

**Beitrag zur Entwicklung numerischer Verfahren für die
Untersuchung von Phasenwechselfvorgängen kompressibler nicht-idealer Fluide**

Von der Fakultät für Ingenieurwissenschaften, Abteilung Maschinenbau und Verfahrenstechnik
der

Universität Duisburg-Essen

zur Erlangung des akademischen Grades

einer

Doktorin der Ingenieurwissenschaften

Dr.-Ing.

genehmigte Dissertation

von

Katharina Tegethoff

aus

Duisburg

Gutachter: Univ.-Prof. Dr.-Ing. Dieter Brillert
Univ.-Prof. Dr.-Ing. Romuald Skoda

Tag der mündlichen Prüfung: 7. Juni 2024

DuEPublico

Duisburg-Essen Publications online

UNIVERSITÄT
D U I S B U R G
E S S E N

Offen im Denken

ub | universitäts
bibliothek

Diese Dissertation wird via DuEPublico, dem Dokumenten- und Publikationsserver der Universität Duisburg-Essen, zur Verfügung gestellt und liegt auch als Print-Version vor.

DOI: 10.17185/duepublico/82080

URN: urn:nbn:de:hbz:465-20240618-154513-1

Alle Rechte vorbehalten.

Danksagung

Die Erlangung eines Doktorgrades ist für mich seit meinem vierzehnten Lebensjahr ein sehr wichtiges Lebensziel, dessen Erreichung durch die Anfertigung der vorliegenden Arbeit nun in greifbare Nähe gerückt ist. Dies wäre ohne die Unterstützung zahlreicher Wegbegleiter undenkbar gewesen. Mir ist es daher eine Herzensangelegenheit dieser Dissertation eine persönliche Danksagung voranzustellen.

Herrn Professor Brillert möchte ich in der Rolle meines Doktorvaters und Erstgutachters sowohl meiner Dissertation als auch zuvor meiner Masterarbeit danken. In den dunkelsten Momenten, in welchen ich dachte, dass es nicht mehr weitergeht, waren Sie stets an meiner Seite und haben versucht, mir ein Licht aufzuzeigen. Auch ermöglichen Sie mir unmittelbar nach meiner Disputation einen Aufenthalt am Whittle Laboratory in Cambridge.

Meinem Zweitgutachter Herrn Professor Skoda möchte ich für sein tiefgehendes Interesse an meinem Dissertationsthema danken. Ihre schriftlichen Ausführungen zu meiner Arbeit sowie der persönliche Austausch mit Ihnen waren für mich bei der Einordnung und kritischen Beurteilung meiner eigenen Arbeit unersetzbar.

Meinen akademischen Weg bis hin zur Zeit als Promotionsstudentin haben drei Professoren maßgeblich geprägt, bei welchen ich mich auf diese Weise gerne bedanken möchte: Herr Professor Nagarajah, Sie haben bereits im Zuge meines Bachelorstudiums an mich und meine Leistung geglaubt und mich in meiner Zielsetzung sehr bestärkt. Hierfür bin ich Ihnen sehr dankbar. Herr Professor Panglisch, Sie waren und sind für mich sowohl fachlich als auch persönlich ein großes Vorbild. Ihre Art komplexe Sachverhalte zu erklären und dabei Ihre persönliche Note nicht einzubüßen habe ich stets sehr bewundert. Herr Professor Bathan, für die Zeit, welche Sie in mich investiert haben, und die absolut uneigennützig und ehrlichen Ratschläge, die Sie mir gegeben haben, kann ich mich nicht genug bedanken. Auch sind Menschen wie Sie meiner Erfahrung nach keinesfalls häufig in Ihrer Rolle anzutreffen.

Mein großer Dank gilt den Kollegen des deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt in Köln. Dank euch, Edmund, Jens, Christian, Graham, Simon, Georg und Jan war meine Arbeit an TRACE überhaupt erst möglich. Ihr habt mir immer das Gefühl gegeben, bei euch willkommen zu sein, und habt mich in jeder denkbaren Situation mit Rat und Tat unterstützt. Das war alles andere als selbstverständlich und bedeutet mir sehr viel.

Dominik und Alex, mit euch zusammen als wissenschaftliche Hilfskräfte arbeiten zu können hat die damalige Zeit am Lehrstuhl für mich zu einer unvergesslichen gemacht. Auch die Hiwis, mit welchen ich später als wissenschaftliche Mitarbeiterin zusammenarbeiten durfte, haben mir unzählige schöne Momente beschert. Danke Johanna, Carolina, Jana, Olli und Aaron für eure emotionale Unterstützung.

Auf meine kleine Armee an Abschlussarbeitern bin ich ganz besonders stolz: Yipeng, Hamed, Basel, Wael, Ayoub, Ilyas, Jannis, Carolina, Olga, Alicja, Mücahit, Alex, Massimiliano und Isaac, es war mir eine Ehre euch auf eurem Weg zum Bachelor- bzw. Masterabschluss begleiten zu dürfen.

Meinen ehemaligen Kolleginnen und Kollegen Rebecca, Tina, Jingjing, Alex, Ihab und Tobi danke ich für die gemeinsame Zeit als Team in der ersten Etage. Ihr wart für mich im Alltag ein wichtiger Halt. Detlev und Ben, auch wenn ich für euch beiden immer nur ein „Simulant“ war, durfte ich mich stets auf euren Rückhalt im Labor verlassen. Dafür bin ich euch sehr dankbar. Danke, Silke, Jenny und Bastian, für die unbedeutenden und bedeutenden Gespräche, das Zuhören und die unzähligen Ermutigungen.

Stefan, dir danke ich fürs Trösten in schweren Zeiten und den kleinen Aufpasser, den ich eines Morgens auf meinem Schreibtisch fand und der seitdem immer da war, wenn ich mich ganz allein gefühlt habe.

Flo, auch wenn du aufgrund der Arbeit an deinem Prüfstand in Ruhrort nur selten in unserem gemeinsamen Büro warst, habe ich die Zeit mit dir und das gemeinsame Lachen sehr genossen. Danke für deine Selbstverständlichkeit.

Haikun, danke für all die Gespräche und Diskussionen, die mit „eine kleine Frage zur Thermodynamik“ angefangen haben, und dein großes Herz, das ich erst recht spät entdeckt habe.

Meinen derzeitigen Kollegen Nick, Till und Lloyd alias Laserman danke ich für ihren unerschütterlichen Glauben daran, dass ich es schaffen würde. Danke, Nick, dass du mich früh morgens wortwörtlich am Boden meines Büros gefunden hast und immer nach Alternativen für mich gesucht hast. Till, danke für dein Vertrauen und die langen gemeinsamen Gespräche über Gott und die Welt. Danke Lloyd für jede einzelne Partie 5D-Schach.

Dem Betreuer meiner Masterarbeit, Sparringspartner wider Willen, ebenbürtigem Sturkopf und Lieblingskollegen Sebastian möchte ich ganz besonders für all die schönen Momente und die Möglichkeiten fachlich und persönlich zu wachsen danken. Trotz all der tiefen Täler, durch die wir zusammen oder auch alleine durch mussten, wirst du immer ein ganz besonderer Mensch für mich bleiben.

Meinen Korrekturlesern Herrn Dr. Dohmen, Christian und Jens gilt mein Dank für jede Anmerkung und Idee sowie die große Sorgfalt mit der sie mich unterstützt haben. Herr Dohmen, vielen Dank, dass ich Ihnen immer vertrauen konnte und Sie mir das Gefühl gegeben haben, auch in Momenten des Scheiterns gut genug zu sein. Christian, danke für deine Zeit, deinen Humor und die Augenhöhe, auf der du mir begegnet bist. Jens, vielen lieben Dank, dass du trotzdem wir uns nur selten persönlich gesehen haben, immer für mich da warst und bedingungslos hinter mir gestanden hast.

Ein unermesslich großes Dankeschön gilt dir Carmen: Ohne dich hätte ich das letzte Jahr meiner Zeit als Promotionsstudentin nicht überstanden. Dank dir konnte ich über Dinge, die mich viele Tränen und Nächte gekostet haben, schnell wieder lachen. Auch hatte ich in dir immer einen Menschen, an den ich mich im Notfall wenden konnte.

Mama, danke für deine Sorge und grenzenlose Unterstützung zu jeder Tages- und Nachtzeit. Danke, dass du nicht zugelassen hast, dass ich aufgebe. Danke für deine ehrliche Meinung, deine unerschütterliche Überzeugung und dein Vermögen, dir meine häufig gleichen Probleme immer wieder anzuhören. Danke für all das und noch so viel mehr!

Kurzfassung

Numerische Methoden stellen einen wesentlichen Bestandteil des Auslegungsprozesses moderner Turbomaschinen dar und tragen zu einer erheblichen Steigerung der Zeit- und Ressourceneffizienz bei. Eine Vielzahl der hierzu verwendeten Verfahren beruht auf der Annahme eines kalorisch perfekten Gases, welche im Kontext konventioneller Arbeitsmedien wie beispielsweise Luft eine geeignete Näherung der realen Fluideigenschaften ermöglicht. Im Zuge der Erschließung alternativer Energiequellen erlangen zunehmend solche Prozesse eine besondere Relevanz, für welche eine auf den Anwendungsfall abgestimmte Wahl des Arbeitsmediums möglich ist. Die in der Folge aufgrund ihrer besonderen thermophysikalischen Eigenschaften eingesetzten Fluide lassen sich nur unzureichend durch das Modell des kalorisch perfekten Gases beschreiben, was ihre Klassifikation als nicht-ideal bedingt. Da eine Berücksichtigung dieser Nicht-Idealität sowie eventueller Phasenwechselvorgänge anhand etablierter numerischer Methoden häufig nicht möglich ist, bedarf die Auslegung der zugehörigen Turbomaschinen zunächst einer Entwicklung geeigneter Verfahren. Der im Rahmen dieser Arbeit vorgestellte Ansatz zur Berechnung numerischer Flussterme leistet hierzu einen Beitrag und kann sowohl auf ein- als auch zweiphasige Strömungen nicht-idealer Fluide angewendet werden. Er zeichnet sich, neben einer hohen numerischen Robustheit gegenüber Diskontinuitäten, insbesondere durch seine Anwendbarkeit auf beliebige Zustandsgleichungen aus. Durch eine Vielzahl an Modellierungsarten ist eine Beschreibung der im Zuge eines Phasenwechsels entstehenden dispersen Phase mit unterschiedlichem Detailgrad möglich. So kann die Tropfengrößenverteilung entweder als mono- oder polydispers modelliert werden, wobei sie im letztgenannten Fall anhand ihrer statistischen Momente beschrieben wird. Auch ermöglicht das entwickelte Verfahren eine Berücksichtigung von Geschwindigkeitsdifferenzen zwischen den Phasen, wodurch die Basis für eine detaillierte Untersuchung der Bewegung der dispersen Phase im Strömungsfeld geschaffen wird. Anhand einer Tabellierung der thermophysikalischen Größen kann zudem eine im Kontext der Auslegung relevante Steigerung der Rechenzeiteffizienz erreicht werden. Die hiermit verbundene Einbuße in Bezug auf die Beschreibungsgenauigkeit wird in Folge der Verwendung eines Taylorreihenansatzes zur Interpolation minimiert. Durch eine Verifizierung und Validierung anhand einer repräsentativen Auswahl an Testfällen kann die Anwendbarkeit des entwickelten Verfahrens auf ein- und zweiphasige Strömungen kompressibler nicht-idealer Fluide unterschiedlicher molekularer Komplexität nachgewiesen werden. Dabei wird insbesondere der Phasenwechsel in Form der homogenen Nicht-Gleichgewichtskondensation in hoher Übereinstimmung mit den Ergebnissen experimenteller Untersuchungen beschrieben.

Abstract

Numerical methods are an integral part of the design process of modern turbomachinery and contribute to a significant increase in time and resource efficiency. Numerous methods used for this purpose are based on the assumption of a calorically perfect gas, which enables a suitable approximation of the real fluid properties in the context of conventional working media such as air. In utilising alternative energy sources, such processes are becoming increasingly relevant for which the choice of working medium can be tailored to the application. The fluids used due to their special thermophysical properties can only be described inadequately by the model of the calorically perfect gas and are therefore classified as non-ideal. Since it is often impossible to take this non-ideality or possible phase change phenomena into account using established numerical methods, a design of related turbomachinery first requires the development of suitable methods. The approach for calculating numerical flux terms presented in this work contributes to that and can be applied to single-phase and two-phase flows of non-ideal fluids. In addition to high numerical robustness against discontinuities, it is characterised in particular by its applicability to arbitrary equations of state. Various modelling approaches can be used to describe the dispersed phase formed during a phase change in different degrees of detail. Thus, the droplet size distribution can be modeled as either monodisperse or polydisperse, whereby, in the latter case, it is described through its statistical moments. Furthermore, the developed method enables the consideration of velocity differences between the phases, which lays the foundation for a detailed investigation of the movement of the dispersed phase in the flow field. By tabulating the thermophysical quantities, it is also possible to achieve an increase in calculation time efficiency that is relevant in the context of the design process. The associated loss in terms of accuracy of description is minimised by using a Taylor series approach for interpolation. A verification and validation based on a representative selection of test cases demonstrates the applicability of the developed method to single-phase and two-phase flows of compressible non-ideal fluids of different molecular complexity. In particular, the phase change based on homogeneous non-equilibrium condensation is described in high agreement with results of experimental investigations.

Anmerkung

Teilergebnisse der vorliegenden Arbeit wurden bereits veröffentlicht bzw. zur Veröffentlichung angenommen in:

Katharina Tegethoff, Sebastian Schuster und Dieter Brillert. "Numerical simulation of real gas one-component two-phase flow using a Roe-based scheme". In Journal: *Computers & Fluids* 245 (2022), No. 105560. DOI 10.1016/j.compfluid.2022.105560.

Katharina Tegethoff, Carolina Borges de Almeida, Sebastian Schuster and Dieter Brillert. "Numerical method for investigating non-ideal flow demonstrated on a centrifugal compressor operating near the critical point of CO₂". In: Proceedings of the ASME Turbo Expo 2024: Turbo Expo: Power for Land, Sea and Air (2024). (zur Veröffentlichung angenommen).

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	vii
Tabellenverzeichnis	x
Formelzeichen und Abkürzungen	xi
1 Einleitung	1
2 Stand der Forschung	3
2.1 Anwendungsgebiete kompressibler nicht-idealer Arbeitsmedien	3
2.2 Numerische Verfahren zur Beschreibung ein- und zweiphasiger Strömungen	5
2.3 Besondere Anforderungen an numerische Schemata im Kontext von Phasenwechselvorgängen	8
3 Thermodynamische Beschreibung kompressibler nicht-idealer Fluide	9
3.1 Thermodynamische Zustandsbereiche und ihre Charakteristika	11
3.2 Mathematische Beschreibung der Zustandsgrößen	19
3.3 Parameter zur Klassifizierung eines Fluides als nicht-ideal	24
3.4 Thermophysikalische Modellierung des Phasenwechsels	30
3.5 Besonderheiten der untersuchten Arbeitsmedien	37
4 Numerische Modellierung	42
4.1 Erhaltungs- und Transportgleichungen für ein- und zweiphasige Strömungen	44
4.2 Erweiterung eines Roe-Schemas für die Anwendung auf ein- und zweiphasige Strömungen unterschiedlicher Komplexität	51
4.3 Implementierung des PGI _{Roe} -Schemas in den Strömungslöser TRACE . .	64
4.4 Methoden zur Beurteilung numerischer Lösungen	71
5 Anwendung der Schemata auf verschiedene Validierungsfälle	76
5.1 Einphasige Strömungen	77
5.1.1 Expansion von CO ₂ und MDM in Laval-Düsen	77
5.1.2 Verdichtung von CO ₂ in überkritischem Zustand	86
5.2 Zweiphasige Strömungen	91
5.2.1 Kondensation von Wasserdampf und CO ₂ in Laval-Düsen	92
5.2.2 Phaseninteraktion von Wasserdampf in einer Turbinenkaskade . . .	110
6 Zusammenfassung und Ausblick	118
7 Anhang	121
Literaturverzeichnis	137
Curriculum Vitae	152

Abbildungsverzeichnis

1	Unterschiedliche Perspektiven auf das Konzept des Fluides	9
2	Phasendiagramm eines Reinstoffes in reduzierter Darstellung	10
3	Zustandsbereiche eines Fluides in einem reduzierten p - v -Diagramm	12
4	Unterteilung des überkritischen Zustandsbereiches in flüssig und gasförmig (links) sowie Verläufe der Ableitungen der Gibbs-Energie für einen reduzierten Druck von $p_r = 1.2$ (rechts)	15
5	Unterscheidung meta- und instabiler Zustände in einem reduzierten p - v -Diagramm	17
6	Gegenüberstellung des Modells perfekter Gase sowie der Zustandsgleichung nach van der Waals anhand von Isothermen im p - v -Diagramm	22
7	Auftragung des Realgasfaktors über dem reduzierten Druck für überkritische (links) und unterkritische (rechts) Isothermen	25
8	Definition des Flüssigkeitsmassenanteils für das Gleichgewichtsmodell der homogenen Kondensation in einem p - v -Diagramm (links) sowie schematische Abgrenzung der Phasen (rechts)	31
9	Exemplarische polydisperse Tropfenradienverteilung (links) sowie schematische Unterscheidung der kontinuierlichen und der dispersen Phase (rechts)	36
10	Variation des Realgasfaktors Z in einem p - v -Diagramm (links) und Abgrenzung der flüssigen und gasförmigen Phase anhand der Schallgeschwindigkeit a sowie den Definitionsbereichen der IAPWS-IF97 in einem p - T -Diagramm (rechts) für das Medium Wasser	37
11	Variation des Realgasfaktors Z und der fundamentalen Ableitung Γ in einem T - s -Diagramm (links) sowie Dichtecharakteristik ρ nahe des kritischen Punktes in einem p - T -Diagramm (rechts) für das Medium CO_2	38
12	Variation des Realgasfaktors Z und Abgrenzung des nicht-idealen Zustandsbereiches in einem p - v -Diagramm (links) sowie Abweichung des isentropen Druck-Volumen-Koeffizienten vom Wärmekapazitätsverhältnis $\Delta\kappa$ in einem T - s -Diagramm (rechts) für das Medium MDM	39
13	Variation des Grüneisen-Parameters Gr und des isentropen Druck-Volumen-Koeffizienten κ_{pv} entlang der kritischen Isotherme für die Medien Wasser, CO_2 und MDM (links) sowie die Molekülstruktur der untersuchten Fluide (rechts)	40
14	Infinitesimales Kontrollvolumen in einem Strömungsfeld (links) und Flüsse über die Volumengrenzen exemplarisch für die Erhaltungsgröße der Masse (rechts)	42
15	Nomenklatur zur Beschreibung des konvektiven Flusses über die Zellgrenze zweier angrenzender Kontrollvolumina (links) und allgemeine Definition eines Riemann-Problems (rechts)	51
16	Benötigte Rechenzeit in Abhängigkeit der Anzahl der Abfragen für unterschiedliche Arten der Auswertung der thermophysikalischen Routinen am Beispiel des Mediums CO_2 ; Gepunktete Linien repräsentieren eine lineare Regression der Datenpunkte	67

17	Definition zweier Untersuchungsbereiche von CO ₂ in einem p - T -Diagramm (links) und Auftragung des relativen Fehlers der Auswertung der Dichte, der Schallgeschwindigkeit sowie der spezifischen isobaren Wärmekapazität anhand von Tabellen unterschiedlicher Dimension (rechts)	68
18	Struktur des Moduls TwoPhase zur Berücksichtigung einer zweiten Phase in TRACE	70
19	Geometrische Charakteristika der NASA CDV-Düse [94] (links) und Spezifikation zweier Testfälle (\circ Isentrop und \boxtimes Stoß) im T - s -Diagramm von CO ₂ (rechts)	78
20	Systematische Analyse der Diskretisierungsfehler des räumlichen Gitters der NASA CDV-Düse sowie der tabellierten thermophysikalischen Größen von CO ₂ für $p \in [90; 1200]$ bar und $T \in [300; 500]$ K anhand dreier Verfeinerungsstufen und der Richardson-Extrapolation	80
21	Verläufe des Druckes (links) und der Mach-Zahl (rechts) für zwei Testfälle der NASA CDV-Düse anhand einer quasi-analytischen Berechnung (Linie) und des PGIRoe-Schemas (Symbole) für das Medium CO ₂ ; zusätzlich Verläufe des Realgasfaktors und der fundamentalen Ableitung	81
22	Geometrische Charakteristika der Düse nach Spinelli et al. [140] (links) und Spezifikation zweier Testfälle (\circ Fall L und \square Fall H) im T - s -Diagramm von MDM (rechts)	83
23	Gegenüberstellung der Verläufe des Druckes für Fall L (links) und Fall H (rechts) der Düse nach Spinelli et al. [140] anhand des PGIRoe-Schemas (Symbole) mit den experimentellen Daten (Punkte) für das Medium MDM; zusätzlich Verläufe des Realgasfaktors sowie Druckverläufe für das zweidimensionale EPGIRoe-Schema (gepunktete Linie)	84
24	Geometrie und Aufbau des untersuchten Segmentes des HeRo-Verdichters mit einer Detailansicht der Vernetzungsstrategie des Rotors (links) und Spezifikation der untersuchten Eintrittszustände im T - s -Diagramm von CO ₂ (rechts)	87
25	Kennfeld des HeRo-Verdichters in Form experimenteller Daten (\circ) mit Fehlerbalken, Berechnungen des PGIRoe-Schemas (\square) und des dreidimensionalen EPGIRoe-Schemas (\triangle) (links) sowie farbige Kontur des statischen Druckes im Rotor des Verdichters für den Testfall Gradient berechnet durch das PGIRoe-Schema (rechts)	90
26	Geometrische Charakteristika der Mystery-Düse [141] (links) und Spezifikation des Testfalles M (\circ) im T - s -Diagramm von Wasser (rechts)	93
27	Vergleich unterschiedlicher Modelle zur Beschreibung der Kondensation anhand des Druckverlaufes entlang der Mystery-Düse (links) und Verläufe der charakteristischen Größen unter Annahme einer homogenen Nicht-Gleichgewichtskondensation (rechts) für das Medium Wasser	95
28	Verläufe des Druckes sowie des Sauter-Radius für den Fall M der Mystery-Düse bestimmt im Rahmen des IWSMP [141] (graue Linien), durch einen Strömungslöser der Universität Cambridge (blaue Linie) sowie anhand des PGIRoe-Schemas (Symbole) (links) und Vergleich unterschiedlicher Modellierungsarten der dispersen Phase anhand des PGIRoe-Schemas (rechts)	97

29	Geometrische Charakteristika der Düse nach Barschdorff [18] (links) und Spezifikation zweier Testfälle (○ Fall B1 und □ Fall B2) im p - v -Diagramm von Wasser (rechts)	100
30	Verläufe des Druckes sowie des Sauter-Radius für Fall B1 (○) und Fall B2 (□) der Düse nach Barschdorff experimentell bestimmt durch Barschdorff [19] (schwarze Linien), durch Maqueo Martinez [96] (schwarz gestrichelte Linie) sowie numerisch anhand des PGIRoe-Schemas E - E - M - $Poly$ (Symbole) (links) und Vergleich unterschiedlicher Modellierungsarten der dispersen Phase anhand des PGIRoe-Schemas (rechts) für das Medium Wasser	102
31	Geometrische Charakteristika der Düse nach Bier und Theis [148] mit grau schattiertem Untersuchungsbereich sowie effektivem Querschnittsverlauf als schwarz gestrichelte Linie (links) und Spezifikation von vier Testfällen im T - s -Diagramm von CO_2 (rechts)	105
32	Verläufe des Druckes für Fall T4 unter Annahme einer einphasigen Strömung experimentell bestimmt durch Theis [148] und numerisch ermittelt anhand des PGIRoe-Schemas (blaue Symbole) sowie des EPGIRoe-Schemas (schwarze Symbole) (links) und Verläufe des Druckes für alle vier Testfälle unter Berücksichtigung einer zweiten Phase (rechts) für das Medium CO_2	108
33	Geometrie der Kaskade nach White et al. [170], Lokalisation der Randbedingungen sowie Detailansichten der Vernetzungsstrategie an der Schaufelvorder- und hinterkante (links) und Spezifikation zweier Testfälle (○ Fall H2 und □ Fall L2) im T - s -Diagramm von Wasser (rechts)	111
34	Gegenüberstellung der Druckverläufe entlang der Schaufeloberfläche für Fall H2 (links) und Fall L2 (rechts) der Kaskade nach White et al. anhand des PGIRoe-Schemas (blaue Linie) und des EPGIRoe-Schemas (schwarze Linie) mit den experimentellen Daten von White [168] (Symbole) für das Medium Wasser	113
35	Qualitative Konturdarstellungen der Dichtegradienten für Fall L2 der Kaskade nach White et al. numerisch berechnet anhand des PGIRoe-Schemas (links) sowie experimentell vermessen durch White [168] (rechts)	116
D.1	Relative Abweichung der Schallgeschwindigkeit sowie des Druckes entlang der Düse nach Bier und Theis für unterschiedliche Arten der Bestimmung der Schallgeschwindigkeit im Fall T1 (links) und relative Abweichung des isentropen Druck-Volumen-Exponenten vom Verhältnis spezifischer Wärmekapazitäten sowie die hieraus resultierende Abweichung des Druckes (rechts)	135

Tabellenverzeichnis

1	Ableitungen erster und zweiter Ordnung der spezifischen Gibbs-Energie . .	14
2	Klassifizierung von Fluiden anhand der fundamentalen Ableitung der Gasdynamik	27
3	Ausgewählte Kombinationen von Modellierungsansätzen zur Beschreibung zweiphasiger Strömungen	48
4	Randbedingungen der NASA CDV-Düse für das Medium CO ₂	79
5	Randbedingungen der Düse nach Spinelli et al. für das Medium MDM . . .	83
6	Randbedingungen des HeRo-Verdichters für das Medium CO ₂	87
7	Randbedingungen der Mystery-Düse für das Medium Wasser	93
8	Randbedingungen der Düse nach Barschdorff für das Medium Wasser . . .	100
9	Randbedingungen der Düse nach Bier und Theis für das Medium CO ₂ . . .	106
10	Randbedingungen der Kaskade nach White et al. für das Medium Wasser .	111
A.1	Verwendete thermophysikalische Modellgleichungen für die Medien Wasser, CO ₂ und MDM in Übereinstimmung mit den Standards der IAPWS-IF97 bzw. der REFPROP-10-Implementierung [93]	121
C.1	Parameter zur Untersuchung des räumlichen Diskretisierungsfehlers aller betrachteten Validierungsfälle	132
C.2	Parameter zur Untersuchung des Diskretisierungsfehlers der tabellierten thermophysikalischen Größen für die einphasigen Validierungsfälle	133
C.3	Parameter zur Untersuchung des Diskretisierungsfehlers der tabellierten thermophysikalischen Größen für die zweiphasigen Validierungsfälle	133

Formelzeichen und Abkürzungen

Lateinische Zeichen

<u>Symbol</u>	<u>Einheit</u>	<u>Bezeichnung</u>
A	m^2	durchströmte Fläche
A_C	-	Modellparameter der Korrektur nach Cunningham
A_s	m^2	Oberfläche eines kugelförmigen Tropfens
A^*	m^2	engster Querschnitt
$\mathbf{A}(\mathbf{U})$	-	Jacobi-Matrix
a	m/s	Schallgeschwindigkeit
a, b	-	van-der-Waals-Koeffizienten
C	-	Anzahl der Komponenten eines Systems
C_C	-	Korrekturfaktor nach Cunningham
C_W	-	dimensionsloser Widerstandsbeiwert
$C_{W,SN}$	-	dimensionsloser Widerstandsbeiwert nach Schiller und Naumann
CFL	-	Kennzahl nach Courant, Friedrichs und Lewy
c_p	$J/(kg \cdot K)$	spezifische isobare Wärmekapazität
c_v	$J/(kg \cdot K)$	spezifische isochore Wärmekapazität
dV	m^3	infinitesimales Kontrollvolumen
E	J/kg	totale spezifische innere Energie
\mathbf{E}	-	Matrix der rechten Eigenvektoren
e	J/kg	spezifische innere Energie
F	-	Anzahl der Freiheitsgrade eines Systems
F_W	N	aerodynamische Widerstandskraft
$\mathbf{F}, \mathbf{G}, \mathbf{H}$	-	Flussvektoren
\mathbf{F}_k	-	konvektiver Anteil des Flussvektors
\mathbf{F}_v	-	viskoser Anteil des Flussvektors
f	J/kg	spezifische Helmholtz-Energie
$f(r)$	-	Anzahldichtefunktion der Tropfenradien
f_x, f_y, f_z	m/s^2	kartesische Komponenten der Körperkräfte
$G(r)$	m/s	Wachstumsrate
Gr	-	Grüneisen-Parameter
g	J/kg	spezifische Gibbs-Energie
H	J/kg	totale spezifische Enthalpie
h	J/kg	spezifische Enthalpie
h_v	J/kg	spezifische Verdampfungsenthalpie
\mathbf{I}	-	Einheitsmatrix
\bar{J}	$1/(kg \cdot s)$	massenbezogene Nukleationsrate

J	$1/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$	Nukleationsrate
J_0	$1/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$	präexponentieller Faktor der Nukleationsrate
Kn	-	Knudsen-Zahl
L	m	Länge
\bar{l}	m	mittlere freie Weglänge
M	kg/mol	molare Masse
Ma	-	Mach-Zahl
\mathbf{M}	-	Vektor der dispersen Phase im Lagrange-Bezugssystem
m	kg	Masse
\dot{m}	kg/s	Massenstrom
N	-	Anzahl aktiver Freiheitsgrade
N_T	1/kg	Tropfenanzahl pro Masseneinheit der Mischung
n	-	Tropfenanzahl
n_A	-	Anzahl der Abfragen
n_G	-	Anzahl der zu lösenden Gleichungen
n_T	-	Tabellendimension
n_V	-	Anzahl der Gitterzellen
n_s	rpm	Drehzahl
n_x, n_y, n_z	-	Komponenten des Normalenvektors
P	-	Anzahl der Phasen eines Systems
Pr	-	Prandtl-Zahl
p	Pa	statischer Druck
\dot{p}	1/s	Expansionsrate
p_s	Pa	Sättigungsdampfdruck
\mathbf{Q}	-	Quelltermvektor
\mathbf{Q}_L	-	Quelltermvektor im Lagrange-Bezugssystem
q	-	symbolische Größe der Roe-Mittelung
q_c	-	Kondensationskoeffizient
\dot{q}_s	J/(kg·s)	Wärmestrom aufgrund von Strahlung
R_s	J/(kg·K)	spezifische Gaskonstante
\mathbf{R}	-	rechter Eigenvektor
Re	-	Reynolds-Zahl
$ResL1$	-	L1-Norm des Residuums
r	m	Radius
r_{20}	m	oberflächengemittelter Radius
r_{32}	m	Sauter-Radius
r_{crit}	m	kritischer Radius
r_G	-	Verfeinerungsfaktor des räumlichen Gitters
r_T	-	Verfeinerungsfaktor der Tabelle

S	-	Sättigungsgrad
St	-	Stokes-Zahl
s	J/(kg·K)	spezifische Entropie
T	K	statische Temperatur
T_s	K	Sättigungstemperatur
t	s	Zeit
U	-	Erhaltungsvektor
u	m/s	Einheitsvektor der Geschwindigkeit
u, v, w	m/s	kartesische Geschwindigkeitskomponenten
v	m ³ /kg	spezifisches Volumen
\mathbf{v}	m/s	Geschwindigkeitsvektor
V	m ³	Volumen
V_V	-	Zellvolumen
x	-	Dampfgehalt
x, y, z	-	kartesische Koordinaten
y	-	Flüssigkeitsmassenanteil
$y_{Nukleation}$	-	Anteil der Nukleation am Flüssigkeitsmassenanteil
$y_{Wachstum}$	-	Anteil des Wachstums am Flüssigkeitsmassenanteil
y^+	-	dimensionsloser Wandabstand
Z	-	Realgasfaktor
z	-	symbolische thermophysikalische Größe

Griechische Zeichen

<u>Symbol</u>	<u>Einheit</u>	<u>Bezeichnung</u>
α, β, ν	-	empirische Parameter nach Young
α	J/(m ² ·s·K)	Wärmeübergangskoeffizient
α_{crit}	J/(m ² ·s·K)	Wärmeübergangskoeffizient für einen Keim mit r_{crit}
$\tilde{\alpha}$	-	Wellenstärke
α_p	1/K	thermischer isobarer Ausdehnungskoeffizient
Γ	-	fundamentale Ableitung der Gasdynamik
Δ	-	Menge der Ableitungsterme zur Interpolation
ΔG	J	Differenz der Gibbs-Energie
ΔG_{crit}	J	Energiebarriere der Keimbildung
ΔG_s	J	Oberflächenanteil der Gibbs-Energie
ΔG_v	J	Volumenanteil der Gibbs-Energie
$\Delta \kappa$	-	Differenz von isentropem Druck-Volumen-Exponenten und Verhältnis spezifischer Wärmekapazitäten
ΔT	K	Unterkühlung

Δt	-	dimensionsloser Zeitschritt
Δx	-	dimensionsloser Gitterpunktabstand
δ	-	dimensionslose Dichte
δ^*	-	Parameter der Entropiebedingung
δ_∞^c	-	dimensionsloser Kehrwert von $c_{v,\infty}$
$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4, \varepsilon_5$	-	Hilfsparameter zur Formulierung der Jacobi-Matrizen
θ_G	-	Konvergenzordnung des räumlichen Gitters
θ_T	-	Konvergenzordnung der Tabelle
η	Pa·s	dynamische Viskosität
κ	-	Isentropenexponent des perfekten Gases
κ_{pv}	-	isentropen Druck-Volumen-Exponent
κ_{pT}	-	isentropen Druck-Temperatur-Exponent
κ_T	1/Pa	isotherme Kompressibilität
Λ	-	Diagonalmatrix der Eigenwerte
Λ_N	1/s	Anteil der Nukleation am Massenaustausch
Λ_W	1/s	Anteil des Tropfenwachstums am Massenaustausch
λ	-	Eigenwert
λ_g	J/(m·s·K)	Wärmeleitfähigkeit
μ	J/mol	chemisches Potential
μ_k	-	Momente der Tropfenradienverteilung
π	-	Druckverhältnis
ρ	kg/m ³	Dichte
σ	-	Parameter der molekularen Komplexität nach Invernizzi
σ_{lg}	N/m	Oberflächenspannung
τ	-	dimensionslose Temperatur
τ_{ij}	-	Schubspannung
Φ	-	dimensionslose Helmholtz-Energie
ϕ	-	nicht-isothermer Korrekturfaktor
ϕ_0	-	Vorfaktor des nicht-isothermen Korrekturfaktors
φ	-	Volumenanteil einer Phase
χ	-	mittlerer Fehler der Auswertung anhand von Tabellen
ω	1/s	Winkelgeschwindigkeit

Indizes und Superskripte

<u>Symbol</u>	<u>Bezeichnung</u>
1, 2, 4	Verfeinerungsstufen für Diskretisierungsfehler
c	kritischer Zustand
d	Index der Differentialgleichung

δ	partielle Ableitung nach dimensionsloser Dichte
<i>EOS</i>	Zustandsgleichung
<i>eq</i>	Gleichgewichtszustand
<i>g</i>	Größe der Gasphase
<i>i</i>	Gruppe von Tropfen gleicher Größe
<i>in</i>	Größe am Eintritt
<i>int</i>	Größe an der Phasengrenzfläche
<i>j</i>	räumliche Diskretisierung
<i>L</i>	linker Zustand eines Riemann-Problems
<i>l</i>	Größe der Flüssigphase
<i>m</i>	Größe des Zweiphasengemisches
<i>max</i>	Maximum
<i>out</i>	Größe am Austritt
<i>p</i>	isobare Zustandsänderung
<i>R</i>	rechter Zustand eines Riemann-Problems
<i>RE</i>	Richardson-Extrapolation
<i>r</i>	reduzierte Größe
<i>s</i>	isentropische Zustandsänderung
<i>s, l</i>	Sättigungszustand der flüssigen Phase
<i>s, g</i>	Sättigungszustand der gasförmigen Phase
<i>trip</i>	Größe am Tripelpunkt
<i>T</i>	isotherme Zustandsänderung
<i>t</i>	totale Größe
<i>tab</i>	Auswertung anhand von Tabellen
<i>v</i>	isochore Zustandsänderung
<i>x, y, z</i>	kartesische Raumrichtungen
τ	partielle Ableitung nach dimensionsloser Temperatur
Φ	Helmholtz-basiert
∞	Größe ausgewertet für $v \rightarrow \infty$
\perp	orthogonal
<i>0</i>	Idealteil
<i>iter</i>	iterative Routine
<i>k</i>	Ordnung statistischer Momente
<i>n</i>	zeitliche Diskretisierung
<i>r</i>	Realteil
*	Korrektur zur Einhaltung der Entropiebedingung

Mathematische Operatoren und Konstanten

<u>Symbol</u>		<u>Bezeichnung</u>
d		vollständiges Differential
Δ		Differenz
δ		unspezifisches partielles Differential
∂		partielles Differential
\mathcal{F}		symbolische Funktion
\sim		Roe-Mittelung
\top		Transposition
∞		unendlich
k_b	$\text{m}^2 \cdot \text{kg} / (\text{s}^2 \cdot \text{K})$	Boltzmann-Konstante
N_A	1/mol	Avogadro-Konstante
R	J/(mol·K)	allgemeine Gaskonstante
π		Kreiszahl

Abkürzungen

<u>Symbol</u>	<u>Bezeichnung</u>
AIAA	A merican I nstitute of A eronautics and A stronautics
CDV	C onverging D iverging V erification
CFD	C omputational F luid D ynamics
DLR	D eutsches Z entrum für L uft- und R aumfahrt
DNS	D irect N umerical S imulation
E-E	E uler- E uler- B ezugssystem
E-L	E uler- L agrange- B ezugssystem
EPGIRoe	E xplicit P hase G eneralised I deal R oe
GIRoe	G eneralised I deal R oe
HLL	H arten L ax van L eer
IAPWS	I nternational A ssociation for the P roperties of W ater and S team
IWSMP	I nternational W et S team M odelling P roject
LES	L arge E ddy S imulation
M	M ischungsbasiert
Mono	M onodispers
MUSCL	M onotonic U pstream-centered S cheme for C onservation L aws
NASA	N ational A eronautics and S pace A dmistration
NICFD	N on- I deal C ompressible F luid D ynamics

NIST	National Institute of Standards and Technology
ORC	Organic Rankine Cycle
P	Phasenbasiert
PGIRoe	Phase Generalised Ideal Roe
Poly	Polydispers
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes
S	Schlupf
sCO ₂	supercritical CO ₂ (CO ₂ in überkritischem Zustand)
SST	Shear Stress Transport
TRACE	Turbomachinery Research Aerodynamic Computational Environment

1 Einleitung

Während die Erkenntnisse der experimentellen und theoretischen Fluidodynamik bis in die Zeit des hellenistischen Griechenlands zurückverfolgt werden können, ist eine erste Anwendung numerischer Verfahren zur Untersuchung von Strömungsphänomenen nur anhand von anekdotischer Evidenz belegbar. Demnach erdachte Lewis Fry Richardson [124] zu Beginn des 20. Jahrhunderts ein Verfahren zur numerischen Wettervorhersage. Um eine Wettervorhersage für einen Zeitraum von acht Stunden zu berechnen, wendete er sechs Wochen seiner Zeit auf und scheiterte letztlich. Seine Beobachtung eines sehr hohen Rechenaufwandes veranlasste ihn zum Entwurf eines Lösungsansatzes. Dieser beschreibt eine von ihm als *forecast factory* bezeichnete Ansammlung von 64,000 Menschen, welche jeweils mit einer mechanischen Rechenmaschine ausgestattet sind. Für die Koordination des Berechnungsvorganges sah Richardson eine für alle sichtbare Person vor, welche hierzu farbige Lichtsignale und telegrafische Kommunikationstechniken nutzen sollte. Selbst der mürrischste Anwender heutiger computergestützter Fluidodynamik (CFD), welcher allein vor seinem Rechner sitzt und für die meisten Fragestellungen innerhalb von Minuten oder Stunden eine konvergierte Lösung erzielen kann, wird bei diesem Gedanken zumindest innerlich schmunzeln müssen. Im nächsten Moment wird ihm vermutlich die Analogie zu den uns heute zur Verfügung stehenden Hochleistungsrechnern bewusst. Dabei werden die menschlichen Rechner durch Prozessorkerne und der durch Hilfsmittel ausgestattete Koordinator durch ein System zur Prozessparallelisierung ersetzt. Bereits vor der Konzeptionierung erster Hochleistungsrechner beschäftigten sich Forscher mit der Entwicklung computergestützter Methoden. Einen besonderen Antrieb stellten dabei zeitgenössische militärische Konflikte, sowie die Erschließung der unseren Planeten umgebenden Weiten dar. In den 1960er-Jahren entwickelten Mitarbeiter der NASA in Los Alamos vor diesem Hintergrund zahlreiche Verfahren zur numerischen Beschreibung von Strömungen. Die schnell voranschreitende technische Weiterentwicklung von Computern ermöglichte bereits in den frühen 1980er-Jahren eine Etablierung von kommerziellen CFD-Verfahren in relevanten Industriezweigen wie dem Turbomaschinenbereich. Im Kontext der Auslegung und Optimierung moderner Turbomaschinen sind numerische Lösungsverfahren mittlerweile unentbehrlich geworden. Ihre Anwendung auf Fluidströmungen, welche durch eine Abweichung ihrer thermophysikalischen Eigenschaften von dem Modell des perfekten Gases charakterisiert werden, verbleibt jedoch weiterhin eine Herausforderung. Die unter dem Fachgebiet der *Non-Ideal Compressible Fluid Dynamics* (NICFD) zusammengefassten Untersuchungsbereiche umfassen neben einphasigen Strömungen nicht-idealer Fluide auch Zweiphasenströmungen. In klassischen Dampfturbinenanwendungen stellt das Auftreten von Kondensationseffekten in den Niederdruckstufen die numerische Modellierung vor besondere Herausforderungen. Durch das zunehmende Interesse an der Erschließung alternativer Energiequellen treten zudem organische Fluide sowie Kohlenstoffdioxid in überkritischem Zustand ($s\text{CO}_2$) in den Fokus numerischer Untersuchungen. Sowohl im Kontext von Phasenwechselvorgängen als auch für Zustandsänderungen im Umfeld des kritischen Punktes sind für solche, als nicht-ideal zu modellierende Fluide, große Gradienten der thermophysikalischen Größen zu beobachten. Die CFD-Verfahren zur Berechnung entsprechender Strömungen müssen daher in der Lage sein, eine hohe Modellierungsgenauigkeit der Zustandsgrößen bei gleichzeitiger Robustheit gegenüber großen Gradienten im Strömungsfeld sicherzustellen. Die vorliegende Arbeit möchte einen Beitrag zur Entwicklung solcher numerischer Verfahren leisten. Dabei wird ein Schwerpunkt auf

die Beschreibung von Phasenwechselvorgängen kompressibler nicht-idealer Fluide gelegt. Um die im Folgenden vorgestellten Ansätze der wissenschaftlichen Gemeinschaft sowie der industriellen Anwendung zugänglich zu machen, erfolgt eine Implementierung der hergeleiteten Schemata in das *Turbomachinery Research Aerodynamic Computational Environment* (TRACE). Dabei handelt es sich um einen CFD-Löser, welcher durch das Deutsche Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) entwickelt wird. Da TRACE für die zeitliche Integration des Gleichungssystems ein implizites Verfahren anwendet, erfolgt die Validierung der in dieser Arbeit vorgestellten Verfahren zur Bestimmung der konvektiven Flussterme zusätzlich anhand eines von der Autorin implementierten dreidimensionalen Verfahrens unter Verwendung eines expliziten Ansatzes der zeitlichen Integration.

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt strukturiert:

Der **Stand der Forschung** wird mit Fokus auf die für diese Arbeit relevanten Fachgebiete dokumentiert und dient als Motivation der bearbeiteten Fragestellung. Die Relevanz der Untersuchung kompressibler nicht-idealer Fluide wird anhand ihrer Anwendungsgebiete aufgezeigt. Unterschiedliche numerische Verfahren zur Beschreibung ein- und zweiphasiger Strömungen werden vergleichend gegenübergestellt und ihre Eignung zur Beschreibung von Phasenwechselvorgängen eingeordnet. Die **Thermodynamische Beschreibung kompressibler nicht-idealer Fluide** führt die für diese Arbeit relevanten Konzepte der Thermodynamik ein. Hierzu erfolgt zunächst eine Abgrenzung thermodynamischer Zustandsbereiche und ihrer Charakteristika. Um diese einer mathematischen Beschreibung zugänglich zu machen, werden verschiedene Arten von Zustandsgleichungen vorgestellt. Die Klassifikation eines Fluides als kompressibel und nicht-ideal erfolgt anhand einer Auswahl geeigneter Parameter. Bevor die Besonderheiten der im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Arbeitsmedien aufgezeigt werden, erfolgt eine Detaillierung der zur Beschreibung des Phasenwechsels verwendeten Modelle. Im Anschluss wird die **Numerische Modellierung** der für die Untersuchung von ein- und zweiphasigen Strömungen kompressibler nicht-idealer Fluide zu lösenden Gleichungssysteme erläutert. Die mathematische Herleitung einer Erweiterung des Roe-Schemas für die Anwendung auf die Berechnung ein- und zweiphasiger Strömungen unterschiedlicher Komplexität stellt den maßgeblichen Beitrag der vorliegenden Arbeit dar und wird im Sinne einer kompakten Darstellung in einer Dimension vorgestellt. Die Art der Implementierung des resultierenden Schemas in den Strömungslöser TRACE sowie Methoden zur Beurteilung numerischer Lösungen werden präsentiert. Die im Zuge einer **Anwendung der Schemata auf verschiedene Validierungsfälle** ein- und zweiphasiger Strömungen erzielten Ergebnisse werden diskutiert. Nach einer numerischen Untersuchung der Expansion von CO_2 und dem organischen Fluid MDM in Laval-Düsen folgt eine Analyse der Verdichtung von CO_2 in überkritischem Zustand anhand der Geometrie eines sCO_2 -Verdichters. Die Kondensation von Wasserdampf und CO_2 in Lavaldüsen dient einer Validierung der implementierten Modelle zur Beschreibung des Phasenwechsels. Anhand der numerischen Untersuchung einer Turbinenkaskade, welche mit Wasserdampf durchströmt wird, erfolgt eine detaillierte Betrachtung von Interaktionen zwischen der flüssigen und der gasförmigen Phase. **Zusammenfassung und Ausblick** dienen zur Einordnung der durch die vorliegende Arbeit gewonnenen Erkenntnisse und zeigen mögliche Aspekte für weitergehende Untersuchungen auf. Der **Anhang** enthält neben einer tabellarischen Auflistung der verwendeten thermophysikalischen Modellgleichungen und einer Untersuchung zur Auswertung dieser im Zweiphasengebiet insbesondere auch die Gleichungen und Matrizen für eine Implementierung des vorgestellten Verfahrens zur Berechnung konvektiver Flussterme in drei Dimensionen.

2 Stand der Forschung

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, einen Beitrag zur Entwicklung numerischer Verfahren für die Untersuchung von Phasenwechselfvorgängen kompressibler nicht-idealer Fluide zu leisten. Um dies erreichen zu können, ist eine Kombination der Konzepte und Erkenntnisse der Thermophysik, der Fluidodynamik sowie der numerischen Mathematik notwendig. Zunächst sind die Anwendungsgebiete und Besonderheiten kompressibler nicht-idealer Arbeitsmedien im Kontext von Turbomaschinen zu betrachten. Die für die numerische Untersuchung solcher Fluide benötigten Verfahren müssen eine Beschreibung ein- und zweiphasiger Strömungen ermöglichen. Die Auswahl der im Weiteren verfolgten Ansätze wird anhand einer Übersicht des durch entsprechende Fachliteratur repräsentierten Erkenntnisstandes vorgenommen. Dabei stellt die Untersuchung von Phasenwechselfvorgängen an das gewählte numerische Verfahren besondere Anforderungen, welche für die Spezifizierung der Zielsetzung diskutiert werden.

2.1 Anwendungsgebiete kompressibler nicht-idealer Arbeitsmedien

Die Umwandlung von thermischer in mechanische bzw. elektrische Energie erfolgt historisch anhand von Kreisläufen, welche durch konventionelle Arbeitsmedien, wie Wasserdampf oder Luft, betrieben werden. Als Wärmequelle dient dabei zumeist die Verbrennung eines fossilen Energieträgers. Die Nutzung anderer Wärmequellen wird maßgeblich durch eine begrenzte Flexibilität in Bezug auf Änderungen der Betriebsbedingungen limitiert. Neben Versuchen, diese Begrenzungen durch Anpassung bestehender Prozesse aufzuheben, erscheinen besonders solche Ansätze als vielversprechend, welche auf die jeweiligen Prozessrandbedingungen zugeschnittene Technologien entwickeln. Die Möglichkeit der Wahl des Arbeitsmediums stellt für letztgenannte einen zusätzlichen Freiheitsgrad dar. Aufgrund ihrer spezifischen thermophysikalischen Eigenschaften finden sich kompressible nicht-ideale Arbeitsmedien in zahlreichen dieser Anwendungen. Neben ihrer Relevanz für Verdichtungs Vorgänge in linksläufigen Kreisläufen der Kälte- und Wärmepumpentechnik zeigt sich ihr Potential auch im Kontext von rechtsläufigen Rankine-Kreisläufen. Bei den für diese *Organic Rankine Cycles* (ORC) genutzten Arbeitsmedien handelt es sich um organische Verbindungen oder Gemische. Der Vorteil organischer Fluide basiert maßgeblich auf der Möglichkeit einer chemischen Herstellung eines für die jeweilige Anwendung optimalen Arbeitsmediums. Aufgrund ihrer geringen thermischen Beständigkeit, werden sie zumeist im Umfeld von Niedertemperatur-Wärmequellen eingesetzt. Die Anwendungsgebiete von ORC-Kreisläufen umfassen neben der Nutzung industrieller Restwärme [102] auch Biomasse [122], Solarthermie- [48] sowie Geothermie-Kraftwerke [47]. Die Betriebsbedingungen in Form der vorherrschenden Temperaturniveaus, sowie des Leistungsbedarfs, können im Zuge der Spezifizierung der optimalen Fluideigenschaften berücksichtigt werden. Ein weiteres Arbeitsmedium, welches sich durch die Nicht-Idealität seiner thermodynamischen Zustände auszeichnet, ist Kohlenstoffdioxid in überkritischem Zustand. Die Idee zur Verwendung dieses Fluides in einem Brayton-Kreislauf geht auf die Arbeit von Angelino [6] zurück. Die flüssigkeitsähnlichen Fluideigenschaften von Kohlenstoffdioxid nahe des kritischen Punktes ermöglichen eine Reduktion der zur Verdichtung aufzuwendenden Leistung. Anders als im Falle von ORC-Anwendungen finden sich sCO₂-Kreisläufe insbesondere im Umfeld von Hochtemperatur-Wärmequellen wie der Wärmeabfuhr in Kernkraftwerken [40], der indus-

triellen Restwärmenutzung [97] sowie der Wandlung konzentrierter Sonnenenergie [111]. Die Verbreitung von Kreisläufen, deren Arbeitsmedien als nicht-ideal klassifiziert werden können, wird maßgeblich durch einen Mangel an Erfahrung im Bereich der Auslegung der Komponenten sowie fehlender experimenteller Evidenz behindert. Dabei ist die Auslegung der Turbomaschinen aufgrund ihres exemplarisch von Colonna et al. [30] und Allison et al. [2] aufgezeigten Einflusses auf den Kreislaufwirkungsgrad von besonderer Relevanz. Inwiefern eine Adaption der für konventionelle Medien etablierten Auslegungsrichtlinien an organische Fluide sowie CO_2 in überkritischem Zustand möglich ist, kann aufgrund der vom Modell des perfekten Gases stark abweichenden Fluideigenschaften bisher nicht abschließend geklärt werden. Um diese Fragestellungen näher untersuchen zu können, werden neben experimentellen Ansätzen insbesondere auch numerische Methoden zur Beschreibung von Strömungen nicht-idealer Fluide benötigt. Die Anwendung numerischer Verfahren ermöglicht eine zeit- und kosteneffiziente Auslegung der Turbomaschinen und stellt daher ein notwendiges Kriterium für die Etablierung zugehöriger Energiewandlungsprozesse dar. Numerische Untersuchungen von Expansions- und Verdichtungsprozessen kompressibler nicht-idealer Fluide stehen aufgrund dessen im Fokus zahlreicher aktueller Veröffentlichungen. Die exemplarisch durch Thompson und Lambrakis [151] dokumentierte Nicht-Idealität organischer Medien im Umfeld der Taulinie, sowie des kritischen Punktes, nehmen Romei et al. [129] zum Anlass für umfassende numerische Untersuchungen des Expansionsvorganges in diesem Zustandsbereich. Sie betrachten die supersonische Durchströmung einer Turbinenkaskade mit dem organischen Fluid Hexamethyldisiloxan. Anders als für unterkritische zeigen sich für überkritische Eintrittszustände starke Abweichungen der Strömungscharakteristiken von denen der idealen Gasdynamik. Die Autoren schlussfolgern daraus die Anwendbarkeit von etablierten Auslegungsregeln für ORC-Turbinen bei Eintrittsbedingungen unterhalb des kritischen Punktes sowie einen weitergehenden Untersuchungsbedarf für Expansionen überkritischer Zustände. Die von Gori et al. [58] beschriebene Zunahme der Mach-Zahl über einem schrägen Stoß in Strömungen nicht-idealer molekularkomplexer Fluide stellt eine solche Abweichung der Strömungscharakteristik von der idealen Gasdynamik dar. Für die Auslegung von Turbinen ist besonders die Unter- bzw. Überschätzung von Strömungsverlusten aufgrund abweichender Strömungscharakteristiken von hoher Bedeutung. Tosto et al. [155] stellen numerische Untersuchungen einer axialen Turbinenkaskade für die Medien CO_2 und Hexamethyldisiloxan an. Sie beobachten eine Abhängigkeit der Abweichungen der Strömungscharakteristik von der molekularen Komplexität sowie der Nicht-Idealität des Fluides. Auch können sie die auftretenden Strömungsverluste in einen Zusammenhang mit den Fluideigenschaften und in der Folge dem Auftreten von Stoßwellen und Wirbelschleppen im Bereich der Schaufelhinterkante setzen. Die Verdichtung von Kohlenstoffdioxid in überkritischem Zustand stellt die numerische Auslegung vor drei besondere Herausforderungen. Nahe des kritischen Punktes weisen die thermophysikalischen Größen erhebliche Gradienten auf, welche eine hohe Genauigkeit der Zustandsbeschreibung erfordern. Außerdem kann oberhalb des kritischen Punktes keine klare Trennung flüssiger und gasförmiger Zustände erfolgen. Der kontinuierliche Phasenübergang zweiter Ordnung erfolgt entlang der Widom-Linie, welche ebenfalls von Bereichen großer Gradienten umgeben ist. Zuletzt kann es innerhalb der Schaufelpassage des Verdichters zum Absinken in das Zweiphasengebiet und der Ausbildung einer zweiten Phase kommen. Pečnik et al. [119] und Rinaldi et al. [125] zeigen diese Besonderheiten der Strömung von CO_2 in überkritischem Zustand innerhalb eines Radialverdichters anhand numerischer Untersuchungen auf. Bei der betrachteten Geometrie

handelt es sich um den Verdichter des experimentellen sCO₂-Kreislaufes der *Sandia National Laboratories* [173]. Zahlreiche weitere Autoren (vgl. exemplarisch [3, 135]) betreiben Detailstudien anhand dieser Geometrie und zeigen Limitierungen in Form einer mangelhaften Konvergenz der von ihnen verwendeten Verfahren sowie eines hohen Rechenzeitbedarfs zur Auswertung der thermophysikalischen Größen auf. Baltadjiev et al. [16] untersuchen den Einfluss der Nicht-Idealität des Fluides sowie der Kondensation an der Schaufelvorderkante auf die Betriebsparameter des Verdichters. Für den von ihnen untersuchten Betriebspunkt kommen die Autoren zu der Schlussfolgerung, dass das Verhältnis der Zeit, welche für die Tropfenbildung benötigt wird, und der Verweilzeit der Tropfen in der Strömung zu klein ist, um einen relevanten Einfluss der Kondensation auf den Betrieb des Verdichters zu induzieren. Der Bedarf an numerisch stabilen und rechenzeiteffizienten Methoden zur Beschreibung kompressibler nicht-idealer ein- und zweiphasiger Strömungen wird durch die aufgeführten Untersuchungen somit deutlich.

2.2 Numerische Verfahren zur Beschreibung ein- und zweiphasiger Strömungen

Die mathematische Beschreibung einer Strömung erfolgt anhand der Erhaltungssätze der Masse, des Impulses und der Energie. Um die in Turbomaschinen auftretenden Strömungsphänomene anhand numerischer Verfahren möglichst umfassend beschreiben zu können, wird die Strömung üblicherweise als viskos und kompressibel modelliert. Das resultierende Gleichungssystem ist durch partielle nicht-lineare Differentialgleichungen gekennzeichnet. Die zugehörigen Gleichungen werden auch als Navier-Stokes-Gleichungen bezeichnet. Um diese numerisch zu lösen, ist insbesondere die Art der Berücksichtigung von turbulenten Schwankungen im Strömungsfeld entscheidend. Bei der direkten numerischen Simulation (DNS) einer Strömung werden die turbulenten Schwankungen in Raum und Zeit vollständig aufgelöst. Dies bedingt aufgrund sehr feiner räumlicher und zeitlicher Auflösungen der Strömungsgrößen eine hohe Genauigkeit der physikalischen Repräsentation und resultiert in einem gleichzeitig sehr hohen Bedarf an Rechenleistung. *Large eddy* Simulationen (LES) reduzieren die benötigte Rechenleistung durch Anwendung eines räumlichen Filters auf die Navier-Stokes-Gleichungen. Dieser bedingt eine vollständige Auflösung größerer Wirbelstrukturen, während kleinere Wirbel anhand von Feinstrukturmodellen nur näherungsweise beschrieben werden. Die Priorisierung von groß- gegenüber kleinskaligen Anteilen im Zuge der LES führt zu einer Reduktion der Beschreibungsgenauigkeit gegenüber den DNS. Eine zeitliche oder auch Reynolds-Mittelung der Navier-Stokes-Gleichungen (RANS) stellt eine weitergehende Vereinfachung dar. Die turbulenten Schwankungen werden anhand von zusätzlichen Gleichungstermen, welche durch sogenannte Turbulenzmodelle beschrieben werden, als Bestandteil der viskosen Flussterme berücksichtigt. Für zahlreiche Turbomaschinenanwendungen weist die Lösung der RANS-Gleichungen eine hinreichende Beschreibungsgenauigkeit bei einem gleichzeitig deutlich geringeren Bedarf an Rechenleistung auf. Da der Fokus der vorliegenden Arbeit auf der Weiterentwicklung eines Verfahrens zur Berechnung der konvektiven Flussterme der Navier-Stokes-Gleichungen liegt, erscheint eine Beschränkung auf das RANS-Gleichungssystem somit als hinreichend. Anhand eines Systems hyperbolischer partieller Differentialgleichungen wie den RANS-Gleichungen kann ein Anfangswertproblem in Form eines Riemann-Problems formuliert werden. Dieses ist unter Anwendung eines finiten Volumenansatzes jeweils für zwei angrenzende räumlich-diskrete

Volumen definiert. Die Arbeit von Godunov [57] bildet den Ausgangspunkt der Entwicklung von Ansätzen zur Lösung solcher Anfangswertprobleme, wobei der Fluss über die Volumengrenzen eine wesentliche Zielgröße darstellt. Eine Vielzahl von Autoren beschäftigt sich mit der Formulierung approximativer Lösungsverfahren. Eine vergleichende Auswahl dieser kann van Leer et al. [92] entnommen werden. Dabei unterscheiden sich die Verfahren maßgeblich in ihrer Fähigkeit, die das Riemann-Problem charakterisierenden Wellenarten abzubilden. Der Ansatz von Lax und Friedrich [89] enthält keinerlei Information über die Wellenstruktur des Riemann-Problems und ist in der Folge nur unzureichend für die Beschreibung von Stoßwellen, Kontaktdiskontinuitäten und Expansionsfächern geeignet. Der Riemann-Löser nach Harten, Lax und van Leer (HLL) [72], die Verfahren des *flux vector splittings* (vgl. exemplarisch [90]) sowie der Ansatz nach Rusanov [131] sind in der Lage jeweils spezifische Wellenarten mit hoher Genauigkeit zu erfassen. Eine vollständige Repräsentation der Wellenstruktur kann hingegen mit den Verfahren nach Osher [113], Roe [127] oder Weiterentwicklungen des HLL-Ansatzes (vgl. [154, 44]) erreicht werden. Die Formulierung nach Roe zeichnet sich durch eine im Vergleich zu anderen Verfahren sehr hohe Genauigkeit der Auflösung von Diskontinuitäten aus, welche insbesondere auf die Abwesenheit zusätzlicher numerischer Dämpfungsterme zurückzuführen ist. Es findet daher präferiert Anwendung bei der Beschreibung komplexer Strömungsfelder mit großen Gradienten der Strömungsgrößen. Peery und Imlay [115] dokumentieren für das Roe-Schema das Auftreten des sogenannten *carbuncle phenomenon*, welches numerische Instabilitäten im Umfeld eines Stoßes unter hypersonischen Bedingungen beschreibt. Auch verletzt das von Roe entwickelte Flussberechnungsschema die Entropiebedingung und erlaubt in der Folge unphysikalische Lösungen. Dies kann jedoch durch eine entsprechende Begrenzung in Form einer Modifikation der Eigenstruktur korrigiert werden [71]. Die durch die Herleitung bedingte Beschränkung des Ansatzes nach Roe auf das Modell des perfekten Gases stellt eine weitere Herausforderung dar. Das linearisierte Gleichungssystem ist unter Berücksichtigung einer Zustandsgleichung eines nicht-idealen Fluides nicht länger eindeutig bestimmt. Aufgrund dessen erlangen die Formulierung der in der Jacobi-Matrix enthaltenen partiellen Ableitungen des Druckes sowie die resultierende Definition des Roe-gemittelten Zustandes eine zentrale Bedeutung. Grossman und Walters [60] behalten die unter der Annahme eines perfekten Gases hergeleiteten Zusammenhänge bei. Der Einfluss der Modellierung als nicht-ideal beschränkt sich auf die Bestimmung eines äquivalenten Verhältnisses spezifischer Wärmekapazitäten in Abhängigkeit von Dichte und innerer Energie. Glaister [56], Vinokur [160] und Liou et al. [95] konzentrieren sich hingegen auf eine exakte Bestimmung der partiellen Ableitungen des Druckes. Dies bedingt jedoch eine Abhängigkeit der Herleitung und somit der resultierenden Ausdrücke von der Art der Zustandsgleichung. Einen Überblick über derartige Anpassungen des Roe-Schemas für unterschiedliche Zustandsgleichungen bieten Mottura et al. [106]. Mit zunehmender Komplexität der Zustandsgleichung steigt nach Abgrall [1] die Anzahl der benötigten Roe-gemittelten Zustandsgrößen. Auch nimmt die Robustheit des für nicht-ideale Fluide angepassten Verfahrens gegenüber der ursprünglichen Formulierung aufgrund der Notwendigkeit einer Lösung komplexer nicht-linearer Gleichungen ab. Um dem zu begegnen, schlägt Cinella [28] eine Reihe spezifischer Vereinfachungen in Bezug auf die Mittelung der Größen vor. Auch die dieser Arbeit zugrundeliegende Erweiterung des Roe-Schemas versucht die Komplexität der Formulierung bei gleichzeitiger Beibehaltung der Genauigkeit und Robustheit des ursprünglichen Ansatzes zu minimieren. Der im Weiteren als *Generalised Ideal Roe* (GI_{Roe}) [146] bezeichnete Ansatz ist dabei auf

Zustandsgleichungen beliebiger Komplexität anwendbar. Seine Besonderheit besteht in der Auswertung der Roe-gemittelten Schallgeschwindigkeit anhand der gewählten Zustandsgleichung. Die bisher vorgestellten Verfahren zur Berechnung der konvektiven Flussterme beschränken sich auf einphasige Strömungen. Im Falle von Zweiphasenströmungen steht die Definition des konvektiven Flusses in direktem Zusammenhang mit der Art der Phasenmodellierung sowie zum gewählten Bezugssystem der dispersen Phase. Erfolgt eine nach Phasen getrennte Formulierung der Erhaltungsgleichungen unter Anwendung eines Euler-Bezugssystems kommt es mindestens zu einer Verdopplung der zu lösenden Gleichungen. Die Interaktion der Phasen und insbesondere der Phasenwechsel werden in dem auch als *two-fluid* Modell bezeichneten Ansatz durch entsprechende Quellterme berücksichtigt. Eine Erhöhung des Detailgrades der Modellierung durch Berücksichtigung unterschiedlicher Tropfengrößen sowie einer fluidspezifischen Zustandsgleichung hat einen starken Einfluss auf die Komplexität der Jacobi-Matrix. Wie Ndjinga et al. [110] zeigen, ist eine numerische Diagonalisierung dieser Matrix anhand üblicher Verfahren nicht länger möglich. Eine Vereinfachung der Jacobi-Matrix für eine spezifische Zustandsgleichung ist in der Lage, dieser Herausforderung zu begegnen [75]. Jedoch verbleibt eine hohe Komplexität des Gleichungssystems bei gleichzeitiger Beschränkung der Anwendbarkeit auf lediglich ein Arbeitsmedium. Eine weitere Möglichkeit zur Modellierung des Zweiphasensystems besteht in Form eines Mischungsansatzes, welcher insbesondere für Strömungen geringer Flüssigkeitsmassenanteile verbreitet ist. Wird die disperse Phase in einem Lagrange-Bezugssystem beschrieben, ist eine Unterteilung des numerischen Lösungsverfahrens auf Erhaltungs- und Transportgleichungen möglich. Die Verfahren zur Bestimmung des konvektiven Flusses für einphasige Strömungen können hierbei Anwendung auf das System der Erhaltungsgleichungen finden. Die Bestimmung der die flüssige Phase charakterisierenden Größen erfolgt entweder anhand von Quelltermen [51] oder durch eine Kopplung eines separaten Gleichungssystems [54]. In beiden Fällen ist keine Anpassung des Flussberechnungsschemas notwendig, wodurch die Robustheit des einphasigen Verfahrens erhalten bleibt. Eine Beschreibung der dispersen Phase in einem Euler-Bezugssystem führt auch unter Anwendung des Mischungsansatzes zu einer Zunahme der zu lösenden Gleichungen. Jedoch wird gleichzeitig eine Berücksichtigung von Geschwindigkeitsdifferenzen zwischen den Phasen sowie eine Parallelisierung des Berechnungsverfahrens vereinfacht. Durch eine Modellierung der Tropfengrößenverteilung anhand statistischer Momente wie Hill [74] sie im Kontext der Ausbildung einer flüssigen dispersen Phase vorschlägt kann die Anzahl der zusätzlichen Gleichungen gegenüber einer diskreten Tropfengrößenverteilung erheblich reduziert werden. Unabhängig davon besteht jedoch eine Notwendigkeit der Anpassung des Verfahrens zur Bestimmung der konvektiven Flussterme. Halama et al. [69] formulieren eine solche für ein thermisch perfektes Gas, während Zhu et al. [180] eine von der Zustandsgleichung unabhängige Anpassung anstreben. Dabei erfolgt in beiden Fällen eine Berücksichtigung des vollständigen Gleichungssystems. Dies verhindert analog zu den im Kontext der *two-fluid* Modelle erörterten Herausforderungen eine Anwendung von Zustandsgleichungen hoher Komplexität. Für ein perfektes Gas stellen Mei und Guha [100] eine Vereinfachung des Gleichungssystems vor. Dabei verbleibt lediglich die Differentialgleichung des Flüssigkeitsmassenanteils im Hauptgleichungssystem, während die restlichen drei Differentialgleichungen der Momente separat gelöst werden. Die Kopplung der beiden Systeme kann durch den Flüssigkeitsmassenanteil sichergestellt werden. Die in der Literatur dokumentierten Erweiterungen von Roe-Schemata für die Anwendung auf Zweiphasenströmungen nicht-idealer Fluide werden maßgeblich durch

zwei Kriterien limitiert. Diese sind die Beschränkung auf eine Beschreibung der dispersen Phase im Lagrange-Bezugssystem sowie ein Zielkonflikt zwischen einer möglichst niedrigen Komplexität des Gleichungssystems bei gleichzeitiger Verwendung hochkomplexer Zustandsgleichungen. Die vorliegende Arbeit möchte daher einen Ansatz vorstellen, welcher sowohl auf Euler- als auch auf Lagrange-Bezugssysteme Anwendung finden kann und zudem unabhängig von der gewählten Zustandsgleichung eine möglichst geringe Komplexität der Formulierung aufweist. Die Genauigkeit und Robustheit des Verfahrens wird dabei maßgeblich durch die numerischen Implikationen des Auftretens von Phasenwechselfvorgängen beeinflusst.

2.3 Besondere Anforderungen an numerische Schemata im Kontext von Phasenwechselfvorgängen

Im Zuge der Lösung des zuvor beschriebenen Riemann-Problems werden die thermodynamischen Zustände in zwei räumlich angrenzenden Volumen betrachtet. Kommt es im Bereich ihrer Grenzfläche zu einer Ausbildung lokal großer Gradienten, ergeben sich für das Lösungsverfahren besondere Anforderungen. Für sehr große räumliche und zeitliche Differenzen in den Erhaltungsgrößen der Strömung kann es im Zuge der iterativen Lösung zur Ausbildung von numerischen Oszillationen kommen, welche die Konvergenz und somit die Stabilität gefährden. Neben Ansätzen zur Vermeidung oder Abschwächung solcher Schwingungen in Form sogenannter *limiter*, welche die maximal zulässige Änderung begrenzen, hat auch der gewählte Ansatz zur Bestimmung der konvektiven Flussterme selbst einen Einfluss auf die Stabilität des Verfahrens. Im Falle einphasiger Strömungen nicht-idealer Fluide finden sich große Gradienten im Strömungsfeld insbesondere für Zustandsänderungen in unmittelbarer Nähe zum kritischen Punkt sowie der Taulinie und im Umfeld von Diskontinuitäten wie Stoßfronten. Phasenwechselfvorgänge von der gasförmigen in die flüssige Phase werden in Turbomaschinen häufig durch eine spontane homogene Keimbildung initiiert. In einem sehr kurzen Zeitintervall kommt es zur Ausbildung einer flüssigen dispersen Phase. Aufgrund der Unterschiede in den thermophysikalischen Größen flüssiger und gasförmiger Medien führt dieser als Nukleation bezeichnete Mechanismus ebenfalls zu lokal großen Gradienten. Die räumliche Ausdehnung ihres Auftretens wird als Kondensationsfront bezeichnet. Ihre Ausbreitungsgeschwindigkeit steht in direkter Abhängigkeit zur Schallgeschwindigkeit, welche nach Guha [64] für eine Zweiphasenströmung unter Abwesenheit eines thermodynamischen Gleichgewichtes nicht eindeutig definiert ist. Da die Schallgeschwindigkeit im Zuge der Lösung des Riemann-Problems eine zentrale Rolle spielt, erlangt ihre Modellierung eine besondere Bedeutung. Um den Phasenwechselfvorgang in Form der Kondensationsfront möglichst genau abbilden zu können, muss das Flussberechnungsschema somit zum einen analog zum Auftreten von Diskontinuitäten in einphasigen Strömungen robust gegenüber numerischen Oszillationen sein. Zum anderen muss es eine Beschreibung der Zustandsgrößen und insbesondere der Schallgeschwindigkeit des nicht-idealen Fluides für beide Phasen mit hoher Genauigkeit erlauben. Aufgrund der besonderen Eignung des Ansatzes nach Roe zur Beschreibung von Stößen und der Erweiterung dieses Ansatzes für beliebige nicht-ideale Fluide in Form des GIRoe-Schemas, strebt die vorliegende Arbeit eine weitere numerische Verallgemeinerung in Bezug auf die Modellierung von Phasenwechselfvorgängen unterschiedlicher Komplexität an.

3 Thermodynamische Beschreibung kompressibler nicht-idealer Fluide

Um die thermodynamischen Eigenschaften kompressibler nicht-idealer Fluide beschreiben zu können, ist es zunächst notwendig, grundlegende Begriffe und Konzepte einzuführen. Hierzu werden mit Ausnahme der in Kapitel 3.5 verwendeten Darstellungen lediglich fluidunspezifische Repräsentationen gezeigt. Da es sich bei den im Rahmen der vorliegenden Arbeit untersuchten Arbeitsmedien ausnahmslos um Reinstoffe handelt, kann das Auftreten chemischer Reaktionen negiert werden. Jedoch kann es zwischen den Molekülen eines Reinstoffes zur Ausbildung von intermolekularen Wechselwirkungen kommen. Die Stärke dieser Wechselwirkungen bedingenden Kräfte ist zentral für die Definition des Begriffes *Fluid*. Im Falle eines Feststoffes sind die zwischen den Molekülen herrschenden Kräfte derart stark, dass sich die Moleküle in einem räumlichen Gitter anordnen und somit eine nahezu ortsfeste Position einnehmen. Zwischen den Molekülen einer Flüssigkeit hingegen herrschen deutlich geringere Kräfte, welche eine Relativbewegung unter Einhaltung der relativen Distanz zum nächsten Molekül ermöglichen. Die relative Distanz zwischen zwei Gasmolekülen ist aufgrund von nur sehr geringen intermolekularen Wechselwirkungen sogar variabel. Als Fluid wird eine Substanz bezeichnet, deren intermolekulare Wechselwirkungen eine Relativbewegung der Moleküle ermöglichen. In der Folge lassen sich flüssige und gasförmige Stoffe unter der Bezeichnung Fluide zusammenfassen. Festkörper bilden das Komplement der Fluide [73]. Neben der in obiger Definition herangezogenen mikroskopischen Betrachtungsweise ist auch eine makroskopische Beschreibung von Fluiden möglich. Dabei wird nicht wie zuvor eine bestimmte Molekülanzahl, sondern ein definiertes Volumen betrachtet. Die Wahl der Größe dieses Volumens wird durch einen unteren und einen oberen Grenzfall limitiert. Wird das Volumen zu klein gewählt, so unterliegen die zu beobachtenden Eigenschaften des Fluids statistischen Schwankungen aufgrund von Molekularbewegungen über die Volumengrenzen hinweg. Eine zu große Dimensionierung des Volumens führt hingegen dazu, dass räumliche Änderungen von Fluideigenschaften nicht mehr hinreichend aufgelöst werden. Für ein Volumen, dessen Größe derart gewählt ist, dass sie den unteren Grenzfall gerade übersteigt, postuliert die Kontinuumstheorie eine homogene Verteilung der Fluideigenschaften innerhalb des Volumens. Dieses Volumen bildet somit die kleinstmögliche makroskopische Repräsentation des Fluides und kann auch als infinitesimales Fluidelement bezeichnet werden. Jedes physikalische Volumen im Raum lässt sich entsprechend Abbildung 1 als endliche Menge von Fluidelementen interpretieren, wodurch sich die Eigenschaften des Fluids für beliebige Punkte im Raum bestimmen lassen. [85]

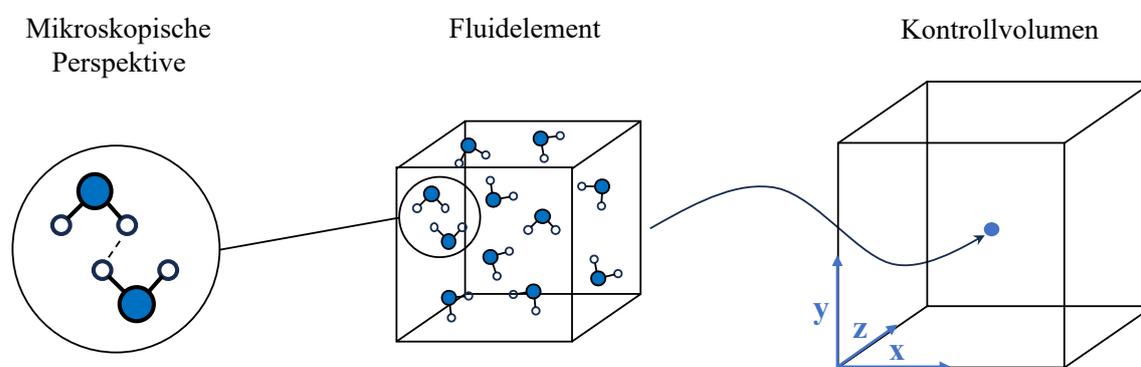


Abbildung 1: Unterschiedliche Perspektiven auf das Konzept des Fluides

Wählt man die Grenzen eines thermodynamischen Systems derart, dass sie ein Fluidelement exakt umschließen, so lassen sich die thermodynamischen Eigenschaften des Fluids mittels physikalischer Größen quantifizieren. Das System befindet sich in einem wohldefinierten thermodynamischen Zustand, wenn dieser jederzeit durch ein unabhängiges Set von Variablen eindeutig beschrieben werden kann [11]. Diese werden dann auch als Zustandsgrößen bezeichnet, wobei zwischen extensiven und intensiven Größen unterschieden werden kann. Intensive Zustandsgrößen zeichnen sich gegenüber extensiven dadurch aus, dass ihre Werte unabhängig von der Größe des homogenen Systems sind. Die beiden bekanntesten Vertreter intensiver Zustandsgrößen sind der Druck p und die Temperatur T . [142]

Da ein Fluidelement per Definition stets eine homogene Verteilung der Fluideigenschaften aufweist, lässt es sich nach Gibbs [52] auch als Phase klassifizieren. Beim Vorliegen von mehr als einer Phase, innerhalb der Systemgrenzen, wird das System aufgrund der sprunghaften Änderungen der thermodynamischen Eigenschaften an den Phasengrenzen als heterogen bezeichnet. Damit die Phasen eines solchen heterogenen Systems in einem thermodynamischen Gleichgewicht vorliegen, müssen drei Kriterien erfüllt sein. Die beiden Phasen weisen die gleiche Temperatur auf und befinden sich somit in thermischem Gleichgewicht. Zudem herrscht zwischen den Phasen ein mechanisches Gleichgewicht, indem der Druck der Phasen den gleichen Wert annimmt. Zuletzt stimmen die chemischen Potentiale μ der beiden Phasen überein, sodass auch ein stoffliches Gleichgewicht vorherrscht. [11]

Für ein System, welches sich in einem solchen thermodynamischen Gleichgewicht befindet, leitet Gibbs [52] eine Gleichung zur Bestimmung der Freiheitsgrade des Systems her:

$$F = C + 2 - P \quad (3.1)$$

Der Freiheitsgrad des Systems F wird hiernach durch die Anzahl der Komponenten im System C sowie die Anzahl der vorliegenden Phasen P bestimmt. Im Rahmen dieser Arbeit werden ausschließlich Einkomponentensysteme betrachtet, sodass C den Wert eins annimmt. Für einphasige Systeme ergibt sich somit ein Freiheitsgrad von zwei, während zweiphasige Systeme lediglich einen Freiheitsgrad von eins aufweisen.

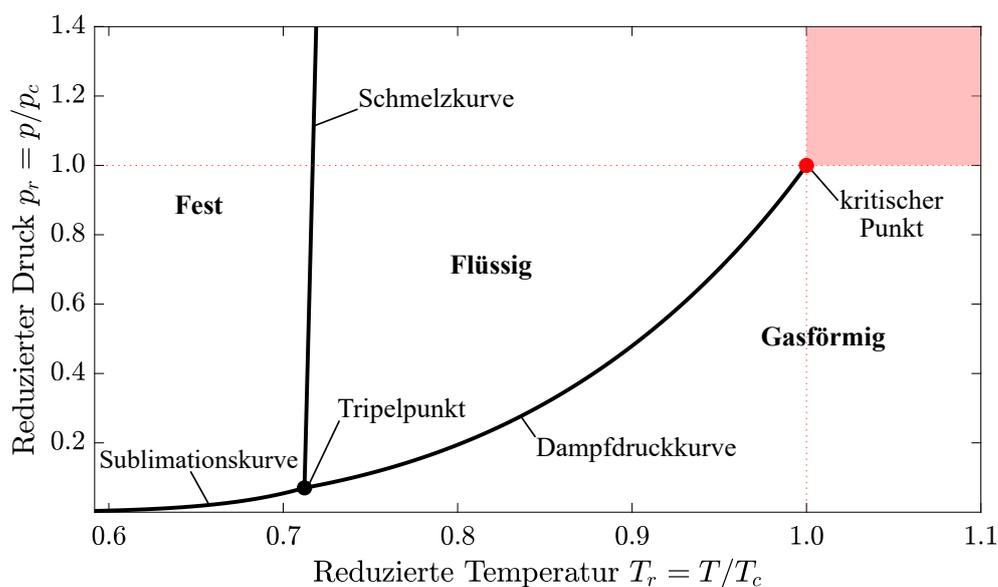


Abbildung 2: Phasendiagramm eines Reinstoffes in reduzierter Darstellung

Die Interpretation des Freiheitsgrades lässt sich anhand des Phasendiagramms in Abbildung 2 beschreiben. Zunächst sollen jedoch die charakteristischen Punkte und Linien des Phasendiagramms kurz erläutert werden. Abbildung 2 stellt eine Auftragung des reduzierten Druckes p_r über der reduzierten Temperatur T_r für ein exemplarisches Einkomponentensystem dar. Die drei Phasen fest, flüssig und gasförmig, in welchen das Fluid vorliegen kann, sind in diesem als Flächen dargestellt. Die Grenzkurven zwischen den Phasen repräsentieren die jeweiligen Phasengleichgewichte, auf welchen eine Koexistenz der beiden angrenzenden Phasen möglich ist. Die Schmelzkurve trennt die feste von der flüssigen Phase, während die Sublimationskurve die feste von der gasförmigen Phase abgrenzt. Die Dampfdruckkurve trennt die flüssige Phase von der gasförmigen Phase und besitzt für die Untersuchung von Fluiden daher die höchste Relevanz. Ihr Anfang wird durch den Tripelpunkt definiert, in welchem alle drei Phasen in thermodynamischem Gleichgewicht stehen. Das Ende der Dampfdruckkurve markiert der kritische Punkt, dessen Zustandsgrößen durch den Buchstaben c indiziert werden. Thermodynamische Zustände, welche einen reduzierten Druck und eine reduzierte Temperatur größer als eins aufweisen, werden als überkritisch bezeichnet. Sie können, wie im nächsten Abschnitt ausführlich erläutert, mangels einer definierten Phasengrenze weder eindeutig der flüssigen noch der gasförmigen Phase zugeordnet werden. [179] Wird ein einphasiges System betrachtet, so können sowohl der Druck als auch die Temperatur im Rahmen der diese Phase umschließenden Grenzen unabhängig voneinander variiert werden. Dies entspricht dem zuvor anhand von Gleichung 3.1 bestimmten Freiheitsgrad von zwei. Wird hingegen ein heterogenes System bestehend aus zwei unterschiedlichen Phasen betrachtet, so herrscht zwischen den beiden Phasen nur dann ein thermodynamisches Gleichgewicht, wenn der Zustand des Systems auf der die Phasen trennenden Kurve liegt. Da diese Grenzkurve eine Relation zwischen Druck und Temperatur bildet, kann nur eine der beiden intensiven Zustandsgrößen frei gewählt werden, was in einem Freiheitsgrad von eins resultiert. Wird ein Zustand eingestellt, welcher sich nicht mehr auf der Grenzkurve befindet, ist eine Koexistenz der beiden Phasen nicht länger möglich. Es kommt dann zu einem Phasenübergang hin zu der Phase, in welcher der aktuelle Zustand des Systems liegt.

3.1 Thermodynamische Zustandsbereiche und ihre Charakteristika

Um den thermodynamischen Zustand eines einphasigen Systems zu definieren, wird neben zweier intensiver Zustandsgrößen zudem eine extensive Größe benötigt. Diese häufig durch die Masse m oder das Volumen V repräsentierte Variable dient dabei lediglich zur Beschreibung der räumlichen Größe des Systems. Wird das Systemvolumen durch seine Masse dividiert, ergibt sich eine weitere intensive Zustandsgröße, das spezifische Volumen v . Der Kehrwert des spezifischen Volumens wird als Dichte ρ bezeichnet. Da der intensive Zustand eines einphasigen Systems durch zwei unabhängige intensive Zustandsgrößen definiert ist, muss zwischen dem Druck, der Temperatur und dem spezifischen Volumen ein mathematischer Zusammenhang bestehen:

$$T = \mathcal{F}(v, p) \quad (3.2)$$

Gleichung 3.2 definiert die Temperatur in Abhängigkeit des Druckes und des spezifischen Volumens und wird daher auch als thermische Zustandsgleichung bezeichnet. Die in ihr enthaltenen Variablen werden daher auch thermische Zustandsgrößen genannt. In Abbildung 3 ist dieser Zusammenhang in Form eines p - v -Diagrammes dargestellt. Die Temperatur wird durch drei ausgewählte Isothermen visualisiert. Dabei wird neben der kritischen Isother-

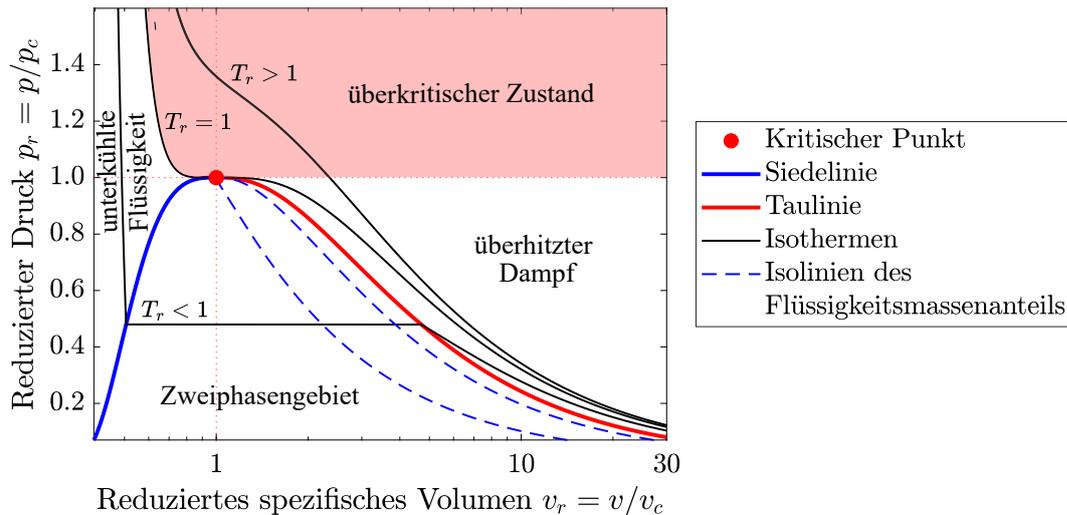


Abbildung 3: Zustandsbereiche eines Fluides in einem reduzierten p - v -Diagramm

me ($T_r = 1$) jeweils der Verlauf einer unter- und einer überkritischen Isotherme dargestellt. Die Abgrenzung der flüssigen von der gasförmigen Phase nimmt nun nicht die Form einer Linie, sondern die einer Fläche an, welche auch als Zweiphasengebiet bezeichnet wird. Innerhalb des Zweiphasengebietes besteht unter der Annahme eines thermodynamischen Gleichgewichtes für die Mischung aus flüssiger und gasförmiger Phase ein eindeutiger Zusammenhang zwischen Druck und Temperatur, welcher durch die Dampfdruckkurve aus Abbildung 2 bereits bekannt ist. Die Siedelinie begrenzt das Zweiphasengebiet hin zur flüssigen Phase, während die Taulinie die Grenze zur gasförmigen Phase bildet. Die flüssige Phase nahe der Siedelinie wird auch als unterkühlte Flüssigkeit bezeichnet, die gasförmige Phase im Umfeld der Taulinie als überhitzter Dampf. Bei dem Punkt, in welchem sich Siedelinie und Taulinie treffen, handelt es sich um den kritischen Punkt. Durch diesen verläuft folglich die Isotherme der reduzierten Temperatur von eins. Wird der Druck eines in gasförmigem Zustand befindlichen Systems entlang einer unterkritischen Isotherme ($T_r < 1$) angehoben, so kommt es beim Erreichen des Dampfdruckes zum Eintritt in das Zweiphasengebiet und somit zur Ausbildung einer flüssigen Phase. Die physikalischen Prozesse, welche diesen Phasenübergang kennzeichnen, werden im Detail in Kapitel 3.4 beschrieben. Es sei angemerkt, dass die Durchquerung des Zweiphasengebietes entlang der Isothermen nicht durch eine weitere Druckänderung erreicht werden kann. Da Druck und Temperatur im Zweiphasengebiet nicht unabhängig voneinander sind, muss eine weitere Größe zur Definition des Zustandes herangezogen werden. Neben dem spezifischen Volumen wird hierzu häufig der Dampfgehalt x oder sein Kehrwert der Flüssigkeitsmassenanteil y verwendet. Daher sind in Abbildung 3 ebenfalls exemplarische Isolinien des Flüssigkeitsmassenanteils dargestellt. Eine Druckerhöhung innerhalb des Systems entlang einer überkritischen Isotherme ($T_r > 1$) führt hingegen nicht zum Eintritt in das Zweiphasengebiet. Das System erreicht beim Überschreiten des kritischen Druckes einen als überkritisch bezeichneten Zustand. Neben der Beschreibung des Systems anhand thermischer Zustandsgrößen können hierzu auch kalorische Zustandsgrößen herangezogen werden. Bei diesen handelt es sich um Größen, welche die im System enthaltene Energie repräsentieren. Eine Verknüpfung einer kalorischen Größe mit zwei thermischen Zustandsgrößen wird als kalorische Zustandsgleichung bezeichnet:

$$e = \mathcal{F}(v, T) \quad (3.3)$$

Die spezifische Energie e des Systems lässt sich auf diese Weise anhand des spezifischen Volumens und der Temperatur formulieren. Ein Differenzieren von Gleichung 3.3 ergibt:

$$de = \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_v dT + \left(\frac{\partial e}{\partial v} \right)_T dv \quad (3.4)$$

Das vollständige Differential gliedert sich in zwei Terme, welche jeweils einen Differentialkoeffizienten enthalten. Unter der Annahme einer Zustandsänderung bei konstantem Volumen entfällt der zweite Term in Gleichung 3.4. Der verbleibende Differentialkoeffizient wird auch als spezifische isochore Wärmekapazität c_v bezeichnet und bildet eine weitere den Zustand des Systems charakterisierende Größe:

$$c_v = \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_v \quad (3.5)$$

Neben der spezifischen inneren Energie zählt auch die spezifische Enthalpie h zu den kalorischen Zustandsgrößen. Sie ergibt sich aus der Addition der spezifischen Energie und dem Produkt aus Druck und spezifischem Volumen:

$$h = e + pv = \mathcal{F}(p, T) \quad (3.6)$$

Auch die Enthalpie lässt sich mittels einer kalorischen Zustandsgleichung in Abhängigkeit zweier thermischer Zustandsgrößen beschreiben. Eine zu Gleichung 3.4 analoge Differentiation führt zur Definition einer weiteren Zustandsgröße, der spezifischen isobaren Wärmekapazität c_p :

$$c_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_p \quad (3.7)$$

Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik führt zur Beurteilung der Umkehrbarkeit von Zustandsänderungen den Begriff der Entropie ein. Die spezifische Entropie s ist eine Zustandsgröße, welche häufig getrennt von den klassischen thermischen und kalorischen Zustandsgrößen betrachtet wird. Wird die Entropie in Abhängigkeit zweier thermischer Zustandsgrößen formuliert, ergibt sich für diesen Zusammenhang die Bezeichnung als Entropie-Zustandsgleichung:

$$s = \mathcal{F}(p, T) \quad (3.8)$$

Um die thermodynamischen Eigenschaften eines Systems vollständig zu beschreiben, kann ein Set aus einer thermischen, einer kalorischen sowie einer Entropie-Zustandsgleichung genutzt werden. Eine Gleichung, welche die drei Arten der Zustandsgleichungen in einer einzigen Formulierung kombiniert, wird nach Gibbs als Fundamentalgleichung bezeichnet:

$$e = \mathcal{F}(s, v) \quad (3.9)$$

Zwei weitere Fundamentalgleichungen, welche im Zentrum der weiteren Betrachtungen stehen, lassen sich mittels der Anwendung einer Legendre-Transformation [10] auf Gleichung 3.9 herleiten:

$$f = \mathcal{F}(v, T) = e - Ts \quad (3.10)$$

$$g = \mathcal{F}(p, T) = h - Ts \quad (3.11)$$

Dabei bezeichnet f die spezifische Helmholtz-Energie, während g die spezifische Gibbs-Energie definiert. Das im Kontext der Definition des thermodynamischen Gleichgewichtes eingeführte chemische Potential ist im Falle eines Einkomponentensystems identisch zur molaren Gibbs-Energie. Die Klassifikation der Phasenübergänge nach Ehrenfest kann somit in vorliegendem Fall mittels der Differentiale der Gibbs-Energie formuliert werden [83]. Nach Ehrenfest [43] liegt ein Phasenübergang erster Ordnung vor, wenn es für eine der ersten partiellen Ableitungen der Gibbs-Energie an der Phasengrenze zur Ausbildung einer Diskontinuität kommt. Entsprechend Tabelle 1 können die Ableitungen erster Ordnung der Gibbs-Energie durch das spezifische Volumen sowie die Entropie ausgedrückt werden.

Tabelle 1: Ableitungen erster und zweiter Ordnung der spezifischen Gibbs-Energie

1. Ordnung	$\left(\frac{\partial g}{\partial p}\right)_T = v$	$\left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_p = -s$	
2. Ordnung	$\left(\frac{\partial^2 g}{\partial p^2}\right)_T = -v\kappa_T$	$\left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2}\right)_p = -\frac{c_p}{T}$	$\left(\frac{\partial^2 g}{\partial p \partial T}\right) = v\alpha_p$

In Abbildung 3 ist eine solche Diskontinuität des spezifischen Volumens in Form der im Zweiphasengebiet senkrecht verlaufenden unterkritischen Isothermen ($T_r < 1$) erkennbar. Die Ordnung des Phasenübergangs zwischen der gasförmigen und der flüssigen Phase entlang der Dampfdruckkurve beträgt somit eins. Ein Phasenübergang zweiter Ordnung liegt entsprechend der Klassifikation von Ehrenfest vor, wenn die Ableitungen erster Ordnung keine Diskontinuität aufweisen, die Ableitungen zweiter Ordnung jedoch schon. Ein Phasenübergang zweiter Ordnung kann somit entsprechend Tabelle 1 anhand einer Diskontinuität der spezifischen isobaren Wärmekapazität, der isothermen Kompressibilität κ_T oder dem thermischen isobaren Ausdehnungskoeffizienten α_p identifiziert werden. Nach Ansermet und Brechet [7] liegt eine solche Diskontinuität am kritischen Punkt vor. Die Beschreibung des überkritischen Zustandes in Hinblick auf die vorliegenden Phasen bedarf daher einer detaillierten Betrachtung.

Überkritischer Zustandsbereich

Im überkritischen Zustandsbereich ist eine Unterscheidung der Phasen flüssig und gasförmig mangels eines Phasenüberganges erster Ordnung nicht länger möglich. Sowohl experimentelle (vgl. [112], [136]) als auch theoretische (vgl. [46], [24]) Untersuchungen zeigen jedoch, dass flüssigkeitssähnliche und gasähnliche Zustände in diesem Bereich unterschieden werden können. Die Ansätze zur Zustandsunterscheidung in der Literatur lassen sich nach Banuti et al. [17] in mikroskopische und makroskopische Beschreibungen unterteilen. Die Methodik zur Untersuchung der Zustandsarten auf mikroskopischer Ebene beruht auf der Molekularbewegung. Wie bei der Definition des Fluidbegriffes bereits angemerkt herrschen zwischen den Molekülen einer flüssigen Phase stärkere intermolekulare Wechselwirkungen als in der Gasphase. Dies hat zur Folge, dass sich Gasmoleküle so lange auf einer geraden Trajektorie bewegen, bis es zu einem Zusammenstoß mit einem anderen Gasmolekül kommt. Die Bewegung der Moleküle in der flüssigen Phase wird hingegen durch die stärkeren intermolekularen Kräfte dominiert. Hieraus resultiert neben einer der Bewegung der Gasmoleküle ähnlichen diffusiven Bewegung ein den Festkörpern ähnliches oszillatorisches Verhalten [29]. Eine Zunahme der Temperatur oder eine Abnahme des Druckes führen

zu einer Abnahme der Relaxationszeit, welche eine Größe zur Beschreibung der Ausprägung dieser Oszillationen darstellt [24]. Strebt die Relaxationszeit gegen ihr Minimum, entfällt die oszillatorische Komponente der Molekularbewegung. Die Zustandspunkte, welche durch ein Minimum der Relaxationszeit gekennzeichnet sind, bieten eine Möglichkeit zur Definition der sogenannten Frenkel-Linie [29]. Neben dieser Formulierung finden sich auch Ansätze, welche die Punkte der Frenkel-Linie anhand einer Relation zwischen isochorer Wärmekapazität eines Atoms und der Boltzmann-Konstante k_b beschreiben [26]. Unterschiedliche Definitionen und Methoden zur Bestimmung der Definitionsgrößen ergeben jedoch nach Pipich und Schwahn [120] auch unterschiedliche Verläufe der Frenkel-Linie. Unabhängig davon ermöglicht die Frenkel-Linie aufgrund ihrer Definition für beliebig hohe Drücke und Temperaturen eine Klassifizierung von Fluidzuständen auch in großer Entfernung zum kritischen Punkt. Für die Beschreibung der überkritischen Zustände nahe des kritischen Punktes, welche für diese Arbeit besondere Relevanz besitzen, finden hingegen maßgeblich makroskopische Ansätze Anwendung. Diese untersuchen die Druck- und Temperaturabhängigkeit der Bildung molekularer Cluster anhand von Dichtefluktuationen. Die spontane Dichtefluktuation kann nach Widom [171] genutzt werden, um die Größe der Cluster anhand einer sogenannten Korrelationslänge zu beschreiben. Die lokale Dichte schwankt in Abhängigkeit der Zeit um einen gewissen Mittelwert. Die Menge der Punkte, in welchen die lokale Dichte zu einem bestimmten Zeitpunkt diesem Mittelwert entspricht, bildet die Grundlage einer geometrischen Definition der Korrelationslänge [130]. Die zweiten Ableitungen der Gibbs-Energie bilden thermodynamische Antwortfunktionen dieser Korrelationslänge. Die Verknüpfung der Antwortfunktionen mit der Unterteilung des überkritischen Zustandsbereiches in flüssigkeits- und gasähnliche Zustände kann anhand von Abbildung 4 erfolgen. Im linken Teil der Abbildung ist hierzu der reduzierte Druck über der reduzierten Temperatur für einen den kritischen Punkt umschließenden Bereich aufgetragen. Der kritische Punkt markiert das Ende der Dampfdruckkurve und somit den Bereich, für welchen eine Unterscheidung der Zustände anhand der Antwortfunktionen untersucht werden soll. Wird exemplarisch ein reduzierter Druck von $p_r = 1.2$ gewählt, lassen sich die ersten und zweiten Ableitungen der Gibbs-Energie entlang der reduzierten Temperatur bestimmen. Eine Auftra-

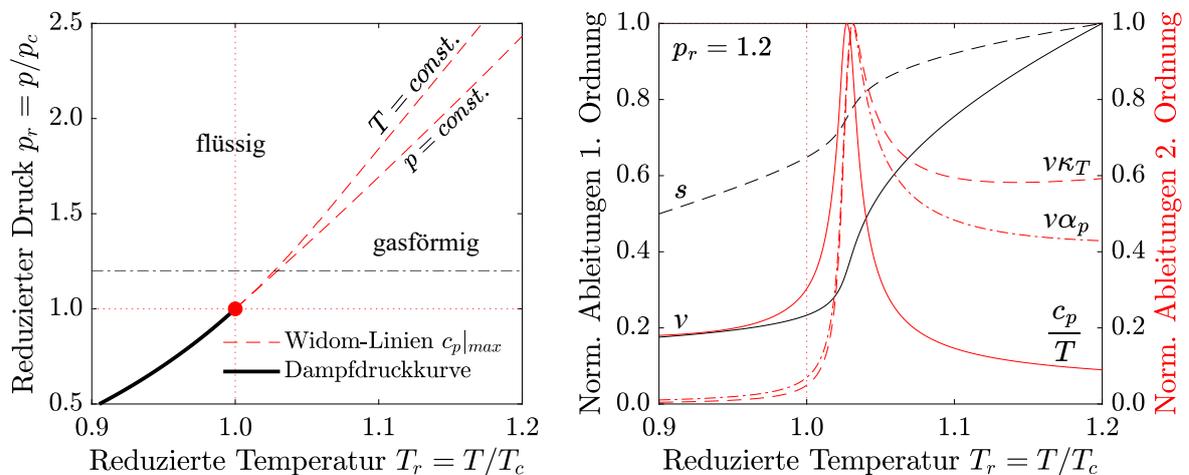


Abbildung 4: Unterteilung des überkritischen Zustandsbereiches in flüssig und gasförmig (links) sowie Verläufe der Ableitungen der Gibbs-Energie für einen reduzierten Druck von $p_r = 1.2$ (rechts)

gung der auf ihren jeweiligen im Definitionsbereich auftretenden Maximalwert bezogenen Größen über der reduzierten Temperatur kann der rechten Seite von Abbildung 4 entnommen werden. Die Verläufe der so normierten ersten Ableitungen sind in schwarz anhand der linken Ordinate dargestellt, während die Verläufe der zweiten Ableitungen in rot auf der rechten Ordinate visualisiert werden. Die Verläufe des spezifischen Volumens sowie der spezifischen Entropie zeigen im dargestellten Temperaturintervall keine Diskontinuität. Dies bestätigt das Ausbleiben eines Phasenübergangs erster Ordnung im überkritischen Zustandsbereich. Die Ableitungen zweiter Ordnung zeigen ebenfalls keine Diskontinuität, sodass auch kein Phasenübergang zweiter Ordnung angenommen werden kann. Jedoch ist für alle drei Verläufe bei einem Wert der reduzierten Temperatur von etwa $T_r = 1.03$ ein Maximum zu erkennen. Eine Bestimmung dieser Maxima für weitere Werte des reduzierten Druckes und die Auftragung der resultierenden Wertepaare in einem Druck-Temperatur-Diagramm führt zu den sogenannten Widom-Linien [176]. Im linken Teil von Abbildung 4 sind zwei Widom-Linien dargestellt. Die untere der beiden Kurven repräsentiert die Maxima der spezifischen isobaren Wärmekapazität ausgewertet für verschiedene Temperaturen bei konstantem Druck. Wertet man die Maxima der spezifischen isobaren Wärmekapazität für verschiedene Drücke bei konstanter Temperatur aus, ergibt sich ein anderer Verlauf der Widom-Linie. Wie Brazhkin et al. [25] aufzeigen, unterscheiden sich auch die Verläufe je nach gewählter Antwortfunktion. Die Abweichung zwischen den Widom-Linien nimmt dabei mit der Entfernung zum kritischen Punkt zu. Dies wird auch für die beiden dargestellten Kurven deutlich. Bis zum Schnittpunkt mit der exemplarisch gewählten Isobaren weisen die beiden Widom-Linien einen sehr ähnlichen Verlauf auf, entfernen sich jedoch mit zunehmendem Abstand vom kritischen Punkt voneinander. Auch weisen die Antwortfunktionen für beliebig hohe Drücke und Temperaturen nicht zwangsläufig entsprechende Maxima auf. Die Widom-Linien eignen sich daher nicht für eine Unterscheidung der Zustände in großer Entfernung zum kritischen Punkt, bieten im dargestellten Bereich jedoch einen hinreichenden Aussagegehalt. Für die weiteren Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit wird somit die Widom-Linie der spezifischen isobaren Wärmekapazität ausgewertet bei konstantem Druck gewählt, um das überkritische Zustandsgebiet zu unterteilen. Die flüssigkeitsähnlichen Zustände werden dabei im Sinne einer eindeutigen Benennung, wie auch in Abbildung 4 verdeutlicht, als flüssig bezeichnet, die gasähnlichen als gasförmig.

Die bisher betrachteten Zustände des Systems zeichnen sich allesamt durch das Vorliegen eines stabilen thermodynamischen Gleichgewichtes aus. Die Bezeichnung als stabil kennzeichnet einen Gleichgewichtszustand, welcher in Folge einer Störung wieder in seinen ursprünglichen Zustand zurückkehrt. Ein instabiles thermodynamisches Gleichgewicht liegt hingegen vor, wenn eine Störung des Systems zu einer dauerhaften Änderung des Zustandes führt. Für die Unterscheidung stabiler und instabiler Gleichgewichtszustände spielen zwei Einflussfaktoren eine besondere Rolle. Zum einen muss die Ausprägung der Störung als verhältnismäßig klein angenommen werden, da andernfalls alle realen Gleichgewichtszustände als instabil klassifiziert werden könnten. Zum anderen ist die Zeitskala, auf Grundlage welcher das Systemverhalten beobachtet wird, entsprechend einer für das System charakteristischen Zeitskala zu wählen. Ist ein Gleichgewichtszustand nur für sehr kleine Störungen und Zeitskalen stabil, so wird er als metastabil bezeichnet. Da metastabile Zustände insbesondere im Kontext von Phasenwechselvorgängen anzutreffen sind, ist eine detaillierte Betrachtung des metastabilen Zustandsbereichs für die weiteren Ausführungen notwendig. [147]

Metastabiler Zustandsbereich

Nach Gibbs [52] liegt ein stabiles thermodynamisches Gleichgewicht vor, wenn sich das System in einem Zustand maximaler Entropie befindet. Ein solches globales Maximum der Entropie ist äquivalent zu einem globalen Minimum der Gibbs-Energie [39]. Gleichgewichtszustände, in welchen ein lokales Minimum der Gibbs-Energie vorliegt, werden als metastabil bezeichnet. Tritt in einem solchen System eine kleine und nur sehr kurz anhaltende Störung auf, so kehrt das System in seinen ursprünglichen metastabilen Zustand zurück [11]. Ist die Ausprägung jedoch größer oder hält die Störung länger an, so geht das System in einen stabilen thermodynamischen Zustand über. Mathematisch wird das Vorliegen eines Minimums einer Funktion durch ein notwendiges sowie ein hinreichendes Kriterium definiert:

$$\begin{aligned} \delta g|_{p,T} = 0 & \quad \text{Notwendiges Kriterium} \\ \delta^2 g|_{p,T} > 0 & \quad \text{Hinreichendes Kriterium} \end{aligned} \quad (3.12)$$

Das hinreichende Kriterium kann anhand von Tabelle 1 auch wie folgt formuliert werden:

$$\delta^2 g|_{p,T} = \left(\frac{\partial^2 g}{\partial p^2} \right)_T = -v\kappa_T = \left(\frac{\partial v}{\partial p} \right)_T = - \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_T > 0 \quad \Leftrightarrow \quad \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_T < 0 \quad (3.13)$$

Ein stabiler oder metastabiler Gleichgewichtszustand einer Phase liegt somit vor, wenn der Druck mit zunehmendem spezifischen Volumen entlang einer Isotherme abnimmt. Eine grafische Interpretation dieser Definition kann anhand von Abbildung 5 erfolgen. Das hinreichende Kriterium aus Gleichung 3.13 wird für alle flüssigen und gasförmigen Zustandspunkte entlang der dargestellten Isotherme erfüllt. Jenseits des Zweiphasengebietes finden sich somit ausschließlich stabile Zustände. Es sei angemerkt, dass die Isotherme zur Verdeutlichung der Gültigkeit des Stabilitätskriteriums für metastabile Zustände jenseits der Siede- bzw. Taulinie in das Zweiphasengebiet extrapoliert wird. Die schwarz gestrichelten

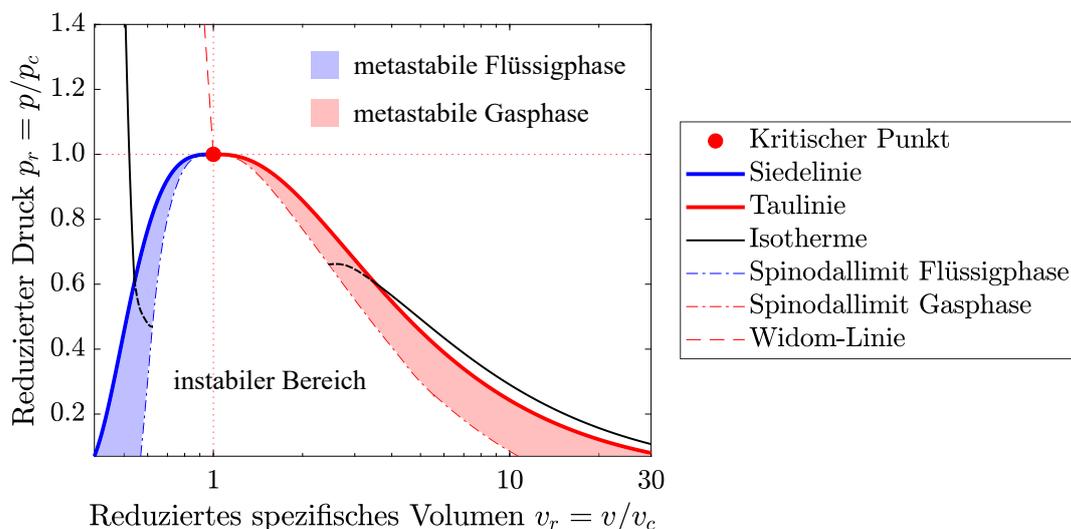


Abbildung 5: Unterscheidung meta- und instabiler Zustände in einem reduzierten p - v -Diagramm

Linien können somit physikalisch als spontane Zustandsänderungen auf einer sehr kurzen Zeitskala interpretiert werden. Dies entspricht der Definition des metastabilen Zustandes nach Skripov [137], welche ein Kreuzen der Dampfdruckkurve ohne das Einsetzen eines Phasenwechsels voraussetzt. Sobald das partielle Differential aus Gleichung 3.13 einen Wert von null annimmt, liegt ein instabiler Zustand vor, welcher aufgrund des Bestrebens eines jeden Systems, einen stabilen Gleichgewichtszustand anzunehmen, ausschließlich theoretischer Natur ist. Das hieraus resultierende Kriterium zur Unterscheidung metastabiler und instabiler Zustände kann auch anhand der isothermen Kompressibilität formuliert werden:

$$\delta^2 g|_{p,T} = \left(\frac{\partial^2 g}{\partial p^2} \right)_T = -v\kappa_T = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \kappa_T = 0 \quad (3.14)$$

Die Linie, welche alle Zustandspunkte, die dieses Kriterium erfüllen, verbindet, wird als Spinodale oder Spinodallimit bezeichnet. Dabei existiert je ein solches Limit für die flüssige und die gasförmige Phase. Der Zustandsbereich der metastabilen Flüssigphase kann in Abbildung 5 als blaue Fläche zwischen der Siedelinie und dem Spinodallimit der Flüssigphase identifiziert werden. Analog findet sich die metastabile Gasphase in rot zwischen der Taulinie und dem Spinodallimit der Gasphase. Der Bereich innerhalb des Zweiphasengebietes, welcher jenseits der Grenzen der metastabilen Zustandsbereiche liegt, wird als instabiler Bereich bezeichnet [33]. In diesem ist ein getrenntes Vorliegen einer der beiden Phasen selbst kurzzeitig ausgeschlossen. Es ist zu beobachten, dass sich die Grenzen der metastabilen Zustandsbereiche mit zunehmendem Druck den Grenzen des Zweiphasengebietes annähern. Im kritischen Punkt treffen die Spinodallimite der Flüssig- und Gasphase mit der Siede- und Taulinie zusammen. Im direkten Umfeld des kritischen Punktes strebt die Ausdehnung der metastabilen Zustandsbereiche somit gegen null. Im überkritischen Zustandsbereich kann entsprechend der zuvor getätigten Definition der Widom-Linie eine Unterscheidung der Fluidzustände in flüssig und gasförmig erfolgen. Das Vorliegen eines Spinodallimits entsprechend Gleichung 3.14 jenseits des kritischen Punktes ist jedoch weder dem rechten Teil von Abbildung 4 noch der Literatur (vgl. [24]) zu entnehmen. Auch findet sich anhand des streng monoton fallenden Verlaufes der überkritischen Isotherme in Abbildung 3 keine Indikation für eine Verletzung des Kriteriums aus Gleichung 3.12, sodass der überkritische Zustandsbereich als thermodynamisch stabil angenommen werden kann.

Alle bisher in diesem Unterkapitel eingeführten Zustandsgrößen lassen sich unter Berücksichtigung der jeweils vorliegenden Phasen im gesamten Zustandsbereich der Fluide eindeutig definieren. Dies trifft für die Zustandsgröße der Schallgeschwindigkeit nicht zu, sodass ihre Definition einer ausführlichen Beschreibung bedarf.

Definition der Schallgeschwindigkeit

Die Schallgeschwindigkeit a bezeichnet die Ausbreitungsgeschwindigkeit einer Schallwelle in einem Medium. Nach Baehr und Kabelac [11] handelt es sich bei einer Schallwelle um eine periodische longitudinale Druck- und Dichteschwankung kleiner Amplitude. Ähnlich wie bei der Betrachtung metastabiler Zustände, steht die Schallgeschwindigkeit somit im Kontext einer im System auftretenden Störung. Dabei wird angenommen, dass diese Störung durch zwei Eigenschaften gekennzeichnet ist. Zum einen ist die Größe der Druckschwankung sehr viel kleiner als der Wert des Gleichgewichtsdruckes des Systems, sodass die Störung eine hinreichend kleine Amplitude aufweist. Zum anderen soll die durch die Schwankung hervor-

gerufene kurzzeitige Zustandsänderung reversibel sein. Eine so charakterisierte Welle breitet sich im Fluid durch die Kollision in Bewegung befindlicher Moleküle aus. Intermolekulare Wechselwirkungen zwischen den Molekülen haben in der Folge einen starken Einfluss auf die Schallgeschwindigkeit [50]. Aufgrund der postulierten Reversibilität kann die Ausbreitung der Störung im Fluid als isentroper Vorgang modelliert werden. Der thermodynamische Zustand des Systems sowie die Schallwelle selbst werden unter dieser Annahme durch die Ausbreitung nicht beeinflusst. Die Geschwindigkeit der Ausbreitung einer so modellierten Schallwelle definiert die isentrope Schallgeschwindigkeit:

$$a = \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s} \quad (3.15)$$

Anhand dieser Formulierung in Abhängigkeit zweier unabhängiger intensiver Größen wird die Zugehörigkeit der Schallgeschwindigkeit zu den thermodynamischen Zustandsgrößen direkt ersichtlich. Auch ist eine Auswertung des Ausdruckes in Gleichung 3.15 zunächst für beliebige Fluidzustände denkbar. Kommt es jedoch zur Ausbildung einer zweiten Phase, wie es für Zustände innerhalb des Zweiphasengebietes möglich ist, reicht die obige Modellierung der Wellenausbreitung aufgrund der nun vorliegenden Heterogenität des Systems nicht zwangsläufig aus. Da die Ausbreitung der Schallwelle in einem solchen System nach Radovskii [123] zusätzlich durch die Interaktion der Phasen beeinflusst wird, ist eine Berücksichtigung dieser bei der Modellbildung angeraten. Er spezifiziert die Interaktion als gleichzeitiges Auftreten von Vorgängen des Phasenwechsels, der Wärmeübertragung sowie des Impulsaustausches zwischen den Phasen. Petr [116] beschreibt diese durch die Ausbreitung der Schallwelle induzierten Vorgänge als irreversibel. Die akustische Welle verursacht somit in Abhängigkeit ihrer Frequenz verschieden starke Störungen des thermischen und mechanischen Gleichgewichtes innerhalb des Systems. Nach Bakhtar et al. [13] kann es auch durch die wechselseitige Interaktion von Schallwelle und Zweiphasenmischung zu einer Beeinflussung der Stabilität des thermodynamischen Gleichgewichtes kommen. Die Bestimmung der Schallgeschwindigkeit für Zustände innerhalb des Zweiphasengebietes steht somit in direkter Abhängigkeit zu den auftretenden Phasenwechselvorgängen. Eine detaillierte Analyse erfolgt daher im Kontext der numerischen Anwendung.

3.2 Mathematische Beschreibung der Zustandsgrößen

Bisher wurde die Beschreibung der thermodynamischen Zustandsgrößen lediglich anhand symbolischer Zusammenhänge vorgenommen. Um den Zustand eines Fluides jedoch im Rahmen numerischer Untersuchungen berechnen zu können, ist die Einführung konkreter Modellierungen notwendig. Die Herleitung einer Definition kompressibler nicht-idealer Fluide soll dabei in Form einer sukzessiven Abgrenzung erfolgen.

Ein Fluid wird als inkompressibel bezeichnet, wenn sein spezifisches Volumen unter Einwirkung einer äußeren Kraft oder eines Druckes nahezu konstant bleibt.

$$v = \text{const.} \quad (3.16)$$

Eine Druck- oder Temperaturabhängigkeit des spezifischen Volumens sowie der Dichte liegen folglich nicht vor. Auch nimmt die isotherme Kompressibilität eines auf diese Weise modellierten Fluides den Wert null an. Das Modell des inkompressiblen Fluids stellt eine

starke Idealisierung dar, welche maßgeblich Anwendung auf Flüssigkeiten findet. Als kompressibel wird ein Fluid folglich bezeichnet, wenn es durch das Modell des inkompressiblen Fluids nicht geeignet beschrieben werden kann. Das spezifische Volumen kompressibler Fluide muss in Abhängigkeit von Druck und Temperatur bestimmt werden. [142]

Modell des perfekten Gases

Eine andere starke Vereinfachung realer Fluide stellt das Modell perfekter Gase dar. Dieses kann, entsprechend seiner Benennung, Anwendung auf gasförmige Fluide finden, deren Zustand sich durch einen sehr geringen statischen Druck auszeichnet. Die thermische Zustandsgleichung perfekter Gase wird auch als Gesetz idealer Gase bezeichnet:

$$pv = R_s T \quad \text{mit} \quad R_s = \frac{R}{M} \quad (3.17)$$

Dabei definiert der Quotient aus allgemeiner Gaskonstante R und molarer Masse M die spezifische Gaskonstante R_s . Das Gesetz idealer Gase stellt eine Kombination der Gesetze von Boyle-Mariotte, Charles und Avogadro dar, wobei die beiden erstgenannten lediglich für $p \rightarrow 0$ Gültigkeit besitzen. Das Gesetz nach Boyle-Mariotte basiert auf drei Annahmen der kinetischen Gastheorie, welche folglich auch herangezogen werden können, um das Modell perfekter Gase auf molekularer Ebene zu spezifizieren. Demnach besteht das Gas aus Molekülen, welche sich in zufällige Richtungen im Raum bewegen. Zudem kann die Größe der Moleküle aufgrund ihrer relativen räumlichen Distanz zueinander vernachlässigt werden. Letztlich beschränkt sich die Interaktion der Moleküle untereinander auf elastische Stöße, was mit einer Negation intermolekularer Wechselwirkungen gleichzusetzen ist. [9]

Die kalorische Zustandsgleichung perfekter Gase kann anhand von Gleichung 3.4 hergeleitet werden. Wie Gay-Lussac und auch Joule experimentell nachweisen, zeigt die spezifische innere Energie perfekter Gase bei konstanter Temperatur keine Abhängigkeit vom spezifischen Volumen. Entsprechend kann der zweite Differentialkoeffizient zu null gesetzt werden und es ergibt sich:

$$de = c_v dT \quad (3.18)$$

Anhand einer Kombination dieser Gleichung mit einer Umformulierung der Fundamentalgleichung nach Gibbs aus Gleichung 3.9 lässt sich die Änderung der Entropie eines perfekten Gases wie folgt schreiben:

$$ds = \frac{1}{T} de + \frac{p}{T} dv = c_v \frac{dT}{T} + R_s \frac{dv}{v} \quad (3.19)$$

Die Zustandsgleichungen des perfekten Gases können somit anhand einer spezifischen Wärmekapazität sowie der spezifischen Gaskonstante vollständig definiert werden. Aus der Definition der Enthalpie in Gleichung 3.6 lässt sich zudem ein weiterer für ein perfektes Gas charakteristischer Zusammenhang ableiten:

$$c_p = R_s + c_v \quad (3.20)$$

Die Definition der spezifischen Wärmekapazitäten führt zu einer Unterteilung des Modells perfekter Gase in zwei Gruppen. Als kalorisch perfekt wird ein Gas bezeichnet, dessen spezifische Wärmekapazitäten für beliebige Temperaturen einen konstanten Wert annehmen. Die

einatomigen Edelgase können anhand dieser Modellannahme hinreichend genau beschrieben werden. Weisen die spezifischen Wärmekapazitäten jedoch eine Temperaturabhängigkeit auf, wird das so modellierte Gas als thermisch perfekt bezeichnet. Es sei angemerkt, dass sich diese Unterscheidung nicht auf die Gültigkeit des Gesetzes idealer Gase auswirkt. Die Herleitung eines Ausdruckes für die Schallgeschwindigkeit perfekter Gase nutzt die Formulierung der Fundamentalgleichung nach Gibbs aus Gleichung 3.19, wobei anstatt der spezifischen inneren Energie die spezifische Enthalpie als kalorische Definitionsgröße verwendet wird. Ein Einsetzen von Gleichung 3.17 und Gleichung 3.20 in diese unter der für die Schallgeschwindigkeit gültigen isentropen Annahme ergibt:

$$0 = c_v \frac{dp}{p} + c_p \frac{dv}{v} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{dp}{p} = -\frac{c_p}{c_v} \frac{dv}{v} = -\kappa \frac{dv}{v} \quad (3.21)$$

Dabei wird das Verhältnis aus spezifischer isobarer und isochorer Wärmekapazität als Isentropenexponent des perfekten Gases κ bezeichnet. Eine Umformulierung der Definition der Schallgeschwindigkeit aus Gleichung 3.15 in Bezug auf das spezifische Volumen führt in Kombination mit Gleichung 3.21 zu einem Ausdruck für die isentrope Schallgeschwindigkeit perfekter Gase:

$$a = \sqrt{-v^2 \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_s} = \sqrt{\kappa p v} = \sqrt{\kappa R_s T} \quad (3.22)$$

Anhand dieser Formulierung wird ersichtlich, dass für die Bestimmung der Schallgeschwindigkeit eines perfekten Gases die Kenntnis der statischen Temperatur ausreicht. Sind die Zustandsgrößen eines Fluides allesamt bekannt, so kann anhand einer Umformung von Gleichung 3.17 die Abweichung vom Modell perfekter Gase quantifiziert werden:

$$Z = \frac{pv}{R_s T} \quad (3.23)$$

Ein Realgasfaktor Z von eins indiziert somit eine vollständige Übereinstimmung mit den Modellannahmen des perfekten Gases. Die meisten Fluide zeigen jedoch zumindest in Teilen ihres Zustandsgebietes eine Abweichung des Realgasfaktors von eins. Aus diesem Grund entwickelte van der Waals [162] die erste thermische Zustandsgleichung, welche zum einen eine solche Abweichung vom Modell des perfekten Gases erlaubt und zum anderen sowohl flüssige als auch gasförmige Zustände beschreiben kann.

Kubische Zustandsgleichungen

Die Zustandsgleichung nach van der Waals ist der bekannteste Vertreter der sogenannten kubischen Zustandsgleichungen. Der Name dieser Gruppe von Modellgleichungen basiert auf ihrer Eigenschaft, dass eine Umformung hin zum spezifischen Volumen jeweils eine Funktion dritten Grades ergibt. Die Berücksichtigung der Abweichung vom Modell perfekter Gase erfolgt in Form von Korrekturfaktoren:

$$\left(p + \frac{a}{v^2} \right) (v - b) = RT \quad (3.24)$$

Die Koeffizienten a und b werden als van-der-Waals-Koeffizienten bezeichnet. Ein Vergleich der Struktur von Gleichung 3.24 und Gleichung 3.17 ermöglicht eine physikalische Interpretation der Korrekturfaktoren. Der Term a/v^2 repräsentiert die Berücksichtigung intermolekularer Kräfte und wird auch als Kohäsionsdruck bezeichnet. Der Koeffizient b stellt eine Korrektur für das Eigenvolumen der Moleküle dar und trägt daher auch die Bezeichnung als Kovolumen. Andere Vertreter der kubischen Zustandsgleichungen, wie exemplarisch die Ansätze nach Peng-Robinson oder Soave-Redlich-Kwong, führen als zusätzlichen Korrekturfaktor den azentrischen Faktor ein, welcher eine Abweichung der Molekülstruktur von der Form einer Kugel berücksichtigt. Eine exemplarische van-der-Waals-Isotherme ist in Abbildung 6 im Vergleich zu der das Gesetz idealer Gase charakterisierenden Hyperbel dargestellt. Anders als die Isotherme des perfekten Gases durchläuft die van-der-Waals-Isotherme das Zweiphasengebiet. Eine Unterscheidung von flüssigen und gasförmigen Zuständen bedarf daher einer Definition der Siede- und Taulinie. Dies kann anhand eines nach Maxwell benannten Kriteriums erfolgen:

$$g_{s,l} = g_{s,g} \quad \Leftrightarrow \quad p_s(v_{s,g} - v_{s,l}) = f_{s,l} - f_{s,g} = \int_{v_{s,l}}^{v_{s,g}} p \, dv \quad (3.25)$$

Für ein Einkomponentensystem in thermodynamischem Gleichgewicht herrscht entlang der Dampfdruckkurve, wie zuvor bereits eingeführt, eine Gleichheit der Gibbs-Energien der flüssigen und der gasförmigen Phase. Zustände entlang der Dampfdruckkurve werden auch als Sättigungszustände bezeichnet und im Folgenden durch ein s in Kombination mit der Phase indiziert. Größen der flüssigen Phase tragen den Index l , während die Gasphase durch den Index g gekennzeichnet wird. Entsprechend des Ausdrucks in Gleichung 3.25 lässt sich der Sättigungsdampfdruck iterativ mittels einer geometrischen Konstruktion bestimmen. Die Fläche unterhalb der isobaren Verbindungslinie zwischen dem spezifischen Volumen der gesättigten Flüssigkeit und dem der gesättigten Gasphase muss in diesem Volumenintervall gleich der Fläche unterhalb der van-der-Waals-Isothermen sein [132]. Dies ist äquivalent zu einer Gleichheit der in Abbildung 6 grau eingefärbten Flächen. Die einzige Isobare, wel-

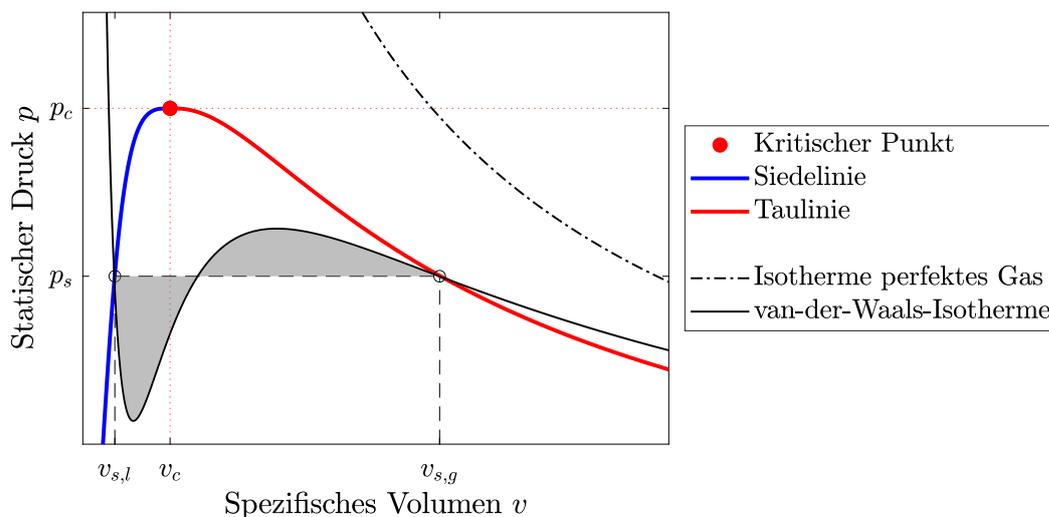


Abbildung 6: Gegenüberstellung des Modells perfekter Gase sowie der Zustandsgleichung nach van der Waals anhand von Isothermen im p - v -Diagramm

che diese Bedingung erfüllt, ist die des Sättigungsdampfdruckes, sodass dieser durch das Maxwell-Kriterium eindeutig definiert wird. Das Maxwell-Kriterium ist ein allgemein notwendiges Kriterium für die Formulierung thermischer Zustandsgleichungen, welche im gesamten Zustandsgebiet eines Fluides Gültigkeit besitzen sollen [11]. Dies erlangt insbesondere im Kontext von Mehrparameter-Zustandsgleichungen eine hohe Relevanz.

Mehrparameter-Zustandsgleichungen

Während das Gesetz idealer Gase sowie die kubischen Zustandsgleichungen physikalische Modellansätze zur Beschreibung der thermischen Zustandsgrößen des Fluides darstellen, handelt es sich bei den Mehrparameter-Zustandsgleichungen um Fundamentalgleichungen, welche auf Grundlage experimenteller Daten approximiert werden. Die erste derartige Fundamentalgleichung, welche für das gesamte Zustandsgebiet eines Fluides definiert ist, formuliert Pollak [121] für das Medium Wasser:

$$\Phi = \frac{f}{R_s T} \quad (3.26)$$

Er führt hierzu den dimensionslosen Parameter Φ ein, welcher als dimensionslose Helmholtz-Energie bezeichnet wird. Eine Aufteilung dieses Parameters in zwei Terme ergibt:

$$\Phi(\delta, \tau) = \Phi^0(\delta, \tau) + \Phi^r(\delta, \tau) \quad \text{mit} \quad \delta = \frac{v_c}{v} = \frac{\rho}{\rho_c} \quad \wedge \quad \tau = \frac{T_c}{T} \quad (3.27)$$

Dabei beschreibt Φ^0 den sogenannten Idealteil, während Φ^r den Realteil der dimensionslosen Helmholtz-Energie darstellt. Entsprechend der Definition der Helmholtz-Energie in Gleichung 3.10 wird diese anhand des spezifischen Volumens sowie der Temperatur formuliert. In Gleichung 3.27 finden sich daher die dimensionslose Dichte δ und die dimensionslose Temperatur τ als unabhängige Variablen. Eine Bestimmung jeglicher Zustandsgrößen des Fluides kann in Form von Ausdrücken in Abhängigkeit der dimensionslosen Helmholtz-Energie und ihrer Ableitungen erfolgen. So lässt sich exemplarisch für die Enthalpie schreiben:

$$h(\delta, \tau) = R_s T (1 + \tau(\Phi_\tau^0 + \Phi_\tau^r) + \delta \Phi_\delta^r) \quad (3.28)$$

Die Verwendung von τ als Index bezeichnet die partielle Ableitung nach der dimensionslosen Temperatur, während die partielle Ableitung nach der dimensionslosen Dichte durch δ indiziert wird. Das Maxwell-Kriterium aus Gleichung 3.25 zur Definition der Sättigungsgrößen kann auch anhand der dimensionslosen Helmholtz-Energie ausgedrückt werden und ist bei der Spezifizierung der Fundamentalgleichung einzuhalten:

$$\frac{p_s}{R_s T} \left(\frac{1}{\rho_{s,g}} - \frac{1}{\rho_{s,l}} \right) - \ln \left(\frac{\rho_{s,l}}{\rho_{s,g}} \right) = \Phi^r(\delta_{s,l}, \tau) - \Phi^r(\delta_{s,g}, \tau) \quad (3.29)$$

Um diese Gleichung oder auch Gleichung 3.28 auswerten zu können, werden explizite Ausdrücke für den Ideal- und den Realteil der dimensionslosen Helmholtz-Energie benötigt. Der Idealteil kann anhand der Werte der spezifischen Enthalpie und der spezifischen Entropie in einem als Referenz definierten Zustand sowie der Temperaturabhängigkeit der spezifischen isochoren Wärmekapazität als Funktion von dimensionsloser Temperatur und Dich-

te beschrieben werden. Dabei müssen die hierfür benötigten Daten experimentell erhoben werden. Auch die Formulierung des Realteils basiert auf Messungen thermodynamischer Zustandsgrößen. Jedoch ist die benötigte Datenmenge deutlich größer als im Fall des Idealteils, da nun nicht nur die spezifische isochore Wärmekapazität Berücksichtigung finden muss, sondern nahezu alle Zustandsgrößen des Fluides. Bei der aus dieser Approximation der Messwerte bestimmten Funktion für den Realteil der Fundamentalgleichung handelt es sich in der Folge um ein Polynom höheren Grades. Die Einbeziehung von Messdaten entlang der Dampfdruckkurve sowie im direkten Umfeld des kritischen Punktes hat einen erheblichen Einfluss auf die Genauigkeit des Modells. Neben solchen Helmholtz-basierten Zustandsgleichungen ist auch eine Formulierung von Zustandsgleichungen auf Grundlage der Gibbs-Energie möglich. Eine derartige Zustandsgleichung nutzt entsprechend der Definition in Gleichung 3.11 als unabhängige Variablen den Druck und die Temperatur. Die Vorgehensweise zur Bestimmung des funktionalen Zusammenhanges stimmt mit der für Helmholtz-basierte Ansätze beschriebenen überein. Jedoch ist eine Gibbs-basierte Zustandsgleichung nicht in der Lage das gesamte Zustandsgebiet von Fluiden abzudecken, da Druck und Temperatur entlang der Dampfdruckkurve nicht unabhängig voneinander sind. Gibbs-basierte Ansätze finden sich somit im Kontext von Fluiden nur in Kombination mit Helmholtz-basierten Zustandsgleichungen, wobei das Zustandsgebiet in einzelne Bereiche aufgeteilt wird. [10]

Anhand der in diesem Unterkapitel vorgestellten Modellarten von Zustandsgleichungen wird ersichtlich, dass die Komplexität der Beschreibung thermodynamischer Zustandsgrößen modellabhängig ist. Mit einer zunehmenden Anzahl an Parametern, welche zur Charakterisierung des Fluides herangezogen werden, geht eine erhöhte Genauigkeit der Beschreibung des realen Zustandes einher. Während das Gesetz idealer Gase lediglich die molare Masse des Fluides berücksichtigt, nutzen kubische Zustandsgleichungen bereits mindestens zwei fluidspezifische Größen in Form von Korrekturfaktoren. Mehrparameter-Zustandsgleichungen basieren auf der Approximation experimenteller Datensätze und erreichen in der Folge den höchsten Grad an Genauigkeit. Die aus ihrer Auswertung resultierenden Zustandsgrößen weisen dementsprechend eine sehr hohe Übereinstimmung mit den realen thermodynamischen Größen auf. Im Vergleich zu den beiden anderen physikalischen Modellen ist ihre Formulierung jedoch komplex. Werden Fluide untersucht, deren thermische Zustandsgrößen sich in guter Näherung mittels des Gesetzes idealer Gase beschreiben lassen, erscheint es nicht sinnvoll Zustandsgleichungen höherer Komplexität anzuwenden. Zeigen die mittels des Gesetzes idealer Gase berechneten Zustandsgrößen jedoch erhebliche Abweichungen von den experimentell erhobenen Größen, so werden die Fluide in dem betrachteten Zustandsbereich als nicht-ideal bezeichnet. Eine Modellierung der thermischen Zustandsgrößen, welche diese Nicht-Idealität des Fluides berücksichtigt, ist dann notwendig. Dabei bestimmt das Ausmaß der Abweichung das zu wählende Komplexitätslevel der Zustandsgleichung.

3.3 Parameter zur Klassifizierung eines Fluides als nicht-ideal

Um die Quantifizierung einer solchen Abweichung vornehmen zu können und ein kompressibles Fluid in der Folge als nicht-ideal klassifizieren zu können, ist die Wahl geeigneter Parameter entscheidend. Dabei erscheint es sinnvoll, neben den thermodynamischen Eigenschaften des Fluides auch die molekulare Struktur als Kriterium in die Parameterwahl miteinzubeziehen. Auf diese Weise ist zusätzlich zu der von den Zustandsgrößen abhängigen Bewertung auch eine Einordnung anhand von Stoffeigenschaften möglich.

Realgasfaktor

Der Realgasfaktor, welcher bereits in Gleichung 3.23 definiert wird, stellt die einfachste Möglichkeit dar, eine Abweichung vom Gesetz idealer Gase zu quantifizieren. Hierzu werden die Terme der linken und rechten Seite der thermischen Zustandsgleichung perfekter Gase dividiert. Der so definierte Faktor nimmt für ein perfektes Gas folglich den Wert eins an. Wird der Realgasfaktor für einen beliebigen Zustand eines Fluides bestimmt, so kann er Werte sowohl größer als auch kleiner als eins annehmen. Um dies zu veranschaulichen ist in Abbildung 7 der Realgasfaktor für unterschiedliche reduzierte Temperaturen über dem reduzierten Druck aufgetragen. Im Allgemeinen weisen Gase bei niedrigen Drücken einen Zustandsbereich auf, in welchem ein Realgasfaktor von ungefähr eins vorliegt. Die Wechselwirkungen zwischen den Gasmoleküle sind aufgrund der großen relativen Molekülabstände hier nur sehr gering ausgeprägt. Für sehr hohe Drücke lassen sich hingegen Realgasfaktoren größer als eins nachweisen, was auf das Vorliegen eines größeren spezifischen Volumens als im Falle eines als perfekt modellierten Gases schließen lässt. Dies beruht auf einer Dominanz der abstoßenden intermolekularen Kräfte im Bereich hoher Drücke, welche auf die Abnahme der relativen Molekülabstände mit zunehmendem Druck zurückzuführen ist. Im Übergangsbereich zwischen niedrigen und hohen Drücken zeigt der Realgasfaktor ein stark temperatur- und fluidabhängiges Verhalten. Während manche Fluide auch hier für beliebige Temperaturen Realgasfaktoren größer als eins aufweisen, finden sich für die meisten Fluide bei gewissen Temperaturen Realgasfaktoren kleiner als eins. Für letztgenannte Gruppe kommt es in einem definierten Zustandsbereich zu einer Dominanz anziehender intermolekularer Kräfte. [9]

Um den Einfluss der Temperatur auf den Realgasfaktor zu analysieren, ist eine Unterteilung anhand der kritischen Isotherme, wie sie in Abbildung 7 vorgenommen wird, sinnvoll. Wie dem linken Teil dieser Abbildung entnommen werden kann, steigt der Realgasfaktor im überkritischen Fall ($T_r > 1$) bei konstantem Druck mit der Temperatur an. Die Ausbildung eines Übergangsbereiches mit Realgasfaktoren kleiner als eins ist zudem nur bis zu einer ge-

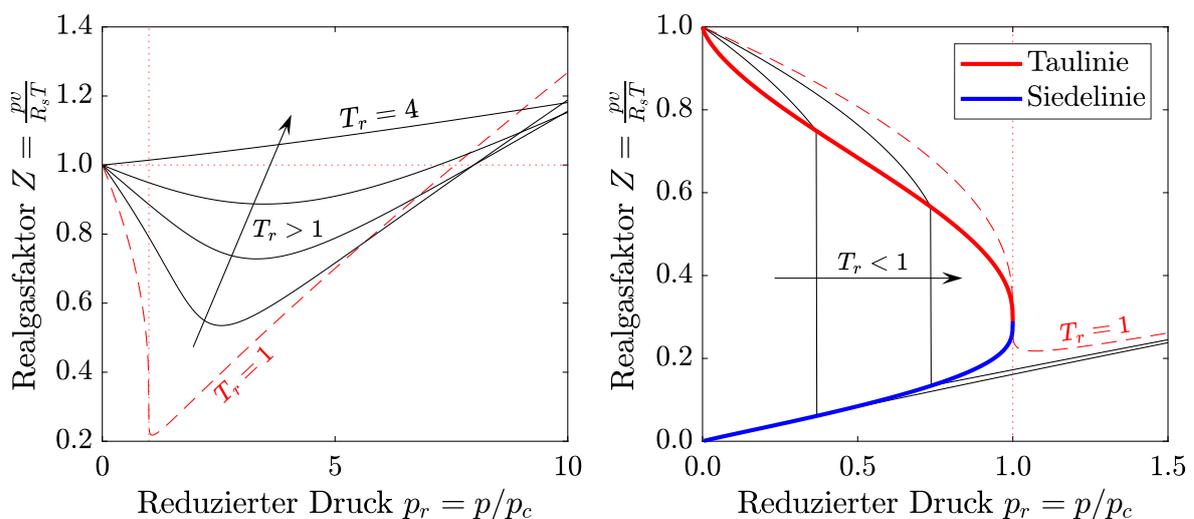


Abbildung 7: Auftragung des Realgasfaktors über dem reduzierten Druck für überkritische (links) und unterkritische (rechts) Isothermen

wissen Temperatur zu beobachten, welche als Boyle-Temperatur bezeichnet wird. Oberhalb dieser Temperatur weist der Verlauf des Realgasfaktors entlang des Druckes ausschließlich Werte größer als eins auf, wie es auch für die oberste Isotherme exemplarisch der Fall ist. Der Verlauf der kritischen Isotherme ($T_r = 1$) ist durch große Gradienten des Realgasfaktors gekennzeichnet und stellt die Grenze zu den unterkritischen Isothermen ($T_r < 1$) im rechten Teil von Abbildung 7 dar. Anders als die überkritischen Isothermen weisen diese eine Diskontinuität auf, welche einem Paar aus Druck und Temperatur zwei unterschiedliche Realgasfaktoren zuweist und das Zweiphasengebiet repräsentiert. Anhand der Unstetigkeiten der Isothermen lassen sich somit äquivalente Verläufe der Tau- und Siedelinie definieren. Die Differenz der Realgasfaktoren auf den Grenzen des Zweiphasengebietes nimmt mit steigender unterkritischer Temperatur ab und erreicht im kritischen Punkt einen Wert von null. Im Bereich überkritischer Drücke streben die unterkritischen Isothermen gegen den gleichen Wert wie die kritische Isotherme. Anhand von Abbildung 7 wird ersichtlich, dass die kleinsten Realgasfaktoren gasförmiger Fluidzustände im direkten Umfeld der Taulinie sowie nahe des kritischen Punktes zu finden sind. Diese Bereiche besitzen somit für die Untersuchung kompressibler nicht-idealer Fluide eine besondere Relevanz.

Isentroper Druck-Volumen-Exponent

Ein weiterer Parameter, welcher zur Klassifizierung eines kompressiblen Fluides als nicht-ideal genutzt werden kann, ist der isentrope Druck-Volumen-Exponent κ_{pv} . Dieser stellt nach Kouremenos und Kakatsios [87] einen zum Isentropenexponenten des perfekten Gases äquivalenten Ausdruck dar. Wird die Entropie in Abhängigkeit des Druckes und des spezifischen Volumens ausgedrückt, lässt sich ein vollständiges Differential formulieren:

$$ds = \left(\frac{\partial s}{\partial p} \right)_v dp + \left(\frac{\partial s}{\partial v} \right)_p dv \quad (3.30)$$

Die isentrope Änderung des Druckes über dem spezifischen Volumen kann entsprechend dieser Gleichung unter Anwendung der Maxwell-Relationen [98] hergeleitet werden:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_s = - \frac{\left(\frac{\partial s}{\partial v} \right)_p}{\left(\frac{\partial s}{\partial p} \right)_v} = \frac{\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_s}{\left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_s} = - \frac{c_p}{c_v} \left(\frac{\partial T}{\partial v} \right)_p \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_v = \frac{c_p}{c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_T \quad (3.31)$$

Unter Rückgriff auf die Definition des Isentropenexponenten anhand von Gleichung 3.21 lässt sich nun der isentrope Druck-Volumen-Exponent nicht-idealer Fluide definieren:

$$\kappa = - \frac{v}{p} \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_s \quad \Leftrightarrow \quad \kappa_{pv} = - \frac{v}{p} \frac{c_p}{c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_T = - \kappa \frac{v}{p} \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_T \quad (3.32)$$

Wird in diesen Ausdruck das Gesetz idealer Gase eingesetzt, geht der isentrope Druck-Volumen-Exponent in den Isentropenexponenten des perfekten Gases über, wodurch die Konsistenz der Methode bekräftigt wird. Anders als der Isentropenexponent perfekter Gase ändert sich der Wert des isentropen Druck-Volumen-Exponenten entlang einer Zustandsänderung. Wheeler und Ong [166] leiten daher einen alternativen Ausdruck für den isentropen Druck-Volumen-Exponenten her, welcher die Abweichung vom Isentropenexponenten

ten anhand eines statistischen Korrekturfaktors beschreibt. Um eine solche Abweichung zu quantifizieren, schlagen Giuffré und Pini [55] die Verwendung eines gemittelten Wertes vor. Sowohl der Isentropenexponent als auch der isentrope Druck-Volumen-Exponent nehmen aufgrund ihrer Definition ausschließlich positive Werte an. Der Wertebereich der beiden Exponenten unterscheidet sich jedoch maßgeblich. Während der Isentropenexponent im gesamten Zustandsbereich eines Fluides Werte größer als eins annimmt, können für den isentropen Druck-Volumen-Exponenten in der Nähe des kritischen Punktes auch Werte kleiner als eins beobachtet werden. Nach Tosto et al. [155] kann die Abweichung der beiden Exponenten als Maß für die Nicht-Idealität eines Fluides genutzt werden. Dabei sind Abweichungen, welche durch größere oder kleinere Werte des isentropen Druck-Volumen-Exponenten gegenüber dem Isentropenexponenten gekennzeichnet sind, gleichermaßen zu berücksichtigen.

Fundamentale Ableitung der Gasdynamik

Ein mit dem isentropen Druck-Volumen-Exponenten eng verknüpfter Parameter ist die fundamentale Ableitung der Gasdynamik Γ . Dieser von Thompson [150] definierte Parameter ist eine dimensionslose Größe für die Krümmung der Isentropen in einer Fläche, welche durch den Druck und das spezifische Volumen aufgespannt wird:

$$\Gamma = \frac{a^4}{2v^3} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial p^2} \right)_s \quad (3.33)$$

Unter Verwendung der Definition der Schallgeschwindigkeit in Gleichung 3.15 lässt sich die fundamentale Ableitung auch anhand der Änderung der Schallgeschwindigkeit über der Dichte entlang einer isentropen Zustandsänderung beschreiben:

$$\Gamma = 1 + \frac{\rho}{a} \left(\frac{\partial a}{\partial \rho} \right)_s = \frac{1}{2} \left[\kappa_{pv} + 1 - \frac{v}{\kappa_{pv}} \left(\frac{\partial \kappa_{pv}}{\partial v} \right)_s \right] \quad (3.34)$$

Für ein perfektes Gas strebt der isentrope Druck-Volumen-Exponent bekanntermaßen gegen den Isentropenexponenten. Der Ausdruck in Gleichung 3.34 nimmt für ein perfektes Gas somit den Wert $\Gamma = (\kappa + 1)/2$ an, welcher stets größer als eins ist. Für die Klassifikation eines kompressiblen Fluides anhand der fundamentalen Ableitung wird eine isentrope Druckerhöhung betrachtet. Ein Fluid wird in Anlehnung an das perfekte Gas als ideal bezeichnet, wenn der Wert der Schallgeschwindigkeit im Zuge einer Druckerhöhung zunimmt. Für diesen Fall nimmt die fundamentale Ableitung Werte größer als eins an. Sinkt der Wert der Schallgeschwindigkeit entlang einer isentropen Druckerhöhung, wird das Fluid als nicht-ideal klassifiziert. Entsprechend Gleichung 3.34 führt das negative Vorzeichen des Differential der Schallgeschwindigkeit zu Werten der fundamentalen Ableitung kleiner als eins. Cramer [35]

Tabelle 2: Klassifizierung von Fluiden anhand der fundamentalen Ableitung der Gasdynamik

$\Gamma \geq 1$	$(\partial a / \partial \rho)_s \geq 0$	klassisch ideal
$0 \leq \Gamma < 1$	$-a / \rho \leq (\partial a / \partial \rho)_s < 0$	klassisch nicht-ideal
$\Gamma < 0$	$(\partial a / \partial \rho)_s < -a / \rho$	nicht-klassisch

weist solche Zustände für Fluorkohlenwasserstoffe in der Nähe des kritischen Punktes nach. Nannan et al. [109] weiten diese Beobachtung auf den Zweiphasenbereich einer Vielzahl von Fluiden direkt unterhalb des jeweiligen kritischen Punktes aus. Nach Harinck et al. [70] kann die Abnahme der Schallgeschwindigkeit im Zuge des Druckanstieges auf die Interaktion anziehender und abstoßender intermolekularer Kräfte zurückgeführt werden. Ist die Abnahme der Schallgeschwindigkeit derart groß, dass die fundamentale Ableitung negative Werte annimmt, wird das Fluid als nicht-klassisch bezeichnet. Einphasige gasförmige Fluide dieser Kategorie finden sich in der Literatur auch unter der Benennung als Bethe-Zel'dovich-Thompson-Fluide. Wie Vimercati et al. [159] anmerken, steht ein experimenteller Nachweis dieser Gruppe, anders als im Falle von zweiphasigen Fluiden, bis zum heutigen Zeitpunkt jedoch noch aus. Anhand der fundamentalen Ableitung ist somit eine Einteilung der Fluide in drei Gruppen möglich, welche in Tabelle 2 zusammenfassend gegenübergestellt werden. Nach Colonna et al. [32] steht diese Klassifikation in direktem Zusammenhang mit der molekularen Komplexität des Fluides, da sowohl die Schallgeschwindigkeit als auch ihre isentrope Änderung mit der Dichte durch diese beeinflusst wird. Der klassisch ideale Fall korrespondiert dementsprechend mit einer niedrigen molekularen Komplexität, während klassisch nicht-ideale Fluide eine hohe molekulare Komplexität aufweisen.

Parameter der molekularen Komplexität

Die Unterscheidung idealer und nicht-idealer kompressibler Fluide sollte daher auch die molekulare Komplexität des Fluides miteinbeziehen. Diese kann nach Colonna und Guardone [31] durch die Anzahl aktiver Freiheitsgrade N ausgedrückt werden:

$$N = \frac{2}{\delta_{\infty}^c} = \frac{2c_{v,\infty}}{R_s} = M \frac{2c_{v,\infty}}{R} \quad (3.35)$$

Der Faktor δ_{∞}^c bezeichnet dabei den von Bethe [21] definierten dimensionslosen Kehrwert der spezifischen isochoren Wärmekapazität, welcher bei der kritischen Temperatur und unter Annahme keiner intermolekularer Wechselwirkungen ausgewertet wird. Eine große Anzahl an aktiven Freiheitsgraden geht demnach mit einer hohen molekularen Komplexität einher. Die Anzahl aktiver Freiheitsgrade ist nach Gleichung 3.35 direkt proportional zur molaren Masse des Moleküls. Jedoch stellen Tosto et al. [156] klar, dass diese Relation durch die von der klassischen Gaskinetik konstatierte Antiproportionalität von spezifischer isochorer Wärmekapazität und molarer Masse abgeschwächt wird. Zwischen der molekularen Komplexität eines Fluides und dem isentropen Druck-Volumen-Exponenten besteht ebenfalls ein reziproker Zusammenhang. Das Verhältnis spezifischer Wärmekapazitäten sowie der Realgasfaktor werden hingegen von der molekularen Komplexität nicht wesentlich beeinflusst. Ein anderer Ansatz zur Beurteilung der molekularen Komplexität von Guardone und Argrow [62] nutzt das Minimum der fundamentalen Ableitung entlang der Taulinie als Kriterium. Ebenso wird der Grüneisen-Parameter Gr zur Beschreibung der molekularen Komplexität herangezogen. Dieser ursprünglich zur Beschreibung von Relationen zwischen thermodynamischen Größen und der Gitterschwingung innerhalb eines Festkörpers definierte Parameter wird durch Arp et al. [8] für die Anwendung auf Fluide verallgemeinert:

$$Gr = \frac{1}{\rho c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_v = -\frac{v}{c_v} \left(\frac{\partial s}{\partial v} \right)_T = \kappa_{pv} \kappa_{pT} \quad \text{mit} \quad \kappa_{pT} = \frac{p}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_s \quad (3.36)$$

Mithilfe der Maxwell-Relationen ist auch eine Formulierung des Grüneisen-Parameters allein anhand des isentropen Druck-Volumen-Exponenten sowie des isentropen Druck-Temperatur-Exponenten κ_{pT} möglich. Letztgenannter lässt sich analog zu der für den isentropen Druck-Volumen-Exponenten vorgestellten Vorgehensweise für nicht-ideale Fluide definieren. Wird der Grüneisen-Parameter bei der kritischen Temperatur ausgewertet, so strebt sein Wert für ein perfektes Gas gegen den Faktor δ_∞^c [156]. Diese Abhängigkeit kann auch für ein nicht-ideales Fluid aufgezeigt werden, wenn seine Abweichung vom Modell des perfekten Gases durch den Realgasfaktor quantifiziert wird:

$$Gr = \frac{1}{\delta_\infty^c} \frac{c_{v,\infty}}{c_v} \left[Z + T \left(\frac{\partial Z}{\partial T} \right)_\rho \right] \quad (3.37)$$

Der Grüneisen-Parameter zeigt für Fluide mit niedriger molekularer Komplexität im kritischen Punkt ein Maximum, während er für Fluide hoher molekularer Komplexität kein Extremum aufweist. Um die molekulare Komplexität von Fluiden zu beschreiben, welche im Kontext eines Phasenwechsels untersucht werden, definiert Invernizzi [82] einen weiteren Parameter:

$$\sigma = \frac{T_c}{R_s} \left(\frac{ds}{dT} \right)_{s,v,T_r=0.7} \quad (3.38)$$

Der Wert von σ ist proportional zur Steigung der Taulinie in einer Fläche, welche durch Temperatur und Entropie aufgespannt wird. Für Fluide mit niedriger molekularer Komplexität weist σ einen negativen Wert auf, welcher in einer negativen Steigung der Taulinie resultiert. Entsprechend dieses Kriteriums lassen sich molekular komplexe Fluide anhand einer positiven Steigung der Taulinie in einer Auftragung der Temperatur über der Entropie identifizieren.

Um ein kompressibles Fluid als nicht-ideal zu klassifizieren, können unterschiedliche Parameter genutzt werden, die sich maßgeblich in ihrer Zielsetzung unterscheiden. Der Realgasfaktor beschreibt die Abweichung vom Gesetz idealer Gase und kann somit nicht nur eine binäre Einordnung bezüglich der Nicht-Idealität eines Fluides liefern, sondern auch eine Quantifizierung dieser Nicht-Idealität. Er stellt somit einen Ähnlichkeitsparameter dar, welcher den Vergleich von thermodynamischen Zuständen sowie unterschiedlichen Fluiden ermöglicht. Der isentrope Druck-Volumen-Exponent als Gegenstück des Isentropenexponenten perfekter Gase eignet sich für die Unterscheidung idealer und nicht-idealer Fluide besonders im Kontext der Untersuchung von Zustandsänderungen. Außerdem kann er in Form einer Hilfsgröße zur Definition der fundamentalen Ableitung der Gasdynamik genutzt werden, welche den Einfluss der Wellenausbreitung auf die Klassifizierung des Fluides betont. Der Grüneisen-Parameter, welcher über Gleichung 3.37 mit der Anzahl aktiver Freiheitsgrade verknüpft ist, zielt auf die Quantifizierung der molekularen Komplexität in Abhängigkeit eines thermodynamischen Zustandes ab. Außerdem stehen die fundamentale Ableitung bzw. der isentrope Druck-Volumen-Exponent und die molekulare Komplexität in einer wechselseitigen Relation. Alle eingeführten Parameter indizieren dabei, dass die Nicht-Idealität eines kompressiblen Fluides in der Nähe der Taulinie besonders signifikant ist. Kommt es in diesem Zustandsbereich zu einer leichten Variation von Druck oder Temperatur, kann es zum Überschreiten der Taulinie in das Zweiphasengebiet kommen, was eine thermophysikalische Modellierung des Phasenwechsellvorganges notwendig macht.

3.4 Thermophysikalische Modellierung des Phasenwechsels

Aufgrund der im Rahmen der vorliegenden Arbeit getätigten Beschränkung auf kompressible Medien, erlangt der Phasenwechsel von der gasförmigen zur flüssigen Phase die höchste Relevanz. Im Fokus der weiteren Betrachtungen steht daher der mit einem solchen Phasenwechsel assoziierte Vorgang der Kondensation, welcher durch die Ausbildung einer flüssigen Phase im Zuge des Unterschreitens der Dampfdruckkurve gekennzeichnet ist. Experimentell lassen sich zwei unterschiedliche Arten von Kondensation beobachten. Eine homogene Kondensation liegt vor, wenn sich die flüssige Phase in Form von Kondensationskeimen spontan direkt aus der Gasphase bildet. Im Falle einer heterogenen Kondensation dient die Oberfläche von zumeist festen Partikeln als Ausgangspunkt der Ausbildung einer flüssigen Phase. Dies bedingt naturgemäß, dass eine heterogene Kondensation nur in Zwei- oder Mehrstoffsystemen auftreten kann und somit im Rahmen dieser Arbeit nicht behandelt wird. [152]

Neben einer solchen Unterscheidung verschiedener realer Kondensationsvorgänge ist auch eine Abstufung von unterschiedlichen Modellierungsansätzen möglich. Die Modellbildung für die homogene Kondensation kann entweder unter Annahme eines thermodynamischen Gleichgewichtes oder unter Negation eines solchen erfolgen. Dabei differieren die resultierenden Modelle maßgeblich in den ihnen zugrundeliegenden Annahmen und der jeweiligen mathematischen Beschreibung des Phasenwechselvorganges. Während das Gleichgewichtsmodell einen sehr hohen Abstraktionsgrad aufweist, beschreibt das Nicht-Gleichgewichtsmodell den realen Vorgang der homogenen Kondensation insbesondere anhand weiterer Modellabstufungen mit hoher Detailtiefe.

Gleichgewichtsmodell der homogenen Kondensation

Das Gleichgewichtsmodell der homogenen Kondensation konstatiert entsprechend seiner Benennung das Vorliegen eines thermodynamischen Phasengleichgewichtes. Die sich im Zuge des Kondensationsvorganges bildende flüssige Phase weist somit die gleiche spezifische Gibbs-Energie, die gleiche Temperatur und den gleichen Druck wie die gasförmige Phase des Fluides auf. Um die Zusammensetzung des zweiphasigen Systems zu beschreiben, eignet sich im Kontext der Kondensation der bereits eingeführte Flüssigkeitsmassenanteil. Dieser setzt die Masse der flüssigen Phase in ein Verhältnis zur Gesamtmasse des Systems:

$$y = \frac{m_l}{m_l + m_g} \quad (3.39)$$

Unter Einhaltung der Gleichgewichtsbedingung können die beiden im System vorliegenden Phasen ausschließlich gesättigte Zustände annehmen. Das extensive Systemvolumen lässt sich somit in Abhängigkeit der Massen der Phasen sowie der Sättigungsgrößen formulieren:

$$V_m = m_l v_{s,l} + m_g v_{s,g} \quad \Leftrightarrow \quad v_m = \frac{m_l v_{s,l} + m_g v_{s,g}}{m_l + m_g} \quad (3.40)$$

In Abbildung 8 wird dieser Zusammenhang zwischen Mischungs- und Sättigungsgrößen anhand eines Druck-Volumen-Diagrammes verdeutlicht. Wird der Druck eines zunächst gasförmig vorliegenden Systems entlang der exemplarisch dargestellten unterkritischen Isothermen erhöht, kommt es beim Erreichen des Sättigungsdampfdruckes zum Eintritt in das Zweiphasengebiet und der Ausbildung einer flüssigen Phase. Der resultierende Zustandspunkt wird

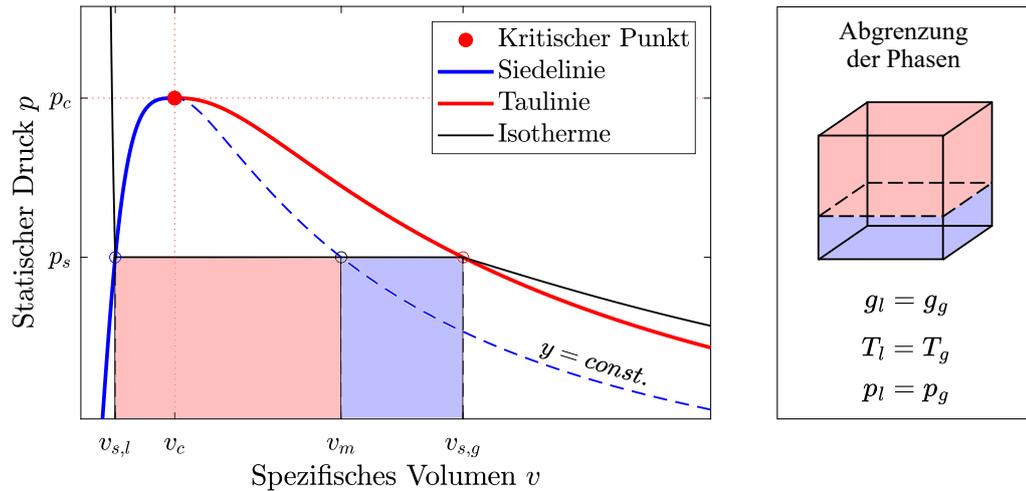


Abbildung 8: Definition des Flüssigkeitsmassenanteils für das Gleichgewichtsmodell der homogenen Kondensation in einem p - v -Diagramm (links) sowie schematische Abgrenzung der Phasen (rechts)

im Diagramm durch das spezifische Volumen des Phasengemisches v_m sowie den Sättigungsdampfdruck kenntlich gemacht. Entsprechend des Gleichgewichtsmodells der homogenen Kondensation liegen die Phasen durch eine einzige Phasengrenzfläche voneinander getrennt vor. Dabei kann der Zustand einer jeden Phase durch die Sättigungsgrößen entlang der Siede- bzw. Taulinie beschrieben werden. Der Anteil der in blau eingefärbten flüssigen Phase an dem im rechten Teil von Abbildung 8 dargestellten Gesamtsystem kann dementsprechend auch als Verhältnis der spezifischen Volumina ausgedrückt werden:

$$y = \frac{v_{s,g} - v_m}{v_{s,g} - v_{s,l}} \quad \Leftrightarrow \quad v_m = v_{s,g} - y(v_{s,g} - v_{s,l}) \quad (3.41)$$

Dieser grafisch anhand des Hebelgesetzes hergeleitete Ausdruck für den Flüssigkeitsmassenanteil lässt sich in gleicher Weise auch durch Kombination von Gleichung 3.39 und Gleichung 3.40 formulieren. Wird für eine große Anzahl von Isothermen eine Aufteilung anhand des Hebelgesetzes durchgeführt, lassen sich die so konstruierten Punkte zu Linien konstanten Flüssigkeitsmassenanteils verbinden. Hierzu können neben dem spezifischen Volumen auch andere Zustandsgrößen, wie die spezifische Enthalpie oder die spezifische Entropie, als Definitionsgrößen genutzt werden:

$$h_m = h_{s,g} - y(h_{s,g} - h_{s,l}) = h_{s,g} - yh_v \quad (3.42)$$

Die Differenz aus den spezifischen Enthalpien der gesättigten Gas- und Flüssigphase wird im Folgenden als spezifische Verdampfungsenthalpie h_v bezeichnet. Diese auch als latente Wärme bekannte Größe quantifiziert die Energiemenge, welche bei einem vollständigen isothermen Phasenwechsel von flüssig zu gasförmig durch das System freigesetzt wird. Eine analytische Bestimmung der Zustandsgrößen des Zweiphasensystems und insbesondere des Flüssigkeitsmassenanteils ist somit im Falle des Gleichgewichtsmodells möglich. Jedoch wird anhand der vorgenommenen theoretischen Abgrenzung der Phasen der hohe Abstraktionsgrad des Modells gegenüber der realen Ausbildung einer flüssigen Phase deutlich. Auch finden die physikalischen Vorgänge, welche den Phasenwechsel kennzeichnen, im Gleichgewichtsmodell keine Berücksichtigung.

Nicht-Gleichgewichtsmodell der homogenen Kondensation

Im Zuge einer homogenen Kondensation kommt es in realen Prozessen beim Überschreiten der Dampfdruckkurve zunächst zur Ausbildung eines metastabilen übersättigten bzw. unterkühlten Zustandes. Dieser kann sowohl mittels des Sättigungsgrades S als auch anhand der Unterkühlung ΔT beschrieben werden:

$$S = \frac{P}{p_s(T_g)} \quad \Leftrightarrow \quad \Delta T = T_s - T_g \quad (3.43)$$

Dabei bezeichnet T_s die durch die Dampfdruckkurve definierte Sättigungstemperatur. Auf eine Indizierung des Druckes als Gasgröße wird aufgrund des Vorliegens eines mechanischen Gleichgewichtes und der daraus folgenden Gleichheit von Phasen- und Mischungsdruck verzichtet. Für einen Sättigungsgrad größer als eins bzw. eine Unterkühlung größer als 0 K kommt es aufgrund von Fluktuationen der Dichte zur Bildung von Clustern. Für Zustände geringer Übersättigung sind diese jedoch nicht hinreichend stabil und zerfallen unmittelbar. Wird ein als kritische Übersättigung bezeichneter Zustand erreicht, kommt es zu einer spontanen Bildung einer hohen Anzahl stabiler Cluster, welche als Kondensationskeime bezeichnet werden. Dieser physikalische Vorgang der spontanen Keimbildung oder auch Nukleation ist initial für die Entstehung einer flüssigen Phase. Der Zustand der kritischen Übersättigung markiert daher den Wilson-Punkt, in welchem die Kondensation erstmals phänomenologisch anhand von Tropfen messbar wird. Die Kondensationskeime, welche in der Regel als kugelförmig modelliert werden, liegen in der kontinuierlichen Gasphase dispergiert vor. An ihrer Oberfläche kommt es zur Anlagerung weiterer Moleküle und somit zum Wachstum der dispersen Phase. Die dabei freigesetzte Energie bedingt eine Temperaturerhöhung innerhalb der Gasphase wodurch nach Gleichung 3.43 die Unterkühlung abnimmt und eine Hemmung der Nukleation einsetzt. Eine Kombination aus Nukleation und Tropfenwachstum führt folglich zu einer Selbstregulierung des Systems, welche die Wiederherstellung eines thermodynamischen Gleichgewichtes anstrebt. Nach dem Einsetzen der Nukleation verlaufen Keimbildung und Tropfenwachstum parallel, sodass zu einem definierten Zeitpunkt Tropfen mit unterschiedlichen Radien r in der Gasphase vorliegen.

Um die disperse Phase mathematisch repräsentieren zu können, ist daher die Aufteilung in eine endliche Anzahl an Gruppen notwendig. Eine jede Gruppe i zeichnet sich dabei durch die Gleichheit ihrer physikalischen Eigenschaften und insbesondere des Radius aus. Der Flüssigkeitsmassenanteil lässt sich dann als Verhältnis der Summe der Massenanteile der einzelnen Gruppen zur Gesamtmasse formulieren:

$$y = \sum y_i = \sum \frac{m_{l,i}}{m_m} = \sum \frac{n_i}{m_m} \cdot \frac{4}{3} \pi r_i^3 \cdot \rho_{l,i} \quad (3.44)$$

Dabei bezeichnet n_i die Anzahl der Tropfen der i -ten Gruppe. Die Masse eines Tropfens wird durch das Produkt aus Kugelvolumen und Dichte der flüssigen Phase ausgedrückt. Die Zustandsgrößen des Zweiphasengemisches, wie exemplarisch das spezifische Volumen, können anhand des Flüssigkeitsmassenanteils sowie den Größen der Gas- und Flüssigphase ausgedrückt werden:

$$v_m = (1 - y)v_g + \sum y_i v_{l,i} \quad (3.45)$$

Anders als im Falle des Gleichgewichtsmodells ist die Bestimmung der Zustandsgrößen der einzelnen Phasen nun jedoch nicht analytisch anhand der Sättigungsgrößen möglich. Die Vorgänge der Nukleation sowie des Tropfenwachstums bedingen eine zeitaufgelöste Änderung der Phasenzusammensetzung und in der Folge auch des Flüssigkeitsmassenanteils. Zudem variiert die Verteilung der gebildeten Tropfen auf die einzelnen Größengruppen ebenfalls im Verlauf der Kondensation. Der Einfluss der Nukleation und des Wachstums auf die Änderung des Flüssigkeitsmassenanteils mit der Zeit t lässt sich mathematisch separieren:

$$\frac{dy}{dt} = \frac{dy_{\text{Nukleation}}}{dt} + \frac{dy_{\text{Wachstum}}}{dt} \quad (3.46)$$

Der Mechanismus der Nukleation kann anhand der Nukleationsrate J quantifiziert werden. Diese stellt ein Maß für die Anzahl der Keime dar, welche sich pro Zeiteinheit in einem definierten Volumen neu bilden. Die klassische Keimbildungstheorie basiert auf der Erkenntnis von Gibbs [53], dass sich die Energie ΔG , welche zur Bildung eines Clusters notwendig ist, in einen volumetrischen Term ΔG_v und einen Oberflächenterm ΔG_s aufteilen lässt:

$$\Delta G = \Delta G_v + \Delta G_s = \frac{4}{3}\pi r^3 \rho_l (g_l - g_g) + 4\pi r^2 \sigma_{lg} \quad (3.47)$$

Dabei bezeichnet σ_{lg} die Oberflächenspannung der flüssigen Phase bei Gastemperatur. Es ist anzumerken, dass die Differenz der spezifischen Gibbs-Energien der flüssigen und gasförmigen Phase üblicherweise unter Anwendung des Gesetzes idealer Gase zu $g_l - g_g = R_s T_g \ln(S)$ vereinfacht wird. Das Maximum der Energiedifferenz aus Gleichung 3.47 stellt die Energiebarriere ΔG_{crit} dar, welche überwunden werden muss, um ein stabiles Cluster, also einen Keim, zu formen. Anhand dieser Bedingung lässt sich ein Ausdruck für den minimalen Keimradius oder auch kritischen Radius r_{crit} formulieren:

$$r_{crit} = \frac{2\sigma_{lg}}{\rho_l R_s T_g \ln(S)} \quad \Leftrightarrow \quad \Delta G_{crit} = \frac{4}{3}\pi \sigma_{lg} r_{crit}^2 \quad (3.48)$$

Auf Grundlage dieser energetischen Beschreibung formulieren Volmer und Weber [161] einen ersten Ausdruck für die Nukleationsrate. Dabei konstatieren sie, dass die Nukleationsrate exponentiell mit der Höhe der Energiebarriere verknüpft ist. Die Arbeiten von Becker und Döring [20], Frenkel [49] und Zeldovich [178] formen die klassische Nukleationstheorie, welche die Nukleationsrate anhand eines Ansatzes der Arrhenius-Gleichung modelliert:

$$J = J_0 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G_{crit}}{k_b T_g}\right) \quad \text{mit} \quad J_0 = q_c \sqrt{\frac{2\sigma_{lg} N_A^3}{\pi M^3}} \cdot \frac{\rho_g^2}{\rho_l} \quad (3.49)$$

Dabei bezeichnet q_c den Kondensationskoeffizienten, dessen Wert im Folgenden zu eins gesetzt wird, und N_A die Avogadro-Konstante. Die klassische Nukleationstheorie geht bei der Herleitung des Ausdruckes in Gleichung 3.49 davon aus, dass die Gasphase, in welcher die Nukleation kurz bevor steht, und das restliche Gasvolumen die gleiche Temperatur aufweisen. In der Realität weist die Gasphase kurz vor Einsetzen der Nukleation jedoch eine höhere Temperatur auf, sodass die isotherme Annahme nicht aufrechterhalten bleiben sollte. Um dies bei der Bestimmung der Nukleationsrate berücksichtigen zu können, schlägt Kántrowitz [84] die Einführung eines Korrekturfaktors ϕ vor.

Nach Bakhtar und Zidi [15] ist zur Formulierung eines solchen der Wärmeübergang zwischen den Phasen zu berücksichtigen:

$$\phi = \phi_0 \cdot \left(\frac{h_v^2}{R_s T_g^2} - \frac{h_v}{2T_g} \right) \quad \text{mit} \quad \phi_0 = q_c \frac{\rho_g}{\alpha_{crit}} \sqrt{\frac{R_s T_g}{2\pi}} \quad (3.50)$$

Der Wärmeübergangskoeffizient für einen Keim mit kritischem Radius α_{crit} wird im Sinne der Einheitlichkeit mit der Beschreibung des Wärmeübergangs im Zuge des Tropfenwachstums durch Gleichung 3.52 definiert. In der Literatur (vgl. [14]) wird der Korrekturfaktor ϕ häufig unter der Annahme eines perfekten Gases vereinfacht, worauf in Hinblick auf die Zielsetzung dieser Arbeit jedoch verzichtet werden soll. Durch eine Kombination von Gleichung 3.49, Gleichung 3.50 und Gleichung 3.44 lässt sich die Änderung des Flüssigkeitsmassenanteils in Folge der Nukleation formulieren:

$$\frac{dy_{Nukleation}}{dt} = \frac{4}{3} \pi r_{crit}^3 \frac{\rho_l}{\rho_m} \cdot \frac{J}{1 + \phi} \quad (3.51)$$

Da Nukleationsereignisse stets bei Keimen mit kritischem Radius auftreten, kann für diesen Term auf die Berücksichtigung weiterer Größengruppen verzichtet werden, sodass die Summation aus Gleichung 3.44 entfällt. Die Division mit der Dichte der Mischung trägt dem Wechsel von volumenbezogener Nukleationsrate auf massenbezogenen Flüssigkeitsmassenanteil Rechnung. Eine Quantifizierung des Tropfenwachstums der i -ten Größengruppe erfolgt anhand der Wachstumsfunktion $G(r_i)$, welche die Änderung des Radius pro Zeiteinheit beschreibt. Der in dieser Arbeit verwendete Ansatz nach Young [177] stellt eine Weiterentwicklung des ursprünglich von Gyarmathy [65] formulierten Zusammenhanges dar. Gyarmathy modelliert das zeitliche Differential der Radienänderung als Rate, mit welcher die beim Tropfenwachstum freigesetzte Verdampfungsenthalpie an die Gasphase abgeführt wird:

$$G(r_i) = \frac{dr_i}{dt} = \frac{\alpha_i}{\rho_l h_v} (T_i - T_g) \quad \text{mit} \quad \alpha_i = \frac{\lambda_g}{r_i (1 + 3.18 \cdot Kn)} \quad (3.52)$$

Dabei bezeichnet α_i den Wärmeübergangskoeffizienten an der Grenzfläche der i -ten Tropfengrößengruppe, welcher anhand einer für niedrige Reynoldszahlen des Mediums Wasser gültigen Nusselt-Korrelation beschrieben wird. λ_g bezeichnet in dieser die Wärmeleitfähigkeit der Gasphase. Die Knudsen-Zahl setzt die mittlere freie Weglänge \bar{l} ins Verhältnis zu einer charakteristischen Länge:

$$Kn = \frac{\bar{l}}{2r_i} \quad \text{mit} \quad \bar{l} = \frac{3\sqrt{\pi} \cdot \eta_g \cdot \sqrt{R_s T_g}}{\sqrt{8p}} \quad (3.53)$$

Da die mittlere freie Weglänge durch die Strecke definiert wird, welche ein Molekül im Durchschnitt zurücklegen kann bis es zu einem Stoß mit einem anderen Molekül kommt, erscheint der Durchmesser der i -ten Gruppe als eine geeignete Wahl für die charakteristische Länge des Tropfenwachstums. Das Formelzeichen η_g bezeichnet die dynamische Viskosität der Gasphase. Um den in Gleichung 3.52 formulierten Ansatz auswerten zu können, wäre die Kenntnis der Flüssigphasentemperatur jeder Tropfengrößengruppe notwendig. Alternativ schlägt Gyarmathy eine Näherung der Temperaturdifferenz vor:

$$T_i - T_g = \Delta T \left(1 - \frac{r_{crit}}{r_i} \right) \quad (3.54)$$

Anhand eines Vergleiches des durch Kombination von Gleichung 3.52 und Gleichung 3.54 definierten Modells nach Gyarmathy mit experimentellen Erkenntnissen erweitert Young dieses um drei empirische Modellparameter α , β und ν :

$$\frac{dr_i}{dt} = \frac{\lambda_g \Delta T (1 - \frac{r_{crit}}{r_i})}{\rho_l h_v r_i \left(\frac{1}{1+2\beta Kn} + 3.78(1-\nu) \frac{Kn}{Pr} \right)} \quad \text{mit} \quad Pr = \frac{\eta_g c_{p,g}}{\lambda_g} \quad (3.55)$$

Die Prandtl-Zahl Pr beschreibt das Verhältnis des Impulstransports zum Wärmetransport innerhalb der Gasphase. Während die Parameter α und β zunächst anhand der Auswahl durch Starzmann et al. [141] zu $\alpha = 11$ und $\beta = 0$ gesetzt werden, gibt Young für den dritten Parameter eine explizite Gleichung an:

$$\nu = \frac{R_s T_s}{h_v} \left(\alpha - 0.5 - \frac{2 - q_c}{2q_c} \left(\frac{\kappa + 1}{2\kappa} \right) \left(\frac{c_{p,g} T_s}{h_v} \right) \right) \quad (3.56)$$

Durch eine geschickte Umformung von Gleichung 3.46 lässt sich der Anteil des Tropfenwachstums an der zeitlichen Änderung des Flüssigkeitsmassenanteils durch Differentiation von Gleichung 3.44 nach dem Radius r_i formulieren:

$$\frac{dy_{Wachstum}}{dt} = \frac{dy_{Wachstum}}{dr_i} \cdot \frac{dr_i}{dt} = \sum \frac{n_i}{m_m} \cdot 4 \cdot \pi r_i^2 \rho_l \cdot G(r_i) \quad (3.57)$$

Eine Addition von Gleichung 3.51 und Gleichung 3.57 ergibt dann unter Verwendung der massenbezogenen Nukleationsrate \bar{J} die Differentialgleichung des Flüssigkeitsmassenanteils für das Nicht-Gleichgewichtsmodell:

$$\frac{dy}{dt} = \frac{4}{3} \pi r_{crit}^3 \rho_l \cdot \frac{\bar{J}}{1 + \phi} + \sum \frac{n_i}{m_m} \cdot 4 \cdot \pi r_i^2 \rho_l \cdot G(r_i) \quad \text{mit} \quad \bar{J} = \frac{J}{\rho_m} \quad (3.58)$$

Um diese lösen zu können, wird eine explizite Beschreibung der Tropfenradienverteilung benötigt. Unter der Annahme einer monodispersen Verteilung weisen alle Tropfen den gleichen mittleren Radius auf, sodass lediglich eine einzige Gruppe zur Modellierung benötigt wird. Die zeitliche Änderung des Flüssigkeitsmassenanteils ergibt sich in der Folge durch Einsetzen von $i = 1$ in Gleichung 3.58. Durch den zeitlichen Versatz von Nukleation und Tropfenwachstum weisen die Tropfenradien in der Realität jedoch zu jedem definierten Zeitpunkt eine polydisperse Verteilung auf. Eine solche ist exemplarisch in Abbildung 9 dargestellt. Die Gruppe des kleinsten Durchmessers wird durch den kritischen Radius charakterisiert. Mit fortschreitender Anlagerung von weiteren Molekülen wachsen die Tropfen an und bilden Gruppen größerer Radien r_i . Aufgrund der Koagulation von Tropfen im mittleren Größenbereich der Verteilung erreichen nur wenige Tropfen überdurchschnittlich hohe Radien. Für die mathematische Beschreibung einer solchen Tropfenradienverteilung schlagen Hulburt und Katz [80] sowie Hill [74] die Modellierung anhand der zentralen statistischen Momente vor. Das k -te Moment der Verteilung lässt sich durch eine Taylorreihenentwicklung der Anzahldichtefunktion $f(r)$ formulieren:

$$\mu_k = \int_0^\infty r^k f(r) dr \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial \mu_k}{\partial t} = k \int_0^\infty r^{k-1} G(r) f(r) dr + \bar{J} r_{crit}^k \quad (3.59)$$

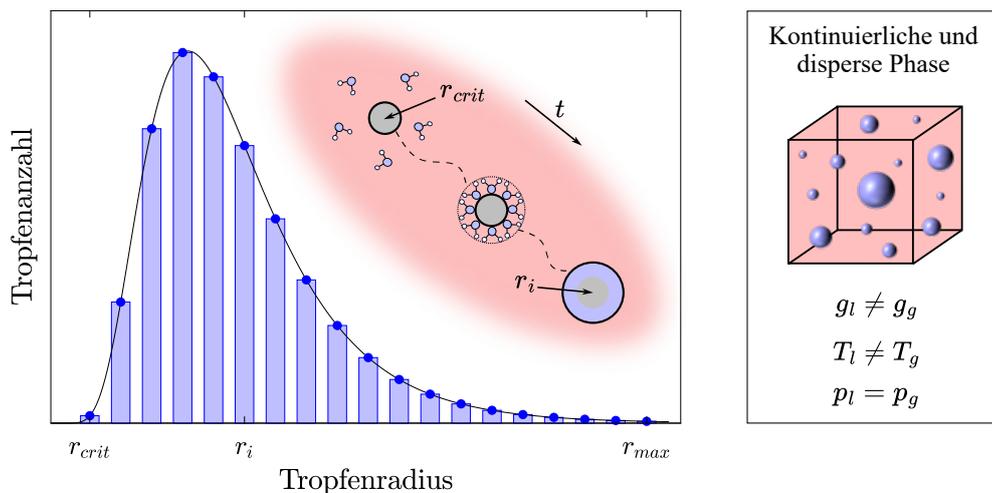


Abbildung 9: Exemplarische polydisperse Tropfenradienverteilung (links) sowie schematische Unterscheidung der kontinuierlichen und der dispersen Phase (rechts)

Um das Gleichungssystem der Momente schließen zu können, gibt White [167] drei mögliche Approximationen für den Ausdruck der Wachstumsrate an. In der vorliegenden Arbeit wird aus diesen der Ansatz gewählt, welcher die Wachstumsfunktion mittels des oberflächengemittelten Radius r_{20} auswertet. Wird das Integral in Gleichung 3.59 durch eine lineare Kombination von μ_k und μ_{k-1} ersetzt, welche für $k = 0$ entfällt, ergibt sich:

$$\frac{\partial \mu_k}{\partial t} = k \mu^{k-1} G(r_{20}) + \bar{J} r_{crit}^k \quad \text{mit} \quad r_{20} = \sqrt{\frac{\mu_2}{\mu_0}} \quad (3.60)$$

Um die Verwendung einer solchen Schließbedingung zu vermeiden und somit die Genauigkeit der Methode zu erhöhen, führt McGraw [99] in Gleichung 3.59 Gewichtungsfaktoren der Momente ein. Diese Faktoren werden dann mittels einer Gauß-Quadratur n -ter Ordnung bestimmt. Nach White und Hounslow [169] ist eine Beschreibung der Tropfenradienverteilung durch die ersten vier Momente $k \in \{0, 1, 2, 3\}$ jedoch auch ohne eine solche Gewichtung zumeist hinreichend genau. Dabei lässt sich das nullte Moment physikalisch als Tropfenanzahl pro Volumeneinheit der Zweiphasenmischung interpretieren. Außerdem stehen der Sauter-Radius r_{32} und der Flüssigkeitsmassenanteil in einem proportionalen Verhältnis zum dritten Moment der Radienverteilung:

$$r_{32} = \frac{\mu_3}{\mu_2} \quad \wedge \quad y = \frac{4}{3} \pi \rho_l \mu_3 \quad (3.61)$$

Die Bestimmung des Flüssigkeitsmassenanteils bedingt im Falle des Nicht-Gleichgewichtsmodells der homogenen Kondensation eine iterative Lösung des Differentialgleichungssystems der statistischen Momente. Die Modellierung der im Zuge der Kondensation einsetzenden Mechanismen, anhand welcher das Gleichungssystem spezifiziert wird, bedient sich einer großen Anzahl thermophysikalischer Größen. Eine Betrachtung der Besonderheiten der im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Arbeitsmedien und der Beschreibung ihrer thermophysikalischen Größen erscheint somit angebracht.

3.5 Besonderheiten der untersuchten Arbeitsmedien

Die Bestimmung der thermophysikalischen Größen der im Folgenden betrachteten Arbeitsmedien bedient sich fluidspezifischer Mehrparameter-Zustandsgleichungen. Da die Auswahl dieser Gleichungen von hoher Relevanz für die Reproduzierbarkeit der dargestellten Ergebnisse ist, findet sich in Anhang A eine tabellarische Übersicht aller verwendeten Modellgleichungen der Medien Wasser, Kohlenstoffdioxid und Octamethyltrisiloxan (MDM).

Wasser - H₂O

Wassermoleküle bestehen aus einem Sauerstoffatom und zwei Wasserstoffatomen. Sie liegen bei atmosphärischen Standardbedingungen als Flüssigkeit vor. Die drei Phasen fest, flüssig und gasförmig stehen im Tripelpunkt bei einer Temperatur von $T_{trip} = 273$ K und einem Druck von $p_{trip} = 6.12$ mbar im Gleichgewicht. Der kritische Punkt des Wassers wird durch eine Temperatur von $T_c = 647$ K und einen kritischen Druck von $p_c = 220$ bar definiert. Für die Betrachtung des Wassers als Arbeitsfluid erlangt der Bereich der Dampfdruckkurve sowie das Zweiphasengebiet eine besondere Relevanz. Aufgrund dessen steht dieser Bereich in Abbildung 10 in Form eines Druck-Volumen-Diagrammes sowie eines Druck-Temperatur-Diagrammes im Zentrum der Betrachtung. Das p - v -Diagramm (links) zeigt die Abgrenzung des Zweiphasengebietes von den einphasigen Zustandsbereichen mittels der Siedelinie (blau) und der Tauline (rot). Der metastabile Zustandsbereich reicht von diesen Grenzkurven bis zu den Spinodallimits der flüssigen und gasförmigen Phase. Im dargestellten Bereich variiert der Realgasfaktor zwischen Werten nahe null und eins. Dabei findet sich das globale Minimum dieses Parameters im Gebiet der Flüssigkeit. Wird hingegen nur die Gasphase betrachtet, liegt das Minimum des Realgasfaktors im Umfeld des kritischen Punktes. Für moderate Drücke und Temperaturen, wie sie bei den Untersuchungen der Kondensation von Wasser im Rahmen dieser Arbeit vorliegen, ist somit nur eine leichte Nicht-Idealität des Fluids zu erwarten. Das Zweiphasengebiet wird im rechten Teil von Abbildung 10 durch die Dampfdruckkurve (schwarz) repräsentiert. Diese grenzt die flüssige von der gasförmigen Phase ab und endet im kritischen Punkt. Um die thermodynamischen Zustandsgrößen

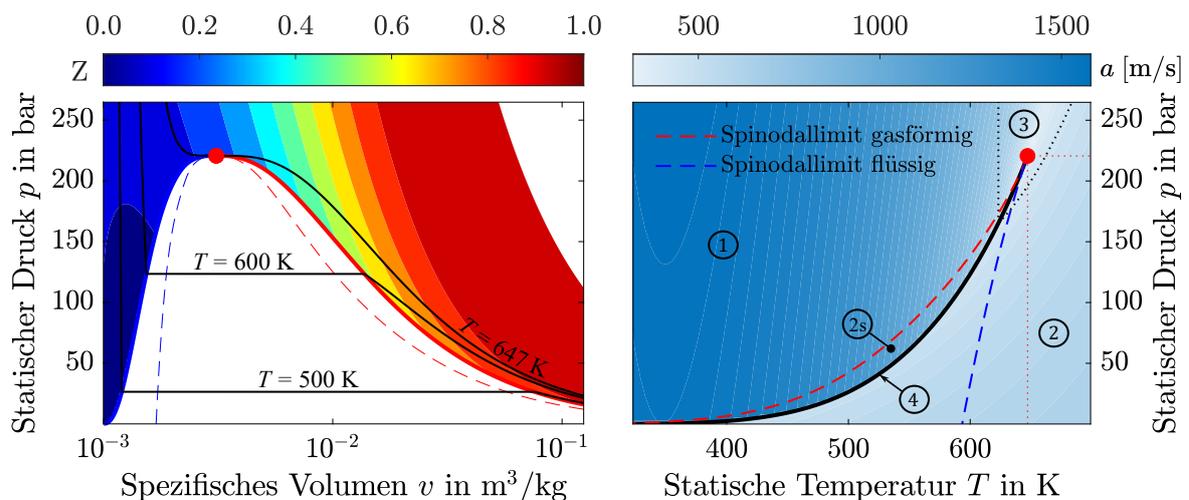


Abbildung 10: Variation des Realgasfaktors Z in einem p - v -Diagramm (links) und Abgrenzung der flüssigen und gasförmigen Phase anhand der Schallgeschwindigkeit a sowie den Definitionsbereichen der IAPWS-IF97 in einem p - T -Diagramm (rechts) für das Medium Wasser

für das Medium Wasser bestimmen zu können, wird in dieser Arbeit die von der *International Association for the Properties of Water and Steam* (IAPWS) im Jahr 1997 als *Industrial Formulation* benannte Zustandsgleichung (IAPWS-IF97) [165] herangezogen. Diese zeichnet sich durch eine Aufteilung ihres Definitionsbereiches in Unterbereiche aus. Die für die weiteren Betrachtungen relevanten Gebiete sind in Abbildung 10 durch umkreiste Ziffern kenntlich gemacht. Um die Bestimmung der Zustandsgrößen in der industriellen Praxis für die Bereiche 1 und 2 zu begünstigen, sind die entsprechenden Gleichungen anhand eines Gibbs-basierten Ansatzes formuliert. Die Zustandsgleichung für den Bereich 3 nutzt hingegen eine Helmholtz-basierte Formulierung. Eine weitere Besonderheit der IAPWS-IF97 besteht in der Erweiterung des Bereiches 2 um das durch das Spinodallimit der Gasphase beschränkte metastabile Zustandsgebiet 2s. Auch für diesen Bereich steht eine Gibbs-basierte Zustandsgleichung zur Verfügung, welche jedoch anders als die übrigen Gleichungen nicht anhand experimenteller Daten ermittelt wird. Vielmehr erfolgt eine Extrapolation aus dem einphasigen Bereich 2 anhand einer spezifischen Zustandsgleichung für Gase geringer Dichte [164]. Durch Anwendung einer solchen Gleichung kann der unstetige Übergang der Zustandsgrößen von der gasförmigen zur flüssigen Phase, wie exemplarisch im rechten Teil von Abbildung 10 für die Schallgeschwindigkeit dargestellt, bei der Betrachtung von Phasenwechsellvorgängen abgeschwächt werden.

Kohlenstoffdioxid - CO₂

Die Struktur eines Kohlenstoffdioxidmoleküls (CO₂) besteht aus einer linearen Anordnung eines Kohlenstoffatoms und zweier Sauerstoffatome. Das Fluid liegt bei atmosphärischen Standardbedingungen in der Gasphase vor. Sein Tripelpunkt wird durch eine Temperatur von $T_{trip} = 217$ K und einen Druck von $p_{trip} = 5.2$ bar definiert. Eine für die technische Anwendung relevante Besonderheit von CO₂ besteht in seinen kritischen Zustandsgrößen. Die kritische Temperatur liegt mit $T_{crit} = 304$ K nahe an typischen Umgebungsbedingungen und ermöglicht in Kombination mit einem kritischen Druck von $p_{crit} = 73.8$ bar eine effiziente Ausnutzung der Eigenschaften nahe des kritischen Punktes. In Abbildung 11 ist daher

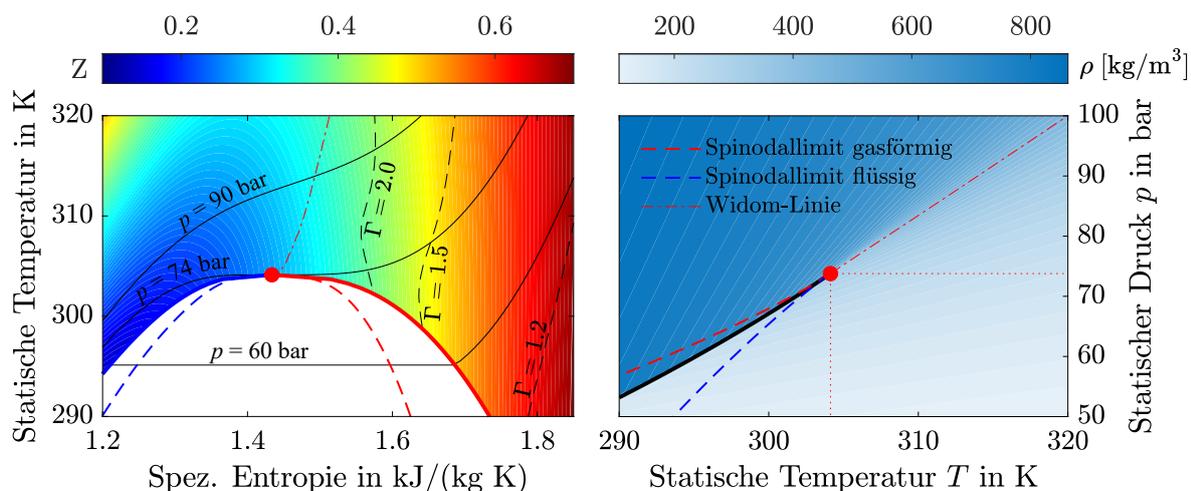


Abbildung 11: Variation des Realgasfaktors Z und der fundamentalen Ableitung Γ in einem T - s -Diagramm (links) sowie Dichtecharakteristik ρ nahe des kritischen Punktes in einem p - T -Diagramm (rechts) für das Medium CO₂

das Zustandsgebiet im Umfeld des kritischen Punktes von CO_2 anhand eines Temperatur-Entropie-Diagrammes sowie eines Druck-Temperatur-Diagrammes dargestellt. Neben den auch schon für das Medium Wasser dargestellten, das Zweiphasengebiet charakterisierenden Kurven, wird zudem die Widom-Linie aufgetragen. Der Realgasfaktor, welcher im linken Teil der Abbildung als Kontur visualisiert wird, variiert in diesem Bereich zwischen ungefähr 0.1 und 0.7. In unmittelbarer Nähe des kritischen Punktes weist der Realgasfaktor einen Wert von etwas über 0.2 auf. Dieser Bereich wird in der Literatur (vgl. [55], [156]) im Sinne der Abweichung vom Gesetz idealer Gase häufig als nicht-ideal bezeichnet. Die Werte der fundamentalen Ableitung liegen jedoch, wie anhand von Isolinien dargestellt, über eins, wodurch der Einfluss der Parameterwahl auf die Klassifikation als nicht-ideal deutlich wird. Die den Berechnungen der Zustandsgrößen von CO_2 zugrunde gelegte Zustandsgleichung nach Span und Wagner [139] weist insbesondere im überkritischen Zustandsbereich eine hohe Genauigkeit im Sinne einer Übereinstimmung mit experimentellen Daten auf. Durch ihre Helmholtz-basierte Formulierung anhand einer einzigen Funktionsvorschrift für den gesamten Definitionsbereich kann sie zudem einfach implementiert werden. Eine Auswertung dieser Gleichung in Bezug auf die Dichte ist im rechten Teil von Abbildung 11 dargestellt. Besonders auffällig ist hier die erkennbare Abgrenzung flüssiger und gasförmiger Zustandsbereiche oberhalb des kritischen Punktes anhand der Widom-Linie.

Octamethyltrisiloxan (MDM) - $\text{C}_8\text{H}_{24}\text{O}_2\text{Si}_3$

Octamethyltrisiloxan wird entsprechend seiner Benennung durch acht Methyl-Gruppen und drei Siliziumatome gekennzeichnet. In der Nomenklatur der Siloxane bildet eine Kombination aus drei Methyl-Gruppen und einem Siliziumatom eine M-Gruppe, während zwei Methyl-Gruppen und ein Siliziumatom zusammen eine D-Gruppe charakterisieren. Hieraus ergibt sich die in der Literatur aufgrund ihrer Kürze dominierende Bezeichnung als MDM. Das bei atmosphärischen Standardbedingungen flüssig vorliegende Fluid weist am Tripelpunkt eine Temperatur von $T_{trip} = 187 \text{ K}$ und einen Druck von etwa $p_{trip} = 0.01 \text{ mbar}$ auf. Der kritische Punkt wird durch eine Temperatur von $T_{crit} = 565 \text{ K}$ und einen Druck von

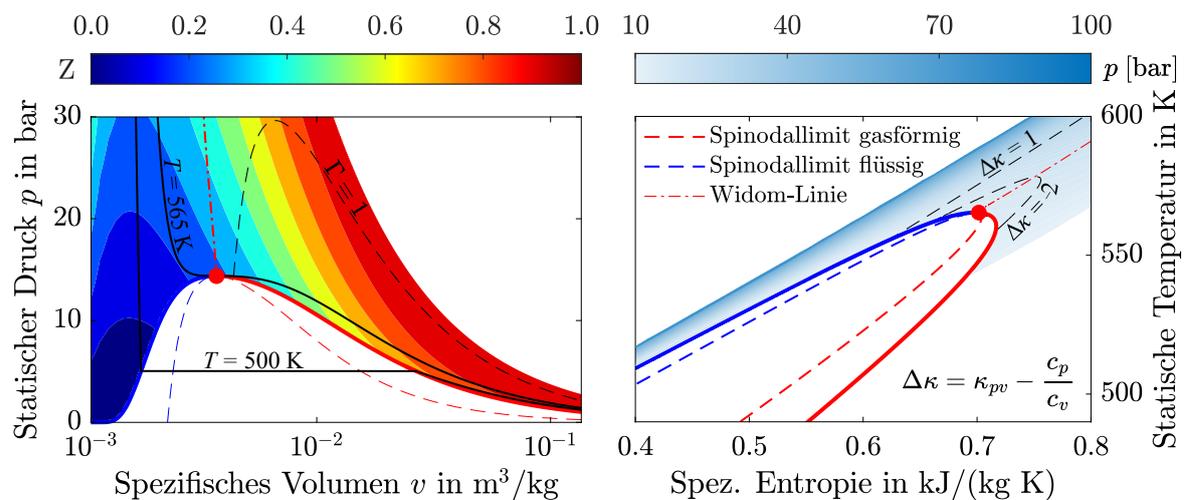


Abbildung 12: Variation des Realgasfaktors Z und Abgrenzung des nicht-idealen Zustandsbereiches in einem p - v -Diagramm (links) sowie Abweichung des isentropen Druck-Volumen-Koeffizienten vom Wärmekapazitätsverhältnis $\Delta\kappa$ in einem T - s -Diagramm (rechts) für das Medium MDM

$p_{crit} = 14.4$ bar definiert. Die Charakteristika der thermodynamischen Zustandsbereiche von MDM werden in Abbildung 12 verdeutlicht. Im linken Teil der Abbildungen sind der gasförmige und flüssige Zustandsbereich sowie das Zweiphasengebiet in einer Auftragung des statischen Druckes über dem spezifischen Volumen dargestellt. Ausgehend von dem im Bereich des Ursprungs zu verortenden Tripelpunktes nimmt der Wert des Realgasfaktors mit steigendem Druck und Volumen zu. Ähnlich wie auch schon für Wasser hervorgehoben, findet sich das globale Minimum dieses Parameters im Bereich der Flüssigphase, während das Minimum unter Limitierung auf gasförmige Zustände am kritischen Punkt zu finden ist. Für MDM kann anders als für die anderen beiden Arbeitsmedien eine Abgrenzung eines durch eine fundamentale Ableitung von kleiner als eins parametrisierten nicht-idealen Zustandsbereiches erfolgen. Dieser befindet sich im Gebiet der Gasphase und verläuft nahezu entlang der gesamten Taulinie. Bemerkenswert ist, dass der Realgasfaktor in diesem Bereich Werte zwischen 0.3 und 1.0 aufweist. Eine Auswertung der Helmholtz-basierten Zustandsgleichung nach Thol et al. [149] in Bezug auf den Druck bildet die Grundlage für die im rechten Teil von Abbildung 12 dargestellte Auftragung der statischen Temperatur über der spezifischen Entropie. Die Abweichung des isentropen Druck-Volumen-Exponenten vom Verhältnis spezifischer Wärmekapazitäten $\Delta\kappa$ ist in Form von zwei Isolinien dargestellt. Während die Differenz nahe des kritischen Punktes negative Werte annimmt, zeigt sie mit steigendem Druck positive Werte. Die Differenz klassifiziert jedoch unabhängig von ihrem Vorzeichen signifikante Abweichungen für den betrachteten Zustandsbereich. Anhand der Darstellung eines T - s -Diagrammes wird zudem direkt die negative Steigung der Taulinie erkennbar, welche neben ihrer Relevanz für ORC-Anwendungen in Äquivalenz zum σ -Parameter auch eine hohe molekulare Komplexität indiziert. Um diesen Aspekt für die drei betrachteten Arbeitsmedien vergleichend untersuchen zu können, sind im linken Teil von Abbildung 13 der Grüneisenparameter sowie der isentrope Druck-Volumen-Exponent entlang der kritischen Isotherme aufgetragen. Die Parameter werden dabei jeweils bezogen auf ihren Wert bei Auswertung für einen gegen unendlich strebenden Wert des spezifischen Volumens dargestellt. Der Verlauf des Grüneisenparameters zeigt für die drei Fluide stark differierende Eigenschaften. Während der Verlauf für Wasser monoton fällt, steigt er für MDM monoton an. Im Falle von CO_2 kommt es kurz vor Erreichen des kritischen Druckes zur Ausbildung eines Maximums. Auch

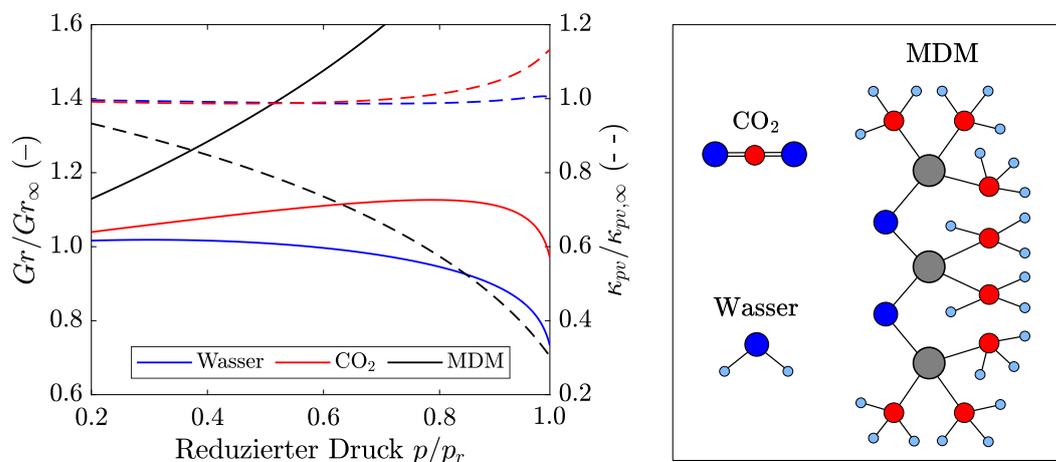


Abbildung 13: Variation des Grüneisen-Parameters Gr und des isentropen Druck-Volumen-Koeffizienten κ_{pv} entlang der kritischen Isotherme für die Medien Wasser, CO_2 und MDM (links) sowie die Molekülstruktur der untersuchten Fluide (rechts)

die Charakteristiken des isentropen Druck-Volumen-Exponenten unterscheiden sich erheblich. Während nun die Kurve für MDM monoton fällt, zeigt die Kurve für Wasser nahezu keine Steigung. Die Verläufe für Wasser und CO_2 weisen im Bereich niedriger Drücke eine große Ähnlichkeit auf. Jedoch steigt der isentropen Druck-Volumen-Exponenten für CO_2 ab einem reduzierten Druck von etwa $p_r = 0.6$ stärker an. Die Ergebnisse für MDM und CO_2 stehen in Übereinstimmung mit den Erkenntnissen von Tosto et al. [156]. Demnach ist die Ausbildung eines Maximums im Verlauf des Grüneisen-Parameters ein Indiz für eine moderate molekulare Komplexität. Ein monoton steigender Verlauf des Grüneisen-Parameters sowie ein monoton abfallendes Verhalten des isentropen Druck-Volumen-Exponenten sind hingegen charakteristisch für ein Fluid mit hoher molekularer Komplexität. Die Klassifikation des Mediums Wasser deutet somit auf eine geringe molekulare Komplexität hin, ist dabei jedoch nicht eindeutig. Eine Betrachtung anhand der Molekülstrukturen im rechten Teil von Abbildung 13 erscheint daher hilfreich. Das MDM-Molekül weist neben der höchsten molaren Masse von $M = 237$ g/mol auch eine deutlich komplexer verzweigte Struktur auf. Die Moleküle von CO_2 mit einer molaren Masse von $M = 44$ g/mol und Wasser mit $M = 18$ g/mol sind vergleichsweise einfach strukturiert. Die in diesem Unterkapitel gewählte Reihenfolge der Arbeitsmedien entspricht folglich auch der Ordnung ihrer molekularen Komplexität.

4 Numerische Modellierung

Ausgehend von der im vorigen Kapitel vorgestellten thermodynamischen Beschreibung kompressibler nicht-idealer Fluide anhand des Konzeptes eines ortsfesten Fluidelements soll nun die Strömung eines kontinuierlichen Fluides untersucht werden. Hierzu ist die Betrachtung einer finiten Anzahl von Fluidelementen notwendig, welche sich im dreidimensionalen Raum bewegen. Da jedes Fluidelement neben unterschiedlichen thermophysikalischen Eigenschaften zudem potentiell auch eine eigene Bewegungsrichtung und -geschwindigkeit aufweist, ist eine Wahl geeigneter Systemgrenzen für die Modellierung der Strömung entscheidend. In Fortführung des Ansatzes aus Abbildung 1 fällt diese für die weiteren Betrachtungen analog zum Fluidelement auf ein infinitesimales Kontrollvolumen dV . Die Bewegung eines kontinuierlichen Mediums kann anhand eines Vektorfeldes, welches auch als Strömungsfeld bezeichnet wird, beschrieben werden. Eine Kurve im Raum, deren Punktmenge tangential zu den Geschwindigkeitsvektoren des Strömungsfeldes steht, definiert eine Stromlinie. Bei der Betrachtung eines ortsfesten Volumens bedingt die Bewegung des Fluides entlang einer solchen Stromlinie einen Fluss über die Grenzflächen. Abbildung 14 veranschaulicht dies in einem kartesischen Koordinatensystem. Die Anwendung der fundamentalen physikalischen Prinzipien der Erhaltung der Masse, des Impulses und der Energie auf das ortsfeste infinitesimale Volumen berücksichtigt neben der räumlichen Änderung auch die zeitliche Dimension. Aufgrund der Relevanz für die weiteren Ausführungen wird das Konzept des Flusses exemplarisch anhand der Erhaltung der Masse verdeutlicht:

$$\dot{m} = \rho \cdot \mathbf{v}_{\perp} \cdot A = \text{const.} \quad (4.1)$$

Der Massenstrom \dot{m} kann anhand des Produktes der Dichte, dem normal zur Strömungsrichtung stehenden Anteil des Geschwindigkeitsvektors \mathbf{v} und der durchströmten Fläche A formuliert werden. Eine Aufteilung des Massenstromes in seine kartesischen Komponenten führt zu einer Definition dreier Flussterme, welche anhand der drei Geschwindigkeitskomponenten u, v und w ausgedrückt werden. Die x -Komponente des Massenstroms ρu tritt über die Fläche $dy \cdot dz$ in das Volumen ein. Auf der komplementären um dx versetzten Fläche tritt entsprechend die um $(\partial(\rho u)/\partial x) \cdot dx$ geänderte Größe aus. Analoges gilt anhand von Abbildung 14 für die anderen beiden Raumrichtungen. Die Vorzeichenkonvention definiert eine positive Flussrichtung anhand der nach außen gerichteten Normalenvektoren auf den Grenzflächen des Volumens. [5]

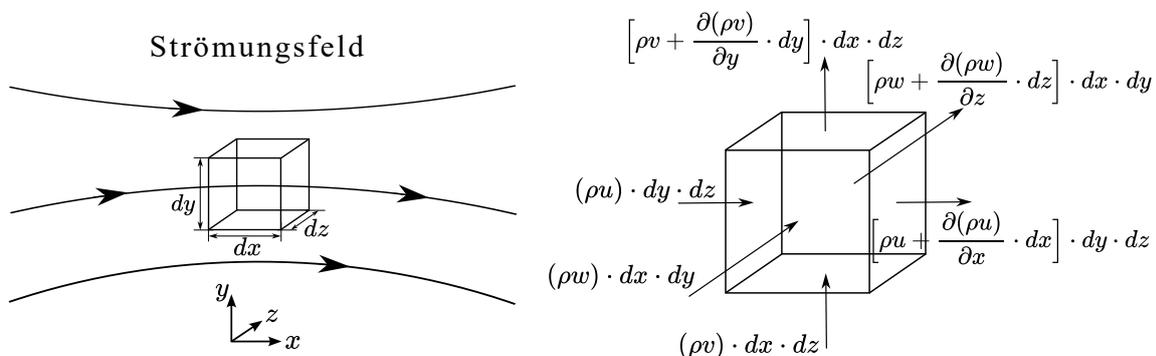


Abbildung 14: Infinitesimales Kontrollvolumen in einem Strömungsfeld (links) und Flüsse über die Volumengrenzen exemplarisch für die Erhaltungsgröße der Masse (rechts)

Die zeitliche Variation der Masse wird über dem gesamten Kontrollvolumen dV erfasst. Eine Bilanzierung der zeitlichen Änderung innerhalb des Volumens sowie der räumlichen Änderung in Form der Flüsse über die Volumengrenzen resultiert in:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t}(dx \cdot dy \cdot dz) + \left[\rho u + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \cdot dx \right] \cdot dy \cdot dz - (\rho u) \cdot dy \cdot dz \\ + \left[\rho v + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \cdot dy \right] \cdot dx \cdot dz - (\rho v) \cdot dx \cdot dz \\ + \left[\rho w + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \cdot dz \right] \cdot dx \cdot dy - (\rho w) \cdot dx \cdot dy = 0 \end{aligned} \quad (4.2)$$

Eine Division von Gleichung 4.2 mit $dx \cdot dy \cdot dz$ und eine anschließende Umformung ergibt die partielle Differentialgleichung der Massenerhaltung. Die Flussterme finden sich in dieser Schreibweise im Zähler der partiellen räumlichen Ableitungen:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (4.3)$$

Eine Anwendung der für die Massenerhaltung vorgestellten Herangehensweise zur Bilanzierung der Erhaltungsgrößen auf die Impulse in den drei Raumrichtungen sowie die Energie führt zu folgenden Gleichungen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p - \tau_{xx}) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho uv + \tau_{yx}) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho uw + \tau_{zx}) - \rho f_x &= 0 \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho vu + \tau_{xy}) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2 + p - \tau_{yy}) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho vw + \tau_{zy}) - \rho f_y &= 0 \\ \frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho wu + \tau_{xz}) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho wv + \tau_{yz}) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w^2 + p - \tau_{zz}) - \rho f_z &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \cdot \left(e + \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 \right) \right] - \rho \cdot (u f_x + v f_y + w f_z) - \rho \dot{q}_s \\ + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho u \cdot \left(h + \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 \right) - (u \tau_{xx} + v \tau_{xy} + w \tau_{xz}) - \lambda_g \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right] \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left[\rho v \cdot \left(h + \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 \right) - (u \tau_{yx} + v \tau_{yy} + w \tau_{yz}) - \lambda_g \cdot \frac{\partial T}{\partial y} \right] \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left[\rho w \cdot \left(h + \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 \right) - (u \tau_{zx} + v \tau_{zy} + w \tau_{zz}) - \lambda_g \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right] &= 0 \end{aligned} \quad (4.4)$$

In diesen bezeichnen f_x, f_y und f_z die kartesischen Komponenten der Körperkräfte, während \dot{q}_s den Wärmestrom aufgrund von Strahlung und τ_{ij} die Schubspannung repräsentiert. Die Spannungskomponenten wirken dabei auf einer zum Index i orthogonalen Fläche in Richtung des Index j . Sie lassen sich anhand der von Stokes [144] formulierten Beziehungen spezifizieren. Der Geschwindigkeitsvektor kann durch $\mathbf{v}^2 = u^2 + v^2 + w^2$ auch anhand seiner kartesischen Komponenten formuliert werden. Die Gesamtheit der Massenerhaltung in Gleichung 4.3, der Impulserhaltung in Gleichung 4.4 sowie der Energieerhaltung in Gleichung 4.5 bildet die vollständigen Navier-Stokes-Gleichungen.

4.1 Erhaltungs- und Transportgleichungen für ein- und zweiphasige Strömungen

Für die Beschreibung kontinuierlicher Strömungen werden im Rahmen dieser Arbeit die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen numerisch gelöst. Sie können aus den vollständigen Navier-Stokes-Gleichungen durch Anwendung einer Favre-Mittelung auf die physikalischen Größen hergeleitet werden. Die Erhaltungsgrößen ergeben sich in der Folge als Summe eines zeitlichen Mittelwertes und einer Schwankungsgröße. Im Zuge der Mittelung nimmt die Anzahl der Unbekannten des Gleichungssystems zu, sodass für die Beschreibung der turbulenten Schwankungen zusätzliche Modellansätze benötigt werden [45]. Da die Formalstruktur der vollständigen und der Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen übereinstimmt und die viskosen Terme nicht im Fokus der weiteren Betrachtungen stehen, wird auf eine Kenntlichmachung der gemittelten Größen verzichtet. Neben einer Formulierung in Form eines Gleichungssystems partieller Differentialgleichungen ist auch eine Darstellung der Navier-Stokes-Gleichungen anhand einer Vektorschreibweise möglich. Diese erscheint im Kontext der Herleitung numerischer Lösungsverfahren aufgrund ihrer strukturierten Darstellung und Nähe zu den Operatoren der linearen Algebra als besonders geeignet:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{F}_k - \mathbf{F}_v) + \frac{\partial}{\partial y} (\mathbf{G}_k - \mathbf{G}_v) + \frac{\partial}{\partial z} (\mathbf{H}_k - \mathbf{H}_v) = \mathbf{Q} \quad (4.6)$$

mit

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_k = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho v u \\ \rho w u \\ \rho u H \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_v = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xz} \\ \lambda_g \cdot \frac{\partial T}{\partial x} + u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{G}_k = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho w v \\ \rho v H \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_v = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{yx} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{yz} \\ \lambda_g \cdot \frac{\partial T}{\partial y} + u\tau_{yx} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}_k = \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho uw \\ \rho v w \\ \rho w^2 + p \\ \rho w H \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H}_v = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{zx} \\ \tau_{zy} \\ \tau_{zz} \\ \lambda_g \cdot \frac{\partial T}{\partial z} + u\tau_{zx} + v\tau_{zy} + w\tau_{zz} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho f_x \\ \rho f_y \\ \rho f_z \\ \rho \cdot (uf_x + vf_y + wf_z + \rho \dot{q}_s) \end{pmatrix}$$

$$E = e + \frac{1}{2} \mathbf{v}^2, \quad H = e + \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2} \mathbf{v}^2$$

\mathbf{U} wird als Erhaltungsvektor und \mathbf{Q} als Quelltermvektor bezeichnet, während \mathbf{F} , \mathbf{G} und \mathbf{H} die Flussvektoren darstellen. Zur besseren Lesbarkeit werden die totale spezifische innere Energie E und die totale spezifische innere Enthalpie H eingeführt. Die Aufteilung in einen konvektiven Anteil \mathbf{F}_k sowie einen viskosen Anteil \mathbf{F}_v des Flussvektors ermöglicht eine separate Betrachtung der zur Berechnung dieser Terme genutzten Verfahren. Aufgrund der untergeordneten Bedeutung der Wärmeleitung, der Wärmestrahlung sowie der Körperkräfte für die vorliegenden Untersuchungen werden diese Terme in den folgenden Gleichungen vernachlässigt. Auch beschränken sich die bisherigen Zusammenhänge auf einphasige Strömungen. Vor einer detaillierten Untersuchung unterschiedlicher Formulierungen der Gleichungssysteme zweiphasiger Strömungen erscheint es sinnvoll, die zur Modellierung der Phaseninteraktion benötigten Größen einzuführen.

Impulsaustausch zwischen flüssiger und gasförmiger Phase

Liegt die flüssige Phase in der gasförmigen kontinuierlichen Phase dispergiert vor, so bedingt das Strömungsfeld einen Impulsaustausch zwischen den beiden Phasen. Dabei kommt es zur Ausbildung verschiedener aerodynamischer Kraftkomponenten. Zu diesen zählen neben der Widerstandskraft exemplarisch auch die Auftriebskraft, die Basset-Kraft, der virtuelle Masseneffekt sowie die Magnus-Kraft [36]. Die Modellierung des Impulsaustausches wird im Weiteren auf die Widerstandskraft beschränkt, was eine Vernachlässigung der übrigen Kraftkomponenten zur Folge hat. Zudem wird angenommen, dass die flüssige Phase in Form von Tropfen untereinander keine Interaktion eingeht. Ein Tropfen, welcher sich im Strömungsfeld mit der Geschwindigkeit \mathbf{v}_l bewegt, erfährt aufgrund seiner Umströmung mit der Geschwindigkeit \mathbf{v}_g eine Krafteinwirkung. Auf die kontinuierliche Gasphase wirkt entsprechend des dritten Newtonschen Axioms eine betragsgleiche entgegengesetzte Kraft. Die Widerstandskraft führt auf diese Weise zu einer Annäherung der beiden Phasengeschwindigkeiten. Sie lässt sich unter der Annahme kugelförmiger Tropfen anhand des zweiten Newtonschen Axioms formulieren:

$$F_W = \frac{1}{2} \rho_g A_s C_W (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_l) |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_l| \quad \text{mit} \quad A_s = \pi r^2 \quad (4.7)$$

Dabei bezeichnet A_s die Oberfläche eines Tropfens und C_W den dimensionslosen Widerstandsbeiwert, welcher maßgeblich durch die in der Strömung vorherrschende Reynolds-Zahl bestimmt wird. Um das Verhältnis der auf einen Tropfen wirkenden Trägheitskräfte zu den viskosen Kraftanteilen anhand der Reynolds-Zahl zu formulieren, wird als Geschwindigkeit die Geschwindigkeitsdifferenz der beiden Phasen sowie als charakteristische Länge der Tropfenradius herangezogen:

$$Re = \frac{2r |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_l| \rho_g}{\eta_g} \quad (4.8)$$

Für Reynolds-Zahlen kleiner als eins leitet Stokes [143] eine Antiproportionalität des Widerstandsbeiwertes zur Reynolds-Zahl her. Der Ansatz nach Schiller und Naumann [134] multipliziert diese mit einem Korrekturterm und ermöglicht so eine Modellierung des Widerstandsbeiwertes für Reynolds-Zahlen bis zu 1000:

$$C_{W,SN} = \frac{24}{Re} \cdot \left(1 + 0.15 \cdot Re^{0.687} \right) \quad \text{für} \quad 1 < Re < 1000 \quad (4.9)$$

Die Beschreibung nach Stokes setzt voraus, dass die Geschwindigkeitsdifferenz an der Oberfläche des Tropfens einen Wert von null annimmt. Diese Annahme wird für Tropfen, deren Durchmesser in einer ähnlichen Größenordnung, wie die mittlere freie Weglänge des Gases liegt, nicht erfüllt. Cunningham [37] schlägt daher einen von der Knudsen-Zahl abhängigen empirischen Korrekturfaktor C_C vor. Knudsen und Weber [86] stellen fest, dass die von Cunningham hergeleitete Modellkonstante A_C ebenfalls eine Abhängigkeit von der Knudsen-Zahl aufweist. Die von ihnen zusätzlich eingeführten Parameter werden von Davies [38] anhand einer gewichteten Mittelung experimenteller Ergebnisse bestimmt und führen zu folgender Formulierung:

$$C_C = \frac{1}{1 + 2 \cdot A_C \cdot Kn} \quad \text{mit} \quad A_C = 1.257 + 0.4 \cdot e^{-1.1 \cdot \frac{1}{2 \cdot Kn}} \quad (4.10)$$

Durch Kombination von Gleichung 4.9 und Gleichung 4.10 lässt sich der Widerstandsbeiwert unter Berücksichtigung des Einflusses der Reynolds- sowie der Knudsen-Zahl ermitteln:

$$C_W = C_{W,SN} \cdot C_C \quad (4.11)$$

Der Tropfenradius lässt sich anhand der obigen Gleichungen in Kombination mit der Definition der Knudsen-Zahl aus Gleichung 3.53 als einer der dominanten Einflussfaktoren auf den Betrag der Widerstandskraft identifizieren. Kleine Tropfenradien werden daher regelmäßig als Legitimation einer Vernachlässigung der Widerstandskraft angeführt (vgl. exemplarisch [170]). Eine weitere Möglichkeit, die Relevanz einer Berücksichtigung der Widerstandskraft abzuschätzen, stellt die Auswertung der Stokes-Zahl dar:

$$St = \frac{2r|\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_l|\rho_l}{9\eta_g} \cdot \frac{24}{Re \cdot C_W} \quad (4.12)$$

Sie beschreibt das Verhältnis der Relaxationszeit eines Tropfens zu einer charakteristischen Zeitskala der Strömung. Dabei wird als Relaxationszeit die Zeit bezeichnet, welche der Tropfen benötigt, um in einen Gleichgewichtszustand bezüglich seiner Massenträgheit zurückzukehren. Der zweite Term in Gleichung 4.12 ermöglicht eine Berücksichtigung der zuvor eingeführten Korrekturfaktoren [63]. Gilt $St < 0.1$, folgen die Tropfen der Strömung mit einer maximalen Abweichung von 1% [158]. Eine Berücksichtigung der Widerstandskraft im Zuge der Modellierung erfolgt daher im Weiteren nur für $St > 0.1$.

Modellierungsansätze für zweiphasige Strömungen

Die Beschreibung von Strömungen kann anhand zweier unterschiedlicher Bezugssysteme erfolgen. Das Euler-Bezugssystem unterteilt ein durchströmtes Volumen in eine finite Anzahl an räumlich diskreten Punkten, welche jeweils ein Fluidelement repräsentieren. Die zeitliche Änderung der Strömungsgrößen wird an jedem dieser ortsfesten Punkte erfasst. Dies ermöglicht eine Beschreibung in Form eines durch Stromlinien charakterisierten Feldes und bedingt die Verbreitung des Euler-Bezugssystems für die Beschreibung kontinuierlicher Strömungen. Unter Anwendung eines Lagrange-Bezugssystems erfolgt im Gegensatz zur ortsfesten Euler-Betrachtungsweise eine Mitbewegung des Bezugssystems. Die zeitliche Änderung der Strömungsgrößen eines spezifischen Teilchens wird entlang seiner Trajektorie beschrieben. Aufgrund der Notwendigkeit einer Identifikation einzelner Teilchen ist die An-

wendbarkeit der Lagrange-Betrachtungsweise für kontinuierliche Strömungen stark eingeschränkt. Für die Beschreibung der dispersen Phase einer Zweiphasenströmungen erscheint ein Lagrange-Bezugssystem jedoch als mögliche Option. Dabei wird ein Teilchen durch eine Gruppe von Tropfen gleicher Größe repräsentiert, welche entlang ihrer Trajektorie durch den Mechanismus des Tropfenwachstums beeinflusst werden. Da die Strömung der kontinuierlichen Phase weiterhin in einem Euler-Bezugssystem beschrieben wird, kann eine nach Phasen getrennte Lösung der Differentialgleichungen erfolgen. Dies ermöglicht eine von der Gitterdiskretisierung sowie des für die Gasphase verwendeten Zeitschrittes unabhängige numerische Integration des Gleichungssystems der dispersen Phase. Die Möglichkeit einer Unterrelaxation kann sich zudem positiv auf das Lösungsverfahren der gekoppelten Differentialgleichungen auswirken. Aufgrund einer separaten Betrachtung der Tropfengrößengruppen ist eine Modellierung möglicher Gruppenwechsel nicht notwendig. Die Anwendbarkeit der Kombination eines Lagrange-Bezugssystems für die disperse Phase mit einer Euler-Betrachtungsweise für die kontinuierliche Phase wird maßgeblich durch die Schwierigkeit einer Parallelisierung der Berechnungsschritte limitiert. Diese ist auf einen ständigen Wechsel zwischen den Bezugssystemen zurückzuführen und beeinflusst die Rechenzeiteffizienz negativ. Wird die disperse Phase in einem Euler-Bezugssystem beschrieben, begünstigt dies die Parallelisierbarkeit. Jedoch nimmt die Anzahl der zu lösenden Gleichungen gegenüber einer Euler-Lagrange-Betrachtung (E-L) zu. Dies führt insbesondere bei der Berücksichtigung einer Vielzahl von diskreten Tropfengrößenklassen zu einer hohen Dimension des Gleichungssystems. Außerdem muss die räumliche Diskretisierung aufgrund der Beschreibung von Nukleation und Tropfenwachstum feiner gewählt werden als im einphasigen Fall. Die starke Kopplung der Differentialgleichungen der beiden Phasen ermöglicht keine klassische Unterrelaxation und kann für Überschallströmungen im Umfeld von Stößen die Stabilität des Lösungsverfahrens gefährden. Zudem wirft die Modellierung der dispersen Phase in einem Euler-Bezugssystem die Frage auf, wie der Wechsel eines Tropfens zwischen zwei Größengruppen im Zuge der Modellierung beschrieben werden kann. Die Berücksichtigung einer Geschwindigkeitsdifferenz zwischen den Phasen wird durch die Wahl einer Euler-Euler-Betrachtungsweise (E-E) hingegen begünstigt. Neben der Wahl des Bezugssystems ist auch die Formulierung des Gleichungssystems in Bezug auf mischungs- oder phasenbasierte Größen zu unterscheiden. Dabei wird bei einer mischungsbasierten Formulierung (M) die Anzahl der benötigten Differentialgleichungen anhand von zusätzlichen Schließbedingungen, wie sie exemplarisch in Gleichung 3.45 definiert wird, reduziert. Dies erscheint insbesondere dann als sinnvoll, wenn die untersuchte Fragestellung auf die Bestimmung globaler Variablen wie den Druck oder den Flüssigkeitsmassenanteil abzielt. Stehen hingegen die Strömungsgrößen der einzelnen Phasen im Zentrum der Betrachtung oder soll eine Berücksichtigung der Geschwindigkeitsdifferenz zwischen den Phasen, welche auch als Schlupf (S) bezeichnet wird, erfolgen, findet eine phasenbasierte Formulierung (P) Anwendung. Ein weiterer Einflussfaktor auf die Anzahl der zu lösenden Gleichungen ist die Art der Modellierung der dispersen Phase. Während die Annahme einer monodispersen Tropfengrößenverteilung (Mono) anhand zweier zusätzlicher Differentialgleichungen berücksichtigt werden kann, bedingt eine polydisperse Beschreibung (Poly) auf Basis statistischer Momente der Verteilung vier zusätzliche Gleichungen. Aus den in diesem Absatz erläuterten Wahlmöglichkeiten in Bezug auf das Bezugssystem der dispersen Phase, die Formulierung der physikalischen Größen sowie die Modellierung der dispersen Phase ergeben sich eine Vielzahl möglicher Kombinationen. Aus diesen erfolgt eine Auswahl von vier Varianten, deren

Tabelle 3: Ausgewählte Kombinationen von Modellierungsansätzen zur Beschreibung zweiphasiger Strömungen

	Bezugssystem der dispersen Phase		Physikalische Größen		Tropfengrößen- verteilung		Schlupf	
	Euler	Lagrange	Phase	Mischung	Poly	Mono	Ja	Nein
E-L-M-Poly		x		x	x			x
E-E-M-Mono	x			x		x		x
E-E-M-Poly	x			x	x			x
E-E-P-Poly-S	x		x		x		x	

Spezifikation Tabelle 3 entnommen werden kann. Als Auswahlkriterien dienen dabei neben der Berücksichtigung der zuvor erläuterten Modelllimitierungen zum einen die Relevanz für die in Kapitel 5 vorgestellten Validierungsfälle. Zum anderen erfolgt die Wahl der Varianten derart, dass eine Übertragbarkeit der im Weiteren für sie vorgestellten Herleitungen auf die verbliebenen Kombinationen sichergestellt ist. Die bisher aufgeführten Kombinationen von Modellierungsansätzen zielen auf die Beschreibung des Phasenwechsels anhand des Modells der homogenen Nicht-Gleichgewichtskondensation ab. Soll hingegen das Modell der homogenen Gleichgewichtskondensation zugrunde gelegt werden, bedarf es aufgrund des niedrigeren physikalischen Detaillierungsgrades keiner separaten Modellierung einer dispersen Phase. Das Gleichungssystem der einphasigen Strömung unter Anwendung einer Mischungsbasierten Formulierung in Form der in Gleichung 3.41 und Gleichung 3.42 formulierten Schließbedingungen ist unter dieser Annahme für die Beschreibung der Zweiphasenströmung hinreichend.

Spezifizierung der zu untersuchenden Gleichungssysteme

Aufgrund der Zielsetzung auf die Herleitung eines Schemas zur Berechnung der konvektiven Flussterme beschränkt sich die Spezifizierung der im Weiteren zu untersuchenden Gleichungssysteme auf die hierfür relevanten Vektorgrößen aus Gleichung 4.6. Im Sinne einer kompakten Darstellung werden die Herleitungen zudem nur in einer Dimension erläutert. Die für eine Formulierung in drei Dimensionen benötigten Vektoren und Matrizen können dem Anhang B entnommen werden. Beginnend mit der Definition des Gleichungssystems für eine einphasige Strömung erfolgt die Detaillierung der Varianten in einer Reihenfolge zunehmender Modellkomplexität.

Einphasig:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_k = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u H \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

Das Gleichungssystem zur Beschreibung einer einphasigen Strömung stellt den Ausgangspunkt der in dieser Arbeit vorgestellten Berücksichtigung einer zweiten Phase dar. Zudem muss jeder zweiphasige Modellierungsansatz für $y = 0 \wedge (n = 0 \vee \mu_k = 0)$ in das einphasige Modell übergehen. Wird in Gleichung 4.13 anstatt der einphasigen Größen die Mischungsdichte ρ_m sowie die spezifische innere Energie der Mischung e_m eingesetzt, wobei der Phasenwechsel anhand des Modells der homogenen Gleichgewichtskondensation beschrieben

wird, ist auch die Modellierung einer Zweiphasenströmung möglich. Durch Kombination des Einsetzens der Mischungsdichte mit einer Beschreibung der dispersen Phase in einem Lagrange-Bezugssystem kann zudem der physikalische Detaillierungsgrad durch Anwendung des Modells der homogenen Nicht-Gleichgewichtskondensation erhöht werden.

E-L-M-Poly:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{M} = \mathbf{Q}_L \quad \text{mit} \quad \mathbf{M} = \begin{pmatrix} y \\ \mu_0 \\ \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q}_L = \begin{pmatrix} \Lambda_N + \Lambda_W \\ \bar{J} \\ \mu_0 G(r_{20}) + \bar{J} r_{crit} \\ 2\mu_1 G(r_{20}) + \bar{J} r_{crit}^2 \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

mit:

$$\Lambda_N = \frac{4}{3} \pi \rho_l \bar{J} r_{crit}^3, \quad \Lambda_W = 4\pi \rho_l \mu_2 G(r_{20})$$

Dabei werden im Falle einer Modellierung der Tropfengrößenverteilung als polydispers die Differentialgleichungen des Flüssigkeitsmassenanteils sowie der statistischen Momente getrennt vom Gleichungssystem der kontinuierlichen Phase aus Gleichung 4.13 gelöst. Aufgrund des mitbewegten Bezugssystems ist hierzu eine zeitliche Integration der durch \mathbf{M} repräsentierten Größen der dispersen Phase nötig. Im Zuge der Definition des Quellterms im Lagrange-Bezugssystem \mathbf{Q}_L wird der Massenaustausch zwischen den Phasen in einen Anteil bezüglich der Nukleation Λ_N und einen Term des Tropfenwachstums Λ_W unterteilt.

E-E-M-Mono:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho_m \\ \rho_m u \\ \rho_m E_m \\ \rho_m y \\ \rho_m N_T \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_k = \begin{pmatrix} \rho_m u \\ \rho_m u^2 + p \\ \rho_m u H_m \\ \rho_m u y \\ \rho_m u N_T \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \rho_m (\Lambda_N + 4\pi r^2 \rho_l N_T G(r_{20})) \\ \rho_m \bar{J} \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

Die Wahl eines Euler-Bezugssystems zur Beschreibung der dispersen Phase führt unter der Annahme monodisperser Tropfen zu zwei zusätzlichen Differentialgleichungen. Für die Tropfenanzahl pro Masseneinheit der Mischung wird die Größe N_T eingeführt, welche für $i = 1$ mit dem aus Gleichung 3.44 bekannten Ausdruck übereinstimmt. Anders als im Falle einer Lagrange-Betrachtungsweise sind die Gleichungen der beiden Phasen nun direkt gekoppelt.

E-E-M-Poly:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho_m \\ \rho_m u \\ \rho_m E_m \\ \rho_m y \\ \rho_m \mu_0 \\ \rho_m \mu_1 \\ \rho_m \mu_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_k = \begin{pmatrix} \rho_m u \\ \rho_m u^2 + p \\ \rho_m u H_m \\ \rho_m u y \\ \rho_m u \mu_0 \\ \rho_m u \mu_1 \\ \rho_m u \mu_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \rho_m (\Lambda_N + \Lambda_W) \\ \rho_m \bar{J} \\ \rho_m (\mu_0 G(r_{20}) + \bar{J} r_{crit}) \\ \rho_m (2\mu_1 G(r_{20}) + \bar{J} r_{crit}^2) \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

Wird eine polydisperse Tropfengrößenverteilung angenommen, erhöht sich die Anzahl der zu lösenden Gleichungen gegenüber der monodispersen Betrachtung. Die übrige Struktur des Gleichungssystems in Euler-Betrachtungsweise ändert sich hingegen nicht.

E-E-P-Poly-S:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{U} &= \begin{pmatrix} \rho_m(1-y) \\ \rho_m(1-y)u_g \\ \rho_m(1-y)E_g \\ \rho_my \\ \rho_myu_l \\ \rho_myE_l \\ \rho_m\mu_0 \\ \rho_m\mu_1 \\ \rho_m\mu_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_k = \begin{pmatrix} \rho_m(1-y)u_g \\ \rho_m(1-y)u_g^2 + \frac{\rho_m}{\rho_g}(1-y)p \\ \rho_m(1-y)u_gH_g \\ \rho_myu_l \\ \rho_myu_l^2 + \frac{\rho_m}{\rho_l}yp \\ \rho_myu_lH_l \\ \rho_mu_l\mu_0 \\ \rho_mu_l\mu_1 \\ \rho_mu_l\mu_2 \end{pmatrix}, \quad (4.17) \\
 \mathbf{Q} &= \begin{pmatrix} -\Lambda_N - \Lambda_W \\ -\Lambda_W u_{int} - \frac{3}{4} \frac{\rho_my}{\rho_l \pi r^3} F_W \\ -\Lambda_W (H_{g,int} - h_v) \\ \Lambda_N + \Lambda_W \\ \Lambda_W u_{int} + \frac{3}{4} \frac{\rho_my}{\rho_l \pi r^3} F_W \\ \Lambda_W H_{l,int} \\ \rho_m \bar{J} \\ \rho_m (\mu_0 G(r_{20}) + \bar{J} r_{crit}) \\ \rho_m (2\mu_1 G(r_{20}) + \bar{J} r_{crit}^2) \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \begin{cases} u_{int} = yu_l + (1-y)u_g \\ H_{g,int} = h_{s,g} + u_{int}u_g - \frac{1}{2}u_g^2 \\ H_{l,int} = h_{s,l} + u_{int}u_l - \frac{1}{2}u_l^2 \end{cases}
 \end{aligned}$$

Eine nach Phasen getrennte Schreibweise des Gleichungssystems ermöglicht eine weitere Erhöhung des Detaillierungsgrades der Modellierung. Neben einer Berücksichtigung der Mechanismen von Nukleation und Tropfenwachstum, wie sie auch schon in den vorigen Varianten zu finden ist, wird nun zudem der Einfluss eines Impulsaustausches aufgrund einer vorherrschenden Geschwindigkeitsdifferenz sowie ein Wärmeaustausch zwischen den Phasen abgebildet. Die Definition der Geschwindigkeit u_{int} sowie der spezifischen totalen Enthalpie der gasförmigen $H_{g,int}$ und flüssigen Phase an der Phasengrenzfläche $H_{l,int}$ erfolgt in Anlehnung an die von Wróblewski und Dykas [174] vorgeschlagenen Formulierungen. Aufgrund der für das Modell der homogenen Nicht-Gleichgewichtskondensation getätigten Annahmen wird eine Druckdifferenz an der Phasengrenzfläche negiert. Um die durch Gleichung 4.13, Gleichung 4.15, Gleichung 4.16 und Gleichung 4.17 definierten nicht-linearen Gleichungssysteme lösen zu können, wird neben numerischen Verfahren zur räumlichen und zeitlichen Integration auch ein Schema zur Bestimmung der konvektiven Flüsse über den Zellgrenzen des infinitesimalen Kontrollvolumens benötigt. Das folgende Unterkapitel befasst sich daher mit der Erweiterung eines für einphasige Strömungen idealer Fluide etablierten Flussberechnungsschemas auf die Beschreibung nicht-idealer ein- und zweiphasiger Strömungen, wobei der Phasenwechsel entsprechend der vorgestellten Gleichungssysteme durch Ansätze unterschiedlicher Komplexität beschrieben wird.

4.2 Erweiterung eines Roe-Schemas für die Anwendung auf ein- und zweiphasige Strömungen unterschiedlicher Komplexität

Die numerische Integration des durch Gleichung 4.13 definierten hyperbolischen Gleichungssystems lässt sich unter Beschränkung auf Verfahren 1. Ordnung anhand einer expliziten Formulierung des Erhaltungsvektors des nächsten diskreten Zeitpunktes verdeutlichen:

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathbf{F}_{k,j+\frac{1}{2}} - \mathbf{F}_{k,j-\frac{1}{2}} \right) \quad \text{mit} \quad \Delta t = t^{n+1} - t^n, \quad \Delta x = x_{j+1} - x_j \quad (4.18)$$

Die zeitliche Dimension wird in Form eines hochgestellten Index bezeichnet, wobei die Integration zwischen zwei durch den Zeitschritt Δt getrennten Zeitpunkten n und $n+1$ erfolgt. Die räumliche Integration berücksichtigt zwei angrenzende infinitesimale Kontrollvolumina, welche durch die Indizes j und $j+1$ kenntlich gemacht werden. Die Differenz der räumlichen Koordinaten ihrer Mittelpunkte dient der Definition des Gitterpunktabstandes Δx . Geschlossen wird Gleichung 4.18 durch die unbekanntenen Größen der Flüsse über den beiden Zellgrenzen. Eine Visualisierung der verwendeten Nomenklatur kann dem linken Teil von Abbildung 15 entnommen werden. Um auf Grundlage der bekannten Erhaltungsgrößen \mathbf{U}_j^n die Größen des nächsten Zeitschrittes \mathbf{U}_j^{n+1} bestimmen zu können, ist somit die Kenntnis dieser Flussterme notwendig. Eine Lösung des durch Kombination von Gleichung 4.13 mit der folgenden Anfangswertbedingung definierten Riemann-Problems stellt hierfür einen geeigneten Lösungsansatz dar:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_k}{\partial x} &= \mathbf{Q} \\ \mathbf{U}(x, t = 0) &= \begin{cases} \mathbf{U}_L, & x < x_{j+\frac{1}{2}} \\ \mathbf{U}_R, & x > x_{j+\frac{1}{2}} \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (4.19)$$

Dabei kennzeichnet die räumliche Koordinate mit dem Index $j + \frac{1}{2}$ die Grenze zwischen den beiden betrachteten infinitesimalen Kontrollvolumina. Der Flussvektor steht stellvertretend für die Änderung der Größen zwischen den im rechten Teil von Abbildung 15 dargestellten nicht-linearen Wellen, welche durch eine Grenzfläche separiert werden. Die Erhaltungsgrößen links des durch diese Wellen begrenzten Bereiches bilden den Vektor \mathbf{U}_L , während der Erhaltungsvektor \mathbf{U}_R die Größen der rechten Seite enthält. Für die Grenzfläche an der mit $j - \frac{1}{2}$ indizierten räumlichen Koordinate lässt sich ein zu Gleichung 4.19 äquivalen-

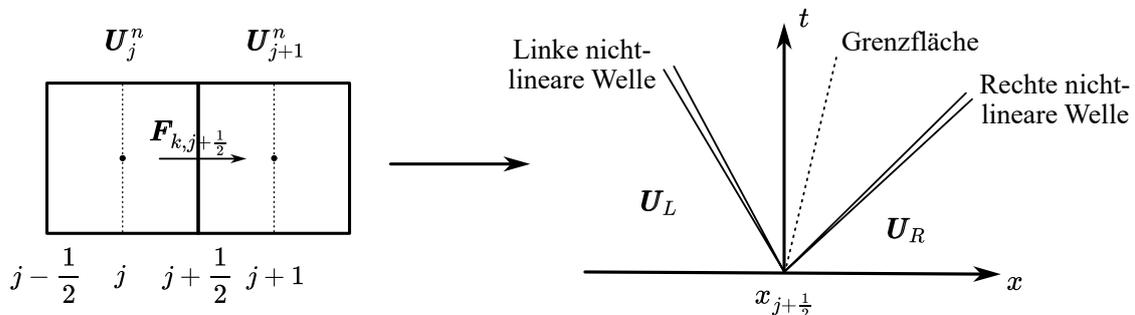


Abbildung 15: Nomenklatur zur Beschreibung des konvektiven Flusses über die Zellgrenze zweier angrenzender Kontrollvolumina (links) und allgemeine Definition eines Riemann-Problems (rechts)

tes Riemann-Problem formulieren. Die Lösung dieser Anfangswertprobleme erfolgt in der Regel anhand von approximativen Lösungsverfahren wie dem von Roe [127] formulierten Ansatz. Hierzu wird das Gleichungssystem zunächst linearisiert, wobei der konvektive Flussvektor in Abhängigkeit des Erhaltungsvektors zu formulieren ist:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \mathbf{A}(\mathbf{U}) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{U} = \mathbf{Q} \quad \text{mit} \quad \mathbf{A}(\mathbf{U}) = \frac{\partial \mathbf{F}_k}{\partial \mathbf{U}} \quad (4.20)$$

Die Matrix $\mathbf{A}(\mathbf{U})$ bezeichnet die Jacobi-Matrix und wird anhand der partiellen Ableitungen der Einträge des Flussvektors nach den Komponenten des Erhaltungsvektors definiert. Roe ersetzt die Jacobi-Matrix durch eine konstante Matrix $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R)$, welche die lokal vorherrschenden Größen der Zustände links und rechts der Grenzfläche beschreibt. Diese muss folgende Bedingungen erfüllen:

- (i) $\tilde{\mathbf{A}}$ definiert eine lineare Abbildung des Erhaltungsvektors \mathbf{U} auf den Flussvektor \mathbf{F}_k .
- (ii) Für $\mathbf{U}_L \rightarrow \mathbf{U} \wedge \mathbf{U}_R \rightarrow \mathbf{U}$ gilt $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{U})$.
- (iii) $\mathbf{F}_k(\mathbf{U}_L) - \mathbf{F}_k(\mathbf{U}_R) = \tilde{\mathbf{A}} \cdot (\mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L)$ für beliebige \mathbf{U}_L und \mathbf{U}_R .
- (iv) $\tilde{\mathbf{A}}$ hat ausschließlich reelle Eigenwerte $\tilde{\lambda}$ und ein vollständiges System linear unabhängiger rechter Eigenvektoren $\tilde{\mathbf{R}}$. Sie ist folglich diagonalisierbar.

Wie Toro [153] aufzeigt, ist die Definition einer diese Bedingungen erfüllenden Matrix für Gleichungssysteme, welche die Komplexität der dreidimensionalen Euler-Gleichungen übersteigen, sehr aufwendig. Der von Roe und Pike [128] vorgeschlagene Ansatz umgeht dieses Hindernis durch eine Definition der für die Bestimmung der konvektiven Flussterme benötigten Eigenstruktur anhand der exakten Jacobi-Matrix und anschließenden Einsetzens ausgewählter algebraisch gemittelter Größen. Die Eigenwerte der exakten Jacobi-Matrix lassen sich in Form der Nullstellen des charakteristischen Polynoms bestimmen:

$$\det(\mathbf{A}(\mathbf{U}) - \lambda \mathbf{I}) = 0 \quad \longrightarrow \quad \mathbf{A}(\mathbf{U})\mathbf{R} = \lambda \mathbf{R} \Leftrightarrow (\mathbf{A}(\mathbf{U}) - \lambda \mathbf{I})\mathbf{R} = 0 \quad (4.21)$$

Dabei bezeichnet \mathbf{I} die Einheitsmatrix. Die Eigenvektoren werden anhand ihrer definierenden Eigenschaft durch Lösen eines linearen Gleichungssystems je Eigenwert ermittelt. Die Eigenstruktur der exakten Jacobi-Matrix ist in der Folge in Form der Eigenwerte und Eigenvektoren eindeutig bestimmt. Durch die Definition sogenannter Roe-gemittelter Größen \tilde{q} erfolgt eine algebraische Verknüpfung der Variablen der linken und rechten Seite:

$$\tilde{\rho} = \sqrt{\rho_L \rho_R}, \quad \tilde{q} = \frac{\sqrt{\rho_L} q_L + \sqrt{\rho_R} q_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \quad \text{mit} \quad q \in \{u, H, a\} \quad (4.22)$$

Werden diese in die aus Gleichung 4.21 ermittelten Gleichungen der Eigenstruktur der exakten Jacobi-Matrix eingesetzt, ergibt sich die Eigenstruktur der Matrix $\tilde{\mathbf{A}}$. Auf diese Weise kann auf eine konkrete Herleitung dieser Matrix verzichtet werden. Der konvektive Fluss über die Zellgrenze wird durch Roe anhand des folgenden Ausdruckes formuliert:

$$\mathbf{F}_{k,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_k(\mathbf{U}_L) + \mathbf{F}_k(\mathbf{U}_R)) - \frac{1}{2} \sum_{d=1}^3 \tilde{\alpha}_d |\tilde{\lambda}_d|^* \tilde{\mathbf{R}}_d \quad (4.23)$$

Dabei bezeichnet $\tilde{\alpha}$ die Wellenstärke und $|\tilde{\lambda}|^*$ den korrigierten Eigenwert. Die Tilde über den Formelzeichen zeigt an, dass die jeweilige Größe durch Einsetzen der Roe-gemittelten Größen bestimmt wird. Die Notwendigkeit einer Korrektur der Eigenwerte ergibt sich aus der Möglichkeit einer Verletzung der Entropiebedingung für das von Roe formulierte Verfahren. Die Entropiebedingung fordert, dass die Änderung der Entropie über einem Stoß stets positiv sein muss. Um dies sicherzustellen schlagen Harten und Hyman [71] eine Korrektur der Eigenwerte entsprechend folgender Fallunterscheidung vor:

$$|\tilde{\lambda}_i|^* = \begin{cases} |\tilde{\lambda}_d| & |\tilde{\lambda}_d| \geq \delta_d^* \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{\lambda}_d^2}{\delta_d^*} + \delta_d^* \right) & |\tilde{\lambda}_d| < \delta_d^* \end{cases} \quad \text{mit} \quad \delta_d^* = \max \left[0, \tilde{\lambda}_d - \lambda_{L,d}, \lambda_{R,d} - \tilde{\lambda}_d \right] \quad (4.24)$$

Der Parameter δ^* dient als ein Maß für die Verletzung der Entropiebedingung. Er wird anhand einer Maximumsfunktion definiert, welche insbesondere die Positivität des Parameters sicherstellt. Die Funktionsparameter λ_L und λ_R werden durch Einsetzen der Erhaltungsgrößen der linken bzw. rechten Seite in die aus Gleichung 4.21 hergeleiteten Ausdrücke der Eigenwerte bestimmt. Die Auswertung erfolgt für jede Gleichung d separat. Ist der Betrag des Roe-gemittelten Eigenwertes größer als der Wert von δ^* , so wird die Entropiebedingung nicht verletzt und es ist folglich keine Korrektur erforderlich. Ist der Betrag jedoch kleiner, so wird der Eigenwert anhand der Formulierung in Gleichung 4.24 korrigiert. Die Wellenstärken können anhand einer Projektion der durch einen Sprung definierten Änderung der Erhaltungsgrößen zwischen linker und rechter Seite auf die Roe-gemittelten rechten Eigenvektoren ermittelt werden:

$$\Delta \mathbf{U} = \mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L = \sum_{d=1}^3 \tilde{\alpha}_d \tilde{\mathbf{R}}_d \quad (4.25)$$

Sie ergeben sich als Koeffizienten des durch diese Gleichung definierten linearen Gleichungssystems. Um die konvektiven Flussterme anhand des von Roe formulierten Verfahrens im Kontext eines numerischen Strömungslösers berechnen zu können, ist entsprechend Gleichung 4.23 eine Bestimmung von analytischen Ausdrücken für die Eigenwerte, die Eigenvektoren sowie die Roe-gemittelten Größen notwendig. Zur Bestimmung der Eigenstruktur muss zudem eine explizite Formulierung der Jacobi-Matrix anhand einer Linearisierung der das Riemann-Problem definierenden partiellen Differentialgleichungen formuliert werden. Roe gibt für die dreidimensionalen Euler-Gleichungen unter Annahme eines perfekten Gases entsprechende Ausdrücke an. Für die im Weiteren vorgestellten Erweiterungen für ein- und zweiphasige Strömungen nicht-idealer Fluide erfolgt eine Herleitung äquivalenter Formulierungen. Um für diese Fälle eine Aussage über die Erfüllung oder Verletzung der von Roe geforderten Bedingungen an die Matrix $\tilde{\mathbf{A}}$ treffen zu können, kann diese durch Anwendung einer Matrixtransformation auf die Diagonalmatrix der Roe-gemittelten Eigenwerte $\tilde{\mathbf{\Lambda}}$ ermittelt werden:

$$\tilde{\mathbf{A}} = \tilde{\mathbf{E}} \tilde{\mathbf{\Lambda}} \tilde{\mathbf{E}}^{-1} \quad \longrightarrow \quad \tilde{\boldsymbol{\alpha}} = \tilde{\mathbf{E}}^{-1} \Delta \mathbf{U} \quad (4.26)$$

Die Spalten der Eigenvektormatrix $\tilde{\mathbf{E}}$ enthalten die durch Einsetzen der Roe-gemittelten Größen definierten Eigenvektoren der Jacobi-Matrix $\tilde{\mathbf{A}}$. Aufgrund der Eigenschaft der Eigenvektoren als eine linear unabhängige Basis ist eine Invertierbarkeit der Eigenvektormatrix gegeben. Dies ermöglicht eine alternative Art der Berechnung der Wellenstärken, welche die Einträge des Vektors $\tilde{\boldsymbol{\alpha}}$ bilden.

Erweiterung für die Anwendung auf einphasige nicht-ideale Strömungen

Wie in Kapitel 2.2 bereits diskutiert, finden sich in der Literatur zahlreiche Ansätze zur Erweiterung des von Roe formulierten Ansatzes auf die Beschreibung einphasiger nicht-idealer Strömungen. Dabei stehen eine möglichst exakte Formulierung der in der Jacobi-matrix enthaltenen partiellen Ableitungen des Druckes sowie die eindeutige Definition der Roe-gemittelten Größen zumeist im Fokus der Herleitung. Eine solche Vorgehensweise bedingt zum einen durch die Festlegung der Definitionsgrößen eine Abhängigkeit des Schemas von der Art der gewählten Zustandsgleichung. Zum anderen weist die resultierende Formulierung der Jacobi-Matrix und ihrer Eigenstruktur einen hohen Grad an Komplexität auf, welcher sich sowohl in Bezug auf die Anwendbarkeit als auch auf die Robustheit des Verfahrens negativ auswirken kann. Das Ziel des GIRoe-Schemas (*Generalised Ideal Roe*) [146] ist es daher, eine Anwendbarkeit auf beliebige Zustandsgleichungen bei geringer Komplexität der Formulierung und möglichst hoher Robustheit des Verfahrens sicherzustellen. Hierzu wird zunächst vereinfachend angenommen, dass der Einfluss der Zustandsgleichung auf die Eigenstruktur der Jacobi-Matrix vernachlässigt werden kann. Die Herleitung erfolgt somit unter Anwendung der Gesetzmäßigkeiten perfekter Gase:

$$p = (\kappa - 1)\rho e, \quad a^2 = \frac{\kappa p}{\rho} \quad (4.27)$$

Durch eine Kombination dieses Ansatzes mit einer Auswertung der thermodynamischen Größen anhand einer vom Gesetz idealer Gase abweichenden Zustandsgleichung ist einzig eine Verletzung der von Roe geforderten Bedingung (iii) (s. Seite 52) möglich. Der vorgestellte Ansatz reiht sich somit in die Klasse der vereinfachten Roe-Schemata ein. Der Vektor des konvektiven Flusses lässt sich in Abhängigkeit des Erhaltungsvektors sowie des Isentropenexponenten eindeutig bestimmen:

$$\mathbf{F}_k(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} u_2 \\ \frac{1}{2}(3 - \kappa)\frac{u_2^2}{u_1} + u_3(\kappa - 1) \\ \kappa\frac{u_2 u_3}{u_1} - \frac{1}{2}(\kappa - 1)\frac{u_2^3}{u_1^2} \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

Die systematische Ableitung der Vektorkomponenten nach den Komponenten des Erhaltungsvektors liefert folgenden Ausdruck für die Jacobi-Matrix:

$$\mathbf{A}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2}(\kappa - 3)u^2 & (3 - \kappa)u & \kappa - 1 \\ \frac{1}{2}(\kappa - 2)u^3 - \frac{a^2 u}{\kappa - 1} & \frac{3 - 2\kappa}{2}u^2 + \frac{a^2}{\kappa - 1} & \kappa u \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

Unter Anwendung von Gleichung 4.21 kann die Eigenstruktur der Matrix in Form ihrer Eigenwerte und Eigenvektoren ermittelt werden:

$$\tilde{\lambda}_1 = \tilde{u} - \tilde{a}, \quad \tilde{\lambda}_2 = \tilde{u}, \quad \tilde{\lambda}_3 = \tilde{u} + \tilde{a} \quad (4.30)$$

$$\tilde{\mathbf{R}}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u} - \tilde{a} \\ \tilde{H} - \tilde{u}\tilde{a} \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{R}}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u} \\ \frac{1}{2}\tilde{u}^2 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{R}}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u} + \tilde{a} \\ \tilde{H} + \tilde{u}\tilde{a} \end{pmatrix} \quad (4.31)$$

Die Auswertung der Roe-gemittelten Schallgeschwindigkeit erfolgt anhand einer frei wählbaren Zustandsgleichung. Neben der klassischen Roe-gemittelten Dichte aus Gleichung 4.22 wird hierzu eine zusätzliche thermodynamische Zustandsgröße benötigt. Für Gibbs- oder Helmholtzbasierte Mehrparameter-Zustandsgleichungen wird daher die Roe-gemittelte Temperatur eingeführt:

$$\tilde{T} = \frac{\sqrt{\rho_L} T_L + \sqrt{\rho_R} T_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \quad \longrightarrow \quad \tilde{a} = a_{EOS}(\tilde{\rho}, \tilde{T}) \quad (4.32)$$

Soll das Verfahren Anwendung auf eine andersartige Zustandsgleichung finden, so ist die Definition der Roe-Mittlung aus Gleichung 4.22 auf das jeweilige Paar der Definitionsgrößen anzuwenden. Unabhängig von der gewählten Zustandsgleichung ist die thermodynamisch konsistente Bestimmung des Roe-gemittelten Zustandes sicherzustellen. Da ein thermodynamischer Zustand im Falle einer einphasigen Strömung durch ein unabhängiges Paar von Zustandsgrößen eindeutig bestimmt ist, sind genau zwei Roe-gemittelte thermodynamische Größen anhand des Ausdruckes aus Gleichung 4.22 zu bestimmen. Alle weiteren thermodynamischen Roe-gemittelten Größen müssen durch Auswertung der jeweiligen Zustandsgleichung bestimmt werden. Die in Gleichung 4.32 dargestellte Art der Definition der Roe-gemittelten Schallgeschwindigkeit hat dabei einen besonderen Einfluss auf die Stabilität des Verfahrens. Ein zunächst vergleichbar erscheinender Ansatz, welcher auf die Einführung der Roe-gemittelten Temperatur verzichtet, lautet:

$$a_L = a_{EOS}(\rho_L, T_L), \quad a_R = a_{EOS}(\rho_R, T_R) \quad \longrightarrow \quad \tilde{a} = \frac{\sqrt{\rho_L} a_L + \sqrt{\rho_R} a_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \quad \not\Leftarrow \quad (4.33)$$

Es zeigt sich jedoch, dass eine solche Annäherung der Roe-gemittelten Schallgeschwindigkeit anhand der jeweiligen Größen der linken und rechten Seite die Ausbildung numerischer Oszillationen bedingt. Diese beeinträchtigen die Konvergenz des Verfahrens negativ und könnten auf die Einführung eines weiteren durch Approximation bedingten numerischen Fehlers zurückzuführen sein. Bei der Erweiterung des GIRoe-Schemas auf die Beschreibung zweiphasiger nicht-idealer Strömungen unterschiedlicher Komplexität erlangt die Bestimmung der Roe-gemittelten Größen entsprechend Gleichung 4.32 daher eine besondere Relevanz.

Erweiterung für zweiphasige nicht-ideale Strömungen unterschiedlicher Komplexität

Soll das GIRoe-Schema zur Beschreibung zweiphasiger Strömungen herangezogen werden, entscheidet die Art der Modellierung des Phasenüberganges über die Notwendigkeit sowie das Ausmaß vorzunehmender Anpassungen. Wird der Phasenübergang anhand des Modells der homogenen Gleichgewichtskondensation beschrieben, ändert sich das zu lösende Gleichungssystem und somit auch die Formulierung des Flussberechnungsschemas nicht.

E-L-M-Poly:

Soll der Phasenwechsel in Form des Modells der homogenen Nicht-Gleichgewichtskondensation berücksichtigt werden, entscheidet die Wahl des Bezugssystems der dispersen Phase über die Notwendigkeit einer Erweiterung des Schemas. Wird ein Lagrange-Bezugssystem

gewählt, ist eine getrennte Lösung der Erhaltungsgleichungen der Zweiphasenmischung und der Transportgleichungen der dispersen Phase möglich. Auf eine Anpassung des GIRoe-Schemas kann in der Folge verzichtet werden. Es sind lediglich anstatt der Größen der einphasigen Strömung die Mischungsgrößen einzusetzen. Zur zeitlichen Integration der in Gleichung 4.14 definierten partiellen Differentialgleichungen der Momente der polydispersen Tropfengrößenverteilung kann ein explizites Euler-Verfahren angewendet werden:

$$\mathbf{M}^{n+1} = \mathbf{M}^n + \frac{\Delta x}{u_m^n} \cdot \mathbf{Q}_L^n \quad (4.34)$$

Die gewählte Schrittweite stellt eine Verknüpfung zwischen dem räumlichen Gitterpunktstand und der lokal vorherrschenden Geschwindigkeit der Zweiphasenmischung her. Da es sich bei der Strömungsgeschwindigkeit um eine Lösungsvariable der Erhaltungsgleichungen handelt, ist auf diese Weise eine einseitige Kopplung des Iterationsfortschrittes möglich.

E-E-M-Mono:

Sofern die disperse Phase in einem Euler-Bezugssystem beschrieben wird, kommt es zu einer Erweiterung des Gleichungssystems, welche eine Anpassung des Flussberechnungsschemas erfordert. Im Falle des durch Gleichung 4.15 formulierten mischungsbasierten Ansatzes unter Annahme einer monodispersen Tropfengrößenverteilung sind zwei zusätzliche Gleichungen zu lösen. Analog zur Vorgehensweise des GIRoe-Schemas erfolgt die Herleitung der Jacobi-Matrix unter Anwendung vereinfachender Annahmen:

$$\begin{aligned} p = p_g = p_l = \rho_g(\kappa - 1)e_g, \quad a_m^2 = \frac{p\kappa}{\rho_m} \\ \frac{1}{\rho_l} \ll 1 \rightarrow \rho_g = (1 - y)\rho_m, \quad e_m = (1 - y)e_g + ye_l \end{aligned} \quad (4.35)$$

Anhand der Verdampfungsenthalpie lässt sich ein analytischer Ausdruck für den im Zweiphasengemisch vorherrschenden Druck formulieren:

$$\begin{aligned} h_v = \frac{p}{\rho_g(\kappa - 1)} + \frac{p}{\rho_g} - \frac{1}{y} \left(e_m - \frac{(1 - y)p}{\rho_g(\kappa - 1)} \right) \\ \Leftrightarrow p = \rho_m \frac{(1 - y)(\kappa - 1)}{(1 + y(\kappa - 1))} \left(yh_v + E_m - \frac{1}{2}u_m^2 \right) \end{aligned} \quad (4.36)$$

Die Vektorkomponenten des Flussvektors aus Gleichung 4.15 können so in Abhängigkeit der Komponenten des Erhaltungsvektors dargestellt werden:

$$\mathbf{F}_k(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} u_2 \\ \frac{u_2^2}{u_1} + (\kappa - 1) \frac{1 - \frac{u_4}{u_1}}{1 + \frac{u_4}{u_1}(\kappa - 1)} \left(u_3 - \frac{1}{2} \frac{u_2^2}{u_1} + u_4 h_v \right) \\ u_2 \left[\frac{u_3}{u_1} + (\kappa - 1) \frac{1 - \frac{u_4}{u_1}}{1 + \frac{u_4}{u_1}(\kappa - 1)} \left(\frac{u_3}{u_1} - \frac{1}{2} \frac{u_2^2}{u_1} + \frac{u_4}{u_1} h_v \right) \right] \\ \frac{u_4 u_2}{u_1} \\ \frac{u_5 u_2}{u_1} \end{pmatrix} \quad (4.37)$$

Die Herleitung der Jacobi-Matrix resultiert in folgendem Ausdruck:

$$\mathbf{A}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & 2u_m - u_m(\kappa - 1)\varepsilon_2 & (\kappa - 1)\varepsilon_2 & a_{24} & 0 \\ a_{31} & a_{32} & \frac{\kappa u_m}{\kappa y - y + 1} & a_{34} & 0 \\ -yu_m & y & 0 & u_m & 0 \\ -N_T u_m & N_T & 0 & 0 & u_m \end{pmatrix} \quad (4.38)$$

mit

$$\begin{aligned} a_{21} &= y\varepsilon_1 + \left(\frac{1}{2}(\kappa - 1)\varepsilon_2 - 1\right)u_m^2, & a_{24} &= (\kappa - 1)\varepsilon_2 h_v - \varepsilon_1, \\ a_{31} &= u_m \left(y\varepsilon_1 + (\kappa - 1)\varepsilon_2 u_m^2 - (1 + (\kappa - 1)\varepsilon_2)E_m - (\kappa - 1)\varepsilon_2 y h_v \right), & (4.39) \\ a_{32} &= (1 + (\kappa - 1)\varepsilon_2)E_m + (\kappa - 1)\varepsilon_2 y h_v - \frac{3}{2}(\kappa - 1)\varepsilon_2 u_m^2, \\ a_{34} &= u_m((\kappa - 1)\varepsilon_2 h_v - \varepsilon_1) \end{aligned}$$

Bei den beiden Parametern ε_1 und ε_2 handelt es sich um Hilfsgrößen, welche zur besseren Lesbarkeit eingeführt werden:

$$\varepsilon_1 = \frac{a_m^2}{(1 - y)(1 + y(\kappa - 1))}, \quad \varepsilon_2 = \frac{(1 - y)^2}{a_m^2} \varepsilon_1 \quad (4.40)$$

Gilt $y = 0 \wedge (n = 0 \rightarrow N_T = 0)$ so wird gefordert, dass die Jacobi-Matrix aus Gleichung 4.38 in die Matrix der einphasigen Strömung aus Gleichung 4.29 übergeht. Ausgenommen hiervon sind lediglich die mit den Transportgleichungen verknüpften Spalten, da diese aufgrund der Nullzeilen des Flussvektors im Zuge der Matrixmultiplikation automatisch entfallen. Ein Einsetzen folgender Grenzbeziehungen in Gleichung 4.38 und Gleichung 4.39 liefert den Nachweis:

$$\varepsilon_1(y = 0) = a_g^2, \quad \varepsilon_2(y = 0) = 1 \quad (4.41)$$

Die Eigenstruktur der Jacobi-Matrix ergibt sich zu:

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}_1 &= \tilde{u}_m - \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a}_m, & \tilde{\lambda}_2 &= \tilde{u}_m, & \tilde{\lambda}_3 &= \tilde{u}_m + \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a}_m, & \tilde{\lambda}_{4,5} &= \tilde{u}_m & (4.42) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{R}}_1 &= \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u}_m - \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a}_m \\ \tilde{H}_m - \tilde{u}_m \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a}_m \\ \tilde{y} \\ \tilde{N}_T \end{pmatrix}, & \tilde{\mathbf{R}}_2 &= \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u}_m \\ \frac{1}{2} \tilde{u}_m^2 + \tilde{y} \tilde{h}_v \\ \tilde{y} \\ 0 \end{pmatrix}, & \tilde{\mathbf{R}}_3 &= \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u}_m + \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a}_m \\ \tilde{H}_m + \tilde{u}_m \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a}_m \\ \tilde{y} \\ \tilde{N}_T \end{pmatrix}, & (4.43) \\ \tilde{\mathbf{R}}_4 &= \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u}_m \\ \tilde{H}_m - (1 - \tilde{y}) \tilde{h}_v \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \tilde{\mathbf{R}}_5 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Ein Vergleich dieser Eigenwerte und Eigenvektoren mit denen für den Fall einer einphasigen Strömung in Gleichung 4.30 und Gleichung 4.31 zeigt eine strukturelle Ähnlichkeit. Auch kann für die Eigenstruktur analog zur Jacobi-Matrix die Überführbarkeit für den einphasigen Grenzfall nachgewiesen werden. Aufgrund der zusätzlichen Transportgleichungen ist die algebraische Roe-Mittelung neben der Temperatur auch auf den Flüssigkeitsmassenanteil sowie die massenbezogene Tropfenanzahl anzuwenden:

$$\begin{aligned} \tilde{q} &= \frac{\sqrt{\rho_L} q_L + \sqrt{\rho_R} q_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \quad \text{mit} \quad q \in \{T, y, N_T\} \\ \longrightarrow \quad \tilde{a}_m &= a_{EOS}(\tilde{\rho}_m, \tilde{T}_m), \quad \tilde{h}_v = h_{v,EOS}(\tilde{T}_m), \quad \tilde{\kappa} \approx \kappa_{pv,EOS}(\tilde{\rho}_m, \tilde{T}_m) \end{aligned} \quad (4.44)$$

Zudem ist zusätzlich zur Roe-gemittelten Schallgeschwindigkeit auch die Roe-gemittelte Verdampfungsenthalpie anhand der Zustandsgleichung zu bestimmen. Eine Besonderheit bildet die Multiplikation der Schallgeschwindigkeit der Mischung mit der Wurzel des Hilfsparameters ε_2 . Dieser wird entsprechend Gleichung 4.40 sowohl durch den Flüssigkeitsmassenanteil als auch den Isentropenexponenten definiert. Aufgrund der in Kapitel 3.3 aufgezeigten Abweichung des isentropen Druck-Volumen-Exponenten vom Verhältnis spezifischer Wärmekapazitäten im Falle kompressibler nicht-idealer Fluide erscheint eine Verwendung des Isentropenexponenten, welcher als Verhältnis spezifischer Wärmekapazitäten ausgewertet wird, problematisch. Aufgrund dessen erfolgt eine Näherung des Isentropenexponenten durch den isentropen Druck-Volumen-Exponenten. Die Sensitivität des Gesamtschemas in Bezug auf die gewählte Formulierung wird im Zuge der Validierung überprüft.

E-E-M-Poly:

Soll der Detaillierungsgrad der Modellierung der dispersen Phase durch Beschreibung der Tropfengrößenverteilung als polydispers erhöht werden, so nimmt die Anzahl der Gleichungen gegenüber der monodispersen Beschreibung weiter zu. Neben den Erhaltungsgleichungen der Mischung sind gleichzeitig die Differentialgleichung des Flüssigkeitsmassenanteils sowie die Gleichungen der ersten drei statistischen Momente der Verteilung zu lösen. Die zuvor in Gleichung 4.35 für die monodisperse Betrachtungsweise getätigten Annahmen behalten auch für die polydisperse Modellierung ihre Gültigkeit. Der in Gleichung 4.16 dargestellte Flussvektor kann somit analog der zuvor erläuterten Vorgehensweise anhand analytischer Ausdrücke der Komponenten des Erhaltungsvektors formuliert werden:

$$\mathbf{F}_k(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} u_2 \\ \frac{u_2^2}{u_1} + (\kappa - 1) \frac{1 - \frac{u_4}{u_1}}{1 + \frac{u_4}{u_1} (\kappa - 1)} \left(u_3 - \frac{1}{2} \frac{u_2^2}{u_1} + u_4 h_v \right) \\ u_2 \left[\frac{u_3}{u_1} + (\kappa - 1) \frac{1 - \frac{u_4}{u_1}}{1 + \frac{u_4}{u_1} (\kappa - 1)} \left(\frac{u_3}{u_1} - \frac{1}{2} \frac{u_2^2}{u_1} + \frac{u_4}{u_1} h_v \right) \right] \\ \frac{u_4 u_2}{u_1} \\ \frac{u_5 u_2}{u_1} \\ \frac{u_6 u_2}{u_1} \\ \frac{u_7 u_2}{u_1} \end{pmatrix} \quad (4.45)$$

Dabei fällt auf, dass die ersten drei Zeilen des Vektors identisch zu denen des Flussvektors der monodispersen Betrachtungsweise in Gleichung 4.37 sind. Da in beiden Fällen eine Mischungsbasierte Schreibweise verwendet wird und die Flussterme der Mischung zudem linear unabhängig von den statistischen Momenten der Tropfengrößenverteilung sind, erscheint diese Beobachtung plausibel. Dies resultiert in einer möglichen Unterteilung der Jacobi-Matrix in zwei diagonalisierbare Submatrizen:

$$\mathbf{A}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & 2u_m - u_m(\kappa - 1)\varepsilon_2 & (\kappa - 1)\varepsilon_2 & a_{24} & 0 & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & \frac{\kappa u_m}{\kappa y - y + 1} & a_{34} & 0 & 0 & 0 \\ -y u_m & y & 0 & u_m & 0 & 0 & 0 \\ -\mu_0 u_m & \mu_0 & 0 & 0 & u_m & 0 & 0 \\ -\mu_1 u_m & \mu_1 & 0 & 0 & 0 & u_m & 0 \\ -\mu_2 u_m & \mu_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_m \end{pmatrix} \quad (4.46)$$

Die symbolischen Matrixkomponenten a_{ij} der die Erhaltungsgleichungen der Mischung repräsentierenden Submatrix stimmen mit den in Gleichung 4.39 und Gleichung 4.40 formulierten Ausdrücken überein. Folglich kann auf einen Nachweis der Überführbarkeit des Schemas für den Grenzfall der einphasigen Strömung verzichtet werden. Die Eigenstruktur der Jacobi-Matrix ist durch folgende Eigenwerte und Eigenvektoren gegeben:

$$\tilde{\lambda}_1 = \tilde{u}_m - \sqrt{\varepsilon_2 \tilde{a}_m}, \quad \tilde{\lambda}_2 = \tilde{u}_m, \quad \tilde{\lambda}_3 = \tilde{u}_m + \sqrt{\varepsilon_2 \tilde{a}_m}, \quad \tilde{\lambda}_{4,5,6,7} = \tilde{u}_m \quad (4.47)$$

$$\tilde{\mathbf{R}}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u}_m - \sqrt{\varepsilon_2 \tilde{a}_m} \\ \tilde{H}_m - \tilde{u}_m \sqrt{\varepsilon_2 \tilde{a}_m} \\ \tilde{y} \\ \tilde{\mu}_0 \\ \tilde{\mu}_1 \\ \tilde{\mu}_2 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{R}}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u}_m \\ \frac{1}{2} \tilde{u}_m^2 + \tilde{y} \tilde{h}_v \\ \tilde{y} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{R}}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u}_m + \sqrt{\varepsilon_2 \tilde{a}_m} \\ \tilde{H}_m + \tilde{u}_m \sqrt{\varepsilon_2 \tilde{a}_m} \\ \tilde{y} \\ \tilde{\mu}_0 \\ \tilde{\mu}_1 \\ \tilde{\mu}_2 \end{pmatrix}, \quad (4.48)$$

$$\tilde{\mathbf{R}}_4 = \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u}_m \\ \tilde{H}_m - (1 - \tilde{y}) \tilde{h}_v \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{R}}_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{R}}_6 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{R}}_7 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Die zusätzlichen Gleichungen der statistischen Momente bedingen eine weitere Erhöhung der Anzahl Roe-gemittelter Größen. Die algebraische Roe-Mittelung findet Anwendung auf die Temperatur, den Flüssigkeitsmassenanteil sowie die ersten drei statistischen Momente. Die Auswertung der gewählten Zustandsgleichung ermöglicht zudem die Bestimmung der Roe-gemittelten Schallgeschwindigkeit sowie der Roe-gemittelten Verdampfungsenthalpie.

Analog zum monodispersen Fall wird der zur Bestimmung des Hilfsparameters ε_2 benötigte Isentropenexponent durch den isentropen Druck-Volumen-Exponenten genähert.

$$\begin{aligned} \tilde{q} &= \frac{\sqrt{\rho_L q_L} + \sqrt{\rho_R q_R}}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \quad \text{mit} \quad q \in \{T, y, \mu_0, \mu_1, \mu_2\} \\ \rightarrow \quad \tilde{a}_m &= a_{EOS}(\tilde{\rho}_m, \tilde{T}_m), \quad \tilde{h}_v = h_{v,EOS}(\tilde{T}_m), \quad \tilde{\kappa} \approx \kappa_{pv,EOS}(\tilde{\rho}_m, \tilde{T}_m) \end{aligned} \quad (4.49)$$

E-E-P-Poly-S:

Neben einer Mischungsbasierten Schreibweise lassen sich die Erhaltungsgleichungen der beiden Phasen auch separat formulieren. Das resultierende phasenbasierte Gleichungssystem aus Gleichung 4.17 repräsentiert neben dem höchsten Detaillierungsgrad in Bezug auf die Modellierung der dispersen Phase auch den höchsten Grad an Komplexität des Gleichungssystems. Durch die Formulierung der Impulserhaltung für beide Phasen kann insbesondere das Vorliegen unterschiedlicher Phasengeschwindigkeiten Berücksichtigung finden. Für die Herleitung der Jacobi-Matrix werden folgende vereinfachende Annahmen getroffen:

$$p = p_g = p_l = \rho(\kappa_g - 1)e_g, \quad a_g^2 = \frac{p\kappa_g}{\rho_g}, \quad \rho_m = (1-y)\rho_g + y\rho_l, \quad \rho_l = const. \quad (4.50)$$

Anders als zuvor wird die flüssige Phase nun im Zuge der Herleitung als inkompressibel modelliert. Da eine Ableitung der Flüssigkeitsdichte nach einer beliebigen Größe unter dieser Annahme stets den Wert null liefert, kann die Bestimmung der phasenbasierten Jacobi-Matrix auf diese Weise vereinfacht werden. Um die Einhaltung der in Folge des Vorliegens eines mechanischen Gleichgewichtes geforderten Druckgleichheit für die phasenbasierte Schreibweise sicherstellen zu können, wird bei der Formulierung des Flussvektors eine von den bisherigen Herleitungen abweichende Vorgehensweise gewählt:

$$\mathbf{F}_k(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} u_2 \\ \frac{u_2^2}{u_1} + \varphi_g p \\ \frac{u_2}{u_1} (u_3 + \varphi_g p) \\ u_5 \\ \frac{u_5^2}{u_4} + \varphi_l p \\ \frac{u_5}{u_4} (u_6 + \varphi_l p) \\ \frac{u_7 u_5}{u_4} \\ \frac{u_8 u_5}{u_4} \\ \frac{u_9 u_5}{u_4} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \begin{cases} \varphi_g = (1-y) \frac{\rho_m}{\rho_g} \\ \varphi_l = y \frac{\rho_m}{\rho_l} \end{cases} \quad (4.51)$$

Toumi [157] schlägt zur Bestimmung der Jacobi-Matrix eines Systems aus sechs Differentialgleichungen unter Berücksichtigung eines Impulsaustausches zwischen den Phasen eine Aufteilung des Flussvektors in zwei Arten von Termen vor. Während die Mehrzahl der Einträge des Flussvektors wie zuvor in Abhängigkeit der Komponenten des Erhaltungsvektors ausgedrückt werden, verbleibt der Druck nun ebenfalls als explizite Größe. Die Koeffizienten der Druckterme können im Sinne einer Strukturvereinfachung in Form der Volumenanteile der gasförmigen Phase φ_g sowie der flüssigen Phase φ_l ausgedrückt werden. Anhand die-

ser Vorgehensweise ist eine eindeutige analytische Definition der Jacobi-Matrix möglich. Im Zuge der hierzu erforderlichen partiellen Ableitung der Druckterme erfolgt zunächst eine Aufspaltung anhand der Produktregel:

$$\frac{\partial}{\partial u_i} (\varphi_{g/l} \cdot p)_i = \frac{\partial \varphi_{g/l}}{\partial u_i} \cdot p + \frac{\partial p}{\partial u_i} \cdot \varphi_{g/l} \quad (4.52)$$

Durch anschließende Anwendung der Kettenregel in Kombination mit den in Gleichung 4.50 getätigten Annahmen lässt sich die Jacobi-Matrix wie folgt formulieren:

$$\mathbf{A}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \kappa_g - 1 & a_{24} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & \kappa_g u_g & 0 & a_{35} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & 2u_l & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{61} & a_{62} & a_{63} & a_{64} & a_{65} & u_l & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\mu_0 u_l}{y} & \frac{\mu_0}{y} & 0 & u_l & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\mu_1 u_l}{y} & \frac{\mu_1}{y} & 0 & 0 & u_l & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\mu_2 u_l}{y} & \frac{\mu_2}{y} & 0 & 0 & 0 & u_l \end{pmatrix} \quad (4.53)$$

mit

$$\begin{aligned} a_{21} &= \frac{1}{2}(\kappa_g - 3)u_g^2, & a_{22} &= (3 - \kappa_g)u_g, & a_{24} &= \frac{\rho_g a_g^2}{\kappa_g \rho_l}, \\ a_{31} &= \frac{1}{2}(\kappa_g - 2)u_g^3 - \frac{a_g^2 u_g}{\kappa_g - 1}, & a_{32} &= \frac{3 - 2\kappa_g}{2}u_g^2 + \frac{a_g^2}{\kappa_g - 1}, & a_{52} &= (1 - \kappa_g) \frac{y}{1 - y} \frac{\rho_l}{\rho_g} u_g, \\ a_{64} &= u_l \left(\frac{a_g^2 \rho_g^2}{\kappa_g \rho_l \rho_m (1 - y)} - h_l - \frac{1}{2}u_l^2 \right), & a_{35} &= \frac{\rho_g a_g^2}{\kappa_g \rho_l}, & a_{51} &= \frac{(\kappa_g - 1)}{2} \frac{y}{1 - y} \frac{\rho_l}{\rho_g} u_g^2, \\ a_{53} &= (\kappa_g - 1) \frac{y}{1 - y} \frac{\rho_l}{\rho_g}, & a_{54} &= \frac{y}{1 - y} \frac{a_g^2}{\kappa_g} - u_l^2, & a_{61} &= \frac{(\kappa_g - 1)}{2} \frac{y}{1 - y} \frac{\rho_l}{\rho_g} u_g^2 u_l, \\ a_{62} &= (1 - \kappa_g) \frac{y}{1 - y} \frac{\rho_l}{\rho_g} u_g u_l, & a_{63} &= (\kappa_g - 1) \frac{y}{1 - y} \frac{\rho_l}{\rho_g} u_l, & a_{65} &= h_l + \frac{1}{2}u_l^2 - \frac{\rho_g a_g^2}{\kappa_g \rho_l} \end{aligned}$$

Durch die getrennte Formulierung der beiden Phasen ist die Überführbarkeit der Matrix für den Grenzfall der einphasigen Strömung leicht zu erkennen. Werden die physikalischen Größen der flüssigen Phase sowie die statistischen Momente zu null gesetzt, nehmen die Einträge der Submatrix in der oberen linken Ecke die Werte der Jacobi-Matrix im einphasigen Fall an. Zudem werden die Einträge unterhalb dieser Submatrix ausnahmslos zu null, sodass die Matrix vollständig in das Gleichungssystem der einphasigen Strömung übergeht. Die Bestimmung der Eigenstruktur der Jacobi-Matrix ergibt neun Eigenwerte:

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}_1 &= \tilde{u}_g - \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g, & \tilde{\lambda}_2 &= \tilde{u}_g, & \tilde{\lambda}_3 &= \tilde{u}_g + \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g, \\ \tilde{\lambda}_4 &= 2\tilde{u}_l - \tilde{u}_g, & \tilde{\lambda}_5 &= \tilde{u}_l, & \tilde{\lambda}_6 &= \tilde{u}_g, & \tilde{\lambda}_{7,8,9} &= \tilde{u}_l \end{aligned} \quad (4.54)$$

Die zugehörigen Eigenvektoren lauten:

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathbf{R}}_1 &= \begin{pmatrix} (1-\tilde{y})\frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_g}\left(1-\frac{\tilde{u}_g-\tilde{u}_l}{\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}}\right) \\ (1-\tilde{y})\frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_g}\left(1-\frac{\tilde{u}_g-\tilde{u}_l}{\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}}\right)(\tilde{u}_g-\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}) \\ (1-\tilde{y})\frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_g}\left(1-\frac{\tilde{u}_g-\tilde{u}_l}{\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}}\right)(\tilde{H}_g-\tilde{u}_g\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g})+\tilde{y}\frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l}\left(1+\frac{\tilde{u}_g-\tilde{u}_l}{\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}}\right)\frac{\tilde{p}}{\tilde{\rho}_l} \\ \tilde{y}\frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l}\left(1+\frac{\tilde{u}_g-\tilde{u}_l}{\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}}\right) \\ \tilde{y}\frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l}\left(1+\frac{\tilde{u}_g-\tilde{u}_l}{\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}}\right)(\tilde{u}_g-\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}) \\ \tilde{y}\frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l}\left(1+\frac{\tilde{u}_g-\tilde{u}_l}{\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}}\right)(\tilde{H}_l-\tilde{u}_l\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g})-\tilde{y}\frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l}\left(1+\frac{\tilde{u}_g-\tilde{u}_l}{\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}}\right)\frac{\tilde{p}}{\tilde{\rho}_l} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.55) \\
 \tilde{\mathbf{R}}_2 &= \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u}_g \\ \frac{1}{2}\tilde{u}_g^2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{R}}_3 = \begin{pmatrix} (1-\tilde{y})\frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_g}\left(1+\frac{\tilde{u}_g-\tilde{u}_l}{\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}}\right) \\ (1-\tilde{y})\frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_g}\left(1+\frac{\tilde{u}_g-\tilde{u}_l}{\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}}\right)(\tilde{u}_g+\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}) \\ (1-\tilde{y})\frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_g}\left(1+\frac{\tilde{u}_g-\tilde{u}_l}{\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}}\right)(\tilde{H}_g+\tilde{u}_g\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g})+\tilde{y}\frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l}\left(1-\frac{\tilde{u}_g-\tilde{u}_l}{\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}}\right)\frac{\tilde{p}}{\tilde{\rho}_l} \\ \tilde{y}\frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l}\left(1-\frac{\tilde{u}_g-\tilde{u}_l}{\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}}\right) \\ \tilde{y}\frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l}\left(1-\frac{\tilde{u}_g-\tilde{u}_l}{\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}}\right)(\tilde{u}_g+\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}) \\ \tilde{y}\frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l}\left(1-\frac{\tilde{u}_g-\tilde{u}_l}{\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}}\right)(\tilde{H}_l+\tilde{u}_l\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g})-\tilde{y}\frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l}\left(1-\frac{\tilde{u}_g-\tilde{u}_l}{\sqrt{\varepsilon_3\tilde{a}_g}}\right)\frac{\tilde{p}}{\tilde{\rho}_l} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
 \tilde{\mathbf{R}}_4 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 2\tilde{u}_l-\tilde{u}_g \\ \frac{\tilde{p}}{\tilde{\rho}_g\tilde{a}_g}\left(\tilde{H}_g-\frac{1}{2}\tilde{u}_g^2\right)+\tilde{u}_g\left(\frac{1}{2}\tilde{u}_g-2\tilde{u}_l\right) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \tilde{\mu}_0 \\ \tilde{\mu}_1 \\ \tilde{\mu}_2 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{R}}_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \tilde{u}_l \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{R}}_6 = \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u}_g \\ \frac{\tilde{p}}{\tilde{\rho}_g\tilde{a}_g}\left(\tilde{H}_g-\frac{1}{2}\tilde{u}_g^2\right)+\frac{1}{2}\tilde{u}_g^2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \tilde{\mu}_0 \\ \tilde{\mu}_1 \\ \tilde{\mu}_2 \end{pmatrix}, \\
 \tilde{\mathbf{R}}_7 &= (0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0)^\top, \quad \tilde{\mathbf{R}}_8 = (0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0)^\top, \\
 \tilde{\mathbf{R}}_9 &= (0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1)^\top \quad \text{mit} \quad \varepsilon_3 = \frac{(1-\tilde{y})\tilde{\rho}_l^2 + \tilde{y}\tilde{\rho}_g^2}{\tilde{\rho}_g\tilde{\rho}_l}
 \end{aligned}$$

Der Parameter ε_3 dient analog zu den zuvor eingeführten Hilfsgrößen einer verbesserten Lesbarkeit. Die Bestimmung der zusätzlich zu den durch Gleichung 4.22 definierten Roe-gemittelten Größen benötigten Variablen beschränkt sich neben den für die polydisperse Betrachtungsweise typischen Vertretern auf die Roe-gemittelte Schallgeschwindigkeiten der Gasphase sowie den Roe-gemittelten Druck:

$$\tilde{q} = \frac{\sqrt{\bar{\rho}_L}q_L + \sqrt{\bar{\rho}_R}q_R}{\sqrt{\bar{\rho}_L} + \sqrt{\bar{\rho}_R}} \quad \text{mit} \quad q \in \{T, y, \mu_0, \mu_1, \mu_2\} \quad (4.56)$$

$$\longrightarrow \quad \tilde{a}_g = a_{EOS}(\tilde{\rho}_g, \tilde{T}_g), \quad \tilde{p} = p_{EOS}(\tilde{\rho}_g, \tilde{T}_g)$$

Dabei ist insbesondere in diesem Fall aufgrund der Vielzahl der zu bestimmenden Größen auf eine Einhaltung der zuvor erläuterten thermodynamischen Konsistenz zu achten. Ein Vergleich der Struktur der Eigenwerte und Eigenvektoren der phasenbasierten Schreibweise mit denen des in Bezug auf die Modellierung der Tropfengrößenverteilung vergleichbaren mischungsbasierten Ansatzes in Gleichung 4.48 verdeutlicht die algebraische Ähnlichkeit. In beiden Fällen wird die für das Roe-Schema zentrale Größe der Schallgeschwindigkeit mit einem Faktor multipliziert, welcher eine dominierende Abhängigkeit vom Flüssigkeitsmassenanteil aufweist. Für alle betrachteten Varianten inklusive der einphasigen Formulierung ist eine charakteristische Systematik der Eigenstrukturen erkennbar. Dabei nimmt mit zunehmendem Detaillierungsgrad der thermophysikalischen Modellierung des Phasenwechsels lediglich die Anzahl der zu berücksichtigenden Variablen und Terme zu. Die hergeleiteten Erweiterungen des GIRoe-Schemas für zweiphasige nicht-ideale Strömungen unterschiedlicher Komplexität zeichnen sich somit durch drei maßgebliche Eigenschaften aus:

- (i) Ihre Herleitung basiert auf vereinfachenden Annahmen bezüglich der Modellierung der thermodynamischen Zustandsgrößen, sodass die resultierenden Matrizen eine verhältnismäßig geringe Komplexität aufweisen.
- (ii) Durch die Auswertung jeglicher thermophysikalischer Größen anhand einer beliebigen eindeutig gewählten Zustandsgleichung werden jegliche Vereinfachungen auf den Bereich der Herleitung isoliert. Dies wird insbesondere durch die Bestimmung ausgewählter Roe-gemittelter Größen anhand der Zustandsgleichung deutlich.
- (iii) Jede der vorgestellten Formulierungen geht unter Negation einer flüssigen Phase in das einphasige GIRoe-Schema über. Zudem weisen ihre Eigenstrukturen eine charakteristische Form auf, welche unabhängig von der Art der gewählten Modellierung der flüssigen Phase erhalten bleibt.

Die vorgestellten Verfahren werden daher im Sinne einer einheitlichen Nomenklatur im Folgenden als *Phase Generalised Ideal Roe* (PGIRoe) Schema bezeichnet. Da das GIRoe-Schema ebenfalls in dieser Bezeichnung aufgeht, ist das PGIRoe-Schema in der Lage ein- und zweiphasige Strömungen kompressibler nicht-idealer Fluide zu beschreiben. Für die Modellierung der flüssigen Phase kann aus einer Vielzahl unterschiedlicher Modellierungsansätze gewählt werden. Um die vorgestellten Varianten des Flussberechnungsschemas anhand physikalischer Testfälle validieren zu können, erfolgt eine modulare Implementierung in den Strömungslöser TRACE.

4.3 Implementierung des PGI_{Roe}-Schemas in den Strömungslöser TRACE

TRACE ist ein vom DLR spezifisch für die Anwendung im Bereich von Turbomaschinen entwickelter dichtebasierter Strömungslöser. Er findet sowohl im akademischen als auch im industriellen Umfeld Anwendung zur Untersuchung von Fragestellungen der Aerodynamik, Aeroelastik, Aeroakustik sowie Aerothermodynamik. Hierzu werden die dreidimensionalen Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen gelöst. Während für die Bestimmung der konvektiven Flussterme ein Roe-Schema mit einer Genauigkeit zweiter Ordnung verwendet wird, erfolgt die Diskretisierung der viskosen Flussterme anhand zentraler Differenzen zweiter Ordnung. Für die räumliche Diskretisierung stehen eine Reihe von Verfahren unterschiedlicher Genauigkeit zur Verfügung. Zu den Formulierungen zweiter Ordnung zählt unter anderem ein *Monotonic Upstream-centered Scheme for Conservation Laws* (MUSCL). Die zeitliche Integration des Gleichungssystems kann in Form eines Gauß-Seidel-Ansatzes sowie einer *predictor-corrector*-Formulierung anhand impliziter Verfahren erster und zweiter Ordnung erfolgen. Soll die Strömung zeitlich aufgelöst untersucht werden, finden zur zeitlichen Integration Verfahren höherer Ordnung Anwendung. TRACE ist zudem in der Lage sowohl für strukturierte als auch unstrukturierte Gitter sowie Kombinationen dieser beiden Arten entsprechende Lösungen des Strömungsfeldes zu berechnen. Auch stehen eine Vielzahl von Turbulenzmodellen zur Auswahl. Eine wesentliche Limitierung der Anwendbarkeit des Strömungslösers stellt jedoch die ihm zugrundeliegende Modellierung der thermophysikalischen Größen dar.

Auswertung thermophysikalischer Größen in TRACE

Die Gasmodelle in TRACE sind auf die Modelle des kalorisch perfekten sowie des thermisch perfekten Gases beschränkt. Folglich steht als thermische Zustandsgleichung ausschließlich das Gesetz idealer Gase zur Verfügung. Im Falle einer Modellierung als thermisch perfektes Gas werden die von der Temperatur abhängigen spezifischen Wärmekapazitäten durch fluidspezifische Koeffizienten charakterisierte Polynome bestimmt. Für die Berechnung der dynamischen Viskosität wird eine von Sutherland formulierte Modellgleichung herangezogen, welche neben einer fluidspezifischen Konstante auch die Temperatur als Parameter enthält. Eine Beschreibung des Fluides als nicht-ideal ist auf Grundlage der in TRACE implementierten Modelle hingegen nicht möglich. Aufgrund der Zielsetzung der vorliegenden Arbeit wird daher zunächst die Implementierung eines zusätzlichen Gasmodells für nicht-ideale Fluide vorgenommen. Wie in Kapitel 3.2 aufgezeigt wird, ermöglichen Mehrparameter-Zustandsgleichungen eine Bestimmung der thermophysikalischen Größen mit hoher Genauigkeit. Sie werden daher für die Beschreibung nicht-idealer Fluide in TRACE ausgewählt. Da es sich bei Mehrparameter-Zustandsgleichungen um fluidspezifische Formulierungen handelt, bedingt diese Wahl die Notwendigkeit der Implementierung einer Zustandsgleichung pro Fluidspezies. Zudem liegen im Zuge der iterativen Lösung unterschiedliche Kombinationen von Zustandsgrößen vor, sodass neben der expliziten Form der Zustandsgleichung weitere iterative Routinen benötigt werden. Soll eine direkte Implementierung all dieser Gleichungen und Routinen in TRACE erfolgen, erscheint die Beschränkung auf eine geringe Anzahl von Fluidspezies unumgänglich. Durch die Einbindung der REFPROP-Datenbank des *National Institute of Standards and Technology* (NIST) [93] kann auf eine solche Limitierung jedoch verzichtet werden. Die im Weiteren präsentierten Ergebnisse basieren auf Version 10 dieser Datenbank. Sie enthält 147 Reinstoffe sowie eine Vielzahl von Mischungen, wobei für

jedes Fluid neben den Zustandsgleichungen sowie den iterativen Routinen auch entsprechende Modellgleichungen zur Bestimmung der Transportgrößen zur Verfügung stehen. Durch ein entsprechendes Interface können die in REFPROP enthaltenen Routinen zur Auswertung der thermophysikalischen Größen direkt in TRACE aufgerufen werden. Bei der Auswahl der Routinen ist ein besonderer Fokus auf eventuelle Limitierungen in Bezug auf spezifische Zustandsbereiche zu legen. Insbesondere für den überkritischen Bereich wie auch das Zweiphasengebiet ist eine Verwendung geeigneter Routinen sicherzustellen, da es andernfalls zur Berechnung unphysikalischer Werte kommen kann. Die Auswertung des metastabilen Zustandsbereiches der Gasphase kann entweder durch das Erzwingen einer Lösungssuche im gasförmigen Zustand oder mittels einer bilinearen Extrapolation erfolgen. Da die REFPROP-Datenbank ausschließlich Helmholtz-basierte Zustandsgleichungen \mathcal{F}_Φ umfasst, wird für das Medium Wasser eine zusätzliche Zustandsgleichung in Form der IAPWS-IF97 direkt in TRACE implementiert. Wagner und Kretzschmar [163] geben für diese Zustandsgleichung als Ersatz für die benötigten iterativen Routinen explizite Polynomgleichungen an. Die zur Berechnung der Transportgrößen des Mediums Wasser verwendeten Gleichungen werden entsprechend den in Anhang A angegebenen Quellen implementiert. Auf diese Weise kann die Auswertung der thermophysikalischen Größen nicht-idealer Fluide im Allgemeinen und der im Rahmen dieser Arbeit zu untersuchenden Medien im Besonderen in TRACE sichergestellt werden. Es zeigt sich jedoch, dass eine direkte Auswertung der Zustandsgleichung und insbesondere die iterative Berechnung von Zustandsgrößen sehr rechenzeitintensiv ist. Da eine Vielzahl dieser Operationen pro Iterationsschritt und Knotenpunkt des räumlichen Gitters durchgeführt werden müssen, führt dies bei der Untersuchung nicht-idealer Fluide zu sehr hohen Rechenzeiten. Eine Möglichkeit dieser Herausforderung zu begegnen, ist die Speicherung der thermophysikalischen Größen in Form von Tabellen.

Speicherung thermophysikalischer Größen in Form von Tabellen

Eine solche Vorgehensweise ist im Bereich der Thermodynamik anhand klassischer Dampftafeln bereits etabliert. Hierzu werden beliebige Zustandsgrößen z in Abhängigkeit zweier unabhängiger Größen bestimmt und zusammen mit diesen in einer Tabelle hinterlegt. Um eine Vielzahl von Zuständen abbilden zu können, erfolgt eine Variation der beiden Definitionsgrößen innerhalb gewählter Intervalle. Die Anzahl der Elemente dieser Intervalle bestimmt die Diskretisierung des durch die Intervallgrenzen festgelegten Zustandsbereiches. Soll nun ein beliebiger Zustand innerhalb dieser Grenzen ausgewertet werden, muss eine Interpolation zwischen den diskreten Einträgen der Tabelle erfolgen. Hierzu stehen neben dem klassischen linearen Ansatz auch eine Vielzahl von Formulierungen höherer Ordnung zur Verfügung. Zu diesen zählt das von Miyagawa und Hill [103] vorgeschlagene Verfahren, welches die Größe z anhand einer nach dem zweiten Glied abgebrochenen Taylorreihenentwicklung ausdrückt. Es handelt sich folglich um eine Formulierung zweiter Ordnung, welche im Falle einer Helmholtz-basierten Zustandsgleichung folgende Form annimmt:

$$\begin{aligned}
 z = z_{i,j} + (\rho - \rho_i) \left(\frac{\partial z}{\partial \rho} \right)_{i,j} + (T - T_j) \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{i,j} + \frac{1}{2} (\rho - \rho_i)^2 \left(\frac{\partial^2 z}{\partial \rho^2} \right)_{i,j} \\
 + \frac{1}{2} (T - T_j)^2 \left(\frac{\partial^2 z}{\partial T^2} \right)_{i,j} + (\rho - \rho_i)(T - T_j) \left(\frac{\partial^2 z}{\partial \rho \partial T} \right)_{i,j}
 \end{aligned} \tag{4.57}$$

Die zur Speicherung genutzte Tabelle lässt sich auch als eine zweidimensionale Struktur interpretieren, deren Dimension direkt mit der gewählten Diskretisierung des tabellierten Zustandsbereiches verknüpft ist. Wird für beide Definitionsgrößen eine gleiche Anzahl n_T von unterschiedlichen Werten gewählt, so ergeben sich n_T^2 eindeutig bestimmte thermodynamische Zustände. In der Folge muss die resultierende quadratische Matrix der Speicherstruktur ebenfalls die Dimension n_T besitzen. Um eine Interpolation der Zustandsgröße z anhand von Gleichung 4.57 vornehmen zu können, müssen alle Gleichungsterme bekannt sein. Hierzu zählen insbesondere auch die benötigten Ableitungen erster und zweiter Ordnung. Für eine Helmholtz-basierte Zustandsgleichung ergibt sich somit eine geeignete Speicherstruktur exemplarisch zu:

$$\begin{array}{c}
 T_1 \quad \cdots \quad \cdots \quad T_{n_T-1} + \Delta T \\
 \rho_1 \quad \left(\begin{array}{cccc} z_{1,1}, \Delta_{1,1} & \cdots & \cdots & z_{1,n_T}, \Delta_{1,n_T} \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ z_{n_T,1}, \Delta_{n_T,1} & \cdots & \cdots & z_{n_T,n_T}, \Delta_{n_T,n_T} \end{array} \right) \\
 \vdots \\
 \rho_{n_T-1} + \Delta\rho
 \end{array} \quad (4.58)$$

mit $\Delta_{i,j} = \left\{ \left(\frac{\partial z}{\partial \rho} \right)_{i,j}, \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{i,j}, \left(\frac{\partial^2 z}{\partial \rho^2} \right)_{i,j}, \left(\frac{\partial^2 z}{\partial T^2} \right)_{i,j}, \left(\frac{\partial^2 z}{\partial \rho \partial T} \right)_{i,j} \right\}$

Die Menge Δ repräsentiert dabei im Sinne der Übersichtlichkeit die Ableitungsterme. Anhand einer solchen Matrixstruktur ist eine Speicherung der für die Interpolation notwendigen Terme einer beliebigen Anzahl von Größen z möglich. Hierbei ist lediglich sicherzustellen, dass die Wahl der Definitionsgrößen unverändert bleibt. Für die anhand iterativer Routinen $\mathcal{F}_{\Phi}^{iter}$ zu bestimmenden Größen sind separate Speicherstrukturen anzulegen. Sie unterscheiden sich von der in Gleichung 4.58 dargestellten Form durch ihre Definitionsgrößen. Sowohl die thermophysikalischen Gleichungen als auch die iterativen Routinen werden im Zuge von CFD-Berechnungen in jedem Iterationsschritt mehrfach ausgewertet. Es lassen sich gemäß der Übersicht im linken Teil von Abbildung 16 drei mögliche Arten einer Auswertung der thermophysikalischen Routinen abgrenzen. Neben einer Direktauswertung jeglicher Größen ist eine durch den Index *tab* bezeichnete abgestufte Verwendung von Speicherstrukturen möglich. Diese unterscheidet zwischen einer Tabellierung aller oder nur der durch die iterativen Routinen ermittelten Größen. Der Grund für eine solche Abstufung liegt in der Beobachtung eines besonders hohen Rechenzeitbedarfes zur Auswertung der iterativen Routinen. Um dies im Detail untersuchen zu können, wird am Beispiel des Mediums CO₂ die Rechenzeit für unterschiedliche Anzahlen an zu tätigen Abfragen n_A in Abhängigkeit der drei Auswertungsarten untersucht. Die Basis der Analyse bildet ein repräsentatives Set aus Routinen, welche durch TRACE pro räumlicher und zeitlicher Iteration durchlaufen werden. Innerhalb eines definierten Zustandsbereiches von CO₂ erfolgt die zufällige Auswahl unterschiedlicher thermodynamischer Zustände. Die Multiplikation der Anzahl der gewählten Zustände mit der Zahl der im Set inkludierten Routinen ergibt die Anzahl der Abfragen. Um die Vergleichbarkeit der Untersuchungsergebnisse sicherzustellen, werden die drei Auswertungsarten jeweils mit identischen Abfragen beaufschlagt. Die für den betrachteten Zustandsbereich erzeugten Tabellen finden zudem in gleicher Weise Verwendung für alle betroffenen Auswertungsarten. Für die Bestimmung der benötigten

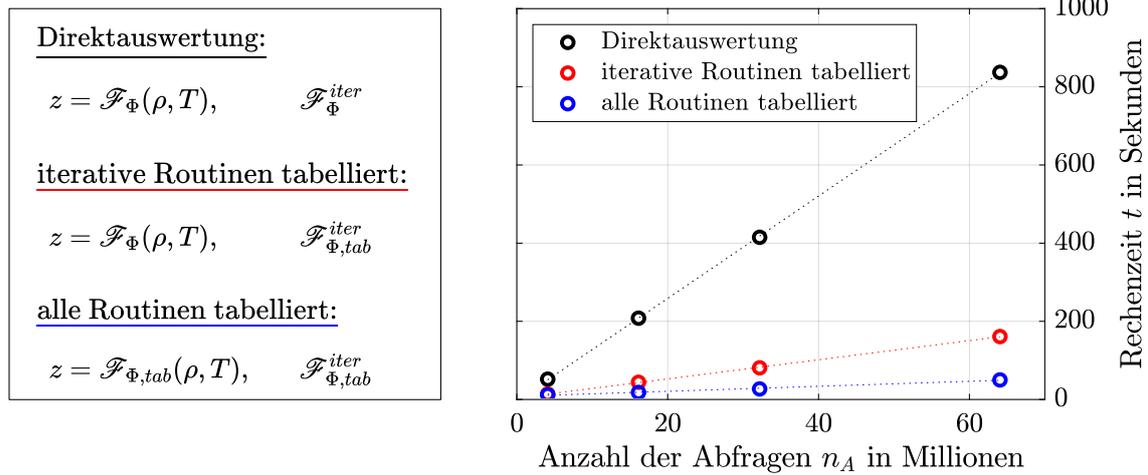


Abbildung 16: Benötigte Rechenzeit in Abhängigkeit der Anzahl der Abfragen für unterschiedliche Arten der Auswertung der thermophysikalischen Routinen am Beispiel des Mediums CO_2 ; Gepunktete Linien repräsentieren eine lineare Regression der Datenpunkte

Rechenzeiten werden zudem je Auswertungsart drei Wiederholungen durchgeführt. Die jeweiligen Ergebnisse dieser drei Durchläufe werden im Anschluss arithmetisch gemittelt. Im rechten Teil von Abbildung 16 ist eine Auftragung der so erhobenen Rechenzeit über der Zahl der Abfragen in Millionen für die Direktauswertung sowie die zwei unterschiedlichen Abstufungen einer Verwendung von Speicherstrukturen dargestellt. Erwartungsgemäß führt eine Speicherung aller thermophysikalischer Größen in Form von Tabellen gegenüber der Direktauswertung zu einer starken Abnahme der Rechenzeit. Da die Tabellen in TRACE zudem vor der Laufzeit erstellt und aufgrund ihrer Speicherung in der Eingabedatei beliebig oft wiederverwendet werden können, umfasst die Rechenzeit der tabellierten Varianten das Einlesen der Speicherstruktur in den Arbeitsspeicher. Selbst für die niedrigste untersuchte Zahl von Abfragen bedingt der hierfür benötigte zusätzliche Zeitbedarf jedoch keinen Nachteil gegenüber der Direktauswertung. Wird eine lineare Regression auf die Datenpunkte der drei Auswertungsarten angewendet, so zeigt sich in allen drei Fällen eine hohe Übereinstimmung mit der jeweiligen Regressionsgeraden. Die Rechenzeit skaliert somit in guter Näherung linear mit der Anzahl der Abfragen, wobei die Steigungen der Geraden stark differierende Werte aufweisen. Dies wird insbesondere für die höchste untersuchte Anzahl an Abfragen deutlich. Der Einsatz einer Tabellierung der iterativen Routinen ermöglicht in diesem Fall gegenüber der Direktauswertung eine Reduktion der Rechenzeit um den Faktor fünf. Werden die restlichen thermophysikalischen Routinen ebenfalls in Form von Tabellen gespeichert, kann eine weitere Abnahme der Rechenzeit um den Faktor drei erzielt werden. Mit dem aufgezeigten Vorteil in Bezug auf die Rechenzeit geht jedoch zwangsläufig eine Abnahme der Genauigkeit der ausgewerteten thermophysikalischen Größen einher. Dabei haben die Diskretisierung der Tabelle sowie die im betrachteten Zustandsbereich vorzufindenden Gradienten der thermophysikalischen Größen einen maßgeblichen Einfluss auf die resultierende Ergebnisgenauigkeit. Um dies zu verdeutlichen, sind im linken Teil von Abbildung 17 zwei Zustandsbereiche von CO_2 in einem Druck-Temperatur-Diagramm farblich hervorgehoben, deren Intervallgrenzen durch gleiche Druck- und Temperaturdifferenzen charakterisiert werden. Region I in Rot umfasst das direkte Umfeld des kritischen Punktes, welches neben geringen Werten des Realgasfaktors insbesondere auch große Gradienten der Zustandsgrößen an den Grenzkurven des kontinuierlichen sowie diskontinuierlichen Phasenüberganges aufweist. Durch

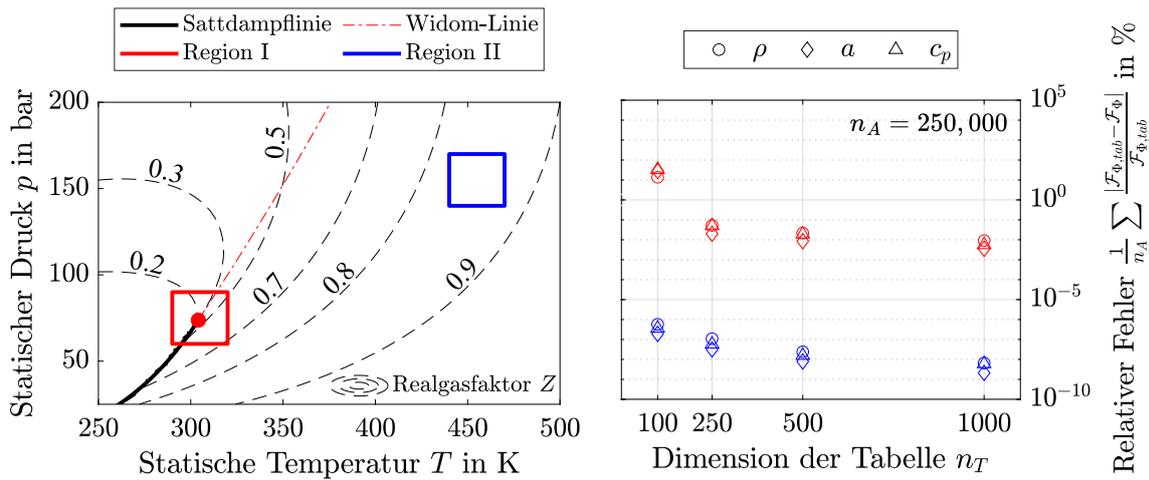


Abbildung 17: Definition zweier Untersuchungsbereiche von CO_2 in einem p - T -Diagramm (links) und Auftragung des relativen Fehlers der Auswertung der Dichte, der Schallgeschwindigkeit sowie der spezifischen isobaren Wärmekapazität anhand von Tabellen unterschiedlicher Dimension (rechts)

die Wahl der blauen Region II in entsprechender Entfernung zum kritischen Punkt finden sich innerhalb ihrer Grenzen Zustände, welche durch eine weniger stark ausgeprägte Nicht-Idealität gekennzeichnet sind. Wird im Zuge einer Tabellierung der thermophysikalischen Größen der beiden Regionen eine gleiche Dimension der Tabelle gewählt, resultiert aus den definitionsbedingt gleichen Druck- und Temperaturdifferenzen auch eine übereinstimmende Diskretisierung. Diese Eigenschaft soll nun genutzt werden, um den Einfluss des Zustandsbereiches auf die Ergebnisgenauigkeit der tabellierten Größen isoliert betrachten zu können. Neben der Dichte werden hierzu die Schallgeschwindigkeit sowie die spezifische isobare Wärmekapazität als Untersuchungsparameter gewählt. Da wie in Kapitel 3 diskutiert, die Schallgeschwindigkeit im Umfeld der Satt dampf Linie und die isobare Wärmekapazität in direkter Nähe zur Widom-Linie große Gradienten aufweisen, erscheint ihre Auswertung als besonders sensibel. Für jede der beiden Regionen werden die Zustandsgrößen entsprechend ihrer Definitionsgrößen tabelliert, wobei jeweils vier unterschiedliche Tabellendimensionen ausgewählt werden. Eine Dimension von 100 repräsentiert dabei die geringste Auflösung, während die Tabelle mit der feinsten Diskretisierung eine Dimension von 1000 aufweist. Innerhalb der beiden zu untersuchenden Regionen werden jeweils 250.000 unterschiedliche thermodynamische Zustände als repräsentative Stichprobenmengen zufällig ausgewählt. Ihre Zahl ist äquivalent zu der bereits bekannten Größe der Anzahl der Abfragen. Die drei Untersuchungsparameter werden für jeden dieser Zustände sowohl anhand einer Direktauswertung als auch mittels einer Interpolation der vier Tabellen ermittelt. Für jede Abfrage wird die absolute Differenz zwischen den Interpolationsergebnissen und dem Ergebnis der Direktauswertung gebildet und auf Erstgenannte bezogen. Im Anschluss erfolgt eine Summation der bezogenen Differenzen je Parameter und Tabellendimension. Wird dieses Ergebnis durch die Anzahl der Abfragen geteilt, ergibt sich der relative Fehler der tabellarischen Auswertung, welcher im rechten Teil von Abbildung 17 in Prozent aufgetragen ist. Dabei sind die Werte für Region I entsprechend der vorherigen Farbgebung in Rot und die Ergebnisse für Region II in Blau dargestellt. Die Werte des relativen Fehlers der tabellarischen Zustandsauswertung für Region II sind unabhängig von der betrachteten Tabellendimension mindestens fünf Größenordnungen kleiner als im Falle von Region I. Da Region I anders als Region II durch große Gradienten der Untersuchungsparameter gekennzeichnet ist, er-

scheint diese Beobachtung plausibel. Für beide Regionen nimmt der Wert des relativen Fehlers mit zunehmender Tabellendimension ab, wobei dieser Effekt für geringe Dimensionen deutlich stärker ausgeprägt ist. Zudem weisen die drei Untersuchungsparameter je gewählter Region und Tabellendimension nur leicht abweichende Werte des relativen Fehlers auf, sodass die Gültigkeit der abgeleiteten Schlussfolgerungen unabhängig von der Tabellenart angenommen werden kann. Während die für Region II erzeugten Tabellen allesamt für die Verwendung im Zuge von CFD-Berechnungen geeignet scheinen, ist dies im Falle von Region I aufgrund der im Vergleich hohen Werte des relativen Fehlers für den spezifischen Anwendungsfall zu überprüfen. Im Zuge einer solchen Untersuchung lässt sich für ein beliebiges Zustandsgebiet eine in Bezug auf die Einhaltung einer definierten Fehlerschranke geeignete Tabellendimension bestimmen. Insbesondere für eine hohe Anzahl an Abfragen, wie sie beispielsweise unter Verwendung sehr feiner räumlicher Gitter auftreten, zeigt die Auswertung anhand tabellierter Daten durch Kombination einer erheblichen Einsparung von Rechenzeit mit einer ausreichenden Ergebnisgenauigkeit ein großes Potential. Zudem führt eine Verfeinerung der Tabellen durch Erhöhung der Dimension lediglich zu einer Zunahme der für das einmalige Einlesen der Speicherstrukturen benötigten Zeit sowie einem erhöhten Bedarf an Arbeitsspeicher. Bis zu einer Dimension von 1000 erscheint der Einfluss dieser beiden Faktoren für TRACE jedoch vernachlässigbar. Dabei ist die Anzahl der benötigten Speicherstrukturen zu berücksichtigen, welche von der Art der zu untersuchenden Strömung abhängt. Während im Falle einer einphasigen Strömung zwei Speicherstrukturen zu verarbeiten sind, erhöht sich diese Anzahl für zweiphasige Strömungen auf bis zu fünf. Wird der Phasenwechsel anhand des Modells der homogenen Gleichgewichts-Kondensation beschrieben, müssen neben den Gasgrößen lediglich die Sättigungsgrößen in Form einer zusätzlichen Struktur gespeichert werden. Eine Modellierung der flüssigen Phase als in der kontinuierlichen Phase dispergiert bedarf hingegen einer zur Gasphase vergleichbaren Tabellierung der Zustandsgrößen anhand zweier zusätzlicher Speicherstrukturen. Dies ist neben zahlreichen anderen Faktoren bei der Konzeptionierung eines Moduls zur Berücksichtigung einer zweiten Phase in TRACE zu berücksichtigen.

Konzeptionierung eines Moduls zur Berücksichtigung einer zweiten Phase

Während das bereits eingeführte Gasmodell nicht-idealer Fluide in die Gruppe der bisher in TRACE verfügbaren Gasmodelle integriert wird, erscheint für die Berücksichtigung einer zweiten Phase der Aufbau eines eigenständigen Moduls, welches die Bezeichnung *TwoPhase* erhält, sinnvoll. Dies wird maßgeblich durch drei Aspekte motiviert. Zum einen ermöglicht die Separation der Routinen eine minimalinvasive Implementierung. Soll eine zweiphasige Strömung mit TRACE berechnet werden, so erfolgt im einphasigen Hauptcode lediglich ein durch einen in der Eingabedatei definierten binären Parameter ausgelöster Aufruf des Moduls pro räumlicher und zeitlicher Iteration. Zum anderen kann das Modul aufgrund seiner Abgeschlossenheit jederzeit ohne Auswirkung auf die Funktionsfähigkeit des restlichen Strömungslösers deaktiviert werden. Dies erlangt eine besondere Relevanz, da es sich bei der ausgearbeiteten Implementierung um eine externe Weiterentwicklung des vom DLR qualitätsgesicherten Codes handelt. Zuletzt wird durch den modularen Aufbau eine von den Entwicklungen im Hauptcode nahezu vollständig entkoppelte Möglichkeit zur Weiterentwicklung und Erweiterung der Modellierungsansätze geschaffen. Um den letzten Teilaspekt zu unterstützen, erfolgt wie in Abbildung 18 visualisiert eine Unterteilung des Moduls in drei Submodule. Das erste dieser Submodule umfasst die Auswertung der thermophysikali-

schen Größen beider Phasen. Während die Routinen zur Bestimmung der Größen der Flüssigphase, der Sättigungszustände, des metastabilen Zustandsbereiches sowie der klassischen Gaskinetik direkt in diesem zu finden sind, basiert die Auswertung der Gasgrößen auf einer Schnittstelle zum Gasmodell des nicht-idealen Fluides. Die Entscheidung zwischen einer direkten oder tabellierten Auswertung der Routinen erfolgt über einen weiteren binären Parameter in der Eingabedatei. Die mit der Art einer Modellierung der flüssigen Phase in Verbindung stehenden Routinen finden sich im zweiten Submodul. Hierzu zählen insbesondere die Modellierungsansätze des Phasenwechsels in Form der homogenen Gleichgewichts- und Nicht-Gleichgewichtskondensation. Im Falle letztgenannter ist eine Bestimmung unterschiedlicher Größen der klassischen Keimbildungs- und Wachstumstheorie sowie eine mathematische Spezifizierung der Tropfengrößenverteilung notwendig. Ähnlich des binären Parameters, welcher zu Beginn der Rechnung die Berücksichtigung einer zweiten Phase aktiviert, besteht anhand weiterer in der Eingabedatei definierter Optionsgrößen die Möglichkeit, zwischen den verschiedenen Arten der Modellierung des Phasenwechsels und den jeweiligen Untermodellen zu wählen. Aus der Kombination dieser resultiert die Formulierung des Flüssigkeitsmassenanteils, welche zu den Routinen des dritten Submoduls in Form der Spezifikation des Gleichungssystems zählt. Die ebenfalls anhand binärer Parameter der Eingabedatei gesteuerte Wahl des Bezugssystems sowie der Berücksichtigung eines Impulsaustausches zwischen den Phasen führt zu einer eindeutigen Definition der Modellierung der zweiten Phase. Auf dieser Grundlage kann die Formulierung des zu lösenden Gleichungssystems in Form der Quellterme sowie des PGI_{Roe}-Schemas spezifiziert werden. In Kombination mit den in TRACE bestehenden Routinen zur Lösung einphasiger Strömungen sowie den

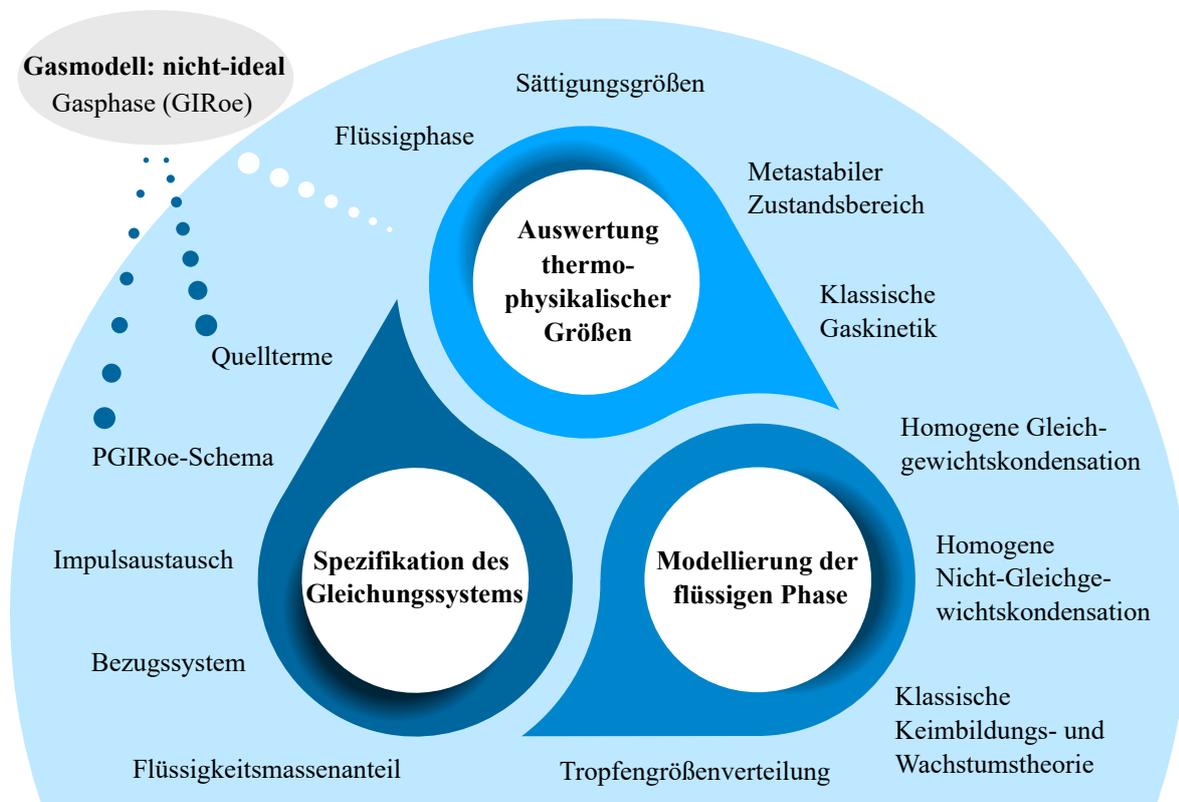


Abbildung 18: Struktur des Moduls TwoPhase zur Berücksichtigung einer zweiten Phase in TRACE

für die Berücksichtigung einer zweiten Phase angepassten Randbedingungen ist die iterative Berechnung des zweiphasigen Strömungsfeldes möglich. Um eine von dem Modul *TwoPhase* unabhängige Funktionsfähigkeit der einphasigen Implementierung für nicht-ideale Fluide sicherzustellen, wird das im PGI_{Roe}-Schema enthaltene GI_{Roe}-Schema zusätzlich im einphasigen Hauptcode implementiert. Auf diese Weise lässt sich in der Eingabedatei durch Kombination der als mathematische Schalter wirkenden binären Parameter die gewünschte Art der Modellierung der Strömung festlegen. Bevor die auf diese Weise konzeptionierte Erweiterung des Strömungslösers TRACE um die Berücksichtigung einer zweiten Phase und somit das in dieser enthaltene PGI_{Roe}-Schema anhand einer Auswahl physikalischer Testfälle validiert werden, erscheint eine Einführung der zur Beurteilung numerischer Lösungen herangezogenen Methoden sinnvoll.

4.4 Methoden zur Beurteilung numerischer Lösungen

Die in diesem Kontext verwendete Nomenklatur orientiert sich an der durch das *American Institute of Aeronautics and Astronautics* (AIAA) formulierten Richtlinie zur Verifizierung und Validierung von CFD-Berechnungen [4]. Durch eine Verifizierung kann sichergestellt werden, dass die Implementierung eine anhand der zugrundeliegenden Modelle hergeleitete Lösung korrekt wiedergibt. Ein Beispiel hierfür könnte der Vergleich einer analytisch bestimmten Lösung einer spezifischen Fragestellung mit den Ergebnissen der numerischen Berechnung darstellen. Auch eine Plausibilisierung anhand fundamentaler physikalischer Zusammenhänge ist denkbar. Als Validierung wird hingegen eine Vorgehensweise bezeichnet, welche überprüft inwieweit die Ergebnisse einer CFD-Berechnung mit den in der Realität zu beobachtenden Strömungsgrößen übereinstimmen. Die Gegenüberstellung experimentell erhobener Daten mit den Ergebnissen einer entsprechenden CFD-Simulation kann hierzu angewendet werden. Um das Modell des PGI_{Roe}-Schemas sowie seine Implementierung in TRACE zu validieren erscheint daher eine gestufte Vorgehensweise in Form einer der Validierung vorgelagerten Verifizierung erforderlich. Da es im Zuge von CFD-Verfahren zwangsläufig zu einer Vereinfachung der Realität anhand einer Vielzahl unterschiedlicher Modellannahmen kommt, steht der Begriff des Fehlers im Zentrum jeder Verifizierung und Validierung. Dabei können unterschiedliche Arten von Fehlern unterschieden werden. Ist eine eindeutige Identifikation der Fehlerquelle möglich, wie dies im Falle von Programmier- oder Anwendungsfehlern der Fall ist, kann der Einfluss des Fehlers auf die Berechnungsergebnisse durch eine entsprechende Korrektur eliminiert werden. Basiert der Fehler jedoch auf einer der Modellierung zugrundeliegenden Annahme oder prozeduralen Eigenschaft, so verbleibt er für das jeweilige CFD-Verfahren immanent. Zu dieser Art von Fehlern lassen sich neben Diskretisierungsfehlern, Approximationsfehlern physikalischer Modelle und mit dem iterativen Lösen des Gleichungssystems verbundene Fehler auch durch die Verwendung von Computern bedingte Rundungsfehler zuordnen. Um den Aussagegehalt der numerischen Lösung einer physikalischen Fragestellung beurteilen zu können, sind diese Fehler systematisch zu untersuchen. Damit eine numerische Repräsentation eines physikalischen Testfalles als validiert gelten kann, muss der Einfluss der einzelnen Fehlerquellen entweder negiert oder qualitativ sowie quantitativ eingeordnet werden können. Für Diskretisierungsfehler sowie durch die iterative Lösung bedingte Fehler wird häufig ein Nachweis der Unabhängigkeit einer numerischen Lösung von der Fehlerquelle angestrebt. Dabei dienen die Einhaltung der methodischen Konsistenz und das Unterschreiten einer definierten Fehlerschranke als hinreichende Kriterien.

Unabhängigkeit der Lösung von der räumlichen Diskretisierung

Da im Rahmen der vorliegenden Arbeit ausschließlich die Berechnung von Strömungen erfolgen soll, welche als stationär angenommen werden können, beschränkt sich die Betrachtung der klassischen Diskretisierungsfehler auf die räumliche Ausprägung. Hierzu wird die von Roache [126] dokumentierte Vorgehensweise verfolgt. Ausgehend von einem groben räumlichen Gitter, welches im folgenden durch den Index 4 identifiziert wird, erfolgt eine systematische Gitterverfeinerung. Die jeweilige Anzahl der Knotenpunkte in den drei Raumrichtungen wird dabei mit einem Faktor r_G , welcher ganzzahlig zu wählen ist, multipliziert. Das auf diese Weise resultierende mittlere Gitter wird durch den Index 2 bezeichnet. Eine erneute Verfeinerung mittels des zuvor definierten Faktors führt zu einer weiteren Erhöhung der Knotenpunktzahl in Form des feinsten Gitters mit Index 1. Anhand der so erzeugten räumlichen Gitter lassen sich unter Anwendung eines Strömungslösers für einen spezifischen Fall drei numerische Lösungen des Strömungsfeldes bestimmen. Die Größe z wird derart gewählt, dass sie für den betrachteten Fall eine charakteristische Größe darstellt. Wird sie für die drei unterschiedlichen Gitter ausgewertet, so lässt sich ein Ausdruck für die Berechnung der Konvergenzordnung des Gitters θ_G formulieren:

$$\theta_G = \ln\left(\frac{z_4 - z_2}{z_2 - z_1}\right) / \ln(r_G) \quad (4.59)$$

Die berechnete Konvergenzordnung kann mit der theoretischen Konvergenzordnung des Lösungsverfahrens verglichen werden. Im Falle von TRACE wird zur räumlichen Diskretisierung ein Verfahren zweiter Ordnung verwendet, sodass die theoretische Konvergenzordnung ebenfalls den Wert zwei annimmt. Um die Konsistenz der Methode sicherzustellen, muss die berechnete Konvergenzordnung folglich einen Wert von ungefähr zwei aufweisen. Wird dieses Kriterium erfüllt, kann anhand einer Richardson-Extrapolation eine Abschätzung getätigt werden, ab welcher Knotenpunktzahl eine weitere Gitterverfeinerung keinen relevanten Einfluss mehr auf die numerische Lösung besitzt. Durch eine Vernachlässigung aller Terme mit einer Ordnung größer als zwei leitet Roache für die untersuchte Größe einen Ausdruck der Richardson-Extrapolation z_{RE} in Abhängigkeit der Ergebnisse des mittleren und feinen Gitters sowie des Gitterverfeinerungsfaktors und der Konvergenzordnung her:

$$z_{RE} = z_1 + \frac{z_1 - z_2}{r_G^{\theta_G} - 1} \quad (4.60)$$

Ihr Wert kann als Näherung der Lösung auf einem räumlichen Gitter mit unendlich vielen Knotenpunkten und somit einem Gitterpunktastand von null interpretiert werden. Da für die meisten numerischen Testfälle in Ermangelung einer analytischen Lösung kein Abgleich der Richardson-Extrapolation mit einer solchen vorgenommen werden kann, dient sie als Richtgröße. Unterschreitet die relative Abweichung der für die drei Gitter ermittelten charakteristischen Größe vom Wert der Richardson-Extrapolation eine zuvor definierte Fehlerschranke, so kann für das entsprechende Gitter die Unabhängigkeit der Lösung von der räumlichen Diskretisierung angenommen werden. Die Fehlerschranke ist dabei jeweils für den zu untersuchenden Fall geeignet zu wählen. Wie zuvor in diesem Kapitel aufgezeigt, bedingt auch die Auswertung tabellierter Daten der thermophysikalischen Größen eine Diskretisierung und somit einen zugehörigen Fehler.

Unabhängigkeit der Lösung von der Diskretisierung der tabellierten Größen

Anders als im Falle der klassischen Diskretisierungsfehler findet sich zur Untersuchung dieser Fehlerart in der Literatur keine standardisierte Vorgehensweise. Jedoch lässt sich die Eigenschaft einer Tabelle als zweidimensionale Struktur auch hier in Form einer Interpretation als Gitter in zwei Raumrichtungen nutzen. Analog der Vorgehensweise zur Untersuchung der räumlichen Gitterunabhängigkeit wird zunächst eine mit dem Index 4 gekennzeichnete grobe Tabelle erzeugt. Die Multiplikation der Tabellendimension mit einem ganzzahligen Verfeinerungsfaktor r_T ergibt eine mit dem Index 2 bezeichnete mittlere Tabelle. Die mit 1 indizierte feinste Tabelle stellt eine weitere Erhöhung der Dimension anhand des zuvor gewählten Faktors dar. Anders als im Kontext der räumlichen Diskretisierung erscheint die Auswertung charakteristischer Größen einer Strömungssimulation hier nicht ausreichend. Vielmehr zielt eine Untersuchung der Unabhängigkeit der Lösung von der Diskretisierung der tabellierten Größen auf die Abweichung zwischen der Direktauswertung sowie einer Auswertung anhand von Tabellen ab. Bei der Quantifizierung dieser ist auf die Verwendung einer repräsentativen Stichprobenmenge zu achten, da andernfalls keine Wiederholbarkeit gewährleistet werden kann. Als Parameter wird daher die anhand der Anzahl der Abfragen gemittelte Abweichung χ herangezogen. Wird dieser jeweils für die grobe, mittlere und feine Tabelle ausgewertet, lässt sich die Konvergenzordnung der Tabelle θ_T wie folgt berechnen:

$$\theta_T = \ln\left(\frac{\chi_4 - \chi_2}{\chi_2 - \chi_1}\right) / \ln(r_T) \quad \text{mit} \quad \chi = \frac{1}{n_A} \sum |\mathcal{F}_{\Phi, tab} - \mathcal{F}_{\Phi}| \quad (4.61)$$

Entsprechend Gleichung 4.57 weist die Interpolation der tabellierten Größen einen Abbruchfehler zweiter Ordnung auf. Folglich nimmt die theoretische Konvergenzordnung der Tabelle den Wert zwei an. Um die Konsistenz der Methode zu gewährleisten, darf die berechnete Konvergenzordnung von diesem Wert nicht wesentlich abweichen. Unter Einhaltung dieses Kriteriums kann anhand der Richardson-Extrapolation χ_{RE} eine Aussage über die für eine Unabhängigkeit der Ergebnisse von der Diskretisierung der Tabelle benötigte Dimension abgeleitet werden. Die Formulierung folgt dabei der für die räumliche Diskretisierung vorgestellten Vorgehensweise:

$$\chi_{RE} = \chi_1 + \frac{\chi_1 - \chi_2}{r_T^{\theta_T} - 1} \xrightarrow{!} 0 \quad (4.62)$$

Ihr Wert kann als mittlerer Fehler der Auswertung einer repräsentativen Menge an Stichproben anhand einer Tabelle mit unendlicher Dimension interpretiert werden. In der Folge muss die Richardson-Extrapolation zwangsläufig gegen einen sehr kleinen Wert streben. Unterschreitet der anhand einer ausgewählten Tabelle ermittelte relative Fehler eine entsprechend gewählte Fehlerschranke, so kann für diese eine Unabhängigkeit der Lösung von der Diskretisierung der Tabelle konstatiert werden. Damit diese Aussage Gültigkeit für zugehörige CFD-Berechnungen erlangen kann, ist sicherzustellen, dass die auszuwertenden thermodynamischen Zustände innerhalb der Intervallgrenzen der Tabelle liegen. Würde der tabellierte Bereich im Zuge der Berechnungen verlassen, käme es zu einer Direktauswertung der thermophysikalischen Größen. Dies würde die Ergebnisgenauigkeit in der Folge zwar nicht negativ beeinflussen, jedoch den Sinn der vorgestellten Detailanalyse in Frage stellen. Neben den Ansätzen zur Untersuchung der Diskretisierungsfehler ist auch eine Analyse des durch die iterative Natur des Lösungsverfahrens bedingten Fehlers vorzunehmen.

Nachweis der Konvergenz des iterativen Lösungsverfahrens

Im Zuge der iterativen Lösung einer mathematisch definierten Fragestellung erfolgt eine wiederholte Auswertung des zugrundeliegenden Gleichungssystems. Ziel ist es, die exakte Lösung mit möglichst hoher Genauigkeit in einer vertretbaren Anzahl an Iterationen anzunähern. Strebt die berechnete Lösung im Verlauf des iterativen Prozesses gegen die exakte Lösung, so konvergiert das Verfahren. Da die exakte Lösung jedoch in einer endlichen Anzahl von Iterationen nicht erreicht werden kann, ist ein Abbruchkriterium zu definieren. Dieses muss einen Kompromiss zwischen den beiden Zielaspekten der Genauigkeit sowie der Anzahl der benötigten Iterationen bilden. Eine Möglichkeit zur Beurteilung der Abweichung zwischen der exakten sowie der approximierten Lösung bildet der Wert des Residuums. Dieser wird pro Iterationsschritt, Gitterpunkt und zu lösender Gleichung bestimmt und kann durch Subtraktion der rechten von der linken Seite des Gleichungssystems gebildet werden. Um eine Aussage über die Abweichung für die Gesamtheit der Gleichungen und Knotenpunkte des Gitters treffen zu können, findet häufig eine Normierung des Residuums Anwendung. Die im Weiteren zur Beurteilung der Konvergenz verwendete L1-Norm gewichtet alle absoluten Werte des Residuums gleich. TRACE bestimmt das auf diese Weise normierte Residuum $ResL1$ im Falle einer stationären Betrachtungsweise anhand folgender Gleichung:

$$ResL1 = \frac{1}{n_V} \sum_{j=1}^{n_V} \sum_{d=1}^{n_G} \left| \frac{\Delta t_j}{V_{V,j} \cdot CFL} \left(\left(\mathbf{F}_{j+\frac{1}{2},d} - \mathbf{F}_{j-\frac{1}{2},d} \right) - \mathbf{Q}_{j,d} \right) \right| \quad (4.63)$$

Dabei bezeichnet n_V die Anzahl der Zellen des räumlichen Gitters, während n_G für die Zahl der zu lösenden Gleichungen steht. Der lokal vorherrschende Zeitschritt Δt_j sowie das jeweilige Zellvolumen $V_{V,j}$, welches durch die lokalen Abstände der Gitterpunkte definiert wird, repräsentieren zusammen mit der CFL -Zahl die im Zuge der räumlichen und zeitlichen Integration eingeführten dimensionslosen Parameter. Dabei setzt die von Courant, Friedrichs und Lewy [34] definierte CFL -Zahl die Schrittweiten der räumlichen und zeitlichen Integration in ein Verhältnis zu einer charakteristischen Geschwindigkeit:

$$CFL = a \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (4.64)$$

Anhand dieser Definition lässt sich ihr Wert auch als Ausbreitungsgeschwindigkeit der Information je Gitterpunkt und Zeitschritt interpretieren. Eine Analyse der Stabilität numerischer Verfahren nach von Neumann [27] ergibt für explizite Formulierungen der zeitlichen Integration ein Stabilitätskriterium von $CFL \leq 1$. Die Information kann sich folglich maximal mit Schallgeschwindigkeit ausbreiten. Implizite Verfahren der zeitlichen Integration unterliegen dieser Limitierung nicht und erzielen auch für $CFL > 1$ stabile Lösungen. Jedoch nimmt die benötigte Anzahl an Rechenoperationen pro Iterationsschritt gegenüber den expliziten Verfahren insbesondere durch die Notwendigkeit zusätzlicher Matrixinversionen zu. Die Bezeichnung als stabil zielt in diesem Kontext auf die Bestimmung einer konvergierten Lösung unter Abwesenheit starker numerischer Oszillationen ab. Als konvergiert gilt eine Lösung, wenn das Konvergenzkriterium in Form eines definierten Wertes des Residuums unterschritten wird. Der Betrag dieses Kriteriums bezeichnet somit die maximal zulässige Abweichung der iterativen Lösung von der exakten. Eine zusätzliche Indikation der Konvergenz kann durch die Analyse der Verläufe globaler Strömungsgrößen abgeleitet werden.

Verifizierung anhand eines von TRACE unabhängigen Strömungslösers

Um den Einfluss möglicher im Zuge der Implementierung des Moduls *TwoPhase* in TRACE unterlaufener Fehler minimieren und zudem eine Validierung des PGI-Roe-Schemas für explizite Verfahren der zeitlichen Integration vornehmen zu können, erfolgt eine von TRACE vollständig unabhängige Implementierung eines eigenen dichte-basierten Strömungslösers. Dieser ist anders als TRACE in der Lage, die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen sowie die Euler-Gleichungen nicht nur in drei, sondern wahlweise auch in einer oder zwei Dimensionen zu lösen. Während die konvektiven Flussterme anhand des PGI-Roe-Schemas mit einer Genauigkeit zweiter Ordnung bestimmt werden, erfolgt die Berechnung der viskosen Flussterme mittels zentraler Differenzen zweiter Ordnung. Die räumliche Diskretisierung basiert auf einem MUSCL-Schema zweiter Ordnung, wobei als Limiter-Funktion ein von van Leer [91] formulierter Ansatz verwendet wird. Zur zeitlichen Integration wird ein explizites Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung herangezogen. Die Turbulenzmodellierung beruht auf dem Ein-Gleichungsmodell von Spalart und Allmaras [138]. Durch eine Einbindung der REFPROP-Datenbank kann zwischen den Gasmodellen des kalorisch perfekten Gases sowie des nicht-idealen Fluides gewählt werden. Für letztgenanntes ist eine Verwendung tabellierter thermophysikalischer Daten möglich. Die in TRACE im Modul *TwoPhase* enthaltenen Modellgleichungen zur Berücksichtigung einer zweiten Phase sind in vergleichbarer Weise auch in der Eigenimplementierung zu finden. Dabei dient diese auch als Entwicklungsumgebung für die in TRACE im Zuge der Berücksichtigung einer zweiten Phase vorgenommenen Anpassungen der Randbedingungen. Die Anwendbarkeit des Verfahrens ist auf strukturierte Gitter sowie stationäre Strömungen beschränkt. Der resultierende Strömungslöser ist in der Lage ein- und zweiphasige Strömungen kompressibler nicht-idealer Fluide unter Berücksichtigung der Ausbildung einer zweiten Phase zu berechnen. Auf diese Weise kann er genauso wie TRACE auf alle im Zuge der Validierung untersuchten physikalischen Testfälle angewendet werden. Im Sinne einer klaren Abgrenzung wird der unabhängig implementierte Strömungslöser im Folgenden als *Explicit Phase Generalised Ideal Roe* (EPGI-Roe) in Kombination mit der zur Modellierung gewählten Anzahl räumlicher Dimensionen bezeichnet.

5 Anwendung der Schemata auf verschiedene Validierungsfälle

Um eine möglichst umfassende Verifizierung und Validierung des PGI_{Roe}-Schemas vornehmen zu können, werden sieben unterschiedliche Testfälle ausgewählt. Diese lassen sich anhand ihrer zugrundeliegenden Geometrien in drei Gruppen unterteilen. Neben der Untersuchung ein- und zweiphasiger Strömungen in Laval-Düsen wird zudem die Verdichtung von CO₂ in überkritischem Zustand anhand eines Radialverdichters sowie die Interaktion der gasförmigen und flüssigen Phase in einer axialen Turbinenkaskade untersucht. Die Auswahl der Testfälle ist durch unterschiedliche Zielsetzungen der Validierung für ein- und zweiphasige Strömungen motiviert. Im einphasigen Fall ist zunächst nachzuweisen, dass das PGI_{Roe}-Schema in der Lage ist, beliebige kompressible nicht-ideale Strömungen geeignet zu beschreiben. Da sich das ursprüngliche Roe-Verfahren durch eine hohe Robustheit und somit die Fähigkeit, Diskontinuitäten und insbesondere Stöße mit hoher Genauigkeit beschreiben zu können, auszeichnet, ist die Erhaltung dieser Eigenschaft für das PGI_{Roe}-Schema nachzuprüfen. Hierzu eignen sich Laval-Düsen in besonderer Weise, da die in diesen vorherrschenden Strömungsbedingungen auf einfache Weise anhand des aufgeprägten Druckverhältnisses variiert werden können. Zudem sind die Geometriedaten einer Vielzahl von Laval-Düsen wie exemplarisch der *Converging Diverging Verification* (CDV) Düse der NASA [94] als Teil etablierter CFD-Validierungsfälle in der Literatur dokumentiert. Aufgrund ihrer im Vergleich zu dreidimensionalen Turbomaschinen einfachen Geometrie besteht zudem die Möglichkeit, sie allein anhand ihrer Flächenänderung entlang der Düsenachse zu charakterisieren und somit die Herleitung quasi-analytischer Lösungen zu ermöglichen. Im Kontext von ORC-Turbinen besitzen Laval-Düsen als Ersatzmodelle niedriger Komplexität für die Untersuchung der Expansion von sub- zu supersonischen Bedingungen eine hohe praktische Relevanz. Der Einfluss der Nicht-Idealität sowie der molekularen Komplexität des Arbeitsmediums auf die Strömungscharakteristik der Expansion kann so von anderen Faktoren isoliert betrachtet werden. Ein Beispiel hierfür sind die experimentellen Untersuchungen von Spinelli et al. [140], welche in Form der zugrundeliegenden Geometrie sowie der Messdaten dokumentiert sind und somit als Validierungsfall im Rahmen dieser Arbeit herangezogen werden können. Um die Robustheit des PGI_{Roe}-Schemas gegenüber großen Gradienten im Strömungsfeld analysieren zu können, wird die Durchströmung eines Radialverdichters mit CO₂ in überkritischem Zustand betrachtet. Der Betriebsbereich des durch Hacks et al. [67] ausgelegten Verdichters liegt in unmittelbarer Nähe zum kritischen Punkt und damit auch zum Zweiphasengebiet. Zudem handelt es sich um einen dreidimensionalen Turbomaschinentestfall, für welchen experimentelle Messdaten zur Verfügung stehen. Nach der Verifizierung und Validierung des PGI_{Roe}-Schemas anhand dieser drei einphasigen Testfälle ist eine solche auch für zweiphasige Strömungen vorzunehmen. Zunächst sind die in Hinblick auf die Modellierung der flüssigen Phase unterschiedlichen Konfigurationen des Schemas zu verifizieren. Dabei ist insbesondere sicherzustellen, dass das PGI_{Roe}-Schema die Mechanismen der Nukleation sowie des Tropfenwachstums und die hieraus resultierenden Strömungsphänomene wie Kondensationsfronten adäquat wiedergibt. Auch ist zu überprüfen, inwiefern das Schema in der Lage ist, die Interaktion der Phasen und somit den Wärme- sowie Impulsaustausch abzubilden. Hierzu erfolgt zunächst, ähnlich wie im einphasigen Fall, die Untersuchung einfacher Geometrien in Form von Laval-Düsen. Diese können als Ersatzmodell des Schaufelkanals von Niederdruck-Dampfturbinen interpretiert werden, indem entsprechende Werte der Expansionsrate \dot{p} , der Mach-Zahl Ma sowie der Unterküh-

lung eingestellt werden. Für das Medium Wasserdampf liegen eine Vielzahl experimenteller Untersuchungen vor, zu welchen insbesondere die Arbeiten von Moore et al. [104], Moses und Stein [105] und Barschdorff [18] zählen. Während die Düsengeometrien der beiden erstgenannten aufgrund von Grenzschichteffekten sowie der Ausbildung von Diskontinuitäten der Strömung eine isolierte Betrachtung von Kondensationseffekten erschweren, liegen für letztgenannte ursprünglich keine Messdaten zur Größe der Tropfen vor. Da eine Validierung, wie Young [177] aufzeigt, jedoch zwingend anhand einer Kombination aus Druck- und Tropfenradienverläufen erfolgen sollte, führen Maqueo Martinez et al. [96] für die Düsengeometrie nach Barschdorff ergänzende Messungen der Tropfenradien durch. Zusätzlich wird ein komplementärer Testfall gewählt, bei welchem es sich um die im Rahmen des *International Wet Steam Modelling Project* (IWSMP) [141] numerisch untersuchte *Mystery-Düse* handelt. Um die Anwendbarkeit des PGIRoe-Schemas auf zweiphasige Strömungen unterschiedlicher Fluidspezies zu validieren, wird zudem eine von Theis [148] experimentell für CO₂ untersuchte Düsengeometrie analysiert. Im Anschluss an die Betrachtung von Laval-Düsen erscheint eine weitere Annäherung an die in Turbomaschinen vorherrschende dreidimensionale Strömung im Zuge der Validierung als sinnvoll. Dies wird durch die von zahlreichen Autoren (vgl. [12, 175, 133]) gelieferte experimentelle Evidenz einer verstärkten Interaktion zwischen disperser und kontinuierlicher Phase unter Anwesenheit von Diskontinuitäten der Strömung in den letzten Stufen von Niederdruck-Dampfturbinen bestätigt. Eine von White et al. [170] untersuchte axiale Turbinenkaskade eignet sich aufgrund der systematischen Variation der Strömungsbedingungen besonders als Basis eines entsprechenden numerischen Testfalles. Die quasi-zweidimensionale Untersuchung dieser Geometrie bildet daher den Abschluss der Validierung des PGIRoe-Schemas für zweiphasige Strömungen.

5.1 Einphasige Strömungen

Die Verifizierung und Validierung des PGIRoe-Schemas für einphasige Strömungen stellt eine notwendige Voraussetzung für die Untersuchung seiner Anwendbarkeit auf die Beschreibung von Phasenwechselvorgängen dar. Drei Anforderungen stehen hierbei im Fokus. Die thermophysikalischen Größen der Strömung müssen durch das PGIRoe-Schema korrekt berechnet werden. Außerdem muss es in der Lage sein, Diskontinuitäten und Gradienten im Strömungsfeld möglichst genau zu beschreiben und trotz dieser eine konvergierte Lösung zu erzielen. Dabei ist nachzuweisen, dass seine Anwendbarkeit für beliebig dimensionale Modellierungen der Strömung gewährleistet wird. Zuletzt ist die Konsistenz des Verfahrens zu prüfen, indem das PGIRoe-Schema unabhängig von der gewählten Einstellung bezüglich einer zweiten Phase im einphasigen Fall in das GIRoe-Schema übergehen muss.

5.1.1 Expansion von CO₂ und MDM in Laval-Düsen

Eine Herausforderung bei der Auswahl eines Testfalles zur Verifizierung des PGIRoe-Schemas für einphasige Strömungen nicht-idealer Fluide ist die Verfügbarkeit geeigneter Referenzdaten. Während unter der Annahme eines idealen Fluides eine Vielzahl etablierter CFD-Testfälle mit entsprechenden analytischen sowie experimentellen Referenzdaten in der Literatur verfügbar ist, findet sich für nicht-ideale Fluide keine vergleichbare Datenbasis. Aufgrund dessen wird zunächst der Testfall der NASA CDV-Düse, welcher in seiner ursprünglichen Formulierung ein kalorisch perfektes Gas voraussetzt, für das als nicht-ideal modellierte Medium CO₂ adaptiert.

Ausbildung eines Stoßes in einer mit CO₂ durchströmten Laval-Düse

Die Geometrie der NASA CDV-Düse kann dem linken Teil von Abbildung 19 entnommen werden. Entsprechend ihrer Benennung handelt es sich um eine Düse, welche sich aus einem konvergenten und einem divergenten Teil zusammensetzt. Um eine dimensionslose Betrachtung der geometrischen Charakteristika zu ermöglichen, werden zwei Kenngrößen eingeführt. Der Quotient aus der Querschnittsfläche A und dem engsten Querschnitt der Düse A^* bezeichnet die relative Fläche, während die relative Länge die Koordinate entlang der Düsenachse x auf die Gesamtlänge der Düse L bezieht. Die NASA CDV-Düse zeichnet sich durch einen engsten Querschnitt von 645.16 mm^2 und eine Gesamtlänge von 0.254 m aus, wobei der Übergang vom konvergenten zum divergenten Teil auf halber Düsenlänge erfolgt. Die Strömungscharakteristik innerhalb der Düse lässt sich anhand des Verhältnisses von statischem Druck am Austritt p_{out} zu totalem Druck am Eintritt $p_{t,in}$ variieren. Ein Parameter für die Klassifizierung dieser Variation ist die Mach-Zahl:

$$Ma = \frac{v}{a} \quad (5.1)$$

Sie setzt die Strömungsgeschwindigkeit in ein Verhältnis zur Schallgeschwindigkeit und bietet eine Möglichkeit, unterschiedliche Strömungsarten innerhalb der Düse abzugrenzen. Eine Mach-Zahl von eins charakterisiert die Strömung als sonisch. Liegt der Wert der Mach-Zahl innerhalb der gesamten Düse unter eins, so handelt es sich um eine rein subsonische Durchströmung. Nimmt die Mach-Zahl im divergenten Teil der Düse hingegen Werte größer als eins an, wird die Strömung lokal als supersonisch bezeichnet. Der Grenzfall, in welchem ausschließlich am engsten Querschnitt sonische Bedingungen vorherrschen, während die restliche Strömung subsonisch verbleibt, wird durch das kritische Druckverhältnis charakterisiert. Ein Unterschreiten des kritischen Druckverhältnisses führt zur Ausbildung einer Diskontinuität in Form eines Stoßes im divergenten Teil der Düse. Während unmittelbar vor der Stoßfront supersonische Bedingungen vorliegen, ist die Strömung stromabwärts subsonisch. Die Position des Stoßes verschiebt sich mit abnehmendem Druckverhältnis hin zum Austritt der Düse. Wird dieser gerade erreicht, so herrschen im gesamten divergenten Teil

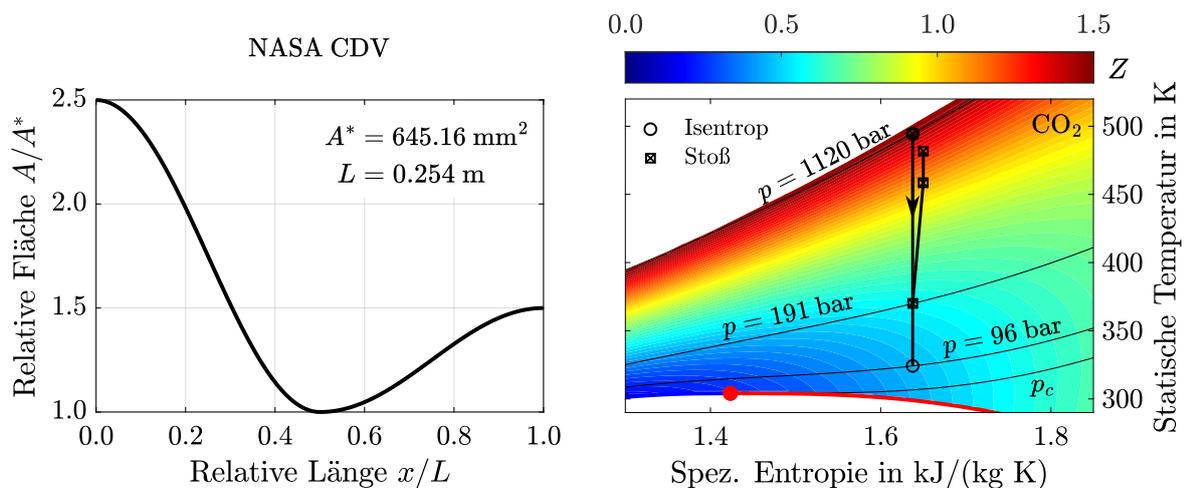


Abbildung 19: Geometrische Charakteristika der NASA CDV-Düse [94] (links) und Spezifikation zweier Testfälle (○ Isentrop und ⊠ Stoß) im T - s -Diagramm von CO₂ (rechts)

Tabelle 4: Randbedingungen der NASA CDV-Düse für das Medium CO₂

	$p_{out}/p_{t,in}$	$p_{t,in}$	$T_{t,in}$
Isentrop	0.08	1200 bar	500 K
Stoß	0.75		

der Düse supersonische Bedingungen. Unter der Annahme einer adiabaten und reibungsfreien Strömung lassen sich somit entsprechend Tabelle 4 zwei charakteristische Fälle unterscheiden. Der Fall *Isentrop* zeichnet sich durch eine rein supersonische Durchströmung des divergenten Teils der Düse aus, wobei das angegebene Druckverhältnis von 0.08 unmittelbar aus der Düsengeometrie sowie der Wahl des Fluides und dem thermodynamischen Zustand am Eintritt resultiert. Durch das Einstellen eines Druckverhältnisses von 0.75 kommt es für CO₂ zur Ausbildung eines Stoßes, welcher die Benennung des zugehörigen Testfalles als *Stoß* indiziert. Die Eintrittsrandbedingung wird derart gewählt, dass zum einen eine möglichst hohe Variation des Realgasfaktors entlang der Düsenachse erreicht wird und zum anderen der Zustand am Austritt der supersonisch durchströmten Düse im Umfeld des kritischen Punktes sowie des Zweiphasengebietes von CO₂ liegt. Die aus den in Tabelle 4 aufgeführten totalen Größen resultierenden statischen thermodynamischen Zustände sind im rechten Teil von Abbildung 19 in Form eines T - s -Diagrammes dargestellt. Beide Testfälle weisen den gleichen Eintrittszustand auf, welcher durch einen statischen Druck von 1120 bar gekennzeichnet ist. Ausgehend von diesem erfolgt eine isentrope Expansion, welche für den durch einen Kreis gekennzeichneten Fall *Isentrop* bis auf einen Druck von 96 bar erfolgt. Im Fall *Stoß*, welcher durch ein Kreuz im Quadrat symbolisiert wird, kommt es bei einer Temperatur von etwa 370 K zur Ausbildung eines Stoßes, in dessen Folge die Entropie sowie der Druck und die Temperatur zunehmen. In beiden Fällen kann eine hohe Variation des Realgasfaktors beobachtet werden. Dieser nimmt für den Fall *Isentrop* Werte zwischen 0.5 und 1.5 an. Es sei angemerkt, dass es sich bei den dargestellten Verläufen um die Ergebnisse quasi-eindimensionaler quasi-analytischer Berechnungen handelt, welche im Weiteren als Referenzlösung für die Verifizierung des PGIRoe-Schemas genutzt werden. Die Bezeichnung als quasi-eindimensional zeigt an, dass lediglich die Flächenänderung entlang einer Dimension in Form der Düsenachse im Zuge der Lösung berücksichtigt wird. Als quasi-analytisch gilt eine Berechnung, welche das Strömungsfeld analytisch löst, wobei aufgrund der Verwendung einer Mehrparameter-Zustandsgleichung die Bestimmung ausgewählter thermodynamischer Zustandsgrößen iterativ erfolgen muss. Um die Durchströmung der NASA CDV-Düse anhand des in TRACE implementierten PGIRoe-Schemas berechnen zu können, ist zunächst ein geeignetes räumliches Gitter zu wählen. Dabei ist zu beachten, dass der Strömungslöser TRACE hierzu eine dreidimensionale Modellierung der Düse fordert. Um den Einfluss der hieraus resultierenden Symmetrie-Randbedingung auf die Strömung entlang der Düsenachse möglichst gering zu halten und somit eine quasi-zweidimensionale Beschreibung zu ermöglichen, wird die Tiefe der Düse zu 0.1L gewählt. Entsprechend der in Kapitel 4.4 vorgestellten Vorgehensweise wird zunächst ein grob strukturiertes Gitter erzeugt. Die Geometrie der NASA CDV-Düse wird mit 100 Knotenpunkten in Richtung der x -Koordinate, 50 Punkten in Richtung der y -Koordinate und 3 Punkten in Richtung der z -Koordinate vernetzt. Das grobe Gitter weist somit eine Knotenpunktzahl von 15,000 auf. Der Verfeinerungsfaktor wird zu $r_G = 2$ gewählt. In der Folge ist das mittlere Gitter durch 120,000 Knoten und das feine Gitter anhand von 960,000 Knotenpunkten definiert. Eine systematische Aufstellung der Parameter zur Untersuchung des

	Räumliches Gitter \circ	Tabelle \mathcal{F}_Φ \blacktriangle
Grob Index 4	15,000	250 $\Delta p = 4.44$ bar $\Delta T = 0.80$ K
Mittel Index 2	120,000	500 $\Delta p = 2.22$ bar $\Delta T = 0.40$ K
Fein Index 1	960,000	1000 $\Delta p = 1.11$ bar $\Delta T = 0.20$ K

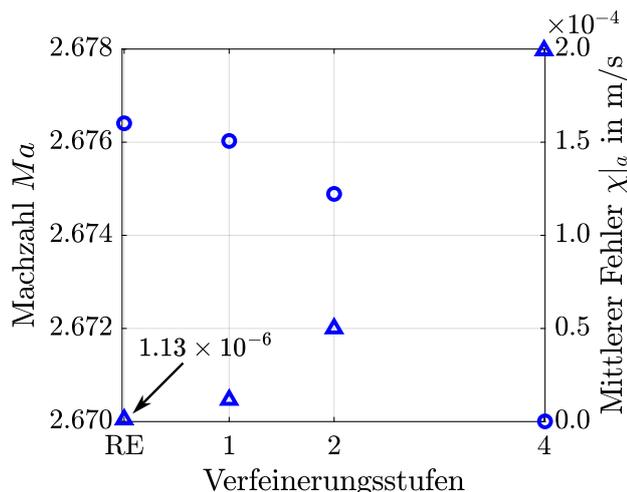


Abbildung 20: Systematische Analyse der Diskretisierungsfehler des räumlichen Gitters der NASA CDV-Düse sowie der tabellierten thermophysikalischen Größen von CO_2 für $p \in [90; 1200]$ bar und $T \in [300; 500]$ K anhand dreier Verfeinerungsstufen und der Richardson-Extrapolation

Diskretisierungsfehler des räumlichen Gitters kann dem linken Teil von Abbildung 20 entnommen werden. Für alle drei Gitter wird mittels des Strömungslösers TRACE eine numerische Lösung für den Fall *Isentrop* bestimmt. Dabei werden sowohl räumlich als auch zeitlich Verfahren mit einer Genauigkeit zweiter Ordnung gewählt, sodass die theoretische Konvergenzordnung den Wert zwei annimmt. Die Konvergenz der iterativen Lösungen wird durch das Unterschreiten eines Konvergenzkriteriums von $ResL1 = 1.0 \times 10^{-6}$ sichergestellt. Als charakteristische Größe wird die flächengemittelte Mach-Zahl am Austritt der Düse gewählt. Eine Auswertung dieser anhand der drei berechneten Lösungen ergibt unter Anwendung von Gleichung 4.59 eine Konvergenzordnung von $\theta_G = 2.08$. Aufgrund der nur sehr geringen Abweichung von berechneter und theoretischer Konvergenzordnung erscheint die Konsistenz der Methode als bestätigt. Folglich kann anhand von Gleichung 4.60 die Berechnung der Richardson-Extrapolation erfolgen. Der resultierende Wert der Mach-Zahl von $Ma_{RE} = 2.6764$ ist zusammen mit den für die drei räumlichen Gitter ermittelten Werten im rechten Teil von Abbildung 20 in Form blauer Kreise aufgetragen. Die Konvergenzordnung spiegelt sich im parabelförmigen Verlauf der dargestellten Punkte wider. Anhand der verwendeten Skala ist erkennbar, dass die Variation der Mach-Zahl für die drei betrachteten Gitter sehr gering ist. Eine Verfeinerung über das mittlere Gitter hinaus führt lediglich zu einer Änderung der Mach-Zahl um 0.04 %. Folglich lässt sich für das mittlere Gitter eine hinreichende Unabhängigkeit der Lösung von der räumlichen Diskretisierung annehmen, welche seine Verwendung für die weiteren Berechnungen rechtfertigt. Da die Auswertung der thermophysikalischen Größen im Sinne der Rechenzeiteffizienz anhand von tabellierten Daten erfolgen soll, ist auch der hiermit verbundene Diskretisierungsfehler zu analysieren. Analog der aus Kapitel 4.3 und Kapitel 4.4 bekannten Ansätze ist zunächst der zu tabellierende Zustandsbereich zu definieren. Dieser kann anhand von Abbildung 19 zu $p \in [90; 1200]$ bar und $T \in [300; 500]$ K abgeschätzt werden. Die Dimension der groben Tabelle wird zu 250 gesetzt, sodass die Schrittweite des Druckes einen Wert von $\Delta p = 4.44$ bar und die Schrittweite der Temperatur einen Wert von $\Delta T = 0.8$ K aufweist. Die Verfeinerung der Tabellen erfolgt mit dem Faktor $r_T = 2$, woraus sich für die mittlere Tabelle eine Dimension von 500 und für die feine von 1000 ergibt. Eine Auflistung der zugehörigen Schrittweiten der Tabellen ist im linken Teil von Abbildung 20 zu finden. Die Anzahl der zufällig gewählten Abfragen beträgt

$n_A = 250,000$. Anhand dieser kann für alle drei Tabellen eine Auswertung der thermophysikalischen Größen erfolgen. Wie in Kapitel 4.3 exemplarisch gezeigt, nehmen die relativen Fehler der einzelnen Größen je Tabelle ähnliche Werte an. Da diese Aussage jedoch für jeden Zustandsbereich einzeln nachzuweisen wäre, wird als charakteristische Größe die Variable mit dem höchsten relativen Fehler gewählt. Im hier betrachteten Fall handelt es sich dabei um die Schallgeschwindigkeit, deren mittlerer Fehler $\chi|_a$ folglich für alle drei Tabellen ermittelt wird. Die Bestimmung der Konvergenzordnung anhand von Gleichung 4.61 ergibt einen Wert von $\theta_T|_a = 1.96$, welcher die theoretische Konvergenzordnung der Tabelle $\theta_T = 2$ hinreichend annähert. Auf Grundlage dessen lässt sich die Richardson-Extrapolation mittels Gleichung 4.62 zu $\chi_{RE}|_a = 1.13 \times 10^{-6}$ m/s bestimmen. Wird diese zusammen mit den für die drei Tabellen ermittelten Fehlerwerten über der Verfeinerungsstufe aufgetragen, ergibt sich der im rechten Teil von Abbildung 20 anhand von Dreiecken dargestellte parabelförmige Trend. Entsprechend der in Kapitel 4.4 formulierten Anforderungen strebt die Richardson-Extrapolation und somit der mittlere Fehler für eine unendlich feine Tabelle gegen einen sehr kleinen Wert. Aufgrund der durch das niedrige Druckverhältnis im Fall *Isentrop* bedingten großen Ausdehnung des zu tabellierenden Zustandsbereiches unterschreitet jedoch nur die feinste Tabelle eine Fehlerschranke von 5.0×10^{-5} m/s. Die finalen Berechnungen werden daher unter Verwendung der feinsten Tabellen auf dem mittleren räumlichen Gitter durchgeführt. Für diese Kombination wird auf Grundlage der vorgestellten Ergebnisse die Unabhängigkeit der Lösung von der Diskretisierung des Gitters sowie der Tabelle angenommen. Da die Untersuchungen der Diskretisierungsfehler für alle in dieser Arbeit vorgestellten Testfälle qualitativ vergleichbare Ergebnisse zeigen, wird, um Repetition zu vermeiden, im Weiteren auf eine detaillierte Beschreibung dieser verzichtet. Die Ausführungen beschränken sich folglich auf die Spezifikation der räumlichen Gitter sowie der Tabellen, für welche eine Unabhängigkeit der Lösung von der Diskretisierung anhand der vorgestellten Vorgehensweise gewährleistet werden kann. Eine detaillierte Übersicht der für die Untersuchung der Diskretisierungsfehler gewählten Parameter kann Anhang C entnommen werden. Im linken Teil von Abbildung 21 sind die Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas bei Lösung der Euler-Gleichungen für die beiden untersuchten Testfälle in Form des Druckverhältnisses von statischem zu totalem Eintrittsdruck über der relativen Länge der Düse aufgetragen. Die Ergebnisse des Test-

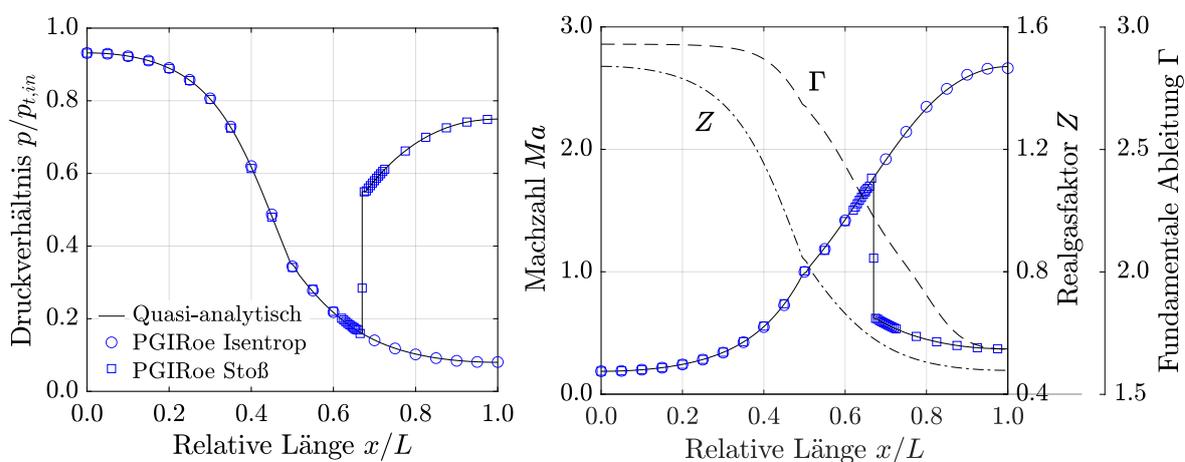


Abbildung 21: Verläufe des Druckes (links) und der Mach-Zahl (rechts) für zwei Testfälle der NASA CDV-Düse anhand einer quasi-analytischen Berechnung (Linie) und des PGI_{Roe}-Schemas (Symbole) für das Medium CO₂; zusätzlich Verläufe des Realgasfaktors und der fundamentalen Ableitung Γ

fallens *Isentrop* werden durch blaue Kreise dargestellt, während die blauen Quadrate den Fall *Stoß* symbolisieren. Um die Auflösung des Stoßes durch das PGI_{Roe}-Schema besser beurteilen zu können, wird die Anzahl der dargestellten Punkte im Umfeld der Stoßfront erhöht. Als Referenz werden zudem die quasi-analytischen Lösungen als schwarze durchgezogene Linien aufgetragen. Für beide Fälle zeigen die Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas eine hohe Übereinstimmung mit der jeweiligen quasi-analytischen Lösung. Dies gilt insbesondere für die Bereiche der Eintritts- sowie der Austrittsrandbedingung. Für den Fall *Stoß* wird die Position des Stoßes durch das PGI_{Roe}-Schema mit sehr hoher Genauigkeit abgebildet. Auch sind vor und hinter der Stoßfront keine Oszillationen erkennbar. Dies deutet darauf hin, dass die Robustheit des von Roe für kalorisch perfekte Gase formulierten Schemas gegenüber Diskontinuitäten für das PGI_{Roe}-Schema erhalten bleibt. Ein weiteres Indiz hierfür ist die Untersuchung der Mach-Zahl, welche im rechten Teil von Abbildung 21 aufgetragen ist. Auch für den Quotienten aus Strömungs- und Schallgeschwindigkeit zeigt das PGI_{Roe}-Schema eine hohe Übereinstimmung mit der quasi-analytischen Lösung. Der ebenfalls über der Düsenlänge aufgetragene Verlauf des Realgasfaktors Z für den Fall *Isentrop* bestätigt die erwartete Variation zwischen Werten von etwa 0.5 bis 1.5. Dies bedingt zum einen, dass das Fluid in großen Teilen der Düse anhand des Realgasfaktors als nicht-ideal klassifiziert werden kann. Zum anderen ist die Strömung innerhalb der Düse durch große Gradienten der thermophysikalischen Größen gekennzeichnet. Dies wird insbesondere im Umfeld der Stoßfront ersichtlich, wobei es hier zu einer sprunghaften Änderung des Realgasfaktors um etwa 0.5 kommt. Die Werte der fundamentalen Ableitung Γ nehmen hingegen ausschließlich Werte größer eins an, was eine Klassifizierung als klassisch ideal bedingen würde. Dies bestätigt die bereits in Kapitel 3.5 aufgezeigte Abhängigkeit der Klassifizierung von CO_2 von der Wahl des betrachteten Parameters und könnte mit der aufgezeigten moderaten molekularen Komplexität von CO_2 in Verbindung gebracht werden. Die Konsistenz des PGI_{Roe}-Schemas im einphasigen Fall kann anhand einer Variationsrechnung geprüft werden. Wird hierzu die Berechnung des Falles *Isentrop* unter expliziter Aktivierung des Zweiphasenmoduls in der Eingabedatei wiederholt, liegt die Abweichung zu den dargestellten Ergebnissen in der Größenordnung der Maschinengenauigkeit für doppelte Genauigkeit. Folglich geht das PGI_{Roe}-Schema im einphasigen Fall in das GI_{Roe}-Schema über. Die Verifizierung anhand der quasi-analytischen Lösung indiziert zudem, dass das PGI_{Roe}-Schema in der Lage ist, die physikalischen Zusammenhänge einphasiger Strömungen korrekt wiederzugeben und Stöße mit hoher Genauigkeit zu beschreiben. Aus diesem Grund erscheint eine Validierung des Schemas anhand experimenteller Daten als sinnvoll.

Gegenüberstellung experimenteller Daten einer mit MDM durchströmten Laval-Düse

Hierzu wird eine von Spinelli et al. [140] experimentell für das Arbeitsmedium MDM untersuchte Düsengeometrie als CFD-Testfall aufbereitet. Es handelt sich um eine Laval-Düse mit einem engsten Querschnitt von 314.16 mm^2 und einer Gesamtlänge von 0.1804 m . Die Kontur der Düse kann dem linken Teil von Abbildung 22 entnommen werden. In dieser ist auch die Detailansicht einer Besonderheit der Düse in Form einer rückwärtsgerichteten Stufe auf Höhe des Düsenhalses dargestellt. Die Höhe der Stufe beträgt etwa 0.1 mm und bedingt im Falle einer supersonischen Durchströmung des divergenten Teils der Düse die Ausbildung eines schrägen Stoßes. Die Querschnittsfläche der Düse weist eine rechteckige Form auf, wobei die Tiefe 18.7 mm beträgt. Spinelli et al. untersuchen die Strömung experi-

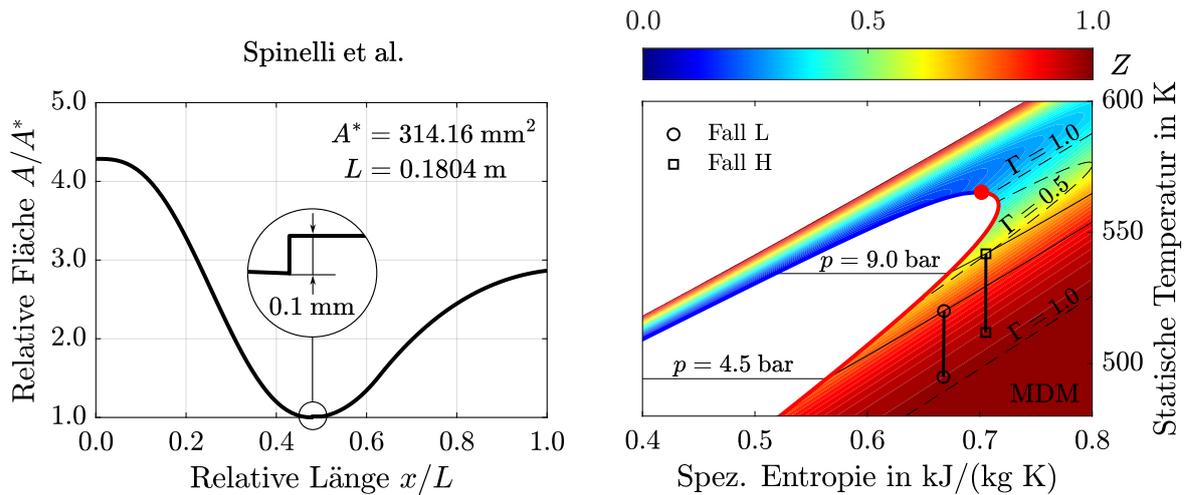


Abbildung 22: Geometrische Charakteristika der Düse nach Spinelli et al. [140] (links) und Spezifikation zweier Testfälle (\circ Fall L und \square Fall H) im T - s -Diagramm von MDM (rechts)

mentell durch Messung des statischen Druckes an neun Messstellen entlang der Düsenachse. Die totalen Zustände am Eintritt der Düse werden durch Messungen in einem der Teststrecke vorgelagerten Bereich ruhender Strömung vor Beginn des Experimentes einmalig eingestellt. Zum Startzeitpunkt des Experimentes strömt das Fluid in Folge des Öffnens eines Ventils in die Messstrecke ein, wodurch es zu einem stetigen Druckabfall im Druckbehälter kommt. Hieraus resultiert, dass zu Beginn des Experimentes am Eintritt der Düse ein maximaler Druck sowie ein minimaler Realgasfaktor vorherrschen. Für diesen Messzeitpunkt sind die Daten des gemessenen statischen Druckes in der Literatur verfügbar. Auch weisen Spinelli et al. anhand eines Vergleiches der Relaxationszeit der Düse mit der des Entleerens des Druckbehälters nach, dass die Düsenströmung zu jedem Messzeitpunkt als stationär angenommen werden kann. Um den Einfluss der Nicht-Idealität des molekular komplexen Fluides MDM auf die Strömungscharakteristik zu untersuchen, werden zwei unterschiedliche totale Eintrittszustände betrachtet. *Fall L* repräsentiert einen Eintrittszustand, welcher sich durch eine geringe Abweichung vom Gesetz idealer Gase auszeichnet, während der Realgasfaktor für *Fall H* einen deutlich von eins abweichenden Wert annimmt. Im rechten Teil von Abbildung 22 sind die statischen Ein- und Austrittszustände der beiden Fälle in einem T - s -Diagramm für das Medium MDM aufgetragen. Der Zustand am Austritt wird hierbei jeweils zur Veranschaulichung durch Annahme einer isentropen Durchströmung der Düse angenähert. Die totalen Eintrittszustände in Verbindung mit den die Testfälle charakterisierenden totalen Realgasfaktoren sind in Tabelle 5 aufgeführt. Anhand der farbigen Kontur des Realgasfaktors im T - s -Diagramm ist leicht erkennbar, dass für *Fall L* entsprechend der Zielsetzung des Testfalles keine erhebliche Abweichung vom Gesetz idealer Gase zu erwarten ist. Jedoch weist die fundamentale Ableitung im gesamten Verlauf der Düse Werte kleiner als eins auf, woraus eine Klassifizierung als klassisch nicht-ideal folgt. Selbiges gilt auch für *Fall H*, wobei der Realgasfaktor für diesen am Eintritt der Düse Werte im Bereich von et-

Tabelle 5: Randbedingungen der Düse nach Spinelli et al. für das Medium MDM

	$p_{t,in}$	$T_{t,in}$	$Z_{t,in}$
Fall L	4.58 bar	520 K	0.83
Fall H	9.02 bar	542 K	0.65

wa 0.7 annimmt. Für beide Fälle ist eine Zunahme des Realgasfaktors sowie des Wertes der fundamentalen Ableitung entlang der Düsenachse zu erwarten. Die Nicht-Idealität nimmt folglich in Richtung der Durchströmung ab. Um die beiden Testfälle einer Untersuchung anhand von CFD-Verfahren zugänglich zu machen, wird die Geometrie aus den von Spinelli et al. dokumentierten Geometriedaten vollständig rekonstruiert und strukturiert vernetzt. Die Auflösung des zu erwartenden schrägen Stoßes im divergenten Teil der Düse erfordert ein hinreichend feines Gitter, sodass für den Bereich der relativen Länge von 0.4 bis 1.0 eine Gitterverfeinerung vorgenommen wird. Um die Ablösung an der Stufe geeignet beschreiben zu können, wird insbesondere die Anzahl der Knotenpunkte in diesem Bereich erhöht. Die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen werden unter Anwendung des in TRACE implementierten *Shear Stress Transport* (SST) Turbulenzmodells nach Menter et al. [101] gelöst. Da auf eine Nutzung von Wandfunktionen zur Beschreibung der Turbulenz in Wandnähe verzichtet wird, muss eine rigide Beschränkung des dimensionslosen Wandabstandes y^+ , welcher ein Maß für den Abstand des ersten Gitterpunktes von der Wand darstellt, erfolgen. Die Feinheit des Gitters in Wandnähe wird folglich unter Einhaltung eines Kriteriums von $y^+ < 1$ als hinreichend angenommen. Für ein räumliches Gitter mit 1.92 Millionen Knotenpunkten kann anhand einer Untersuchung des Diskretisierungsfehlers die Gitterunabhängigkeit der Lösung nachgewiesen werden. Die Tabellierung der thermophysikalischen Größen erfolgt für ein Druckintervall von $p \in [0.5; 10]$ bar und einen Temperaturbereich von $T \in [490; 550]$ K. Die Berechnungen der beiden Testfälle erfolgen anhand des spezifizierten räumlichen Gitters sowie einer Tabelle mit Dimension 500. Als Konvergenzkriterium der iterativen Lösung wird ein Residuum von $ResL1 = 1.0 \times 10^{-6}$ gewählt. Abbildung 23 zeigt eine Gegenüberstellung der mit dem PGI_{Roe}-Schema berechneten Ergebnisse mit den experimentellen Daten. Dabei symbolisieren rote Punkte das Experiment, während blaue Kreise die Ergebnisse des in TRACE implementierten PGI_{Roe}-Schemas darstellen. Für *Fall L* ist im linken Teil der Abbildung das Verhältnis von statischem Druck zu totalem Eintrittsdruck über der Düsenlänge aufgetragen. Es liegen für acht Messstellen entlang der Düsenachse experimentelle Daten vor. Ein Vergleich dieser mit den anhand des PGI_{Roe}-Schemas ermittelten Werten zeigt eine qualitative Übereinstimmung im gesamten Bereich der Düse. Dabei nimmt die Abweichung im divergenten Teil und somit in dem der Stufe nachgelagerten

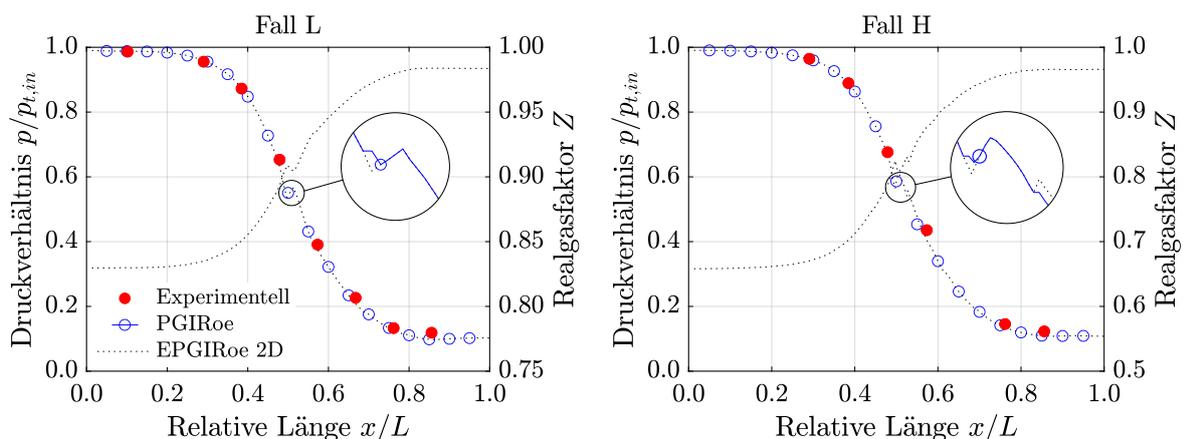


Abbildung 23: Gegenüberstellung der Verläufe des Druckes für Fall L (links) und Fall H (rechts) der Düse nach Spinelli et al. [140] anhand des PGI_{Roe}-Schemas (Symbole) mit den experimentellen Daten (Punkte) für das Medium MDM; zusätzlich Verläufe des Realgasfaktors sowie Druckverläufe für das zweidimensionale EPGIRoe-Schema (gepunktete Linie)

Bereich zu. Dies wird insbesondere für den Datenpunkt der letzten Messstelle ersichtlich, welcher zu den CFD-Ergebnissen die höchste Abweichung zeigt. Der Realgasfaktor, dessen Werte auf der rechten Ordinate aufgetragen sind, zeigt eine Zunahme von etwa 0.15 entlang der Düsenachse. Dabei strebt sein Wert am Düsenaustritt gegen einen Wert nahe eins, was in Übereinstimmung zu dem in Abbildung 22 dargestellten Wertebereich steht. Da die exakte Position des schrägen Stoßes, anhand der experimentellen Daten des Druckes nicht ermittelt werden kann, erscheint ein Vergleich der Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas mit denen des EPGI_{Roe}-Schemas hilfreich. Um die Vergleichbarkeit der Ergebnisse sicherzustellen und dabei der Beschränkung des EPGI_{Roe}-Schemas auf das Turbulenzmodell nach Spalart und Allmaras gerecht zu werden, wird die zuvor mit dem SST-Modell durchgeführte Berechnung des in TRACE implementierten PGI_{Roe}-Schemas unter Anwendung des Modells nach Spalart und Allmaras wiederholt. Zudem wird das zweidimensionale Gitter für die Berechnungen des EPGI_{Roe}-Schemas derart gewählt, dass es in den beiden Raumrichtungen die gleiche Knotenpunktanzahl und Struktur aufweist wie das für das PGI_{Roe}-Schema erzeugte dreidimensionale Gitter. Die Ergebnisse des EPGI_{Roe}-Schemas sind in Abbildung 23 in Form einer gepunkteten Linie dargestellt. Es sei angemerkt, dass die Punktdichte in Folge der Knotenpunktanzahl des Gitters ausreichend hoch ist, um einen Einfluss der durch die Linie bedingten linearen Interpolation auf die Darstellung der Ergebnisse negieren zu können. Der Wechsel des Turbulenzmodells von SST zu Spalart und Allmaras zeigt keinen darstellbaren Einfluss auf die Druckverteilung entlang der Düsenachse, sodass im Sinne der Übersichtlichkeit auf eine zusätzliche Datenreihe für das PGI_{Roe}-Schema verzichtet wird. Wie anhand der Detailansicht erkennbar ist, wird die Position des Kreuzungspunktes der durch die obere und untere Stufe der Düsengeometrie bedingten Stoßfronten, welche im Folgenden als Position des schrägen Stoßes bezeichnet wird, im *Fall L* von beiden Schemata übereinstimmend vorhergesagt. In der Charakteristik der Druckverläufe zeigt sich jedoch eine leichte Abweichung. Dabei scheint die Druckänderung über der Stoßfront durch das EPGI_{Roe}-Schema mit etwas höherer Genauigkeit aufgelöst zu werden. Die Abweichung weist jedoch eine derart geringe Ausprägung und lokale Begrenzung auf, dass sie durch die Unterschiede der beiden Verfahren in Bezug auf die ihnen zugrundeliegende zeitliche Diskretisierung sowie ihre Implementierung erklärbar erscheint. Dies kann als Plausibilisierung der Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas interpretiert werden. Eine weitere Indikation der Ergebnisvalidität kann anhand der Untersuchungen von Gori et al. [59] erfolgen. Die Autoren untersuchen für *Fall L* anhand einer CFD-Methode den Einfluss der Modellierung des Fluides auf die Strömungscharakteristik. Dabei stellen auch sie keinen relevanten Einfluss der Wahl des Turbulenzmodells auf den Druckverlauf entlang der Düsenachse fest. Zudem zeigen die von ihnen erzielten Ergebnisse sowohl in Bezug auf die Position des schrägen Stoßes als auch auf die Druckcharakteristik im divergenten Teil der Düse eine sehr große Ähnlichkeit mit den im linken Teil von Abbildung 23 dargestellten Ergebnissen. Dies deutet darauf hin, dass die Abweichung der Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas von den experimentellen Daten im divergenten Teil der Düse nicht auf das Schema selbst zurückzuführen ist. Vielmehr könnte es durch die CFD-Berechnungen zu einer Unterschätzung der Intensität reflektierter Stoßwellen kommen. Die von Spinelli et al. dokumentierten Schlieren-Bilder zeigen im Umfeld der beiden letzten Messstellen die Kreuzungspunkte zweier an den Düsenwänden reflektierter Stoßwellen, welche durch das PGI_{Roe}-Schema nicht mit vergleichbarer Intensität bestimmt werden. Dies könnte die lokale Unterschätzung des statischen Druckes begründen. In Ermangelung der Angabe eines Maßstabes der experimentellen Schlierenbilder ist eine wei-

terführende Untersuchung jedoch nicht möglich. Ein möglicher Einfluss der Nicht-Idealität des Fluides auf diese Beobachtung kann hingegen anhand der für *Fall H* im rechten Teil von Abbildung 23 dargestellten Ergebnisse untersucht werden. Auch hier symbolisieren die roten Punkte die experimentellen Daten, wobei durch Spinelli et al. lediglich für sechs Messstellen entsprechende Druckdaten dokumentiert werden. Die Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas, dargestellt als blaue Kreise, zeigen eine zu *Fall L* vergleichbar hohe Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Der Realgasfaktor nimmt entlang der Düsenachse um etwa 0.3 zu, wobei insbesondere im konvergenten Teil der Düse mit einem Einfluss der Nicht-Idealität des Fluides auf die Strömungscharakteristik zu rechnen ist. Werden auch hier die Ergebnisse des EPGI_{Roe}-Schemas genutzt, um die Position des schrägen Stoßes im Detail zu analysieren, so fällt auf, dass die beiden Verfahren auch für *Fall H* im Umfeld des Stoßes eine leichte Abweichung zeigen. Während die Stoßposition durch beide gleich verortet wird, scheint auch in diesem Fall das EPGI_{Roe}-Schema die Stoßfront mit etwas höherer Genauigkeit aufzulösen. Zudem sagt es für einen weiteren Stoß stromabwärts des ersten eine leicht höhere Intensität voraus. Jedoch ist der Unterschied zwischen den beiden Verfahren erneut sehr gering und beschränkt sich auf das direkte Umfeld des schrägen Stoßes. Die ebenfalls bereits für *Fall L* diskutierte Abweichung der CFD-Ergebnisse von den experimentellen Daten im divergenten Teil der Düse kann auch für *Fall H* in vergleichbarer Weise beobachtet werden. Jedoch erscheint die allgemein hohe Übereinstimmung der Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas mit den experimentellen Daten für die Validierung als hinreichend. Dies wird durch die Untersuchung zweier Testfälle, welche sich durch einen unterschiedlichen Grad der Nicht-Idealität des Fluides auszeichnen, bekräftigt. Es kann somit angenommen werden, dass das PGI_{Roe}-Schema in der Lage ist, Strömungen nicht-idealer Fluide moderater und hoher molekularer Komplexität geeignet zu beschreiben. Auch zeichnet es sich durch eine hohe Genauigkeit bei der Auflösung von Stoßfronten aus. Dabei beschränken sich die bisherigen Untersuchungen zur Validierung des PGI_{Roe}-Schemas auf quasi-zweidimensionale Strömungen. Um das Verfahren auch für dreidimensionale Anwendungsfälle zu validieren, soll nun die Verdichtung von CO₂ in überkritischem Zustand anhand der Geometrie eines Radialverdichters untersucht werden. Der ausgewählte Testfall repräsentiert folglich eine in Rotation versetzte Strömung, für welche in Folge der Nähe ihrer thermodynamischen Zustände zum kritischen Punkt mit großen Gradienten im Strömungsfeld zu rechnen ist. Auf diese Weise eignet er sich besonders zur Demonstration der numerischen Stabilität des PGI_{Roe}-Schemas.

5.1.2 Verdichtung von CO₂ in überkritischem Zustand

Bei der untersuchten Geometrie handelt es sich um den einstufigen Radialverdichter einer Turbomaschine, welche im Rahmen des Projektes sCO₂-HeRo entwickelt wurde. Der Verdichter wird daher im Weiteren kurz als HeRo-Verdichter bezeichnet. Die Zuströmung erfolgt parallel zur Rotationsachse, wobei ein dem Rotor vorgelagerter Teil des Zulaufes ebenfalls mit Rotordrehzahl dreht. Der Rotor selbst besteht aus 15 zweidimensionalen rein radialen Schaufeln und weist einen Außendurchmesser von etwa 40 mm auf. Seine Dimension ist somit vergleichbar zu der eines anderen häufig in der Literatur untersuchten Radialverdichterlaufrades der *Sandia sCO₂ compression loop facility* [173]. Das Fluid strömt aus dem Rotor in einen parallelen Radialdiffusor ein, welcher die Strömung wiederum in eine Volute ableitet. Der beschriebene Aufbau des HeRo-Verdichters kann mit Ausnahme der Volute dem linken Teil von Abbildung 24 entnommen werden. Dabei bezeichnet ω die Winkelgeschwindigkeit der dem Uhrzeigersinn entgegengesetzten Rotation um die Achse der x -Koordinate.

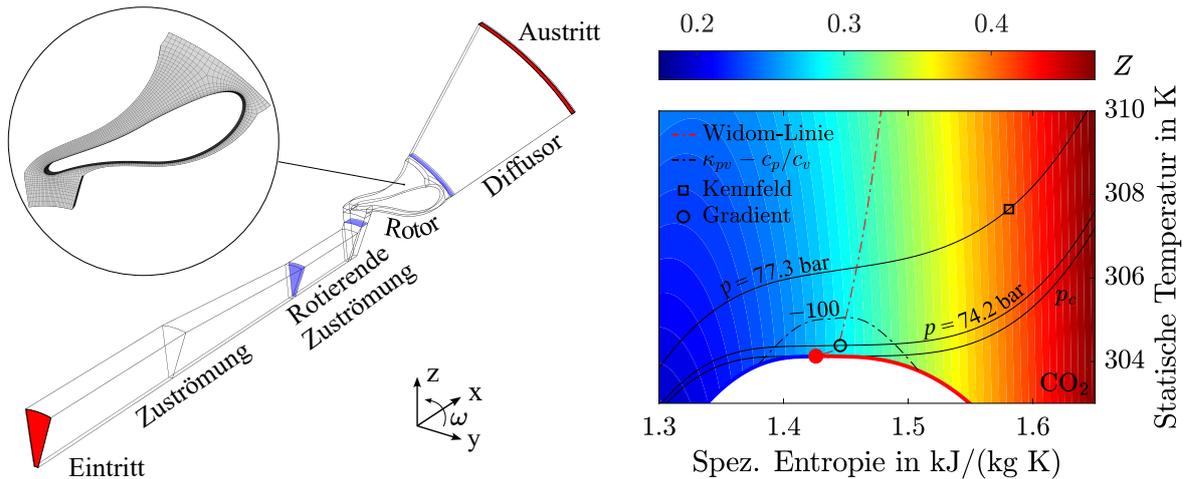


Abbildung 24: Geometrie und Aufbau des untersuchten Segmentes des HeRo-Verdichters mit einer Detailansicht der Vernetzungsstrategie des Rotors (links) und Spezifikation der untersuchten Eintrittszustände im T - s -Diagramm von CO_2 (rechts)

Hacks et al. [66, 68] führen anhand des HeRo-Verdichters eine Vielzahl experimenteller Untersuchungen durch, welche eine umfangreiche Datenbasis an Messwerten bilden. Diese ermöglichen in Kombination mit der bekannten Geometrie eine weitere Validierung des PGI-Roe-Schemas für zwei ausgewählte Testfälle. Eine Spezifikation der totalen thermodynamischen Zustände am Eintritt des Verdichters kann Tabelle 6 entnommen werden. Da im Experiment jeweils ein Wertepaar aus Druck und Dichte gemessen wird, handelt es sich bei den angegebenen Werten der Temperatur um anhand der Zustandsgleichung berechnete Größen. Im rechten Teil von Abbildung 24 sind die so definierten Eintrittszustände des Testfalles *Kennfeld* in Form eines Quadrates sowie des Falles *Gradient* als Kreis in einem T - s -Diagramm des Mediums CO_2 dargestellt. Um eine Einordnung der Zustände in Bezug auf die in ihrem Umfeld zu erwartenden Gradienten im Strömungsfeld zu ermöglichen, ist neben den Grenzkurven des Zweiphasengebietes auch die Widom-Linie als rote Strich-Punkt-Linie aufgetragen. Zudem ermöglicht die farbige Kontur des Realgasfaktors sowie eine Isolinie der Differenz aus isentropem Druck-Volumen-Exponenten und dem Verhältnis spezifischer Wärmekapazitäten, welche durch eine schwarze Strich-Punkt-Linie repräsentiert wird, eine Abschätzung der Nicht-Idealität. Für den Testfall *Kennfeld* nimmt der Realgasfaktor am Eintritt des Verdichters einen Wert von etwa 0.41 an. Dabei liegt der Zustandspunkt rechts vom kritischen Punkt sowie der Widom-Linie, wobei die verwendete Skalierung den geringen Abstand zum kritischen Punkt von etwa 3.5 bar und 3.5 K stark vergrößert darstellt. Der Fall *Gradient* stellt eine weitere Annäherung an den kritischen Punkt dar und liegt folglich in unmittelbarer Nähe zum Zweiphasengebiet sowie der Widom-Linie. Mit einem Realgasfaktor von etwa 0.28 weist er eine zum kritischen Punkt vergleichbare Nicht-Idealität am Eintritt des Verdichters auf. Die Differenz zwischen isentropem Druck-Volumen-Exponenten und dem Verhältnis spezifischer Wärmekapazitäten beträgt etwa -288 . Dies entspricht ei-

Tabelle 6: Randbedingungen des HeRo-Verdichters für das Medium CO_2

	$p_{t,in}$	$T_{t,in}$	n_s	\dot{m}_{out}
Kennfeld	77.3 bar	307.65 K	10,000 - 25,000 rpm	0.04 - 0.33 kg/s
Gradient	74.2 bar	304.39 K	30,392 rpm	0.31 kg/s

ner relativen Abweichung des isentropen Druck-Volumen-Exponenten von etwa 100 % und verdeutlicht die erhebliche Abweichung von der Modellannahme eines kalorisch perfekten Gases in diesem Zustandspunkt. Sowohl für den Fall *Kennfeld* als auch den Fall *Gradient* ergibt sich somit eine Klassifikation der Fluidzustände als nicht-ideal, wobei für den Fall *Gradient* entsprechend seiner Benennung mit großen Gradienten der thermophysikalischen Größen im Strömungsfeld zu rechnen ist. Die Durchströmung des HeRo-Verdichters wird für die beiden Testfälle anhand einer Modellvereinfachung untersucht. Dabei erfolgt eine Reduktion der Geometrie auf ein 24° -Segment, welche die Aufprägung einer periodischen Randbedingung in Umfangsrichtung bedingt. Da die Querschnittsfläche der Volute in dieser Richtung jedoch eine kontinuierliche Änderung aufweist, kann sie im Zuge einer solchen Vorgehensweise nicht länger sinnvoll berücksichtigt werden. Sie wird folglich genauso wie die in der realen Maschine auftretenden Leckage-Massenströme bei der Modellierung vernachlässigt. Es ist hervorzuheben, dass diese vereinfachenden Annahmen der vorliegenden Zielsetzung jedoch nicht entgegenwirken. Durch eine Reduktion der Knotenpunktzahl um mehr als den Faktor 15 kann die benötigte Rechenzeit erheblich reduziert werden. Zudem wirkt sich die Volute als ruhendes Bauteil tendenziell eher vorteilhaft auf die numerische Stabilität der Lösung aus, sodass auch unter Vernachlässigung dieser ein entsprechender Erkenntnisgewinn möglich erscheint. Die Flächen der Ein- und Austrittsrandbedingung sind im linken Teil von Abbildung 24 in roter Farbe dargestellt, während blaue Flächen die Grenzflächen zwischen den Komponenten kennzeichnen. Am Eintritt wird eine drallfreie Zuströmung angenommen, welche durch einen vorgegebenen totalen Druck sowie eine totale Temperatur charakterisiert wird. Die rotierenden Komponenten drehen mit einer definierten Rotordrehzahl n_s . Zudem dient eine Vorgabe des Massenstroms \dot{m}_{out} als Austrittsrandbedingung. Eine Übersicht über die vollständigen Randbedingungen der beiden untersuchten Testfälle ist in Tabelle 6 aufgeführt. Die Grenzflächen zwischen den Komponenten stellen ebenfalls Randbedingungen dar, welche anhand des Modells der *Mixing Plane* beschrieben werden. Anders als das Modell des *Frozen Rotor*, welches die Randbedingung an der Grenzfläche anhand einer lokalen Momentaufnahme der Rotation bestimmt, ermöglicht das Modell der *Mixing Plane* eine Berücksichtigung der Rotationsbewegung. Hierzu werden die Kreissegmente in definierte radiale Profile unterteilt, innerhalb welcher die Strömungsgrößen in Umfangsrichtung gemittelt werden. Diese Vorgehensweise wird für beide Seiten der Grenzfläche angewandt und führt zu einer Aktualisierung der Randbedingung in jedem Iterationsschritt. Die strukturierte Vernetzung der Geometrie erfolgt für jede seiner Komponenten und somit der Zuströmung, des Rotors sowie des Diffusors separat. Dabei wird für die wandnahen Bereiche eine systematische Gitterverfeinerung vorgenommen. Eine Detailansicht der Vernetzungsstrategie des Rotors ist in Abbildung 24 dargestellt. Pečnik et al. [118] geben einen Überblick über die mit der Turbulenzmodellierung kompressibler nicht-idealer Fluide in überkritischem Zustand verbundenen Herausforderungen. Eine vergleichende Untersuchung unterschiedlicher *Eddy-Viscosity*-Modelle in Hinblick auf ihre Fähigkeit, Turbulenzeffekte in Strömungen kompressibler nicht-idealer Fluide zu beschreiben, wird durch Otero et al. [114] unternommen. Sie zeigen auf, dass die für ideale Fluide etablierten Turbulenzmodelle wie exemplarisch das SST-Modell für Strömungen nicht-idealer Fluide insbesondere unter Anwesenheit großer Gradienten im Strömungsfeld unzureichende Ergebnisse liefern können. Lediglich das Modell nach Spalart und Allmaras weist trotz der Einfachheit seiner Formulierung eine hohe Übereinstimmung mit den mittels DNS erzeugten Ergebnissen auf. Für Untersuchungen von CO_2 nahe des kritischen Punktes wie im Falle des HeRo-Verdichters

erscheint dieses Modell daher als mögliche geeignete Wahl. Aufgrund seiner Eigenschaft, die Turbulenz bis hin zur Wand zu beschreiben, muss insbesondere der von der Viskosität beeinflusste Bereich der Grenzschicht durch das räumliche Gitter hinreichend aufgelöst werden. Um dies sicherzustellen, wird für den dimensionslosen Wandabstand ein Kriterium von $y^+ < 1$ gewählt. Unter Einhaltung dieser Bedingung wird eine Untersuchung des mit dem räumlichen Gitter korrelierten Diskretisierungsfehlers durchgeführt. Anhand dieser kann für ein Gitter mit 949,000 Knotenpunkten die Gitterunabhängigkeit abgeleitet werden. Für den Fall *Kennfeld* erfolgt die Tabellierung der thermophysikalischen Größen in einem Druckintervall von $p \in [65;95]$ bar und einem Temperaturintervall von $T \in [295;320]$ K. Aufgrund der großen Gradienten im Umfeld des kritischen Punktes, welche besonders hohe Anforderungen an die Diskretisierung der Tabelle stellen, wird eine Dimension von 1000 gewählt. Weist die Tabelle im Umfeld der Satttdampflinie eine unzureichende Auflösung auf, kann dies die Stabilität des iterativen Lösungsverfahrens gefährden. Aufgrund dessen wird zusammen mit den tabellierten Größen für diesen Bereich ein Konfidenzintervall hinterlegt, bei dessen Verlassen die Zustandsgleichung direkt ausgewertet wird. Um die Zielsetzung einer Tabellierung nicht zu unterminieren, wird sichergestellt, dass mindestens 95 % der auszuwertenden Zustände anhand der Tabelle ermittelt werden. Im Fall *Gradient* umfasst der tabellierte Bereich ein Druckintervall von $p \in [65;90]$ bar und ein Temperaturintervall von $T \in [295;315]$ K. Auch hier wird die Tabellendimension entsprechend obiger Ausführungen zu 1000 gewählt. Eine detaillierte Darstellung der Untersuchungen der Diskretisierungsfehler des räumlichen Gitters sowie der tabellierten thermophysikalischen Größen im Fall *Gradient* ist in Tegethoff et al. [145] zu finden. Die Konvergenz der iterativen Lösung wird anhand eines Kriteriums von $ResL1 = 1.0 \times 10^{-6}$ beurteilt. Eine zusätzliche Indikation kann anhand des Verlaufes globaler Größen im Zuge des Iterationsprozesses gewonnen werden. Hierzu eignet sich neben dem Massenstrom am Eintritt auch das Druckverhältnis π :

$$\pi = \frac{p_{out}}{p_{in}} \quad (5.2)$$

Beide dieser Größen stehen in keiner direkten Abhängigkeit zu den aufgeprägten Randbedingungen und können zur vollständigen Charakterisierung der Strömung herangezogen werden. Stellen sich für sie konstante Werte ein, so scheint es im Zuge der iterativen Lösung zu keiner weiteren Änderung des Strömungsfeldes zu kommen. Unter Einbeziehung des Konvergenzkriteriums liegt somit eine konvergierte Lösung vor. Für den Fall *Kennfeld* wird auf diese Weise eine Vielzahl konvergierter Lösungen berechnet, wobei sowohl die Drehzahl als auch der Massenstrom am Austritt in den in Tabelle 6 definierten Bereichen variiert werden. Auf diese Weise ist die numerische Bestimmung eines Kennfeldes für den HeRo-Verdichter möglich. Im linken Teil von Abbildung 25 ist eine typische Darstellung eines solchen anhand der Auftragung des Druckverhältnisses über dem Massenstrom am Eintritt des Verdichters dargestellt. Dabei kennzeichnet die Farbe Blau eine Drehzahl von 10,000 rpm, die Farbe Rot eine Drehzahl von 20,000 rpm und die Farbe Schwarz eine Drehzahl von 25,000 rpm. Die experimentellen Daten sowie die zugehörigen Fehlerabschätzungen, welche auf den Untersuchungen von Hacks et al. [68] beruhen, werden anhand von Kreisen sowie Fehlerbalken des Massenstroms und des Druckverhältnisses visualisiert. Die Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas sind durch Quadrate dargestellt, während Dreiecke die Ergebnisse des dreidimensionalen EPGI_{Roe}-Schemas symbolisieren. Um die Vergleichbarkeit der anhand des PGI_{Roe}-Schemas und des EPGI_{Roe}-Schemas erzielten Ergebnisse zu gewähr-

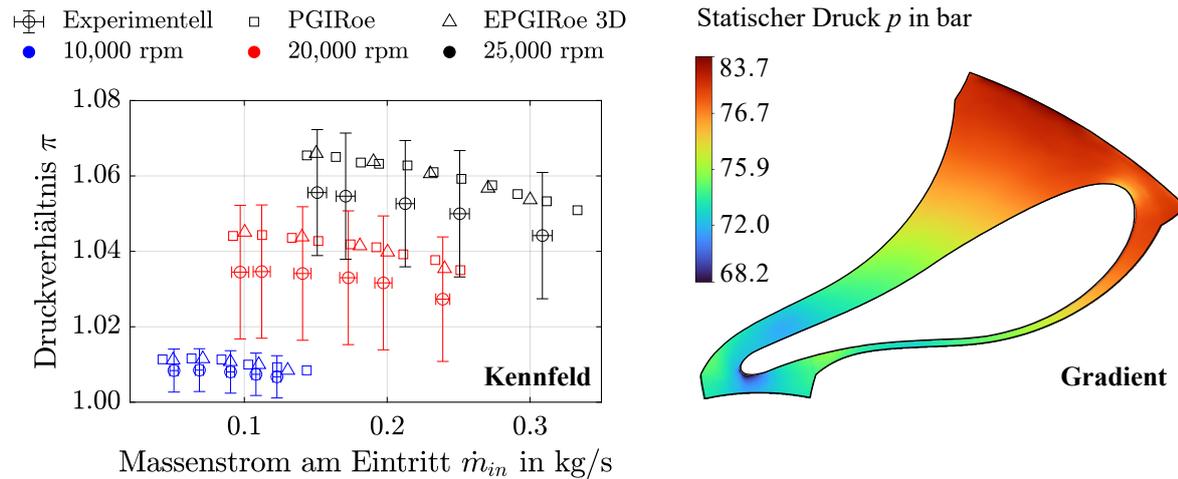


Abbildung 25: Kennfeld des HeRo-Verdichters in Form experimenteller Daten (\circ) mit Fehlerbalken, Berechnungen des PGIRoe-Schemas (\square) und des dreidimensionalen EPGIRoe-Schemas (\triangle) (links) sowie farbige Kontur des statischen Druckes im Rotor des Verdichters für den Testfall Gradient berechnet durch das PGIRoe-Schema (rechts)

leisten, werden diese anhand identischer räumlicher Gitter sowie tabellierter Zustandsgrößen berechnet. Im Sinne einer optischen Abgrenzung unterscheiden sich die Berechnungen der Schemata jedoch zumeist leicht in Bezug auf den Wert der Massenstromrandbedingung am Austritt. Ein Vergleich der experimentellen Daten mit den Ergebnissen des PGIRoe-Schemas zeigt eine hohe qualitative Übereinstimmung der resultierenden Verläufe. Außerdem liegen die numerisch bestimmten Werte ausnahmslos innerhalb der durch die Fehlerbalken umfassten Bereiche, wobei das Druckverhältnis erwartungsgemäß mit der Drehzahl ansteigt. Durch die numerischen Untersuchungen kommt es zu einer Überschätzung des Druckverhältnisses, welche jedoch anhand der dem Modell zugrundeliegenden Annahmen plausibilisiert werden kann. Aufgrund der im Zuge einer Durchströmung der Volute zu erwartenden Druckverluste, welche durch das untersuchte Modell vernachlässigt werden, käme es zu einer Absenkung des Druckverhältnisses. Auch die Vernachlässigung der Leckagemassenströme könnte zu einer Verschiebung der numerisch bestimmten Kennlinien konstanter Drehzahl führen, da der am Austritt eingestellte Massenstrom unter Berücksichtigung der Leckage nicht länger mit dem im Kennfeld aufgetragenen Massenstrom am Eintritt übereinstimmt. Die Ergebnisse des PGIRoe-Schemas erscheinen daher sowohl qualitativ als auch quantitativ plausibel. Dies wird zusätzlich durch die Ähnlichkeit der anhand des PGIRoe-Schemas sowie des EPGIRoe-Schemas bestimmten Verläufe der Kennlinien konstanter Drehzahl bestätigt. Das PGIRoe-Schema scheint somit in der Lage zu sein, auch dreidimensionale Strömungen nicht-idealer Fluide in Turbomaschinen zu beschreiben. Durch die Tabellierung der thermophysikalischen Größen kann die Rechenzeit zudem auf eine für die praktische Anwendung geeignete Größenordnung reduziert werden, was anhand der für ein Kennfeld benötigten Anzahl an Datenpunkte verdeutlicht wird. Bei der Untersuchung des Testfalls *Gradient* mittels des PGIRoe-Schemas kann aufgrund des innerhalb der Verdichtergeometrie vorliegenden Zustandsbereiches bereits das Erzielen einer konvergierten Lösung als Erfolg gewertet werden. Ein Nachweis der Konvergenz der iterativen Lösung dieses Testfalles sowie eine detaillierte Beschreibung der Vorgehensweise zur Erreichung einer solchen kann Tegethoff et al. [145] entnommen werden. Im rechten Teil von Abbildung 25 ist die Kontur des statischen Druckes im Rotor des HeRo-Verdichters für den Fall *Gradient* dargestellt. Anhand der farbigen Ab-

stufungen ist erkennbar, dass der Wert des Druckes zwischen 68.2 bar und 83.7 bar variiert. Sowohl im Bereich der Schaufelvorder- als auch der Schaufelhinterkante sind lokal begrenzte Bereiche niedrigeren Druckes erkennbar. Das Druckminimum wird dabei an der Schaufelvorderkante erreicht und indiziert durch das Unterschreiten der Taulinie die Ausbildung einer zweiten Phase. Aufgrund der in diesem Unterkapitel getätigten Beschränkung auf einphasige Betrachtungen wird durch REFPROP die Auswertung der Zustandsgleichung unter Annahme eines gasförmigen Fluides erzwungen. Diese Vorgehensweise ermöglicht innerhalb der Grenzen des gasseitigen metastabilen Zustandsbereiches auch jenseits der Taulinie eine Bestimmung der thermophysikalischen Größen der Gasphase. Wird das Spinodallimit jedoch überschritten, muss zum einen die physikalische Signifikanz der ermittelten Werte angezweifelt werden. Zum anderen kann die iterative Bestimmung des Druckes sowie der Temperatur in Ermangelung einer konvergierten Lösung scheitern. Daher erfolgt für diesen Bereich eine bilineare Extrapolation der Gasgrößen in das Zweiphasengebiet. Wird auf dieser Basis für den Testfall *Gradient* das Druckverhältnis anhand von Gleichung 5.2 bestimmt, ergibt sich ein Wert von $\pi = 1.121$. Das anhand der von Hacks et al. [66] dokumentierten Messdaten berechnete Druckverhältnis beträgt $\pi = 1.113$. Somit kommt es auch für diesen Fall durch das numerische Verfahren zu einer leichten Überschätzung des Druckverhältnisses, welche anhand der zuvor erläuterten Modellvereinfachungen plausibilisiert werden kann. Eine Analyse des Realgasfaktors innerhalb der Geometrie des Rotors zeigt eine besonders hohe Variation des Parameters im Bereich der Schaufelvorderkante sowie dem angrenzenden druckseitigen Schaufelprofil. Aus dieser Beobachtung lässt sich in Kombination mit der Indikation des Unterschreitens der Siedelinie lokal eine besondere Herausforderung für die Stabilität des numerischen Verfahrens ableiten. Das PGI_{Roe}-Schema scheint somit auch unter Anwesenheit großer Gradienten der thermophysikalischen Größen im Strömungsfeld sowie in direkter Nähe zum Zweiphasengebiet eine numerisch stabile Lösung erzielen zu können. Dies kann als Validierung des PGI_{Roe}-Schemas für Strömungen kompressibler nicht-idealer Fluide in unmittelbarer Nähe zum kritischen Punkt von CO₂ interpretiert werden. Auch zeigt dieser Testfall die aus einem realen Anwendungsfall resultierende Notwendigkeit der numerischen Berücksichtigung einer zweiten Phase auf.

5.2 Zweiphasige Strömungen

Bevor das PGI_{Roe}-Schema jedoch auf einen solchen angewendet werden kann, muss es zunächst anhand unterschiedlicher Testfälle zweiphasiger Strömungen verifiziert und validiert werden. Dabei sind drei Aspekte von besonderer Relevanz. Die in Kapitel 4.2 formulierten Konfigurationen des PGI_{Roe}-Schemas, welche sich maßgeblich in ihrer Art der Beschreibung einer dispersen Phase unterscheiden, sind hinsichtlich ihrer Fähigkeit den Phasenwechsel geeignet numerisch abzubilden, zu prüfen. Insbesondere die Mechanismen der Nukleation sowie des Tropfenwachstums müssen durch die Schemata korrekt wiedergegeben werden. Zudem ist sicherzustellen, dass ihre Anwendbarkeit auf beliebige nicht-ideale Fluide gewährleistet werden kann. Dabei ist im Zuge der Validierung neben der Nicht-Idealität der Gasphase auch die Art der Bestimmung der Schallgeschwindigkeit im Zweiphasengebiet zu berücksichtigen. Zuletzt soll das PGI_{Roe}-Schema in der Lage sein, sowohl Kondensations- als auch Stoßfronten in mehrdimensionalen Zweiphasenströmungen möglichst genau zu beschreiben.

5.2.1 Kondensation von Wasserdampf und CO₂ in Laval-Düsen

Die Verifizierung unterschiedlicher Konfigurationen des PGIRoe-Schemas erfordert einen Testfall, für welchen eine möglichst große Bandbreite an Vergleichsdaten verschiedener Modellierungsansätze der dispersen Phase vorliegt. Da zweiphasige Strömungen in der Realität jedoch stets eine polydisperse Tropfengrößenverteilung sowie Geschwindigkeitsdifferenzen zwischen den Phasen aufweisen, erscheinen experimentelle Daten hierzu ungeeignet. Auch ist es aufgrund von Wechselwirkungen zwischen den Phasen nicht möglich, für praxisrelevante Fragestellungen analytische Lösungsansätze abzuleiten. Dies bedingt, dass eine Verifizierung ausschließlich anhand geeigneter numerischer Daten erfolgen kann. Die im Rahmen des IWSMP [141] veröffentlichten numerischen Ergebnisse basieren auf der Anwendung von vierzehn unterschiedlichen Strömungslösern, welche sich unter anderem in der Wahl des Bezugssystems sowie der Beschreibung der Tropfengrößenverteilung unterscheiden. Der Einfluss der Modellierung der dispersen Phase auf die numerischen Ergebnisse des PGIRoe-Schemas lässt sich somit auf Grundlage dieser Daten einordnen.

Einfluss der Modellierung der dispersen Phase auf die numerischen Ergebnisse

Bei der hierzu untersuchten Geometrie handelt es sich um eine speziell für die Zielsetzung des IWSMP entworfene Laval-Düse, welche mit Wasserdampf durchströmt wird. Aufgrund ihrer Eigenschaft als Blindtestfall trägt sie den Namen Mystery-Düse und zeichnet sich gegenüber anderen Düsengeometrien durch einen von Diskontinuitäten freien Betriebsbereich aus. Zudem weist sie auslegungsbedingt für einphasige Strömungen eine nahezu konstante Expansionsrate \dot{p} auf.

$$\dot{p} = -\frac{1}{p} \cdot \frac{dp}{dt} = -\frac{u}{p} \cdot \frac{dp}{dx} \quad (5.3)$$

Entsprechend der Definition in Gleichung 5.3 ist die Expansionsrate proportional zur zeitlichen Änderung des Druckes. Wird die Strömungsgeschwindigkeit als Differential der örtlichen Koordinate nach der Zeit interpretiert, lässt sie sich auch anhand der Änderung des Druckes entlang der Düsenachse formulieren. Ein konstanter Wert der Expansionsrate setzt die Stetigkeit des Druckverlaufes voraus und indiziert folglich die angestrebte Abwesenheit von Diskontinuitäten. Das IWSMP untersucht zwei Varianten der Mystery-Düse, aus welchen für die weiteren Betrachtungen jene mit einer Expansionsrate von $\dot{p} = 3500 \text{ 1/s}$ gewählt wird. Eine Auftragung der relativen Fläche über der relativen Düsenlänge kann dem linken Teil von Abbildung 26 entnommen werden. Die Mystery-Düse weist einen engsten Querschnitt von 40 mm^2 auf, wobei anzumerken ist, dass es sich hierbei aufgrund der rein zweidimensionalen Definition der Geometrie um eine die Höhe des Düsenhalses repräsentierende Pseudofläche handelt. Die Länge der Düse beträgt 0.5 m und wird im Verhältnis 0.3 zu 0.7 in einen konvergenten und einen divergenten Abschnitt aufgeteilt. Für den im Folgenden als *Fall M* bezeichneten Testfall kann die Strömung im divergenten Teil als rein supersonisch angenommen werden. Auf die explizite Formulierung einer Randbedingung am Austritt der Düse wird daher verzichtet. Die Eintrittsrandbedingung in Form eines totalen Druckes von 1.1 bar und einer totalen Temperatur von 417 K ist zusammen mit der die Zustandsänderung innerhalb der Düse charakterisierenden Expansionsrate in Tabelle 7 formuliert. Der durch die statischen Größen am Eintritt definierte thermodynamische Zustand wird im rechten Teil von Abbildung 26 durch einen Kreis markiert. Dabei ist zu erkennen,

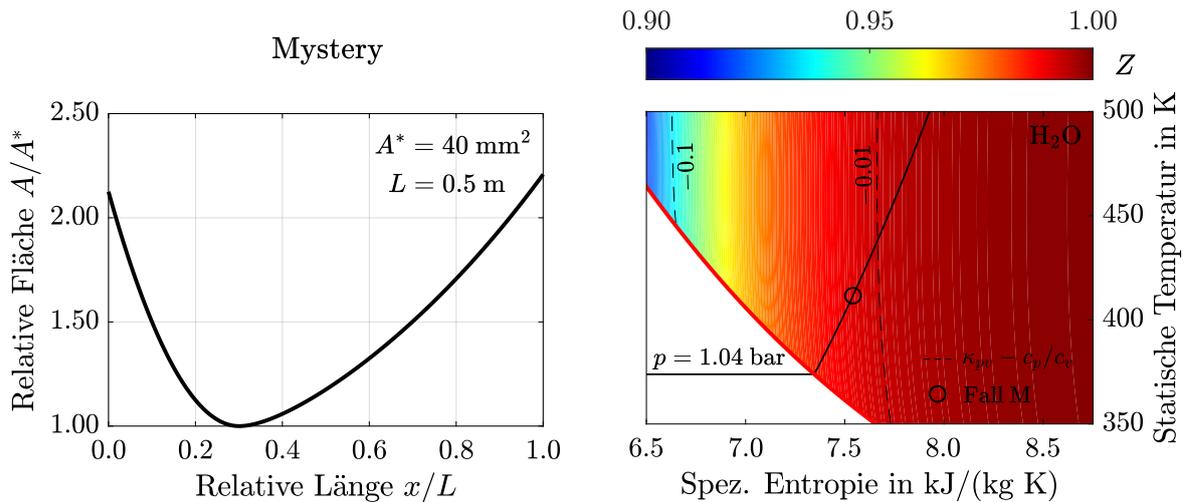


Abbildung 26: Geometrische Charakteristika der Mystery-Düse [141] (links) und Spezifikation des Testfalles M (○) im T - s -Diagramm von Wasser (rechts)

dass dieser oberhalb der Taulinie und somit im einphasigen Zustandsbereich der Gasphase liegt, sodass als zusätzliche Randbedingung am Eintritt ein Flüssigkeitsmassenanteil von $y = 0$ gewählt werden kann. Auch ist der Eintrittszustand durch einen Realgasfaktor von etwa 0.99 gekennzeichnet, welcher lediglich eine sehr schwache Nicht-Idealität der einphasigen Strömung indiziert. Die Abweichung des isentropen Druck-Volumen-Exponenten vom Verhältnis spezifischer Wärmekapazitäten beträgt etwa -0.013 , was einer relativen Abweichung von 1 % entspricht und die Indikation des Realgasfaktors bestätigt. Um der durch den Strömungslöser bedingten Forderung einer dreidimensional vernetzten Geometrie zu entsprechen und gleichzeitig die Bedingungen einer zweidimensionalen Untersuchung anzunähern, wird die Tiefe der Düse vergleichbar zur Vorgehensweise für die NASA CDV-Düse mit $0.1L$ modelliert. Im Sinne einer Vergleichbarkeit mit den Ergebnissen des IWSMP erfolgt eine Berücksichtigung von Turbulenzeffekten innerhalb der Strömung, welche anhand des Turbulenzmodells nach Spalart und Allmaras beschrieben werden. Bei der Vernetzung der Geometrie wird daher ein Kriterium des dimensionslosen Wandabstandes von $y^+ < 1$ gewählt. Für ein räumliches Gitter mit 576,000 Knotenpunkten, welches in Wandnähe entsprechende Verfeinerungen aufweist, zeigt eine Untersuchung des räumlichen Diskretisierungsfehlers die Gitterunabhängigkeit der Lösung. Die Tabellierung der thermophysikalischen Größen erfolgt für die Gas- und die Flüssigphase getrennt. Dabei wird für die Gasgrößen ein Druckintervall von $p \in [0.1; 1.15]$ bar und ein Temperaturintervall von $T \in [300; 430]$ K gewählt. Anders als im Rahmen einer rein einphasigen Betrachtung erlangt die Bestimmung der thermophysikalischen Größen im Zweiphasengebiet nun eine besondere Bedeutung. Liegt der zu tabellierende thermodynamische Zustand im Zweiphasengebiet, so ist zunächst abzufragen, welches Modell zur Beschreibung des Phasenwechsels herangezogen werden soll. Im Falle des Modells der homogenen Gleichgewichtskondensation kann auf eine Tabellierung der Zustände innerhalb des Zweiphasengebietes verzichtet werden. Die Speicherung

Tabelle 7: Randbedingungen der Mystery-Düse für das Medium Wasser

	$p_{t,in}$	$T_{t,in}$	\dot{p}
Fall M	1.1 bar	417 K	3500 1/s

der thermophysikalischen Größen der Gasphase sowie der Sättigungsgrößen von Gas- und Flüssigphase genügt für eine vollständige Zustandsbestimmung. Soll das Modell der homogenen Nicht-Gleichgewichtskondensation Anwendung finden, ist zunächst zu prüfen, ob der zu tabellierende Zustandspunkt in die Grenzen des metastabilen Bereiches fällt. Ist dies der Fall, wird die Zustandsgleichung unter Beschränkung auf gasförmige Zustände ausgewertet. Liegt der Zustandspunkt hingegen jenseits des Spinodallimits, besitzt er keine physikalische Signifikanz, weshalb eine Tabellierung des Wertes minus Eins erfolgt. Sollte es im Rahmen der iterativen Berechnungen des Strömungslösers zur Abfrage eines solchen Tabelleneintrages kommen, wird eine Warnmeldung ausgelöst. Das negative Vorzeichen dient dabei zur Aktivierung einer bilinearen Extrapolation jenseits des Spinodallimits unter Verwendung der Direktauswertung. Diese darf ausschließlich zur kurzzeitigen Stabilisierung des Lösungsvorganges eingesetzt werden und ermöglicht insbesondere im Umfeld des kritischen Punktes trotz der dort sehr geringen Ausdehnung des metastabilen Zustandsbereiches die Erzielung einer konvergierten Lösung. Um die physikalische Signifikanz der finalen Berechnungsergebnisse sicherzustellen, wird eine Aktivierung der bilinearen Extrapolation in den letzten 500 Iterationen ausgeschlossen. Kommt es in diesem Stadium der Lösung dennoch zu einem Überschreiten des Spinodallimits, so führt das negative Vorzeichen der tabellierten Werte zu einem Abbruch der Berechnungen. Die Tabellen der thermophysikalischen Größen der Gasphase setzen sich folglich aus Bereichen rein einphasiger sowie metastabiler Zustände im Zweiphasengebiet zusammen. Um die Abgrenzung dieser Bereiche mit hinreichender Genauigkeit auflösen zu können, erfolgt zusätzlich eine Tabellierung der Satttdampflinie sowie der Taulinie innerhalb des betrachteten Definitionsbereiches als Funktion der Temperatur. Für die Flüssigphase werden die thermophysikalischen Größen innerhalb eines Druckintervalls von $p \in [0.1; 0.55]$ bar und eines Temperaturintervalls von $T \in [310; 355]$ K tabelliert. Hierzu wird die Zustandsgleichung unter expliziter Beschränkung auf flüssige Zustände ausgewertet. Die Untersuchung des Diskretisierungsfehlers der Tabellen zeigt eine Auffälligkeit in Bezug auf die für eine hinreichende Auflösung des Zustandsbereiches benötigten Tabellendimensionen. Während die Tabellen der Gasphase bereits für eine Dimension von 500 einen hinreichend geringen Betrag des mittleren Fehlers der Schallgeschwindigkeit zeigen, wird ein solcher im Falle der flüssigen Phase nur für die nächsthöhere Dimension von 1000 erreicht. Da das Druck- und Temperaturintervall für die Gasphase einen größeren Wertebereich umfasst, entspricht dies zunächst nicht der Erwartung. Jedoch zeigt sich, dass die Zustandsgleichung der IAPWS-IF97 für Bereich 1 und somit flüssige Zustände innerhalb der untersuchten Intervallgrenzen eine deutlich höhere Sensitivität in Bezug auf Änderungen der Definitionsparameter besitzt als die Gleichungen der Bereiche 2 und 2s für die Gasphase. Eine Beschreibung des Phasenwechsels kann entsprechend Kapitel 3.4 anhand unterschiedlicher Modellannahmen erfolgen. Um nachzuweisen, dass das PGI_{Roe}-Schema in der Lage ist, die zugrundeliegenden physikalischen Vorgänge korrekt wiederzugeben, erfolgt zunächst ein Vergleich der Ergebnisse dreier Modellierungsarten. Dieser ermöglicht zum einen eine Plausibilisierung und zeigt zum anderen für den *Fall M* die Charakteristik des Phasenwechsels innerhalb der Mystery-Düse auf. Im linken Teil von Abbildung 27 wird der Druckverlauf der trockenen Durchströmung mit Wasserdampf den Verläufen unter Annahme einer homogenen Gleichgewichtskondensation sowie einer homogenen Nicht-Gleichgewichtskondensation gegenübergestellt. Dabei liegt der Fokus der Darstellung auf dem divergenten Teil der Düse. Um eine möglichst isolierte Analyse des Einflusses der Modellierung des Phasenwechsels auf die Strömungsgrößen zu ermöglichen, wird für alle

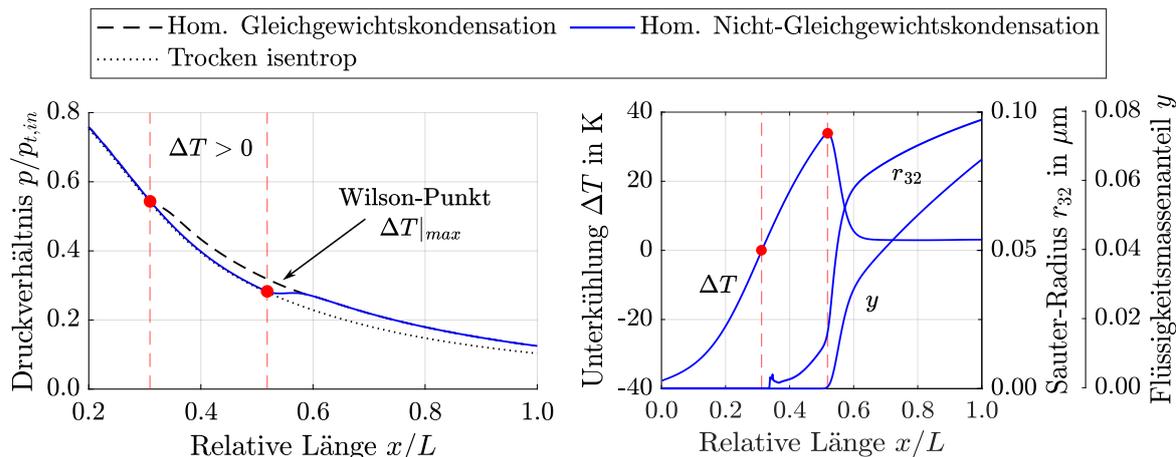


Abbildung 27: Vergleich unterschiedlicher Modelle zur Beschreibung der Kondensation anhand des Druckverlaufes entlang der Mystery-Düse (links) und Verläufe der charakteristischen Größen unter Annahme einer homogenen Nicht-Gleichgewichtskondensation (rechts) für das Medium Wasser

drei Berechnungen durch Lösung der Euler-Gleichungen auf eine Berücksichtigung von Reibungseffekten verzichtet. Dabei erfolgt wie auch für alle nachfolgenden Berechnungen dieses Testfalles die Beurteilung der Konvergenz der iterativen Lösung anhand eines Kriteriums von $ResL1 = 1.0 \times 10^{-7}$. Die als trocken modellierte Durchströmung weist eine isentrope Charakteristik auf und wird durch eine schwarz gepunktete Linie dargestellt. Ihr Druckverlauf gleicht den bereits aus Kapitel 5.1 bekannten Verläufen für Laval-Düsen mit supersonischer Austrittsrandbedingung. Der Druckverlauf des PGIRoe-Schemas bei Beschreibung des Phasenwechsels anhand des Modells der homogenen Gleichgewichtskondensation, welcher durch eine schwarz gestrichelte Linie dargestellt wird, stimmt zunächst mit dem der trockenen Strömung überein. Im Zuge der Expansion entlang der Düsenachse kommt es jedoch in Folge der Abnahme von Druck und Temperatur an einer definierten Position zum Unterschreiten der Satt dampflinie. In Abbildung 27 ist dies durch einen roten Punkt auf Höhe einer relativen Länge von 0.32 markiert. Die resultierende Unterkühlung größer null kennzeichnet entsprechend des Modells der homogenen Gleichgewichtskondensation den Einsatz der Kondensation und somit die Ausbildung einer zweiten Phase. Da das Modell das Vorliegen eines Gleichgewichtszustandes zwischen den Phasen voraussetzt, wird der thermodynamische Zustand des Phasengemisches stromabwärts eindeutig durch die jeweiligen Sättigungsgrößen und den Flüssigkeitsmassenanteil bestimmt und resultiert in einem zur trockenen Strömung näherungsweise parallelen Druckverlauf. Um die realen physikalischen Vorgänge der Kondensation sowie die Wechselwirkung der Phasen beschreiben zu können, muss die Annahme eines Phasengleichgewichtes jedoch aufgegeben werden. Der Druckverlauf des PGIRoe-Schemas für das Modell der homogenen Nicht-Gleichgewichtskondensation, welcher durch eine blaue Linie repräsentiert wird, sollte daher anhand der Mechanismen der Nukleation sowie des Tropfenwachstums plausibilisierbar sein. Zunächst zeigt auch dieser Verlauf eine zur trockenen Strömung vergleichbare Charakteristik. Anders als unter Annahme einer Gleichgewichtskondensation, kommt es beim Unterschreiten der Satt dampflinie jedoch nicht unmittelbar zur Ausbildung einer zweiten Phase. Vielmehr bilden sich zunächst Cluster, welche jedoch kleiner als der kritische Keimbildungsradius sind und somit zerfallen. Wie im rechten Teil von Abbildung 27 erkennbar, nimmt die Unterkühlung weiter zu. Durch ein plötzliches Nukleationsereignis kommt es dann zur Entstehung einer Vielzahl stabiler

Kondensationskeime, welche sich zu einer in der Gasphase dispergierten flüssigen Phase formieren. Die Position entlang der Düsenachse, an welcher es zu einem solchen Nukleationsereignis kommt, wird durch einen weiteren roten Punkt bei einer relativen Düsenlänge von 0.52 hervorgehoben. Er kennzeichnet den Punkt maximaler Unterkühlung, welcher auch als Wilson-Punkt bezeichnet wird und für *Fall M* etwa bei einem Druck von 0.31 bar und einer Unterkühlung von 33 K liegt. Durch die im Zuge der Nukleation sowie des Tropfenwachstums von der flüssigen Phase freigesetzte Verdampfungsenthalpie steigt der Druck sowie die Temperatur der Gasphase an. In der Folge nimmt die Unterkühlung ab. Außerdem nähert sich der thermodynamische Zustand des Phasengemisches einem Gleichgewichtszustand an. Dies ist sowohl im Verlauf der Unterkühlung als auch im Druckverlauf anhand eines häufig als Kondensationsfront bezeichneten charakteristischen Druckanstieges und der nachfolgenden Annäherung an den Druckverlauf unter Annahme eines Gleichgewichtszustandes im linken Teil von Abbildung 27 erkennbar. Der Tropfenradius, welcher in Form des Sauter-Radius aufgetragen ist, nimmt stromabwärts des Wilson-Punktes in Folge des Wachstums der Tropfen zu und erreicht Werte von bis knapp unter $0.1 \mu\text{m}$. Da die Nukleation aufgrund des Temperaturanstieges stromabwärts der Kondensationsfront gehemmt wird, dominiert ab einer relativen Düsenlänge von etwa 0.6 der Mechanismus des Tropfenwachstums. Der Wert des Flüssigkeitsmassenanteils nimmt im Wilson-Punkt erstmals einen Wert größer null an. Er steigt bis zu einem Wert von etwas über 0.06, was einem Anteil der Flüssigkeitsmasse an der Gesamtmasse des Phasengemisches von etwa 6 % entspricht. Das Anwachsen der Tropfenradien, welche mit der dritten Potenz in das Volumen der flüssigen Phase eingehen und somit direkt mit der Flüssigkeitsmasse verknüpft sind, steht in Einklang mit einem weiteren Anstieg des Flüssigkeitsmassenanteils ab einer relativen Düsenlänge von etwa 0.6. Die in Abbildung 27 dargestellten Ergebnisse des PGIRoe-Schemas für die beiden unterschiedlichen Modellierungsarten der Kondensation erscheinen somit im Kontext der zu erwartenden physikalischen Vorgänge als plausibel. Insbesondere ist das PGIRoe-Schema in der Lage, die mit der Kondensation verknüpften physikalischen Mechanismen qualitativ korrekt abzubilden. Um eine Aussage über die quantitative Übereinstimmung der Ergebnisse des PGIRoe-Schemas mit Referenzdaten ableiten und das Schema somit verifizieren zu können, muss zunächst eine Wahl der zu untersuchenden Konfigurationen getroffen werden. Die Stokes-Zahl kann entsprechend Kapitel 4.1 als Indikator für die Fähigkeit der dispersen Phase, der kontinuierlichen Strömung in Bezug auf Richtung und Betrag der Strömungsgeschwindigkeit zu folgen, interpretiert werden. Anhand ihrer Definition in Gleichung 4.12 ist ersichtlich, dass ihr Wert vom Betrag der Geschwindigkeitsdifferenz zwischen den Phasen beeinflusst wird. Eine Berechnung von *Fall M* anhand des PGIRoe-Schemas der Konfiguration *E-E-P-Poly-S* unter Berücksichtigung von Reibungseffekten indiziert, dass die maximale Phasengeschwindigkeitsdifferenz an den Wänden der Düse in unmittelbarer Nähe zum Austritt erreicht wird. Eine Berechnung der Stokes-Zahl anhand der in diesem Bereich vorherrschenden Strömungsgrößen ergibt einen Wert von 0.09 und erfüllt somit nicht das für eine Berücksichtigung des Impulsaustausches formulierte Kriterium von $St > 0.1$. Aufgrund dessen werden für die Mystery-Düse im Weiteren lediglich die Konfigurationen *E-L-M-Poly*, *E-E-M-Mono* und *E-E-M-Poly* untersucht. Die beiden erstgenannten unterscheiden sich von der letztgenannten jeweils nur in einer der vier in Tabelle 3 spezifizierten Variationskategorien. Dies ermöglicht anhand eines Vergleiches mit den Ergebnissen der Konfiguration *E-E-M-Poly* eine isolierte Analyse des Einflusses der Wahl des Bezugssystems sowie der Beschreibung der Tropfengrößenverteilung. Zuvor muss jedoch eine Verifizierung der Kon-

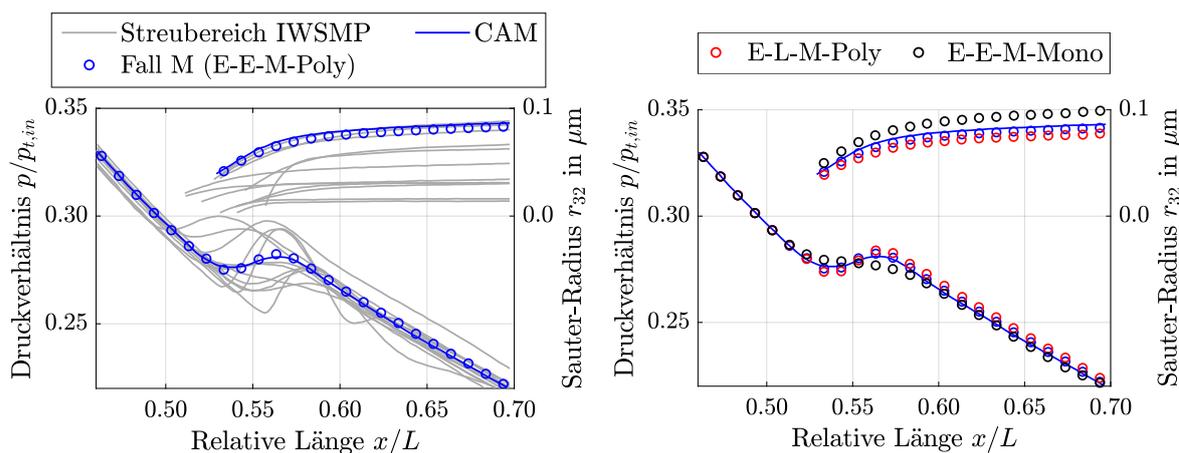


Abbildung 28: Verläufe des Druckes sowie des Sauter-Radius für den Fall M der Mystery-Düse bestimmt im Rahmen des IWSMP [141] (graue Linien), durch einen Strömungslöser der Universität Cambridge (blaue Linie) sowie anhand des PGIRoe-Schemas (Symbole) (links) und Vergleich unterschiedlicher Modellierungsarten der dispersen Phase anhand des PGIRoe-Schemas (rechts)

figuration *E-E-M-Poly* anhand von Referenzdaten des IWSMP erfolgen. Hierzu wird auf der linken Abszisse des linken Teils von Abbildung 28 das Verhältnis von statischem Druck zu totalem Eintrittsdruck aufgetragen. Die anhand des PGIRoe-Schemas berechneten und in Form blauer Kreise dargestellten Werte werden den Ergebnissen des IWSMP gegenübergestellt. Eine äquivalente Vorgehensweise wird anhand der rechten Abszisse für den Sauter-Radius verfolgt. Im Sinne der Übersichtlichkeit wird der Streubereich der Ergebnisse des IWSMP durch eine graue Kurvenschar dargestellt. Es ist erkennbar, dass die unterschiedlichen Strömungslöser sowohl in Bezug auf die Verläufe des Druckes als auch der Tropfenradien untereinander hohe Abweichungen zeigen. So muss zwar angemerkt werden, dass der dargestellte Abschnitt nur einen kleinen Teil der Düsengeometrie repräsentiert, jedoch variiert die Position und Form des Druckanstieges und insbesondere die Größe der Tropfenradien stark. Dies kann in Teilen durch die unterschiedlichen Arten und Implementierungen der untersuchten Strömungslöser erklärt werden. Starzmann et al. [141] nennen zudem Unterschiede in den verwendeten Modellen der Nukleations- und Wachstumsrate sowie den thermophysikalischen Modellgleichungen als mögliche Einflussfaktoren. Da folglich allein anhand des Streubereiches keine Verifizierung des PGIRoe-Schemas erfolgen kann, wird der Strömungslöser der Universität Cambridge als Referenz für einen weiterreichenden quantitativen Vergleich der Ergebnisse gewählt. Dieser erscheint aufgrund seiner Ähnlichkeit zur Implementierung des PGIRoe-Schemas in TRACE als besonders geeignet. Er basiert auf den gleichen Modellierungsansätzen der Nukleation und des Tropfenwachstums, nutzt identische Modellparameter zur Beschreibung des Tropfenwachstums nach Young und wertet die thermophysikalischen Größen anhand der gleichen Modellgleichungen aus. Die Beschreibung der dispersen Phase erfolgt genauso wie im Falle der Konfiguration *E-E-M-Poly* anhand eines Euler-Bezugssystems in Mischungsbasierter Schreibweise, wobei die polydisperse Tropfengrößenverteilung anhand ihrer statistischen Momente beschrieben wird. Da als Turbulenzmodell ebenfalls der Ansatz nach Spalart und Allmaras gewählt wird, können neben der Art der Implementierung lediglich zwei Unterschiede zum PGIRoe-Schema in TRACE identifiziert werden. Der Strömungslöser der Universität Cambridge verwendet ein explizites Verfahren zur zeitlichen Integration des Gleichungssystems und berechnet die numerischen Flussterme durch ein Schema, welches definitionsbedingt zur Ausbildung numerischer Dis-

sipation beiträgt. Trotz dieser Unterschiede zeigen die Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas sowohl in Bezug auf den Druckverlauf als auch den Sauter-Radius eine hohe Übereinstimmung mit den Referenzdaten. Dabei setzt die Kondensation für das PGI_{Roe}-Schema marginal später ein. Dies bedingt eine etwas höhere Unterkühlung und könnte zur Bildung einer größeren Anzahl an Tropfen führen, welche in der Folge geringere Tropfenradien aufweisen. Jedoch ist die Abweichung der Ergebnisse insbesondere im Vergleich zum Streubereich des IWSMP derart gering, dass die Konfiguration *E-E-M-Poly* des PGI_{Roe}-Schemas als verifiziert gelten kann. Sie soll daher nun genutzt werden, um zwei weitere Konfigurationen zu verifizieren. Hierzu erfolgt im rechten Teil von Abbildung 28 ein Vergleich der Ergebnisse der Konfigurationen *E-L-M-Poly* und *E-E-M-Mono* mit den bereits verifizierten Daten. Die Berechnungen unter Beschreibung der dispersen Phase in einem Lagrange-Bezugssystem sind als rote Kreise dargestellt, während schwarze Kreise die Ergebnisse unter Annahme einer monodispersen Tropfengrößenverteilung repräsentieren. Der gezeigte Düsenabschnitt sowie die Skalen der beiden Abszissen werden analog der bereits präsentierten Ergebnisse gewählt. Sowohl anhand des Druck- als auch des Radienverlaufes sind leichte Abweichungen der Konfigurationen untereinander sowie von den Referenzdaten zu erkennen. Wird das Bezugssystem der dispersen Phase von Euler zu Lagrange gewechselt, setzt die Kondensation erst etwas weiter stromabwärts ein, was wie zuvor erläutert entsprechend der vorliegenden Ergebnisse zu einer Verringerung des Tropfenradius führen kann. Im Vergleich zu den Untersuchungen eines Wechsels des Bezugssystems nach White [167] ist die Abweichung zwischen den Ergebnissen jedoch sehr gering. White gibt für die von ihm beobachtete Diskrepanz als möglichen Grund einen durch das Schema zur Berechnung der numerischen Flussterme eingeführten Fehler an. Die Beschreibung der dispersen Phase im Lagrange-Bezugssystem bedingt das Lösen eines von den Erhaltungsgleichungen der kontinuierlichen Gasphase getrennten Gleichungssystems. In der Folge sind die numerischen Flussterme ausschließlich für die Navier-Stokes-Gleichungen zu formulieren, was den Einfluss des verwendeten Flussberechnungsschemas und seiner Genauigkeit auf die Größen der Flüssigphase im Vergleich zu einer Formulierung im Euler-Bezugssystem stark reduziert und eine Abweichung zwischen den Ergebnissen unterschiedlicher Bezugssysteme begründen könnte. Da die Formulierung des PGI_{Roe}-Schemas anders als das von White verwendete Verfahren keine künstlichen Dämpfungsterme enthält und zudem aufgrund seiner Abstammung vom Schema nach Roe auch nicht zur Ausbildung von numerischer Dissipation neigt, erscheint diese Begründung auch geeignet, um die vorliegende Abwesenheit einer Abweichung zu erklären und somit eine Verifikation zu indizieren. Trotz der hohen Übereinstimmung der Ergebnisse sei jedoch angemerkt, dass die Verwendung eines Euler-Bezugssystems im Kontext der Implementierung in TRACE einen wesentlichen Vorteil in Bezug auf die Rechenzeit zeigt. Erwartungsgemäß ermöglicht die Beschreibung der dispersen Phase im Lagrange-Bezugssystem bereits auf einem Gitter mit geringerer Knotenpunktzahl die Erzielung einer gitterunabhängigen Lösung. Die hiermit verbundene Rechenzeiteinsparung wird in TRACE jedoch durch einen erhöhten Zeitbedarf zur Erzielung einer konvergierten Lösung egalisiert. Das von den Erhaltungsgleichungen separierte Lösen der Differentialgleichungen der statistischen Momente führt zu einer Erhöhung der für das Erreichen des Konvergenzkriteriums benötigten Iterationsanzahl. Da dieses Verhalten für das EPGI_{Roe}-Schema in ähnlicher Weise beobachtet werden kann, erscheint ein Einfluss der Implementierung unwahrscheinlich. Vielmehr könnte das durch ein Euler-Bezugssystem gekoppelte Lösen der Gleichungen im vorliegenden Fall zu einer Konvergenzbeschleunigung führen, wobei kein negativer Einfluss auf die Sta-

bilität festzustellen ist. Ein Vergleich der Ergebnisse unter Annahme einer monodispersen Tropfengrößenverteilung mit der bereits verifizierten polydispersen Konfiguration zeigt eine größere Abweichung als im Falle eines Wechsels des Bezugssystems. Der Anstieg des Druckes im Umfeld der Kondensationsfront erscheint leicht gestaucht. Auch wird der Radius der Tropfen im Vergleich zur Variante *E-E-M-Poly* überschätzt. Dabei ist anzumerken, dass die Berechnung des Sauter-Radius im monodispersen Fall in Ermangelung einer Möglichkeit zur Bestimmung der Tropfenoberfläche durch die Formulierung eines volumenge-mittelten Radius ersetzt wird. Starzmann et al. [141] zeigen jedoch, dass die Art der Mittelung des Tropfenradius im Falle von Düsenströmungen eine untergeordnete Bedeutung für die Ergebnisgenauigkeit hat. Auch stimmt die gestauchte Charakteristik des Druckverlaufes mit entsprechenden Beobachtungen in der Literatur überein. White und Hounslow [169] begründen dies mit einer mangelhaften Beschreibung des Wärmeaustausches zwischen den Phasen unter der vereinfachenden Annahme einer monodispersen Tröpfengrößenverteilung. Der Wärmeaustausch zwischen den Phasen, welcher an der Oberfläche der Tropfen lokalisiert werden kann, steht somit in Form des Flächeninhaltes in direkter Abhängigkeit zu einer Größe, welche im monodispersen Fall nicht eindeutig bestimmt werden kann. Der hieraus resultierende Fehler wirkt sich auch auf die Unterkühlung sowie das Maximum der Nukleationsrate aus und führt zu einem stromaufwärts verschobenen Einsetzen der Kondensation, welche eine Überschätzung der Tropfenradien begünstigt. Da somit auch die Konfiguration *E-E-M-Mono* des PGIRoe-Schemas mit den durch die Literatur belegten Tendenzen übereinstimmt, können alle drei anhand von *Fall M* der Mystery-Düse untersuchten Konfigurationen als verifiziert angenommen werden. Auch scheint es auf Grundlage der diskutierten Relationen zwischen den drei Konfigurationen vertretbar, eine Validierung des PGIRoe-Schemas auf die Varianten *E-E-M-Poly* und *E-E-P-Poly-S* zu beschränken. Hierzu soll nun ein Vergleich der numerischen Ergebnisse des PGIRoe-Schemas mit experimentellen Daten einer durch moderate Phasengeschwindigkeitsdifferenzen gekennzeichneten Strömung erfolgen.

Vergleich zu experimentellen Daten mit moderater Phasengeschwindigkeitsdifferenz

Die im Weiteren betrachtete Geometrie wird von Barschdorff [18] ursprünglich zur Untersuchung der Kondensation in Überschallströmungen feuchter Luft unter Zufuhr von Wärme herangezogen. In späteren Experimenten vermisst Barschdorff [19] anhand derselben Laval-Düse zudem die Expansion von reinem Wasserdampf, wobei erneut der Phasenwechsel in Form von Kondensation im Fokus steht. Die von ihm dokumentierten Ergebnisse beschränken sich aufgrund der verwendeten Messmethoden auf entlang der Düsenachse vermessene Druckverläufe. Da für eine Validierung numerischer Methoden jedoch neben Messdaten der kontinuierlichen Phase auch Messergebnisse mindestens einer Größe der dispersen Phase vorliegen müssen, untersuchen Maqueo Martinez et al. [96] die Düsengeometrie nach Barschdorff sowohl anhand des Druckes als auch des Tropfenradius. Die von ihnen verwendete Geometrie entspricht der von Barschdorff als Düse II bezeichneten Kreisbogendüse mit rechteckigem Querschnitt, welche sich durch einen Krümmungsradius von 584 mm auszeichnet. Der zugehörige Verlauf der relativen Fläche entlang der relativen Länge ist im linken Teil von Abbildung 29 dargestellt. Aufgrund der Form des Kreisbogens, welcher durch die Auftragung bezogener Größen leicht verzerrt erscheint, besteht zwischen der Länge der Düse sowie der Querschnittsfläche am Ein- bzw. Austritt unter Vorgabe des Radius, der Düsentiefe sowie des engsten Querschnittes eine direkte geometrische Abhängigkeit. Dies

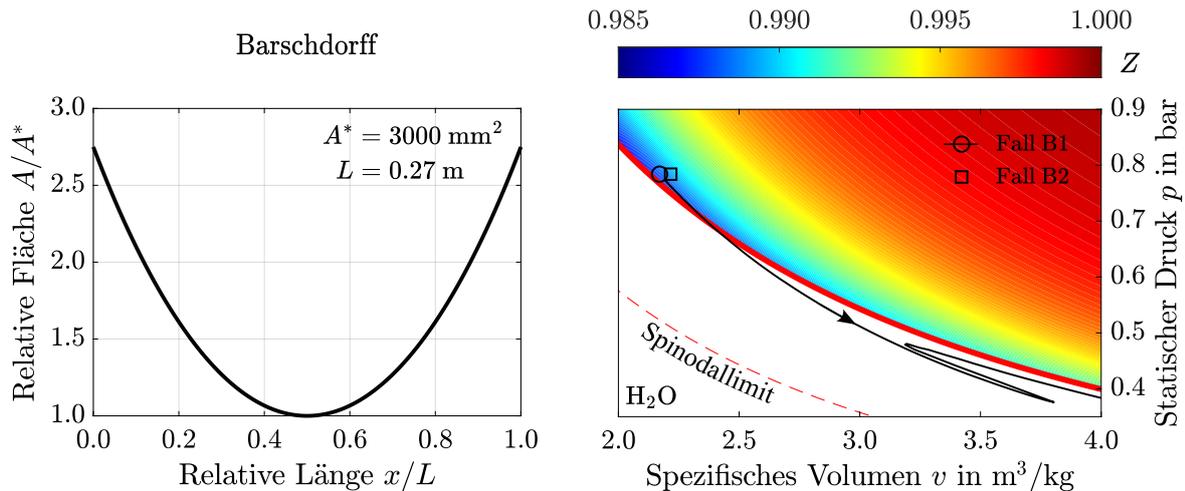


Abbildung 29: Geometrische Charakteristika der Düse nach Barschdorff [18] (links) und Spezifikation zweier Testfälle (\circ Fall B1 und \square Fall B2) im p - v -Diagramm von Wasser (rechts)

bedingt, dass die Charakteristik der Flächenänderung entlang der Düsenachse unabhängig von der Wahl der Düsenlänge erhalten bleibt. Der engste Querschnitt der Düse nach Barschdorff ergibt sich durch Multiplikation einer Höhe des Düsenhalses von 60 mm mit einer Düsentiefe von 50 mm zu 3000 mm^2 . Die Länge der Düse wird in Übereinstimmung mit der Dokumentation von Barschdorff zu 0.27 m modelliert. Anders als im Fall der Mystery-Düse liegt keine konstante Expansionsrate vor. Für die Validierung des PGI_{Roe}-Schemas werden aus den elf von Barschdorff vermessenen Eintrittszuständen zwei Testfälle ausgewählt. Der totale Druck am Eintritt beträgt in beiden Fällen 0.7839 bar. *Fall B1* wird durch eine totale Temperatur am Eintritt von 373.35 K charakterisiert, während für *Fall B2* eine totale Temperatur von 380.55 K vorgegeben wird. Eine Übersicht dieser Daten kann Tabelle 8 entnommen werden. Die aus den totalen Größen resultierenden statischen thermodynamischen Zustände sind im rechten Teil von Abbildung 29 in einem p - v -Diagramm des Mediums Wasser aufgetragen. Dabei wird *Fall B1* durch einen Kreis und *Fall B2* durch ein Quadrat repräsentiert. Beide Zustandspunkte liegen oberhalb der Taulinie und somit im gasförmig einphasigen Zustandsbereich. Eine Betrachtung des anhand einer farbigen Kontur dargestellten Realgasfaktors zeigt, dass auch für die Testfälle der Düse nach Barschdorff keine wesentliche Nicht-Idealität der Gasphase zu erwarten ist. Der Realgasfaktor liegt im Bereich von etwa 0.987, wobei der Wert für *Fall B1* leicht geringer als im *Fall B2* ausfällt. Wird exemplarisch für *Fall B1* die zu erwartende Zustandsänderung entlang der Düsenachse in Form einer schwarzen Linie visualisiert, zeigt sich eine Besonderheit. Ausgehend vom Zustand am Eintritt der Düse, welcher bereits in unmittelbarer Nähe zur Taulinie liegt, führt die Expansion innerhalb der Laval-Düse zu einem Eintritt in das Zweiphasengebiet. Wie bereits anhand der Ergebnisse für die Mystery-Düse gezeigt, nimmt die Unterkühlung stromabwärts weiter zu, wobei das als rot gestrichelte Linie dargestellte Spinodallimit nicht

Tabelle 8: Randbedingungen der Düse nach Barschdorff für das Medium Wasser

	$p_{t,in}$	$T_{t,in}$
Fall B1	0.7839 bar	373.35 K
Fall B2		380.55 K

überschritten wird. Der Zustand, in welchem es erstmals zur Bildung stabiler Kondensationskeime kommt, wird durch das Erreichen einer maximalen Unterkühlung gekennzeichnet und kann im p - v -Diagramm von Abbildung 29 im lokalen Minimum des schwarzen Verlaufes verortet werden. In Folge der Ausbildung einer flüssigen Phase kommt es zur Freisetzung der Verdampfungsenthalpie, welche als Wärmeenergie interpretiert werden kann. Während die Größen des Druckes und der Temperatur ansteigen, kommt es durch die Wärmezufuhr zu einem lokalen Abfall der Mach-Zahl. Geschieht dies wie im *Fall B1* verhältnismäßig nah zum engsten Querschnitt der Düse, in welchem sonische Bedingungen vorherrschen, und ist die Wärmezufuhr hinreichend groß, so bildet sich im divergenten Teil der Düse ein örtlich begrenztes subsonisches Gebiet aus. Dabei wird der Wärmeeintrag, in dessen Folge es im Umfeld der Kondensationsfront gerade zum Erreichen einer Mach-Zahl von eins kommt, als kritische Wärmezufuhr bezeichnet. Weist die freigesetzte Energiemenge einen höheren Betrag auf, so wird sie als überkritische Wärmezufuhr bezeichnet und bedingt durch einen abrupten Wechsel von sub- zu supersonischen Bedingungen große Gradienten im Strömungsfeld. Um diese im Rahmen der numerischen Untersuchungen geeignet abbilden zu können, wird das räumliche Gitter im divergenten Teil der Düse verfeinert. Analog der Mystery-Düse wird auch für die Turbulenzmodellierung der Düse nach Barschdorff das Modell nach Spalart und Allmaras mit einem entsprechenden Kriterium des dimensionslosen Wandabstandes gewählt. Anhand einer Untersuchung des Diskretisierungsfehlers des räumlichen Gitters kann für ein Gitter mit 960,000 Knotenpunkten die Gitterunabhängigkeit der Lösung konstatiert werden. Die Tabellierung der thermophysikalischen Größen der Gasphase sowie der Sättigungsgrößen erfolgt für ein Druckintervall von $p \in [0.15; 0.8]$ bar und ein Temperaturintervall von $T \in [300; 385]$ K, während die Größen der Flüssigphase in einem Intervall des Druckes von $p \in [0.15; 0.5]$ bar und einem Intervall der Temperatur von $T \in [300; 360]$ K tabelliert werden. Eine Untersuchung zur Unabhängigkeit der Lösung von der Diskretisierung resultiert in der Wahl einer Tabellendimension von 500 für die Gasphase und von 1000 für die Flüssigphase. Das Kriterium zur Beurteilung der Konvergenz der iterativen Lösung wird zu $ResL1 = 1.0 \times 10^{-7}$ gesetzt. Um eine Abschätzung in Bezug auf die Notwendigkeit einer Berücksichtigung des Impulsaustausches zwischen den Phasen vornehmen zu können, wird für beide Testfälle der Düse nach Barschdorff die Stokes-Zahl ermittelt. Berechnungen mittels der Konfiguration *E-E-P-Poly-S* des PGI_{Roe}-Schemas zeigen, dass ähnlich zum Fall der Mystery-Düse eine maximale Phasengeschwindigkeitsdifferenz im Bereich der Wände nahe der Austrittsrandbedingung zu erwarten ist. Auf Grundlage der so ermittelten Größen wird anhand von Gleichung 4.12 für *Fall B1* eine Stokes-Zahl von 0.51 und für *Fall B2* von 0.37 bestimmt. In Kombination mit dem zuvor formulierten Kriterium von $St > 0.1$ erscheint somit eine Berücksichtigung des Impulsaustausches zwischen den Phasen insbesondere für *Fall B1* als sinnvoll. An dieser Stelle sei angemerkt, dass unter Verwendung der Konfiguration *E-E-P-Poly-S* des PGI_{Roe}-Schemas die Berücksichtigung von Reibungseffekten in Form einer Turbulenzmodellierung ausschließlich für die Gasphase erfolgt. Um den Einfluss der Berücksichtigung des Impulsaustausches zwischen den Phasen auf die numerischen Ergebnisse vergleichend untersuchen zu können, werden die beiden Testfälle der Düse nach Barschdorff zunächst anhand der bereits verifizierten Konfiguration *E-E-M-Poly* berechnet. Die so erzielten Ergebnisse werden im linken Teil von Abbildung 30 den experimentellen Daten gegenübergestellt. Die Druckverläufe nach Barschdorff [19] werden als schwarze Linie dargestellt und basieren auf einer digitalen Rekonstruktion der als Grafik veröffentlichten Messdaten. Eine ähnliche Vorgehensweise wird auch für die experimentellen Daten

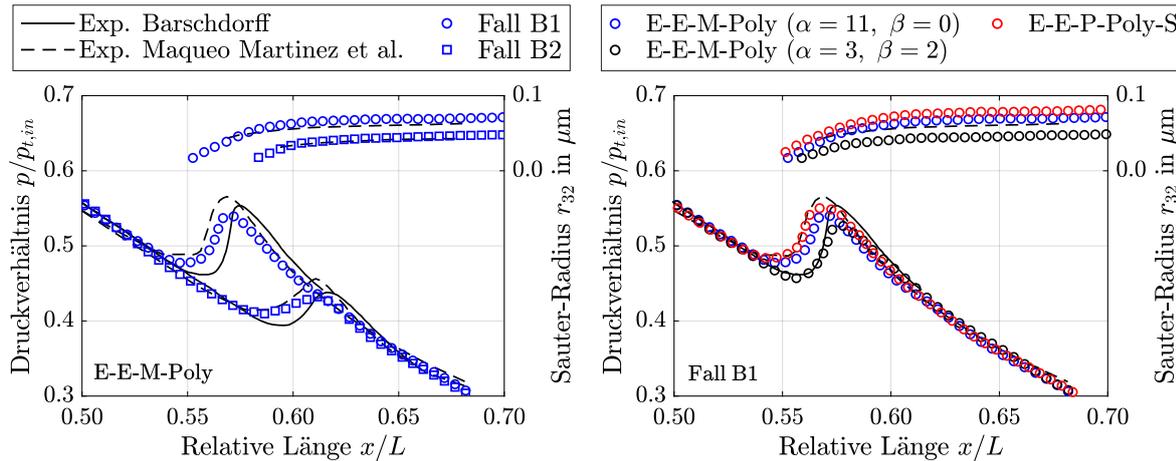


Abbildung 30: Verläufe des Druckes sowie des Sauter-Radius für Fall B1 (\circ) und Fall B2 (\square) der Düse nach Barchdorff experimentell bestimmt durch Barchdorff [19] (schwarze Linien), durch Maqueo Martinez [96] (schwarz gestrichelte Linie) sowie numerisch anhand des PGI_{Roe}-Schemas *E-E-M-Poly* (Symbole) (links) und Vergleich unterschiedlicher Modellierungsarten der dispersen Phase anhand des PGI_{Roe}-Schemas (rechts) für das Medium Wasser

nach Maqueo Martinez et al. [96] verfolgt. Die resultierenden Verläufe des Druckes sowie des Sauter-Radius werden durch schwarze gestrichelte Linien repräsentiert. Blaue Kreise symbolisieren die Ergebnisse der Konfiguration *E-E-M-Poly* des PGI_{Roe}-Schemas für den *Fall B1*, während blaue Quadrate die für *Fall B2* ermittelten Verläufe andeuten. Da der engste Querschnitt auf halber Düsenlänge zu finden ist, wird seine Koordinate als Ursprung der Ordinate gewählt. Vor Einsetzen der Kondensation stimmen alle dargestellten Druckverläufe in guter Näherung überein, wobei die numerischen Ergebnisse etwas näher an den Daten nach Barchdorff liegen. Der Wilson-Punkt für *Fall B1* wird durch das PGI_{Roe}-Schema in Form eines Druckes von etwa 0.38 bar und einer maximalen Unterkühlung von 33 K charakterisiert. Ein Vergleich der experimentellen Datensätze untereinander zeigt eine Abweichung in Bezug auf das Einsetzen der Kondensation sowie den resultierenden Druckanstieg. Die Ergebnisse von Maqueo Martinez et al. indizieren ein früheres Einsetzen der Kondensation als die Daten nach Barchdorff, wobei die Charakteristik des Druckanstieges für beide Datensätze eine ähnliche Form aufweist. Die Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas liegen in Bezug auf das Einsetzen der Kondensation innerhalb des durch die experimentellen Daten aufgespannten Bereiches. Jedoch weist der Druckanstieg eine geringere Steigung und in der Folge auch ein niedrigeres Maximum auf. Da es sich bei *Fall B1* um einen Testfall mit überkritischer Wärmezufuhr handelt, könnte diese Abweichung auf eine Unterschätzung der freigesetzten Wärmeenergie durch das PGI_{Roe}-Schema hindeuten. Stromabwärts des Druckanstieges zeigen die numerischen Ergebnisse eine Übereinstimmung mit den experimentellen Daten nach Maqueo Martinez et al., während die Daten nach Barchdorff etwas höhere Werte des Druckes verzeichnen. Der durch das PGI_{Roe}-Schema ermittelte Verlauf des Tropfenradius zeigt innerhalb des gesamten Messabschnittes eine qualitative Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Im letzten durch Maqueo Martinez et al. dokumentierten Datenpunkt weist der für *Fall B1* numerisch bestimmte Sauter-Radius eine relative Abweichung von etwa 16 % auf. Eine Untersuchung von *Fall B2* führt zu einer Bestimmung des Wilson-Punktes durch das PGI_{Roe}-Schema in Form eines Druckes von etwa 0.33 bar und einer maximalen Unterkühlung von 34 K. Die experimentellen Daten zeigen untereinander ähnlich wie im

Fall B1 eine Abweichung in Bezug auf das Einsetzen der Kondensation. Auch im *Fall B2* liegen die Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas zwischen den experimentell erhobenen Druckverläufen. Das Einsetzen der Kondensation wird durch das PGI_{Roe}-Schema sowohl in Bezug auf die Düsenkoordinate als auch das Druckniveau mit den Daten von Maqueo Martinez et al. vergleichbar vorausgesagt. Die Form des Druckanstieges weist jedoch auch in diesem Fall eine geringere Steigung sowie ein niedrigeres Maximum auf. Da *Fall B2* nicht durch eine überkritische Wärmezufuhr gekennzeichnet ist, kann hierfür zunächst keine konkrete Ursache identifiziert werden. Eine Analyse der Tropfenradien zeigt eine qualitative Übereinstimmung der numerischen Ergebnisse mit den experimentellen Verläufen. Die relative Abweichung des mittels des PGI_{Roe}-Schemas bestimmten Sauter-Radius im letzten von Maqueo Martinez et al. dokumentierten Datenpunkt beträgt für *Fall B2* etwa 7 %. Unter Rückgriff auf den durch das IWSMP für die Mystery-Düse aufgezeigten Streubereich numerischer Ergebnisse bei einer Untersuchung der Kondensation von Wasserdampf in Laval-Düsen sowie die Ähnlichkeit der numerischen Ergebnisse zu den experimentellen Messdaten im Falle der Düse nach Barschdorff kann die Konfiguration *E-E-M-Poly* des PGI_{Roe}-Schemas als validiert gelten. Maqueo Martinez et al. zeigen anhand eigener numerischer Berechnungen auf, dass eine Anpassung der Parameter des Tropfenwachstumsmodells nach Young zu einer verbesserten Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen führen kann. Die von den Autoren verwendeten Werte von $\alpha = 3$ und $\beta = 2$ stellen gegenüber den durch das IWSMP zu $\alpha = 11$ und $\beta = 0$ empfohlenen Parametern eine eher ungewöhnliche Wahl dar. Um den Einfluss der Modellierung des Tropfenwachstums auf die numerischen Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas untersuchen zu können, erfolgt im rechten Teil von Abbildung 30 eine Gegenüberstellung anhand von *Fall B1*. Dabei symbolisieren die blauen Kreise wie auch zuvor die Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas unter Verwendung der Konfiguration *E-E-M-Poly* sowie der Standardparameter des Tropfenwachstumsmodells. Die Ergebnisse unter Anpassung der Modellparameter entsprechend der Wahl von Maqueo Martinez et al. bei ansonsten gleicher Modellierung der dispersen Phase sind als schwarze Kreise dargestellt. Ein Vergleich der Druckverläufe zeigt bis zum Einsetzen der Kondensation keine relevante Abweichung. Da die Anpassung der Parameter des Tropfenwachstumsmodells unter Abwesenheit von Tropfen keinen Einfluss auf die Ergebnisse haben darf, erscheint dies plausibel. Anhand der geänderten Parameter wird das Einsetzen der Kondensation durch das PGI_{Roe}-Schema weiter stromabwärts vorhergesagt. Dies stimmt mit der von Maqueo Martinez et al. beobachteten Tendenz überein und führt im Falle des PGI_{Roe}-Schemas zu einer Annäherung an die experimentellen Daten nach Barschdorff. Die Form des Druckanstieges wird durch die Wahl der Parameter nicht wesentlich beeinflusst. Da in diesem Bereich der Einfluss der Nukleation als dominant angenommen werden kann, steht auch dies in Einklang mit der physikalischen Modellierung. Durch den späteren Einsatz der Kondensation und der damit verbundenen größeren Unterkühlung kommt es wie bereits für die Mystery-Düse erläutert zur Ausbildung einer höheren Anzahl an Tropfen mit geringerem Radius. Eine Analyse von Gleichung 3.55 und Gleichung 3.56 zeigt, dass die von Maqueo Martinez et al. vorgeschlagene Anpassung der Parameter des Tropfenwachstumsmodells im vorliegenden Anwendungsfall gegenüber einer Verwendung der Standardparameter tendenziell zu geringeren Werten der Wachstumsrate führt. Die starke Abnahme der Tropfenradien im Zuge der Anpassung der Parameter kann somit durch Kombination eines stromabwärts verlagerten Einsatzes der Kondensation mit einer Reduktion der Tropfenwachstumsrate begründet werden. Für das PGI_{Roe}-Schema bedingt die Anpassung der Parameter keine verbesserte Übereinstimmung mit den experi-

mentellen Ergebnissen. Vielmehr zeigt sich nun eine Abweichung der Tropfenradien von bis zu 29 %. Die numerischen Berechnungen von Maqueo Martinez et al. basieren auf der Annahme einer monodispersen Tropfengrößenverteilung, was wie anhand der Mystery-Düse gezeigt und durch Wróblewski und Dykas [174] auch für die Düse nach Barschdorff bestätigt zu einer numerischen Überschätzung der Radien führen kann. Eine Reduktion der Tropfenradien erscheint daher, anders als für die Konfiguration *E-E-M-Poly* des PGIRoe-Schemas, in ihrem Fall als zielführend. Unabhängig von dem für das PGIRoe-Schema erzielten Effekt verdeutlicht die Variation der Modellparameter nach Young jedoch die hohe Sensitivität der numerischen Lösung gegenüber den zur Beschreibung der Kondensation herangezogenen Modellansätzen. Wie anhand der zuvor berechneten Stokes-Zahlen indiziert, ist zudem mit einem Einfluss der Berücksichtigung eines Impulsaustausches zwischen den Phasen auf die numerischen Ergebnisse zu rechnen. Im rechten Teil von Abbildung 30 sind daher zusätzlich zu den bereits beschriebenen Datenreihen auch die Ergebnisse des PGIRoe-Schemas der Konfiguration *E-E-P-Poly-S* für *Fall B1* in Form roter Kreise aufgetragen. Ein Vergleich des Druckverlaufes mit den experimentellen Daten nach Maqueo Martinez et al. zeigt sowohl in Bezug auf das Einsetzen der Kondensation als auch die Form des Druckanstieges eine hohe Übereinstimmung. Lediglich im direkten Umfeld des lokalen Druckmaximums kommt es durch das PGIRoe-Schema zu einer Unterschätzung des Druckes. Im Vergleich zur Konfiguration *E-E-M-Poly*, welche die Strömung anhand der Mischungsgrößen beschreibt, weist der Druckanstieg eine steilere Charakteristik sowie einen höheren Wert des Druckes auf. Der qualitative Verlauf der Tropfenradien bleibt auch unter Berücksichtigung eines Impulsaustausches zwischen den Phasen erhalten. Jedoch kommt es durch die Konfiguration *E-E-P-Poly-S* zur Berechnung größerer Tropfenradien. Dies erscheint zwar aufgrund der im Vergleich etwas weiter stromaufwärts einsetzenden Kondensation plausibel, führt jedoch zu einer erhöhten Diskrepanz zu den experimentellen Daten. So beträgt die relative Abweichung der Tropfenradien in diesem Fall etwa 25 %. Dykas und Wróblewski [41] untersuchen die Düse nach Barschdorff für *Fall B1* anhand zweier Modellansätze, wobei ähnlich wie für das PGIRoe-Schema nur eine der Varianten den Impulsaustausch zwischen den Phasen berücksichtigt. Dabei beobachten sie sowohl in Bezug auf den Druckverlauf als auch die Tropfenradien vergleichbare Tendenzen.

Die Ergebnisse aller vier untersuchten Konfigurationen des PGIRoe-Schemas erscheinen somit physikalisch konsistent und stimmen zudem qualitativ mit korrespondierenden, in der Literatur vertretenen Untersuchungen überein. Ein Vergleich der Ergebnisse des PGIRoe-Schemas mit experimentellen Daten für die Düse nach Barschdorff zeigt zudem insbesondere unter Berücksichtigung des Impulsaustausches zwischen den Phasen auch eine quantitativ hohe Übereinstimmung. Hieraus kann eine erfolgreiche Validierung des PGIRoe-Schemas für mit Wasserdampf durchströmte Laval-Düsen abgeleitet werden. Um den Anwendungsbereich des Schemas in Hinblick auf das Arbeitsmedium zu vergrößern, erscheint eine Validierung anhand eines Testfalles mit einem von Wasser abweichenden Medium als vielversprechend. Die Wahl des Mediums CO_2 in Kombination mit einem Zustand am Eintritt der Laval-Düse, welcher nahe der üblichen Betriebsgrenzen von $s\text{CO}_2$ -Verdichtern liegt, ermöglicht eine vereinfachte Untersuchung der Kondensation, wie sie insbesondere auch an Schaufelvorderkanten auftritt. Hierzu erfolgt ähnlich wie im zuvor untersuchten Fall eine Gegenüberstellung experimentell erhobener Ergebnisse.

Gegenüberstellung experimenteller Daten einer mit CO₂ durchströmten Laval-Düse

Theis [148] führt anhand von fünf unterschiedlichen Laval-Düsengeometrien Untersuchungen zur homogenen Kondensation in Strömungen von CO₂ sowie Difluordichlormethan durch. Die von ihm dokumentierten Messdaten umfassen insbesondere in Form unterschiedlicher Parameterkombinationen aufgetragene Wilson-Linien, welche nahezu den gesamten Zustandsbereich zwischen Tripelpunkt und kritischem Punkt abdecken. Bier et al. [22, 23] untersuchen aufbauend auf diesen Erkenntnissen Strömungen von Luft-CO₂-Gemischen sowie weiteren Kältemitteln. Da in der Literatur im Kontext der Untersuchung von reinem CO₂ zumeist irrtümlicherweise eine Referenzierung von Bier anstatt Theis erfolgt, wird der Testfall im Weiteren im Sinne der Integrität durch Kombination beider Autorennamen bezeichnet. Theis unterscheidet die von ihm untersuchten Düsen anhand der Form ihrer Querschnittsfläche sowie ihrer Expansionsrate. Für die Validierung des PGI_{Roe}-Schemas wird eine von Theis als B1 bezeichnete Düse mit rechteckigem Querschnitt und einer Expansionsrate von etwa 23,000 1/s ausgewählt. Dabei handelt es sich bei letztgenannter Größe um einen von Theis durch Mittelung entlang der Düsenachse abgeschätzten Wert, welcher dementsprechend keine Konstante darstellt. Im linken Teil von Abbildung 31 ist die relative Fläche der Düse über der relativen Länge aufgetragen. Der engste Querschnitt beträgt 1.88 mm² und setzt sich multiplikativ aus einer Höhe von 0.75 mm und einer Düsentiefe von 2.51 mm zusammen. Die Gesamtlänge der Düse umfasst 34.4 mm, wobei der konvergente und der divergente Teil in einem Verhältnis von 0.29 zu 0.71 stehen. Für die untersuchte Düse ist mit der Ausbildung einer Grenzschicht zu rechnen, welche die Strömung und somit auch den Phasenwechsel aufgrund der sehr geringen Abmaße der Geometrie erheblich beeinflussen könnte. Theis schlägt daher die Bestimmung der effektiv durchströmten Fläche anhand eines für den Fall einer trockenen Durchströmung experimentell bestimmten Druckverlaufes vor. Unter Annahme einer isentropen Kernströmung ist unter Kenntnis der totalen Eintrittsrandbedingung sowie des statischen Druckes entlang der Düsenachse eine quasi-analytische Herleitung der effektiven Querschnittsfläche möglich. Ihr Verlauf ist im linken Teil von Abbildung 31 als gestrichelte Linie dargestellt. Die Differenz zwischen geo-

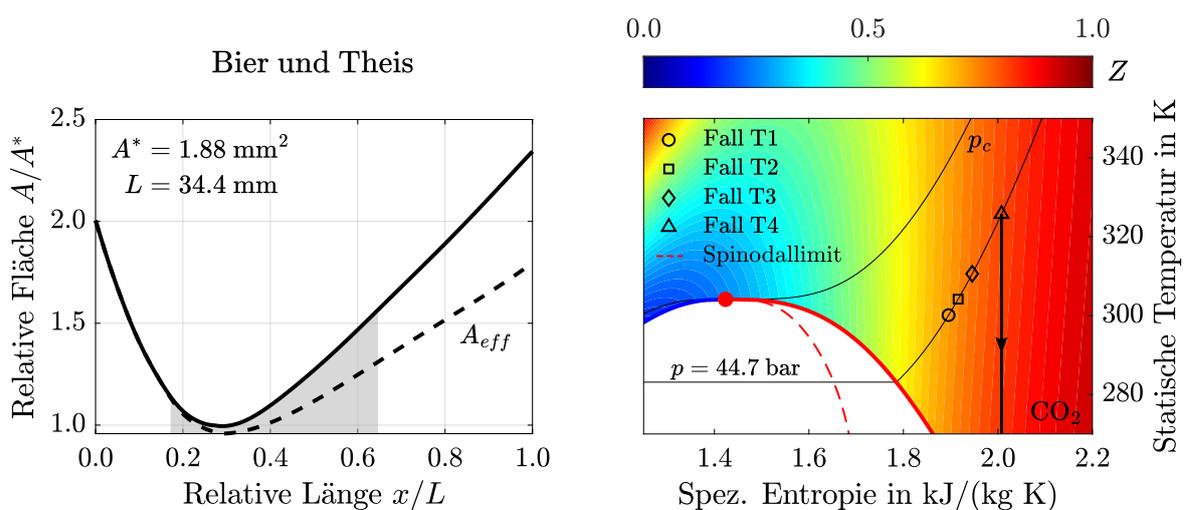


Abbildung 31: Geometrische Charakteristika der Düse nach Bier und Theis [148] mit grau schattiertem Untersuchungsbereich sowie effektivem Querschnittsverlauf als schwarz gestrichelte Linie (links) und Spezifikation von vier Testfällen im T - s -Diagramm von CO₂ (rechts)

Tabelle 9: Randbedingungen der Düse nach Bier und Theis für das Medium CO₂

	Fall T1	Fall T2	Fall T3	Fall T4
$p_{t,in}$	45 bar			
$T_{t,in}$	300.12 K	304.18 K	310.60 K	325.76 K

metrischem und effektivem Querschnitt kann als Verdrängung der Strömung in Folge einer Grenzschicht interpretiert werden. Demnach erlangt die Wandreibung etwa ab dem engsten Querschnitt der Düse eine besondere Signifikanz, welche im divergenten Teil weiter verstärkt wird. Zudem kommt es zu einer effektiven Verschiebung des engsten Querschnittes in positiver Durchströmungsrichtung. Da die von Theis formulierten Randbedingungen, welche im Weiteren noch zu erläutern sind, lediglich in einem Teil der Düse Gültigkeit erlangen, ist dieser durch eine graue Schattierung hervorgehoben. Für die ausgewählte Düsengeometrie werden anhand des Mediums CO₂ vier Testfälle untersucht, wobei der totale Druck am Eintritt einheitlich 45 bar beträgt. Die totalen Eintrittstemperaturen variieren zwischen 300.12 K und 325.76 K. Eine vollständige Übersicht der Eintrittsrandbedingungen kann Tabelle 9 entnommen werden. Auch sind die statischen Zustände am geometrischen Eintritt der Düse für alle vier Fälle im rechten Teil von Abbildung 31 in einem T - s -Diagramm aufgetragen. Während *Fall T1* durch einen Kreis symbolisiert wird, markiert ein Quadrat *Fall T2*. Der Eintrittszustand für *Fall T3* ist anhand einer Raute, derjenige für *Fall T4* in Form eines Dreiecks dargestellt. Die kritische Isobare verdeutlicht, dass die untersuchten Fluidzustände zwar in Teilen überkritische Temperaturen, jedoch mit etwa 44.7 bar einen unterkritischen Wert des Druckes aufweisen. *Fall T4* wird durch Theis als Testfall einer trockenen Durchströmung charakterisiert. Hierbei ist jedoch zu beachten, dass diese Annahme lediglich innerhalb des grau schattierten Untersuchungsbereiches zutreffend ist. Da es im weiteren Verlauf der Düse auch für *Fall T4* zur Ausbildung einer zweiten Phase kommt, ist die Austrittsrandbedingung insbesondere für die Bestimmung der effektiven Querschnittsfläche geeignet zu platzieren. Für die anderen drei Testfälle kommt es bereits innerhalb des Untersuchungsbereiches in Folge der Kondensation zum Eintritt in den metastabilen Bereich des Zweiphasengebietes. Eine Analyse des Realgasfaktors anhand der im rechten Teil von Abbildung 31 dargestellten farbigen Kontur zeigt anders als zuvor für das Medium Wasser eine relevante Abweichung vom Wert $Z = 1$. Mit abnehmender Temperatur am Eintritt der Düse nimmt bei konstantem Druck auch der Realgasfaktor ab. So weist er für *Fall T4* einen Wert von etwa 0.81 und für *Fall T1* von 0.73 auf. Hieraus resultiert eine Klassifikation der Fluidzustände als nicht-ideal, sodass anhand der Düse nach Bier und Theis eine Validierung des PGI_{Roe}-Schemas für Strömungen nicht-idealer Fluide unter Ausbildung einer zweiten Phase möglich erscheint. Aufgrund des indizierten Einflusses von Grenzschichteffekten werden zwei unterschiedliche Ansätze zur Untersuchung der Strömung verfolgt. Anhand des EPGI_{Roe}-Schemas, welches anders als TRACE eine quasi-eindimensionale Beschreibung der Strömung ermöglicht, kann unter Rückgriff auf die zuvor berechnete effektive Querschnittsfläche, auf eine explizite Modellierung der Wandreibung verzichtet werden. Zusätzlich wird das in TRACE implementierte PGI_{Roe}-Schema analog zu den bisherigen Düsentestfällen genutzt, um die Strömung quasi-zweidimensional und unter expliziter Berücksichtigung von Reibung zu untersuchen. Ein Vergleich der durch diese beiden Ansätze erzielten Ergebnisse könnte Aufschluss über die Sensitivität der Modellierung des Phasenwechsels bezüglich eines Einflusses von Reibungseffekten bieten. Da für die Berechnungen in TRACE das Turbulenzmodell nach Spalart und Allmaras gewählt wird und somit ein Kriterium des dimensionslosen Wandabstandes kleiner

als eins einzuhalten ist, wird eine Verfeinerung des räumlichen Gitters in Wandnähe vorgenommen. Um eine Einheitlichkeit der Berechnungsansätze in Bezug auf die räumliche Diskretisierung sicherzustellen, wird im Zuge der quasi-eindimensionalen Beschreibung eine zur quasi-zweidimensionalen Modellierung identische Anzahl an Knotenpunkten in Richtung der x-Koordinate und somit entlang der Düsenachse gewählt. Anhand einer Untersuchung des räumlichen Diskretisierungsfehlers unter Berücksichtigung aller drei Raumrichtungen kann für ein Gitter mit 638,000 Knotenpunkten die Gitterunabhängigkeit der Lösung angenommen werden. Die Tabellierung der thermophysikalischen Größen erfolgt für die Gasphase sowie die Sättigungsgrößen in einem Druckintervall von $p \in [9; 40]$ bar und einem Temperaturintervall von $T \in [230; 300]$ K. Für die flüssige Phase wird ein Druckintervall von $p \in [9; 23]$ bar und ein Temperaturintervall von $T \in [250; 270]$ K tabelliert. Für beide Phasen kann für eine Tabellendimension von 500 eine Unabhängigkeit der Lösung von der gewählten Diskretisierung angenommen werden. Um die Konvergenz der iterativen Lösung sicherzustellen, wird ein Kriterium von $ResL1 = 1.0 \times 10^{-7}$ gewählt. Die Durchführung einer Berechnung von *Fall T1* anhand der Konfiguration *E-E-P-Poly-S* des PGIRoe-Schemas ermöglicht die Abschätzung einer Stokes-Zahl von 0.06. Folglich erscheint eine Berücksichtigung des Impulsaustausches zwischen den Phasen als nicht notwendig. Demzufolge kann durch die Modellierung der Tropfengrößenverteilung als polydispers ein hinreichend hoher Detaillierungsgrad in Bezug auf die Beschreibung der dispersen Phase erreicht werden. Anders als für die bisherigen Untersuchungen wird auf eine Korrektur der Nukleationsrate in Bezug auf ein der Keimbildung unmittelbar vorausgehendes Vorliegen eines Temperaturgradienten in der Gasphase verzichtet. Die hieraus resultierende Vernachlässigung des in Gleichung 3.50 formulierten Faktors, reduziert den Einfluss der ausschließlich für Wasserdampf verifizierten Modellanpassungen auf das Tropfenwachstumsmodell nach Young. Vor einer Untersuchung der Kondensation erfolgt jedoch zunächst eine Berechnung der trockenen Durchströmung der Düsengeometrie nach Bier und Theis. Die numerischen Ergebnisse des Druckes für *Fall T4* werden im linken Teil von Abbildung 32 den von Theis [148] experimentell erhobenen Daten gegenübergestellt. Da die Messdaten in der Literatur lediglich in Form von Grafiken verfügbar sind, erfolgt eine digitale Rekonstruktion der entsprechenden Verläufe. Während die so ermittelten experimentellen Werte durch eine schwarze Linie gekennzeichnet sind, repräsentieren schwarze Dreiecke die Ergebnisse der quasi-eindimensionalen Berechnung des EPGIRoe-Schemas. Der aus einer quasi-zweidimensionalen Modellierung anhand des PGIRoe-Schemas resultierende Druckverlauf wird durch blaue Dreiecke kenntlich gemacht. Sowohl die Berechnungen des EPGIRoe-Schemas als auch die des PGIRoe-Schemas basieren auf einer Modellierung der dispersen Phase mittels der Konfiguration *E-E-M-Poly*. Unter Abwesenheit einer flüssigen Phase geht diese wie anhand des Testfalles der NASA CDV-Düse überprüft in das GIRoe-Schema über. Die numerischen Ergebnisse zeigen für *Fall T4* eine hohe Übereinstimmung mit den experimentell bestimmten Daten. Dabei trifft das EPGIRoe-Schema den vermessenen Druckverlauf nahezu exakt. Dies bestätigt jedoch ausschließlich die Konsistenz der Methode, da die zur Berechnung herangezogene effektive Querschnittsfläche zuvor anhand derselben Messdaten berechnet wird. Die Ergebnisse des PGIRoe-Schemas, welche auf einer Beschreibung der Düse anhand ihrer geometrischen Kontur basieren, stimmen im konvergenten Teil der Düse ebenfalls in guter Näherung mit den Messdaten überein. Stromabwärts des engsten Querschnittes, welcher etwa bei einer relativen Länge von 0.29 liegt, kommt es zu einer leichten Abweichung von den experimentell bestimmten Daten. Diese nimmt entlang der Düsenachse zu und erreicht ein Maximum von

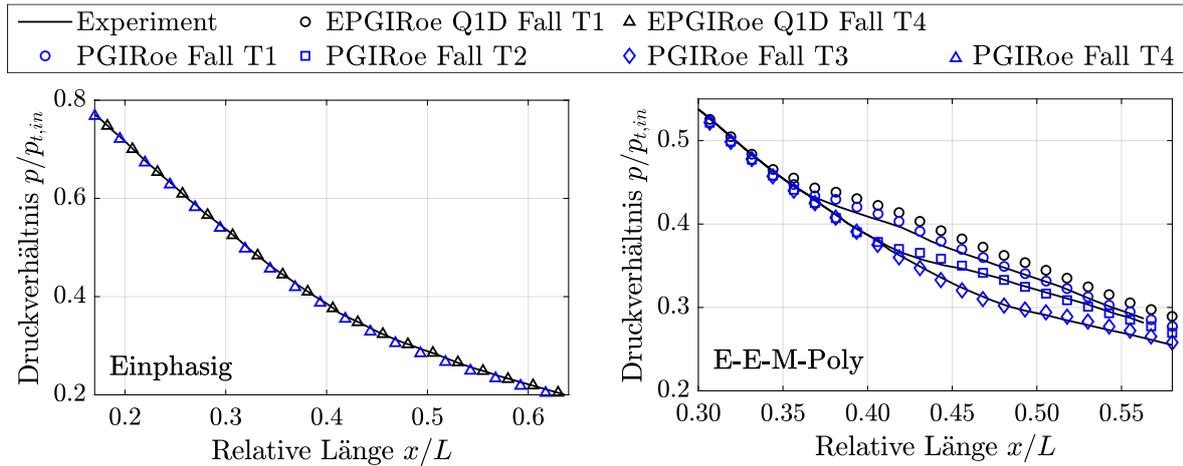


Abbildung 32: Verläufe des Druckes für Fall T4 unter Annahme einer einphasigen Strömung experimentell bestimmt durch Theis [148] und numerisch ermittelt anhand des PGIroE-Schemas (blaue Symbole) sowie des EPGIRoe-Schemas (schwarze Symbole) (links) und Verläufe des Druckes für alle vier Testfälle unter Berücksichtigung einer zweiten Phase (rechts) für das Medium CO_2

etwa 3 %. Um einen potentiellen Einfluss des numerischen Verfahrens zu überprüfen, wird unter Beibehaltung aller Randbedingungen auch anhand des EPGIRoe-Schemas eine quasi-zweidimensionale Berechnung durchgeführt. Da die so erzielten Ergebnisse lediglich eine maximale Abweichung von 0.002 % zu den Berechnungen des PGIroE-Schemas zeigen, wird auf eine Darstellung einer zusätzlichen Datenreihe verzichtet. Die Beschreibung der durchströmten Fläche anhand des effektiven Querschnitts scheint somit zu einer geringen Überschätzung des Grenzschichtinflusses im divergenten Teil der Düse zu führen. Allerdings ist zu berücksichtigen, dass sowohl der dargestellte experimentelle Druckverlauf als auch die Düsenkontur grafisch bestimmt werden und somit Ungenauigkeit aufweisen, welche sich auf den Ergebnisvergleich auswirken und zumindest einen Teil der Abweichung begründen könnten. Aufgrund der geringen Differenz sowie einer qualitativen Ähnlichkeit der Verläufe erscheint eine weitergehende Betrachtung anhand des PGIroE-Schemas gerechtfertigt. Im rechten Teil von Abbildung 32 sind daher die Ergebnisse des PGIroE-Schemas der Testfälle, für welche es innerhalb des Untersuchungsbereiches zur Ausbildung einer zweiten Phase kommt, dargestellt. *Fall T1* wird durch blaue Kreise, *Fall T2* durch blaue Quadrate und *Fall T3* durch blaue Rauten repräsentiert. Der Wilson Punkt wird durch das PGIroE-Schema exemplarisch für *Fall T1* durch einen Druck von etwa 20.3 bar und eine maximale Unterkühlung von 8 K charakterisiert. Ein Abgleich dieses Datenpaares mit der von Theis bestimmten Wilson-Linie führt zu einer Bestätigung des im Vergleich zu den bisher für Wasserdampf untersuchten Testfällen geringen Wertes der maximalen Unterkühlung. Für alle drei Testfälle ist eine hohe Übereinstimmung mit den experimentell bestimmten Daten erkennbar. So liegen die für *Fall T3* anhand des PGIroE-Schemas berechneten Werte des Druckes nahezu exakt auf dem vermessenen Druckverlauf. Auch werden die Position des Wilson-Punktes sowie der anschließende Druckanstieg durch das PGIroE-Schema in guter Näherung abgebildet. Die verhältnismäßig geringe maximale Unterkühlung spiegelt sich in einer flachen Form des Druckanstieges wieder. Um den Einfluss der Querschnittsfläche auf das Einsetzen der Kondensation zu untersuchen und zudem einen Vergleich mit in der Literatur vertretenen Untersuchungen zu vereinfachen, sind im rechten Teil von Abbildung 32 auch die quasi-eindimensionalen Ergebnisse des EPGIRoe-Schemas für *Fall T1* in Form schwarzer Kreise

aufgetragen. Der Wilson-Punkt wird durch das EPGIRoe-Schema etwas weiter stromaufwärts vorhergesagt. In der Folge setzt die Kondensation und der mit dieser ursächlich verbundene Druckanstieg bei einem etwas höheren Druck ein. Dies bedingt eine quantitative Abweichung zu den experimentellen Messdaten, welche stärker ausgeprägt ist als im Falle der quasi-zweidimensionalen Berechnungen des PGIRoe-Schemas. Um auch hier einen Einfluss der Implementierung ausschließen zu können, wird erneut eine quasi-zweidimensionale Vergleichsrechnung mittels des EPGIRoe-Schemas durchgeführt. Die Abweichung zu den Ergebnissen des PGIRoe-Schemas liegt in einer zum trockenen Fall ähnlichen Größenordnung und kann somit vernachlässigt werden. Der rein quantitative Versatz des Druckanstieges scheint somit auf die Art der Modellierung des Reibungseinflusses zurückzuführen zu sein. Dies könnte als Indiz für die besondere Relevanz einer exakten Modellierung der Düsenkontur sowie der an ihr auftretenden Grenzschichteffekte im Kontext von Phasenwechselvorgängen interpretiert werden. Ein Einfluss der Wechselwirkung von disperser Phase und turbulenter Grenzschicht kann ebenfalls nicht ausgeschlossen werden. Da durch Theis keine Vermessung der Tropfenradien vorgenommen wird, ist eine abschließende Beurteilung der Ergebnisse in Bezug auf die Beschreibungsgenauigkeit der dispersen Phase leider nicht möglich. Die von Petrucci et al. [117] angegebene Notwendigkeit einer Anpassung der Formulierung des kritischen Radius aus Gleichung 3.48 in Bezug auf die Nicht-Idealität der Gasphase kann anhand der vorliegenden Untersuchung nicht bestätigt werden. Die Autoren zeigen mittels numerischer Berechnungen einen erheblichen Einfluss der Art der Modellierung des kritischen Radius auf den Wilson-Punkt auf. Hierzu untersuchen sie eine von Theis als B2 bezeichnete Düse mit höherer Expansionsrate. Die zugrundeliegende Beschreibung der Düsengeometrie basiert dabei auf einer nicht sinnvoll erscheinenden Kombination aus effektiver Querschnittsfläche und einer zusätzlichen Turbulenzmodellierung. Ein Vergleich der von den Autoren präsentierten Ergebnisse mit den experimentellen Messdaten nach Theis zeigt zudem erhebliche Abweichungen, welche leider nicht diskutiert werden. Grundsätzlich erscheint eine Untersuchung von Anpassungen der für das Medium Wasserdampf etablierten Modellansätze, welche zudem die Idealität der Gasphase voraussetzen, jedoch durchaus als vielversprechend. Neben einer detaillierten theoretischen Analyse der gaskinetischen Zusammenhänge wird hierzu jedoch insbesondere eine entsprechende Datenbasis zur Validierung der entwickelten Modellanpassungen benötigt. Dabei wirkt insbesondere die mangelnde Verfügbarkeit von Messdaten der Tropfenradien limitierend, sodass auf eine solche Betrachtung im Rahmen dieser Arbeit verzichtet wird. Da insbesondere die Schallgeschwindigkeit, aber auch ein zum Isentropenexponenten kalorisch perfekter Gase äquivalenter Ausdruck zentrale Parameter des PGIRoe-Schemas darstellen, erscheint eine Untersuchung dieser in Hinblick auf Strömungen nicht-idealer Fluide unter Ausbildung einer zweiten Phase sinnvoll. Es zeigt sich, dass die Art der Bestimmung der Schallgeschwindigkeit im Zweiphasengebiet auf die Ergebnisse von *Fall T1* keinen relevanten Einfluss nimmt. Auch eine vom isentropen Druck-Volumen-Koeffizienten abweichende Näherung des Isentropenexponenten in Gleichung 4.49 führt lediglich zu einer relativen Abweichung des Druckes im direkten Umfeld des Wilson-Punktes von bis zu 0.01 bar, was einer relativen Abweichung von 0.05 % entspricht. Eine detaillierte Darstellung der zugrundeliegenden Untersuchung ist in Anhang D zu finden. Dies indiziert, dass die verfolgte Vorgehensweise zur Bestimmung der thermophysikalischen Zustandsgrößen im Zweiphasengebiet zumindest für die im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Testfälle valide erscheint. Die hohe Übereinstimmung der Ergebnisse des PGIRoe-Schemas mit den für die Düse nach Bier und Theis bestimm-

ten experimentellen Daten des Mediums CO_2 zeigt zudem, dass das PGIRoe-Schema in der Lage ist, den Phasenwechsel in Strömungen nicht-idealer Fluide geeignet zu beschreiben. Die bisherige numerische Untersuchung der Kondensation in Laval-Düsen legt den Fokus der Validierung auf die Beschreibungsgenauigkeit der mit dem Phasenwechsel verbundenen Modellierung. Die hierzu untersuchten Strömungen weisen mit Ausnahme der wandnahen Bereiche eine quasi-eindimensionale Charakteristik auf, welche in realen Turbomaschinen jedoch nicht vorzufinden ist. Um das PGIRoe-Schema auch anhand von Strömungen zu validieren, welche sich neben der Ausbildung einer zweiten Phase auch durch die Anwesenheit von zweidimensionalen Diskontinuitäten auszeichnen, bietet sich ein Testfall einer axialen Turbinenkaskade an.

5.2.2 Phaseninteraktion von Wasserdampf in einer Turbinenkaskade

In Folge der Umströmung von Turbinenschaufeln kann es im Bereich der Hinterkante zur Ausbildung von Stoßfronten kommen, in deren Umfeld eine Interaktion zwischen der dispersen und der kontinuierlichen Phase in Form eines verstärkten Wärme- und Impulsaustausches zu beobachten ist. Um die resultierende Strömungscharakteristik numerisch abbilden und somit eine Abschätzung der auftretenden Strömungsverluste ermöglichen zu können, sind hohe Anforderungen an das verwendete Verfahren in Bezug auf Robustheit und Beschreibungsgenauigkeit des Phasenwechsels zu stellen. White et al. [170] untersuchen die Strömung von Wasserdampf innerhalb einer axialen Turbinenkaskade sowohl experimentell als auch anhand eines von White [168] entwickelten zweidimensionalen Zeitschritt-Verfahrens, welches die disperse Phase in einem Lagrange-Bezugssystem beschreibt. Bei den von ihm verwendeten Schaufelprofilen handelt es sich um die Statorschaufeln der fünften Stufe einer realen Niederdruckdampfturbine. Die Kaskade besteht aus vier Profilen, welche parallel angeordnet sind. Anhand eines optischen Zugangs im Bereich der Schaufelhinterkanten kann das Strömungsfeld in Form von Schlieren-Bildern visualisiert werden. Auch ermöglichen Druckbohrungen entlang der Saug- und Druckseite der beiden zentralen Profile eine orts aufgelöste Messung des statischen Druckes an der Schaufeloberfläche. Um eine Validierung zweidimensionaler numerischer Verfahren zu ermöglichen, wird die Tiefe der Passage mit 152 mm derart gewählt, dass in der räumlichen Symmetrieebene mit keinem relevanten Einfluss durch die Tiefenbegrenzung zu rechnen ist. Die mittlere Expansionsrate wird von White et al. zu 1156 1/s angegeben und stimmt aufgrund der Wahl der Beschauung mit dem Wert der realen Turbine überein. Um den Testfall einer Untersuchung anhand von CFD-Verfahren zugänglich zu machen, wird der Strömungskanal im Umfeld einer der vier Schaufeln modelliert. Eine homogene Verteilung der Strömungsgrößen am Eintritt wird durch Positionierung der Eintrittsrandbedingung in hinreichendem Abstand zur Schaufelvorderkante sichergestellt. Zudem verhindert die Einhaltung eines entsprechenden Abstandes zwischen der Schaufelhinterkante und dem Austritt eine Rückwirkung der im Nachlaufbereich der Schaufel zu erwartenden Stoßsysteme auf die Austrittsrandbedingung. Die physikalische Gesamtlänge des modellierten Bereiches, welcher im linken Teil von Abbildung 33 dargestellt ist, beträgt 300 mm. Die Definition der zur Schaufelkontur der Druckseite nahezu parallel verlaufenden Begrenzungsfläche als periodische Randbedingung ermöglicht eine Beschreibung des vollständigen Strömungsfeldes innerhalb der Kaskade anhand nur eines Profils. White et al. formulieren 22 Testfälle, welche sowohl anhand der Unterkühlung am Eintritt als auch der Mach-Zahl am Austritt klassifiziert werden. Sie unterscheiden zwischen niedriger, mittlerer, hoher und sehr hoher Unterkühlung, wobei diese stets positive Werte an-

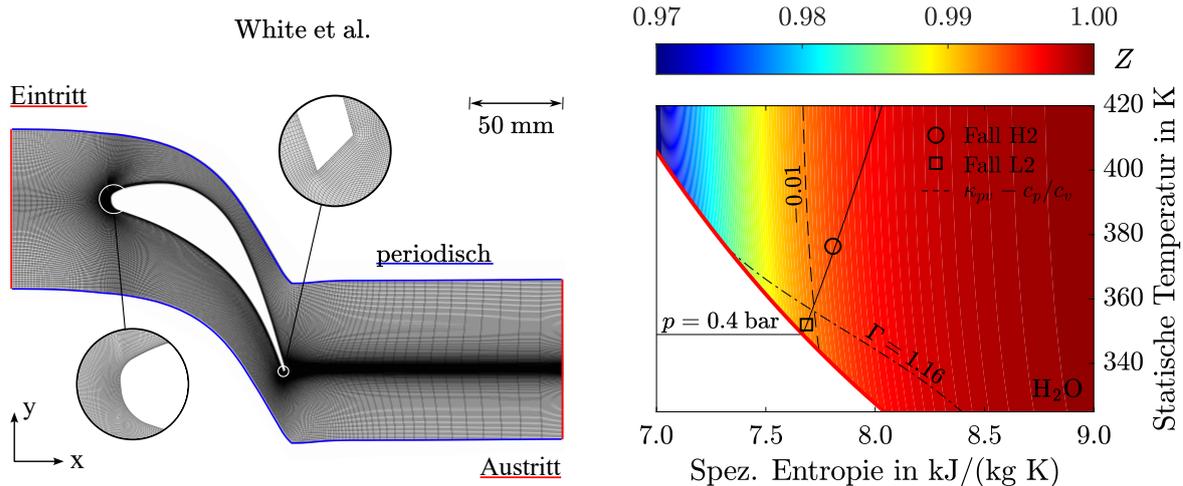


Abbildung 33: Geometrie der Kaskade nach White et al. [170], Lokalisation der Randbedingungen sowie Detailansichten der Vernetzungsstrategie an der Schaufelvorder- und hinterkante (links) und Spezifikation zweier Testfälle (○ Fall H2 und □ Fall L2) im T - s -Diagramm von Wasser (rechts)

nimmt und vom ihnen daher auch als Überhitzung bezeichnet wird. Für jede dieser Gruppen erfolgt eine Variation der Mach-Zahl am Austritt durch Regelung des Kondensatorgegen-druckes. Der Testfall mit der höchsten Mach-Zahl und somit dem geringsten Austrittsdruck wird jeweils durch die Zahl Eins bezeichnet, während die niedrigste Mach-Zahl respektive der höchste Austrittsdruck für den Testfall mit der Zahl Drei erreicht werden. Die Validierung des PGIRoe-Schema erfolgt anhand zweier charakteristischer Testfälle. Diese zeichnen sich sowohl durch signifikante Unterschiede in ihren Strömungscharakteristiken als auch eine hinreichende Repräsentation in der Literatur in Form vergleichbarer numerischer Untersuchungen aus. Beide Testfälle weisen einen totalen Eintrittsdruck von etwas über 0.4 bar auf. *Fall H2* wird durch White et al. anhand einer totalen Eintrittstemperatur von 378.5 K definiert und als Testfall mit hoher Überhitzung klassifiziert. Wird diese auf Basis der totalen Größen am Eintritt bestimmt, ergibt sich ein Wert von 28 K. Die in der Bezeichnung enthaltene Zahl Zwei zeigt an, dass die Mach-Zahl am Austritt einen für die Gruppe mittleren supersonischen Wert annimmt. Dies gilt auch für *Fall L2*, wobei die totale Eintrittstemperatur von 354 K eine Überhitzung von 4 K und damit die Zugehörigkeit des Testfalls zur Gruppe mit niedriger Überhitzung bedingt. Eine Übersicht über die Ein- und Austrittsrandbedingungen ist in Tabelle 10 zu finden, wobei der statische Druck am Austritt als flächengemittelter Wert interpretiert wird. Auch sind die statischen Eintrittszustände der beiden Testfälle im rechten Teil von Abbildung 33 in einem T - s -Diagramm dargestellt. Dabei symbolisiert ein Kreis den *Fall H2*, während *Fall L2* durch ein Quadrat repräsentiert wird. Die bereits aufgezeigte Unterscheidung der Testfälle anhand der Überhitzung wird durch unterschiedlich große Entfernungen der dargestellten Eintrittszustände von der Taulinie deutlich. So liegt *Fall L2* in Folge einer niedrigen Überhitzung anders als *Fall H2* in unmittelbarer Nähe zu

Tabelle 10: Randbedingungen der Kaskade nach White et al. für das Medium Wasser

	$p_{t,in}$	$T_{t,in}$	p_{out}
Fall H2	0.419 bar	378.5 K	0.177 bar
Fall L2	0.409 bar	354.0 K	0.194 bar

dieser. Eine Analyse des Realgasfaktors, welcher durch eine farbige Kontur dargestellt wird, zeigt für beide Eintrittszustände keine signifikante Abweichung vom Wert eins. Dies steht in Übereinstimmung mit den bisher für das Medium Wasser untersuchten Validierungsfällen und indiziert nur eine geringe Nicht-Idealität der Gasphase. Auch die als gestrichelte Isolinie aufgetragene Abweichung des isentropen Druck-Volumen-Exponenten vom Verhältnis spezifischer Wärmekapazitäten sowie die Strich-Punkt-Linie der fundamentalen Ableitung bestätigen diese Klassifikation. So nimmt die fundamentale Ableitung für beide Testfälle einen Wert größer als eins an. Der isentrope Druck-Volumen-Exponent weicht sowohl für *Fall H2* als auch für *Fall L2* lediglich um etwa -0.01 und somit 0.83% vom Verhältnis spezifischer Wärmekapazitäten ab. Eine numerische Untersuchung der Zustandsänderung innerhalb der Turbinenkaskade bedarf eines räumlichen Gitters, welches anhand der Geometrie erzeugt wird. Um eine hinreichende Auflösung im Bereich der Schaufeloberfläche sicherzustellen und somit das für das Turbulenzmodell nach Spalart und Allmaras einzuhaltende Kriterium des dimensionslosen Wandabstandes einzuhalten, erfolgt in den wandnahen Bereichen eine Verfeinerung des Gitters. Dabei wird ein besonderer Fokus auf die Struktur im Umfeld der Schaufelvorder- und hinterkante gelegt, welche im linken Teil von Abbildung 33 vergrößert dargestellt ist. Während an der Schaufelvorderkante eine hinreichende Auflösung des Staupunktes sicherzustellen ist, erlangt die Gitterstruktur im Bereich der Schaufelhinterkante im Kontext der sich hier ausbildenden Stoßsysteme eine besondere Relevanz. Um eine möglichst hohe Beschreibungsgenauigkeit der Strömungscharakteristik zu gewährleisten, wird das Gitter lokal verfeinert und in Bezug auf die Anordnung seiner Knotenpunkte optimiert. Anhand einer Untersuchung des räumlichen Diskretisierungsfehlers des so erzeugten Gitters kann für eine Knotenpunktzahl von 1.16 Millionen eine Gitterunabhängigkeit der Lösung nachgewiesen werden. Die Tabellierung der thermophysikalischen Größen der Gasphase sowie der Sättigungsgrößen erfolgt in einem Druckintervall von $p \in [0.05; 0.45]$ bar und einem Temperaturintervall von $T \in [250; 400]$ K. Für die flüssige Phase wird ein Druckintervall von $p \in [0.05; 0.35]$ bar und ein Temperaturintervall von $T \in [250; 380]$ K tabelliert. Für die Gasphase kann bei einer Tabellendimension von 500 und für die Flüssigphase bei einer Dimension von 1000 eine Unabhängigkeit der Lösung von der gewählten Tabellendiskretisierung angenommen werden. Zudem gilt die iterative Lösung als konvergiert, sofern ein Kriterium von $ResL1 = 1.0 \times 10^{-6}$ unterschritten wird. Um abschätzen zu können, ob eine Berücksichtigung des Impulsaustausches zwischen den Phasen für die untersuchten Testfälle der Turbinenkaskade nach White et al. einen zusätzlichen Erkenntnisgewinn bieten könnte, erfolgt eine Berechnung beider Fälle mittels der Konfiguration *E-E-P-Poly-S* des PGIRoe-Schemas. Die höchste Differenz zwischen den Geschwindigkeiten der Gas- und Flüssigphase wird im Bereich der Strömungsablösung an der Schaufelhinterkante vorausgesagt. Eine Berechnung der Stokes-Zahl im Punkt der maximalen Phasengeschwindigkeitsdifferenz ergibt für *Fall H2* einen Wert von 0.74, während für *Fall L2* ein Wert von 0.92 erreicht wird. In der Folge erfüllen beide Testfälle das zu $St > 0.1$ definierte Kriterium, weshalb die weiteren Berechnungen einen Impulsaustausch zwischen den Phasen durch Verwendung der Konfiguration *E-E-P-Poly-S* berücksichtigen. An dieser Stelle sei angemerkt, dass die phasenbasierte Schreibweise eine umfassende Bestimmung der Strömungsgrößen beider Phasen und somit insbesondere eine Beschreibung der Tropfentrajektorien im Strömungsfeld ermöglicht. Dabei wird auf die Berücksichtigung einer möglichen Interaktion der Tropfen untereinander verzichtet. Auch erfolgt keine Modellierung des Wärmeübergang an der Grenzfläche zwischen der flüssigen Phase und der Schaufeloberfläche. Im linken Teil von Abbildung 34

werden die numerischen Ergebnisse des statischen Druckes an der Schaufeloberfläche für *Fall H2* den von White et al. [170] experimentell erhobenen Daten gegenübergestellt. Hierzu erfolgt eine Auftragung des Verhältnisses aus statischem Druck zu totalem Eintrittsdruck über der relativen Bogenlänge des Profils, welche als Verhältnis der Koordinate in x -Richtung zur Bogenlänge des Schaufelprofils definiert ist. Die Schaufelhinterkante selbst, welche aufgrund ihrer Form durch eine druck- und eine saugseitige Koordinate definiert ist, wird von der Bestimmung der relativen Bogenlänge ausgeschlossen. Während die experimentellen Datenpunkte für *Fall H2* als kreisförmige Symbole dargestellt sind, werden die Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas durch eine blaue Linie repräsentiert. Es sei darauf hingewiesen, dass die Darstellung der ortsdiskreten CFD-Ergebnisse in Form eines stetigen Verlaufes eine lineare Interpolation zwischen den Datenpunkten bedingt. Ein Einfluss dieser auf den Aussagegehalt der Darstellung kann in Folge einer hohen Knotenpunktdichte in Wandnähe jedoch negiert werden. Die Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas zeigen für *Fall H2* eine hohe Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Ausgehend vom Staupunkt, welcher den Ursprung der Ordinate bildet, trifft der druckseitige Verlauf des statischen Druckes an der Schaufeloberfläche die Messdatenpunkte in guter Näherung, wobei die Abweichung entlang der relativen Bogenlänge abnimmt. Da sich das Strömungsfeld im Umfeld der Druckseite des Profils durch im Vergleich zur Saugseite höhere Werte des Druckes und niedrigere Werte der Geschwindigkeit auszeichnet, ist mit keinem relevanten Einfluss der Kondensation auf den Druckverlauf zu rechnen. Dies wird durch die stetige Druckabnahme entlang der relativen Bogenlänge bestätigt. Auch der saugseitige Druckverlauf zeigt eine zu den experimentellen Daten ähnliche Charakteristik. Eine relevante Abweichung der numerischen Ergebnisse wird erstmals bei einer relativen Bogenlänge von etwa 0.6 sichtbar. Durch das Vorherrschen supersonischer Bedingungen im Umfeld der Schaufelhinterkante kommt es in Folge ihrer eckigen Form zur Ausbildung schräger Stöße. White et al. unterscheiden diese Stoßfronten anhand ihrer Lokalisation im Strömungsfeld in druck- und saugseitige Diskontinuitäten. Eine Analyse des durch das PGI_{Roe}-Schema bestimmten zweidimensionalen Strömungsfeldes zeigt, dass ein druckseitiger Stoß, welcher von dem oberhalb der untersuchten Schaufel angeordneten Profil ausgeht, etwa auf Höhe einer relativen Bogenlänge

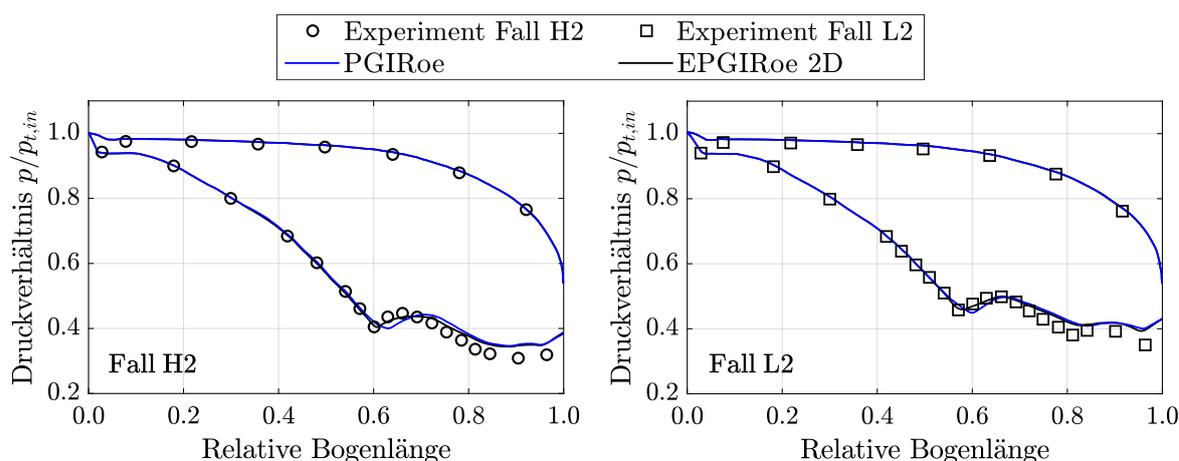


Abbildung 34: Gegenüberstellung der Druckverläufe entlang der Schaufeloberfläche für Fall H2 (links) und Fall L2 (rechts) der Kaskade nach White et al. anhand des PGI_{Roe}-Schemas (blaue Linie) und des EPGI_{Roe}-Schemas (schwarze Linie) mit den experimentellen Daten von White [168] (Symbole) für das Medium Wasser

von 0.62 auf die Saugseite des untersuchten Profils trifft. Dies steht in qualitativer Übereinstimmung mit den von White et al. dokumentierten Schlieren-Bildern, welche nachfolgend im Kontext von *Fall L2* detailliert diskutiert werden. Folglich kann der lokale Druckanstieg, welcher im linken Teil von Abbildung 34 erkennbar ist, durch eine Interaktion zwischen der schaufelnahen Strömung und der Stoßfront begründet werden. Es zeigt sich jedoch eine leichte Abweichung in Bezug auf die Position sowie die Steigung des Druckanstieges. Auch nimmt die Abweichung stromabwärts des Stoßes zu. So wird der Druck hinter der Stoßfront leicht überschätzt, was zu einer maximalen Abweichung von etwa 0.016 bar und somit 12 % führt. Die qualitative Ähnlichkeit der Verläufe bleibt jedoch entlang der gesamten Bogenlänge erhalten. Um mögliche numerische Einflussfaktoren auf die Vorhersage der Position des druckseitigen Stoßes zu untersuchen, wird eine Vergleichsrechnung anhand des zweidimensionalen EPGIRoe-Schemas durchgeführt. Die Ergebnisse, welche mit Ausnahme des verwendeten Strömungslösers auf identischen Randbedingungen beruhen, sind in Abbildung 34 als schwarze Linie dargestellt. Während die Ergebnisse des EPGIRoe-Schemas in weiten Teilen nahezu exakt mit den Ergebnissen des PGIRoe-Schemas übereinstimmen, kommt es im Bereich des Druckanstieges zu einer erkennbaren Abweichung. So sagt das EPGIRoe-Schema eine leicht stromaufwärts verschobene Position der Stoßfront voraus, was sich in einem entsprechenden Versatz des Druckanstieges widerspiegelt und zu einer höheren Übereinstimmung mit den experimentellen Daten führt. Stromabwärts der Stoßfront kommt es zu einer sukzessiven Annäherung der Ergebnisse des EPGIRoe-Schema an die mittels des PGIRoe-Schemas bestimmten Werte. Ähnlich wie im einphasigen Fall der Düse nach Spinnelli et al. scheint das EPGIRoe-Schema die Strömung im direkten Umfeld von Stoßfronten folglich mit etwas höherer Genauigkeit beschreiben zu können. Da für die zuvor in diesem Kapitel vorgestellten Untersuchungen jedoch keine quantitativ vergleichbaren Abweichungen beobachtet werden, erscheint eine Diskussion dieser als notwendig. Anders als durch das EPGIRoe-Schema wird der Strömungskanal für das in TRACE implementierte PGIRoe-Schema als dreidimensional modelliert. Um einen möglichen Einfluss der räumlichen Tiefe auf die numerischen Ergebnisse zu untersuchen, wird die Berechnung von *Fall H2* daher anhand des dreidimensionalen EPGIRoe-Schemas wiederholt. Dabei wird für die räumliche Diskretisierung das bereits zuvor für die Berechnungen des PGIRoe-Schemas erzeugte Gitter verwendet. Die auf diese Weise erzielten Ergebnisse des EPGIRoe-Schemas zeigen keine signifikante Abweichung zu den zweidimensionalen Berechnungen, weshalb auf eine Darstellung verzichtet wird. Die Modellierung der räumlichen Tiefe kann auf dieser Grundlage als Ursache für die beobachtete Abweichung ausgeschlossen werden. Die weiteren im Kontext dieser Untersuchung potentiell relevanten Unterschiede zwischen den Strömungslösern beschränken sich auf das zur zeitlichen Integration verwendete Verfahren sowie die Art der Implementierung. Ohne erhebliche Änderungen an den bestehenden Strukturen vorzunehmen, kann ein Einfluss der zeitlichen Integration jedoch nur oberflächlich untersucht werden. Hierfür ist eine Annäherung des in TRACE implementierten impliziten Verfahrens an die Integrationsbedingungen des expliziten Ansatzes erforderlich. Dies erfolgt anhand einer Anpassung der CFL-Zahl, welche entsprechend Gleichung 4.64 eine Proportionalität zum Zeitschritt der Integration aufweist. Die Absenkung der CFL-Zahl auf den Wert eins führt zu keiner relevanten Änderung in den Ergebnissen des PGIRoe-Schemas, woraus jedoch lediglich auf die Konsistenz des impliziten Verfahrens für unterschiedliche Integrationsschrittweiten geschlossen werden kann. Aufgrund der Ausrichtung der vorliegenden Untersuchung auf eine Validierung des formulierten Flussberechnungsschemas erscheint eine über die be-

reits dargestellten Ansätze hinausgehende Analyse an dieser Stelle als nicht sinnvoll. Einen größeren Erkenntnisgewinn für die Validierung des PGI_{Roe}-Schemas verspricht die Untersuchung eines weiteren Testfalles in Form von *Fall L2*. Für diesen ist nach White et al. anders als für *Fall H2* in Folge der niedrigeren Überhitzung mit einem Einfluss der Kondensation auf den Verlauf des Druckes an der Schaufeloberfläche zu rechnen. Eine Gegenüberstellung der anhand des PGI_{Roe}-Schemas berechneten Ergebnisse mit den experimentellen Daten ist im rechten Teil von Abbildung 34 dargestellt. Analog zu *Fall H2* repräsentieren die Symbole, welche für *Fall L2* eine quadratische Form aufweisen, die Messdaten, während eine blaue Linie die numerischen Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas kennzeichnet. Der Verlauf des Druckes entlang der Druckseite der Schaufel zeigt eine zum *Fall H2* vergleichbar hohe Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Im Bereich einer relativen Bogenlänge von etwa 0.58 ist ein Anstieg des Druckes erkennbar, welcher durch das PGI_{Roe}-Schema erneut leicht stromabwärts versetzt vorausgesagt wird. Anders als im *Fall H2* ähnelt die Steigung des Druckanstieges in diesem Fall jedoch der durch das Experiment indizierten. Eine Betrachtung des zweidimensionalen Strömungsfeldes, welches im Weiteren noch detailliert beschrieben wird, zeigt die Ausbildung einer Kondensationsfront auf der Saugseite der Schaufel. Sie befindet sich in unmittelbarer Nähe zu einer von der Schaufelhinterkante des benachbarten Profils ausgehenden Stoßfront, weshalb der zu beobachtende Anstieg des Druckes an der Schaufeloberfläche durch eine Kombination beider Phänomene erklärbar erscheint. Dies wird durch eine Analyse des Punktes maximaler Unterkühlung an der Schaufeloberfläche, welcher das lokale Einsetzen der Kondensation kennzeichnet und für das PGI_{Roe}-Schema mit dem Beginn des Druckanstieges zusammenfällt, bestätigt. Weiter stromabwärts nimmt die Abweichung der Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas von den experimentellen Daten ähnlich wie im *Fall H2* zu. Anders als in diesem zeigen jedoch sowohl die Messdaten als auch die numerischen Ergebnisse einen zweiten schwächeren Druckanstieg. Nach White et al. kommt es in Folge des Temperaturanstieges im Umfeld des druckseitigen Stoßes zu einer Aufspaltung der Kondensationsfront in zwei Teile. Demnach verbleibt ein Teil, welcher in unmittelbarer Nähe zur Saugseite steht, auf Höhe der Stoßfront, während ein zweiter Teil stromabwärts verschoben erscheint. Eine Rückwirkung des letztgenannten auf die Strömungsgrößen der Saugseite könnte einen erneuten Anstieg des Druckes begründen. Auch dieser wird durch das PGI_{Roe}-Schema qualitativ abgebildet, wobei die Abweichung zu den Messdaten stromabwärts einen maximalen Wert von etwa 0.021 bar und somit 19 % annimmt. Werden auch für *Fall H2* die Ergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas mit denen des EPGI_{Roe}-Schemas verglichen, zeigt sich ein zu *Fall H2* vergleichbares Bild. So kommt es ausschließlich im Umfeld des Stoßes zu einer relevanten Abweichung zwischen den Implementierungen. Erneut trifft das EPGI_{Roe}-Schema die experimentellen Daten lokal mit etwas höherer Genauigkeit, wobei die Abweichung zum PGI_{Roe}-Schema geringer ausfällt als im *Fall H2*. Dies erscheint aufgrund der eigentlich komplexeren Strömungscharakteristik zunächst erstaunlich, könnte jedoch auf eine verminderte Dominanz der Diskontinuität in Folge der Kondensationsfront zurückzuführen sein. Um eine Einordnung der in Abbildung 34 gezeigten Abweichungen des PGI_{Roe}-Schemas von den experimentellen Daten zu ermöglichen, bietet sich ein Vergleich mit entsprechenden Literaturstellen an. Das von White [168] entwickelte Zeitschritt-Verfahren zeigt in Bezug auf den Druck an der Schaufeloberfläche im *Fall H2* Abweichungen von bis zu 30 %. Dykas und Wróblewski [42] untersuchen zwei zu *Fall L2* komplementäre Testfälle mittels eines zur Konfiguration *E-E-P-Poly-S* ähnlichen Strömungslösers. Anders als White berücksichtigen sie einen Impulsaustausch zwischen den

Phasen. Die resultierende maximale Abweichung ihrer Ergebnisse von den Messdaten tritt im Umfeld des Stoßes auf und beträgt etwa 29 %. Grübel et al. [61] berechnen *Fall L2* anhand unterschiedlicher Modellansätze zur Beschreibung des Tropfenwachstums. Ihre Ergebnisse zeigen unabhängig von dieser Variation eine maximale Abweichung im Bereich der Schaufelhinterkante von etwa 23 %. Das PGI_{Roe}-Schema scheint die Strömungscharakteristik somit in beiden Testfällen mit vergleichsweise hoher Genauigkeit zu beschreiben. Die verbleibende Abweichung könnte zudem durch die Annahme einer periodischen Randbedingung, welche durch die reale Strömung laut White [168] nicht zwangsläufig hinreichend zu rechtfertigen ist, begründet werden. Auch kommt es im Zuge der Durchströmung der Kaskade in Abhängigkeit der Zeit zu Änderungen im Strömungsfeld, welche durch das verwendete Verfahren nicht aufgelöst werden. Um die Eignung des PGI_{Roe}-Schemas zur Beschreibung von Diskontinuitäten und Kondensationsfronten sowie der hieraus resultierenden Phaseninteraktion abschließend beurteilen zu können, ist eine Untersuchung des zweidimensionalen Strömungsfeldes erforderlich. Dabei erscheint *Fall L2* aufgrund einer für diesen bereits indizierten Interaktion zwischen Stoß- und Kondensationsfront als besonders geeignet. Um die zweidimensionale Strömung innerhalb der Kaskade anhand der Berechnungsergebnisse des PGI_{Roe}-Schemas visualisieren zu können, werden die räumlichen Dichtegradienten ermittelt. Eine qualitative Konturdarstellung dieser ist im linken Teil von Abbildung 35 zu finden. Schwarz eingefärbte Bereiche repräsentieren einen hohen Wert des Dichtegradienten und sind somit charakteristisch für Diskontinuitäten, während niedrige Werte des Dichtegradienten in weiß dargestellt werden. Die periodische Randbedingung sowie die Schaufelkontur sind anhand der aus Abbildung 33 bekannten Farbgebung erkennbar. Die Gegenüberstellung eines von White [168] experimentell vermessenen Schlieren-Bildes im rechten Teil von Abbildung 35 ermöglicht einen qualitativen Vergleich. Anders als für das numerische Schlieren-Bild werden Stöße im Experiment durch die Farbe Blau gekennzeichnet, während anhand der Farbe Grün Bereiche kleiner Gradienten erkennbar sind. Für eine bessere Orientierung werden zusätzlich zur periodischen Randbedingung die Grenzen des numerischen Schlieren-Bildes in der Messaufnahme als schwarz gepunktete Linien dargestellt. Auf der Druckseite des Schaufelprofils ist eine von der Schaufelhinterkante ausgehende Diskontinuität erkennbar, welche durch White als druckseitiger Stoß S_{DS} bezeichnet und bereits im Kontext der Druckverläufe in Abbildung 34 diskutiert wird. Sowohl die Position als auch die geometrische Ausrichtung des Stoßes stimmt mit den experimentellen Ergebnissen überein. Jedoch wird die Stoßfront numerisch anhand von zwei leicht versetzten Diskontinuitäten be-

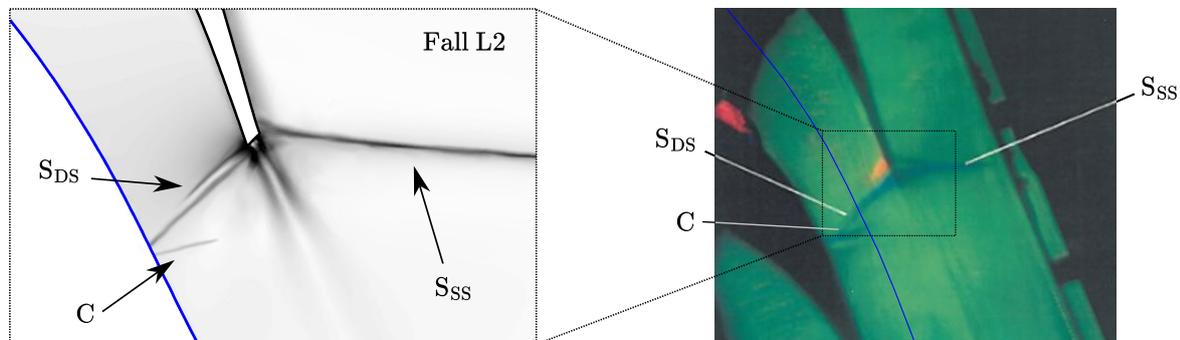


Abbildung 35: Qualitative Konturdarstellungen der Dichtegradienten für Fall L2 der Kaskade nach White et al. numerisch berechnet anhand des PGI_{Roe}-Schemas (links) sowie experimentell vermessen durch White [168] (rechts)

schrieben. White weist jedoch darauf hin, dass es in Folge einer Oszillation der Stoßfronten zu einer verschmierten Darstellung in den experimentellen Schlieren-Bildern kommt. Dies könnte auch eine mögliche Begründung für die Abweichung in den numerischen Ergebnissen darstellen. Auf der Saugseite des Schaufelprofils ist eine weitere Stoßfront zu erkennen, welche mit S_{SS} gekennzeichnet ist. Anders als für den Stoß S_{DS} wird diese Diskontinuität durch die numerischen Berechnungen als klar vom restlichen Strömungsfeld abgegrenzt beschrieben. Ähnlich wie für S_{DS} ist in Bezug auf die Position sowie die Anordnung der Stoßfront eine hohe Übereinstimmung mit den experimentellen Daten erkennbar. Wie bereits anhand des Druckverlaufes an der Schaufeloberfläche aufgezeigt, kommt es für *Fall L2* zur Ausbildung einer Kondensationsfront, welche auch anhand der numerischen Dichtegradienten erkennbar ist und in Abbildung 34 durch den Buchstaben C markiert wird. Sie erstreckt sich von der Saugseite des Profils aus in den Strömungskanal und weist eine ähnliche Form wie im experimentellen Schlieren-Bild auf. Das Einsetzen der Kondensation und somit die Ausbildung einer zweiten Phase im direkten Umfeld einer Diskontinuität der Strömung scheint zu einer Abschwächung der Stoßintensität zu führen. Insbesondere kommt es zu keiner Reflektion von S_{DS} an der Saugseite des Profils, was auf eine verstärkte Phaseninteraktion in diesem Bereich hindeuten könnte. Dies steht in Übereinstimmung mit der Beobachtung lokaler Maxima der durch das PGIRoe-Schema berechneten Phasengeschwindigkeitsdifferenz. Unmittelbar hinter dem Schaufelprofil indizieren die numerischen Ergebnisse Regionen großer Dichtegradienten, welche durch das Experiment nicht bestätigt werden. Jedoch zeigen auch die experimentellen Ergebnisse Bereiche größerer Gradienten im Nachlaufbereich der Schaufel. Eine Analyse des Flüssigkeitsmassenanteils stromabwärts der Schaufelhinterkante zeigt, dass durch das PGIRoe-Schema auch für diesen große Gradienten vorausgesagt werden. Durch die turbulente Ablösung könnte es zu einem längeren Aufenthalt der Tropfen in diesem Bereich und in der Folge zu einem lokal verstärkten Tropfenwachstum kommen. Der Detailgrad des numerischen Schlieren-Bildes verdeutlicht dabei die durch das PGIRoe-Schema erzielte Beschreibungsgenauigkeit. Sowohl die zweidimensionalen Diskontinuitäten der Strömung als auch die Mechanismen des Phasenwechsels werden in hoher Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen vorausgesagt. In Kombination mit der in Kapitel 5.2.1 vorgestellten Validierung unterschiedlicher Konfigurationen des PGIRoe-Schemas anhand von Laval-Düsen indiziert dies die Anwendbarkeit des Verfahrens auf Fragestellungen unterschiedlicher Komplexität und Dimension.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit möchte einen Beitrag zur Entwicklung numerischer Verfahren für die Untersuchung von Phasenwechsellvorgängen kompressibler nicht-idealer Fluide leisten. Hierzu wird ein von Roe ursprünglich für kalorisch perfekte Gase formuliertes Verfahren zur Berechnung numerischer Flussterme für die Anwendung auf ein- und zweiphasige Strömungen nicht-idealer Fluide erweitert. Das resultierende PGI_{Roe}-Schema zeichnet sich durch eine auf seiner Herleitung basierenden geringen Komplexität aus und kann auf beliebige Zustandsgleichungen angewendet werden. Es bietet zudem die Möglichkeit eine im Zuge des Phasenwechsels entstehende disperse Phase anhand unterschiedlicher Modellannahmen zu beschreiben. So kann neben dem Bezugssystem der dispersen Phase auch die Art der Modellierung der Tropfengrößenverteilung frei gewählt werden. Zudem ermöglicht das PGI_{Roe}-Schema eine Berücksichtigung des Impulsaustausches zwischen den Phasen, so dass die Bewegung der dispersen Phase getrennt von der kontinuierlichen Phase beschrieben werden kann. Durch die Formulierung unterschiedlicher Konfigurationen, welche parallel implementiert vorliegen und im einphasigen Fall ineinander übergehen, ist das Schema in der Lage, den für eine spezifische Fragestellung benötigten Detailgrad mit sehr hoher Genauigkeit abzubilden. Auch ermöglicht ein modularer Aufbau die Verwendung beliebiger Modelle zur Beschreibung der Phasenwechsellvorgänge. Durch eine Implementierung des PGI_{Roe}-Schemas in den dreidimensionalen Strömungslöser TRACE soll der entwickelte Ansatz der wissenschaftlichen Gemeinschaft sowie der industriellen Anwendung zugänglich gemacht werden. Auch erfolgt auf diese Weise eine Validierung im Kontext eines für die Berechnung von Turbomaschinenströmungen etablierten Strömungslösers. Durch die Option einer Tabellierung der thermophysikalischen Größen kann eine erhebliche Steigerung der Recheneffizienz erreicht werden. Dies führt zu einer Erhöhung der Verfügbarkeit und ermöglicht somit einen potentiellen Einsatz des PGI_{Roe}-Schemas im Zuge der numerischen Auslegung von Turbomaschinen. Vor dem Hintergrund dieser Zielsetzung erfolgt eine umfassende Verifizierung und Validierung des Schemas anhand einer repräsentativen Auswahl geeigneter ein- und zweiphasiger Testfälle. Um die Anwendbarkeit des PGI_{Roe}-Schemas sowohl für implizite als auch explizite Verfahren der zeitlichen Integration nachweisen zu können, erfolgt eine zusätzliche Validierung mittels eines unabhängig von TRACE selbst implementierten dreidimensionalen Strömungslösers. Zudem ermöglicht eine nach der Anzahl der Phasen gestufte Validierung eine möglichst isolierte Betrachtung einzelner Charakteristika. Im Zuge einer Untersuchung der einphasigen Durchströmung von Laval-Düsen zeigt sich, dass das PGI_{Roe}-Schema in der Lage ist, Diskontinuitäten der Strömung mit hoher Genauigkeit zu beschreiben. Dies kann anhand der Untersuchung unterschiedlicher Arbeitsmedien sowohl für Fluide moderater als auch hoher molekularer Komplexität und Nicht-Idealität nachgewiesen werden. Die Robustheit des PGI_{Roe}-Schemas gegenüber großen Gradienten im Strömungsfeld wird zudem durch die Untersuchung der Durchströmung eines sCO₂-Verdichters bestätigt. Trotz einer direkten Nähe der Betriebspunkte zum kritischen Punkt sowie dem Zweiphasengebiet kann eine konvergierte Lösung erzielt werden, welche zudem eine hinreichende Übereinstimmung mit den experimentell bestimmten Größen aufweist. Die auf diese Weise indizierte Validität des PGI_{Roe}-Schemas zur Beschreibung einphasiger Strömungen dient als Basis für die anschließende Betrachtung zweiphasiger Testfälle. Die unterschiedlichen Konfigurationen des Schemas werden anhand der Kondensation in Laval-Düsen untersucht. Auf diese Weise kann gezeigt werden, dass das PGI_{Roe}-Schema in der Lage ist, den

Phasenwechsel sowohl anhand des Modells der homogenen Gleichgewichtskondensation als auch mittels des Modells der homogenen Nicht-Gleichgewichtskondensation zu beschreiben. Zudem können für unterschiedliche Modellierungsarten der dispersen Phase konsistente Ergebnisse erzielt werden, welche sowohl qualitativ als auch quantitativ nur geringe Abweichungen zu experimentell bestimmten Daten zeigen. Um eine Verifizierung der implementierten Modelle zur Beschreibung der Nukleation sowie des Tropfenwachstums zu ermöglichen, wird neben einer Messgröße der kontinuierlichen Phase auch der Tropfenradius als Repräsentant der dispersen Phase in die Validierung miteinbezogen. Die Untersuchung der Durchströmung einer axialen Turbinenkaskade zeigt, dass das PGI_{Roe}-Schema sowohl Diskontinuitäten als auch Kondensationsfronten und die hiermit verbundene Interaktion zwischen den Phasen in Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen beschreibt. Das PGI_{Roe}-Schema scheint somit Anwendung auf ein- und zweiphasige Strömungen kompressibler nicht-idealer Fluide unterschiedlicher molekularer Komplexität finden zu können. Dabei bedingt eine Beschränkung auf kompressible Medien die Forderung einer Dominanz der gasförmigen Phase innerhalb der Strömung, was zu einer Limitierung des Anwendungsbereiches in Bezug auf den Flüssigkeitsmassenanteil $y < 0.5$ führt. Für die Untersuchung der homogenen Kondensation in Turbomaschinen ist hierdurch jedoch aufgrund der zu beobachtenden geringen Werte des Flüssigkeitsmassenanteils mit keiner praktischen Einschränkung zu rechnen. Auch erscheint eine Bestimmung der Schallgeschwindigkeit im Zweiphasengebiet unter Annahme eines Gleichgewichtszustandes folglich als hinreichend. Da es im Zuge der Kondensation nicht-idealer Fluide zur lokalen Ausbildung höherer Werte des Flüssigkeitsmassenanteils kommen könnte, ist ein möglicher Einfluss auf die Bestimmung der Schallgeschwindigkeit im Zweiphasengebiet fallspezifisch zu prüfen. Sollte die Annahme eines Gleichgewichtszustandes nicht länger zu rechtfertigen sein, kann auf eine Formulierung unter Berücksichtigung des Flüssigkeitsmassenanteils zurückgegriffen werden.

Erste Untersuchungen zu Mehrkomponentenströmungen, welche nicht Teil der vorliegenden Arbeit sind, deuten auf die Gültigkeit des PGI_{Roe}-Schemas für Mischungen hin. Dies sollte jedoch zukünftig anhand einer umfassenden Validierung belegt werden. Auch erscheint eine Untersuchung des HeRo-Verdichters unter Berücksichtigung einer zweiten Phase als vielversprechend. Da die einphasigen Berechnungen das Unterschreiten der Satttdampflinie im Umfeld der Schaufelvorderkante anzeigen, könnte es in diesem Bereich in Folge von Phasenwechselvorgängen zur Ausbildung einer zweiten Phase kommen. Eine Berechnung des dreidimensionalen Strömungsfeldes unter Annahme einer homogenen Nicht-Gleichgewichtskondensation ermöglicht eine nähere Analyse der lokalen Zustandsänderungen. Die Berücksichtigung eines Impulsaustausches zwischen den Phasen durch das PGI_{Roe}-Schema könnte zudem einen Beitrag zu einer in der Literatur diskutierten Unklarheit bezüglich den mit der Kondensation in Verbindung stehenden Zeitskalen liefern.

Eine weitere Möglichkeit, um derartige Vorgänge mit noch höherer Genauigkeit beschreiben zu können, stellen LES-Verfahren dar. Eine Anwendung des PGI_{Roe}-Schemas in diesem Kontext erscheint unter geringen Anpassungen der bereits in TRACE bestehenden Ansätze als möglich und könnte für eine Vielzahl von Fragestellungen einen Mehrwert in Bezug auf die Modellierung des Fluides liefern. So könnten die etablierten Turbulenzmodelle, welche in ihrer Mehrzahl auf der Annahme eines kalorisch perfekten Gases beruhen, anhand von LES-Berechnungen für die Anwendung auf nicht-ideale Fluide überprüft und falls nötig angepasst werden. In der Folge wäre eine Vergrößerung des Konfidenzbereichs der RANS-Berechnungen denkbar. Zudem ermöglichen LES-Berechnungen eine zeitaufgelöste

Untersuchung von Grenzschichteffekten. Auf diese Weise könnte eine mögliche Interaktion der Grenzschicht mit der dispersen Phase im Umfeld von Kondensationsfronten anhand numerischer Verfahren näher untersucht werden. Derartige Untersuchungen könnten zudem ebenfalls einen Mehrwert in Bezug auf die zuvor genannte Unklarheit bezüglich des Einsetzens der Kondensation im direkten Umfeld des kritischen Punktes bieten.

Aufgrund der hohen technischen Relevanz der Verdunstung im Kontext einer kurzzeitigen Effizienzsteigerung von Verdichtern könnte auch die Modellierung dieses zur Kondensation komplementären physikalischen Vorganges eine interessante Erweiterung darstellen. Unter entsprechender Anpassung der Quellterme ist das PGI_{Roe}-Schema potentiell in der Lage beliebige Phasenwechselvorgänge zu beschreiben. Aufgrund der modularen Implementierung ist zudem eine einfache Erweiterung der bestehenden Modellgleichungen möglich, wobei eine Umkehr des Tropfenwachstums bereits einen ersten Ansatz zur Beschreibung der Verdunstung darstellen kann. Werden neben der aerodynamischen Widerstandskraft weitere Kraftkomponenten in Bezug auf die Impulsbilanz der Phasen berücksichtigt, könnte dies eine Erhöhung der Beschreibungsgenauigkeit für zweiphasige Strömungen ermöglichen. Erneut erscheint eine Anpassung der Quellterme des PGI_{Roe}-Schema für die Konfiguration, welche einen Impulsaustausch zwischen den Phasen zulässt, als geeigneter Ansatzpunkt. Auf diese Weise wäre auch eine Untersuchung der Ablagerung von Flüssigkeitstropfen an Wänden und der hieraus resultierenden Filmbildung denkbar.

Da die Modellgleichungen zur Beschreibung der Nukleation sowie des Tropfenwachstums auf der Annahme eines kalorisch perfekten Gases beruhen und zudem historisch für die Beschreibung des Mediums Wasserdampf optimiert sind, erscheint eine theoretische Detailstudie im Kontext von Strömungen nicht-idealer Fluide als angeraten. Eine solche erfordert eine Analyse der zugrundeliegenden molekularen Gaskinetik und könnte zu einer Anpassung der bestehenden Modelle führen. Die Validierung dieser bedarf jedoch einer entsprechenden experimentellen Datenbasis wie sie zum aktuellen Zeitpunkt nicht vorliegt. Hieraus kann insbesondere ein Bedarf an experimentellen Vermessungen von Tropfenradien in kondensierenden Strömungen nicht-idealer Fluide abgeleitet werden. Sofern diese vorliegen erscheint das PGI_{Roe}-Schema auf Grundlage der im Rahmen der vorliegenden Arbeit vorgestellten Ergebnisse für eine Validierung der angepassten Modelle als besonders geeignet.

7 Anhang

A Thermophysikalische Modellgleichungen

Tabelle A.1: Verwendete thermophysikalische Modellgleichungen für die Medien Wasser, CO₂ und MDM in Übereinstimmung mit den Standards der IAPWS-IF97 bzw. der REFPROP-10-Implementierung [93]

Fluid	Fundamentalgleichung	Dynamische Viskosität	Thermische Leitfähigkeit	Oberflächen- spannung
Wasser	IAPWS-IF97 [165]	Huber et al. [78]	Huber et al. [77]	IAPWS 2014 [81]
CO₂	Span und Wagner [139]	Laesecke und Muzny [88]	Huber et al. [79]	Mulero et al. [108]
MDM C ₈ H ₂₄ O ₂ Si ₃	Thol et al. [149]	Huber [76]	Huber [76]	Mulero und Cachadina [107]

B Vektoren und Matrizen zur Implementierung des PGI-Roe-Schemas in drei Dimensionen

Einphasig (GI-Roe):

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_k = \begin{pmatrix} \rho \mathbf{u} \\ \rho u \mathbf{u} + p n_x \\ \rho v \mathbf{u} + p n_y \\ \rho w \mathbf{u} + p n_z \\ \rho \mathbf{u} H \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

Jacobi-Matrix:

$$\mathbf{A}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} 0 & n_x & n_y & n_z & 0 \\ \frac{1}{2}(\kappa-1)\mathbf{v}^2 n_x - u\mathbf{u} & \mathbf{u} - (\kappa-2)un_x & un_y - (\kappa-1)vn_x & un_z - (\kappa-1)wn_x & (\kappa-1)n_x \\ \frac{1}{2}(\kappa-1)\mathbf{v}^2 n_y - v\mathbf{u} & vn_x - (\kappa-1)un_y & \mathbf{u} - (\kappa-2)vn_y & vn_z - (\kappa-1)wn_y & (\kappa-1)n_y \\ \frac{1}{2}(\kappa-1)\mathbf{v}^2 n_z - w\mathbf{u} & wn_x - (\kappa-1)un_z & wn_y - (\kappa-1)vn_z & \mathbf{u} - (\kappa-2)wn_z & (\kappa-1)n_z \\ \left[\frac{1}{2}(\kappa-2)\mathbf{v}^2 - h\right]\mathbf{u} & (h + \frac{1}{2}\mathbf{v}^2)n_x - (\kappa-1)u\mathbf{u} & (h + \frac{1}{2}\mathbf{v}^2)n_y - (\kappa-1)v\mathbf{u} & (h + \frac{1}{2}\mathbf{v}^2)n_z - (\kappa-1)w\mathbf{u} & \kappa\mathbf{u} \end{pmatrix} \quad (\text{B.2})$$

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1, \quad \mathbf{u} = un_x + vn_y + wn_z, \quad \mathbf{v}^2 = u^2 + v^2 + w^2$$

Eigenstruktur:

$$\tilde{\lambda}_1 = \tilde{\mathbf{u}} - \tilde{a}, \quad \tilde{\lambda}_2 = \tilde{\mathbf{u}}, \quad \tilde{\lambda}_3 = \tilde{\mathbf{u}}, \quad \tilde{\lambda}_4 = \tilde{\mathbf{u}}, \quad \tilde{\lambda}_5 = \tilde{\mathbf{u}} + \tilde{a} \quad (\text{B.3})$$

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ \tilde{u} - \tilde{a}n_x & \tilde{u} & n_y & -n_z & \tilde{u} + \tilde{a}n_x \\ \tilde{v} - \tilde{a}n_y & \tilde{v} & -n_x & 0 & \tilde{v} + \tilde{a}n_y \\ \tilde{w} - \tilde{a}n_z & \tilde{w} & 0 & n_x & \tilde{w} + \tilde{a}n_z \\ \tilde{H} - \tilde{a}\tilde{\mathbf{u}} & \frac{1}{2}\tilde{\mathbf{v}}^2 & \tilde{u}n_y - \tilde{v}n_x & \tilde{w}n_x - \tilde{u}n_z & \tilde{H} + \tilde{a}\tilde{\mathbf{u}} \end{pmatrix} \quad (\text{B.4})$$

Zusätzliche Roe-gemittelte Größe:

$$\tilde{T} = \frac{\sqrt{\rho_L}T_L + \sqrt{\rho_R}T_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \quad \longrightarrow \quad \tilde{a} = a_{EOS}(\tilde{\rho}, \tilde{T}) \quad (\text{B.5})$$

E-E-M-Mono:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho_m \\ \rho_m u \\ \rho_m v \\ \rho_m w \\ \rho_m E \\ \rho_m y \\ \rho_m N_T \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_k = \begin{pmatrix} \rho_m \mathbf{u} \\ \rho_m \mathbf{u}u + pn_x \\ \rho_m v\mathbf{u} + pn_y \\ \rho_m w\mathbf{u} + pn_z \\ \rho_m \mathbf{u}H \\ \rho_m y\mathbf{u} \\ \rho_m N_T \mathbf{u} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \rho_m(\Lambda_N + 4\pi r^2 \rho_l N_T G(r_{20})) \\ \rho_m \bar{J} \end{pmatrix} \quad (\text{B.6})$$

Jacobi-Matrix:

$$\mathbf{A}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} 0 & n_x & n_y & n_z & 0 & 0 & 0 \\ (y\varepsilon_1 + \frac{1}{2}\varepsilon_4 \mathbf{v}^2)n_x - \mathbf{u}u & \mathbf{u} - (\varepsilon_4 - 1)un_x & un_y - \varepsilon_4 vn_x & un_z - \varepsilon_4 wn_x & \varepsilon_4 n_x & (\varepsilon_4 h_v - \varepsilon_1)n_x & 0 \\ (y\varepsilon_1 + \frac{1}{2}\varepsilon_4 \mathbf{v}^2)n_y - v\mathbf{u} & vn_x - \varepsilon_4 un_y & \mathbf{u} - (\varepsilon_4 - 1)vn_y & vn_z - \varepsilon_4 wn_y & \varepsilon_4 n_y & (\varepsilon_4 h_v - \varepsilon_1)n_y & 0 \\ (y\varepsilon_1 + \frac{1}{2}\varepsilon_4 \mathbf{v}^2)n_z - w\mathbf{u} & wn_x - \varepsilon_4 un_z & wn_y - \varepsilon_4 vn_z & \mathbf{u} - (\varepsilon_4 - 1)wn_z & \varepsilon_4 n_z & (\varepsilon_4 h_v - \varepsilon_1)n_z & 0 \\ (y\varepsilon_1 + \frac{1}{2}(\varepsilon_4 - 1)\mathbf{v}^2 - h)\mathbf{u} & (h + \frac{1}{2}\mathbf{v}^2)n_x - \varepsilon_4 \mathbf{u}u & (h + \frac{1}{2}\mathbf{v}^2)n_y - \varepsilon_4 v\mathbf{u} & (h + \frac{1}{2}\mathbf{v}^2)n_z - \varepsilon_4 w\mathbf{u} & (1 + \varepsilon_4)\mathbf{u} & (\varepsilon_4 h_v - \varepsilon_1)\mathbf{u} & 0 \\ -y\mathbf{u} & yn_x & yn_y & yn_z & 0 & \mathbf{u} & 0 \\ -N_T \mathbf{u} & N_T n_x & N_T n_y & N_T n_z & 0 & 0 & \mathbf{u} \end{pmatrix} \quad (\text{B.7})$$

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1, \quad \mathbf{u} = un_x + vn_y + wn_z, \quad \mathbf{v}^2 = u^2 + v^2 + w^2$$

$$\varepsilon_1 = \frac{a^2}{(1-y)(1+y(\kappa-1))}, \quad \varepsilon_2 = \frac{(1-y)^2}{a^2} \varepsilon_1, \quad \varepsilon_4 = (\kappa-1)\varepsilon_2$$

Eigenstruktur:

$$\tilde{\lambda}_1 = \tilde{\mathbf{u}} - \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{\mathbf{a}}, \quad \tilde{\lambda}_{2,3,4,5,6} = \tilde{\mathbf{u}}, \quad \tilde{\lambda}_7 = \tilde{\mathbf{u}} + \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{\mathbf{a}} \quad (\text{B.8})$$

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \tilde{u} - \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a} n_x & \tilde{u} & n_y & -n_z & \tilde{u} + \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a} n_x & 0 & 0 \\ \tilde{v} - \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a} n_y & \tilde{v} & -n_x & 0 & \tilde{v} + \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a} n_y & 0 & 0 \\ \tilde{w} - \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a} n_z & \tilde{w} & 0 & n_x & \tilde{w} + \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a} n_z & 0 & 0 \\ \tilde{H} - \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a} \tilde{\mathbf{u}} & \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{v}}^2 & \tilde{u} n_y - \tilde{v} n_x & \tilde{w} n_x - \tilde{u} n_z & \tilde{H} + \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a} \tilde{\mathbf{u}} & \tilde{H} - (1 - \tilde{y}) \tilde{h}_v & 0 \\ \tilde{y} & \tilde{y} & 0 & 0 & \tilde{y} & 1 & 0 \\ \tilde{N}_T & 0 & 0 & 0 & \tilde{N}_T & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.9})$$

Zusätzliche Roe-gemittelte Größen:

$$\tilde{q} = \frac{\sqrt{\rho_L} q_L + \sqrt{\rho_R} q_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \quad \text{mit} \quad q \in \{T, y, N_T\} \quad (\text{B.10})$$

$$\longrightarrow \quad \tilde{a} = a_{EOS}(\tilde{\rho}_m, \tilde{T}), \quad \tilde{h}_v = h_{v,EOS}(\tilde{T}), \quad \tilde{\kappa} \approx \kappa_{pv,EOS}(\tilde{\rho}_m, \tilde{T})$$

E-E-M-Poly:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho_m \\ \rho_m \mathbf{u} \\ \rho_m v \\ \rho_m w \\ \rho_m E \\ \rho_m y \\ \rho_m \mu_0 \\ \rho_m \mu_1 \\ \rho_m \mu_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_k = \begin{pmatrix} \rho_m \mathbf{u} \\ \rho_m \mathbf{u} \mathbf{u} + p n_x \\ \rho_m v \mathbf{u} + p n_y \\ \rho_m w \mathbf{u} + p n_z \\ \rho_m \mathbf{u} H \\ \rho_m y \mathbf{u} \\ \rho_m \mu_0 \mathbf{u} \\ \rho_m \mu_1 \mathbf{u} \\ \rho_m \mu_2 \mathbf{u} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \rho_m (\Lambda_N + \Lambda_W) \\ \rho_m \bar{J} \\ \rho_m (\mu_0 G(r_{20}) + \bar{J} r_{crit}) \\ \rho_m (2\mu_1 G(r_{20}) + \bar{J} r_{crit}^2) \end{pmatrix} \quad (\text{B.11})$$

Jacobi-Matrix:

$$\mathbf{A}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} 0 & n_x & n_y & n_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ (y\varepsilon_1 + \frac{1}{2}\varepsilon_4 \mathbf{v}^2)n_x - \mathbf{u} \mathbf{u} & \mathbf{u} - (\varepsilon_4 - 1)un_x & un_y - \varepsilon_4 vn_x & un_z - \varepsilon_4 wn_x & \varepsilon_4 n_x & (\varepsilon_4 h_v - \varepsilon_1)n_x & 0 & 0 & 0 \\ (y\varepsilon_1 + \frac{1}{2}\varepsilon_4 \mathbf{v}^2)n_y - v \mathbf{u} & vn_x - \varepsilon_4 un_y & \mathbf{u} - (\varepsilon_4 - 1)vn_y & vn_z - \varepsilon_4 wn_y & \varepsilon_4 n_y & (\varepsilon_4 h_v - \varepsilon_1)n_y & 0 & 0 & 0 \\ (y\varepsilon_1 + \frac{1}{2}\varepsilon_4 \mathbf{v}^2)n_z - w \mathbf{u} & wn_x - \varepsilon_4 un_z & wn_y - \varepsilon_4 vn_z & \mathbf{u} - (\varepsilon_4 - 1)wn_z & \varepsilon_4 n_z & (\varepsilon_4 h_v - \varepsilon_1)n_z & 0 & 0 & 0 \\ (y\varepsilon_1 + \frac{1}{2}(\varepsilon_4 - 1)\mathbf{v}^2 - h)\mathbf{u} & (h + \frac{1}{2}\mathbf{v}^2)n_x - \varepsilon_4 \mathbf{u} \mathbf{u} & (h + \frac{1}{2}\mathbf{v}^2)n_y - \varepsilon_4 v \mathbf{u} & (h + \frac{1}{2}\mathbf{v}^2)n_z - \varepsilon_4 w \mathbf{u} & (1 + \varepsilon_4)\mathbf{u} & (\varepsilon_4 h_v - \varepsilon_1)\mathbf{u} & 0 & 0 & 0 \\ -y \mathbf{u} & yn_x & yn_y & yn_z & 0 & \mathbf{u} & 0 & 0 & 0 \\ -\mu_0 \mathbf{u} & \mu_0 n_x & \mu_0 n_y & \mu_0 n_z & 0 & 0 & \mathbf{u} & 0 & 0 \\ -\mu_1 \mathbf{u} & \mu_1 n_x & \mu_1 n_y & \mu_1 n_z & 0 & 0 & 0 & \mathbf{u} & 0 \\ -\mu_2 \mathbf{u} & \mu_2 n_x & \mu_2 n_y & \mu_2 n_z & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{u} \end{pmatrix}$$

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1, \quad \mathbf{u} = un_x + vn_y + wn_z, \quad \mathbf{v}^2 = u^2 + v^2 + w^2 \quad (\text{B.12})$$

$$\varepsilon_1 = \frac{a^2}{(1-y)(1+y(\kappa-1))}, \quad \varepsilon_2 = \frac{(1-y)^2}{a^2} \varepsilon_1, \quad \varepsilon_4 = (\kappa-1)\varepsilon_2$$

Eigenstruktur:

$$\tilde{\lambda}_1 = \tilde{\mathbf{u}} - \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{\mathbf{a}}, \quad \tilde{\lambda}_{2,3,4,5,6,7,8} = \tilde{\mathbf{u}}, \quad \tilde{\lambda}_9 = \tilde{\mathbf{u}} + \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{\mathbf{a}} \quad (\text{B.13})$$

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{u} - \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a} n_x & \tilde{u} & n_y & -n_z & \tilde{u} + \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a} n_x & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{v} - \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a} n_y & \tilde{v} & -n_x & 0 & \tilde{v} + \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a} n_y & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{w} - \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a} n_z & \tilde{w} & 0 & n_x & \tilde{w} + \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a} n_z & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{H} - \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a} \tilde{\mathbf{u}} & \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{v}}^2 & \tilde{u} n_y - \tilde{v} n_x & \tilde{w} n_x - \tilde{u} n_z & \tilde{H} + \sqrt{\varepsilon_2} \tilde{a} \tilde{\mathbf{u}} & \tilde{H} - (1 - \tilde{y}) \tilde{h}_v & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{y} & \tilde{y} & 0 & 0 & \tilde{y} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{\mu}_0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\mu}_0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \tilde{\mu}_1 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\mu}_1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \tilde{\mu}_2 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\mu}_2 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.14})$$

Zusätzliche Roe-gemittelte Größen:

$$\tilde{q} = \frac{\sqrt{\rho_L} q_L + \sqrt{\rho_R} q_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \quad \text{mit} \quad q \in \{T, y, \mu_0, \mu_1, \mu_2\} \quad (\text{B.15})$$

$$\longrightarrow \quad \tilde{a} = a_{EOS}(\tilde{\rho}_m, \tilde{T}), \quad \tilde{h}_v = h_{v,EOS}(\tilde{T}), \quad \tilde{\kappa} \approx \kappa_{pv,EOS}(\tilde{\rho}_m, \tilde{T})$$

E-E-P-Poly-S:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho_m(1-y) \\ \rho_m(1-y)\mathbf{u}_g \\ \rho_m(1-y)v_g \\ \rho_m(1-y)w_g \\ \rho_m(1-y)E_g \\ \rho_m y \\ \rho_m y \mathbf{u}_l \\ \rho_m y v_l \\ \rho_m y w_l \\ \rho_m y E_l \\ \rho_m y \mu_0 \\ \rho_m y \mu_1 \\ \rho_m y \mu_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_k = \begin{pmatrix} \rho_m(1-y)\mathbf{u}_g \\ \rho_m(1-y)\mathbf{u}_g \mathbf{u}_g + \frac{\rho_m}{\rho_g}(1-y)pn_x \\ \rho_m(1-y)v_g \mathbf{u}_g + \frac{\rho_m}{\rho_g}(1-y)pn_y \\ \rho_m(1-y)w_g \mathbf{u}_g + \frac{\rho_m}{\rho_g}(1-y)pn_z \\ \rho_m(1-y)\mathbf{u}_g H_g \\ \rho_m y \mathbf{u}_l \\ \rho_m y \mathbf{u} \mathbf{u}_l + \frac{\rho_m}{\rho_l} y pn_x \\ \rho_m y v \mathbf{u}_l + \frac{\rho_m}{\rho_l} y pn_y \\ \rho_m y w \mathbf{u}_l + \frac{\rho_m}{\rho_l} y pn_z \\ \rho_m y \mathbf{u}_l H_l \\ \rho_m \mu_0 \mathbf{u}_l \\ \rho_m \mu_1 \mathbf{u}_l \\ \rho_m \mu_2 \mathbf{u}_l \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} -\Lambda_N - \Lambda_W \\ -\Lambda_W u_{int} - \frac{3}{4} \frac{\rho_m y}{\rho_l \pi r^3} F_{W,x} \\ -\Lambda_W v_{int} - \frac{3}{4} \frac{\rho_m y}{\rho_l \pi r^3} F_{W,y} \\ -\Lambda_W w_{int} - \frac{3}{4} \frac{\rho_m y}{\rho_l \pi r^3} F_{W,z} \\ -\Lambda_W (H_{g,int} - h_v) \\ \Lambda_N + \Lambda_W \\ \Lambda_W u_{int} + \frac{3}{4} \frac{\rho_m y}{\rho_l \pi r^3} F_{W,x} \\ \Lambda_W v_{int} + \frac{3}{4} \frac{\rho_m y}{\rho_l \pi r^3} F_{W,y} \\ \Lambda_W w_{int} + \frac{3}{4} \frac{\rho_m y}{\rho_l \pi r^3} F_{W,z} \\ \Lambda_W H_{l,int} \\ \rho_m \bar{J} \\ \rho_m (\mu_0 G(r_{20}) + \bar{J} r_{crit}) \\ \rho_m (2\mu_1 G(r_{20}) + \bar{J} r_{crit}^2) \end{pmatrix} \quad (\text{B.16})$$

Jacobi-Matrix:

$$\mathbf{A}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} 0 & n_x & n_y & n_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & a_{2,4} & a_{2,5} & a_{2,6} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} & a_{3,4} & a_{3,5} & a_{3,6} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{4,1} & a_{4,2} & a_{4,3} & a_{4,4} & a_{4,5} & a_{4,6} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{5,1} & a_{5,2} & a_{5,3} & a_{5,4} & a_{5,5} & 0 & a_{5,7} & a_{5,8} & a_{5,9} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & n_x & n_y & n_z & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{7,1} & a_{7,2} & a_{7,3} & a_{7,4} & a_{7,5} & a_{7,6} & a_{7,7} & a_{7,8} & a_{7,9} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{8,1} & a_{8,2} & a_{8,3} & a_{8,4} & a_{8,5} & a_{8,6} & a_{8,7} & a_{8,8} & a_{8,9} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{9,1} & a_{9,2} & a_{9,3} & a_{9,4} & a_{9,5} & a_{9,6} & a_{9,7} & a_{9,8} & a_{9,9} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{10,1} & a_{10,2} & a_{10,3} & a_{10,4} & a_{10,5} & a_{10,6} & a_{10,7} & a_{10,8} & a_{10,9} & \mathbf{u}_l & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\mu_0 \mathbf{u}_l}{y} & \frac{\mu_0 n_x}{y} & \frac{\mu_0 n_y}{y} & \frac{\mu_0 n_z}{y} & 0 & \mathbf{u}_l & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\mu_1 \mathbf{u}_l}{y} & \frac{\mu_1 n_x}{y} & \frac{\mu_1 n_y}{y} & \frac{\mu_1 n_z}{y} & 0 & 0 & \mathbf{u}_l & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\mu_2 \mathbf{u}_l}{y} & \frac{\mu_2 n_x}{y} & \frac{\mu_2 n_y}{y} & \frac{\mu_2 n_z}{y} & 0 & 0 & 0 & \mathbf{u}_l \end{pmatrix} \quad (\text{B.17})$$

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1, \quad \mathbf{u}_g = u_g n_x + v_g n_y + w_g n_z, \quad \mathbf{u}_l = u_l n_x + v_l n_y + w_l n_z,$$

$$\mathbf{v}_g^2 = u_g^2 + v_g^2 + w_g^2, \quad \mathbf{v}_l^2 = u_l^2 + v_l^2 + w_l^2$$

mit

$$\begin{aligned}
a_{2,1} &= \frac{1}{2}(\kappa_g - 1)\mathbf{v}_g^2 n_x - \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g, & a_{2,2} &= \mathbf{u}_g - (\kappa_g - 2)u_g n_x, & a_{2,3} &= u_g n_y - (\kappa_g - 1)v_g n_x, & a_{2,4} &= u_g n_z - (\kappa_g - 1)w_g n_x, & a_{2,5} &= (\kappa_g - 1)n_x, \\
a_{2,6} &= \frac{p}{\rho_l} n_x, & a_{3,1} &= \frac{1}{2}(\kappa_g - 1)\mathbf{v}_g^2 n_y - v_g \mathbf{u}_g, & a_{3,2} &= v_g n_x - (\kappa_g - 1)u_g n_y, & a_{3,3} &= \mathbf{u}_g - (\kappa_g - 2)v_g n_y, & a_{3,4} &= v_g n_z - (\kappa_g - 1)w_g n_y, \\
a_{3,5} &= (\kappa_g - 1)n_y, & a_{3,6} &= \frac{p}{\rho_l} n_y, & a_{4,1} &= \frac{1}{2}(\kappa_g - 1)\mathbf{v}_g^2 n_z - w_g \mathbf{u}_g, & a_{4,2} &= w_g n_x - (\kappa_g - 1)u_g n_z, & a_{4,3} &= w_g n_y - (\kappa_g - 1)v_g n_z, \\
a_{4,4} &= \mathbf{u}_g - (\kappa_g - 2)w_g n_z, & a_{4,5} &= (\kappa_g - 1)n_z, & a_{4,6} &= \frac{p}{\rho_l} n_z, & a_{5,1} &= \left[\frac{1}{2}(\kappa_g - 2)\mathbf{v}_g^2 - h_g \right] \mathbf{u}_g, & a_{5,2} &= \left(h_g + \frac{1}{2}\mathbf{v}_g^2 \right) n_x - (\kappa_g - 1)u_g \mathbf{u}_g, \\
a_{5,3} &= \left(h_g + \frac{1}{2}\mathbf{v}_g^2 \right) n_y - (\kappa_g - 1)v_g \mathbf{u}_g, & a_{5,4} &= \left(h_g + \frac{1}{2}\mathbf{v}_g^2 \right) n_z - (\kappa_g - 1)w_g \mathbf{u}_g, & a_{5,5} &= \kappa_g \mathbf{u}_g, & a_{5,7} &= \frac{p}{\rho_l} n_x, & a_{5,8} &= \frac{p}{\rho_l} n_y, & a_{5,9} &= \frac{p}{\rho_l} n_z, \\
a_{7,1} &= \frac{1}{2}(\kappa_g - 1) \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} \mathbf{v}_l^2 n_x, & a_{7,2} &= \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} (\mathbf{u}_l - \kappa_g u_l n_x), & a_{7,3} &= \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} (u_l n_y - (\kappa_g + 1)v_l n_x), & a_{7,4} &= \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} (u_l n_z - (\kappa_g + 1)w_l n_x), \\
a_{7,5} &= (\kappa_g - 1) \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} n_x, & a_{7,6} &= \frac{y}{1-y} \frac{p}{\rho_g} n_x - u_l \mathbf{u}_l, & a_{7,7} &= \mathbf{u}_l + u_l n_x, & a_{7,8} &= u_l n_y + v_l n_x, & a_{7,9} &= u_l n_z + w_l n_x, \\
a_{8,1} &= \frac{1}{2}(\kappa_g - 1) \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} \mathbf{v}_l^2 n_y, & a_{8,2} &= \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} (v_l n_x - (\kappa_g + 1)u_l n_y), & a_{8,3} &= \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} (\mathbf{u}_l - \kappa_g v_l n_y), & a_{8,4} &= \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} (v_l n_z - (\kappa_g + 1)w_l n_y), \\
a_{8,5} &= (\kappa_g - 1) \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} n_y, & a_{8,6} &= \frac{y}{1-y} \frac{p}{\rho_g} n_y - v_l \mathbf{u}_l, & a_{8,7} &= v_l n_x + u_l n_y, & a_{8,8} &= \mathbf{u}_l + v_l n_y, & a_{8,9} &= v_l n_z + w_l n_y, \\
a_{9,1} &= \frac{1}{2}(\kappa_g - 1) \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} \mathbf{v}_l^2 n_z, & a_{9,2} &= \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} (w_l n_x - (\kappa_g + 1)u_l n_z), & a_{9,3} &= \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} (w_l n_y - (\kappa_g + 1)v_l n_z), & a_{9,4} &= \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} (\mathbf{u}_l - \kappa_g w_l n_z), \\
a_{9,5} &= (\kappa_g - 1) \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} n_z, & a_{9,6} &= \frac{y}{1-y} \frac{p}{\rho_g} n_z - w_l \mathbf{u}_l, & a_{9,7} &= w_l n_x + u_l n_z, & a_{9,8} &= w_l n_y + v_l n_z, & a_{9,9} &= \mathbf{u}_l + w_l n_z, \\
a_{10,1} &= \frac{1}{2}(\kappa_g - 1) \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} \mathbf{v}_l^2 \mathbf{u}_l, & a_{10,2} &= (1 - \kappa_g) \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} u_g \mathbf{u}_l, & a_{10,3} &= (1 - \kappa_g) \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} v_g \mathbf{u}_l, & a_{10,4} &= (1 - \kappa_g) \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} w_g \mathbf{u}_l, \\
a_{10,5} &= (\kappa_g - 1) \frac{y}{1-y} \frac{\rho_l}{\rho_g} \mathbf{u}_l, & a_{10,6} &= \left(\frac{p}{y\rho_m} - h_l - \frac{1}{2}\mathbf{v}_l^2 \right) \mathbf{u}_l, & a_{10,7} &= h_l + \frac{1}{2}\mathbf{v}_l^2 - \frac{p}{\rho_l} n_x, & a_{10,8} &= h_l + \frac{1}{2}\mathbf{v}_l^2 - \frac{p}{\rho_l} n_y, & a_{10,9} &= h_l + \frac{1}{2}\mathbf{v}_l^2 - \frac{p}{\rho_l} n_z
\end{aligned}$$

Eigenstruktur:

$$\tilde{\lambda}_1 = \tilde{\mathbf{u}}_g - \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g, \quad \tilde{\lambda}_{2,3,4} = \tilde{\mathbf{u}}_g, \quad \tilde{\lambda}_5 = \tilde{\mathbf{u}}_g + \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g, \quad \tilde{\lambda}_6 = 2\tilde{\mathbf{u}}_l - \tilde{\mathbf{u}}_g, \quad \tilde{\lambda}_{7,8,9} = \tilde{\mathbf{u}}_l, \quad \tilde{\lambda}_{10} = \tilde{\mathbf{u}}_g, \quad \tilde{\lambda}_{11,12,13} = \tilde{\mathbf{u}}_l \quad (\text{B.18})$$

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} e_{1,1} & 1 & 0 & 0 & e_{1,5} & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ e_{2,1} & \tilde{u}_g & n_y & -n_z & e_{2,5} & e_{2,6} & 0 & 0 & 0 & \tilde{u}_g & 0 & 0 & 0 \\ e_{3,1} & \tilde{v}_g & -n_x & 0 & e_{3,5} & e_{3,6} & 0 & 0 & 0 & \tilde{v}_g & 0 & 0 & 0 \\ e_{4,1} & \tilde{w}_g & 0 & n_x & e_{4,5} & e_{4,6} & 0 & 0 & 0 & \tilde{w}_g & 0 & 0 & 0 \\ e_{5,1} & \frac{1}{2}\tilde{v}_g^2 & e_{5,3} & e_{5,4} & e_{5,5} & e_{5,6} & 0 & 0 & 0 & e_{5,10} & 0 & 0 & 0 \\ e_{6,1} & 0 & 0 & 0 & e_{6,5} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ e_{7,1} & 0 & 0 & 0 & e_{7,5} & 0 & \tilde{u}_l & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ e_{8,1} & 0 & 0 & 0 & e_{8,5} & 0 & 0 & \tilde{v}_l & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ e_{9,1} & 0 & 0 & 0 & e_{9,5} & 0 & 0 & 0 & \tilde{w}_l & 0 & 0 & 0 & 0 \\ e_{10,1} & 0 & 0 & 0 & e_{10,5} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\mu}_0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\mu}_0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\mu}_1 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\mu}_1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\mu}_2 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\mu}_2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.19})$$

$$\varepsilon_3 = \frac{(1 - \tilde{y})\tilde{\rho}_l^2 + \tilde{y}\tilde{\rho}_g^2}{\tilde{\rho}_g\tilde{\rho}_l}, \quad \varepsilon_5 = \frac{\tilde{u}_g - \tilde{u}_l}{\sqrt{\varepsilon_3}\tilde{a}_g}$$

mit

$$\begin{aligned}
e_{1,1} &= (1 - \tilde{y})(1 - \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_g}, & e_{1,5} &= (1 - \tilde{y})(1 + \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_g}, & e_{2,1} &= (1 - \tilde{y})(1 - \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_g} (\tilde{u}_g - \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g n_x), \\
e_{2,5} &= (1 - \tilde{y})(1 + \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_g} (\tilde{u}_g + \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g n_x), & e_{2,6} &= 2\mathbf{u}_l - u_g, & e_{3,1} &= (1 - \tilde{y})(1 - \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_g} (\tilde{v}_g - \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g n_y), \\
e_{3,5} &= (1 - \tilde{y})(1 + \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_g} (\tilde{v}_g + \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g n_y), & e_{3,6} &= 2\mathbf{u}_l - v_g, & e_{4,1} &= (1 - \tilde{y})(1 - \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_g} (\tilde{w}_g - \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g n_z), \\
e_{4,5} &= (1 - \tilde{y})(1 + \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_g} (\tilde{w}_g + \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g n_z), & e_{4,6} &= 2\mathbf{u}_l - w_g, & e_{5,1} &= (1 - \tilde{y})(1 - \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_g} (\tilde{H}_g - \tilde{\mathbf{u}}_g \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g) + \tilde{y}(1 + \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m \tilde{p}}{\tilde{\rho}_l^2}, \\
e_{5,3} &= \tilde{u}_g n_y - \tilde{v}_g n_x, & e_{5,4} &= \tilde{w}_g n_x - \tilde{u}_g n_z, & e_{5,5} &= (1 - \tilde{y})(1 + \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_g} (\tilde{H}_g + \tilde{\mathbf{u}}_g \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g) + \tilde{y}(1 - \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m \tilde{p}}{\tilde{\rho}_l^2}, \\
e_{5,6} &= \frac{\tilde{p}}{\tilde{\rho}_g \tilde{a}_g} \left(\tilde{H}_g - \frac{1}{2} \tilde{v}_g^2 \right) - 2\mathbf{u}_l \mathbf{u}_g + \frac{1}{2} \tilde{v}_g^2, & e_{5,10} &= \frac{\tilde{p}}{\tilde{\rho}_g \tilde{a}_g} \left(\tilde{H}_g - \frac{1}{2} \tilde{v}_g^2 \right) + \frac{1}{2} \tilde{v}_g^2, & e_{6,1} &= \tilde{y}(1 + \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l}, & e_{6,5} &= \tilde{y}(1 - \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l}, \\
e_{7,1} &= \tilde{y}(1 + \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l} (\tilde{u}_g - \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g n_x), & e_{7,5} &= \tilde{y}(1 - \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l} (\tilde{u}_g + \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g n_x), & e_{8,1} &= \tilde{y}(1 + \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l} (\tilde{v}_g - \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g n_y), \\
e_{8,5} &= \tilde{y}(1 - \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l} (\tilde{v}_g + \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g n_y), & e_{9,1} &= \tilde{y}(1 + \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l} (\tilde{w}_g - \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g n_z), & e_{9,5} &= \tilde{y}(1 - \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l} (\tilde{w}_g + \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g n_z), \\
e_{10,1} &= \tilde{y}(1 + \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l} (\tilde{H}_l - \tilde{\mathbf{u}}_l \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g) - \tilde{y}(1 + \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m \tilde{p}}{\tilde{\rho}_l^2}, & e_{10,5} &= \tilde{y}(1 - \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m}{\tilde{\rho}_l} (\tilde{H}_l + \tilde{\mathbf{u}}_l \sqrt{\varepsilon_3} \tilde{a}_g) - \tilde{y}(1 - \varepsilon_5) \frac{\tilde{\rho}_m \tilde{p}}{\tilde{\rho}_l^2}
\end{aligned}$$

Zusätzliche Roe-gemittelte Größen:

$$\begin{aligned}
\tilde{q} &= \frac{\sqrt{\rho_L} q_L + \sqrt{\rho_R} q_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \quad \text{mit} \quad q \in \{T, y, \mu_0, \mu_1, \mu_2\} \\
\longrightarrow \quad \tilde{a}_g &= a_{EOS}(\tilde{\rho}_g, \tilde{T}_g), \quad \tilde{p} = p_{EOS}(\tilde{\rho}_g, \tilde{T}_g)
\end{aligned} \tag{B.20}$$

C Unabhängigkeit der Lösungen von der Diskretisierung des räumlichen Gitters und der thermophysikalischen Tabellen

In Tabelle C.1 sind die für eine Untersuchung des räumlichen Diskretisierungsfehlers herangezogenen charakteristischen Größen für alle betrachteten Validierungsfälle zusammengefasst. Basierend auf der in Kapitel 4.4 vorgestellten Vorgehensweise wird als Kriterium die maximal tolerierte relative Abweichung der charakteristischen Größe bei Verfeinerung des Gitters um den Verfeinerungsfaktor r_G bezeichnet. Die Knotenpunktanzahl, für welche diese Fehlerschranke erstmals unterschritten wird, repräsentiert in der Folge das Gitter, für welches eine Unabhängigkeit der Lösung von der gewählten Diskretisierung angenommen werden kann.

Tabelle C.1: Parameter zur Untersuchung des räumlichen Diskretisierungsfehlers aller betrachteten Validierungsfälle

	Charakteristische Größen	Kriterium	Knotenpunktanzahl
NASA CDV-Düse	Mach-Zahl am Austritt	0.1 %	120,000
Düse nach Spinelli et al.	Mach-Zahl am Austritt	0.01 %	1.92 Millionen
HeRo-Verdichter	Mach-Zahl am Austritt	0.1 %	949,000
Mystery-Düse	Mach-Zahl und Sauter-Radius am Austritt	0.1 %	576,000
Düse nach Barschdorff	Mach-Zahl und Sauter-Radius am Austritt	0.1 %	960,000
Düse nach Bier und Theis	Mach-Zahl und Sauter-Radius am Austritt	0.1 %	638,000
Kaskade nach White et al.	Mach-Zahl und Sauter-Radius am Austritt	0.1 %	1.16 Millionen

Die für eine Untersuchung des Diskretisierungsfehlers der tabellierten thermophysikalischen Größen benötigten Parameter sind in Tabelle C.2 für die einphasigen und in Tabelle C.3 für die zweiphasigen Validierungsfälle aufgeführt. Die Berechnung des mittleren Fehlers der charakteristischen Größe erfolgt innerhalb des durch die Intervallgrenzen des Druckes und der Temperatur definierten Zustandsbereiches. Dabei wird als charakteristische Größe jene thermophysikalische Variable gewählt, welche im betrachteten Zustandsbereich den größten relativen Fehler aufweist. Eine Unabhängigkeit der Lösung von der gewählten Tabellendimension kann angenommen werden, sofern der mittlere Fehler der charakteristischen Größe eine als Kriterium bezeichnete Fehlerschranke unterschreitet.

Tabelle C.2: Parameter zur Untersuchung des Diskretisierungsfehlers der tabellierten thermophysikalischen Größen für die einphasigen Validierungsfälle

	NASA CDV-Düse	Düse nach Spinelli et al.	HeRo- Verdichter
Druckintervall	[90;1200] bar	[0.5;10] bar	[65;95] bar
Temperaturintervall	[300;500] K	[490;550] K	[295;320] K
Charakteristische Größe	Schallgeschwindigkeit	Schallgeschwindigkeit	isobare Wärmekapazität
Kriterium	5.0×10^{-5} m/s	5.0×10^{-5} m/s	0.1 J/(kg·K)
Tabellendimension	1000	500	1000

Tabelle C.3: Parameter zur Untersuchung des Diskretisierungsfehlers der tabellierten thermophysikalischen Größen für die zweiphasigen Validierungsfälle

Gasphase	Mystery-Düse	Düse nach Barschdorff	Düse nach Bier und Theis	Kaskade nach White et al.
Druckintervall	[0.1;1.15] bar	[0.15;0.8] bar	[9;40] bar	[0.05;0.45] bar
Temperaturintervall	[300;430] K	[300;385] K	[230;300] K	[250;400] K
Charakteristische Größe	Schallgeschwindigkeit	Schallgeschwindigkeit	Schallgeschwindigkeit	Schallgeschwindigkeit
Kriterium	1.0×10^{-4} m/s	1.0×10^{-4} m/s	1.0×10^{-4} m/s	1.0×10^{-4} m/s
Tabellendimension	500	500	500	500

Flüssigphase	Mystery-Düse	Düse nach Barschdorff	Düse nach Bier und Theis	Kaskade nach White et al.
Druckintervall	[0.1;0.55] bar	[0.15;0.5] bar	[9;23] bar	[0.05;0.35] bar
Temperaturintervall	[310;355] K	[300;360] K	[250;270] K	[250;380] K
Charakteristische Größe	Schallgeschwindigkeit	isochore Wärmekapazität	Schallgeschwindigkeit	isochore Wärmekapazität
Kriterium	1.0×10^{-4} m/s	0.1 J/(kg·K)	1.0×10^{-4} m/s	0.1 J/(kg·K)
Tabellendimension	1000	1000	500	1000

D Bestimmung der thermophysikalischen Größen im Zweiphasengebiet

Da die Schallgeschwindigkeit wie bereits in Kapitel 3.1 erläutert im Zweiphasengebiet nicht eindeutig definiert ist, erscheint es notwendig, den Einfluss unterschiedlicher Formulierungsarten auf die numerische Lösung zu untersuchen. Hierbei erlangt das metastabile Zustandsgebiet der Gasphase aufgrund einer Betrachtung von Phasenwechselvorgängen, durch welche es zur Ausbildung einer flüssigen Phase und somit einem Eintritt in das Zweiphasengebiet rechts des kritischen Punktes kommt, eine besondere Relevanz. Liegt ein thermodynamischer Zustand innerhalb des Zweiphasengebietes aber jenseits des Spinodallimits, welche den metastabilen Zustandsbereich begrenzt, ist dieser nicht stabil und weist in der Folge keine physikalische Signifikanz auf. Eine Untersuchung zur Bestimmung der Schallgeschwindigkeit im Zweiphasengebiet kann sich daher auf metastabile Zustände beschränken. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit erfolgt eine Berechnung der Schallgeschwindigkeit unter Annahme eines Gleichgewichtszustandes a_{eq} . Hierzu wird die Zustandsgleichung im metastabilen Bereich unter Beschränkung auf gasförmige Zustände ausgewertet. Die so ermittelten Werte der Schallgeschwindigkeit und die auf dieser Grundlage berechneten Druckverläufe entlang der Düsenachse dienen daher im Weiteren als Referenz. Um einen möglichst umfassenden Vergleich mit anderen in der Literatur vertretenen Formulierungsarten der Schallgeschwindigkeit zu ermöglichen, erfolgt eine Auswahl von drei Ansätzen. Zunächst erscheint eine Gegenüberstellung mit der in Gleichung 3.22 definierten Schallgeschwindigkeit eines kalorisch perfekten Gases als sinnvoll, da anhand dieser eine obere Grenze möglicher Abweichungen definiert werden kann. Ein weiterer Ansatz zur Beschreibung der Schallgeschwindigkeit wird von Guha [64] und Petr [116] ausführlich dargelegt. Demnach kommt es in Folge der Ausbreitung einer Schallwelle in Abhängigkeit ihrer Frequenz zu unterschiedlich starken Störungen des thermischen und mechanischen Gleichgewichtes innerhalb der Strömung. Während eine hochfrequente Schallwelle den Untersuchungsbereich bereits durchquert hat bevor die Strömung in der Lage ist auf die durch sie hervorgerufenen lokalen Gradienten zu reagieren, ermöglichen niederfrequente Schallwellen eine Anpassung der Strömungsgrößen ohne Störung des Gleichgewichtszustandes. Das Konzept des *frozen speed of sound* repräsentiert den Fall hochfrequenter Schallwellen und führt zur Formulierung der Schallgeschwindigkeit in Abhängigkeit der Sättigungsgrößen. Šafářík [181] schlägt hierzu eine Auswertung der Zustandsgleichung anhand des durch den Druck definierten Sättigungszustandes der Gasphase vor:

$$\text{Frozen:} \quad a = a_{EOS}(\rho_{s,g}, T_{s,g}) \quad (\text{D.1})$$

Während sowohl die Bestimmung der Schallgeschwindigkeit im Gleichgewichtszustand als auch das Konzept des *frozen speed of sound* eine Dominanz der gasförmigen Phase voraussetzen, kommt es durch die Formulierung nach Wood [172] zu einer äquivalenten Berücksichtigung der Anteile beider Phasen:

$$\text{Wood:} \quad a = \sqrt{\frac{1}{\rho_m} \left(\frac{1-y}{\rho_g a_g^2} + \frac{y}{\rho_l a_l^2} \right)^{-1}} \quad (\text{D.2})$$

Die Bestimmung der in dieser Gleichung enthaltenen Schallgeschwindigkeiten der Gas- und Flüssigphase erfolgt jeweils durch Auswertung der Zustandsgleichung. Durch eine Imple-

mentierung der drei vorgestellten Ansätze zur Bestimmung der Schallgeschwindigkeiten in TRACE kann für jede der Formulierungen mittels des PGIRoe-Schemas eine numerische Lösung für *Fall T1* der Düse nach Bier und Theis berechnet werden. Auf dieser Grundlage wird für jeden berechneten Zustandspunkt entlang der Düsenachse eine relative Abweichung der Schallgeschwindigkeit sowie des Druckes von den Referenzdaten berechnet. Im linken Teil von Abbildung D.1 sind die so für die drei Formulierungsarten ermittelten Werte der Abweichung über der relativen Düsenlänge aufgetragen. Während die relative Abweichung der Schallgeschwindigkeit auf der linken Abszisse zu finden und durch die Farbe Blau gekennzeichnet ist, bildet die rechte Abszisse die relative Abweichung des Druckes in schwarzer Farbe ab. Die als *Ideal* betitelte und durch eine Strich-Punkt-Linie dargestellte Datenreihe repräsentiert die Berechnungen unter Verwendung der Schallgeschwindigkeit des kalorisch perfekten Gases. Als *Frozen* wird die anhand von Gleichung D.1 berechnete Lösung bezeichnet, deren Abweichung durch eine gestrichelte Linie gekennzeichnet ist. Die Ergebnisse unter Verwendung des Ansatzes nach Wood aus Gleichung D.2 ermöglicht ebenfalls die Bestimmung relativer Abweichungen, welche als durchgezogene Linie aufgetragen werden. Um eine Orientierung bezüglich des Vorliegens einer zweiten Phase innerhalb der Düsengeometrie zu ermöglichen, ist die Position des Wilson-Punktes für den in Kapitel 5.2.1 ausführlich beschriebenen Testfall als rot gestrichelte Linie vermerkt. Da für eine Untersuchung des Einflusses der Art der Bestimmung der Schallgeschwindigkeit die qualitativen Verläufe der Abweichungen eine untergeordnete Rolle spielen, soll der Fokus der weiteren Betrachtungen auf einem quantitativen Vergleich liegen. Eine systematische Analyse der relativen Abweichung der Schallgeschwindigkeit und somit der blauen Verläufe zeigt, dass der höchste Wert mit etwa 10 % für die Datenreihe *Ideal* erreicht wird. Da die Annahme eines kalorisch perfekten Gases für den vorliegenden Testfall nicht zu rechtfertigen ist, erscheint dies plausibel. Die Formulierung *Frozen* führt zu einer maximalen relativen Abweichung der Schallgeschwindigkeit von etwa 1 %, während die Formel nach Wood mit etwa 0.13 % die geringste Abweichung zeigt. Zudem ist erkennbar, dass ihr Verlauf erst im Wilson-Punkt startet. Da eine Abweichung der berechneten Schallgeschwindigkeit vom Wert im Gleichgewichtszustand entsprechend Gleichung D.2 erst für Zustände mit $y > 0$ möglich ist, erscheint

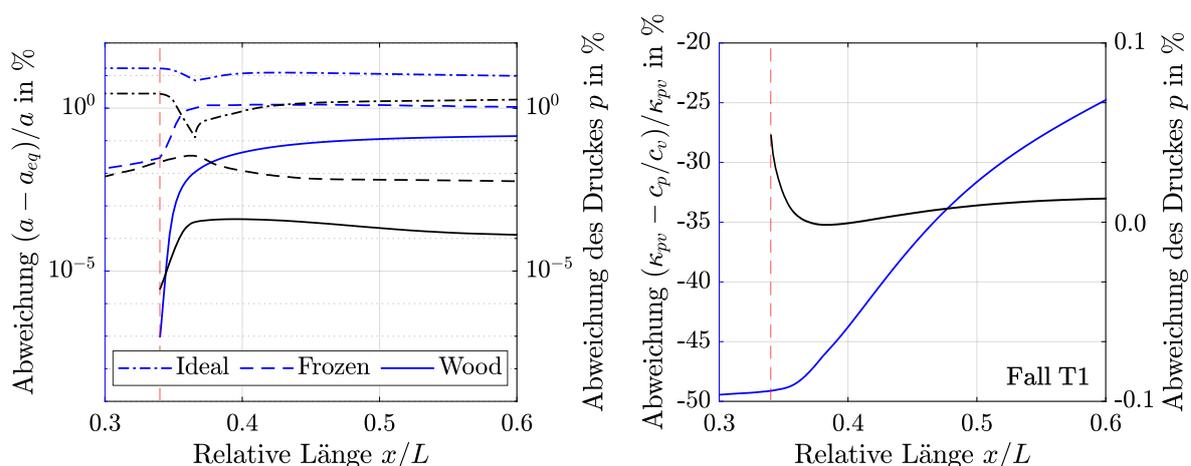


Abbildung D.1: Relative Abweichung der Schallgeschwindigkeit sowie des Druckes entlang der Düse nach Bier und Theis für unterschiedliche Arten der Bestimmung der Schallgeschwindigkeit im Fall T1 (links) und relative Abweichung des isentropen Druck-Volumen-Exponenten vom Verhältnis spezifischer Wärmekapazitäten sowie die hieraus resultierende Abweichung des Druckes (rechts)

dies konsistent. Anhand eines Vergleiches mit der Datenreihe *Ideal* wird zudem deutlich, dass die maximalen Abweichungen der Fälle *Frozen* und *Wood* verhältnismäßig gering ausfallen. Eine Betrachtung der zugehörigen relativen Abweichungen des Druckes ermöglicht nun eine Abschätzung, inwiefern sich die Art der Bestimmung der Schallgeschwindigkeit im Zweiphasengebiet auf die Berechnung des Strömungsfeldes auswirkt. Werden hierzu die schwarzen Verläufe analysiert, zeigt sich eine zur Schallgeschwindigkeit ähnliche Charakteristik. Während für den Fall *Ideal* mit 1.7 % die höchste Abweichung erreicht wird, kommt es für den Fall *Frozen* nur zu einer maximalen Abweichung von 0.01 %. Der Fall *Wood* weist mit 0.0004 % den geringsten Maximalwert auf. Dies macht deutlich, dass die Art der Bestimmung der Schallgeschwindigkeit im Zweiphasengebiet zumindest für den vorliegenden Fall keinerlei Relevanz aufweist. Mit Ausnahme des Falles *Ideal*, welcher lediglich als Vergleichsgröße dient, führt jede der Formulierung zur Berechnung eines nahezu identischen Druckverlaufes. Da die Schallgeschwindigkeit zudem nicht direkt in die Modellierung der dispersen Phase einfließt, kann der Einfluss ihrer Bestimmung auf den Tropfenradius durch den anhand des Druckes bestimmten Wert abgeschätzt werden. Die Formel nach Wood indiziert, dass es für größere Flüssigkeitsmassenanteile auch zu einer höheren Abweichung in der Schallgeschwindigkeit und somit den berechneten Strömungsgrößen kommen könnte. Für die im Rahmen der vorliegenden Arbeit untersuchten Phasenwechselvorgänge in Form der homogenen Kondensation in Turbomaschinen werden in der Regel jedoch nur Flüssigkeitsmassenanteile in einer Größenordnung von 0.1 erreicht. Auch ist der maximale im Zuge einer homogenen Kondensation zu erreichende Flüssigkeitsmassenanteil thermodynamisch durch das Spinodallimit begrenzt.

Eine weitere thermophysikalische Größe, welche im Zuge der Berechnungen des PGI-Roe-Schemas zu bestimmen ist, stellt der isentrope Druck-Volumen-Exponent dar. Aufgrund seiner Verwendung als zum Isentropenexponenten äquivalenten Ausdruck soll analog der Vorgehensweise für die Schallgeschwindigkeit eine Untersuchung des Einflusses seiner Formulierung erfolgen. Hierzu wird für *Fall T1* der Düse nach Bier und Theis eine Berechnung durchgeführt, welche den isentropen Druck-Volumen-Exponenten durch das Verhältnis spezifischer Wärmekapazitäten ersetzt. Die Abweichung dieser Ergebnisse von den Referenzdaten ist im rechten Teil von Abbildung D.1 auf der linken Abszisse in blau aufgetragen. Während die Abweichung vor Einsetzen der Kondensation einen Wert von etwas über -50% aufweist, nimmt sie stromabwärts des Wilson-Punktes ab und erreicht am Austritt des Untersuchungsbereiches einen Wert von -25% , was auf die Annäherung an den Gleichgewichtszustand hindeuten könnte. Wird anhand der rechten Abszisse die Auswirkung einer Verwendung des Verhältnisses spezifischer Wärmekapazitäten auf den Druckverlauf betrachtet, zeigt sich eine maximale Abweichung von etwa -0.05% , welche lokal mit dem Wilson-Punkt zusammen fällt. Da es im Kontext des PGI-Roe-Schemas erst unter Anwesenheit einer zweiten Phase zur Bestimmung der untersuchten Größe kommt, bildet dieser auch den Startpunkt des Verlaufes. Die dargestellte Abweichung nimmt stromabwärts stetig ab und erreicht am Austritt des Untersuchungsbereiches einen Wert von etwa 0.01% . In der Folge scheint auch die Art der Näherung des Isentropenexponenten keinen relevanten Einfluss auf die Ergebnisse zu haben. Jedoch muss hierbei angemerkt werden, dass einzig der in Gleichung 4.49 formulierte Faktor des PGI-Roe-Schemas durch obige Variation beeinflusst wird. Die Verwendung des Verhältnisses spezifischer Wärmekapazitäten im Zuge der Modellgleichungen der Kondensation bleibt hiervon hingegen unbeeinflusst.

Literaturverzeichnis

- [1] **Abgrall, Rémi.** “An extension of Roe’s upwind scheme to algebraic equilibrium real gas models”. In: *Computers & Fluids* 19.2 (1991), S. 171–182. ISSN: 0045-7930. DOI: 10.1016/0045-7930(91)90032-D.
- [2] **Allison, Timothy C., Moore, Jeffrey, Pelton, Robert, Wilkes, Jason und Ertas, Bugra.** “7 - Turbomachinery”. In: *Fundamentals and Applications of Supercritical Carbon Dioxide (sCO₂) Based Power Cycles*. Hrsg. von Klaus Brun, Peter Friedman und Richard Dennis. Woodhead Publishing, 2017, S. 147–215. ISBN: 978-0-08-100804-1. DOI: 10.1016/B978-0-08-100804-1.00007-4.
- [3] **Ameli, Alireza, Turunen-Saaresti, Teemu und Backman, Jari.** “Numerical Investigation of the Flow Behavior Inside a Supercritical CO₂ Centrifugal Compressor”. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 140 (Juli 2018). DOI: 10.1115/1.4040577.
- [4] **American Institute of Aeronautics and Astronautics.** *Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations (AIAA G-077-1998 (2002))*. 1998, S. 3–4. DOI: 10.2514/4.472855.001.
- [5] **Anderson, John D.** *Computational Fluid Dynamics - The Basics with Applications*. McGraw-Hill, 1995, S. 41–42,53–55,62. ISBN: 9780071132107.
- [6] **Angelino, Gianfranco.** “Carbon Dioxide Condensation Cycles For Power Production”. In: *Journal of Engineering for Power* 90.3 (Juli 1968), S. 287–295. ISSN: 0022-0825. DOI: 10.1115/1.3609190.
- [7] **Ansermet, Jean-Philippe und Brechet, Sylvain.** *Principles of Thermodynamics*. Dez. 2018, S. 140. ISBN: 9781108426091. DOI: 10.1017/9781108620932.
- [8] **Arp, Vincent, Persichetti, John M. und Chen, Guo-Bang.** “The Grüneisen Parameter in Fluids”. In: *Journal of Fluids Engineering* 106.2 (Juni 1984), S. 193–200. ISSN: 0098-2202. DOI: 10.1115/1.3243100.
- [9] **Atkins, Peter und Paula, Julio.** *Atkins’ physical chemistry*. Oxford University press, 2008, S. 7–9. ISBN: 9780195685220.
- [10] **Baehr, Hans Dieter.** “Thermodynamische Fundamentalgleichungen und charakteristische Funktionen”. In: *Forschung im Ingenieurwesen* 64.1 (Mai 1998), S. 35–43.
- [11] **Baehr, Hans Dieter und Kabelac, Stephan.** *Thermodynamik: Grundlagen und technische Anwendungen*. 16. Aufl. 2016. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2016, S. 14–18, 254–256, 183–184, 221, 181–183. ISBN: 9783662495674.
- [12] **Bakhtar, Farhang, Ebrahimi, Mojtaba und Webb, Richard A.** “On the Performance of a Cascade of Turbine Rotor Tip Section Blading in Nucleating Steam: Part 1: Surface Pressure Distributions”. In: *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science* 209.2 (1995), S. 115–124. DOI: 10.1243/PIME_PROC_1995_209_131_02.
- [13] **Bakhtar, Farhang, Otto, Steven R., Zamri, Mohd und Sarkies, Jonathan Michael.** “Instability in Two-Phase Flows of Steam”. In: *Proceedings: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 464.2091 (2008), S. 537–553. ISSN: 13645021.

- [14] **Bakhtar, Farhang, Young, John B., White, Alexander J. und Simpson, David. A.** “Classical Nucleation Theory and Its Application to Condensing Steam Flow Calculations”. In: *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science* 219.12 (2005), S. 1315–1333. DOI: 10.1243/095440605X8379.
- [15] **Bakhtar, Farhang und Zidi, Kaddour.** “Nucleation Phenomena in Flowing High-Pressure Steam Part 2: Theoretical Analysis”. In: *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy* 204.4 (1990), S. 233–242. DOI: 10.1243/PIME_PROC_1990_204_032_02.
- [16] **Baltadjiev, Nikola, Spakovszky, Zoltan und Lettieri, Claudio.** “An Investigation of Real Gas Effects In Supercritical CO₂ Centrifugal Compressors”. In: *Journal of Turbomachinery* 137 (Sep. 2015). DOI: 10.1115/1.4029616.
- [17] **Banuti, Daniel T., Raju, Muralikrishna und Ihme, Matthias.** “Between supercritical liquids and gases – Reconciling dynamic and thermodynamic state transitions”. In: *The Journal of Supercritical Fluids* 165 (2020), S. 104895. ISSN: 0896-8446. DOI: 10.1016/j.supflu.2020.104895.
- [18] **Barschdorff, Dieter.** “Kurzzeitfeuchtemessung und ihre Anwendung bei Kondensationserscheinungen in Lavaldüsen”. Doctoral Thesis. Karlsruhe: Institut Strömungslehre und Strömungsmaschinen, 1967, S. 29–30.
- [19] **Barschdorff, Dieter.** “Verlauf der Zustandsgrößen und gasdynamische Zusammenhänge bei der spontanen Kondensation reinen Wasserdampfes in Lavaldüsen”. In: *Forschung im Ingenieurwesen A* 37 (1971), S. 146–157.
- [20] **Becker, Richard und Döring, Werner.** “Kinetische Behandlung der Keimbildung in übersättigten Dämpfen”. In: *Annalen der Physik* 416.8 (1935), S. 719–752. DOI: 10.1002/andp.19354160806.
- [21] **Bethe, Hans A.** “On the Theory of Shock Waves for an Arbitrary Equation of State”. In: *Classic Papers in Shock Compression Science*. Hrsg. von James N. Johnson und Roger Chéret. New York, NY: Springer New York, 1998, S. 421–495. ISBN: 978-1-4612-2218-7. DOI: 10.1007/978-1-4612-2218-7_11.
- [22] **Bier, Konrad, Ehrler, Friedrich und Niekrawietz, Martin.** “Experimental Investigation and Computer Analysis of Spontaneous Condensation in Stationary Nozzle Flow of CO₂-Air Mixtures”. In: *Adiabatic Waves in Liquid-Vapor Systems*. Hrsg. von Gerd E. A. Meier und Philip A. Thompson. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1990, S. 113–127. ISBN: 978-3-642-83587-2.
- [23] **Bier, Konrad, Ehrler, Friedrich und Theis, Gerhard.** “Spontaneous Condensation in Stationary Nozzle Flow of Carbon Dioxide in a Wide Range of Density”. In: *Adiabatic Waves in Liquid-Vapor Systems*. Hrsg. von Gerd E. A. Meier und Philip A. Thompson. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1990, S. 129–141. ISBN: 978-3-642-83587-2.
- [24] **Bolmatov, Dima, Brazhkin, Vadim V. und Trachenko, Kostya.** “Thermodynamic behaviour of supercritical matter”. In: *Nature communications* 4 (Aug. 2013), S. 2331. DOI: 10.1038/ncomms3331.

- [25] **Brazhkin, Vadim V., Fomin, Yury D., Lyapin, Alexander G., Ryzhov, Valentin N. und Tsiok, Elena N.** “Widom Line for the Liquid–Gas Transition in Lennard-Jones System”. In: *The Journal of Physical Chemistry B* 115.48 (2011), S. 14112–14115. DOI: 10.1021/jp2039898.
- [26] **Brazhkin, Vadim V. und Trachenko, Kostya.** “What separates a liquid from a gas?” In: *Physics Today* 65.11 (Nov. 2012), S. 68–69. ISSN: 0031-9228. DOI: 10.1063/PT.3.1796.
- [27] **Charney, Jule G., Fjörtoft, Ragnar und Neumann, John von.** “Numerical Integration of the Barotropic Vorticity Equation”. In: *Tellus* 2 (1950), S. 237–254.
- [28] **Cinnella, Paola.** “Roe-type schemes for dense gas flow computations”. In: *Computers & Fluids* 35.10 (2006), S. 1264–1281. ISSN: 0045-7930. DOI: 10.1016/j.compfluid.2005.04.007.
- [29] **Cockrell, Cillian, Brazhkin, Vadim V. und Trachenko, Kostya.** “Transition in the supercritical state of matter: Review of experimental evidence”. In: *Physics Reports* 941 (2021), S. 1–27. ISSN: 0370-1573. DOI: 10.1016/j.physrep.2021.10.002.
- [30] **Colonna, Piero, Casati, Emiliano, Trapp, Carsten, Mathijssen, Tiemo, Larjola, Jaakko, Turunen-Saaresti, Teemu und Uusitalo, Antti.** “Organic Rankine Cycle Power Systems: From the Concept to Current Technology, Applications, and an Outlook to the Future”. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 137.10 (Okt. 2015). ISSN: 0742-4795. DOI: 10.1115/1.4029884.
- [31] **Colonna, Piero und Guardone, Alberto.** “Molecular interpretation of nonclassical gas dynamics of dense vapors under the van der Waals model”. In: *Physics of Fluids* 18 (Mai 2006). DOI: 10.1063/1.2196095.
- [32] **Colonna, Piero, Nannan, Nawin R., Guardone, Alberto und van der Stelt, Teus P.** “On the computation of the fundamental derivative of gas dynamics using equations of state”. In: *Fluid Phase Equilibria* 286.1 (2009), S. 43–54. ISSN: 0378-3812. DOI: 10.1016/j.fluid.2009.07.021.
- [33] **Colonna, Piero und Reynolds, William.** *Thermodynamics: Fundamentals and Engineering Applications*. Sep. 2018, S. 136–137. ISBN: 9780521862738. DOI: 10.1017/9781139050616.
- [34] **Courant, Richard, Friedrichs, Kurt und Lewy, Hans.** “Über die partiellen Differenzgleichungen der mathematischen Physik”. In: *Mathematische Annalen* 100 (1928), S. 32–74. ISSN: 0025-5831.
- [35] **Cramer, Mark S.** “Negative nonlinearity in selected fluorocarbons”. In: *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics* 1.11 (Nov. 1989), S. 1894–1897. ISSN: 0899-8213. DOI: 10.1063/1.857514.
- [36] **Crowe, Clayton, Schwarzkopf, John, Sommerfeld, Martin und Tsuji, Yutaka.** *Multiphase flows with droplets and particles*. CRC Press, Jan. 2011, S. 67–100. ISBN: 1439840504. DOI: 10.1201/b111103.
- [37] **Cunningham, Ebenezer und Larmor, Joseph.** “On the velocity of steady fall of spherical particles through fluid medium”. In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 83.563 (1910), S. 357–365. DOI: 10.1098/rspa.1910.0024.

- [38] **Davies, Charles N.** “Definitive equations for the fluid resistance of spheres”. In: *Proceedings of the Physical Society* 57.4 (1945), S. 259. DOI: 10.1088/0959-5309/57/4/301.
- [39] **Demirel, Yaşar.** “Chapter 14 - Extended nonequilibrium thermodynamics”. In: *Nonequilibrium Thermodynamics*. Amsterdam: Elsevier Science, 2002, S. 373–394. ISBN: 978-0-444-50886-7. DOI: 10.1016/B978-044450886-7/50014-X.
- [40] **Dostál, Václav.** *A supercritical carbon dioxide cycle for next generation nuclear reactors*. Massachusetts Institute of Technology, Dept. of Nuclear Engineering, März 2004, S. 114–155.
- [41] **Dykas, Sławomir und Wróblewski, Włodzimierz.** “Single- and two-fluid models for steam condensing flow modeling”. In: *International Journal of Multiphase Flow* 37.9 (2011), S. 1245–1253. ISSN: 0301-9322. DOI: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2011.05.008.
- [42] **Dykas, Sławomir und Wróblewski, Włodzimierz.** “Two-fluid model for prediction of wet steam transonic flow”. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 60 (2013), S. 88–94. ISSN: 0017-9310. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.12.024.
- [43] **Ehrenfest, Paul.** *Phasenumwandlungen im ueblichen und erweiterten Sinn, classifiziert nach den entsprechenden Singularitaeten des thermodynamischen Potentials*. NV Noord-Hollandsche Uitgevers Maatschappij, 1933.
- [44] **Einfeldt, Bernd.** “On Godunov-Type Methods for Gas Dynamics”. In: *Siam Journal on Numerical Analysis - SIAM J NUMER ANAL* 25 (Apr. 1988), S. 294–318. DOI: 10.1137/0725021.
- [45] **Ferziger, Joel H. und Perić, Milovan.** *Numerische Strömungsmechanik*. ger. Berlin [u.a.: Springer, 2008, S. 345–347. ISBN: 9783540675860.
- [46] **Fisher, Michael E. und Widom, Benjamin.** “Decay of Correlations in Linear Systems”. In: *The Journal of Chemical Physics* 50.9 (Dez. 1969), S. 3756–3772. ISSN: 0021-9606. DOI: 10.1063/1.1671624.
- [47] **Franco, Alessandro.** “Power production from a moderate temperature geothermal resource with regenerative Organic Rankine Cycles”. In: *Energy for Sustainable Development* 15.4 (2011), S. 411–419. ISSN: 0973-0826. DOI: 10.1016/j.esd.2011.06.002.
- [48] **Freeman, James, Hellgardt, Klaus und Markides, Christos N.** “An assessment of solar-powered organic Rankine cycle systems for combined heating and power in UK domestic applications”. In: *Applied Energy* 138 (2015), S. 605–620. ISSN: 0306-2619. DOI: 10.1016/j.apenergy.2014.10.035.
- [49] **Frenkel, Yakov.** “Statistical Theory of Condensation Phenomena”. In: *The Journal of Chemical Physics* 7.3 (März 1939), S. 200–201. ISSN: 0021-9606. DOI: 10.1063/1.1750413.

- [50] **Friend, Daniel G.** “7. Speed of sound as a thermodynamic property of fluids”. In: *Modern Acoustical Techniques for the Measurement of Mechanical Properties*. Hrsg. von Moises Levy, Henry E. Bass und Richard Stern. Bd. 39. Experimental Methods in the Physical Sciences. Academic Press, 2001, S. 237–306. DOI: 10.1016/S1079-4042(01)80090-4.
- [51] **Gerber, Andrew G.** “Two-Phase Eulerian/Lagrangian Model for Nucleating Steam Flow”. In: *Journal of Fluids Engineering* 124.2 (Mai 2002), S. 465–475. ISSN: 0098-2202. DOI: 10.1115/1.1454109.
- [52] **Gibbs, Josiah Willard.** “On the Equilibrium of Heterogeneous Substances”. In: *Repertorium der literarischen Arbeiten aus dem Gebiete der reinen und angewandten Mathematik : Originalberichte der Verfasser 2* (1879), S. 300–320.
- [53] **Gibbs, Josiah Willard.** *The Collected Works of J. Willard Gibbs*. Volume I - Thermodynamics. Longmans, Green und Co., 1928, ff.253.
- [54] **Giordano, Michele und Cinnella, Paola.** “Numerical Method for Wet-Steam Flows with Polydispersed Droplet Spectra”. In: Juni 2008. DOI: 10.2514/6.2008-3843.
- [55] **Giuffré, Andrea und Pini, Matteo.** “Design Guidelines for Axial Turbines Operating With Non-Ideal Compressible Flows”. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 143.1 (Dez. 2020), S. 011004. ISSN: 0742-4795. DOI: 10.1115/1.4049137.
- [56] **Glaister, Paul.** “An approximate linearised Riemann solver for the Euler equations for real gases”. In: *Journal of Computational Physics* 74.2 (1988), S. 382–408. ISSN: 0021-9991. DOI: 10.1016/0021-9991(88)90084-8.
- [57] **Godunov, Sergei K. und Bohachevsky, Ihor.** “Finite difference method for numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics”. In: *Matematičeskij sbornik* 47(89).3 (1959), S. 271–306.
- [58] **Gori, Giulio, Vimercati, Davide und Guardone, Alberto.** “Non-ideal compressible-fluid effects in oblique shock waves”. In: *Journal of Physics: Conference Series* 821 (März 2017), S. 012003. DOI: 10.1088/1742-6596/821/1/012003.
- [59] **Gori, Giulio, Zocca, Marta, Cammi, Giorgia, Spinelli, Andrea und Guardone, Alberto.** “Experimental assessment of the open-source SU2 CFD suite for ORC applications”. In: *Energy Procedia* 129 (2017). 4th International Seminar on ORC Power Systems, S. 256–263. ISSN: 1876-6102. DOI: 10.1016/j.egypro.2017.09.151.
- [60] **Grossman, Ben und Walters, Robert W.** “Flux-split algorithms for the multi-dimensional Euler equations with real gases”. In: *Computers & Fluids* 17.1 (1989), S. 99–112. ISSN: 0045-7930. DOI: 10.1016/0045-7930(89)90009-1.
- [61] **Grübel, Marius, Starzmann, Jörg, Schatz, Markus, Eberle, Timo, Vogt, Damian M. und Sieverding, Frank.** “Two-Phase Flow Modeling and Measurements in Low-Pressure Turbines—Part I: Numerical Validation of Wet Steam Models and Turbine Modeling”. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 137.4 (Apr. 2015), S. 042602. ISSN: 0742-4795. DOI: 10.1115/1.4028468.
- [62] **Guardone, Alberto und Argrow, Brian.** “Nonclassical gasdynamic region of selected fluorocarbons”. In: *Physics of Fluids - PHYS FLUIDS* 17 (Nov. 2005). DOI: 10.1063/1.2131922.

- [63] **Guha, Abhijit.** “Transport and Deposition of Particles in Turbulent and Laminar Flow”. In: *Annu. Rev. Fluid Mech* 40 (Jan. 2008), S. 311–41. DOI: 10.1146/annurev.fluid.40.111406.102220.
- [64] **Guha, Abhijit.** *Two-Phase Flows with Phase Transition.* von Karman Institute Lecture Series, Juni 1995, S. 50–51.
- [65] **Gyarmathy, Georg.** “Grundlagen einer Theorie der Nassdampfturbine”. Doctoral Thesis. Zürich: ETH Zurich, 1962. DOI: 10.3929/ethz-a-000087803.
- [66] **Hacks, Alexander J., Abd El Hussein, Ihab, Ren, Haikun, Schuster, Sebastian und Brillert, Dieter.** “Experimental Data of Supercritical Carbon Dioxide (sCO₂) Compressor at Various Fluid States”. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 144.4 (Jan. 2022), S. 041012. ISSN: 0742-4795. DOI: 10.1115/1.4052954.
- [67] **Hacks, Alexander J., Schuster, Sebastian, Dohmen, Hans Josef, Benra, Friedrich-Karl und Brillert, Dieter.** “Turbomachine Design for Supercritical Carbon Dioxide Within the sCO₂-HeRo.eu Project”. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 140.12 (Nov. 2018), S. 121017. ISSN: 0742-4795. DOI: 10.1115/1.4040861.
- [68] **Hacks, Alexander J., Vojacek, Ales, Dohmen, Hans Josef und Brillert, Dieter.** “Experimental investigation of the sCO₂-HeRo compressor”. In: *2nd European sCO₂ Conference 2018* (2018). DOI: 10.17185/duerpublico/46088.
- [69] **Halama, Jan, Benkhaldoun, Fayssal und Fořt, Jaroslav.** “Flux schemes based finite volume method for internal transonic flow with condensation”. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 65 (März 2011), S. 953–968. DOI: 10.1002/flid.2223.
- [70] **Harinck, John, Guardone, Alberto und Colonna, Piero.** “The influence of molecular complexity on expanding flows of ideal and dense gases”. In: *Physics of Fluids* 21.8 (Aug. 2009), S. 086101. ISSN: 1070-6631. DOI: 10.1063/1.3194308.
- [71] **Harten, Amiram und Hyman, James M.** “Self adjusting grid methods for one-dimensional hyperbolic conservation laws”. In: *Journal of Computational Physics* 50.2 (1983), S. 235–269. ISSN: 0021-9991. DOI: 10.1016/0021-9991(83)90066-9.
- [72] **Harten, Amiram, Lax, Peter D. und Leer, Bram van.** “On Upstream Differencing and Godunov-Type Schemes for Hyperbolic Conservation Laws”. In: *SIAM Rev* 25 (Jan. 1983), S. 35–61.
- [73] **Hauke, Guillermo.** *An Introduction to Fluid Mechanics and Transport Phenomena.* Bd. 86. Jan. 2008, S. 5–10. ISBN: 978-1-4020-8536-9. DOI: 10.1007/978-1-4020-8537-6.
- [74] **Hill, Philip G.** “Condensation of water vapour during supersonic expansion in nozzles”. In: *Journal of Fluid Mechanics* 25.3 (1966), 593–620. DOI: \url{10.1017/S0022112066000284}.
- [75] **Hu, Guojun und Kozlowski, Tomasz.** “A Roe-type numerical solver for the two-phase two-fluid six-equation model with realistic equation of state”. In: *Nuclear Engineering and Design* 326 (2018), S. 354–370. ISSN: 0029-5493. DOI: 10.1016/j.nucengdes.2017.11.023.

- [76] **Huber, Marcia.** *Models for Viscosity, Thermal Conductivity, and Surface Tension of Selected Pure Fluids as Implemented in REFPROP v10.0.* en. Aug. 2018. DOI: 10.6028/NIST.IR.8209.
- [77] **Huber, Marcia, Perkins, Richard, Friend, Daniel, Sengers, Jan, Assael, Marc, Metaxa, Ifigeneia, Miyagawa, Kiyoshi, Hellmann, Robert und Vogel, Eckhard.** “New International Formulation for the Thermal Conductivity of H₂O”. In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 41 (Sep. 2012), S. 033102. DOI: 10.1063/1.4738955.
- [78] **Huber, Marcia, Perkins, Richard, Laesecke, Arno, Friend, Daniel, Sengers, Jan, Assael, Marc, Metaxa, Ifigeneia, Vogel, Eckhard, Mareš, Radim und Miyagawa, Kiyoshi.** “New International Formulation for the Viscosity of H₂O”. In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data - J PHYS CHEM REF DATA* 38 (Juni 2009), S. 101–125. DOI: 10.1063/1.3088050.
- [79] **Huber, Marcia, Sykioti, Evrydiki, Assael, Marc und Perkins, Richard.** “Reference Correlation of the Thermal Conductivity of Carbon Dioxide from the Triple Point to 1100 K and up to 200 MPa”. In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 45.1 (Feb. 2016), S. 013102. ISSN: 0047-2689. DOI: 10.1063/1.4940892.
- [80] **Hulburt, Hugh M. und Katz, Stanley.** “Some problems in particle technology: A statistical mechanical formulation”. In: *Chemical Engineering Science* 19.8 (1964), S. 555–574. ISSN: 0009-2509. DOI: 10.1016/0009-2509(64)85047-8.
- [81] **International Association for the Properties of Water and Steam.** “Revised Release on Surface Tension of Ordinary Water Substance”. In: (Juni 2014).
- [82] **Invernizzi, Costante.** *Closed Power Cycles. Thermodynamic Fundamentals and Applications.* Bd. 11. Jan. 2013, S. 109. ISBN: 978-1-4471-5139-5. DOI: 10.1007/978-1-4471-5140-1.
- [83] **Jaeger, Gregg.** “The Ehrenfest Classification of Phase Transitions: Introduction and Evolution”. In: *Archive for History of Exact Sciences* 53 (Mai 1998), S. 51–81. DOI: 10.1007/s004070050021.
- [84] **Kantrowitz, Arthur.** “Nucleation in Very Rapid Vapor Expansions”. In: *The Journal of Chemical Physics* 19.9 (Dez. 2004), S. 1097–1100. ISSN: 0021-9606. DOI: 10.1063/1.1748482.
- [85] **Katopodes, Nikolaos D.** *Free-Surface Flow.* Butterworth-Heinemann, 2018, S. 11–13. ISBN: 9780128154892.
- [86] **Knudsen, Martin und Weber, Sophus.** “Luftwiderstand gegen die langsame Bewegung kleiner Kugeln”. In: *Annalen der Physik* 341.15 (1911), S. 981–994. DOI: 10.1002/andp.19113411506.
- [87] **Kouremenos, Dimitrios A. und Kakatsios, Xenofon K.** “The three isentropic exponents of dry steam”. In: *Forschung im Ingenieurwesen A* 51 (1985), S. 117–122. DOI: 10.1007/BF02558416.
- [88] **Laesecke, Arno und Muzny, Chris.** “Reference Correlation for the Viscosity of Carbon Dioxide”. In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 46 (März 2017), S. 013107. DOI: 10.1063/1.4977429.

- [89] **Lax, Peter D.** “Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation”. In: *Communications on Pure and Applied Mathematics* 7.1 (1954), S. 159–193. DOI: 10.1002/cpa.3160070112.
- [90] **Leer, Bram van.** “Flux-Vector Splitting for the Euler Equation”. In: Bd. 170. Jan. 1982. ISBN: 978-3-540-11948-7. DOI: 10.1007/3-540-11948-5_66.
- [91] **Leer, Bram van.** “Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme”. In: *Journal of Computational Physics* 14.4 (1974), S. 361–370. ISSN: 0021-9991. DOI: 10.1016/0021-9991(74)90019-9.
- [92] **Leer, Bram van, Thomas, James, Roe, Philip L. und Newsome, Richard.** “A Comparison of Numerical Flux Formulas for the Euler and Navier-Stokes Equations”. In: Juni 1987. DOI: 10.2514/6.1987-1104.
- [93] **Lemmon, Eric W., Bell, Ian, Huber, Marcia und McLinden, Mark O.** *NIST Standard Reference Database 23: Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties-REFPROP, Version 10.0, National Institute of Standards and Technology*. 2018. DOI: 10.18434/T4/1502528.
- [94] **Liou, Meng-Sing.** “A generalized procedure for constructing an upwind-based TVD scheme”. In: *25th AIAA Aerospace Sciences Meeting* (Jan. 1987). DOI: 10.2514/6.1987-355.
- [95] **Liou, Meng-Sing, Leer, Bram Van und Shuen, Jian-Shun.** “Splitting of inviscid fluxes for real gases”. In: *Journal of Computational Physics* 87.1 (1990), S. 1–24. ISSN: 0021-9991. DOI: 10.1016/0021-9991(90)90222-M.
- [96] **Maqueo Martínez, Manuel Ernesto, Schippling, Stefan, Schatz, Markus und Vogt, Damian M.** “New Supersonic Nozzle Test Rig Used to Generate Condensing Flow Test Data According to Barschdorff”. In: *International Journal of Turbomachinery, Propulsion and Power* 8.4 (2023). ISSN: 2504-186X. DOI: 10.3390/ijtp8040040.
- [97] **Marchionni, Matteo, Bianchi, Giuseppe und Tassou, Savvas.** “Review of supercritical carbon dioxide (sCO₂) technologies for high-grade waste heat to power conversion”. In: *SN Applied Sciences* 2 (März 2020). DOI: 10.1007/s42452-020-2116-6.
- [98] **Maxwell, James Clerk.** *Theory of heat*. Longmans, Green, and Co., London, 1872, S. 163–171.
- [99] **McGraw, Robert.** “Description of Aerosol Dynamics by the Quadrature Method of Moments”. In: *Aerosol Science and Technology* 27.2 (1997), S. 255–265. DOI: 10.1080/02786829708965471.
- [100] **Mei, Yi und Guha, Abhijit.** “Modification of the upwind schemes for the computation of condensing two-phase flows”. In: *Proceedings of The Institution of Mechanical Engineers Part A-journal of Power and Energy - PROC INST MECH ENG A-J POWER* 220 (Nov. 2006). DOI: 10.1243/09576509JPE146.
- [101] **Menter, Florian, Kuntz, Martin und Langtry, Robin. B.** “Ten years of industrial experience with the SST turbulence model”. In: *Turbulence, Heat and Mass Transfer* 4 (Jan. 2003), S. 625–632.

- [102] **Minea, Vasile.** “Power generation with ORC machines using low-grade waste heat or renewable energy”. In: *Applied Thermal Engineering* 69.1 (2014), S. 143–154. ISSN: 1359-4311. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2014.04.054.
- [103] **Miyagawa, Kazuyoshi und Hill, Philip G.** “A Tabular Taylor Series Expansion Method for Fast Calculation of Steam Properties”. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 119.2 (Apr. 1997), S. 485–491. ISSN: 0742-4795. DOI: 10.1115/1.2815600.
- [104] **Moore, Michael J., Walters, Paul T., Crane, Robert I. und Davidson, Bernhard J.** “Predicting the Fog-Drop Size in Wet-Steam Turbines”. In: *Proceedings of the IMechE Conference on Heat and Fluid Flow in Steam and Gas Turbine Plant* (Apr. 1973), S. 101–109.
- [105] **Moses, Clifford A. und Stein, Gilbert D.** “On the Growth of Steam Droplets Formed in a Laval Nozzle Using Both Static Pressure and Light Scattering Measurements”. In: *Journal of Fluids Engineering* 100.3 (Sep. 1978), S. 311–322. ISSN: 0098-2202. DOI: 10.1115/1.3448672.
- [106] **Mottura, Lorenzo, Vigevano, Luigi und Zaccanti, Marco.** “An Evaluation of Roe’s Scheme Generalizations for Equilibrium Real Gas Flows”. In: *Journal of Computational Physics* 138.2 (1997), S. 354–399. ISSN: 0021-9991. DOI: 10.1006/j.cph.1997.5838.
- [107] **Mulero, Angel und Cachadina, Isidro.** “Recommended Correlations for the Surface Tension of Several Fluids Included in the REFPROP Program”. In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 43.2 (Juni 2014), S. 023104. ISSN: 0047-2689. DOI: 10.1063/1.4878755.
- [108] **Mulero, Angel, Cachadina, Isidro und Parra, Maria.** “Recommended Correlations for the Surface Tension of Common Fluids”. In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 41 (Dez. 2012). DOI: 10.1063/1.4768782.
- [109] **Nannan, Nawin R., Guardone, Alberto und Colonna, Piero.** “On the fundamental derivative of gas dynamics in the vapor–liquid critical region of single-component typical fluids”. In: *Fluid Phase Equilibria* 337 (2013), S. 259–273. ISSN: 0378-3812. DOI: 10.1016/j.fluid.2012.09.017.
- [110] **Ndjinga, Michaël, Kumbaro, Anela, De Vuyst, Florian und Laurent-Gengoux, Pascal.** “Numerical simulation of hyperbolic two-phase flow models using a Roe-type solver”. In: *Nuclear Engineering and Design* 238.8 (2008). ICONE-14 - 14th International Conference on Nuclear Energy, S. 2075–2083. ISSN: 0029-5493. DOI: 10.1016/j.nucengdes.2007.11.014.
- [111] **Neises, Ty W. und Turchi, Craig S.** “A Comparison of Supercritical Carbon Dioxide Power Cycle Configurations with an Emphasis on CSP Applications”. In: *Energy Procedia* 49 (2014). Proceedings of the SolarPACES 2013 International Conference, S. 1187–1196. ISSN: 1876-6102. DOI: 10.1016/j.egypro.2014.03.128.
- [112] **Nishikawa, Keiko und Tanaka, Ibuki.** “Correlation lengths and density fluctuations in supercritical states of carbon dioxide”. In: *Chemical Physics Letters* 244.1 (1995), S. 149–152. ISSN: 0009-2614. DOI: 10.1016/0009-2614(95)00818-0.

- [113] **Osher, Stanley**. “Numerical Solution of Singular Perturbation Problems and Hyperbolic Systems of Conservation Laws”. In: *Analytical and Numerical Approaches to Asymptotic Problems in Analysis*. Hrsg. von O. Axelsson, L.S. Frank und A. Van Der Sluis. Bd. 47. North-Holland Mathematics Studies. North-Holland, 1981, S. 179–204. DOI: 10.1016/S0304-0208(08)71109-5.
- [114] **Otero-Rodriguez, Gustavo J., Patel, Ashish, Diez S., Rafael und Pečnik, René**. “Turbulence modelling for flows with strong variations in thermo-physical properties”. In: *International Journal of Heat and Fluid Flow* 73 (2018), S. 114–123. ISSN: 0142-727X. DOI: 10.1016/j.ijheatfluidflow.2018.07.005.
- [115] **Peery, Kelton M. und Imlay, Scott T.** “Blunt-body flow simulations”. In: *24th Joint Propulsion Conference*. 1988. DOI: 10.2514/6.1988-2904.
- [116] **Petr, Vita**. “Wave propagation in wet steam”. In: *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science* 218.8 (2004), S. 871–882. DOI: 10.1243/0954406041474237.
- [117] **Petrucelli, Giuseppe, Grönman, Aki und Turunen-Saaresti, Teemu**. “A novel numerical approach for simulating low-pressure and high-pressure non-equilibrium condensation in real gases”. In: *International Journal of Multiphase Flow* 171 (2024), S. 104700. ISSN: 0301-9322. DOI: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2023.104700.
- [118] **Pečnik, René, Ren, Jie und Otero-Rodriguez, Gustavo J.** “Characterizing and modelling turbulence in supercritical fluids”. In: *4th European sCO₂ Conference for Energy Systems: March 23-24, 2021, Online Conference* (März 2021), S. 301–306. ISSN: 2510-7852. DOI: 10.17185/duerpublico/73942.
- [119] **Pečnik, René, Rinaldi, Enrico und Colonna, Piero**. “Computational Fluid Dynamics of a Radial Compressor Operating With Supercritical CO₂”. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 134 (Juni 2012), S. 122301. DOI: 10.1115/GT2012-69640.
- [120] **Pipich, Vitaliy und Schwahn, Dietmar**. “Densification of Supercritical Carbon Dioxide Accompanied by Droplet Formation When Passing the Widom Line”. In: *Physical Review Letters* 120 (Apr. 2018). DOI: 10.1103/PhysRevLett.120.145701.
- [121] **Pollak, Rolf**. “Die thermodynamischen Eigenschaften von Wasser - dargestellt durch eine kanonische Zustandsgleichung für die fluiden homogenen und heterogenen Zustände bis 1200 Kelvin und 3000 bar”. Doctoral Thesis. Ruhr-Universität Bochum, 1974.
- [122] **Prando, Dario, Renzi, Massimiliano, Gasparella, Andrea und Baratieri, Marco**. “Monitoring of the energy performance of a district heating CHP plant based on biomass boiler and ORC generator”. In: *Applied Thermal Engineering* 79 (2015), S. 98–107. ISSN: 1359-4311. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2014.12.063.
- [123] **Radovskii, Isaak S.** “Speed of sound in two-phase vapor-liquid systems”. In: *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics* 11 (1970), S. 778–784.
- [124] **Richardson, Lewis F.** *Weather prediction by numerical process*. Cambridge University Press, 1922, S. 219.

- [125] **Rinaldi, Enrico, Pečnik, René und Colonna, Piero.** “Steady State CFD Investigation of a Radial Compressor Operating With Supercritical CO₂”. In: *Proceedings of the ASME Turbo Expo 8* (Juni 2013). DOI: 10.1115/GT2013-94580.
- [126] **Roache, Patrick J.** “Quantification of Uncertainty in Computational Fluid Dynamics”. In: *Annual Review of Fluid Mechanics* 29.1 (1997), S. 123–160. DOI: 10.1146/annurev.fluid.29.1.123.
- [127] **Roe, Philip L.** “Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes”. In: *Journal of Computational Physics* 43.2 (1981), S. 357–372. ISSN: 0021-9991. DOI: 10.1016/0021-9991(81)90128-5.
- [128] **Roe, Philip L. und Pike, Jack.** “Efficient Construction and Utilisation of Approximate Riemann Solutions”. In: Juni 1985, S. 499–518.
- [129] **Romei, Alessandro, Vimercati, Davide, Persico, Giacomo und Guardone, Alberto.** “Non-ideal compressible flows in supersonic turbine cascades”. In: *Journal of Fluid Mechanics* 882 (2020). DOI: 10.1017/jfm.2019.796.
- [130] **Ruppeiner, George, Sahay, Anurag, Sarkar, Tapobrata und Sengupta, Gautam.** “Thermodynamic geometry, phase transitions, and the Widom line”. In: *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics* 86 (Nov. 2012), S. 052103. DOI: 10.1103/PhysRevE.86.052103.
- [131] **Rusanov, Viktor V.** “The calculation of the interaction of non-stationary shock waves and obstacles”. In: *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics* 1.2 (1962), S. 304–320. ISSN: 0041-5553. DOI: 10.1016/0041-5553(62)90062-9.
- [132] **Schames, Leon.** “Erweiterung des Clausius-Maxwell’schen Kriteriums”. In: *Helvetica Physica Acta* 1.4 (1928), S. 417–420.
- [133] **Schatz, Markus, Eberle, Timo, Grübel, Marius, Starzmann, Jörg, Vogt, Damian und Sürken, Norbert.** “Two-Phase Flow Modeling and Measurements in Low-Pressure Turbines: Part 2 — Turbine Wetness Measurement and Comparison to CFD-Predictions”. In: *Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air Volume 1B: Marine; Microturbines, Turbochargers and Small Turbomachines; Steam Turbines* (Juni 2014), V01BT27A006. DOI: 10.1115/GT2014-25245.
- [134] **Schiller, Ludwig und Naumann, Alexander.** “Über die grundlegenden Berechnungen bei der Schwerkraftaufbereitung”. In: *Zeitschrift des Vereins Deutscher Ingenieure* 77 (1933), S. 318–320.
- [135] **Shao, Wenyang, Yang, Jinguang, Wang, Xiaofang und Ma, Ziyue.** “Accuracy study and stability control of a property-table-based CFD strategy for modeling SCO₂ compressors working near the critical point of the fluid”. In: *Applied Thermal Engineering* 183 (2021), S. 116222. ISSN: 1359-4311. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2020.116222.
- [136] **Simeoni, Giovanna G., Bryk, Taras, Gorelli, Federico A., Krisch, Michael, Ruocco, Giancarlo, Santoro, Mario und Scopigno, Tullio.** “The Widom line as the crossover between liquid-like and gas-like behaviour in supercritical fluids”. In: *Nature Physics* 6.7 (Juli 2010), S. 503–507. DOI: 10.1038/nphys1683.
- [137] **Skripov, Vladimir P.** “Metastable States”. In: *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics* 17.3 (1992), S. 193–236. DOI: 10.1515/jnet.1992.17.3.193.

- [138] **Spalart, Philippe und Allmaras, Steven.** “A One-Equation Turbulence Model for Aerodynamic Flows”. In: *AIAA* 439 (Jan. 1992). DOI: 10.2514/6.1992-439.
- [139] **Span, Roland und Wagner, Wolfgang.** “A New Equation of State for Carbon Dioxide Covering the Fluid Region from the Triple-Point Temperature to 1100 K at Pressures up to 800 MPa”. In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 25.6 (Nov. 1996), S. 1509–1596. ISSN: 0047-2689. DOI: 10.1063/1.555991.
- [140] **Spinelli, Andrea, Cammi, Giorgia, Gallarini, Simone, Zocca, Marta, Cozzi, Fabio, Gaetani, Paolo, Dossena, Vincenzo und Guardone, Alberto.** “Experimental evidence of non-ideal compressible effects in expanding flow of a high molecular complexity vapor”. In: *Experiments in Fluids* 59 (Juli 2018). DOI: 10.1007/s00348-018-2578-0.
- [141] **Starzmann, Jörg u. a.** “Results of the International Wet Steam Modeling Project”. In: *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy* 232.5 (2018), S. 550–570. DOI: 10.1177/0957650918758779.
- [142] **Stephan, Peter, Schaber, Karlheinz, Stephan, Karl und Mayinger, Franz.** *Thermodynamik Grundlagen und technische Anwendungen Band 1: Einstoffsysteme*. 19., ergänzte Aufl. 2013. Springer-Lehrbuch. Springer Berlin Heidelberg, 2013, S. 8–10. ISBN: 9783642300981.
- [143] **Stokes, George Gabriel.** “On the Effect of the Internal Friction of Fluids on the Motion of Pendulums”. In: *Mathematical and Physical Papers*. Bd. 3. Cambridge Library Collection - Mathematics. Cambridge University Press, 2009, 1–10. DOI: 10.1017/CB09780511702266.002.
- [144] **Stokes, George Gabriel.** “On the Theories of the Internal Friction of Fluids in Motion, and of the Equilibrium and Motion of Elastic Solids”. In: *Mathematical and Physical Papers*. Bd. 1. Cambridge Library Collection - Mathematics. Cambridge University Press, 2009, 75–129. DOI: 10.1017/CB09780511702242.005.
- [145] **Tegethoff, Katharina, Almeida, Carolina Borges de, Schuster, Sebastian und Brillert, Dieter.** “Numerical method for investigating non-ideal flow demonstrated on a centrifugal compressor operating near the critical point of CO₂”. In: *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2024: Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air* (2024). (zur Veröffentlichung angenommen).
- [146] **Tegethoff, Katharina, Schuster, Sebastian und Brillert, Dieter.** “Numerical simulation of real gas one-component two-phase flow using a Roe-based scheme”. In: *Computers & Fluids* 245 (2022), S. 105560. ISSN: 0045-7930. DOI: 10.1016/j.compfluid.2022.105560.
- [147] **Tester, Jefferson W. und Modell, Michael.** *Thermodynamics and Its Applications*. Physical and Chemical Engineering Sciences. Prentice Hall PTR, 1997, S. 176–178. ISBN: 9780139153563.
- [148] **Theis, Gerhard.** “Spontankondensation in übersättigten Dampfströmungen von Kohlendioxid und von Difluordichlormethan”. Doctoral Thesis. Karlsruhe: Fakultät für Chemieingenieurwesen, 1985, S. 22–23,28–30,35.

- [149] **Thol, Monika, Dubberke, Frithjof, Baumhögger, Elmar, Vrabec, Jadran und Span, Roland.** “Speed of Sound Measurements and Fundamental Equations of State for Octamethyltrisiloxane and Decamethyltetrasiloxane”. In: *Journal of Chemical & Engineering Data* 62 (Juli 2017). DOI: 10.1021/acs.jced.7b00092.
- [150] **Thompson, Philip A.** “A Fundamental Derivative in Gasdynamics”. In: *The Physics of Fluids* 14.9 (Sep. 1971), S. 1843–1849. ISSN: 0031-9171. DOI: 10.1063/1.1693693.
- [151] **Thompson, Philip A. und Lambrakis, Konstantine C.** “Negative shock waves”. In: *Journal of Fluid Mechanics* 60.1 (1973), 187–208. DOI: \url{10.1017/S002211207300011X}.
- [152] **Topping, David und Bane, Michael.** “Nucleation”. In: *Introduction to Aerosol Modelling*. John Wiley & Sons, Ltd, 2022. Kap. 6, S. 223–258. ISBN: 9781119625728. DOI: 10.1002/9781119625728.ch6.
- [153] **Toro, Eleuterio F.** *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction*. Springer Berlin, Heidelberg, Jan. 2009, S. 349. ISBN: 9783540252023. DOI: 10.1007/b79761.
- [154] **Toro, Eleuterio F., Spruce, Michael und Speares, William.** “Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver”. In: *Shock Waves* 4 (1994), S. 25–34.
- [155] **Tosto, Francesco, Giuffré, Andrea, Colonna, Piero und Pini, Matteo.** “Flow deviation and critical choking in transonic turbine cascades operating with non-ideal compressible flows”. In: *Journal of the Global Power and Propulsion Society* 6 (2022), S. 181–199. DOI: 10.33737/jgpps/151659.
- [156] **Tosto, Francesco, Lettieri, Claudio, Pini, Matteo und Colonna, Piero.** “Dense-vapor effects in compressible internal flows”. In: *Physics of Fluids* 33.8 (Aug. 2021). ISSN: 1070-6631. DOI: 10.1063/5.0058075.
- [157] **Toumi, Imad.** “An Upwind Numerical Method for Two-Fluid Two-Phase Flow Models”. In: *Nuclear Science and Engineering* 123.2 (1996), S. 147–168. DOI: 10.13182/NSE96-A24180.
- [158] **Tropea, Cameron, Yarin, Alexander und Foss, John.** *Springer Handbook of Experimental Fluid Mechanics*. Jan. 2007, S. 288–289. ISBN: 9783540251415. DOI: 10.1007/978-3-540-30299-5.
- [159] **Vimercati, Davide, Gori, Giulio und Guardone, Alberto.** “Non-ideal oblique shock waves”. In: *Journal of Fluid Mechanics* 847 (2018), 266–285. DOI: 10.1017/jfm.2018.328.
- [160] **Vinokur, Marcel.** “Flux Jacobian matrices and generated Roe average for an equilibrium real gas”. In: 1988.
- [161] **Volmer, Max und Weber, Alexander.** “Nucleus Formation in Supersaturated Systems”. In: *Zeitschrift für Physikalische Chemie* 119.1 (1926), S. 277–301. DOI: 10.1515/zpch-1926-11927.
- [162] **Waals, Johannes Diderik van der.** *Over de continuïteit van den gas- en vloeïstoestand*. A. W. Sijthoff, Leiden, 1873, S. 54–56.

- [163] **Wagner, Wolfgang und Kretschmar, Hans-Joachim.** *International steam tables - Properties of water and steam based on the industrial formulation IAPWS-IF97.* Springer Berlin, Heidelberg, 2008, S. 30–135. ISBN: 9783642431715. DOI: 10.1007/978-3-540-74234-0.
- [164] **Wagner, Wolfgang und Pruß, Andreas.** “The IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use”. In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 31.2 (Juni 2002), S. 387–535. ISSN: 0047-2689. DOI: 10.1063/1.1461829.
- [165] **Wagner, Wolfgang u. a.** “The IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam”. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 122.1 (Jan. 2000), S. 150–184. ISSN: 0742-4795. DOI: 10.1115/1.483186.
- [166] **Wheeler, Andrew und Ong, Jonathan.** “The Role of Dense Gas Dynamics on Organic Rankine Cycle Turbine Performance”. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 135 (Okt. 2013), S. 102603. DOI: 10.1115/1.4024963.
- [167] **White, Alexander J.** “A comparison of modelling methods for polydispersed wet-steam flow”. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 57 (Juni 2003), S. 819–834. DOI: 10.1002/nme.705.
- [168] **White, Alexander J.** “Condensation in steam turbine cascades”. Doctoral Thesis. University of Cambridge, 1992.
- [169] **White, Alexander J. und Hounslow, Mike J.** “Modelling droplet size distributions in polydispersed wet-steam flows”. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 43 (Juni 2000), S. 1873–1884. DOI: 10.1016/S0017-9310(99)00273-2.
- [170] **White, Alexander J., Young, John B. und Walters, Paul T.** “Experimental validation of condensing flow theory for a stationary cascade of steam turbine blades”. In: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 354.1704 (1996), S. 59–88. DOI: 10.1098/rsta.1996.0003.
- [171] **Widom, Benjamin.** “The critical point and scaling theory”. In: *Physica* 73.1 (1974), S. 107–118. ISSN: 0031-8914. DOI: 10.1016/0031-8914(74)90228-6.
- [172] **Wood, Albert B.** *A Textbook of Sound: Being an Account of the Physics of Vibrations with Special Reference to Recent Theoretical and Technical Developments.* G. Bell und Sons Limited, 1930.
- [173] **Wright, Steven Alan, Radel, Ross F., Vernon, Milton E., Pickard, Paul S. und Rochau, Gary Eugene.** “Operation and analysis of a supercritical CO₂ Brayton cycle.” In: 2010. DOI: 10.2172/984129.
- [174] **Wróblewski, Włodzimierz und Dykas, Sławomir.** “Two-fluid model with droplet size distribution for condensing steam flows”. In: *Energy* 106 (2016), S. 112–120. ISSN: 0360-5442. DOI: 10.1016/j.energy.2016.03.052.
- [175] **Wróblewski, Włodzimierz, Dykas, Sławomir, Gardzilewicz, Andrzej und Kolvratnik, Michal.** “Numerical and Experimental Investigations of Steam Condensation in LP Part of a Large Power Turbine”. In: *Journal of Fluids Engineering* 131.4 (März 2009), S. 041301. ISSN: 0098-2202. DOI: 10.1115/1.3089544.

-
- [176] **Xu, Limei, Kumar, Pradeep, Buldyrev, Sergey, Chen, Sow-Hsin, Poole, Peter, Sciortino, Francesco und Stanley, Harry E.** “Relation Between the Widom Line and the Dynamic Crossover in Systems With a Liquid-Liquid Phase Transition”. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 102 (Dez. 2005), S. 16558–62. DOI: 10.1073/pnas.0507870102.
- [177] **Young, John B.** *Spontaneous Condensation of Steam in Supersonic Nozzles*. Technical report (University of Cambridge. Department of Engineering): A-Turbo. Cambridge University Engineering Department, 1980, S. 23.
- [178] **Zeldovich, Yakov B.** “On the theory of new phase formation: cavitation”. In: *Acta Physicochem., USSR* 18 (1943), S. 1.
- [179] **Zemansky, Mark W., Dittman, Richard H. und Scott, Hugh L.** *Heat and Thermodynamics, 7th ed.* McGraw Hill, New York, 1997, S. 226–227. ISBN: 0-07-01759-2.
- [180] **Zhu, Xiaofeng, Lin, Zhirong, Yuan, Xin, Tomohiro, Tejima, Niizeki, Yoshiki und Shibukawa, Naoki.** “Non-equilibrium Condensing Flow Modeling in Nozzle and Turbine Cascade”. In: *International Journal of Gas Turbine, Propulsion and Power Systems* 4.3 (Okt. 2012).
- [181] **Šafarík, Pavel, Nový, Adam, Jícha, David und Hajšman, Miroslav.** “On the speed of sound in steam”. In: *Acta Polytechnica* 55.6 (2015), 422–426. DOI: 10.14311/AP.2015.55.0422.

Curriculum Vitae

Der Lebenslauf ist in der Online-Version aus Gründen des Datenschutzes nicht enthalten.