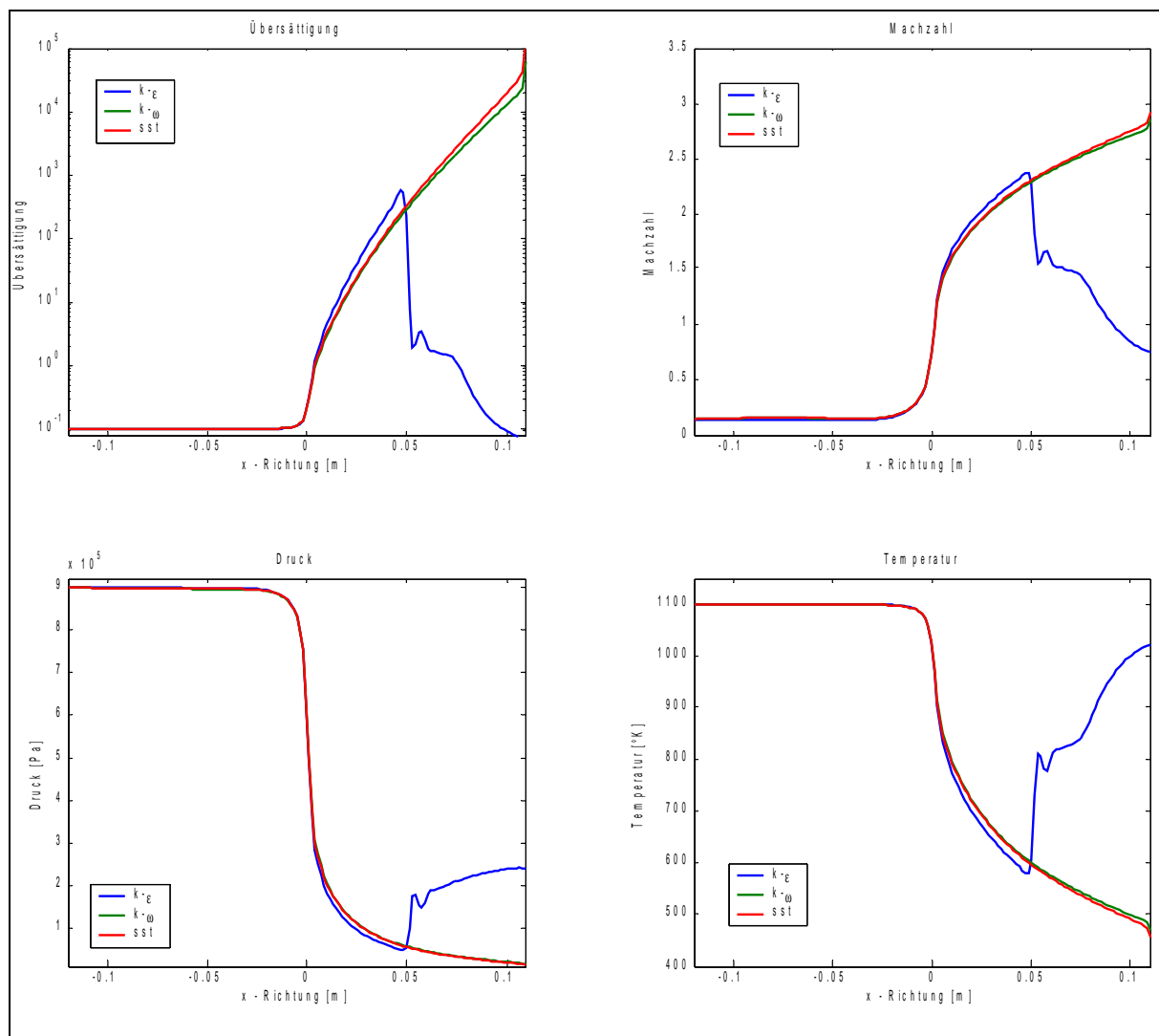


9.2.12.) Lavaldüse 3 x 5 [mm] – Austrittshöhe 0.016 [m]

Breite: 5 [mm]
 Höhe engster Querschnitt: 3 [mm]
 Höhe am Austritt: 0.016 [m]

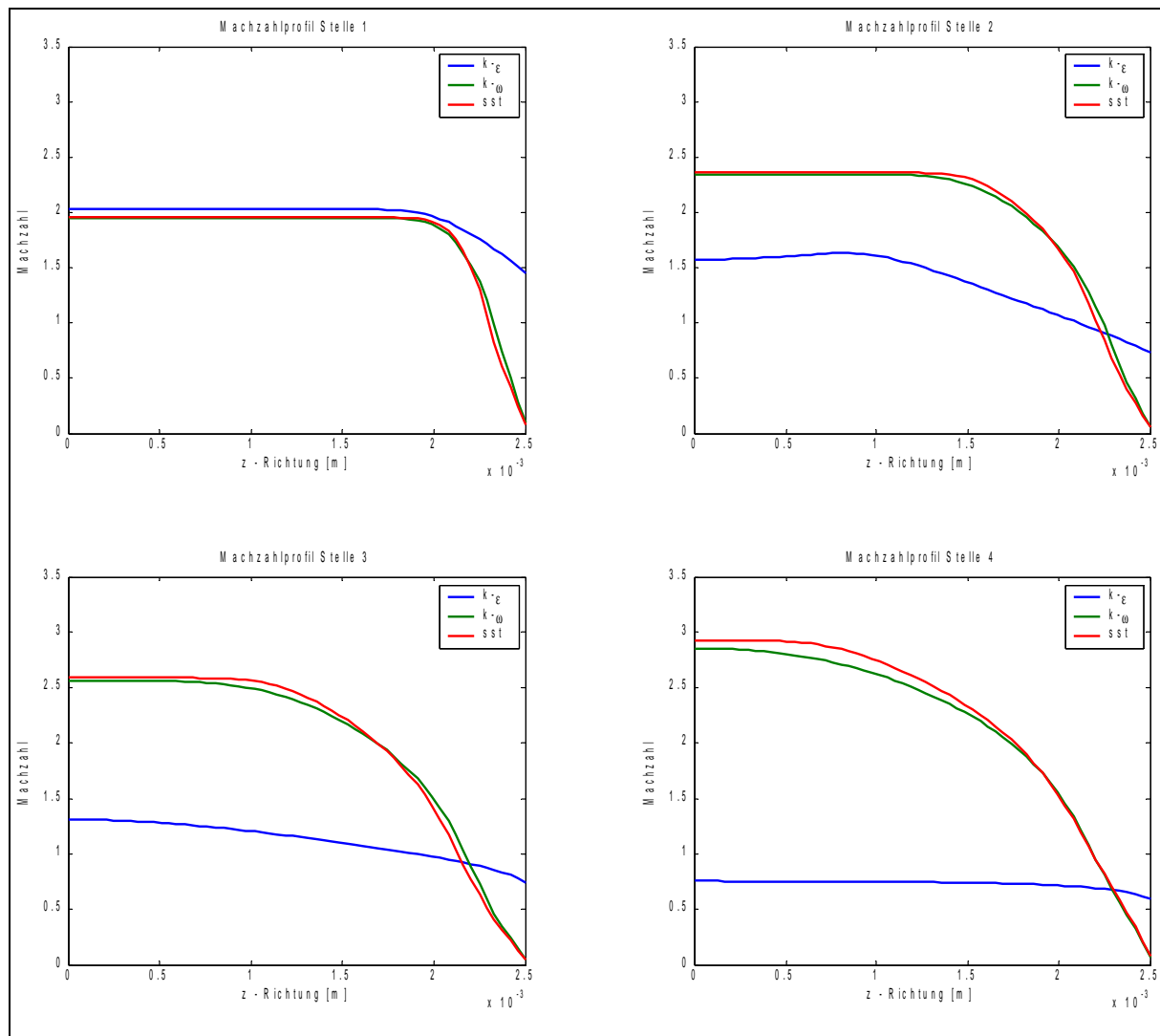
Auswertung Düsenachse

Übersättigung, Machzahl, Druck und Temperatur.

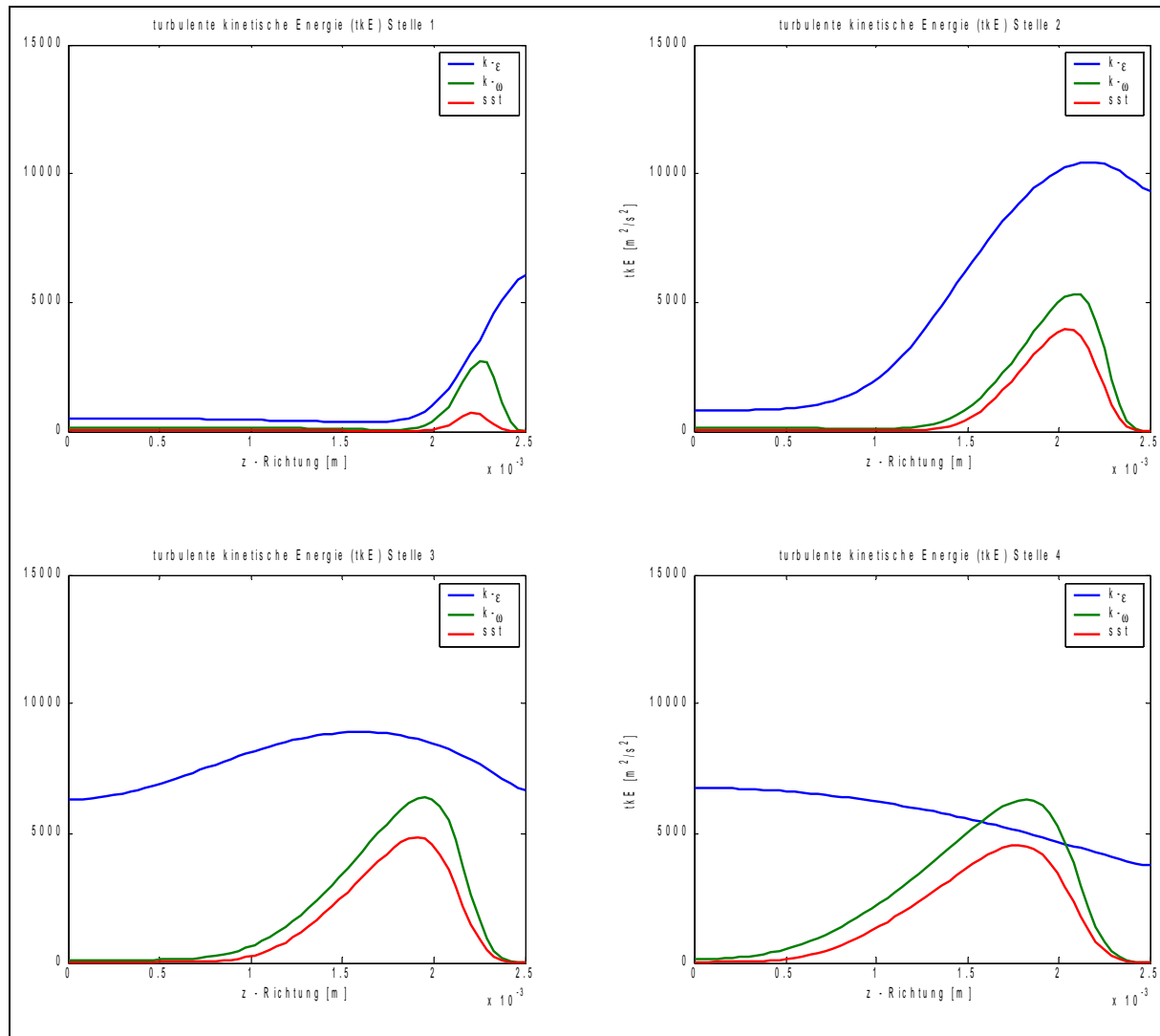


Auswertung Düsenbreite

Machzahl an 4 Stellen.

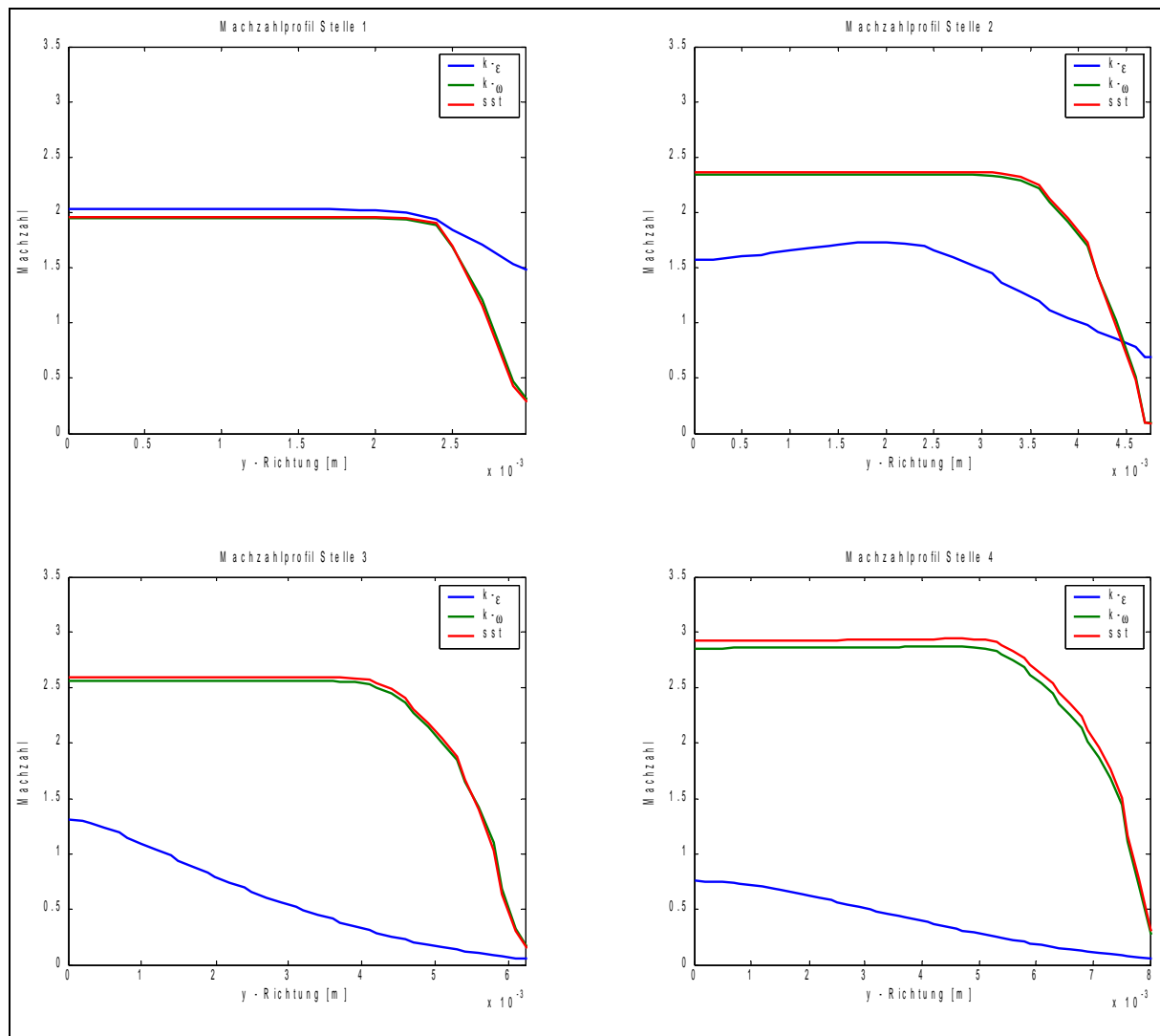


Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

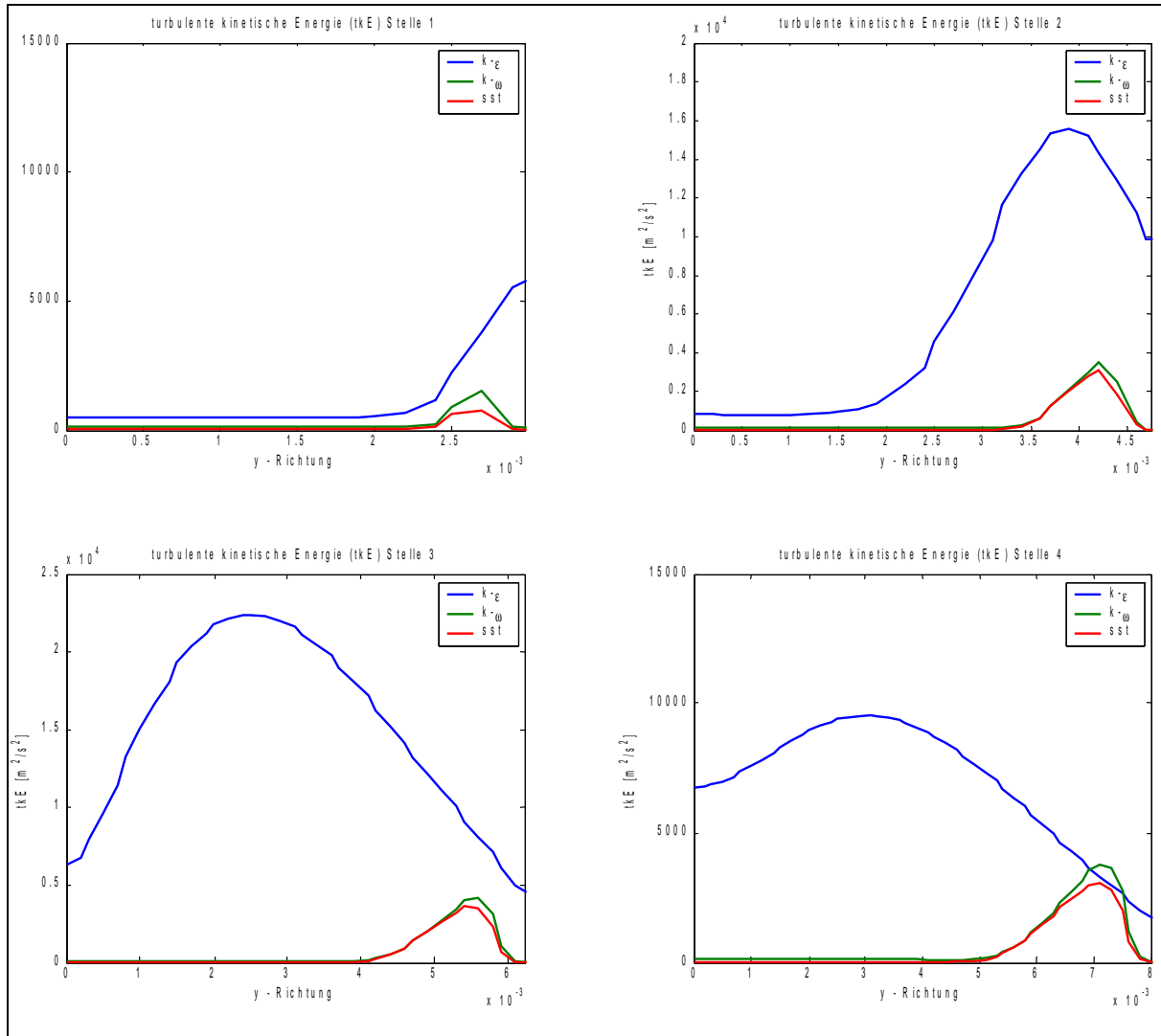


Auswertung Düsenhöhe

Machzahl an 4 Stellen.



Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

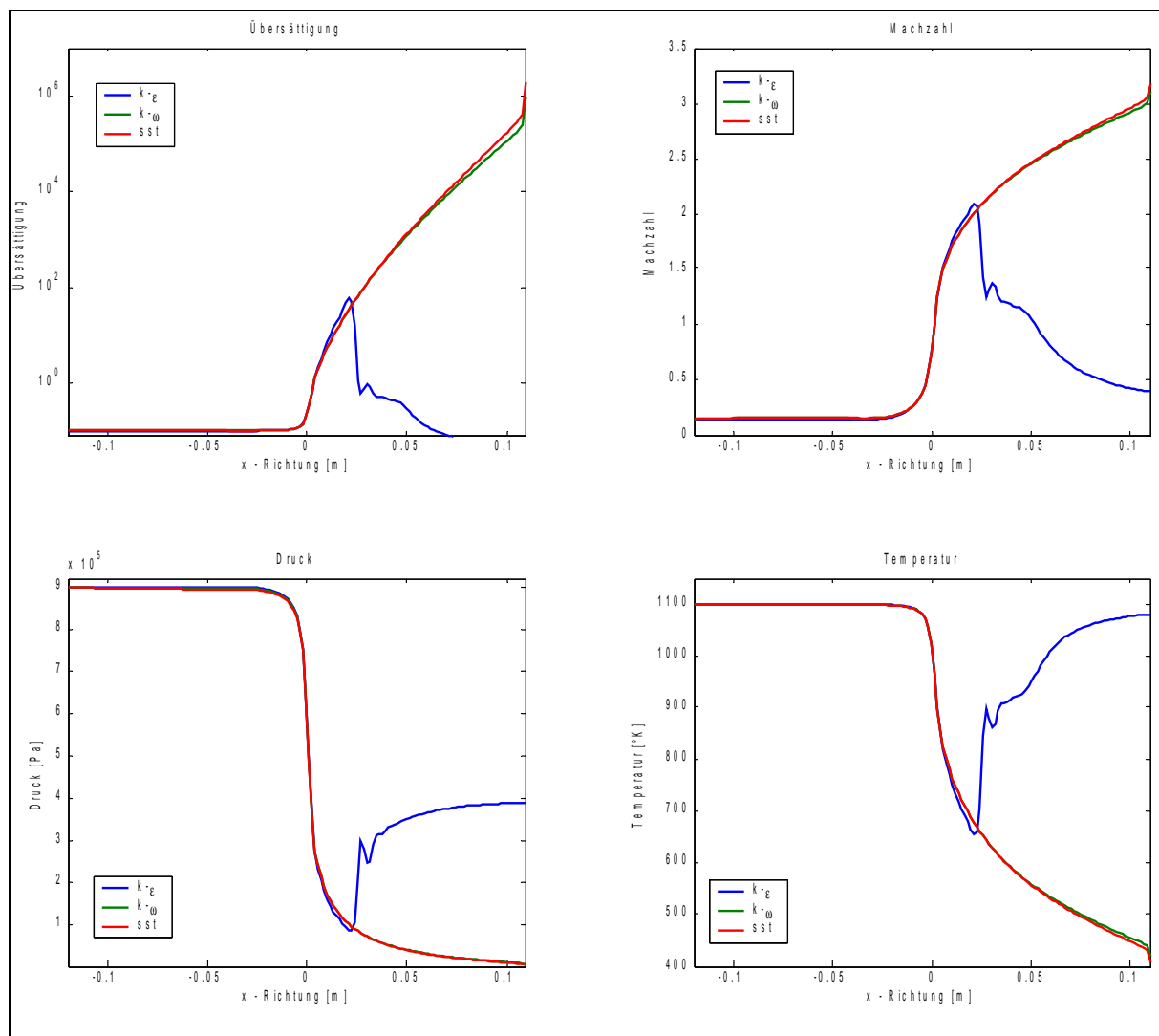


9.2.13.) Lavaldüse 3 x 5 [mm] – Austrittshöhe 0.02 [m]

Breite: 5 [mm]
Höhe engster Querschnitt: 3 [mm]
Höhe am Austritt: 0.02 [m]

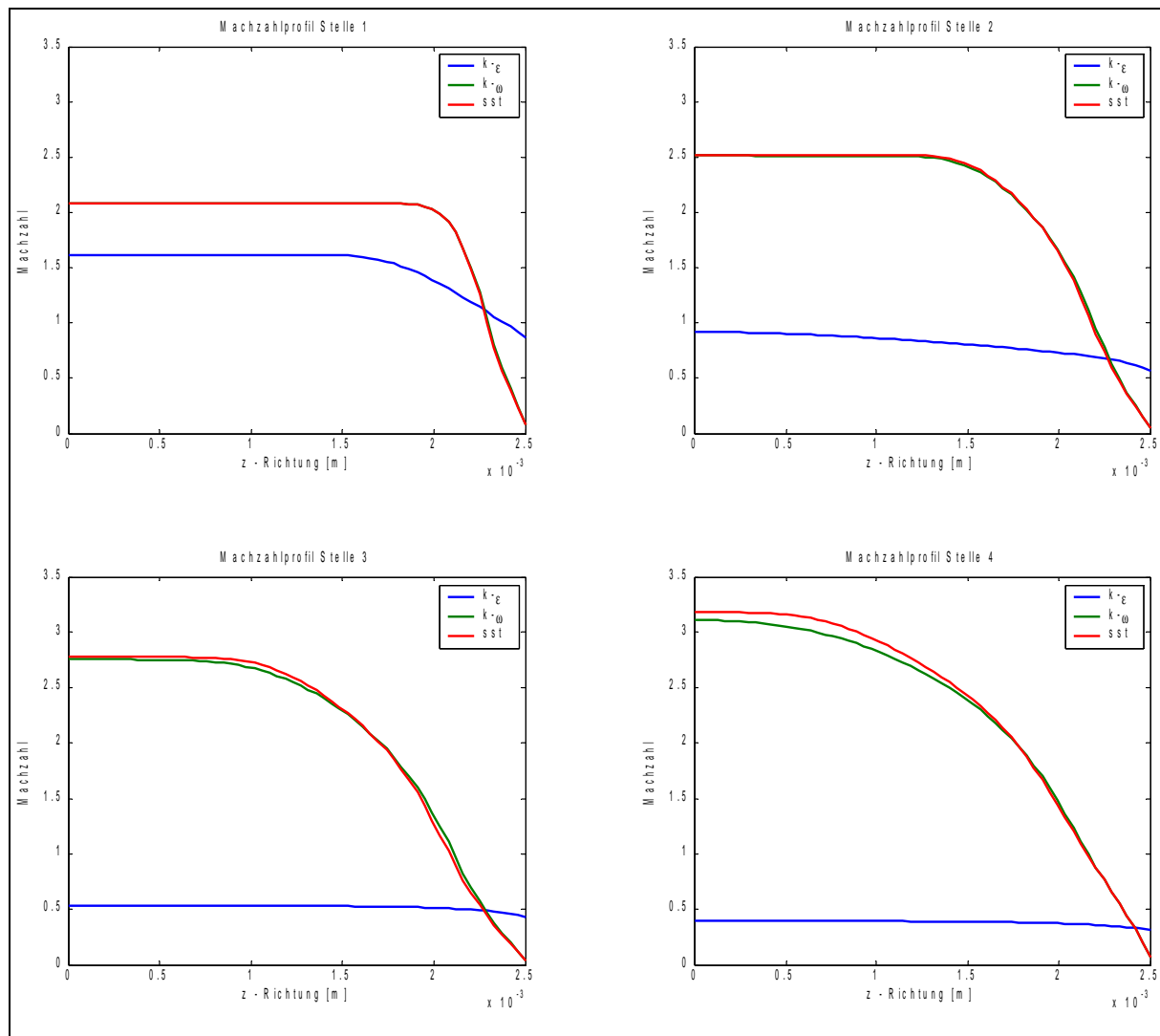
Auswertung Düsenachse

Übersättigung, Machzahl, Druck und Temperatur.

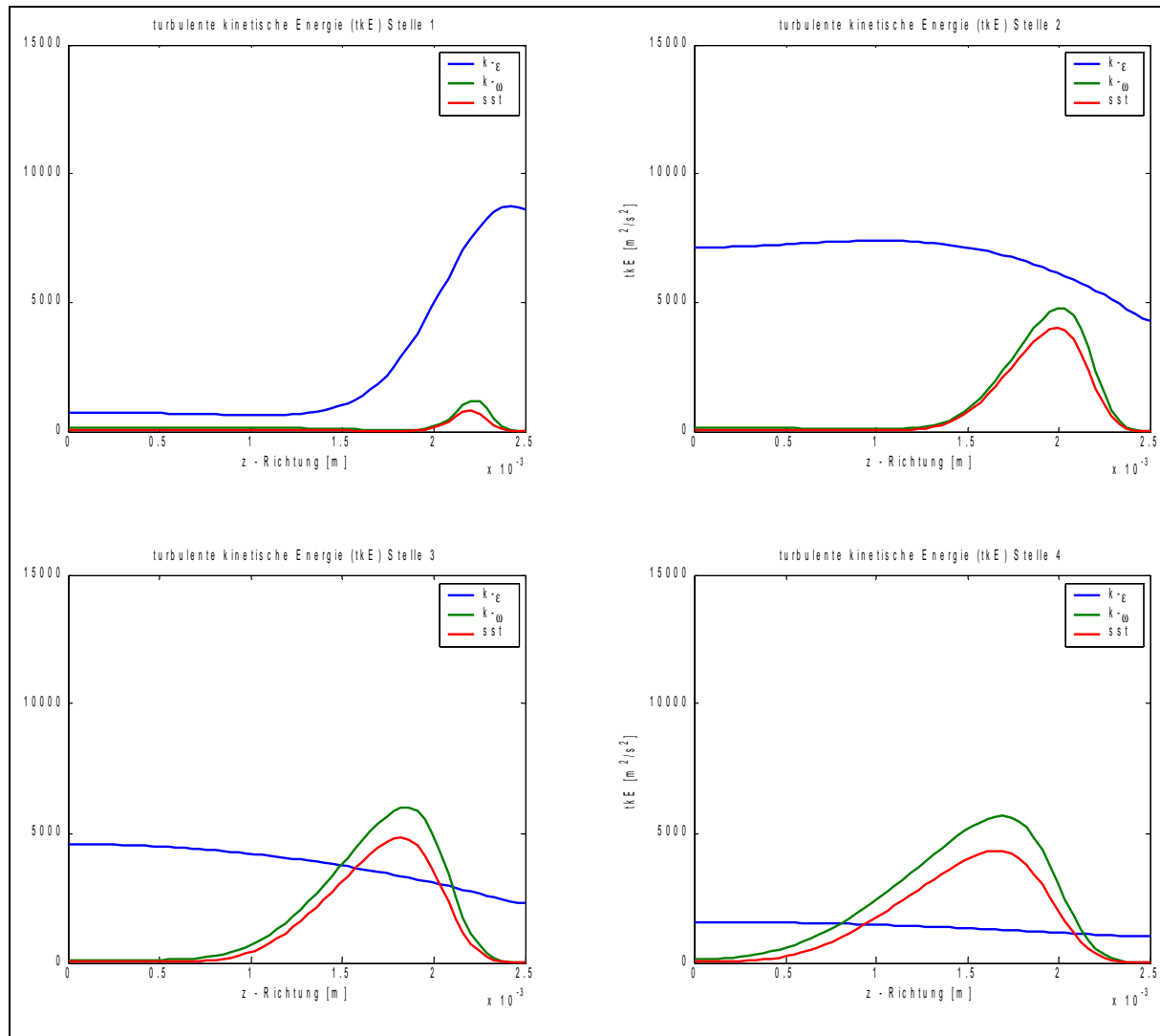


Auswertung Düsenbreite

Machzahl an 4 Stellen.

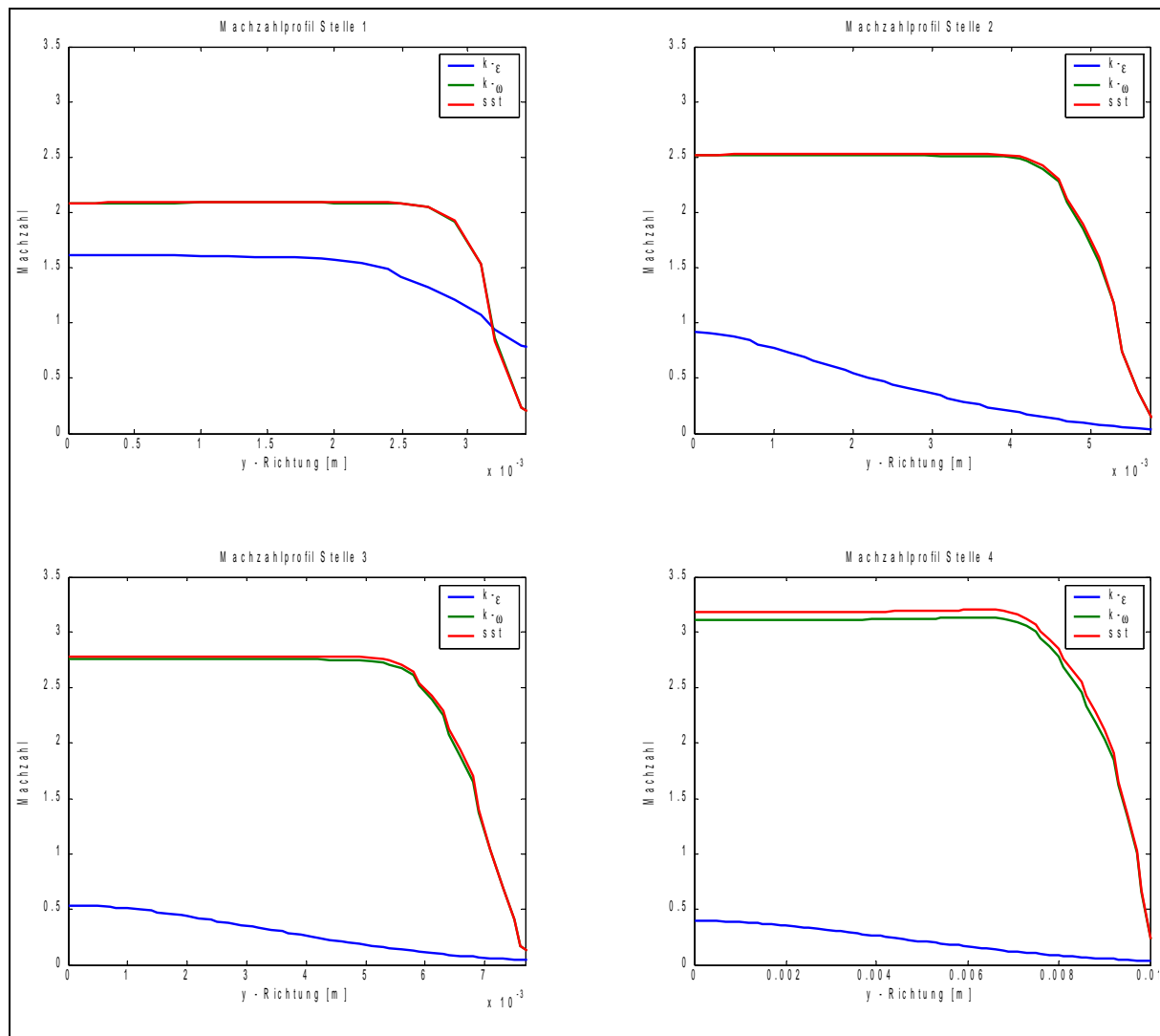


Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.

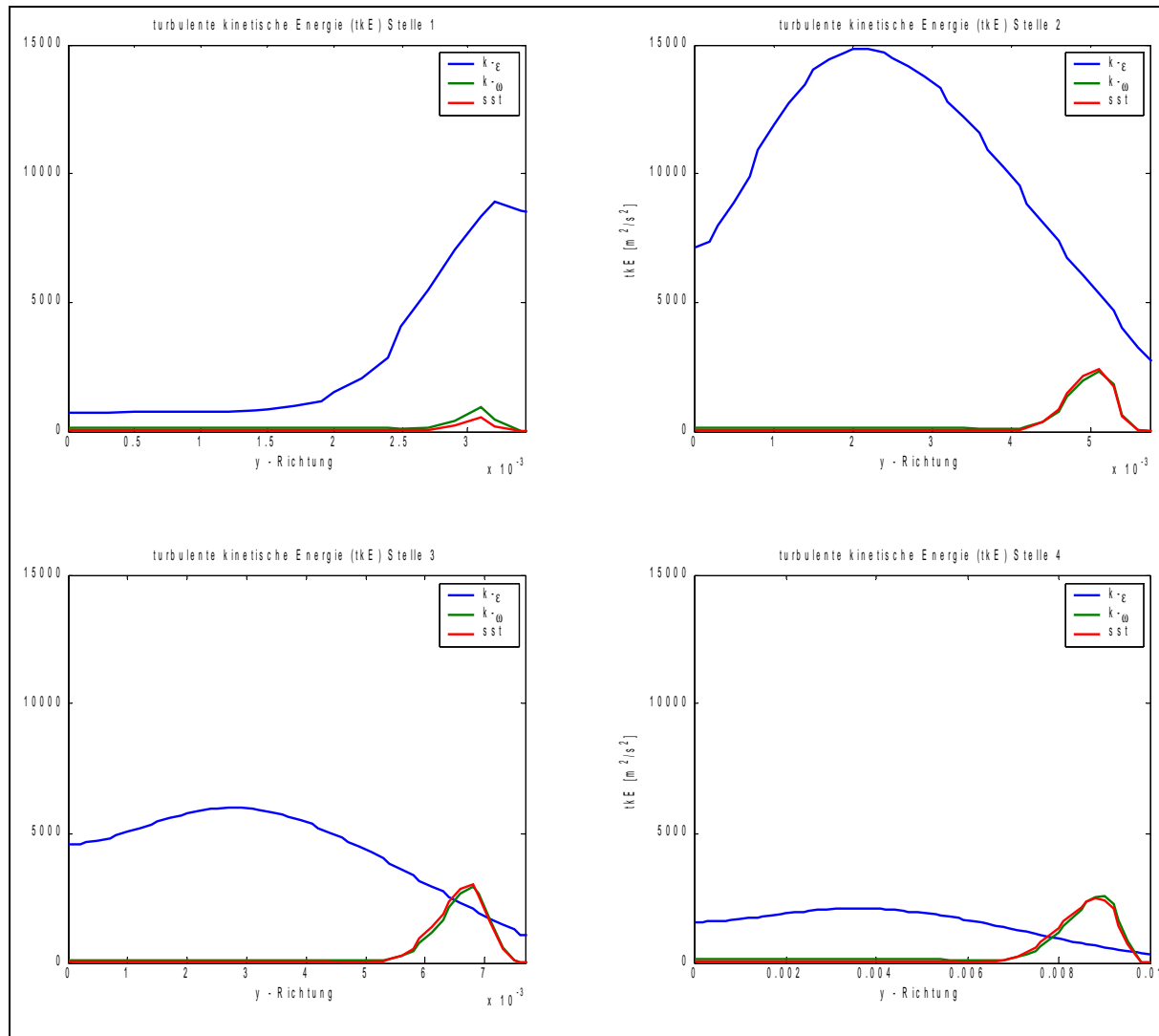


Auswertung Düsenhöhe

Machzahl an 4 Stellen.



Spezifische turbulente kinetische Energie an 4 Stellen.



9.3.) Simulationsvorgehen von A-Z

Damit das PSI die Simulationsresultate wiederherstellen und duplizieren, oder noch weitere Simulationen machen kann, ist anbei ein Rezept angefügt, welches Step-by-Step beschreibt, wie bei der Simulation meinerseits vorgegangen wurde.

9.3.1.) Gittergenerierung

Das Gitter wird mittels meines MATLAB-Programms generiert. Der Parameter n bestimmt die Anzahl Intervall in Strömungsrichtung, der Parameter m die Anzahl Intervalle senkrecht in der Höhe (variiert) der Düse. Weiter bestimmt man über den Parameter aa die halbe Höhe am Ausgang und somit auch den Düsendifferenzwinkel. Der vierte wählbare Parameter zz bestimmt die konstante Düsenbreite. Senkrecht zur Strömungsrichtung ist die Anzahl der Intervalle jeweils gleich und bestimmt über den Parameter m .

Beim Durchlaufen des Programms sind zwei Arrays für die weiterführende Arbeit wichtig. Im Array Pa sind die Gitterdaten für die x - y -Ebene gespeichert und zwar in einem $4 \times ((n+1)*(m+1))$ - Array. Die erste Spalte gibt die Punktnummer des Gitters in x - Richtung an. Die zweite Spalte die Punktnummer des Gitters in y - Richtung. Die dritte Spalte zeigt den Koordinatenwert in x - Richtung und die vierte Spalte den Koordinatenwert in y -Richtung.

Das zweite weiterführend brauchbare Array trägt den Titel *breite*. Hier sind die Koordinatenwerte in z -Richtung gespeichert.

Diese zwei Arrays sind in das Formular des FORTRAN – Gittergenerierungsprogramms von Hansmartin Friess einzufügen. Erst das Array *breite*, zuunterst das Array Pa . Anbei die Form des Formulars angefügt.

```
!Leerzeilen und mit "!" beginnende Zeilen werden ignoriert

!NAME DES OUTPUTFILES EINGEBEN

DuGiKa_150x60x60_007.cfx5

GASBEREICH

XMIN
XMAX

YMIN
YMAX

ZMIN
ZMAX

!STUETZWERTE IN Z-RICHTUNG
!VEKTOR BREITE EINGEBEN
!=====

!ANZAHL DER INTERVALLE IN DER BREITE
60      nz = Anzahl z-Intervalle; d.h. Anzahl Stuetzwerte = nz+1

.....
```

```
!STUETZWERTE IN DER XY-EBENE
!=====
```

```
150      Anzahl x-Intervalle
60       Anzahl y-Intervalle
```

```
!          i          j          x          y
!-----
1          1      -0.12  0
1          2      -0.12  0.00025
1          3      -0.12  0.0005
..... usw..
```

Dabei wird nun ein .cfx5 – File generiert, welches sieben Bereiche enthält. XMIN ist der Düseneinlass, XMAX ist der Düsenauslass, ZMIN ist die Düsenwand in der Breite, ZMAX ist die Symmetrieebene in der Breite, YMIN ist die Symmetrieebene in der Höhe, YMAX ist die Wand in der Höhe und GASBEREICH ist der Bereich der Strömung.

9.3.2.) CFX-Pre

Der erste Schritt ist das Importieren des Gitters:

File > Import Mesh

Materialdefinition

Create > Library Objects > Material

Name: Zink

Basic Settings:

Option: Pure Substance

Material Group: User

Thermodynamic State: Gas

Coord Frame: Coord 0

Material Properties:

Option: Ideal Gas

Molar Mass: 65.64 [g mol⁻¹]

Specific Heat Capacity

Option: Value

Specific Heat Capacity: (21.128 [J mol⁻¹ K⁻¹] - 1.3303e-03 [J mol⁻¹ K⁻²] * T + 7.3647e-07 [J mol⁻¹ K⁻³] * T² - 1.78e-10 [J mol⁻¹ K⁻⁴] * T³ + 1.6481e-14 [J mol⁻¹ K⁻⁵] * T⁴)*1/(0.06564 [kg mol⁻¹])

Specific Heat Type: Constant Pressure

Reference Pressure: 1 [bar]

Ref. Temperature: 25 [C]
Specific Heat Depends on
Specific Heat Depends: Temperature
Transport Properties:
Dynamic Viscosity:
Option: Value
Dynamic Viscosity: 0.000004347 [Pa s]
Thermal Conductivity:
Option: Value
Thermal Conductivity: 0.00242 [W m⁻¹ K⁻¹]

Create > Library Objects > Material

Name: Nitrogen

Basic Settings:
Option: Pure Substance
Material Group: User
Thermodynamic State
Thermodynamic State: Gas
Coord Frame
Coord Frame: Coord 0

Material Properties:
General Material
Equation of State:
Option: Ideal Gas
Molar Mass: 28 [g mol⁻¹]
Specific Heat Capacity
Option: Value
Specific Heat Capacity: $(25.84546229 \text{ [J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}] + 0.008900406 \text{ [J kg}^{-1} \text{ K}^{-2}] * T + 2.34795e-6 \text{ [J kg}^{-1} \text{ K}^{-3}] * T^2 + 2.1164e-10 \text{ [J kg}^{-1} \text{ K}^{-4}] * T^3 + 47860.76772 \text{ [J kg}^{-1} \text{ K]} / (T^2)) / 0.028$
Specific Heat Type: Constant Pressure
Reference Pressure: 1 [bar]
Ref. Temperature: 25 [C]
Specific Heat Depends on
Specific Heat Depends: Temperature
Transport Properties:
Dynamic Viscosity
Option: Value
Dynamic Viscosity : $(42.606e-06 \text{ [Pa s]} + 4.75e-07 \text{ [Pa s K}^{-1}] * T - 9.88e-011 \text{ [Pa s K}^{-2}] * T^2)$
Thermal Conductivity
Option: Value
Thermal Conductivity: $0.00309 \text{ [W m}^{-1} \text{ K}^{-1}] + 7.5930e-05 \text{ [W m}^{-1} \text{ K}^{-2}] * T - 1.1014e-08 \text{ [W m}^{-1} \text{ K}^{-3}] * T^2$

3] * T²

Damit sind erstmal die zwei Grundmaterialien, welche als Fluide benutzt werden definiert. Nächster Schritt ist das Kombinieren der Beiden zu einem Gemisch:

Create > Library Objects > Material

Name: Gemisch

Basic Settings:

Option: Fixed Composition Mixture

Material Group: User

Materials List: Zinc, Nitrogen (CTRL drücken und die beiden anklicken)

Thermodynamic State:

Thermodynamic State: Gas

Coord Frame:

Coord Frame: Coord 0

Child Materials (sind nun Zinc und Nitrogen zu sehen)

Klicke Nitrogen an:

Nitrogen:

Option: Mass Fraction

Mass Fraction: 0.9892

Klicke Zinc an:

Option: Mass Fraction

Mass Fraction: 0.0108

Create Domain

Create > Flow Object > Domain

Name: Duese

General Options:

Basic Settings:

Location: GASBEREICH

Domain Type: Fluid Domain

Fluids List: Gemisch

Coord Frame: Coord 0

Pressure

Reference Pressure: 9 [atm]

Buoyancy:
Option: Non Buoyant
Domain Motion:
Option: Stationary

Fluid Models:
Heat Transfer Model:
Option: Total Energy
> Incl. Viscous Work Term
Turbulence Model:
Option: k-Epsilon

Create Boundary Conditions

Create > Flow Object > Boundary Condition

Name: Einlass

Basic Settings:
Boundary Type: Inlet
Location: XMIN

Boundary Details:
Flow Regime:
Option: Subsonic
Mass and Momentum:
Option: Normal Speed
Normal Speed: 92 [m s⁻¹]
Turbulence:
Option: High (Intensity =10%)
Heat Transfer:
Option: Static Temperatur
Static Temperatur: 1100 [K]

Create > Flow Objects > Boundary Condition

Name: Auslass

Basic Settings:
Boundary Type: Outlet
Location: XMAX

Boundary Details:
Flow Regime:

Option: Supersonic

Create > Flow Objects > Boundary Condition

Name: Symmetrie

Basic Settings:

Boundary Type: Symmetry

Location: YMIN, ZMIN (CTRL drücken und anklicken)

Create > Flow Objects > Boundary Condition

Name: Wand

Basic Settings:

Boundary Type: Wall

Location: YMAX, ZMAX (CTRL drücken und anklicken)

Boundary Details:

Wall Influence On Flow:

Option: No Slip

Wall Roughness:

Option: Smooth Wall

Heat Transfer:

Option: Adiabatic

Create Solver – File

Create > Flow Objects > Solver Control

Basic Settings:

Option: High Resolution

Convergence Control:

Timescale Control: Auto Timescale

Max. Iterations: 1000

Length Scale Option: Conservative

Convergence Criteria:

Residual Type: RMS

Residual Target: 1. E-4

Damit kreiert man ein .def – File, welches im Solver verwendet wird. Name frei wählbar.

9.3.3.) CFX-Solver

ANSYS CFX – Solver Manager starten um die Simulation zu beginnen.

Eingabe der Definitionsdatei:

File > Define Run

Run Definition:

Definition File: (Name des kreierten .def – Files eingeben)

Sonstige Einstellungen übernehmen.

Start Run

Bemerkungen

Damit die Lösung schneller erreicht wird, wurde von mir wie folgt vorgegangen. Fünf Gitter wurden generiert. Ein 30x12x12 – Gitter (Anzahl Intervalle [x-Rtg]x[y-Rtg]x[z-Rtg]), ein 60x24x24 – Gitter, ein 90x36x36 – Gitter ein 120x48x48 – Gitter und ein 150x60x60 – Gitter.

Die Simulationen habe ich jeweils mit dem grössten Gitter begonnen. Der Gitterwechsel auf das nächst feinere Gitter geschah jeweils nach dem Erreichen des Konvergenzkriteriums. Beim Gitterwechsel als Definition – File das neue feinere Gitter nehmen. Als Initial Value File das letzte Lösungsfile nehmen und dann > Interpolate Initial Values onto Def File Mesh wählen. Damit dauern die Simulationen bis zur Endgültigen Lösung rund 90 Minuten.