



## **DIPLOMARBEIT**

ILR-RSN DA 07-38

Thema: **Numerische Simulation einer  
Stickstoff-Düsenströmung mit gaskinetischen  
und kontinuumsmechanischen Verfahren**

von: **Martin Grabe**

Zum  
Erlangen des akademischen Grades

## **DIPLOMINGENIEUR**

(Dipl.-Ing.)

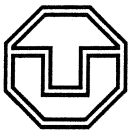
Betreuer: Dr.-Ing. Klaus Hannemann, DLR

Verantwortlicher Hochschullehrer: Prof. Dr.-Ing. Stefanos Fasoulas

Tag der Einreichung: 28.02.2008

Erster Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Stefanos Fasoulas

Zweiter Gutachter: Dr.-Ing. Klaus Hannemann, DLR



### **Aufgabenstellung für die Diplomarbeit**

Studiengang: Maschinenbau  
Studienrichtung: Luft- und Raumfahrttechnik  
Name des Studierenden: Grabe, Martin  
Registrierungsnummer: ILR-RSN D 07-38

### **Thema: Numerische Simulation einer Stickstoff-Düsenströmung mit gaskinetischen und kontinuumsmechanischen Verfahren**

Ein Arbeitsschwerpunkt der Abteilung Raumfahrzeuge des DLR in Göttingen ist die Untersuchung der Wechselwirkungen von Abgasstrahlen aus Kleintriebwerken mit deren Umgebung. Dazu werden seit vielen Jahren aufwendige Experimente an weltweit einzigartigen Vakuumanlagen durchgeführt. Für viele Anwendungen ist es dabei unerlässlich, die Expansion des Treibstrahls aus der Düse auch numerisch behandeln zu können. Aus strömungstechnischer Sicht müssen dabei zwei fundamental verschieden zu beschreibende Bereiche unterschieden werden. Zum einen ist dies die Gasströmung in der Düse, die aufgrund der verhältnismäßig hohen Moleküldichte mit den Navier-Stokes-Gleichungen der Kontinuumsmechanik beschrieben werden kann. Die Expansion des Gases außerhalb der Düse hingegen ist durch deutliche Nichtgleichgewichtseffekte gekennzeichnet, für deren physikalisch korrekte Simulation gaskinetische Verfahren (Direct Simulation Monte Carlo, DSMC) notwendig sind. Eine vollständige Berechnung der Düsenexpansion mit dem DSMC-Verfahren verbietet sich aufgrund des immensen Bedarfs an Speicher und Rechenzeit.

Für beide Strömungsbereiche sind Implementierungen der nötigen Verfahren vorhanden. Der am DLR entwickelte Navier-Stokes-Löser TAU ist für die Berechnung der Düsenströmung ohne größere Anpassungen einsatzfähig. Das Gebiet der verdünnten Strömung soll aufbauend auf dem ursprünglich am Institut für Raumfahrtssysteme in Stuttgart entwickelten 2D-DSMC-Code „LasVegas“ simuliert werden. Um eine effiziente und physikalisch richtige Simulation durchführen zu können, müssen beide Verfahren gekoppelt werden. Dabei genügt es für die Düsenströmung in erster Näherung, eine Stromab-Kopplung von Kontinuums- zu DSMC-Verfahren zu realisieren. Eine ähnliche Arbeit wurde am DLR in einfacherer Form, mit anderer Software und eingebettet in den größeren Rahmen einer Dissertation, bereits durchgeführt. Ziel der Diplomarbeit ist es nun, ein Verfahren zu erarbeiten, mit welchem die Codes TAU und „LasVegas“ zweidimensional möglichst effektiv stromab gekoppelt werden können. Als Testfall wird eine simulierte Stickstoff-Düsenströmung vorgesehen, für die ausreichend experimentelle Ergebnisse zur Validierung vorliegen. Wesentlicher Bestandteil der Arbeit soll die Diskussion von verfahrenstechnischen Besonderheiten der Kopplung sein.

Folgende Punkte sollen bearbeitet werden:

- 2D-Simulation der Düsenströmung mit TAU, Vergleich mit bereits vorhandenen numerischen Lösungen
- Ermittlung und Bewertung der Parameter für die Kontinuums-grenze im Strömungsfeld
- Erweiterung des DSMC-Codes „LasVegas“ um für die Kopplung notwendige Funktionen
- Simulation der Treibstrahlexpansion im Bereich des Nichtgleichgewichts mit „LasVegas“ unter Beachtung der von TAU vorgegebenen Einstrombedingungen (Stromab-Kopplung)
- Vergleich der Lösung mit experimentellen Daten
- Diskussion der Verfahrensbesonderheiten


**Rechtliche Bestimmungen:** Der Bearbeiter ist grundsätzlich nicht berechtigt, irgendwelche Arbeits- und Forschungsergebnisse, von denen er bei der Bearbeitung Kenntnis erhält, ohne Genehmigung des Betreuers dritten Personen zugänglich zu machen. Bezüglich erreichter Forschungsleistungen gilt das Gesetz über Urheberrecht und verwandete Schutzrechte (Bundesgesetzblatt I/ S. 1273, Urheberrechtsgesetz vom 09.09.1965). Der Bearbeiter hat das Recht, seine Erkenntnisse zu veröffentlichen, soweit keine Erkenntnisse und Leistungen der betreuenden Institutionen eingeflossen sind. Die von der Studienrichtung erlassenen Richtlinien zur Anfertigung der Studienarbeit sowie die Prüfungsordnung sind zu beachten.


**Betreuer:** Prof. Fasoulas, Institut für Luft- und Raumfahrttechnik TU Dresden  
Dr. Hannemann, DLR Göttingen

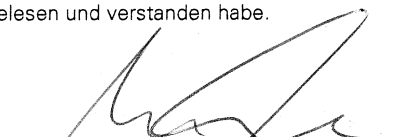
**Bearbeitungsbeginn:** 17.01.2008  
**Einzureichen am:** 16.05.2008

**Empfangsbestätigung des Studierenden:**

Ich bestätige hiermit, dass ich die Aufgabenstellung sowie die rechtlichen Bestimmungen und die Studien- und Prüfungsordnung gelesen und verstanden habe.

  
Prof. Dr.-Ing. K. Wolf  
Studienrichtungsleiter

  
Prof. Dr.-Ing. S. Fasoulas  
Verantwortlicher Hochschullehrer

  
Unterschrift des Studierenden

## **Selbständigkeitserklärung**

Hiermit erkläre ich, daß ich die von mir dem Institut für Luft- und Raumfahrttechnik der Fakultät Maschinenwesen eingereichte Diplomarbeit zum Thema „Numerische Simulation einer Stickstoff-Düsenströmung mit gaskinetischen und kontinuumsmechanischen Verfahren“ selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie Zitate kenntlich gemacht habe.

Göttingen, 27. Februar 2008

Diplomarbeit

**Numerische Simulation einer  
Stickstoff-Düsenströmung mit gaskinetischen  
und kontinuumsmechanischen Verfahren**

Martin Grabe

26. März 2008

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>7</b>
1.1. Problemstellung . . . . .	8
1.2. Ansatz in dieser Arbeit . . . . .	10
<b>2. Modellierung von Gasströmungen</b>	<b>12</b>
2.1. Molekulare Sichtweise . . . . .	12
2.2. Gleichungshierarchie . . . . .	18
2.2.1. Die Liouville-Gleichung . . . . .	18
2.2.2. Die Boltzmann-Gleichung . . . . .	19
2.2.3. Verfahren zur Behandlung der Boltzmann-Gleichung .	20
2.3. Bestimmung der Kontinuumsgrenze . . . . .	22
2.3.1. Knudsenzahl . . . . .	22
2.3.2. Birds Parameter . . . . .	24
2.3.3. Tiwaris Parameter . . . . .	25
2.3.4. Garcias Parameter . . . . .	26
2.3.5. Andere Ansätze . . . . .	27
2.4. Informationstransport über die Kopplungsgrenze . . . . .	29
<b>3. Numerische Verfahren</b>	<b>31</b>
3.1. Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen . . . . .	31
3.2. Simulation verdünnter Gasströmungen mit Direct Simulation Monte Carlo . . . . .	32
3.3. Verwendete Implementierungen . . . . .	36
3.3.1. Der TAU-Code . . . . .	36
3.3.2. LASVEGAS . . . . .	37
<b>4. Düsenströmung</b>	<b>38</b>
4.1. Expansion von Düsenströmungen ins Vakuum . . . . .	38
4.2. Die verwendete Düse . . . . .	39
4.3. Beschreibung der Referenzkonfiguration . . . . .	40

<b>5. Simulation</b>	<b>42</b>
5.1. Navier-Stokes-Lösung mit TAU . . . . .	43
5.1.1. Simulationsgebiet und räumliche Diskretisierung . . . . .	43
5.1.2. Randbedingungen und Simulationsparameter . . . . .	44
5.1.3. Rechenzeiten und sonstige Kenngrößen . . . . .	46
5.2. Bestimmung der Kontinuumsgrenze . . . . .	47
5.3. Gaskinetische Simulation mit LASVEGAS . . . . .	49
5.3.1. Rechengitter . . . . .	49
5.3.2. Randbedingungen und Simulationsparameter . . . . .	50
5.3.3. Rechenzeiten und sonstige Kenngrößen . . . . .	53
5.3.4. Ergebnisse und Diskussion . . . . .	55
5.4. Kombination beider Rechnungen . . . . .	58
<b>6. Strömungsphysikalische Auswertung</b>	<b>63</b>
6.1. Nichtgleichgewichtseffekte . . . . .	63
6.1.1. Anisotropie der Translationstemperatur . . . . .	64
6.1.2. Asymmetrische Verteilungsfunktionen . . . . .	65
6.2. Teilchenflüsse . . . . .	67
<b>7. Zusammenfassung</b>	<b>70</b>
<b>A. Viskosität</b>	<b>74</b>
<b>B. Temperaturanisotropie</b>	<b>77</b>
<b>C. Formeln und Abschätzungen</b>	<b>80</b>

# Nomenklatur

## Lateinische Symbole

$\text{Ma}$	Machzahl
$\mathcal{F}$	Fluß
$\mathcal{I}$	Stoßintegral
$\mathcal{P}$	Wahrscheinlichkeit
$\tilde{c}$	Wahrscheinlichste thermische Geschwindigkeit
$\text{Re}$	Reynolds-Zahl
$c$	Wurzel aus dem Mittelwert des Geschwindigkeitsquadrates
$\boldsymbol{c}$	Vektor der thermischen Geschwindigkeiten
$\boldsymbol{F}$	Kraftvektor
$\boldsymbol{n}$	Normalen-Einheitsvektor
$\boldsymbol{q}$	Wärmestromvektor
$\boldsymbol{u}$	Vektor der makroskopischen Driftgeschwindigkeit
$\boldsymbol{v}$	Gesamtgeschwindigkeit, $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{u} + \boldsymbol{c}$
$\boldsymbol{x}$	Ortsvektor
$A$	Fläche
$B$	Nichtgleichgewichts-Indikator nach Garcia und Alder [22]
$c$	Betrag der thermischen Geschwindigkeit
$c_i$	Komponente der thermischen Geschwindigkeit in Richtung $i$
$d$	Partikeldurchmesser $\leftrightarrow$ Radius des Wirkungsquerschnitts
$e$	Energie
$f$	Wahrscheinlichkeitsdichte, Verteilungsfunktion
$H$	typische Abmessung einer DSMC-Zelle
$h$	Wärmeleitfähigkeit
$k$	Boltzmann-Konstante, $k = 1,3806503(24) \times 10^{-23} \text{ J/K}$
$L$	Charakteristische Abmessung
$m$	Teilchenmasse

$N$	Anzahl
$n$	Teilchendichte
$P$	Nichtgleichgewichts-Indikator nach Bird [5]
$p$	Druck
$Q$	Platzhalter für eine skalare Variable
$R$	(Spezielle) Gaskonstante, $R = k/m$
$r$	Abstand von der Düsenaustrittsebene
$S$	Molekulare Machzahl
$s_P$	Partikel-Skalierungsfaktor in der DSMC-Methode
$T$	Temperatur
$t$	Zeit
$u$	Betrag der makroskopischen Driftgeschwindigkeit
$V$	Volumen

#### Griechische Symbole

$\delta$	Mittlerer Molekülabstand
$\Gamma$	Chapman-Enskog-Faktor; Gamma-Funktion
$\kappa$	Isentropenexponent
$\lambda$	Mittlere freie Weglänge
$\boldsymbol{\tau}$	Spannungstensor
$\mu$	(Dynamische) Viskosität
$\nu$	Stoßfrequenz
$\Omega$	Raumwinkel
$\omega$	Exponent im VHS-Modell
$\phi$	Anzahl der angeregten molekularen Freiheitsgrade
$\pi$	Kreiszahl, $\pi \approx 3,1415926535898 \dots$
$\rho$	Massendichte
$\sigma$	Stoßquerschnitt
$\tau$	Mittlere Zeit zwischen zwei aufeinanderfolgenden Kollisionen
$\theta$	Winkel zur Düsenachse
$\ \Phi\ $	Nichtgleichgewichts-Indikator nach Tiwari [53]

#### Indice

$+, -$	Ein-, ausströmende Partikel
$0$	Bedingung in der Ruhekammer



$\perp$	Senkrecht
$\infty$	Fernfeld
$\parallel$	Parallel
<i>DSMC</i>	DSMC-Löser
<i>E</i>	Bedingung am Düsenaustritt
<i>e</i>	Gleichgewicht ( <i>equilibrium</i> )
<i>n</i>	Normal, d. i. senkrecht (zu einer Kante)
<i>NSS</i>	Navier-Stokes-Löser
<i>P</i>	Partikel
<i>R</i>	Rotation
<i>r</i>	relativ
<i>ref</i>	Referenz
<i>S</i>	Referenzgröße im Sutherland-Viskositätsmodell
<i>T</i>	Translation
<i>V</i>	Vibration
<i>VHS</i>	Referenzgröße im VHS-Viskositätsmodell
<i>W</i>	Wand
<i>x, y, z</i>	Raumkoordinaten

#### **Abkürzungen**

AMAR	Adaptive Mesh and Algorithm Refinement
CAD	Computer-aided design
IGES	Initial Graphics Exchange Specification
CFD	Computational Fluid Dynamics
DLR	Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt
DSMC	Direct Simulation Monte Carlo
GGW	Gleichgewicht
HS	Hard Sphere
IP	Information Preservation
STG	Simulationsanlage für Treibstrahlen Göttingen
VHS	Variable Hard Sphere

# 1. Einleitung

Die aus der Gasdynamik bekannten Gleichungen zur Beschreibung von Strömungen entstehen aus der Annahme, der diskrete Aufbau des Gases aus einer großen Zahl von Molekülen<sup>1</sup> könne zugunsten einer phänomenologischen Beschreibung durch wenige Zustandsgrößen vernachlässigt werden. Das Fluid wird wie ein Kontinuum behandelt. Tatsächlich gab es noch bis in die frühen Jahre des 20. Jahrhunderts einen heftigen Disput zwischen den Vertretern der Kontinuumsannahme um Ernst Mach und einem kleinen Kreis um Ludwig Boltzmann um die reine Existenz von Atomen.

Ludwig Boltzmann und James Clerk Maxwell waren wesentlich an der Formulierung einer kinetischen Theorie der Gase beteiligt, die die makroskopischen Erscheinungen der Thermodynamik allein aus dem Zustand der Gasmoleküle abzuleiten sucht. Allein schon die in praktischen Anwendungen sehr große Zahl von Partikeln<sup>2</sup> erzwingt dabei stochastische Methoden. Dafür ist die kinetische Gastheorie in ihrer Anwendbarkeit prinzipiell nicht beschränkt auf Gase im Gleichgewicht.

Der Begriff des (dynamischen) Gleichgewichts ist immer im Zusammenhang mit typischen Zeit- und Längenskalen zu erklären. Die Vorstellung eines Gases als Kontinuum ist eng mit der Annahme lokalen Gleichgewichtes verknüpft. Nach der molekularen Anschauung finden in einem kleinen Volumenelement so viele intermolekulare Kollisionen statt, daß sich die makroskopisch beobachtbaren Größen im Mittel nicht ändern. Das bedeutet nicht, daß alle Teilchen den gleichen energetischen Zustand haben: Die Rate, mit der Teilchen des Zustandes 1 durch Stöße zwischen den Partikeln in einen anderen Zustand überführt werden, ist gleich der Rate, mit der aus eben jenen Kollisionen Moleküle des Zustandes 1 erzeugt werden. Ein Volumenelement im Gleichgewicht ist durch Isotropie ausgezeichnet.

---

<sup>1</sup>In diesem Text werden „Molekül“, „Teilchen“ oder „Partikel“ synonym verwendet als abstrakte kleinste Einheit in einem Gas.

<sup>2</sup>Ein Kubikmeter Luft im Normzustand enthält in etwa  $2,5 \times 10^{25}$  Moleküle.

Ein abgeschlossenes System wird immer dem thermodynamischen Gleichgewicht und damit dem Zustand maximaler Entropie entgegenstreben. Nichtgleichgewicht ist demnach ein transienter Zustand zwischen zwei Gleichgewichtslagen. In vielen insbesondere für die Hochvakuumphysik, die Verfahrenstechnik oder die Raumfahrt relevanten Strömungsfällen kann jedoch die erforderliche große Zahl intermolekularer Kollisionen in einem gegenüber typischen Abmessungen kleinen Volumenelement nicht erreicht werden, oder aber die Änderung von einem makroskopischen Strömungszustand auf einen anderen erfolgt über nur wenige Kollisionen, wie es bei gasdynamischen Stößen der Fall ist. In solchen Gebieten starker Verdünnung oder großer Gradienten sind Nichtgleichgewichtseffekte wie z. B. Temperaturanisotropien zu beobachten. Die Annahme reinen Kontinuums ist dann nicht mehr gerechtfertigt, und Methoden der kinetischen Gastheorie werden benötigt.

### 1.1. Problemstellung

In vielen technisch relevanten Konfigurationen treten sowohl Strömungsbereiche im Kontinuum als auch durch starke Verdünnung und Nichtgleichgewicht gekennzeichnete Zonen auf. Beispiele aus dem Gebiet der Raumfahrttechnik sind Über- und Hyperschallumströmungen mit Gebieten starker Kompression oder die Expansion eines Gases ins Vakuum. Die analytische Berechnung eines Strömungsfeldes ist oft höchstens in akademischen Fällen unter starken Vereinfachungen möglich. Mit der Entwicklung der Computertechnik ist auch der Wunsch gewachsen, analytisch nicht leicht zugängliche Probleme numerisch zu lösen. Die numerische Behandlung kann zum einen durch eine für die Arbeitsweise des Computers geeignete Umformulierung der beschreibenden Gleichungen erfolgen, wie es typischerweise bei Verfahren zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen der Fall ist. Eine andere Herangehensweise ist die direkte Simulation, also das Nachbilden physikalischer Prozesse als „Experiment im Computer“. Populäre Beispiele für direkte Simulationen sind die (deterministische) *Molecular Dynamics* (MD)-Methode oder das in dieser Arbeit verwendete und in Abschnitt 3.2 näher beschriebene Monte-Carlo-Direkt-Simulationsverfahren (*Direct Simulation Monte Carlo*, *DSMC*) [4, 8]. Letzteres simuliert zwar die Teilchen-Flugbahnen deterministisch nach den Gesetzen der Newtonschen Mechanik, behandelt jedoch z. B. Kollisionen stochastisch.

Die vollständige numerische Simulation von Strömungen über weite Dichtebereiche mit gaskinetischen Verfahren wie der direkten Monte-Carlo-Simulation kann sehr aufwändig in Bezug auf Rechenzeit und -leistung sein, wohingegen die numerische Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen zwar häufig schneller zu bewältigen ist, aber Abweichungen vom lokalen Gleichgewicht naturgemäß nicht erfassen kann.

Es ist naheliegend, die beiden Verfahren zu verbinden und kontinuumsnahe Bereiche mit einem Navier-Stokes-Löser zu behandeln, während die Strömungsgebiete außerhalb dessen Gültigkeit mit dem DSMC-Verfahren simuliert werden. Dazu hat es in den vergangenen zwei Jahrzehnten etliche Arbeiten gegeben, in denen zum einen numerisch faßbare Kriterien für die Existenz von Nichtgleichgewicht gesucht und untersucht werden, und zum anderen die möglichen Arten der Randbedingungs Vorgabe an der Kopplungsgrenze für den jeweils anderen Löser diskutiert werden.

Wadsworth und Erwin gehören zu den ersten Autoren, die sich mit gekoppelten Kontinuums- und Partikelmethoden befassen [56, 57]. Das dort beschriebene Verfahren ist stark gekoppelt (*strongly coupled*), d. h. der Informationsaustausch zwischen dem Kontinuumslöser und dem DSMC-Verfahren findet nach jedem Zeitschritt statt. Die Einteilung in die beiden Simulationszonen erfolgte nach Vorstudien mit einem reinen DSMC-Verfahren.

Eggers präsentiert in seiner Dissertation ein ebenfalls stark gekoppeltes 2D-Hybridverfahren [19], in welchem die Unterteilung des Strömungsfeldes anhand konkreter Parameter vorgenommen wird. Eine Reihe von Untersuchungen zu Kopplungskonzepten wurden von Hash und Hassan [29, 30, 31] vorgelegt.

In den letzten Jahren sind viele weitere Ansätze zu numerisch effizienter und physikalisch korrekter Verknüpfung von Navier-Stokes-Lösern und DSMC-Verfahren für verschiedenste Anwendungen veröffentlicht worden, eine vollständige Nennung und Kurzbeschreibung aller Arbeiten würde den Rahmen dieses Überblicks sprengen. Daher seien im Folgenden lediglich einige repräsentative Beiträge genannt. Garcia *et al.* schlagen einen adaptiven Algorithmus vor, in dessen feinsten Gitterzellen DSMC-Prozeduren zur Anwendung kommen, während auf größeren Skalen Kontinuumslöser angewendet werden [23]. Eine der vorliegenden Arbeit nahe kommende Veröffentlichung stammt von George und Boyd [24], die die Expansion von  $\text{CO}_2$  aus einer konischen Düse in ideales Vakuum untersuchen und dabei ihre 2D-axialsymmetrischen Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten vergleichen. Vor dem Hintergrund der Analyse von Strömungen durch Mikrofilter schlagen Aktas und

Aluru eine Kombination aus einem Kontinuumsverfahren und DSMC mit überlappenden Gittern vor [1]. Wang und Boyd berichten über Arbeiten an einer stark gekoppelten hybriden Methode [61, 60]. Dabei kommt im Bereich des Nichtgleichgewichts die von Fan und Shen [20] vorgeschlagene Erweiterung des DSMC-Verfahrens mit „Informationserhaltung“ (DSMC-IP) zum Einsatz, um das der DSMC-Methode inhärente Rauschen zu verringern.

## 1.2. Ansatz in dieser Arbeit

Die Verfahrenskopplung soll an einem experimentell verifizierbaren Testfall vorgenommen werden. Am DLR Göttingen wird schon seit vielen Jahren theoretisch und experimentell zu den Strahlglocken von Kleintriebwerken geforscht. Solche Kleintriebwerke werden zur Lageregelung von Satelliten eingesetzt, expandieren also in ein hohes Vakuum. Aussagen zu Gestalt und Verhalten der Strahlglocke sind besonders zur Beurteilung von Kontamination durch die Verbrennungsprodukte des Treibstoffes und zur Bestimmung von Kraftwirkungen auf andere Komponenten in Reichweite der Strömung interessant. Das DLR Göttingen verfügt über eine in dieser Form einzigartige Vakuumkammer (Simulationsanlage für Treibstrahlen Göttingen, STG) [17], deren Kryopumpe eine freie Expansion der Düsenströmung wie im Weltall ermöglicht. Zur Reduktion der Komplexität werden viele Experimente zunächst mit reinem Stickstoff durchgeführt. Eine Referenzkonfiguration [42] (siehe Abschnitt 4.3) soll in dieser Arbeit numerisch untersucht und mit experimentellen Ergebnissen verglichen werden.

Die vorliegende Arbeit baut auf der Dissertation von Rosenhauer auf [44]. Rosenhauers Ansatz zur Kopplung des DLR-eigenen CFD-Lösers CEVCATS mit einer frühen Version des DSMC-Programms „Monaco“ war vor allem durch numerische Probleme des verwendeten Kontinuumsverfahrens bei der Berechnung starker Expansionen eingeschränkt, so daß die Kopplungsgrenze vollständig in der Düse liegen mußte. In dieser Arbeit sollen die moderneren Rechenverfahren TAU für den Kontinuumsbereich und LASVEGAS für den verdünnten Teil des Strömungsfeldes in Strömungsrichtung verbunden werden.

Der zu untersuchende Strömungsfall einer stationären Stickstoff-Expansion aus einer konischen Düse ist in mehrerlei Hinsicht für Studien zur Verknüpfung von Kontinuums- mit Partikelverfahren interessant. Die Expansion des

simulierten Gases aus einem Reservoir ins Vakuum durchläuft nicht nur alle Strömungsbereiche von Kontinuum bis zur quasi kollisionsfreien Molekülströmung, es darf in erster Näherung auch angenommen werden, daß der Informationstransport hauptsächlich in Strömungsrichtung stattfindet und deshalb eine reine Stromab-Kopplung für dieses Problem ausreichend ist. Der wesentlich kompliziertere Fall, in welchem Randbedingungen für den Kontinuumslöser aus DSMC-Ergebnissen gewonnen werden müssen, kann somit zunächst ausgeklammert werden.

Die hier angewendete „Stromab-Kopplung“ wird in der sonst üblichen Terminologie [30] „entkoppelte“ (*decoupled*) Simulation genannt, da die Lösung nicht iterativ ermittelt wird. Vielmehr liefert der Kontinuumslöser direkt die Randbedingungen für das DSMC-Verfahren. Die Schritte sind im einzelnen:

1. Vorläufige Berechnung des gesamten Strömungsfeldes mit TAU,
2. Bestimmung der Gültigkeitsgrenze der Navier-Stokes-Gleichungen,
3. Extraktion der Randbedingungen für den DSMC-Einströmrand entlang der Gültigkeitsgrenze,
4. DSMC-Simulation des übrigen Strömungsfeldes mit LASVEGAS.

## 2. Modellierung von Gasströmungen

Zum besseren Verständnis der Problemstellung und des vorgeschlagenen Lösungsweges soll eine Übersicht zu den theoretischen Grundlagen gegeben werden. Insbesondere zu den ersten beiden Abschnitten in diesem Kapitel existieren einige bekannte Monografien, z. B. [26, 50, 54] (englisch) oder [21, 32] (deutsch), die zur Vertiefung der hier notwendigerweise nur angeschnittenen Themen empfohlen sind.

Der erste Abschnitt faßt im Partikelbild häufig gebrauchte Größen zusammen und gibt basierend darauf eine Übersicht zu den behandelten Strömungsbereichen. Im zweiten Abschnitt wird eine Hierarchie von Strömungsgleichungen skizziert, ausgehend von einer allgemeinstmöglichen Formulierung. Verbunden damit ist die Absicht, den Gültigkeitsbereich der jeweiligen Gleichungen aus den bei ihrer Herleitung gemachten Einschränkungen deutlich zu machen.

Im darauf folgenden dritten Abschnitt werden Kriterien vorgestellt, die bisher in der Literatur zur Bestimmung der Gültigkeitsgrenzen der Navier-Stokes-Gleichungen vorgeschlagen und angewendet wurden.

Neben der Bestimmung einer Gültigkeits- und damit Kopplungsgrenze ist die Art und Weise des Informationstransportes über diese Grenze der zweite wesentliche Punkt bei der kombinierten Simulation mit zwei verschiedenen Verfahren. Der letzte Abschnitt dieses Kapitels ist den dazu in der Literatur diskutierten Vorgehensweisen gewidmet.

### 2.1. Molekulare Sichtweise

Die physikalische Beschreibung eines Gases und seiner Bestandteile kann mit beinahe beliebiger Komplexität erfolgen, es empfiehlt sich allerdings auch hier, eine Modellierung zu finden, die gerade noch fein genug ist, um die im Experiment beobachteten Phänomene zu reproduzieren.

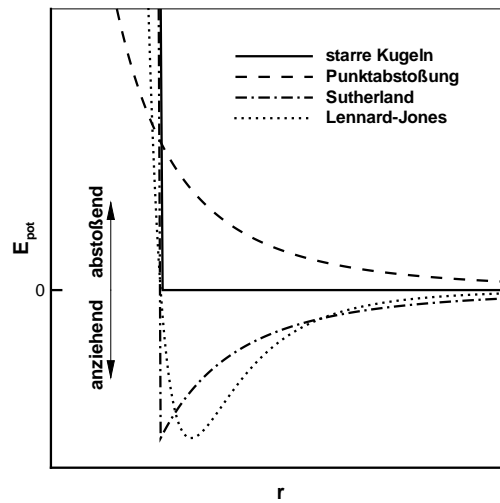


Abbildung 2.1: Intermolekulare Wechselwirkungspotentiale

Eine wesentliche Annahme in der kinetischen Gastheorie ist, daß die physikalischen Eigenschaften eines Gases ihre Ursache in der Bewegung von Partikeln hat, deren konkretem internen Aufbau lediglich durch eine phänomenologische Beschreibung der Kraftwirkung auf andere Teilchen Rechnung getragen wird. Dabei wird weiterhin angenommen, daß die Wechselwirkungspotentiale in alle Richtungen gleich sind. Ein Molekül wird also durch eine mehr oder weniger scharf begrenzte Kugel approximiert. Realistische Potentiale üben auf größere Entfernungen eine anziehende Wirkung auf andere Moleküle aus, sind aber ab einem gewissen Abstand zum gedachten Zentrum des Teilchens stark repulsiv. Dieses Verhalten wird gut durch das bekannte Lennard-Jones-Potential wiedergegeben oder durch das Sutherland-Potential approximiert. Einfachere Modelle bilden nur die abstoßende Wirkung der Partikel nach, die bekanntesten sind das der Punktabstoßung (in der englischen Literatur als *inverse-power-law* bezeichnet) und das Modell der harten Kugeln. Letzteres bildet die Gasteilchen als starre Kugeln mit festem Durchmesser nach und wird anschaulicherweise auch oft Billardkugel-Modell genannt. Abbildung 2.1 stellt die genannten Potentiale grafisch dar.

Oft wird in Verbindung mit Vakuumströmungen von „verdünnten“ (*rarefied*) Gasen gesprochen. Bei Bird [6] ist eine recht anschauliche Definition nachzulesen. Die Anzahl der Partikel in einem Volumenelement wird Teilchen-



oder Anzahldichte genannt und mit  $n$  bezeichnet. Der mittlere Abstand  $\delta$  der Moleküle kann abgeschätzt werden mit

$$\delta = \frac{1}{\sqrt[3]{n}}. \quad (2.1)$$

Ein Gas wird als „verdünnt“ bezeichnet, wenn der typische Durchmesser  $d$  der Partikel gegenüber dem mittleren Molekülabstand vernachlässigbar ist:

$$d \ll \delta. \quad (2.2)$$

Für Luft bei Standardbedingungen gilt übrigens  $d/\delta \approx 0,12$ .

Aus (2.2) kann geschlossen werden, daß ein Molekül sich den größten Teil der Zeit frei bewegt, das heißt ohne nennenswerte Beeinflussung durch die Kraftfelder anderer Partikel. Es ergibt sich noch eine weitere, für die theoretische Betrachtung ganz wesentliche Vereinfachung: Wenn es zu intermolekularen Kollisionen kommt, dann sind daran mit hoher Wahrscheinlichkeit nur genau zwei Teilchen beteiligt<sup>1</sup>, und es ist unwahrscheinlich, daß die selben Teilchen bereits unmittelbar zuvor kollidiert sind. Diese spitzfindig anmutende Überlegung begründet die Annahme von sogenanntem „molekularen Chaos“, was wiederum eine statistische Beschreibbarkeit erst sinnvoll möglich macht.

Ein zentrales Element eben jener statistischen Formulierung ist die Verteilungsfunktion. Sie enthält, anschaulich gesprochen, Informationen darüber, wie häufig welche Zustände auftreten. In dieser Arbeit ist die Verteilungsfunktion als eine Wahrscheinlichkeitsdichte definiert. Dies soll am Beispiel der Geschwindigkeits-Verteilungsfunktion illustriert werden: Die Wahrscheinlichkeit, in einem Volumenelement ein Teilchen mit einer Geschwindigkeit zwischen  $c$  und  $c + \Delta c$  anzutreffen, ist  $f(c) \cdot \Delta c$ . Da ein Teilchen nicht gleichzeitig zwei verschiedene Geschwindigkeiten haben kann, lassen sich die Wahrscheinlichkeiten addieren bzw. im Grenzfall  $\Delta c \rightarrow dc$  integrieren. Man erhält für die Wahrscheinlichkeit  $\mathcal{P}$ , daß sich ein Teilchen mit einer Geschwindigkeit zwischen  $c_-$  und  $c_+$  bewegt:

$$\int_{c_-}^{c_+} f(c) dc = \mathcal{P}, \quad \text{und besonders:} \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(c) dc = 1. \quad (2.3)$$

---

<sup>1</sup>Eine Ausnahme sind Rekombinationsreaktionen, die theoretisch einen dritten Stoßpartner erfordern.

Wenn im folgenden Text ohne besondere Erläuterung von „Verteilungsfunktion“ die Rede ist, so ist damit immer die Geschwindigkeits-Verteilungsfunktion gemeint.

Die Verteilungsfunktion ist das Bindeglied zwischen mikroskopischer und makroskopischer Beschreibung. Ist sie bekannt, können mit ihrer Hilfe Mittelwerte  $\langle Q \rangle$  von Größen  $Q$  berechnet werden, indem diese in die Integration einbezogen werden:

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} Q(\zeta) \cdot f(\zeta) d\zeta. \quad (2.4)$$

Die so ermittelten makroskopischen Größen  $\langle Q \rangle$  werden auch *Momente* der Verteilungsfunktion genannt.

Problematisch kann jedoch die Bestimmung der Verteilungsfunktion sein, wie im Unterabschnitt 2.2.2 weiter ausgeführt wird. Für den Zustand thermischen Gleichgewichts ist die Verteilungsfunktion jedoch bekannt und nach ihrem Entdecker „Maxwell-Verteilung“ benannt<sup>2</sup>. Die lokale Maxwell-Verteilung  $f_e$  der Geschwindigkeitskomponente  $c_i$  ist

$$f_e(c_i) = \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left( -\frac{mc_i^2}{2kT} \right). \quad (2.5)$$

Formal ist (2.5) eine Normalverteilung mit Standardabweichung  $\sqrt{kT/m}$ . Die Maxwell-Verteilung des Geschwindigkeitsvektor  $\mathbf{c}$  ist das Produkt der Komponenten-Verteilungen:

$$f_e(\mathbf{c}) = \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left( -\frac{m\mathbf{c} \cdot \mathbf{c}}{2kT} \right). \quad (2.6)$$

Interessant ist oft noch die Verteilung des Geschwindigkeitsbetrages  $c = |\mathbf{c}| = \sqrt{c_x^2 + c_y^2 + c_z^2}$ , deren Herleitung zum Beispiel bei Vincenti und Kruger beschrieben ist [54]:

$$f_e(c) = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} c^2 \exp \left( -\frac{mc^2}{2kT} \right). \quad (2.7)$$

Aus der Verteilung des Geschwindigkeitsbetrages (2.7) können drei besondere Geschwindigkeiten ermittelt werden:

---

<sup>2</sup>Gelegentlich auch als Maxwell-Boltzmann-Verteilung bezeichnet. Boltzmann konnte die Maxwell-Verteilung unter weniger einschränkenden Annahmen herleiten.

Die *wahrscheinlichste molekulare Geschwindigkeit*  $\tilde{c}$  ist ganz offensichtlich derjenige Geschwindigkeitsbetrag, bei dem (2.7) ein Maximum hat. Man erhält

$$\tilde{c} = \sqrt{\frac{2kT}{m}} = \sqrt{2RT}. \quad (2.8)$$

Die *mittlere molekulare Geschwindigkeit*  $\langle c \rangle$  wird nach Gleichung (2.4) mit  $Q = c$  gebildet. Die untere Integrationsgrenze ist hier wegen  $c = |\mathbf{c}| \geq 0$  gleich Null<sup>3</sup>:

$$\langle c \rangle = \sqrt{\frac{8RT}{\pi}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \tilde{c} \quad (2.9)$$

Der *Mittelwert des Geschwindigkeitsquadrates* (root-mean-square)  $c^2$  ist das Moment zweiter Ordnung von (2.7):

$$c^2 = \langle c^2 \rangle = \int_0^\infty c^2 f_e(c) dc, \quad c = \sqrt{\frac{3kT}{m}} = \sqrt{3RT} = \sqrt{\frac{3}{2}} \tilde{c}. \quad (2.10)$$

Der Mittelwert des Geschwindigkeitsquadrates ist ein Maß für die mittlere kinetische Energie:

$$\langle e_T \rangle = \frac{1}{2} m c^2 \quad \stackrel{\text{GGW}}{\Longleftrightarrow} \quad \langle e_T \rangle = \frac{3}{2} kT. \quad (2.11)$$

Abbildung 2.2 veranschaulicht die Gestalt der Gleichgewichts-Verteilungsfunktionen und ihre Abhängigkeit von der Temperatur.

Bisher wurde gelegentlich von „typischen“ Zeit- und Längenskalen gesprochen, deren Verhältnis zu Prozessgeschwindigkeiten und Geometrien z.B. eine Aussage über die Existenz von Gleichgewicht erlaubt. Da nach dem Postulat der kinetischen Gastheorie die molekularen Kollisionen für den Austausch von Masse, Impuls und Energie verantwortlich sind, ist es naheliegend, Referenzwerte für Länge und Zeit im Bezug zu den Kollisionsprozessen zu definieren.

---

<sup>3</sup>Integrale des Typs  $\int_a^b x^n \exp(-(cx)^2) dx$  sind nicht trivial. Für  $a = 0, b = \infty, c > 0$  existieren jedoch einfach darstellbare Lösungen, die in mathematischen Nachschlagewerken tabelliert sind.

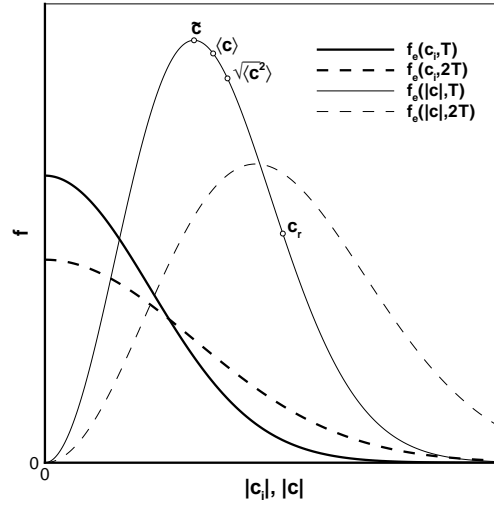


Abbildung 2.2: Verteilungsfunktionen einer Geschwindigkeitskomponente und des Geschwindigkeitsbetrages

Der von Rudolf Clausius eingeführte Begriff der *mittleren freien Weglänge*  $\lambda$  ist definiert als der Mittelwert derjenigen Wegstrecke, die ein Molekül nach einer Kollisionen zurücklegt, bevor es wieder mit einem anderen Teilchen stößt. Die Zeit, die zwischen zwei Kollisionen im Mittel vergeht, wird *mittlere Kollisionszeit*  $\tau$  genannt, die Anzahl der pro Zeiteinheit stattfindenden Stöße heißt *Kollisionsfrequenz*  $\nu$ . Diese drei Parameter stehen in engem Zusammenhang zueinander und zur mittleren Geschwindigkeit:

$$\nu = \frac{1}{\tau} = \frac{\langle c \rangle}{\lambda}. \quad (2.12)$$

Die Kollisionsfrequenz ist definiert als  $\nu = n \langle \sigma c_r \rangle$ , wobei mit  $\sigma = \pi d^2$  der effektive Stoßquerschnitt eines Teilchens und mit  $c_r$  der Betrag der Relativgeschwindigkeit bezeichnet wird. In realistischeren Gasmodellen ist  $\sigma$  eine Funktion der Relativenergie und damit der Relativgeschwindigkeit. Zur einfachen Abschätzung von Größenordnungen genügt es oft, den Fall eines homogenen Starrkugel-Gases im Gleichgewicht zu betrachten. Mit etwas mathematischem Aufwand kann man zeigen, daß für ein Gas im Gleichgewicht  $\langle c_r \rangle =$

$\sqrt{2} \langle c \rangle$  gilt, was für die mittlere freie Weglänge liefert:

$$\lambda_e = \frac{1}{\sqrt{2}n\pi d^2}. \quad (2.13)$$

Die Definitionen der gebräuchlichen dimensionslosen Kennzahlen sind allgemein bekannt und werden hier nur der Vollständigkeit halber wiedergegeben. Die *Machzahl* setzt den Betrag der (lokalen) makroskopischen Geschwindigkeit  $u$  zur (lokalen) Schallgeschwindigkeit  $a = \sqrt{\kappa RT}$  in Beziehung:

$$\text{Ma} = \frac{u}{\sqrt{\kappa RT}}, \quad \kappa = \frac{2 + \phi}{\phi}, \quad (2.14)$$

wobei  $\kappa$  der sog. Isentropenexponent ist, der sich aus der Zahl der angeregten molekularen Freiheitsgrade  $\phi$  bestimmen läßt<sup>4</sup>.

Analog zur Definition der Machzahl nach (2.14) wird eine *molekulare Machzahl* eingeführt. Da die Schallgeschwindigkeit als Ausbreitungsgeschwindigkeit kleiner Störungen eher im makroskopischen Bild verhaftet ist, bezieht die molekulare Machzahl die makroskopische Driftgeschwindigkeit auf die wahrscheinlichste thermische Geschwindigkeit  $\tilde{c}$ :

$$S = \frac{u}{\tilde{c}}. \quad (2.15)$$

Im Gleichgewicht ist  $S/\text{Ma} = \sqrt{\kappa/2}$ .

## 2.2. Gleichungshierarchie

### 2.2.1. Die Liouville-Gleichung

Für die klassische mathematische Beschreibung eines Systems von  $N$  Masspunkten (z. B. ein Gas aus idealisiert punktförmigen Molekülen) wird ein Phasenraum definiert, dessen  $6N$  Dimensionen aus den  $3N$  Dimensionen der einzelnen Ortsvektoren  $\mathbf{x}_i$  und weiteren  $3N$  Dimensionen der zugehörigen Geschwindigkeiten  $\dot{\mathbf{x}}_i$  zusammengesetzt sind. Der Vektor

$$\mathbf{z} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, \dot{\mathbf{x}}_1, \dots, \dot{\mathbf{x}}_N)^T$$

---

<sup>4</sup>Ein zweiatomiges Molekül zum Beispiel kann sich in drei Raumrichtungen bewegen und um zwei Achsen rotieren. Außerdem können die beiden Atome noch gegeneinander vibrieren. Bei Raumtemperatur ist die Vibration bei z. B. Stickstoff nicht angeregt, damit ist  $\phi = 5$  und  $\kappa = 1,4$ .

kennzeichnet einen Punkt (Zustand) im Phasenraum.

Die zeitliche Entwicklung der Phasenraumdichte eines physikalischen Systems wird durch die Liouville-Gleichung beschrieben. Im konkreten Beispiel entspricht die Phasenraumdichte der Wahrscheinlichkeitsdichte  $F^{(N)}(\mathbf{z}, t)$ , einen bestimmten Zustand des Phasenraumes unter einem Ensemble möglicher Zustände zu finden. Damit ist die Wahrscheinlichkeit, eine bestimmte Konfiguration von  $N$  unterscheidbaren Teilchen in dem Volumenelement  $d\mathbf{z}$  in der Umgebung des Punktes  $\mathbf{z}$  zu finden, gleich

$$F^{(N)}(\mathbf{z}, t)d\mathbf{z}. \quad (2.16)$$

Die Liouville-Gleichung ist eine Kontinuitätsgleichung der  $N$ -Teilchen-Verteilungsfunktion  $F^{(N)}$  im  $6N$ -dimensionalen Phasenraum (vergleiche mit der differentiellen Form der hydrodynamischen Kontinuitätsgleichung) [13]:

$$\frac{\partial(F^{(N)})}{\partial t} + \nabla \cdot (F^{(N)}\dot{\mathbf{z}}) = 0. \quad (2.17)$$

### 2.2.2. Die Boltzmann-Gleichung

In der oben dargestellten Form hat Gleichung (2.17) wenig praktischen Nutzen, da sowohl direkte Lösungen als auch die meisten Approximationen aufgrund der hohen Dimensionalität enormen Aufwand erfordern würden. Nimmt man an, daß die Teilchen voneinander nicht unterscheidbar sind, läßt sich durch sukzessive Integration der Liouville-Gleichung<sup>5</sup> die Ein-Teilchen-Verteilungsfunktion  $F^{(1)}$  darstellen, die die Wahrscheinlichkeit angibt, ein Molekül zum Zeitpunkt  $t$  im Phasenraumelement  $d\mathbf{x}d\mathbf{v}$  anzutreffen. In Folge der Integration hängt  $F^{(1)}$  allerdings noch von  $F^{(2)}$  ab. Bei hinreichender Verdünnung ist es zulässig, „molekulares Chaos“ anzunehmen, dann kann  $F^{(2)} = F_1^{(1)}F_2^{(1)}$  gesetzt werden. Für die Beschreibung verdünnter Gase genügt also die Ein-Teilchen-Verteilungsfunktion.

Die Boltzmann-Gleichung beschreibt die zeitliche Veränderung der Geschwindigkeits-Verteilungsfunktion  $n\mathbf{f}(\mathbf{v}) = NF^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$  eines Gases aus starren Kugeln in einem Raumelement unter Vernachlässigung von Wandkollisionen. Eine mathematische Herleitung aus der Liouville-Gleichung ist z. B. bei Cercignani [13] zu finden. Anschaulicher ist die Konstruktion aus Teilchenbilanzen über ein Phasenraumelement (z. B. Patterson [41]), wobei eine Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum durch die Geschwindigkeit

---

<sup>5</sup>BBGKY-Hierarchie

der Teilchen bedingt wird, während eine Veränderung im Geschwindigkeitsraum ihre Ursache in der beschleunigenden Wirkung einer externen Kraft hat. Darüberhinaus wird die Lage eines Partikels im Phasenraum durch intermolekulare Kraftwirkungen (Stöße) beeinflusst:

$$\frac{\partial(nf)}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial(nf)}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \frac{\partial(nf)}{\partial \mathbf{v}} = \mathcal{I}, \quad (2.18)$$

mit

$$\mathcal{I} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{4\pi} n^2 (f' f'_1 - f f_1) c_r \sigma d\Omega d\mathbf{v}_1. \quad (2.19)$$

Die linke Seite der Boltzmann-Gleichung (2.18) repräsentiert die Änderung der Ein-Teilchen-Verteilungsfunktion infolge der Bewegung im Phasenraum, während mit der rechten Seite, dem sogenannten Stoßintegral, die Wirkung von Zweierkollisionen erfaßt wird.

Dem mathematischen Charakter nach ist die Boltzmann-Gleichung eine Integro-Differentialgleichung und deshalb einer direkten und allgemeinen analytischen oder numerischen Behandlung schwer zugänglich. Analytische Lösungen existieren nur für die Grenzfälle des Gleichgewichts (dort ist die Form der Verteilungsfunktion bekannt) oder im Falle einer nahezu kollisionsfreien, d.i. *freimolekularen* Strömung, für den in guter Näherung  $\mathcal{I} = 0$  gesetzt werden kann.

### 2.2.3. Verfahren zur Behandlung der Boltzmann-Gleichung

Für das Übergangsgebiet zwischen hinreichend dichter und freimolekularer Strömung wurden einige weitere Vereinfachungen vorgeschlagen, die hier nur kurz skizziert werden sollen. Eine ausführlichere Behandlung des Themas ist in der einschlägigen Literatur (z. B. [13, 26, 54]) zu finden.

Eine Möglichkeit zur Reduktion der Komplexität von (2.18) besteht darin, den Phasenraum in diskrete Richtungen zu unterteilen, eine recht moderne Ausprägung dieses Konzeptes sind die *Lattice-Boltzmann-Methoden*, die z. B. bei [32] ausführlich beschrieben sind.

Die sogenannten *Momentenmethoden* haben gemeinsam, daß die Boltzmann-Gleichung (2.18) auf beiden Seiten mit  $Q(\mathbf{c})d\mathbf{c}$  multipliziert wird. Die Verteilungsfunktion  $f$  ist zunächst nicht vollständig bekannt, sondern durch  $N$

Parameter abhängig von Ort  $\mathbf{x}$  und Zeit  $t$  bestimmt. Durch Integration beider Seiten der Boltzmann-Gleichung werden dann  $N$  Momentengleichungen gebildet, die schließlich genauso viele partielle Differentialgleichungen für die Parameterfunktionen liefern. Der bekannteste Ansatz geht auf Grad [27] zurück, der  $f$  als Produkt aus der Maxwell-Verteilung  $f_e$  und einem Polynom formuliert. Eine Approximation mit 13 Momentengleichungen führt auf die Navier-Stokes-Gleichungen [26].

Eine Hauptursache für Schwierigkeiten bei der Lösung der Boltzmann-Gleichung ist das Stoßintegral. Die bekannteste Approximation ist nach Bhatnagar, Gross und Krook (*BGK*) benannt und ersetzt (2.19) durch

$$\mathcal{I}_{BGK} = n\nu (f_e - f). \quad (2.20)$$

Dieser Ansatz wird auch Relaxationsmodell genannt.

Wiederum einen anderen Weg gehen die Störungsansätze, der bekannteste ist die *Chapman-Enskog-Entwicklung*. Hier wird von vorneherein angenommen, daß die Verteilungsfunktion  $f$  bei kleinen Abweichungen vom thermischen Gleichgewicht in eine Potenzreihe um  $f_e$  entwickelt werden kann:

$$f = \sum_{i=0}^{i_{max}} \varepsilon^i f_i, \quad f_0 \equiv f_e, \quad \varepsilon \ll 1, \quad (2.21)$$

oder

$$f = f_e(1 + \Phi_1 + \Phi_2 + \dots). \quad (2.22)$$

Die Entwicklung wird an gewünschter Stelle abgebrochen und in die Boltzmann-Gleichung eingesetzt. Abhängig vom Grad der Approximation erhält man so die bekannte Hierarchie der Kontinuumsleichungen:

$i_{max} = 0$ :  $f = f_e$ , es gibt per Definition keine Abweichung vom Gleichgewicht  
→ Euler-Gleichungen,

$i_{max} = 1$ :  $f = f_e(1 + \Phi_1)$  → Navier-Stokes-Gleichungen,

$i_{max} = 2$ :  $f = f_e(1 + \Phi_1 + \Phi_2)$  → Burnett-Gleichungen,

$i_{max} > 2$ : Super-Burnett-Gleichungen,

wobei die Burnett- und Super-Burnett-Gleichungen kaum praktisch genutzt werden. Wesentliches Merkmal der Champan-Enskog-Entwicklung ist, daß zusätzlich zu den Navier-Stokes-Gleichungen noch Ausdrücke für die Transportkoeffizienten Viskosität  $\mu$  und Wärmeleitfähigkeit  $h$  hergeleitet werden.



Die Herleitung der Navier-Stokes-Gleichungen aus der Boltzmann-Gleichung ist mathematisch anspruchsvoll und kann deshalb hier nicht skizziert werden. Eine ausführliche Behandlung findet sich bei [54].

### 2.3. Bestimmung der Kontinuumsgrenze

Die wohl wichtigste Fragestellung bei der Behandlung eines Problems ist die nach der Anwendbarkeit der Lösungsverfahren. Während eine Partikelsimulation im Prinzip auf alle Strömungsfälle angewandt werden kann, für die auch Lösungen der Navier-Stokes-Gleichungen sinnvoll sind (umgekehrt ist dies nicht der Fall), fordert das Monte-Carlo-Verfahren gerade im Gültigkeitsbereich der Navier-Stokes-Gleichungen wesentlich mehr Arbeitsspeicher und Rechenleistung als ein Kontinuumslöser, weshalb in Gebieten mit geringer Abweichung vom Gleichgewichtszustand und nur schwacher Verdünnung Kontinuumsverfahren bevorzugt eingesetzt werden.

Ein naheliegendes und übliches Vorgehen bei der gekoppelten Simulation starker Expansions- oder Kompressionsströmungen ist die initiale Behandlung des gesamten Strömungsfeldes mit einem Kontinuumslöser. Gesucht wird nun ein Indikator, zu berechnen aus den Variablen der makroskopischen Betrachtungsweise, mithilfe dessen auf die Grenzen der Kontinuumsannahme geschlossen werden kann. Die Vielzahl der präsentierten Indikatoren spiegelt zum einen das große Interesse an einem möglichst universellen praktischen Kriterium wider. Andererseits veranschaulicht sie auch den Einwand mancher Autoren [46], die Bestimmung der Gültigkeitsgrenze eines Verfahrens mit seinen eigenen Methoden sei ein fragwürdiges Vorgehen. Aus Gründen der Vollständigkeit sind in der folgenden Übersicht auch Kennwerte aufgeführt, die aus molekularen Größen berechnet werden müssen und als Signale für beginnendes Kontinuum dienen. Solche Indikatoren sind dann geeignet oder notwendig, wenn sich stromab eines Verdünnungs- oder Nichtgleichgewichtsgebietes wieder eine Kontinuumszone anschließt, oder aber wenn ein aus den Kontinuumsgleichungen gewonnener Indikator verifiziert werden soll.

#### 2.3.1. Knudsenzahl

Das Verhältnis von mittlerer freier Weglänge  $\lambda$  zu einer für die Strömung charakteristischen Abmessung  $L$  ist nach dem dänischen Physiker Martin

Knudsen benannt:

$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{L}. \quad (2.23)$$

Wie bei vielen anderen dimensionslosen Kenngrößen der Strömungsmechanik unterliegt die Wahl der relevanten Abmessung einer gewissen Willkür. Ohne nähere Informationen zu Art und Gestalt des betrachteten Gebietes ist die Angabe einer Knudsenzahl nach (2.23) insbesondere für strömende Gase von wenig Bedeutung, weshalb sich schnell brauchbarere Formulierungen etablierten. Für die Untersuchung viskoser Effekte in Wandnähe kann z.B. die Grenzschichtdicke  $\delta$  verwendet werden. Damit läßt sich die Knudsenzahl über Mach- und Reynoldszahl ausdrücken:

$$\text{Kn} \propto \frac{\text{Ma}}{\sqrt{\text{Re}}}. \quad (2.24)$$

In älterer Literatur (z.B. [45]) wird die Abgrenzung der Dichtebereiche (siehe dazu auch Abschnitt 2.1) mit der Formulierung (2.24) vorgenommen. Einen Überblick über verwandte Parameter und deren Eignung wurde kürzlich von Macrossan präsentiert [38].

Ein sehr populärer Ansatz zielt darauf ab, die Knudsenzahl nicht global, sondern abhängig von lokalen (makroskopischen) Größen des Strömungsfeldes zu formulieren. Dabei wird die charakteristische Länge durch einen Gradienten einer Strömungsvariablen ausgedrückt:

$$\text{Kn}_Q = \lambda \frac{|\nabla Q|}{Q}, \quad Q \in \{\rho, u, T\}. \quad (2.25)$$

Diese gradientenbasierte Formulierung findet sich bereits in einem Übersichtsartikel von Smolderen [51] und auch bei Bird [8]. Wang und Boyd [59] schlagen zunächst vor, einen Nichtgleichgewichtsindikator

$$\text{Kn}_{\max} = \max(\text{Kn}_Q) \quad \forall \quad Q$$

zu bilden, weisen aber im Anhang der selben Veröffentlichung darauf hin, daß  $\text{Kn}_T \approx \text{Kn}_\rho$  ist. In der Literatur wird häufig ausschließlich von  $\text{Kn}_\rho$  Gebrauch gemacht. Boyds Vorschlag für einen festen Parameter ist

$$\text{Kn}_\rho = 0,05. \quad (2.26)$$

Es soll an dieser Stelle jedoch bemerkt werden, daß Wang und Boyd [59] selbst feststellen mußten, daß ein Parameter  $\text{Kn}_Q$  nicht in der Lage ist, den Beginn

starker gasdynamischer Stöße korrekt zu signalisieren. In einem weiteren Beitrag [11] weist Boyd darauf hin, daß diese Unfähigkeit der rechtzeitigen Indikation von Nichtgleichgewicht ein prinzipielles Problem ist: Die Stoßdicke wird von Kontinuumsverfahren zu dünn wiedergegeben. Diese Feststellung nährt die oben schon geäußerte Skepsis gegenüber dem Ansatz, einsetzendes Nichtgleichgewicht allein aus einem Parameter zu gewinnen, der von vorneherein unter der Annahme von nur geringen Abweichungen vom Gleichgewicht ermittelt wurde.

### 2.3.2. Birds Parameter

Ein Indikator für thermisches Nichtgleichgewicht in isentropen Überschall-Expansionsströmungen wurde 1970 von Bird vorgeschlagen [5] und in [8] ausführlicher diskutiert. Dabei wird die logarithmische Zeitableitung der Dichte in einem Fluidelement aus Sicht eines mitbewegten Beobachters zur Kollisionsfrequenz in diesem Element ins Verhältnis gesetzt:

$$P = \frac{1}{\nu} \left| \frac{D(\ln \rho)}{Dt} \right|. \quad (2.27)$$

Bird argumentiert, daß das beobachtete Einfrieren der Temperatur in Strömungsrichtung darauf zurückzuführen sein muß, daß nicht genügend Stöße stattfinden, um ein gleichmäßiges Absinken der Temperatur zu gewährleisten, wie es das Kontinuumsmodell für Expansionen vorhersagt.

Mit der materiellen Ableitung

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \quad (2.28)$$

läßt sich Gleichung (2.27) für stationäre, eindimensionale Strömungen vereinfachen zu:

$$P_1 = \frac{1}{\nu} \left| \frac{u}{\rho} \frac{d\rho}{dx} \right|, \quad (2.29)$$

Der Gradient wird dabei in Richtung der Strömung ermittelt. Ersetzt man die Kollisionsfrequenz  $\nu$  durch (2.12) unter Beachtung von (2.9) und (2.15), kann leicht der Zusammenhang zwischen Birds Parameter und der Knudsenzahl basierend auf dem Dichtegradienten gezeigt werden:

$$P_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot S \cdot \frac{\lambda}{\rho} \left| \frac{d\rho}{dx} \right|, \quad (2.30)$$

$$= \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot S \cdot \text{Kn}_\rho. \quad (2.31)$$

Beginnendes translatorisches Nichtgleichgewicht wird für  $0,02 \leq P_1 \leq 0,04$  angegeben [8, 11], deutlich vorsichtiger als Kriterium (2.26). Birds Parameter ist für den Spezialfall einer isentropen Überschallexpansion entwickelt worden und kann schon aufgrund der damit verbundenen Einschränkungen nicht als universeller Parameter dienen.

### 2.3.3. Tiwaris Parameter

Neben den aus physikalischen Überlegungen entstandenen Kennzahlen, die sich auf den Vergleich von Größenverhältnissen im Strömungsfeld zurückführen lassen, existiert eine Reihe von Parametern, die aus mathematischen Modellen hervorgegangen sind. Ausgangspunkt ist dabei die im Chapman-Enskog-Ansatz oder den Momentenmethoden (siehe auch Abschnitt 2.2.3) zugelassene „kleine“ Abweichung der Verteilungsfunktion von der Maxwell-Verteilung  $f_e$ :

$$f = f_e(1 + \Phi), \quad \|\Phi\| \ll 1, \quad (2.32)$$

wobei  $\|\Phi\|$  eine geeignete Normierung ist [13]. Tiwari [53] entwickelt unter Anwendung der 13-Momente-Methode nach Grad [27] einen Ausdruck für die Abweichung von der Maxwell-Verteilung und gibt diesen an als

$$\|\Phi\| = \frac{1}{\rho RT} \left( \frac{2}{5} \frac{|\mathbf{q}|^2}{RT} + \frac{1}{2} |\boldsymbol{\tau}|^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.33)$$

Darin sind  $|\mathbf{q}|$  und  $|\boldsymbol{\tau}|$  jeweils euklidische Normen des Wärmestromvektors bzw. des Spannungstensors. Führt man hier und im Folgenden dimensionslose Schreibweisen für beide Größen ein:

$$\hat{q}_i = -\frac{h}{p} \sqrt{\frac{2}{RT}} \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (2.34)$$

$$\hat{\tau}_{ij} = \frac{\mu}{p} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right), \quad (2.35)$$

erhält man schließlich:

$$\|\Phi\| = \sqrt{\frac{1}{5} |\hat{\mathbf{q}}|^2 + \frac{1}{2} |\hat{\boldsymbol{\tau}}|^2}. \quad (2.36)$$

Tiwari präsentiert in Zusammenhang mit seinem Vorschlag für  $\|\Phi\|$  Ergebnisse einer gekoppelten Simulation der Boltzmann- und der Euler-Gleichungen,

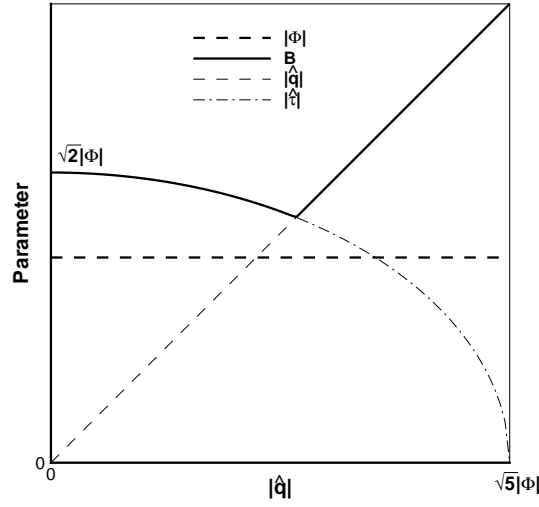


Abbildung 2.3: Vergleich der Parameter  $\|\Phi\|$  und  $B$

in der ohne nähere Begründung das Kriterium  $\|\Phi\| = 0,4$  für die Bestimmung der Verfahrensgrenzen verwendet wurde. Angesichts der Forderung in (2.32) erscheint dieser Wert sehr hoch gewählt.

#### 2.3.4. Garcias Parameter

Garcia und Alder [22] bemerken in ihrem Artikel zur Generierung einer Chapman-Enskog-Verteilung nach (2.32), daß sich kleine Abweichungen vom Gleichgewicht in den Strömungsgleichungen bekanntlich durch das Auftreten von Termen manifestieren, die als Wärmestromvektor und Spannungstensor interpretiert werden können. Sie schlagen deshalb vor, bei hinreichend großen Werten einer der beiden normierten und nach (2.34) bzw. (2.35) dimensionslosen Größen auf beginnendes Nichtgleichgewicht zu schließen. Ein entsprechender Indikator wird also einfach gebildet als

$$B = \max(|\hat{q}|, |\hat{\tau}|). \quad (2.37)$$

Ein Vergleich von  $\|\Phi\|$  und  $B$  zeigt, daß  $B$  immer eine konservativere Schätzung liefert (siehe Abbildung 2.3).

Um eine Vorstellung von sinnvollen Obergrenzen für  $B$  zu erhalten, empfiehlt sich z. B. eine Umformung von (2.34) unter Zuhilfenahme der in Anhang C zusammengestellten Näherungsformeln. Man erhält im eindimensionalen Fall

$$\hat{q} \propto \text{Kn}_T, \quad \hat{q} \approx 4,154 \cdot \frac{\lambda}{T} \frac{\partial T}{\partial x}.$$

Demnach würde zum Beispiel  $\hat{q} = 0,1$  bedeuten, daß sich die Temperatur auf einer Länge von nur  $10\lambda$  um knapp 25% ändert. Garcia und Alder geben daher in einer ersten Veröffentlichung ein Kriterium  $B < 0,1$  für die Annahme geringer Abweichung vom Gleichgewicht an, verwenden selbst aber in einem späteren Artikel  $B = 0,2$  als Umschaltparameter von Navier-Stokes- und DSMC-Verfahren in ihrem AMAR-Verfahren [23].

### 2.3.5. Andere Ansätze

Die in den vorangegangenen Abschnitten präsentierten Indikatoren sind in der Literatur am häufigsten anzutreffen, ermöglichen sie doch die Berechnung einer Gültigkeitsgrenze der Euler- bzw. Navier-Stokes-Löser aus den makroskopischen Größen und deren Gradienten, die diese Verfahren liefern – unter den oben schon angesprochenen prinzipiellen Vorbehalten (siehe S. 24). Neben diesen leicht auszuwertenden Kriterien werden unter bestimmten Umständen noch andere Parameter eingesetzt, die oft jedoch erweiterte Modellierungen in den Kontinuums-Verfahren erfordern oder aber von vorneherein nur sinnvoll aus Partikelverfahren wie DSMC ermittelt werden können.

#### Temperaturbasierte Indikatoren

Für Verfahren, in denen eine Modellierung mehrerer Temperaturen enthalten ist, bietet sich ein einfacher Vergleich der zu prüfenden Temperatur  $T_{ind}$  mit einer Referenztemperatur  $T_{ref}$  an, um über den Grad der Abweichung thermisches Nichtgleichgewicht zu signalisieren:

$$D_{ind} = \left| \frac{T_{ref} - T_{ind}}{T_{ref}} \right|. \quad (2.38)$$

Der offensichtliche Vorteil dieses Parameters besteht darin, keine Gradienten bestimmen zu müssen. Wohl aufgrund der Beschränkung auf entsprechend erweiterte Kontinuums-Löser ist seine Anwendung in der Literatur nur spärlich dokumentiert (siehe z. B. [49, 62]).

### Chapman-Enskog-Faktor

George und Boyd [24] unternehmen aus ähnlichen Überlegungen wie Tiwari (siehe Abschnitt 2.3.3) den Versuch, direkt aus der Formulierung der Chapman-Enskog-Verteilung (2.32) einen lokalen Wert

$$\Gamma(\hat{\mathbf{c}}) = 1 + \Phi(\hat{\mathbf{c}}), \quad \hat{\mathbf{c}} = \mathbf{c}/\tilde{c}, \quad (2.39)$$

zu ermitteln<sup>6</sup>. Mit (2.34) und (2.35) ist

$$\Gamma(\hat{\mathbf{c}}) = 1 + \hat{q}_i \hat{c}_i \left( \frac{2}{5} |\hat{\mathbf{c}}|^2 - 1 \right) - \hat{\tau}_{ij} \hat{c}_i \hat{c}_j. \quad (2.40)$$

Boyd selbst diskutiert in einer späteren Veröffentlichung die fragwürdige Eignung von  $\Gamma$  zur Ermittlung größerer Abweichungen vom Gleichgewicht [11]. Zum einen ist  $\Gamma$  eine Funktion der thermischen Geschwindigkeit  $\mathbf{c}$ , welche von Kontinuumsverfahren prinzipiell nicht modelliert wird. Zum anderen kann selbst mit DSMC-Verfahren beginnendes Gleichgewicht aus (2.40) nicht sinnvoll berechnet werden, wie z. B. Duttweiler ausführt [18]. In seinen numerischen Experimenten waren mehr als  $10^4$  Mittelungsschritte nötig, um  $\hat{q}_i$  und  $\hat{\tau}_{ij}$  mit einem Fehler von „nur“ 10% aus den thermischen Geschwindigkeiten zu berechnen. Duttweiler begründet diese Schwierigkeit mit der Abhängigkeit der Nichtgleichgewichts-Größen von Momenten höherer Ordnung:

$$\hat{q}_i = 2 \langle \hat{c}_i |\hat{\mathbf{c}}|^2 \rangle, \quad \hat{\tau}_{ij} = -2 \langle \hat{c}_i \hat{c}_j \rangle + \frac{2}{3} \langle |\hat{\mathbf{c}}|^2 \rangle \delta_{ij}.$$

### Entropie-Methoden

Eine Reihe neuerer Veröffentlichungen [14, 46, 12] präsentiert Untersuchungen zur Anwendbarkeit der Entropie-Erzeugungsrate als Parameter zur Bestimmung der Kopplungsgrenze. Dabei geht man von der Überlegung aus, daß der Gleichgewichtszustand auch dem Zustand maximaler Entropie entspricht. Nichtgleichgewicht hingegen äußert sich prinzipiell durch Entropie-Generierung.

Chen *et al.* [14] berechnen die Entropierate noch mit einem Kontinuumslöser und stellen Übereinstimmung mit den oben präsentierten gradientenbasierten

---

<sup>6</sup>Die Bezeichnung des Chapman-Enskog-Faktors mit „ $\Gamma$ “ wurde hier aus der Literatur übernommen [22, 24] und darf nicht mit der (vollständigen) Gamma-Funktion der Mathematik  $\Gamma(a) = \int_0^\infty x^{a-1} \exp(-x) dx$  verwechselt werden, für die in dieser Arbeit das selbe Symbol gebraucht wird.

Indikatoren fest. Allerdings kann auch ein so gewonnener Entropie-Parameter beginnendes Nichtgleichgewicht in starken Stößen nicht korrekt anzeigen, was Schrock [46] auf den schon angesprochenen Widerspruch zurückführt, Nichtgleichgewicht zuverlässig aus Gleichgewichtsformulierungen zu ermitteln. Darüber hinaus berichten Gilmore *et al.* [25], daß sie Entropie-Änderung als Indikator für Fehler aufgrund *numerischer* Diffusion ihres Kontinuums-Verfahrens bei der Untersuchung expandierender Gasströmungen ausmachen konnten. Demnach wären beide Effekte schwer voneinander zu trennen.

Schrock *et al.* [47] und Camberos *et al.* [12] konzentrieren sich deshalb auf die Formulierung einer DSMC-kompatiblen Formulierung der Entropierate, um Gleichgewichtsgebiete im Strömungsfeld der Partikelsimulation detektieren und gegebenenfalls auf Kontinuumsmodelle umschalten zu können. Diese Arbeiten, wenngleich vielversprechend, befinden sich jedoch noch in einem frühen Stadium und bedürfen ausgiebiger Validierungen.

## 2.4. Informationstransport über die Kopplungsgrenze

Neben der Bestimmung der Kopplungsgrenze ist der korrekte Informationsaustausch entlang dieser Trennfläche der zweite wichtige Punkt bei der gekoppelten Simulation zweier Verfahren. Wu *et al.* [63] fassen in ihrem Übersichtsartikel zur Berechnung kompressibler Strömungen mit künstlichen Schnittstellen die wesentlichen Erkenntnisse v. a. aus Untersuchungen zur Kopplung von DSMC- mit Kontinuumsverfahren zusammen.

Nach der Art des Informationstransportes wird in Zustandskopplung und in Flusskopplung unterschieden. Zustandskopplung erfordert geometrisch überlappende Rechengitter. In den überlappenden Zellen fordert man gleiche makroskopische Zustände sowohl des Partikelverfahrens als auch des Kontinuumsverfahrens. Diese Zustände werden nach einem geeigneten Algorithmus aktualisiert, d. h. angeglichen, und stellen so die Randbedingungen für die beiden Verfahren her.

Die Flusskopplung erfordert keine überlappenden Gebiete. Die Berechnung der Flüsse über die Kopplungsgrenze kann nach verschiedenen Methoden erfolgen. Hash und Hassan [30] berichten, daß die Einhaltung der ursprünglich aus der Theorie des Strahlungstransportes stammenden Marshak-Bedingung [39] das effektivste Vorgehen bei der Bestimmung der Flüsse über die Verfahrensgrenze sei. Danach ist der Netto-Fluß einer Zustandsvariablen als Summe



der Halbflüsse aus jedem Verfahren zu berechnen. Die ein- und austretenden Flüsse des DSMC-Gebietes sind:

$$\mathcal{F}_{DSMC}^{(Q)} = \frac{s_P}{A\Delta t} \sum_{i=1}^{N_{\pm}} Q_i, \quad (2.41)$$

und aus dem Kontinuumsbereich:

$$\mathcal{F}_{NSS}^{(Q)} = n \langle Q \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} \rangle_{\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} > 0}, \quad (2.42)$$

wobei hier  $Q \in \{m, m\mathbf{v}, m\mathbf{v}^2/2\}$  ist. Nach Untersuchungen von Sun *et al.* [52] funktioniert dieses Verfahren nur dann zuverlässig, wenn eine große Zahl Partikel ( $N_P > 50$ ) in jeder Zelle für die Bestimmung von  $\mathcal{F}_{DSMC}$  zur Verfügung steht.

Die hier angesprochenen Verfahren sind besonders dann interessant, wenn die Randbedingungen für beide Methoden nicht *ab initio* bekannt sind und im Laufe der Simulation iteriert werden müssen. Eine Voraussetzung dieser Arbeit ist jedoch, daß die Berechnung der Düsenexpansion genau eine Kopplungsgrenze benötigt und daß der Informationstransport über diese Grenze nur in eine Richtung, nämlich von der mit einem Kontinuumsverfahren zu berechnenden Kernströmung in den Bereich der stark expandierenden Strahlglocke erfolgt (Stromab-Kopplung). Deshalb wird hier vereinfachend angenommen, daß die aus der Kontinuumslösung entlang der ermittelten Kopplungsgrenze extrahierten Größen Teilchendichte  $n$ , makroskopische Geschwindigkeit  $\mathbf{u}$  und Temperatur  $T$ , direkt als Randbedingungen für das DSMC-Verfahren verwendet werden können. Dieser Ansatz und seine Berechtigung werden in Abschnitt 5.4 ausführlicher diskutiert.

### 3. Numerische Verfahren

Weder die Liouville-Gleichung noch die sich aus ihr unter Vereinfachungen ableitbaren Erhaltungsgleichungen sind im Allgemeinen analytisch lösbar. Für einen großen Bereich technisch relevanter Strömungen existieren jedoch numerische Methoden, die je nach betrachtetem Dichtebereich und zugrundeliegendem Gleichungssatz in Kontinuumsverfahren und gaskinetische Verfahren unterteilt werden können.

Für viskose Strömungen nahe dem thermodynamischen Gleichgewicht kommen die Navier-Stokes-Gleichungen zum Einsatz. Für diesen Typ hyperbolischer, partieller Differentialgleichungen existieren eine Vielzahl numerischer Verfahren, die in der Literatur unter dem Begriff *Computational Fluid Dynamics* (CFD) geführt werden. Eine bekannte Einführung in das Thema ist das gleichnamige Buch von Anderson [2].

Die Boltzmann-Gleichung ist aufgrund ihres komplizierten mathematischen Charakters (Integro-Differentialgleichung) sogar einer unmittelbaren numerischen Simulation unzugänglich. Im Bereich verdünnter Gasströmungen hat sich hier das von Bird [4, 8] vorgeschlagene *Direct Simulation Monte Carlo*-Verfahren schnell als Standard etabliert. Da Beschreibungen der Methode nicht annähernd so häufig zu finden sind wie die zu den CFD-Verfahren, werden die Grundkonzepte der DSMC hier etwas ausführlicher geschildert.

#### 3.1. Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen

Das Finite-Volumen-Verfahren ist ein verbreiteter Ansatz zur numerischen Lösung der Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie und wird auch im hier benutzten TAU-Code [3] verwendet. Dabei wird das zu berechnende Gebiet in geeigneter Weise so in Volumenelemente zerlegt, daß der Raum vollständig ausgefüllt ist und keine Überlappungen existieren. Die Form des Volumenelementes ist dabei (zunächst) zweitrangig, das Verfahren

ist also – im Gegensatz zu Finite-Differenzen-Verfahren – für unstrukturierte Gitter besonders geeignet.

Grundlage der Finite-Volumen-Methode ist die integrale Form der Navier-Stokes-Gleichungen,

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \mathbf{w} dV = - \iint_{\partial V} \mathcal{F} \cdot \mathbf{n} dA, \quad (3.1)$$

mit dem Vektor der Erhaltungsgrößen  $\mathbf{w} = (\rho, \rho \mathbf{u}^T, \rho E)^T$  und dem Flussdichtetensor  $\mathcal{F}$ . Gleichung (3.1) beschreibt die anschauliche Forderung, daß die zeitliche Änderung von Masse, Impuls und Energie in einem Volumen  $V$  mit Oberfläche  $A$  und äußerem Normalenvektor  $\mathbf{n}$  durch die über den Rand  $\partial V$  des Volumens ein- und austretenden Flüsse bestimmt wird<sup>1</sup>.

Gleichung (3.1) muß für die numerische Behandlung in geeigneter Weise diskretisiert werden. Die dafür notwendigen Schritte nebst Vor- und Nachteilen sind Gegenstand eines großen Forschungsgebietes der numerischen Mathematik und gehen weit über den Kontext dieser Arbeit hinaus. Ein kurzer Überblick dazu ist aber zum Beispiel bei Anderson [2] zu finden, Details zur Implementierung verschiedener Methoden im TAU-Code sind in [3] dokumentiert.

### 3.2. Simulation verdünnter Gasströmungen mit Direct Simulation Monte Carlo

Das DSMC-Verfahren [4, 8, 9] greift die molekulare Sichtweise der kinetischen Gastheorie auf, d. h. das Gas wird im Gegensatz z. B. zum Finite-Volumen-Verfahren nicht von vorneherein als Kontinuum betrachtet, sondern als aus einer großen Zahl diskreter Partikel zusammengesetzt. Das Verfahren stützt sich auf die fundamentale Annahme der kinetischen Gastheorie, daß alle makroskopischen Eigenschaften eines Gases aus den Eigenschaften und Interaktionen der konstituierenden Moleküle hervorgehen, d. h. die Mittelwerte der Eigenschaften einer großen Zahl von Molekülen in einem makroskopisch kleinen Volumen sind.

---

<sup>1</sup>Quellen und Senken (z. B. chemische Reaktionen) werden hier nicht berücksichtigt.

Die Anzahl der Teilchen, die simuliert werden können, ist stark durch die Leistungsfähigkeit der verwendeten Rechner bestimmt, beträgt aber in jedem Fall nur einen winzigen Teil der *in natura* auftretenden Moleküle. Dieses Problem wird in der DSMC-Methode durch Verwendung von Simulationsteilchen gelöst, von denen jedes stellvertretend für eine Anzahl  $s_P$  realer Partikel steht. Die Größenordnung von  $s_P$  liegt, abhängig von der Problemstellung und der verfügbaren Rechenleistung, im Bereich  $10^{10} < s_P < 10^{18}$ .

Jedem Simulationsteilchen sind die Eigenschaften Masse, Position und Geschwindigkeit zugeordnet. Werden mehratomige Stoffe simuliert, müssen auch noch Rotations- und Vibrationsenergie jedes Testteilchens gespeichert werden. Das Strömungsfeld ist räumlich in Zellen unterteilt, die Zeit wird in Schritten  $\Delta t$  gezählt. In der DSMC-Methode werden Bewegung der Teilchen und die stattfindenden Kollisionen entkoppelt, also nacheinander simuliert.

Im Folgenden wird der Ablauf einer DSMC-Simulationsschleife der Anschaulichkeit halber vereinfachend für ein einatomiges reines Gas umrissen. Auf eine umfangreichere Beschreibung der DSMC-Methode wird in dieser Arbeit verzichtet. Die Übersichtsartikel z. B. von Oran *et al.* [40], Ivanov und Gimmelshain [33], oder der erst vor kurzem erschienene Überblick von Prasanth und Kakkassery [43] geben erschöpfend Auskunft über den gegenwärtigen Entwicklungsstand und zitieren dabei jeweils zwischen 60 und 160 Veröffentlichungen. Detailliertere Beschreibungen zu Besonderheiten in der Implementierung sind z. B. bei Bird [8] nachzulesen. Das Gerüst der Methode ist jedoch prinzipiell auch für verfeinerte Modellierungen z. B. von inneren Freiheitsgraden, Gasgemischen, chemischen Reaktionen oder katalytischen Wandwechselwirkungen zu verwenden.

**1. Erzeugung von Partikeln am Rand** Abhängig von den vorgegebenen Randbedingungen Teilchendichte  $n$ , makroskopische Geschwindigkeit  $\mathbf{u}$  und Temperatur  $T$  sowie dem Normaleneinheitsvektor der Randfläche  $\mathbf{n}$  wird der Partikelfluss bestimmt, also die Anzahl der einströmenden Simulationsteilchen  $N_+$  pro Randfläche  $A$  und Zeitschritt  $\Delta t$ :

$$\frac{N_+}{A\Delta t} = s_P n \langle (\mathbf{u} + \mathbf{c}) \cdot \mathbf{n} \rangle_{\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} > 0}. \quad (3.2)$$

Der Mittelwert in Gleichung (3.2) wird dabei mit einer geeigneten Verteilungsfunktion berechnet, häufig mit (2.6).

Den zu erzeugenden Teilchen wird nun jeweils stochastisch eine Geschwindigkeit zugewiesen, die aus der Verteilungsfunktion gewonnen wird. Dafür gibt es verschiedene Vorgehensweisen, die gebräuchlichste ist wohl die *Acceptance-Rejection*-Methode, siehe dazu z. B. [8].

- 2. Bewegung durch das Rechengebiet** Im Bewegungsschritt erhält jedes Simulationspartikel eine neue Koordinate im Rechengebiet. Dabei spielt es keine Rolle, ob sich die Flugbahnen zweier Teilchen vielleicht kreuzen würden. Die neue Ortskoordinate eines Teilchens ist dann<sup>2</sup>

$$\mathbf{x}_{(t+\Delta t)} = \mathbf{x}_t + \mathbf{v} \cdot \Delta t. \quad (3.3)$$

- 3. Intermolekulare Kollisionen** Die Simulation der Teilchenkollisionen untereinander und mit Wänden findet im DSMC-Verfahren losgelöst vom Bewegungsschritt statt. Für jede Zelle werden paarweise Kollisionspartner gebildet, für die jeweils eine Stoßwahrscheinlichkeit  $\mathcal{P}_{coll}$  in Abhängigkeit von der Relativgeschwindigkeit ermittelt wird. Diese Wahrscheinlichkeit wird in der Simulation durch einen einfachen Vergleich reproduziert: Ist die Stoßwahrscheinlichkeit eines Paares größer als eine Zufallszahl  $\mathcal{R} \in [0; 1]$ , findet ein Stoß zwischen diesen Teilchen statt.

Nach einem ähnlichen Schema wird der Stoß selber behandelt. So kann gegebenenfalls die Wahrscheinlichkeit einer chemischen Reaktion berechnet und wiederum durch Vergleich mit einer Zufallszahl deren Zustandekommen bestimmt werden. Im Falle mehratomiger Gase wird auf diese Weise auch überprüft, ob es zu einem Energieaustausch zwischen den Freiheitsgraden kommt. Die Details der Implementierung im hier verwendeten Simulationspaket LASVEGAS sind bei Laux [34] ausführlich dargelegt.

- 4. Gas-Wand-Wechselwirkung** Bei der Simulation von Strömungen mit begrenzenden Wänden müssen auch die Phänomene der Teilchenkollisionen mit Oberflächen nachgebildet werden. Im einfachsten Fall einer spiegelnden Reflexion bleibt die tangentielle Komponente der Teilchengeschwindigkeit gleich, und die Normalkomponente  $v_{\perp}$  ändert ihr Vorzeichen. Der insgesamt an die Wand abgegebene Impuls ist  $i_{\perp} = m\Delta v_{\perp}$ ,

---

<sup>2</sup>Für rotationssymmetrische 1D- und 2D-Simulation ist die Berechnung der neuen Position aufgrund der Symmetrieannahmen etwas aufwendiger. In diesen Konfigurationen erhält auch der Geschwindigkeitsvektor mit jedem Bewegungsschritt eine andere Richtung [6].

und damit wegen des wechselnden Vorzeichens für die spiegelnde Reflexion  $i_{\perp} = 2mv_{\perp}$ . Die Änderung der Partikelenergie  $e$  ist Null, daher findet auch kein Energieaustausch (Wärmeﬂuss) mit der Wand statt.

Das Modell der spiegelnden Reflexion ist für Wechselwirkungen mit technischen Oberflächen ganz offensichtlich nicht realistisch, verbreitet wird deshalb das Modell einer diffusen Streuung mit vollständiger thermischer Akkommodation verwendet: In diesem Modell wird dem Teilchen nach dem Wandkontakt ein Geschwindigkeitsvektor aus der Maxwellverteilung bei Wandtemperatur zugewiesen, analog zur Erzeugung des Anfangszustandes einströmender Teilchen. Kompliziertere Formulierungen der Streukerne (siehe z. B. [34]) enthalten weitere denkbare Einﬂußparameter wie Einfallswinkel oder Akkommodationskoeffizienten für Impuls und Energie. Für die meisten technischen Strömungen ist das Modell der diffusen Streuung ausreichend.

**5. Sampling** Um schließlich die gewünschten makroskopischen Strömungsgrößen in jeder Zelle aus der Teilchenzahl und den Teilchenenergien zu gewinnen, müssen Mittelwerte gebildet werden. Da die Zahl der zu einem Zeitpunkt in einer Zelle enthaltenen Teilchen selten hinreichend groß ist, weisen instantane lokale Mittelwerte oft große Schwankungen auf, die bei stationären Strömungen durch Mittelung über viele Zeitschritte wieder kompensiert werden können<sup>3</sup>.

Das durch die stochastische Natur der Methode bedingte Rauschen in der Lösung macht es unmöglich, einen einfachen Konvergenzindikator zu finden. Der Anwender ist gezwungen, auf der Grundlage seiner Erfahrung und durch regelmäßige Kontrolle der sich entwickelnden Lösung das Ende einer Simulation zu deﬁnieren. Allerdings ist die DSMC-Methode inhärent stabil. Selbst bei unpassend gewählter Diskretisierung von Rechengebiet und Zeit stellt sich ein Ergebnis ein, wenngleich dieses dann nicht notwendig realistisch ist. Probate Richtwerte für die typische Zellabmessung  $H$  und den Zeitschritt  $\Delta t$  sind

$$H \approx 0,3\lambda, \quad \Delta t \approx 0,3\tau. \quad (3.4)$$

Zu große Zellen lassen den Auswahlprozess der möglichen Kollisionspartner (Schritt 3) fragwürdig erscheinen, da dabei implizit unmittelbare Nachbarschaft der Teilchen angenommen wird. Außerdem können etwaige Gradienten im Strömungsfeld so natürlich nicht aufgelöst werden. Im Falle zu kleiner

---

<sup>3</sup>Durch das Postulat von „molekularem Chaos“ sind zeitliche und räumliche Mittelung äquivalent (Ergodenhypothese) [55].

Zellen sind unter Umständen nicht genügend Partikel in einer Zelle, um aussagekräftige Mittelwerte zu bilden. Zu große Zeitschritte führen vor allem dazu, daß Partikel im Bewegungsschritt der DSMC-Methode (Punkt 2) an Stellen gelangen, die sie realistischerweise kaum erreicht hätten, ohne vorher in Kollisionen mit anderen Teilchen womöglich ihre Eigenschaften geändert zu haben.

Das DSMC-Verfahren hat sich schnell zum Quasi-Standard zur numerischen Simulation von Strömungen außerhalb des Kontinuumsbereiches entwickelt und wird aufgrund seiner Anschaulichkeit oft auch als „Experiment im Computer“ bezeichnet. Es war jedoch lange Zeit nicht bewiesen, daß die Ergebnisse der Simulation immer auch den Lösungen der Boltzmann-Gleichungen (2.18) äquivalent sind. Erst 1992 konnte Wagner [58] zeigen, daß die DSMC-Methode für sehr große Partikelzahlen gegen die Lösung der Boltzmann-Gleichung konvergiert.

### **3.3. Verwendete Implementierungen**

#### **3.3.1. Der TAU-Code**

TAU ist ein umfangreiches 3D-Finite-Volumen-Simulationspaket, welches vom DLR entwickelt wird [3]. Das Rechengebiet kann dabei durch ein hybrides Primärgitter aus Tetraedern und Hexaedern definiert sein. Die Lösung von Gleichung (3.1) wird dabei für ein Volumen um jeden Punkt des Primärgitters gewonnen. Eine Adaption des Primärgitters ist getrennt von der Simulation möglich.

Der in dieser Arbeit verwendete Löser berechnet die fünf Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie zeitgenau mit Runge-Kutta- oder impliziten Euler-rückwärts-Verfahren. Die räumliche Diskretisierung kann nach verschiedenen Upwind-Verfahren oder zentralen Verfahren erfolgen.

Zur Verkürzung der Rechenzeit sind Mehrgitter-Verfahren und lokale Zeitschritte implementiert, außerdem ist TAU für die gleichzeitige Nutzung mehrerer Prozessoren parallelisiert. In dieser Arbeit wurde von der Parallelisierung kein Gebrauch gemacht.

### 3.3.2. LASVEGAS

Die DSMC-Implementierung LASVEGAS wurde Mitte der neunziger Jahre von Laux am Institut für Raumfahrtssysteme der Universität Stuttgart im Rahmen einer Dissertation entwickelt [34] und später noch ausgebaut [35, 36]. Das Programm ist gegenwärtig in der Lage, ebene oder axialsymmetrische Strömungen von Gasgemischen ein- und zweiatomiger Spezies zu simulieren. Das Rechengebiet wird zur Teilchenverfolgung in Dreieckszellen unterteilt. Diese Nutzung unstrukturierter Gitter erlaubt eine sehr allgemeine Definition von Randgeometrien. Wohl aus historischen Gründen verfügt LASVEGAS über einen eigenen Gittergenerator. Eine eventuell notwendige Adaption des Gitters kann in zuvor festgelegten Intervallen automatisch während der Simulation ausgeführt werden.

Das implementierte intermolekulare Wechselwirkungsmodell ist das der starren Kugeln mit variablem Durchmesser (*Variable Hard Sphere*, VHS) [7]. Die physikalische Modellierung intermolekularer Kollisionen erlaubt die Behandlung innerer Freiheitsgrade (Rotation und Vibration) nach dem Modell von Larsen und Borgnakke sowie chemische Reaktionen. Für die Simulation der Wechselwirkungen von Teilchen mit Wänden stehen in LASVEGAS viele gängige Rückstreuungsmodelle und auch zwei Ansätze zur Simulation katalytischer Rekombinationsreaktionen bereit.

Um die üblicherweise langwierigen DSMC-Rechnungen zu beschleunigen, wurde LASVEGAS parallelisiert [35]. Dabei blieb, wie bei TAU, die Möglichkeit zur Nutzung auf einem Prozessor aber erhalten. Versuche, LASVEGAS in dieser Arbeit parallel zu betreiben, scheiterten zunächst an technischen Details und wurden dann nicht weiter verfolgt. Die außerdem verfügbare Implementierung variabler Zeitschritte [36] erhöht auch die Ausführungsgeschwindigkeit auf Ein-Prozessor-Rechnern.



## 4. Düsenströmung

### 4.1. Expansion von Düsenströmungen ins Vakuum

Eine wesentliche Motivation für die vorliegende Arbeit ist, daß die Expansion einer Düsenströmung ins Vakuum sehr unterschiedliche Dichtebereiche aufweist, die mit nur einem der beiden in Kapitel 3 vorgestellten numerischen Verfahren entweder nicht vollständig physikalisch richtig (Navier-Stokes-Löser), oder nicht effektiv (DSMC) berechnet werden können. Abbildung 4.1 zeigt schematisch charakteristische Gebiete einer Düsenexpansion ins Vakuum.

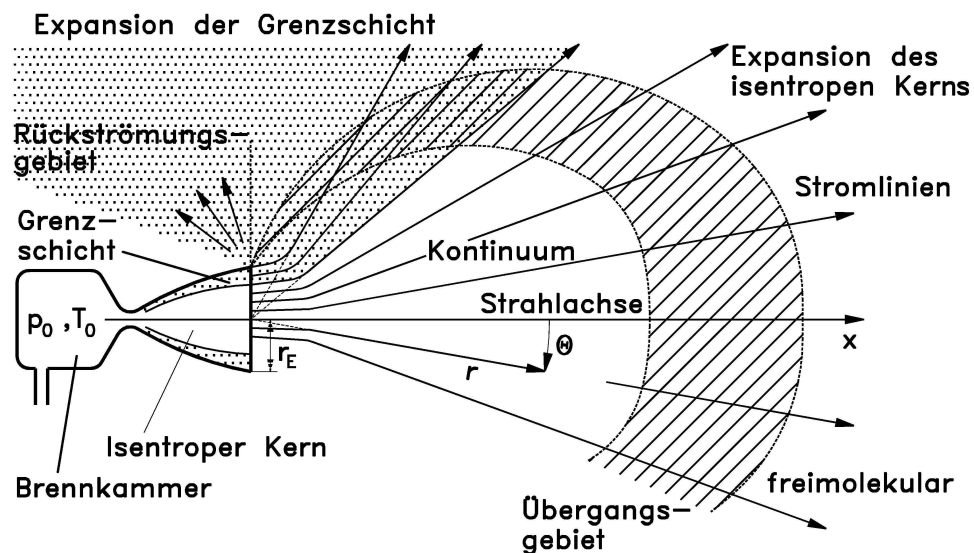


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung einer Düsenexpansion ins Vakuum

Im Reservoir der Düse ist das Gas makroskopisch annähernd in Ruhe, alle Energie ist gleichmäßig auf die thermischen und – bei mehratomigen Gasen – auf die inneren Freiheitsgrade aufgeteilt. Zum Düsenhals hin jedoch

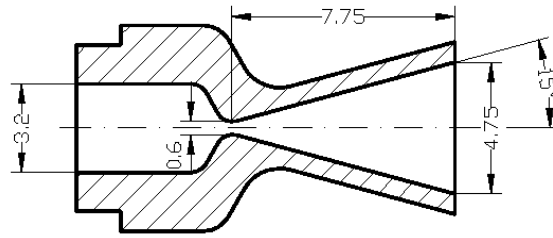


Abbildung 4.2: Geometrie der DASA 0,5 N-Düse, Abmessungen in mm

beschleunigt das Gas und erreicht im Düsenhals Schallgeschwindigkeit. In der anschließenden Überschallexpansion bildet sich eine annähernd isentrope Strömung im Düsenkern aus, während sich in Wandnähe eine Grenzschicht formiert. Die Dicke der Grenzschicht hängt maßgeblich von der Dichte und von der Viskosität des Gases ab, die ihrerseits wieder einem starken Temperatureinfluß unterliegt, siehe z. B. Abb. A.1.

Die vergleichsweise langsame Grenzschicht expandiert um die Düsenlippe herum und erzeugt so eine stark verdünnte Rückströmung. Auch die Kernströmung expandiert strahlenförmig von einem gedachten Punkt in der Nähe der Austrittsebene, dabei nimmt die Dichte und damit auch die Stoßfrequenz etwa invers-quadratisch mit der Entfernung ab, so daß bald nicht mehr genügend Kollisionen stattfinden können, um einen gleichmäßigen Energieaustausch zwischen den Molekülen zu gewährleisten, es bildet sich ein thermisches Nichtgleichgewicht aus. In großer Entfernung vom Düsenaustritt werden Kollisionen schließlich sehr unwahrscheinlich, die Strömung wird dann „freimolekular“.

## 4.2. Die verwendete Düse

Am DLR in Göttingen sind zahlreiche Experimente zu Gasexpansionen ins Vakuum in verschiedenen Konfigurationen und Anlagen durchgeführt worden. Ein besonders großer Fundus an experimentellen, analytischen und numerischen Untersuchungen liegt für eine konische Düse vor, die im ursprünglich vorgesehenen Einsatz mit Hydrazin einen nominalen Schub von 0,5 N produziert und deshalb auch üblicherweise 0,5 N-Düse genannt wird. Ihre Abmessungen sind in Abbildung 4.2 zu sehen.

Diese Düse wird, betrieben mit Hydrazin, zur Lageregelung von Satelliten im Orbit eingesetzt. Am DLR finden Untersuchungen zu den Abgasstrahlen von Kleintriebwerken statt, um bessere Erkenntnisse über die Kraftwirkung auf Flächen in der Nähe der Strahlglocke, oder über die Kontamination des Satelliten durch Rückströmung des Abgasstrahls zu erhalten.

Die konische Düse ist aufgrund ihrer einfachen Geometrie gut für grundsätzliche Untersuchungen geeignet. Zwar induziert der Krümmungssprung am Übergang von Halssegment (Kreisbogen) zu gerader Düsenwand Störungen in der Strömung, diese sind allerdings vergleichsweise schwach und verwischen schnell in der Grenzschicht der Düse. Im Gegensatz zu einer ebenfalls erwogenen konturierten Düse bildet die konische Düse kein ausgeprägtes Stoßsystem im Strömungsfeld aus und eignet sich daher besser für eine Stromab-Kopplung.

### 4.3. Beschreibung der Referenzkonfiguration

Zur Reduktion der Komplexität wurden viele Experimente und Rechnungen mit sogenannten simulierten Strahlglocken durchgeführt, das heißt anstelle von Hydrazin wurden Stickstoff und Wasserstoff verwendet.

Frühe Untersuchungen am DLR ließen vermuten, daß die Gestalt der Strahlglocke im Fernfeld entscheidend von den Reibungseffekten in der Düse abhängt. Es wurde daher ein Ähnlichkeitsparameter in Form einer Reynoldszahl vorgeschlagen [10], die mit der dynamischen Viskosität  $\mu_0$  in der Ruhekammer und der Lauflänge des divergenten Teils der Düse gebildet wird:

$$\text{Re}_E = \frac{\rho_E u_E L_E}{\mu_0}. \quad (4.1)$$

In (4.1) sind  $\rho_E$  und  $u_E$  jeweils die Dichte und die Geschwindigkeit am Düsenaustritt. Die Lauflänge der Grenzschicht im divergenten Düsenteil wird oft durch den Abstand von engstem Querschnitt zu Austrittsquerschnitt angenähert. Obwohl eine Ähnlichkeit der Strömung bei gleicher Austritts-Reynoldszahl  $\text{Re}_E$  nicht universell bestätigt werden konnte [15], greifen spätere Arbeiten auf eine Charakterisierung der Einströmbedingungen über  $\text{Re}_E$  und  $T_0$  zurück [42, 44].

Die in dieser Arbeit gewählten Bedingungen entsprechen einer Austritts-Reynoldszahl von  $\text{Re}_E = 800$  bei einer Reservoir-Temperatur  $T_0 = 300 \text{ K}$ . Dies wiederum bedeutet für die untersuchte Kegeldüse einen Druck von

$p_0 = 50 \text{ kPa}$  (oder  $0,5 \text{ bar}$ ) in der Ruhekammer. Diese Konfiguration wurde gewählt, weil dazu bereits Ergebnisse verfügbar sind, die einen Vergleich mit den eigenen Resultaten ermöglichen. Experimentelle Untersuchungen des Pitot-Druckes am Düsenaustritt wurden von Dettleff und Dankert [15] sowie von Plähn durchgeführt. Plähn [42] berichtet weiter über Teilchenfluss-Messungen mit einer Patterson-Sonde in der Simulationsanlage für Treibstrahlen Göttingen (STG), einer Kryo-Vakuumanlage, in der eine freie Expansion des Abgasstrahls untersucht werden kann.

Numerische Untersuchungen an der DASA 0,5 N-Düse mit der hier verwendeten Referenzkonfiguration  $\text{Re}_E = 800$ ,  $T_0 = 300 \text{ K}$  umfassen Simulationen der Düseninnenströmung mit dem Kontinuumslöser CEVCATS. Auf Basis dieser Lösungen führte Rosenhauer [44] eine erste Stromabkopplung mit dem DSMC-Verfahren „Monaco“ durch.

## 5. Simulation

In diesem Kapitel werden Vorgehensweise und Parameter der entkoppelten Simulation dargelegt.

Zwar ist es prinzipiell möglich, aus physikalischer Überlegung und experimenteller Erfahrung heraus das mit dem Navier-Stokes-Löser zu berechnende Gebiet im vorhinein festzulegen, ein solches Vorgehen ist jedoch nicht allgemein genug und stellt zudem hohe Ansprüche an die Definition der Randbedingungen. In dieser Arbeit wird daher ein Ansatz gewählt, der sich auch auf andere Strömungskonfigurationen anwenden läßt.

Das Strömungsfeld wird zunächst vollständig mit einem Navier-Stokes-Löser berechnet, unabhängig davon, daß die Lösung in verdünnten Bereichen unphysikalisch ist. Diese Lösung bildet die Grundlage für die Bestimmung eines geeigneten Indikators für die Gültigkeitsgrenze der Navier-Stokes-Gleichungen (siehe Abschnitt 2.3) und damit für den Kopplungsrand zum DSMC-Gebiet. Im hier behandelten Fall der Expansion aus einer konischen Düse existiert genau eine Schnittstelle zwischen Navier-Stokes- und DSMC-Verfahren, entlang dieses Kopplungsrandes werden aus der Lösung des Kontinuumsverfahrens die Randbedingungen für die Einströmung in das DSMC-Gebiet ermittelt.

Die numerische Simulation der Gasexpansion ins Vakuum außerhalb der Düsenkernströmung findet getrennt von der Berechnung der Kontinuumslösung statt. Dieses Vorgehen wird als Stromab-Kopplung bezeichnet und mit der Annahme gerechtfertigt, daß der weitaus größte Teil der Strömung die Kopplungsgrenze mit Überschall passiert und daher keine Information aus dem DSMC-Gebiet in das Kontinuumsgebiet gelangen kann. Die Gültigkeit dieser Annahme wird im Folgenden noch diskutiert.

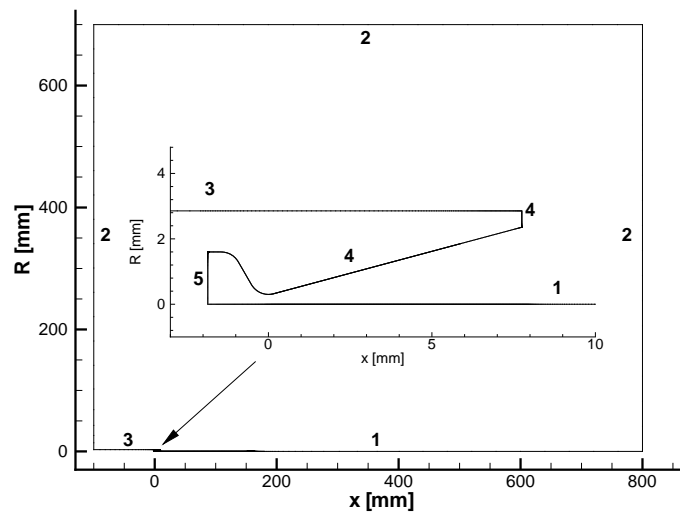


Abbildung 5.1: Begrenzungen des Rechengebietes für die Kontinuumslösung

## 5.1. Navier-Stokes-Lösung mit TAU

Die Ausgangslösung wird mit dem am DLR entwickelten 3D-Finite-Volumen-Verfahren TAU [3] berechnet. Aufgrund der angenommenen Symmetrie der Strömung aus der untersuchten Düse muß das Rechengebiet jedoch nicht vollständig dreidimensional behandelt werden, sondern lediglich in einem schmalen Keil symmetrisch zur Düsenlängsachse. Die Rechnung erfolgt also 2D-axialsymmetrisch.

### 5.1.1. Simulationsgebiet und räumliche Diskretisierung

Abbildung 5.1 zeigt die Begrenzungen und die Ausdehnung des Rechengebietes. Die Abmessung der offenen Ränder (Nr. 2) ist aufgrund der gewählten Fernfeld-Randbedingung erforderlich. An diesen Rändern werden die Bedingungen vom Löser abhängig vom lokalen Strömungszustand (Ein- oder Ausströmung, Über- oder Unterschall) automatisch so gesetzt, daß das Problem wohlformuliert<sup>1</sup> ist.

<sup>1</sup>Ein Problem ist nach J. Hadamard „wohlformuliert“ oder „korrekt gestellt“, wenn eine eindeutige Lösung existiert, die zudem stetig von den Eingangsdaten abhängt (Exi-

Nr.	Bezeichnung	Bedingungen
1	Symmetrieachse	-
2	Fernfeld	$T_\infty = 300 \text{ K}, \rho_\infty = 3,0 \times 10^{-6} \text{ kg/m}^3$
3	Euler-Wand	-
4	viskose Wand	$T_W = 300 \text{ K}$ , laminar, isotherm
5	Druckreservoir	$p_0 = 50 \text{ kPa}, \rho_0 = 0,5612 \text{ kg/m}^3$

Tabelle 5.1: Randbedingungen für die Kontinuumsrechnung (siehe Abb. 5.1)

Die Geometrie des Rechengebietes wurde in dem CAD-Programm „Rhino-ceros“<sup>2</sup> erzeugt und im IGES-Format gespeichert. IGES-Dateien können direkt vom Gittergenerator „Centaur“<sup>3</sup> verarbeitet werden. Das von „Centaur“ erzeugte unstrukturierte 2D-Gitter kann schließlich mit einem Programm aus dem TAU-Paket in eine Primärgitterdatei und eine Randbedingungsdatei konvertiert werden.

### 5.1.2. Randbedingungen und Simulationsparameter

Tabelle 5.1 gibt einen Überblick über die Randbedingungen, die den in Abbildung 5.1 markierten Kanten zugewiesen sind. Wesentlich sind dabei neben einer möglichst niedrigen Dichte im Fernfeld die Bedingungen an der Düseninnenwand (Nr. 4). Zum einen ist die Strömung aufgrund der niedrigen Dichte in der Grenzschicht laminar, es ist also keine Turbulenzmodellierung erforderlich. Darüberhinaus muß die Düsenwand als isotherm definiert werden. Das ist wichtig, um Kompatibilität zwischen dem Kontinuumsverfahren und dem DSMC-Verfahren zu gewährleisten, da das in der DSMC-Rechnung verwendete Wandwechselwirkungsmodell (siehe Abschnitt 5.3.2) ebenfalls eine isotherme Wand annimmt. Schließlich beeinflußt die Modellierung des Wärmeübergangs vom Fluid an die Wand die Ausprägung der Grenzschicht und wirkt damit auch auf die Kernströmung.

Kern der Finite-Volumen-Methode ist die Berechnung von Flüssen über die Grenzen eines Kontrollvolumens, alle Flussterme enthalten die lokale Dichte als Faktor. Dieser Umstand setzt der Berechnung von Bereichen mit sehr niedrigen Dichten (unabhängig davon, ob physikalisch sinnvoll oder nicht)

---

stanz, Eindeutigkeit, Stabilität).

<sup>2</sup>[www.rhino3d.com](http://www.rhino3d.com)

<sup>3</sup>[www.centaursoft.com](http://www.centaursoft.com)

numerische Grenzen und erfordert ein vorsichtiges Vorgehen bei der Lösungsgewinnung. In einem ersten Anlauf wurde z.B. die Außenkontur der Düse mitmodelliert, in dem so entstandenen Hinterschnitt waren die lokalen Dichten jedoch so gering, daß numerische Probleme eine stabile Simulation verhinderten.

Mit der in Abbildung 5.1 zu sehenden geraden Außenwand verschwinden viele Probleme, dennoch darf in diesem Fall die Dichte im Fernfeld zu Beginn der Simulation nicht wesentlich kleiner als etwa  $\rho_\infty \approx 10^{-4} \text{ kg/m}^3$  sein, sie kann dann in zwei Schritten von jeweils einer Zehnerpotenz auf ein Minimum in der Größenordnung  $\rho_\infty \approx 10^{-6} \text{ kg/m}^3$  abgesenkt werden. In dieser Arbeit wird eine Hintergrunddichte von  $\rho_\infty = 3,0 \times 10^{-6} \text{ kg/m}^3$  als ausreichend niedrig betrachtet. Der dadurch erreichte Hintergrunddruck hängt natürlich maßgeblich von der gesetzten Fernfeld-Temperatur ab. Deren genauer Wert spielt für die Lösung im interessierenden Kern der Düsenströmung aber keine Rolle, wie eine anschließende Simulation mit  $T_\infty = 10 \text{ K}$  gezeigt hat. Um die Rechnung aber überhaupt starten zu können, ist für das Fernfeld eine Temperaturvorgabe in der Größenordnung der Reservoirtemperatur erforderlich.

Das hier für den Zeitschritt benutzte Runge-Kutta-Verfahren arbeitet bei einer CFL-Zahl von maximal 0,8 stabil, deshalb sind auch sehr viele Iterationen erforderlich, bevor die Lösung als konvergiert bezeichnet werden kann. Es hat sich gezeigt, daß das in TAU verfügbare Mehrgitterverfahren zur Konvergenzbeschleunigung in dem hier behandelten Strömungsfall zu Instabilitäten führt. Zur Berechnung der Flüsse wird das Upwind-Schema „AUSMDV“ verwendet. Die Flussbestimmung ist größtenteils von zweiter Ordnung genau, was eine Gradientenrekonstruktion verlangt und den Einsatz sogenannter *Limiter* zur Dämpfung erfordert. Das beste derzeit in TAU implementierte Verfahren zur Gradientenrekonstruktion arbeiten nach dem *Least-Squares*-Prinzip, dieses kam auch hier zur Anwendung. Details zur Implementierung können in [3] nachgelesen werden.

Das zu simulierende Gas (Stickstoff) wird in TAU durch die Parameter der Viskositäts-Approximation nach Sutherland (A.1) definiert, die konkret gewählten Werte sind in Tabelle A.1 im Anhang aufgeführt. TAU benötigt weiterhin die Angabe von drei Referenzgrößen, da die Berechnung der Strömungsvariablen dimensionslos erfolgt. Hier wurde

$$T_{ref} = 300 \text{ K}, \quad u_{ref} = 5,0 \text{ m/s}, \quad \rho_{ref} = 3,0 \times 10^{-2} \text{ kg/m}^3$$

gewählt.



Adaptionen	Anz. der Zellen	Iterationen	Zeit pro Iteration
0	152442	88000	$\approx 2,16$ s
1	587621	3000	$\approx 10,58$ s
2	2314181	2000	$\approx 39,05$ s

Tabelle 5.2: Rechenzeiten für die Navier-Stokes-Simulation (AMD Opteron 242 1.6 GHz)

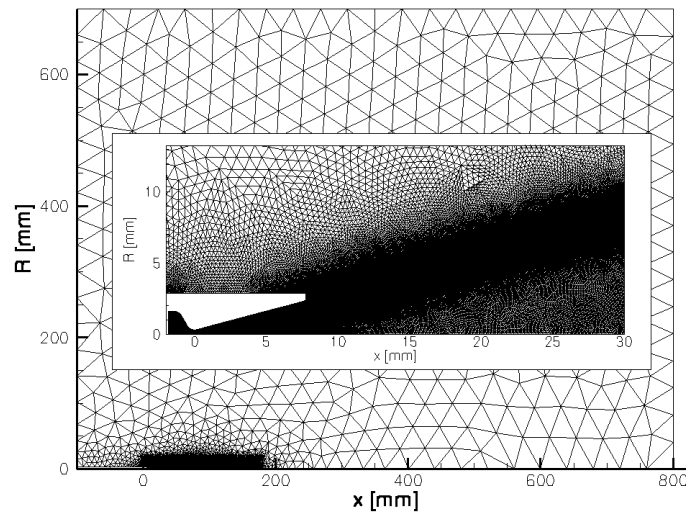


Abbildung 5.2: TAU-Rechengitter nach Adaption

### 5.1.3. Rechenzeiten und sonstige Kenngrößen

Auf dem Startgitter mit 152442 Zellen wurde die TAU-Rechnung gestartet. Die Lösung erreichte mit den oben beschriebenen Anpassungen nach 88000 Iterationen einen Zustand, der als unveränderlich angesehen wurde. Zur Prüfung der Netzqualität wurden anschließend alle Zellen in einem großzügig festgelegten rechteckigen Gebiet um den Düsenkernstrahl geviertelt, nach bereits 3000 Iterationen war auch hier keine weitere signifikante Änderung der Lösung festzustellen. Eine weitere Viertelung im Adaptiongebiet führte schließlich auf über zwei Millionen Zellen. Diese Auflösung erwies sich allerdings als unnötig. Die jeweils in den einzelnen Adaptionstufen durchgeführten Iterationen und die zugehörige spezifische Rechenzeit sind in Tabelle

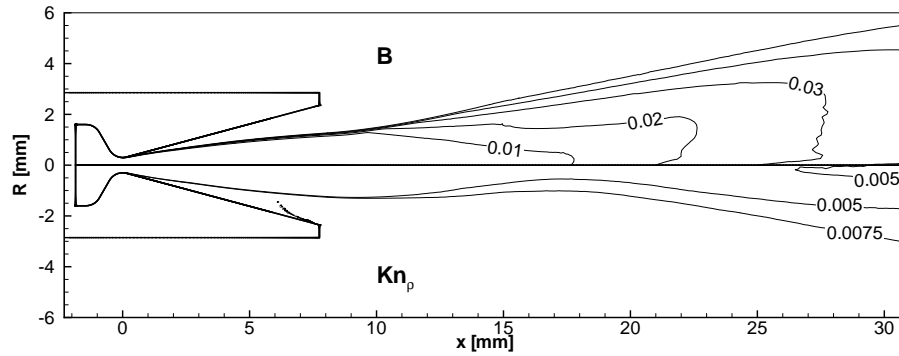


Abbildung 5.3: Vergleich der Indikatoren  $B$  und  $\text{Kn}_\rho$  (siehe Abschnitt 2.3)

5.2 vergleichend dargestellt. Für die gesamte Simulation ergab sich dadurch eine reine Rechenzeit von knapp 3,5 Tagen. Das schließlich verwendete feinste Gitter ist in Abbildung 5.2 zu sehen. Die erhöhte Zelldichte im Bereich der vermuteten Scherschicht wurde bereits während der Erstellung des Ursprungsgitters erzeugt.

## 5.2. Bestimmung der Kontinuumsgrenze

Für die Bestimmung der Kontinuumsgrenze ist zunächst die Wahl eines geeigneten Indikators notwendig. Wie in Abschnitt 2.3 dargelegt, sind für die Ermittlung eines solchen Parameters aus einer Kontinuumslösung zur Zeit zwei Herangehensweisen gebräuchlich. Die eine stützt sich im Wesentlichen auf einen Vergleich der Größenordnungen von mittlerer freier Weglänge und lokalen Gradientenlängen. Der in der Literatur am häufigsten gebrauchte Parameter dieser Art ist die Knudsenzahl basierend auf dem Dichtegradienten,  $\text{Kn}_\rho$ . Andere Autoren leiten einen Indikator für die Gültigkeit der Navier-Stokes-Gleichungen direkt aus der Chapman-Enskog-Entwicklung ab. Es wurde gezeigt, daß der von Garcia und Alder vorgeschlagene Parameter  $B$  nicht nur sehr einfach formuliert ist, sondern die Gültigkeitsgrenze der Kontinuumsannahme auch vorsichtiger abschätzt.

Abbildung 5.3 zeigt einen Vergleich von  $\text{Kn}_\rho$  und  $B$ . Beide Kennwerte zeigen übereinstimmend einen rapiden Anstieg in radialer Richtung im Inneren der Düse und signalisieren damit, daß die gesamte Grenzschicht streng genommen nicht mehr physikalisch richtig mit einem Kontinuumslöser ohne

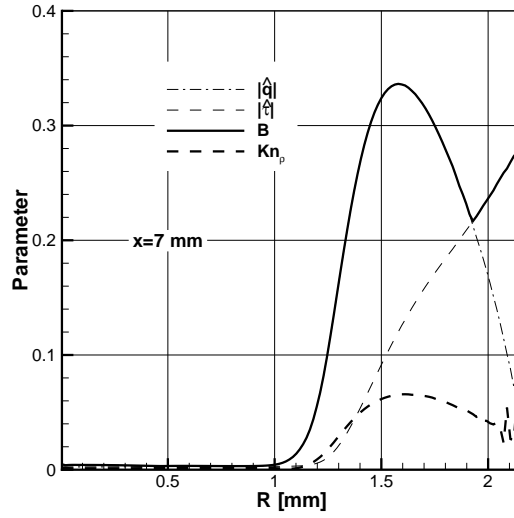


Abbildung 5.4: Vergleich des radialen Verlaufes von  $B$  und  $Kn_p$  bei  $x = 7$  mm

erweiterte Modellierung berechnet werden kann. Die erwartete Keulenform der Kernströmung (vergleiche Abb. 4.1) wird nur vom Parameter  $B$  wiedergegeben. Abbildung 5.4 veranschaulicht noch einmal den starken Ausschlag des Indikators  $B$ , hier verursacht durch den Betrag des (dimensionslosen) Wärmestroms aufgrund der vergleichsweise warmen Wand. An dieser Stelle sei auf die Diskrepanz zu Rosenhauers Untersuchung dieser Parameter für den gleichen Strömungsfall hingewiesen [44]. Rosenhauer gelangt auf der Basis seiner Ergebnisse zu dem Schluß, daß eine Simulation der Strömung mit gaskinetischen Verfahren erst ab etwa  $x = 6,5$  mm nötig ist und berechnet die Grenzschicht in der Düse beinahe vollständig mit dem Kontinuumslöser. Abbildung 5.4 zeigt weiterhin, daß  $Kn_p$  zwar ebenfalls größere Dichtegradienten signalisiert, allerdings später anspricht als der Kennwert  $B$ . Letzterer scheint für den vorliegenden Strömungsfall der geeignetere Indikator zu sein.

Wie schon in Abschnitt 2.3 bemerkt, gibt es widersprüchliche Aussagen zu Grenzwerten für  $B$ . Eine überschlägige Rechnung ließ erkennen, daß  $B$  kleiner als etwa 0,1 sein sollte. Auf die Lage der Grenzfläche in der Düse hat ein Parameter  $0,01 \leq B \leq 0,1$  weniger Einfluß als auf die Ausdehnung der Kernströmung in axialer Richtung (Bild 5.3). In Ermangelung entsprechender Daten wird die Kopplungsgrenze in dieser Arbeit bei  $B \approx 0,03$  ange-

setzt.

Die Extraktion der Bedingungen entlang der Einströmkante erfolgte manuell mit der Visualisierungssoftware „Tecplot“<sup>4</sup>. Pläne, die Randbedingungen für LASVEGAS automatisch entlang der Konturlinie  $B = 0,03$  zu ermitteln, wurden zugunsten einer Approximation aus Linien- und Ellipsensegmenten verworfen, als sich offenbarte, daß LASVEGAS Spline-Ränder bisher nur rudimentär unterstützt.

### 5.3. Gaskinetische Simulation mit LASVEGAS

#### 5.3.1. Rechengitter

In Vorbereitung der DSMC-Simulation mit LASVEGAS ist das Rechengebiet zu diskretisieren. Gestalt und Abmessungen des Fernfeldes orientieren sich an der Konfiguration von Rosenhauer, lediglich die Einströmkante wird, wie oben beschrieben, anders gewählt. Das Fernfeld wird durch ein Kugelsegment mit Halbwinkel  $130^\circ$  und Radius 600 mm gebildet.

Für die Gittergenerierung stellt LASVEGAS eigene Programme zur Verfügung, mit denen ausgehend von einer vorzugebenden Randknotenverteilung ein unstrukturiertes Dreiecksgitter nach dem *Advancing-Front*-Mechanismus erzeugt wird [34]. Die Größe der Dreiecke im Feld wird dabei von der mit ihrem Abstand gewichteten Länge der Randkanten bestimmt. Während dieses Verfahren für Außenströmungen in der Regel sehr gute Ergebnisse liefert, sind im vorliegenden Fall viele vorsichtige Iterationen der Generierungsparameter notwendig gewesen, um schließlich eine annehmbare Kompromißlösung zu erzielen. Die besonderen Verhältnisse bei einer Düsenexpansion ins Vakuum erfordern nämlich eine möglichst geringe Zellgröße in der Düse, während der Großteil des Fernfeldes nicht unnötig fein diskretisiert werden sollte. Eine enge Anordnung der Randknoten an den Innenrändern der Düse wirkt sich allerdings im oben skizzierten Mechanismus auch auf das Innere des Strömungsfeldes aus. In Abbildung 5.5 ist das Ergebnis der Gittergenerierung dargestellt.

---

<sup>4</sup>[www.tecplot.com](http://www.tecplot.com)

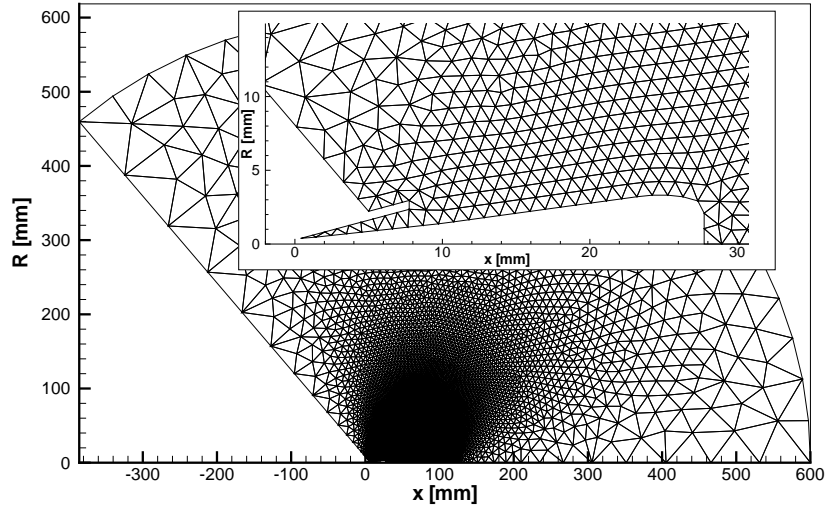


Abbildung 5.5: Ausgangsgitter für die DSMC-Simulation (14484 Zellen)

### 5.3.2. Randbedingungen und Simulationsparameter

Vor Beginn der Simulation müssen die Zustände an den Rändern des Rechengebietes definiert werden. Die Lage der Begrenzungen, bestehend aus Einströmkante, Symmetrieachse, Abströmrund und Düsenwand, ist in Abbildung 5.6 skizziert.

LASVEGAS fordert für jeden offenen Rand die Vorgabe von Teilchendichte  $n$ , makroskopischer Geschwindigkeit  $\mathbf{u}$  und den äquivalenten Temperaturen  $T_T$ ,  $T_R$ ,  $T_V$  jeweils für Translations-, Rotations- und Vibrationsenergie. Mit diesen Größen werden die Simulationsteilchen später unter Annahme translatorischen Gleichgewichts erzeugt. Die Bedingungen am Einströmrund werden direkt aus der Kontinuumslösung gewonnen. Einige Veröffentlichungen (z.B. [22]) schlagen vor, an Kopplungsgrenzen zu Navier-Stokes-Lösern die Simulationsteilchen für das DSMC-Gebiet aus einer sog. Chapman-Enskog-Verteilung zu erzeugen und so der Annahme geringfügiger Abweichung vom lokalen translatorischen Gleichgewicht Rechnung zu tragen. Rosenhauer konnte eine sichtbare Auswirkung der Partikelgenerierung aus einer Chapman-Enskog-Verteilung nur in Bereichen ausmachen, die in dieser Arbeit ohnehin schon vollständig im DSMC-Gebiet liegen. Für die hier vorgestellte Simulation wurde daher die Verwendung der Maxwell-Verteilung für

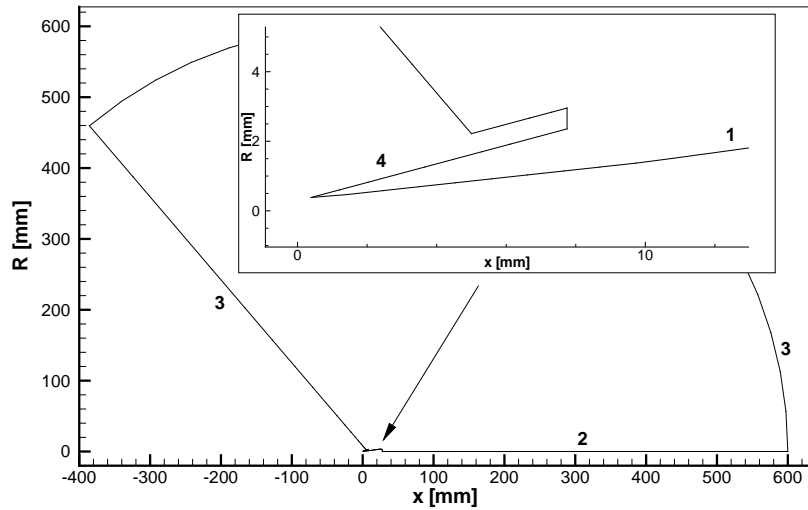


Abbildung 5.6: Randdefinition in der DSMC-Simulation

ausreichend befunden.

Für die Düsenwand wird in der Simulation eine konstante und homogene Wandtemperatur von  $T_W = 300\text{ K}$  vorgeschrieben, das entspricht der mittleren Düsenwandtemperatur, wie sie in der STG gemessen wurde [42]. Für die Simulation von Gas-Wand-Wechselwirkungen mit technischen Oberflächen bei niedrigen Geschwindigkeiten hat sich die Annahme einer diffusen Rückstreuung bewährt. Dabei wird angenommen, daß die mit der Wand kollidierenden Teilchen nach einer Maxwell-Verteilung bei Wandtemperatur reemittiert werden, man spricht dabei von vollständiger Akkommodation.

Neben den Bedingungen an den Rändern des Simulationsgebietes haben natürlich auch die Parameter der intermolekularen Wechselwirkung einen Einfluß auf den Transport von Information durch das Strömungsfeld. In LASVEGAS werden Wechselwirkungen durch das *Variable Hard Sphere*-Modell beschrieben. In diesem Modell hängen die Stoßquerschnitte und damit auch die Stoßwahrscheinlichkeiten von der Relativgeschwindigkeit der kollidierenden Moleküle ab. Die freien Parameter in der VHS-Modellierung müssen dabei so gewählt werden, daß die im Experiment bestimmte Viskosität von der Simulation reproduziert wird. Im vorliegenden Fall weisen große Teile des

Nr.	Bezeichnung	Bedingungen
1	Einströmkannte	$n, \mathbf{u}, T_T = T_R = T_V = T$ aus der Kontinuumslösung
2	Symmetrieachse	-
3	Offener Rand	Vakuum
4	Wand	$T_W = 300\text{ K}$ , diffuse Reflexion, vollst. Akkommodation

Tabelle 5.3: Randbedingungen für die DSMC-Simulation (siehe Abb. 5.6)

Strömungsfeldes tiefe Temperaturen auf, was die Verwendung sonst üblicher Viskositätsparameter in Frage stellt. Details hierzu können im Anhang A nachgelesen werden.

Im Zusammenhang mit der Simulation kalter Gasströmungen ist ein weiterer verfahrenstechnischer Aspekt zu beachten, der die in LASVEGAS implementierte Gitteradaption betrifft. LASVEGAS überprüft die Notwendigkeit einer Adaption anhand eines Kriteriums, das eine typische Zellabmessung zur lokalen mittleren freien Weglänge in Beziehung setzt. Ist die mittlere freie Weglänge kleiner als die Zellabmessung, ist eine Verfeinerung des Rechengitters notwendig. Um Rechenzeit zu sparen, verzichtete Laux bei der Entwicklung von LASVEGAS darauf, für die Bestimmung des Adaptionkriteriums die mittlere freie Weglänge mit den Parametern des VHS-Modells zu ermitteln, da diese dann von der Temperatur abhängig ist. Die Temperatur wiederum müsste als makroskopische Größe vor der Adaption erst gesampelt werden. Laux verwendet stattdessen die wesentlich einfacher zu bestimmende mittlere freie Weglänge des *Hard Sphere*-Modells und hält diese Vereinfachung für in jedem Falle konservativ [34]. Im vorliegenden Strömungsfall hat sich diese Annahme in der Allgemeinheit ihrer Formulierung als irrig erwiesen, wie hier kurz erklärt werden soll.

Das Verhältnis von freier Weglänge nach VHS-Modell  $\lambda_{VHS}$  zu freier Weglänge nach HS-Modell  $\lambda_{HS}$  ist für ein reines Gas [34]:

$$\begin{aligned} \frac{\lambda_{VHS}}{\lambda_{HS}} &= \frac{1}{\Gamma(2-\omega)(2-\omega)^\omega} \left( \frac{d_{HS}}{d_{VHS}} \right)^2 \left( \frac{T}{T_{VHS}} \right)^\omega, \\ &= \mathcal{C} \cdot \left( \frac{T}{T_{VHS}} \right)^\omega, \end{aligned} \quad (5.1)$$

wobei  $\mathcal{C}$  eine Konstante in der Größenordnung von 1 ist. Wie klar zu erkennen ist, wird die Verwendung von  $\lambda_{HS}$  nur dann zu einem strengeren Adaptionkriterium und damit zu einer zulässigen Vereinfachung führen, wenn die Temperatur  $T$  über der Referenztemperatur des VHS-Modells liegt. Die Temperaturen sind im vorliegenden Strömungsfall jedoch überall niedriger als die Referenztemperatur  $T_{VHS} = 300\text{ K}$ , so daß Änderungen in LASVEGAS notwendig wurden, die eine direkte Verwendung von  $\lambda_{VHS}$  zur Bestimmung des Adaptionkriteriums erlauben. In der geänderten Programmversion werden die Teilchengeschwindigkeiten nun auch in der Initialisierungsphase nach jedem Zeitschritt gesampelt, damit zum Zeitpunkt der Adaption eine lokale Temperatur bestimmt werden kann. Die dafür benötigte zusätzliche Zeit ist gegenüber den anderen DSMC-Schritten so klein, daß sie faktisch nicht ins Gewicht fällt.

### 5.3.3. Rechenzeiten und sonstige Kenngrößen

Nach der Gittergenerierung und der Definition der Randbedingungen kann die Simulation gestartet werden. Zwei wichtige Simulationsparameter sind der Skalierungsfaktor  $s_P$  und der Zeitschritt  $\Delta t$ . Der Skalierungsfaktor bestimmt das Verhältnis von realen zu Simulationsteilchen (siehe Abschnitt 3.2) und damit letztlich die statistische Qualität der Lösung, da der Fehler in DSMC-Simulationen umgekehrt proportional zur Wurzel aus der Zahl der Samples skaliert [8]. Allerdings ist  $s_P$  nach unten durch die verfügbare Rechnerkapazitäten beschränkt. Der in LASVEGAS implementierte Adaptionalgorithmus sorgt dafür, daß in Gebieten hoher Dichte und entsprechend niedriger mittlerer freier Weglänge kleine Zellen vorliegen. Ein zu gering gewählter Skalierungsfaktor hat dann zur Folge, daß in diesen kleinen Zellen im Mittel nur wenige Simulationsteilchen vorhanden sind, was sich wiederum negativ auf die statistischen Schwankungen auswirkt. Letztlich kann dieses Problem im derzeit implementierten Verfahren zur Mittelwertsbildung nur durch Erhöhung der Anzahl der Iterationen kompensiert werden.

Rosenhauer verwendete für seine Simulation einen Zeitschritt von  $\Delta t = 1,0 \times 10^{-8}\text{ s}$  [44], diese Wahl hat sich als günstig herausgestellt und wurde in dieser Arbeit übernommen. Wie viele Iterationen tatsächlich notwendig sind, ist, wie schon in Abschnitt 3.2 bemerkt, nicht ohne weiteres pauschal zu entscheiden, da es für DSMC-Simulationen schwierig ist, ein eindeutiges Konvergenzkriterium zu bestimmen. In dieser Arbeit kam ein Algorithmus für die Gitteradaption zur Anwendung, der das Verhältnis von Zellgröße zu



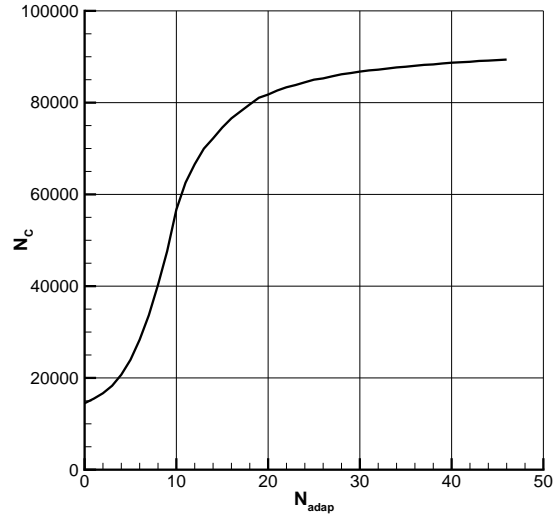


Abbildung 5.7: Änderung der Zellenanzahl  $N_C$  infolge der Gitteradaption

lokaler mittlerer freier Weglänge prüft und die Zelle gegebenenfalls halbiert. Man kann nun argumentieren, daß es dabei einen endgültigen Zustand geben muß, der dann erreicht ist, wenn die letzte Änderung des Gitters keine Auswirkung mehr auf das Strömungsfeld hat. In dieser Arbeit wird dann davon ausgegangen, daß die Simulation beendet ist. Allerdings ist zu gewährleisten, daß nach jeder Adaption eine hinreichend große Zahl an Iterationen durchgeführt werden muß, um den Einfluß der statistischen Schwankungen auf die Adaption gering zu halten. Hier wurden 10000 Iterationen für ausreichend gehalten. Abbildung 5.7 zeigt den Verlauf der Adaption. Nach insgesamt 1,1 Mio. Iterationen und 76 Adaptionsschritten war zwar ein Endzustand noch nicht erreicht, die Anzahl der Zellen änderte sich aber lediglich um nur noch 0,05% auf schließlich 91108.

LASVEGAS bietet die Möglichkeit, eine Rechnung aufbauend auf einer vorangegangenen neu zu starten. Da es nicht möglich ist, eine laufende Simulation zur Kontrolle des Strömungsfeldes kurzfristig anzuhalten, wurde die Rechnung in Blöcken durchgeführt. Um zu Beginn das Strömungsfeld möglichst rasch mit einer sinnvollen Partikelverteilung zu initialisieren, hat sich die Einstellung eines deutlich größeren Zeitschrittes bewährt. Es genügten bei  $\Delta t = 1,0 \times 10^{-6}$  s bereits etwas weniger als 1500 Iterationen, um das Rechengebiet zu füllen. Anschließend wurde auf den oben angesprochenen

Parameter	Rosenhauer [44]	diese Arbeit
Zeitschritt $\Delta t$	$1,0 \times 10^{-8} \text{ s}$	$1,0 \times 10^{-8} \text{ s}$
Iterationen (ges.)	100000	1,1 Mio.
Adaptionintervall	-	10000 Iterationen
Skalierungsfaktor $s_P$	k. A.	$1,0 \times 10^{11}$
Durchschn. Teilchenzahl	6,05 Mio.	5,42 Mio.
Zellen (Ende der Sim.)	93586	91108
Rechenzeit	$\approx 7\text{d}$	11d19h
	(AMD Athlon 900 MHz)	(Intel E6550 2.3 GHz)

Tabelle 5.4: Parameter für die DSMC-Simulation

realistischeren Zeitschritt umgestellt, und es wurden Sequenzen von 50000 Iterationen durchgeführt. Davon dienten die letzten 20000 Iterationen jeweils zur Mittelwertbildung für die Zwischenergebnisse. Eine abschließende Rechnung umfaßte 350000 Iterationen, davon 50000 zur Mittelwertbildung. In den jeweils nicht ausschließlich zur Mittelwertbildung genutzten Zeiten wurden aller 10000 Iterationen das Gitter und die Zeitzone adaptiert. Eine tabellarische Zusammenfassung einiger wesentlicher Kennzahlen ist nebst Vergleich zu der Rechnung von Rosenhauer [44] in Tabelle 5.4 zusammengestellt.

#### 5.3.4. Ergebnisse und Diskussion

Vor der Auswertung des Strömungsfeldes ist anhand dreier wichtiger Kenngrößen zu überprüfen, ob die Simulationsparameter für diesen Strömungsfall adäquat gewählt sind. Im einzelnen sind das:

1. Zellgröße zu mittlerer freier Weglänge,

$$\frac{H}{\lambda} \stackrel{!}{<} 1,$$

2. Zeitschritt zu mittlerer Kollisionszeit,

$$\frac{\Delta t}{\tau} \stackrel{!}{<} 1,$$

und

3. Anzahl der Partikel pro Zelle.

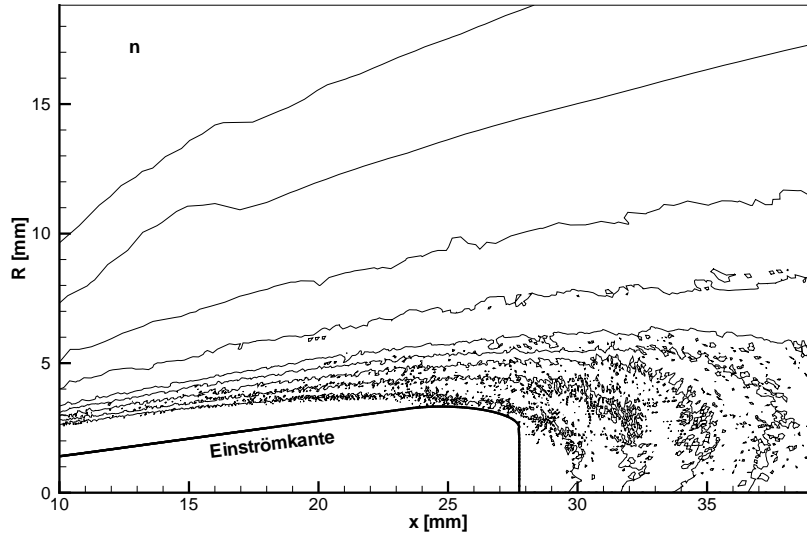


Abbildung 5.8: Verrauschte DSMC-Lösung in Achsnähe nach mehr als 1 Mio. Iterationen (Beispiel: Teilchendichte)

Der erste und der zweite Punkt sind leicht über das Adaptionkriterium bzw. den Zeitschritt in der Parameterdatei von LASVEGAS einzustellen, die gleichfalls notierten Forderungen sind auch fast überall im Rechengebiet erfüllt. Prinzipiell kann auch die Anzahl der Partikel über den Skalierungsfaktor  $s_P$  so eingestellt werden, daß möglichst viele Simulationsteilchen in jeder Zelle für eine Mittelwertbildung zur Verfügung stehen. In axialsymmetrischen DSMC-Simulationen, besonders mit großer Ausdehnung in radialer Richtung, erhält man jedoch schnell die Situation, daß Zellen am äußeren Rand des Strömungsfeldes um etliche Größenordnungen mehr Teilchen enthalten als Zellen in Achsnähe, wenn keine Korrekturen wie radiale Gewichtungsfaktoren zum Einsatz kommen [8]. Eine Verringerung von  $s_P$  kann dann zwar die Teilchenzahl im Strömungsfeld (und damit die Anforderungen an Speicher und Prozessorleistung) drastisch erhöhen, die Auswirkung auf die Teilchenzahl in Achsnähe ist hingegen gering. Erfordert die Rechnung, wie im vorliegenden Fall, auch noch vergleichsweise kleine Zellen in der Nähe der Achse, enthalten diese oft nur eine einstellige Zahl von Simulationsteilchen und weisen entsprechende statistische Schwankungen auf (Abbildung 5.8). Um das Auftreten völlig leerer oder kollisionsfreier Zellen zu unterbinden, wurde der Adaptionalgorithmus in LASVEGAS dahingehend modifiziert, daß

Zellteilungen nur dann stattfinden dürfen, wenn die betreffende Zelle bereits mindestens vier Partikel enthält. Es ist wünschenswert, diese Mindestanzahl noch höher zu wählen und sie künftig vom Nutzer in der Parameterdatei festlegen zu lassen. Dabei ist allerdings in Kauf zu nehmen, daß die Zellgröße unter Umständen ein Vielfaches der mittleren freien Weglänge beträgt. Nach Rosenhauer [44] führt eine Zellgröße von bis zu etwa  $10\lambda$  im Bereich schwacher Gradienten jedoch kaum zu einem merklichen Unterschied zur korrekt aufgelösten Rechnung.

Beim Vergleich der in Tabelle 5.4 gegenübergestellten Simulationsparameter fällt auf, daß die Ergebnisse von Rosenhauer mit „Monaco“ auf älterer Rechenteknik mit einer größeren Anzahl Partikel offenbar in etwa 70% der in der hier beschriebenen Rechnung benötigten Zeit gewonnen wurden. Auf den ersten Blick ist das natürlich dadurch zu erklären, daß Rosenhauer weniger als ein Zehntel der in dieser Arbeit durchgeführten Iterationsschritte simuliert hat. Die große Zahl der hier benötigten Iterationen von über 1 Million hat ihre Ursache in zwei Verfahrensunterschieden:

1. Um den enormen statistischen Schwankungen in Achsnähe aufgrund der zwangsläufig geringen Teilchenzahl zu begegnen, wurden für axialsymmetrische Simulationen radiale Gewichtungsfaktoren vorgeschlagen (siehe z. B. [8]). „Monaco“ sieht die Verwendung radialer Gewichtungsfaktoren vor. Durch die vergleichsweise größere Teilchenzahl in der Nähe der Achse sinkt die Anzahl der erforderlichen Stichproben, um auf die selbe statistische Schwankungsbreite zu kommen wie ohne Gewichtungsfaktoren.
2. Der in den Ablauf der Rechnung integrierte automatische Adaptionalgorithmus in LASVEGAS kann eine Zelle in jedem Adaptionsschritt genau einmal teilen. Neben der zwangsläufigen Ausbildung auch sehr spitzwinkliger Zellen hat dieses Verfahren der sukzessiven Bisektion noch einen weiteren Nachteil, der bei Betrachtung von Abb. 5.7 deutlich wird: Es ist immer eine gewisse Anzahl Adaptionsschritte nötig, um eine viel zu große Zelle des Ausgangsgitters an die Lösung anzupassen. Da zwischen den Adaptionen noch Iterationen stattfinden müssen, damit das Strömungsfeld auf die Änderung reagieren kann, führt dieses Verfahren zwangsläufig zu einer wesentlich längeren Gesamtrechnenzeit. Außerdem kann ein lokal zu feines Ausgangsgitter nicht nachträglich vergrößert werden. Wenngleich auf den ersten Blick aufwendiger als eine einfache Zellteilung, würde eine komplette Neuvernetzung (z. B. auf

Grundlage der lokalen freien Weglänge) insgesamt viele Vorteile bringen: Das Gitter konvergiert wesentlich schneller, d. h. es werden weniger Iterationen benötigt. Außerdem läßt sich so nebenbei gewährleisten, daß die Zellen regelmäßiger sind. „Monaco“ nutzt dieses Konzept der separaten, manuellen Adaption. Rosenhauer mußte für seine Rechnungen genau einen Adaptionsschritt ausführen, um ein zufriedenstellendes Gitter zu erhalten.

#### 5.4. Kombination beider Rechnungen

Das Ergebnis einer gekoppelten Simulation soll natürlich physikalisch sinnvoll sein, in der Regel heißt das, die Lösungen der beiden verbundenen Verfahren müssen über die Kopplungsgrenze hinweg stetig und wenigstens näherungsweise differenzierbar sein. Bei Verfahren zur Lösung von Differentialgleichungen können diese Eigenschaften oft durch die Vorgabe spezieller Randbedingungen von vorneherein festgeschrieben werden, für die DSMC-Methode ist das nicht möglich. Es muß also überprüft werden, wie die am Einströmrand des DSMC-Gebietes getroffenen Bedingungen geeignet sind, die Forderung nach Stetigkeit und Differenzierbarkeit zu erfüllen.

Die hier verfolgte Stromab-Kopplung bedeutet in Bezug auf die Festlegung der Randbedingungen, daß der Massen- oder Teilchenfluss aus dem Navier-Stokes-Gebiet gleich dem Teilchenfluß in das DSMC-Gebiet sein soll, siehe auch Gleichung (3.2). Der Kopplungsrand wurde so gelegt, daß entlang dieser Grenze in guter Näherung lokales Gleichgewicht angenommen werden kann. Für die Generierung der Partikel entlang der Kopplungsgrenze ist also eine Vorgabe von Teilchendichte, Temperatur und makroskopischem Geschwindigkeitsvektor erforderlich.

Die am Rand vorgegebene Teilchendichte kann aber in der unmittelbar angrenzenden Zelle nur dann reproduziert werden, wenn die Mehrzahl der Partikel das Rechengebiet nicht anschließend wieder durch die Einströmkante verläßt, wenn also die makroskopische Geschwindigkeit größer ist als die wahrscheinlichste thermische Geschwindigkeit (diese Bedingung ist äquivalent zu  $S_n > 1$ ). Nur dann findet auch der Informationstransport tatsächlich fast ausschließlich stromab statt.

Wesentlich bei der Betrachtung der Flüsse über die Kopplungsgrenze ist, daß die *normale* Geschwindigkeitskomponente über die Grenze hinweg entscheidend für die Teilchenbilanz am Einströmrand ist. Im vorliegenden Fall ist

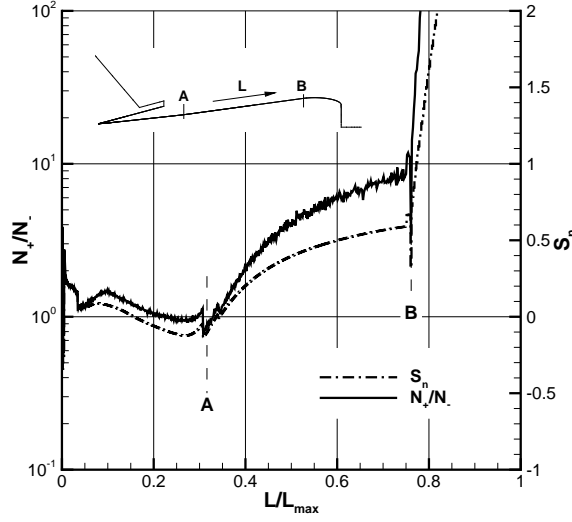


Abbildung 5.9: Teilchenflüsse an der Einströmkante

die Grenze für die Kontinuumsannahme und damit der Einströmrand für die DSMC-Simulation, wie in Abschnitt 5.2 dargelegt, streng nach einem für geeignet befundenen Indikator festgelegt worden. Was aus dieser Anschauung gerechtfertigt erscheint, erweist sich für die Stromab-Kopplung als ungeeignet, da große Teile des so gefundenen Einströmrandes fast parallel zur Expansionsströmung verlaufen. Entsprechend klein ist die Normalgeschwindigkeit. Abbildung 5.9 veranschaulicht diesen Sachverhalt. Die strichpunktierte Linie stellt den Verlauf der normalen molekularen Machzahl  $S_n$  entlang der Randkante dar, es ist deutlich zu sehen, daß knapp 80% der Einströmgrenze unterhalb von  $S_n = 1$  liegen, knapp 20% sind sogar kleiner als  $S_n = 0$ , was faktisch einer dominanten Rückströmung in das Navier-Stokes-Gebiet entspricht. Die durchgezogene Kurve stellt vergleichend dazu das Verhältnis von einströmenden zu ausströmenden Teilchen  $N_+/N_-$  dar, der qualitativ ähnliche Verlauf zeigt die starke Abhängigkeit von der normalen Einströmgeschwindigkeit. Diese ist auch zu erkennen, wenn Gleichung (3.2) mit einer Maxwell-Verteilung ausgewertet wird:

$$\frac{N_+}{A\Delta t} = \frac{n\tilde{c}}{2\sqrt{\pi}} \left( \exp(-S_n^2) + \sqrt{\pi} S_n [1 + \operatorname{erf}(S_n)] \right). \quad (5.2)$$

Aus Abbildung 5.9 läßt sich schließen, daß akzeptable Kontinuität der Lö-

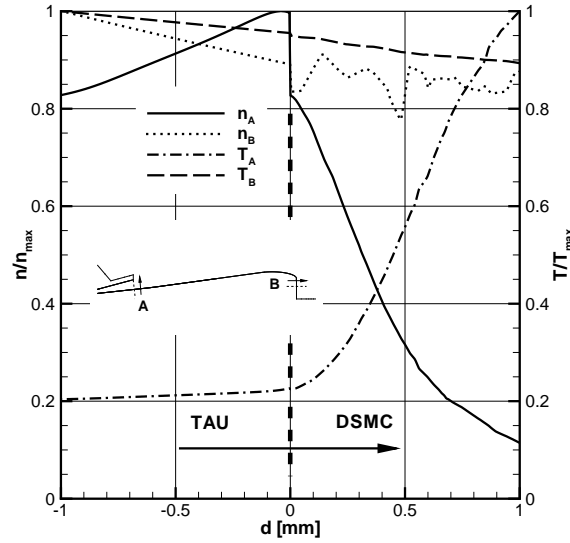


Abbildung 5.10: Verhalten von Teilchendichte  $n$  und Temperatur  $T$  an der Kopplungsgrenze

sung beim Übergang vom Kontinuums- zum DSMC-Gebiet nur für die letzten (stromab gelegenen) 20% der Einströmkante erwartet werden darf. Zur Überprüfung dieser Annahme sind in Abbildung 5.10 Teilchendichte und Temperatur jeweils in zwei Ebenen normal zum Einströmrund dargestellt. Ebene A schneidet die Kopplungsgrenze etwa in Höhe des Düsenaustritts, dort ist  $S_n \approx 0$  (Effusion). Ebene B hingegen liegt auf dem senkrechten Teil der Einströmkante, hier ist  $S_n \approx 2$ .

Die Probleme der hier durchgeführten Kopplung zeigen sich am deutlichsten bei der Betrachtung des Verlaufes der Teilchendichten in den Ebenen A und B in Abbildung 5.10. Anhand der durchgezogenen Linie ist abzulesen, daß die Teilchendichte im DSMC-Gebiet knapp 20% zu niedrig wiedergegeben wird, obwohl die Teilchendichte  $n_A(d = -0 \text{ mm})$ , d. h. im TAU-Gebiet, als Randbedingung vorgegeben wurde. Der Grund für diese Diskrepanz ist, daß etwa genausoviele Teilchen aus- wie einströmen.

Eine andere Problematik offenbart sich bei Betrachtung der Teilchendichte entlang der Ebene B (punktiierte Linie), hier kann man sich gut einen kontinuierlichen Verlauf aus dem Kontinuums- in das DSMC-Gebiet vorstellen, allerdings sind die statistischen Schwankungen aufgrund des geringen Stichprobe-

numfangs in Achsnähe sehr stark (vgl. auch Abbildung 5.8).

Auf die Verläufe der Translationstemperatur entlang beider Ebenen hat die normale Strömungsgeschwindigkeit keinen merklichen Einfluß, die Übergänge sind in beiden Fällen hinreichend glatt. Das ist jedoch auch nicht verwunderlich: Lediglich die Anzahl der tatsächlich ins DSMC-Gebiet eingeschossenen Teilchen ist geringer als erforderlich, für die Ermittlung der Temperatur bedeutet dies nur einen geringeren Stichprobenumfang. Da aber alle Partikel in einer Ebene aus der selben Maxwell-Verteilung generiert wurden, tragen sie auch alle letztlich mit ihrer thermischen Geschwindigkeit dieselbe Information über die makroskopische Temperatur.

Diese Ergebnisse legen nahe, daß die hier behandelte Düsenströmung nicht einwandfrei unter der Voraussetzung einer reinen Stromabkopplung berechnet werden kann, da zwei hier unvereinbare Bedingungen erfüllt werden müßten:

1. Eine Stromab-Kopplung berücksichtigt *per definitionem* nur die Flüsse von einem Gebiet in das andere. Wie oben ausgeführt ist, können die am Übergang von einem Kontinuumslöser zu einem DSMC-Verfahren unweigerlich auftretenden Rückströmungen nur dann vernachlässigt werden, wenn die molekulare Machzahl normal zur Einströmkante größer als eins ist. Der Vektor der makroskopischen Geschwindigkeit bedingt also die Lage der Kopplungsgrenze. In einer Expansionsströmung wäre die nach diesem Kriterium optimale Grenze in der Umgebung der Düsenaustrittsebene zu finden. Betrachtungen zur Gültigkeit der Kontinuumsgleichungen haben mit diesen Vorgaben keinen Raum. In Rosenhauers Arbeit mußte die Kopplungsgrenze aus technischen Gründen senkrecht zur Achse stehen. Dadurch mußte aber auch viel Aufwand in die Berechnung eines Kontinuumsgebietes mit dem DSMC-Verfahren investiert werden.
2. Nach einem anderen Gesichtspunkt ist die Verfahrensgrenze dahin zu legen, wo die Anwendbarkeit einer Methode nicht mehr gewährleistet ist. Hier ist das die über einen Nichtgleichgewichts-Indikator bestimmte Grenze zwischen Navier-Stokes- und DSMC-Verfahren. Die Normalgeschwindigkeit hat nach dieser Methode keinen Einfluß auf die Lage des Kopplungsrandes, daher kann auch nicht sichergestellt werden, daß die Bedingungen für die Gültigkeit einer Stromab-Kopplung auch erfüllt sind. Im Falle einer Düsenexpansion ist die Situation sogar besonders ungünstig: Der Nichtgleichgewichts-Indikator reagiert sehr stark auf die Scherschicht in der Düse, diese liegt aber (definitionsgemäß) auch



parallel zur makroskopischen Strömungsgeschwindigkeit, was wiederum eine denkbar ungünstige Bedingung für eine einseitige Kopplung von Kontinuums- und DSMC-Löser darstellt.

Für zukünftige Arbeiten ist eine stärkere Verfahrenskopplung notwendig, in der die Lösungen für Kontinuums- und DSMC-Gebiet so lange iteriert werden, bis die Strömungsvariablen entlang einer nach Punkt 2 ermittelten Verfahrensgrenze kontinuierlich von einem in das andere Gebiet übergehen. Wie einleitend schon bemerkt, ist die Zahl Veröffentlichungen zur Thematik der beidseitigen Kopplung von Kontinuums- und gaskinetischen Verfahren groß. Dem Inhalt neuester Publikationen zufolge sind grundlegende Verfahrensfragen trotz des großen Interesses an dem Thema noch immer nicht abschließend geklärt [48, 62].

## 6. Strömungsphysikalische Auswertung

Die im vorangegangenen Kapitel im Abschnitt 5.4 diskutierten Unzulänglichkeiten der Stromabkopplung entlang der Kontinuumsgrenze lassen eine strömungsphysikalische Auswertung der Simulationsergebnisse im Nahfeld der Düse wenig sinnvoll erscheinen. Insbesondere der Vergleich mit vorhandenen Ergebnissen aus Pitotdruck-Messungen in der Düsenaustrittsebene muß entfallen, da der dafür benötigte statische Druck direkt proportional zur Teilchendichte ist und deshalb wie diese in der Austrittsebene auch einen deutlichen Sprung über die Kopplungsgrenze aufweist (Abbildung 5.10).

Es zeigt sich jedoch, daß die Unstimmigkeiten an der Kopplungsgrenze keinen merklichen Einfluß auf die Strömungsgrößen im Fernfeld zu haben scheinen, so daß Vergleiche mit experimentellen Ergebnissen dennoch möglich sind. Diese werden in Abschnitt 6.2 diskutiert. Darüber hinaus ist es dennoch möglich, anhand zweier Beispiele Nichtgleichgewichtseffekte in verdünnten Gasströmungen aufzuzeigen, von denen auf den vorangegangenen Seiten so oft die Rede war.

### 6.1. Nichtgleichgewichtseffekte

In dem hier untersuchten Fall einer kalten, chemisch inerten Expansionsströmung äußert sich Nichtgleichgewicht vorwiegend in den Translationsfreiheitsgraden. Da Stickstoff ein zweiatomiges Gas ist, verfügt es auch über innere Freiheitsgrade. Von diesen ist allerdings nur die Rotation angeregt, für eine Anregung der internuklearen Vibration sind die Temperaturen im Strömungsfeld viel zu niedrig.

Infolge der raschen Expansion finden schon bald nicht mehr genügend intermolekulare Stöße statt, um einen Gleichgewichtszustand im Gas herzustellen. Das äußert sich in der Ausbildung „schiefer“ Geschwindigkeitsverteilungsfunktionen und in sogenannten elliptischen Verteilungen, die durch

unterschiedlich breite Verteilungsfunktionen der einzelnen Komponenten der Molekülgeschwindigkeiten ausgezeichnet sind. Dieses Phänomen ist leicht zu veranschaulichen: Weit stromab z.B. entlang der Strahlachse befinden sich nur noch vergleichsweise wenige Teilchen mit einer positiven Geschwindigkeitskomponente quer zur Achse, letztere sind schon vorher im Laufe der Expansion nach außen geflogen. Infolge der geringen Dichte können auch immer weniger Kollisionen stattfinden, die eine Richtungsänderung der Moleküle veranlassen könnten, die Strömung „friert ein“.

### 6.1.1. Anisotropie der Translationstemperatur

Hamel und Willis [28] führten zur Charakterisierung der elliptischen Verteilungsfunktionen hypothetische Temperaturen ein, die sie nach dem oben skizzierten Bild parallele ( $T_{\parallel}$ ) und senkrechte ( $T_{\perp}$ ) Temperaturen nannten. Die Aufspaltung der Translationstemperatur in parallele und senkrechte Temperaturen wurde von Hamel und Willis analytisch für eine sphärische Expansionsströmung untersucht und von Bird [5] mit einem 1D-DSMC-Code berechnet.

Da eine Auswertung der Rechnung mit LASVEGAS entlang der Strahlachse aus praktischen Gründen (hohe statistische Fluktuationen in Achsnähe) keine guten Ergebnisse verspricht, wird die Ausbildung elliptischer Verteilungen entlang einer Stromlinie untersucht. Die Herleitung der dafür nötigen Transformationen ist im Anhang B dargelegt.

Abbildung 6.1 zeigt schließlich den Verlauf von Translations-, paralleler und senkrechter Temperatur entlang einer Stromlinie, wie mit LASVEGAS berechnet. Der Punkt, an dem die Kopplung zwischen TAU und LASVEGAS erfolgte, ist mit **A** gekennzeichnet. Parallel- und Senkrecht-Temperatur laufen noch einige Millimeter bis auf Schwankungen von etwa  $\pm 0,5$  K parallel zur Kurve der Translationstemperatur, bevor  $T_{\parallel}$  einfriert, während  $T_{\perp}$  weiter fällt. Idealerweise sollte  $T_{\perp}$  in der doppelt-logarithmischen Darstellung weiter linear fallen.

Rosenhauer [44] detektiert die Aufspaltung der Translationstemperaturen entlang der Strahlachse bei etwas über  $x = 20$  mm und damit in etwa an der Stelle, die in dieser Arbeit den Übergang zwischen Kontinuums- und DSMC-Gebiet markiert. Die als schon recht vorsichtig angenommene Wahl des Indikators für den Kopplungsrand  $B = 0,03$  ist also für diese Strömung die gerade noch akzeptable Obergrenze. Für künftige Untersuchungen sollte

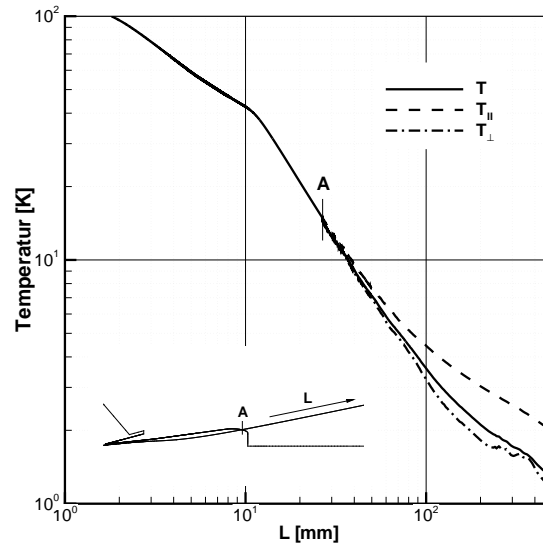


Abbildung 6.1: Temperatur und Anisotropie entlang einer Stromlinie

$B$  noch geringer gewählt werden, um den Beginn translatorischen Nichtgleichgewichts genauer im Rechenggebiet der DSMC-Simulation erfassen zu können. Darüber hinaus scheint es noch notwendig zu sein, einen geeigneten Wert für  $B$  in verschiedenen Strömungssituationen zu ermitteln, um die Allgemeingültigkeit des Indikators zu prüfen. Schließlich liegt schon der hier gewählte Wert deutlich unter den von Garcia *et al.* vorgeschlagenen Grenzen [22, 23].

### 6.1.2. Asymmetrische Verteilungsfunktionen

Da die Maxwell-Verteilung (2.5) die Verteilung der Geschwindigkeitskomponenten im Gleichgewicht wiedergibt, müssen sich Nichtgleichgewichtseffekte in einer Abweichung von der Maxwell-Verteilung äußern. LASVEGAS bietet die Möglichkeit, Geschwindigkeitsverteilungen an beliebigen Punkten im Strömungsfeld während der Simulation zu ermitteln. Die Verteilungen der axialen und radialen Geschwindigkeitskomponenten  $f(v_x)$  und  $f(v_R)$  zweier repräsentativer Punkte sind in Abbildung 6.2 zusammen mit den zugehörigen Gleichgewichtsverteilungen aufgetragen. Letztere sind mit Gleichung

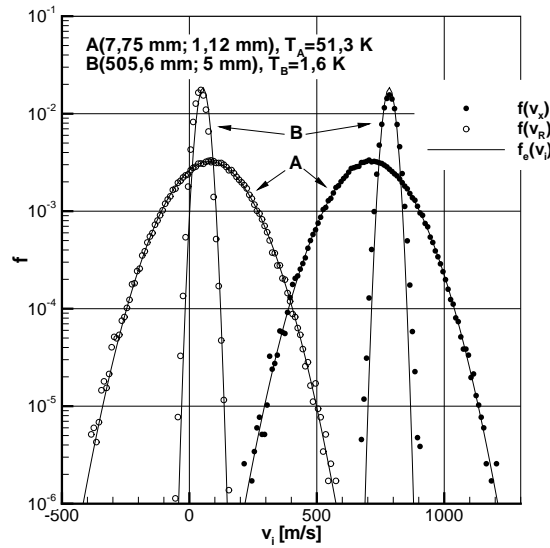


Abbildung 6.2: Verteilungsfunktionen der Geschwindigkeitskomponenten an der Kopplungsgrenze in der Düsenaustrittsebene (A) und in Achsnähe, etwa  $r = 500$  mm vom Düsenaustritt entfernt (B)

(2.5) für die jeweils lokalen Geschwindigkeitskomponenten und Translations-temperaturen ermittelt worden.

Der Punkt A liegt unmittelbar an der Einströmkante und in der Düsenaustrittsebene. Da die Einströmkante mit einem Indikator für Nichtgleichgewicht so bestimmt wurde, daß die einströmenden Teilchen noch gut aus einer Maxwell-Verteilung erzeugt werden können, sollte an dieser Stelle noch eine gute Übereinstimmung zwischen den gesampelten Werten und der berechneten Gleichgewichtsfunktion bestehen. In der Tat ist die Übereinstimmung für den Punkt A in beiden Geschwindigkeitskomponenten wie erwartet sehr gut.

Punkt B liegt etwa  $r = 500$  mm vom Düsenaustritt entfernt, nahe der Symmetrieachse. Aufgrund der deutlich niedrigeren Gesamttemperatur (siehe auch Abbildung 2.2) sind die Verteilungsfunktionen wesentlich schlanker ausgebildet. Hier ist es interessant, sich die systematischen Abweichungen der gesampelten Werte von der zugehörigen Kurve der Maxwell-Verteilung anzuschauen. Für die axiale Geschwindigkeitskomponente liegen die gesampelten Werte außerhalb der Äste der theoretischen Funktion, die Verteilung ist

also in  $x$ -Richtung insgesamt breiter. Wie oben schon zur Anisotropie der Translationstemperatur bemerkt, entspricht die Verbreiterung einer höheren Temperatur in axialer Richtung. Bei der Betrachtung der Verteilung für die radiale Geschwindigkeitskomponente fällt eine leichte Asymmetrie zur mittleren Radialgeschwindigkeit in den gesampelten Daten auf. Nun sind „schiefe“ Verteilungen ebenfalls Ausprägungen von Nichtgleichgewicht, allerdings muß bei der Interpretation dieser Daten beachtet werden, daß der Ort, an dem gesampelt wurde, sehr nahe an der Achse in einem Gebiet mit verhältnismäßig großen Zellen liegt. Außerdem ist der Mittelwert der radialen Geschwindigkeitskomponente schon sehr klein. Es kann also nicht ausgeschlossen werden, daß die beobachtete Asymmetrie womöglich ein Effekt der axialsymmetrischen Simulation ist oder die Unterschiede auf die Interpolation der Werte in der großen Zelle zurückgeführt werden müssen.

## 6.2. Teilchenflüsse

Die Strahlglocke der hier simulierte 0,5-Newton-Düse wurde am DLR in Göttingen umfangreich vermessen, viele Messungen erfolgten dabei mit einer Patterson-Sonde in der Kryo-Vakuumanlage STG. Die hier verwendeten Vergleichsdaten stammen aus der Dissertation von Plähn [42]. Dabei wurden sowohl Angularprofile in konstantem Abstand  $r$  um die Düse gemessen als auch Radialprofile mit konstantem Winkel  $\theta$ .

Die Patterson-Sonde selber ist ein Meßgerät für stark verdünnte Strömungen und besteht aus einem langen, dünnen Röhrchen von etwa 6 mm Durchmesser, an dessen einem Ende eine kleine Öffnung ist. Das andere Ende wird durch ein Druckmeßgerät abgeschlossen. Partikel können nun von außen durch den Schlitz eintreten, gelangen aber aufgrund ihrer thermischen Eigenbewegung schwerer wieder hinaus. Daher aggregiert die Teilchenzahl in der Sonde und es kann ein Druck gemessen werden. Aus diesem Druck kann man unter Kenntnis der Sondereigenschaften und mit einigen Annahmen auf den Teilchenfluss durch die Öffnung schließen. Details zur Bestimmung der Sondencharakteristik und zur Patterson-Sonde selbst sind ebenfalls bei Plähn ausführlich dargelegt.

In Abbildung 6.3 ist das Angularprofil des Teilchenflusses  $\dot{n}$  in 500 mm Entfernung von der Düsenaustrittsöffnung dargestellt, wobei die Messung von Plähn mit den Resultaten der DSMC-Simulationen von Rosenhauer [44]

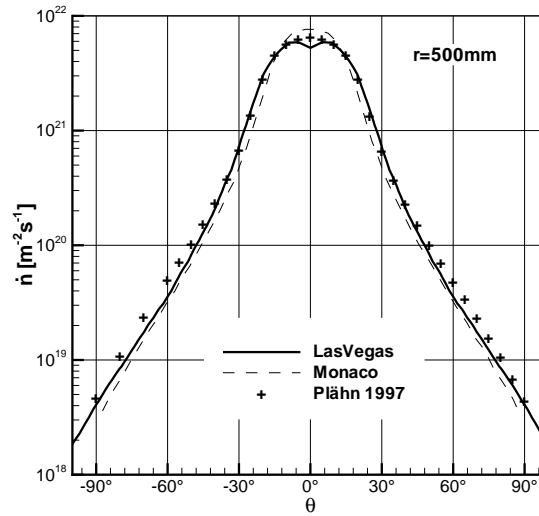


Abbildung 6.3: Angularprofil, Vergleich mit Messungen in der STG [42] und mit „Monaco“ [44]

(„Monaco“) und der vorliegenden Arbeit (LASVEGAS) verglichen wird. Erstaunlicherweise wird das Experiment trotz ungünstiger Randbedingungen von LASVEGAS fast überall besser reproduziert, selbst in den Bereichen betragsmäßig großer Winkel.

Die zugehörigen Teilchenflussmessungen entlang radialer Strahlen in verschiedenen Winkeln sind in Abbildung 6.4 gezeigt. Auch hier stimmen die Ergebnisse der Rechnung in drei Fällen gut mit dem Experiment überein. Die systematische Abweichung für  $\theta = 90^\circ$  wurde auch von Rosenhauer festgestellt, er führt einen gestiegenen Hintergrunddruck in der Vakuumkammer oder den zeitabhängigen Ausgasungsdruck der Patterson-Sonde als mögliche Begründungen für die Diskrepanz an. Ein Vergleich mit der entsprechenden Koordinate aus dem Angularprofil (Abb. 6.3) legt aber nahe, daß in diesem Falle nicht die Rechnungen falsch sind. Durch einen Vergleich des Anstiegs der Geraden (im doppelt-logarithmischen Koordinatensystem) mit späteren Messungen [16] konnte festgestellt werden, daß die DSMC-Rechnungen die erwartete invers-quadratische Abhängigkeit des Teilchenflusses vom Abstand sehr wohl richtig wiedergeben.

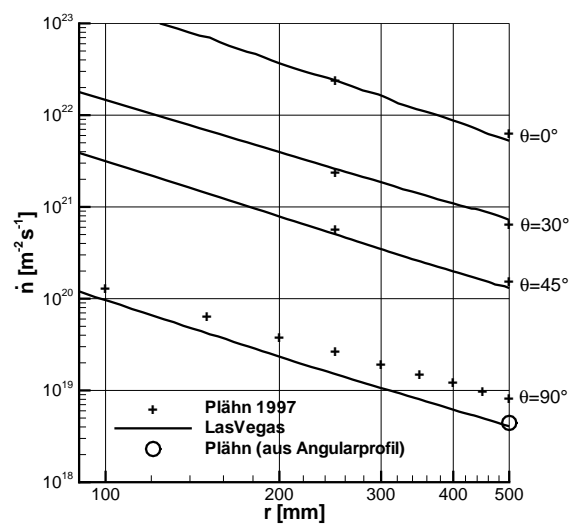


Abbildung 6.4: Radialprofil, Vergleich mit Messungen in der STG [42]



## 7. Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde der am DLR Göttingen entwickelte Navier-Stokes-Löser TAU [3] zusammen mit dem vom Institut für Raumfahrtsysteme der Universität Stuttgart stammenden DSMC-Code LASVEGAS [34] verwendet, um die Expansion einer Stickstoff-Düsenströmung ins Vakuum zu simulieren. Am DLR Göttingen werden seit vielen Jahren aufwendige experimentelle und theoretische Untersuchungen zu dieser Art Strömung durchgeführt, um bessere Kenntnis von der Strahlglockenausbreitung und ihrer Effekte während eines Lageregelungsmanövers von Satelliten im Orbit zu erhalten. Zur Unterstützung dieser Experimente fehlt bisher ein etabliertes numerisches Simulationstool.

Es empfiehlt sich, die verhältnismäßig dichte Düsenkernströmung mit einem Navier-Stokes-Verfahren zu behandeln, da dieser bei vernünftiger Handhabung im Allgemeinen weniger Zeit benötigt, um eine stationäre Lösung zu erzeugen. Die den Navier-Stokes-Gleichungen zugrundeliegenden Annahmen machen sie für Nichtgleichgewichtsströmungen etwa bei niedrigen Dichten untauglich, Gebiete verdünnter Strömung sollen daher mit der etablierten DSMC-Methode berechnet werden.

In einer vorangegangenen Arbeit wurde bereits ein Anlauf zur Stromabkopplung eines Kontinuumsverfahrens mit einem DSMC-Code unternommen [44]. Die damals eingesetzten Verfahren unterlagen allerdings einigen technischen Einschränkungen, insbesondere auf die Lage der Kopplungsgrenze. Daher besteht Interesse an einer erneuten Beschäftigung mit dem Thema.

In dieser Arbeit wurde untersucht, nach welchen Gesichtspunkten eine unidirektionale Kopplung von Kontinuumslösern und gaskinetischen Direktsimulationsverfahren am Beispiel einer Stickstoff-Düsenströmung erfolgen könnte. Die beiden wesentlichen Fragestellungen sind dabei, *wo* die Kopplungsgrenze zu ziehen ist und *wie* der Informationsfluß über diese Grenze realisiert werden kann.

Die Frage nach der Bestimmung der Kopplungsgrenze wird in der Literatur bis heute heftig diskutiert, eine Übersicht zu den derzeit benutzten Indikatoren für Nichtgleichgewicht ist in dieser Arbeit zu finden. Die meisten Autoren lösen das zu berechnende Strömungsfeld zunächst vollständig mit einem Kontinuumsverfahren, dementsprechend sind die gebräuchlichsten Umschaltparameter so angelegt, daß sie aus den Strömungsgrößen einer vorab berechneten Kontinuumslösung ermittelt werden können. Dieses Vorgehen ist umstritten, und auch die in den Veröffentlichungen angegebenen Grenzwerte der Indikatoren variieren erheblich.

Die weitaus meisten in der Literatur beschriebenen Kopplungsverfahren sind auf einen zweiseitigen Informationsfluß angelegt, das heißt, es werden sowohl Randbedingungen für das gaskinetische Verfahren aus dem Kontinuumsverfahren erzeugt, als auch anders herum. Im Wesentlichen haben sich für dieses Problem zwei Vorgehensweisen etabliert, das eine wird zustandsbasierte Kopplung genannt und arbeitet mit überlappenden Rechengittern, um die korrekten Randbedingungen zu gewährleisten. Das andere Verfahren heißt flussbasierte Kopplung, hier wird anhand einer Bilanz der Halbflüsse derjenige Fluß bestimmt, der den Netto-Fluß in stationären Strömungen null werden läßt (Marshak-Bedingung).

Die Erfordernisse der Stromab-Kopplung lassen wenige Möglichkeiten in der Abfolge der Simulation: Zuerst muß eine Lösung mit dem Navier-Stokes-Verfahren bestimmt werden, aus der dann der Kopplungsrand und entlang diesem die Randbedingungen für das DSMC-Verfahren ermittelt werden können. Als Indikator für einsetzendes Nichtgleichgewicht erwies sich der von Garcia und Alder aus der Chapman-Enskog-Entwicklung zur Herleitung der Navier-Stokes-Gleichungen gewonnene Parameter  $B$  [22] als geeignet. Dabei wurde festgestellt, daß praktisch die gesamte Grenzschicht der Düse, die im hier behandelten Fall am Düsenaustritt in etwa halb so dick wie der Radius des Düsenquerschnitts war, nicht mehr befriedigend mit Kontinuumsverfahren behandelt werden kann. Die Kontinuums-grenze fällt also mit dem Beginn der Grenzschicht zusammen und liegt damit über weite Bereiche fast parallel zur Strömungsrichtung.

Die Lage der ermittelten Kontinuums-grenze hat zwangsläufig eine verschwindend geringe makroskopische Strömungsrichtung normal zur Einströmkannte in das DSMC-Gebiet zur Folge, aus Sicht eines mitbewegten Fluidelementes entspricht dies einer Effusion. Konkret bedeutet das für die DSMC-Simulation, daß ein erheblicher Teil der randnahen Simulationsteilchen das Strömungsfeld über die Einströmkannte verlässt. Dadurch entstehen in der

Umgebung des Kopplungsrandes grobe Dichte-Unterschiede zwischen beiden Verfahren.

Es wäre denkbar, die durch den Einstromrand aus dem DSMC-Gebiet heraustretenden Teilchen in einer Flussbilanz zu berücksichtigen und die Anzahl neu zu erzeugender Teilchen aufbauend darauf iterativ zu bestimmen. Es bleibt zu untersuchen, ob diese Maßnahme schließlich eine reine Stromabkopplung mit physikalisch richtigem Ergebnis ermöglichen würde. Andernfalls ist eine Kopplung mit wechselseitigem Informationsaustausch zwischen Kontinuums- und gaskinetischem Verfahren unvermeidbar. Interessanterweise sind die Fehler an der Kopplungsgrenze in hinreichend großer Entfernung von der Düse kaum noch feststellbar, Vergleiche mit experimentellen Ergebnissen zeigten gute Übereinstimmung.

Bei der Arbeit mit LASVEGAS wurde deutlich, daß dieses Verfahren ursprünglich mit Blick auf die Simulation hochenthalper Außenströmungen konzipiert war. Für die Simulation einer kalten Düsenexpansion waren deshalb einige Erweiterungen des Programmes notwendig:

- Bisher war für axialsymmetrische Simulationen nur eine achsparallele Einstromung vorgesehen. Diese Einschränkung wurde aufgehoben.
- LASVEGAS nutzte zur Entscheidung über die Notwendigkeit einer Gitteradaption bislang die mittlere freie Weglänge aus dem Molekülmodell starrer Kugeln. Bei Temperaturen kleiner 300 K ist diese Vereinfachung problematisch, da viele adaptionswürdige Zellen nicht als solche erkannt werden. Eine Umstellung auf das VHS-Modell zeigte bessere Ergebnisse.
- In der geänderten Programmversion werden Zellen nur noch dann adaptiert, wenn sie eine Mindestanzahl Partikel enthalten.
- Die Bestimmung der Position neuer Punkte entlang eines elliptischen Randes war unnötig aufwendig realisiert und produzierte unter bestimmten Umständen fehlerhafte Gitter. Der Algorithmus wurde durch einen wesentlich einfacheren und zudem robusteren ersetzt.
- Das Postprocessing-Werkzeug wurde erweitert, um künftig direkt binäre Dateien für die Visualisierungssoftware „Tecplot“ aus den Ausgabedateien von LASVEGAS erzeugen zu können.

## Ausblick

Weitere Arbeiten zur Kopplung von TAU mit LASVEGAS sollten von vorneherein eine zweiseitige (stromauf/stromab) Verknüpfung der Simulationscodes in Betracht ziehen, da sich zumindest für die Düsenrechnung als eine der Hauptanwendungen eine physikalisch korrekte Stromab-Kopplung im Zuge dieser Arbeit als nicht realisierbar darstellt. Der dafür nötige Aufwand ist allerdings vermutlich groß. Zum Beispiel muß dann geklärt werden, wie anfällig ein Kontinuumsverfahren auf Randbedingungen reagiert, die gewissen statistischen Schwankungen unterliegen.

Nach wie vor sind einige Schwachstellen im DSMC-Code LASVEGAS zu beheben. Eine ist die korrekte Nachbildung der Kontur bei der Adaption von Spline-Kanten, diese werden derzeit nur rudimentär unterstützt. Noch wichtiger allerdings ist die Entwicklung eines Verfahrens zur Reduktion des statistischen Rauschens, wie es besonders für axialsymmetrische Simulationen in Achsnähe dringend erforderlich ist. Denkbar wäre, in Analogie zum *Subcell*-Verfahren nach Bird [8], die unmittelbaren Nachbarn einer schwach besetzten Zelle ebenfalls zur Mittelwertbildung heranzuziehen. Eine andere Möglichkeit ist die Implementierung radialer Gewichtungsfaktoren, wie sie schon lange in der Literatur bekannt sind [6] und zum Beispiel in „Monaco“ Anwendung gefunden haben.

Da sich gezeigt hat, daß das zum Programmpaket LASVEGAS gehörende Verfahren zur Generierung der Rechengitter nur bedingt für Geometrien mit stark variierender Randknotendichte geeignet ist, sind Alternativen anzuraten. Es existieren heute sehr viele schnelle und flexibel zu handhabende Programme, die teilweise sogar frei erhältlich sind. Eine Umstellung auf spezialisierte Software zur Gittererzeugung würde eine stärkere Konzentration auf die Verbesserung der eigentlichen DSMC-Routinen erlauben.

## A. Viskosität

Natürlich müssen numerische Simulationen die im Experiment beobachtete Zähigkeit oder Viskosität des Fluids möglichst gut wiedergeben. Die Viskosität hängt vom Wechselwirkungspotential der Moleküle ab. Es existieren verschiedene Approximationen, diese Wechselwirkung in Abhängigkeit von möglichst wenigen Parametern innerhalb eines möglichst großen Temperaturbereichs möglichst realistisch, nachzubilden. Die Parameter der Modelle werden v. a. durch Anpassung an experimentelle Daten ermittelt.

Im Navier-Stokes-Löser TAU ist die Zähigkeit nach dem bekannten Sutherland-Gesetz modelliert:

$$\frac{\mu}{\mu_S} = \left( \frac{T}{T_S} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{T_S + \text{Su}}{T + \text{Su}}. \quad (\text{A.1})$$

In DSMC-Verfahren wird häufig das *Variable Hard Sphere*-Modell (VHS) verwendet, welches zwar die Annahme isotroper Streuung nach einer Kollision aus dem Modell der starren Kugeln (*Hard Sphere*, HS) übernimmt, den Stoßquerschnitt aber als Funktion der Relativgeschwindigkeit behandelt [7]. Daraus folgt ein Potenzgesetz für die Viskosität im VHS-Modell [19]:

$$\mu(T) = \frac{15}{8} \frac{\sqrt{mk}}{\Gamma(4 - \omega) [(2 - \omega) T_{VHS}]^\omega \sqrt{\pi} d_{VHS}^2} T^{\frac{1}{2} + \omega}. \quad (\text{A.2})$$

Die meisten der in der Literatur angegebenen Parameter der beiden Modelle liefern für Temperaturen um etwa 300 K gute Ergebnisse. Der hier behandelte Fall einer kalten Stickstoff-Expansion mit beheizter Wand umfaßt jedoch den Temperaturbereich von einstelligen Kelvin-Werten bis zur Wandtemperatur von 300 K. Es ist deshalb zu prüfen, wie gut die in TAU und LASVEGAS verwendeten Parameter vorhandene experimentelle Daten im fraglichen Temperaturbereich wiedergeben. Gegebenenfalls müssen neue Referenzwerte ermittelt werden.

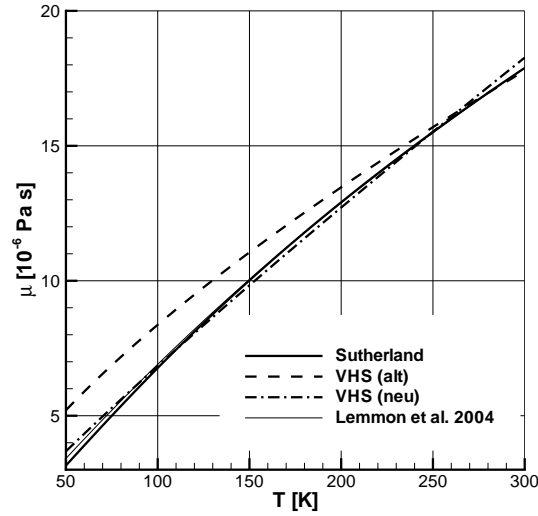


Abbildung A.1: Abhängigkeit der Viskosität von der Temperatur nach VHS- und Sutherland-Modell, Vergleich mit feinerer Näherung aus experimentellen Daten

Eine umfangreiche Sammlung experimentell ermittelter Viskositätsdaten für Stickstoff wird von Lemmon und Jacobsen [37] ausgewertet. Die tiefste Temperatur, die bei den dabei berücksichtigten Messungen bei niedrigen Drücken berücksichtigt wurde, liegt bei 78,6 K. In Ermangelung passenderer Daten werden die Parameter für die oben genannten Viskositätsmodelle mit der von Lemmon und Jacobsen angegebenen Funktion verglichen. Das Ergebnis ist in Abbildung A.1 grafisch dargestellt. Aus der Abbildung A.1 geht hervor, daß das für die TAU-Rechnungen verwendete Sutherland-Gesetz mit den in Tabelle A.1 gelisteten Parametern über weite Bereiche sehr gut mit der Extrapolation der experimentellen Daten übereinstimmt. Das ursprünglich verwendete Modell für die DSMC-Simulation aber ist für den betrachteten Temperaturbereich offensichtlich ungeeignet und erfordert eine Anpassung der Parameter. Diese wurden aus einer Anpassung mit dem bekannten *Least-Squares*-Verfahren ermittelt und sind ebenfalls in Tabelle A.1 zu finden.

Sutherland-Modell		
Referenzviskosität	$\mu_S =$	$1,663 \times 10^{-5} \text{ kg/ms}$
Referenztemperatur	$T_S =$	$273,0 \text{ K}$
Sutherland-Konstante	$Su =$	$107 \text{ K}$
VHS-Modell (alt)		
Referenzdurchmesser	$d_{VHS} =$	$3,975 \times 10^{-10} \text{ m}$
Referenztemperatur	$T_{VHS} =$	$300,0 \text{ K}$
VHS-Exponent	$\omega =$	$0,186$
VHS-Modell (neu)		
Referenzdurchmesser	$d_{VHS} =$	$4,222 \times 10^{-10} \text{ m}$
Referenztemperatur	$T_{VHS} =$	$300,0 \text{ K}$
VHS-Exponent	$\omega =$	$0,394$

Tabelle A.1: Parameter der in Abbildung A.1 dargestellten Viskositätsmodelle

## B. Temperaturanisotropie

In der Literatur wird translatorisches Nichtgleichgewicht oft durch den Vergleich hypothetischer, richtungsbehafteter Temperaturen beschrieben [28, 5]. Im Gleichgewicht gibt es genau eine Temperatur, sie ist gaskinetisch als direkt proportional zur mittleren Translationsenergie definiert, siehe Gleichung (2.11). Der Anschaulichkeit halber können ganz analog und formal „Temperaturkomponenten“ definiert werden, z. B. für die kartesischen Koordinaten  $i \in \{x, y, z\}$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}kT_i &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{m}{2} \left( \langle v_i^2 \rangle - \langle v_i \rangle^2 \right), \\ RT_i &= \langle v_i^2 \rangle - \langle v_i \rangle^2. \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Auf diese Weise werden auch in LASVEGAS Temperaturen  $T_x, T_y, T_z$  berechnet. Die Festlegung auf das kartesische System erfolgt dabei aus rein praktischen Gründen, schließlich liegen auch die Gesamtgeschwindigkeiten für die Teilchen,  $\mathbf{v} = \mathbf{u} + \mathbf{c}$ , in diesem System vor.

Historisch ist es aber gebräuchlicher, die Temperaturen bezogen auf eine Stromlinie als parallele ( $T_{\parallel} \parallel \mathbf{u}$ ) und senkrechte ( $T_{\perp 1} \perp T_{\perp 2} \perp \mathbf{u}$ ) Temperatur anzugeben [28]. Für eindimensionale Betrachtungen und den Sonderfall, daß die Stromlinie mit einer Symmetriachse zusammenfällt, stellt dies kein Problem dar. Axialsymmetrische DSMC-Simulationen kranken aber, werden keine Gegenmaßnahmen wie etwa radiale Gewichtungsfaktoren ergriffen, an einer äußerst geringen Zahl an Simulationspartikeln in Achsnähe, mit entsprechend großen statistischen Schwankungen.

Im Folgenden werden Überlegungen vorgestellt, die eine Ermittlung paralleler und senkrechter Temperaturen entlang einer beliebigen Stromlinie in einer axialsymmetrischen Strömung ermöglichen. Auf dieser Grundlage wurde auch die Abbildung 6.1 erstellt, um Vergleiche mit [44] durchführen zu können.

Analog zu (B.1) wird zunächst eine Paralleltemperatur definiert durch:

$$RT_{\parallel} = \langle v_{\parallel}^2 \rangle - \langle v_{\parallel} \rangle^2. \quad (\text{B.2})$$



Die Bestimmung von  $T_{\parallel}$  erfordert eine Formulierung der Mittelwerte der Gesamtgeschwindigkeiten und deren Quadrate in Richtung der Stromlinie. Da eine Stromlinie eine Integralkurve des Geschwindigkeitsfeldes ist, läßt sich die stromlinienparallele Komponente der Gesamtgeschwindigkeiten mit dem Einheitsvektor in Geschwindigkeitsrichtung  $\mathbf{e}_u = \mathbf{u}/u$  ermitteln:

$$\begin{aligned} v_{\parallel} &= \mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_u, \\ v_{\parallel} &= v_x e_x + v_y e_y + v_z e_z. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Daraus ist leicht das Quadrat von  $v_{\parallel}$  zu bilden. Auch die Mittelwertbildung kann rein formal vollzogen werden:

$$\begin{aligned} v_{\parallel}^2 &= v_x^2 e_x^2 + v_y^2 e_y^2 + v_z^2 e_z^2 + 2(v_x v_y e_x e_y + v_x v_z e_x e_z + v_z v_y e_z e_y), \\ \langle v_{\parallel}^2 \rangle &= \langle v_x^2 \rangle e_x^2 + \langle v_y^2 \rangle e_y^2 + \langle v_z^2 \rangle e_z^2 + \dots \\ &\quad \dots + 2(\langle v_x v_y \rangle e_x e_y + \langle v_x v_z \rangle e_x e_z + \langle v_z v_y \rangle e_z e_y). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Ähnlich ist für den Subtrahenden in (B.2) zu verfahren:

$$\begin{aligned} \langle v_{\parallel} \rangle &= \langle v_x \rangle e_x + \langle v_y \rangle e_y + \langle v_z \rangle e_z, \\ \langle v_{\parallel} \rangle^2 &= \langle v_x \rangle^2 e_x^2 + \langle v_y \rangle^2 e_y^2 + \langle v_z \rangle^2 e_z^2 + \dots \\ &\quad \dots + 2(\langle v_x \rangle \langle v_y \rangle e_x e_y + \langle v_x \rangle \langle v_z \rangle e_x e_z + \langle v_z \rangle \langle v_y \rangle e_z e_y). \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Gleichung (B.5) wird nun von (B.4) subtrahiert und liefert so die rechte Seite von (B.2):

$$\langle v_{\parallel}^2 \rangle - \langle v_{\parallel} \rangle^2 = \sum_{i,j} [(\langle v_i v_j \rangle - \langle v_i \rangle \langle v_j \rangle) e_i e_j]_{i,j \in \{x,y,z\}}. \quad (\text{B.6})$$

Für  $i = j$  können bereits die Formulierungen mit kartesischen Temperaturen (B.1) ersetzt werden. Darüberhinaus enthält (B.6) allerdings bedingt durch die Transformation (B.3) gemischte Terme, hier ist eine Annahme nötig, um eine Aussage über das Verhältnis von  $\langle v_i v_j \rangle$  zu  $\langle v_i \rangle \langle v_j \rangle$  treffen zu können. Es wird angenommen, daß die *Komponenten* der Gesamtgeschwindigkeiten statistisch unabhängig sind und deshalb  $f(\mathbf{v}) = \prod f(v_i)$  gilt. Die Mittelwerte

aus dem Produkt zweier Geschwindigkeiten sind dann:

$$\begin{aligned}
\langle v_i v_j \rangle &= \iiint_{\mathbb{R}^3} v_i v_j f(\mathbf{v}) d\mathbf{v}, \\
&= \iiint_{\mathbb{R}^3} v_i v_j f(v_i) f(v_j) f(v_k) dv_i dv_j dv_k, \\
&= \int_{\mathbb{R}} v_i f(v_i) dv_i \cdot \int_{\mathbb{R}} v_j f(v_j) dv_j \cdot \int_{\mathbb{R}} f(v_k) dv_k,
\end{aligned} \tag{B.7}$$

also

$$\langle v_i v_j \rangle = \langle v_i \rangle \langle v_j \rangle, \quad i \neq j. \tag{B.8}$$

Dadurch verschwinden alle gemischten Terme in (B.6) und die Paralleltemperatur kann aus den kartesischen Temperaturen und den Komponenten des Einheitsvektors in Geschwindigkeitsrichtung berechnet werden:

$$\boxed{T_{\parallel} = T_x e_x^2 + T_y e_y^2 + T_z e_z^2.} \tag{B.9}$$

Ein ähnliches Vorgehen ist für die senkrechten Temperaturen vorstellbar. Allerdings bietet sich ein kürzerer Weg an, der zudem eine Konsistenz in der Definition der Temperaturen gewährleistet. Für die Translationstemperatur muß gelten (Energieerhaltung):

$$T_T \stackrel{\text{def}}{=} \frac{T_x + T_y + T_z}{3} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{T_{\parallel} + T_{\perp 1} + T_{\perp 2}}{3}, \tag{B.10}$$

beziehungsweise

$$T_{\perp 1} + T_{\perp 2} = 3T_T - T_{\parallel}. \tag{B.11}$$

Um die Gleichungen zu schließen, ist noch eine Aussage über die senkrechten Temperaturen nötig. Im hier behandelten Fall einer axialsymmetrischen Strömung ( $e_z = 0$ ) ist anschaulich klar, daß

$$T_{\perp 2} \equiv T_z.$$

Damit vereinfachen sich (B.9) und (B.10) und  $T_{\perp}$  kann bestimmt werden:

$$\boxed{T_{\perp} = T_x + T_y - T_{\parallel}.} \tag{B.12}$$

## C. Formeln und Abschätzungen

Die folgenden Formeln sind für überschlägige Rechnungen oft nützlich:

**Mittlere freie Weglänge** Für ein einfaches Gas (starre Kugeln) im Gleichgewicht:

$$\lambda_e = \frac{1}{\sqrt{2} \cdot \pi d^2 n}. \quad (\text{C.1})$$

**Wärmeleitfähigkeit** Die Chapman-Enskog-Entwicklung liefert eine erste Näherung für die Wärmeleitfähigkeit  $h$  [8]:

$$h = \frac{15}{4} \frac{k}{m} \mu. \quad (\text{C.2})$$

**Viskosität** für ein einfaches Billardkugel-Gas:

$$\mu = \frac{5m}{16d^2} \sqrt{\frac{RT}{\pi}}. \quad (\text{C.3})$$

mit (C.1):

$$\mu = \frac{5\pi}{32} \rho \langle c \rangle \lambda_e. \quad (\text{C.4})$$

## Literaturverzeichnis

- [1] AKTAS, O. und N. R. ALURU: *A combined continuum/DSMC technique for multiscale analysis of microfluidic filters*. Journal of Computational Physics, 178:342–372, 2002.
- [2] ANDERSON, J. D.: *Computational Fluid Dynamics*. McGraw-Hill, 1995.
- [3] ANONYMUS: *Technical Documentation of the DLR TAU-Code*. Techn. Ber. IB 123-2004/00, DLR Institut für Aerodynamik und Strömungstechnik Braunschweig, Göttingen, 2004.
- [4] BIRD, G. A.: *Approach to Translational Equilibrium in a Rigid Sphere Gas*. Physics of Fluids, 6:1518, 1963.
- [5] BIRD, G. A.: *Breakdown of Translational and Rotational Equilibrium in Gaseous Expansions*. AIAA Journal, 8(11):1998–2003, 1970.
- [6] BIRD, G. A.: *Molecular Gas Dynamics*. Clarendon Press, Oxford, 1976.
- [7] BIRD, G. A.: *Monte-Carlo simulation in an engineering context*. In: *Rarefied gas dynamics*, Nr. 12, Charlottesville, 1980.
- [8] BIRD, G. A.: *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford University Press, 1994.
- [9] BIRD, G. A.: *Recent Advances and Current Challenges for DSMC*. Computers and Mathematics with Applications, 35:1–14, 1998.
- [10] BOETTCHER, R.-D. und H. LEGGE: *A Study of Rocket Exhaust Plumes and Impingement Effects on Spacecraft Surfaces, II. Plume Profile Analysis, Part 1: Continuum Plume Modeling*. IB 251-80 A 29, DFVLR, Göttingen, 1980.
- [11] BOYD, I. D.: *Predicting Breakdown of the Continuum Equations Under Rarefied Flow Conditions*. In: KETSDEVER, A. D. und E. P. MUNTZ (Hrsg.): *Rarefied Gas Dynamics: 23rd International Symposium*, S. 899–906. American Institute of Physics, 2003.

- [12] CAMBEROS, J. A., C. R. SCHROCK, R. J. McMULLAN und R. D. BRANAM: *Development of continuum onset criteria with direct simulation Monte-Carlo using Boltzmann's H-theorem: Review and vision*. In: *9th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference*, AIAA Paper 2006-2942, San Francisco, US-CA, June 2006.
- [13] CERCIGNANI, C.: *Theory and Application of the Boltzmann Equation*. Scottish Academic Press, 1975.
- [14] CHEN, P.-H., I. D. BOYD und J. A. CAMBEROS: *Assessment of Entropy Generation Rate as a Predictor of Continuum Breakdown*. In: *36th Thermophysics Conference*, Nr. AIAA 2003-3783, 2003.
- [15] DETTLEFF, G. und C. DANKERT: *Studies on Rocket Exhaust Plumes and Impingement Effects Related to the Columbus Space Station Programme. WP3: Experimental Study of the Boundary Layer Expansion Region in the Plume*. Techn. Ber. IB 222-88 A 14, DFVLR, Göttingen, Jun. 1988.
- [16] DETTLEFF, G. und A. KESTING: *Plume Characterisation Testing of European Thrusters*. IB 224-2003 A 06, DLR, Göttingen, 2003. WP2: Investigation of Backflow and Rarefaction Effects.
- [17] DETTLEFF, G. und K. PLÄHN: *Initial Experimental Results from the New DLR-High Vacuum Plume Test Facility STG*. In: *33rd Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Nr. AIAA 97-3297, Seattle, 1997.
- [18] DUTTWEILER, C. R.: *Development and Parallelization of a Hybrid Particle/Continuum Method for Simulating Rarefied Flow*. Doktorarbeit, Stanford University, 1998.
- [19] EGGERS, J.: *Entwicklung eines Direktsimulationsverfahrens und dessen Kopplung mit Kontinuumsverfahren*. Doktorarbeit, RWTH Aachen, 1994.
- [20] FAN, J. und C. SHEN: *Statistical Simulation of Low-Speed Rarefied Gas Flows*. Journal of Computational Physics, 167:393–412, 2001.
- [21] FROHN, A.: *Einführung in die kinetische Gastheorie*. AULA-Verlag Wiesbaden, 2. Aufl., 1988.
- [22] GARCIA, A. L. und B. J. ALDER: *Generation of the Chapman-Enskog Distribution*. Journal of Computational Physics, 140:66–80, 1998.

- [23] GARCIA, A. L., J. B. BELL, W. Y. CRUTCHFIELD und B. J. ALDER: *Adaptive mesh and algorithm refinement using direct simulation Monte Carlo*. Journal of Computational Physics, 154:134–155, 1999.
- [24] GEORGE, J. D. und I. D. BOYD: *Simulation of nozzle plume flows using a combined CFD-DSMC approach*. In: *33rd Thermophysics Conference*, AIAA Paper 1999-3454. June, Norfolk, US-VA 1999.
- [25] GILMORE, M. R., M. A. GALLIS und J. K. HARVEY: *Breakdown of continuum solvers in rapidly expanding flows*. In: *30th AIAA Thermophysics Conference*, AIAA Paper 1995-2134, San Diego, US-CA, Juni 1995.
- [26] GOMBOSI, T. I.: *Gaskinetic Theory*. Cambridge Atmospheric and Space Science Series. Cambridge University Press, 1994.
- [27] GRAD, H.: *On the Kinetic Theory of Rarefied Gases*. Communications on Pure and Applied Mathematics, 2:331–407, 1949.
- [28] HAMEL, B. B. und R. D. WILLIS: *Kinetic Theory of Source Flow Expansion with Application to the Free Jet*. Physics of Fluids, 9(5):829–841, 1966.
- [29] HASH, D. B. und H. A. HASSAN: *Assessment of schemes for coupling Monte Carlo and Navier-Stokes solution methods*. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 10(2):242–249, April-June 1996.
- [30] HASH, D. B. und H. A. HASSAN: *A decoupled DSMC/Navier-Stokes analysis of a transitional flow experiment*. In: *34th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, AIAA Paper 1996-0353, Reno, US-NV, January 1996.
- [31] HASH, D. B. und H. A. HASSAN: *Two-Dimensional Coupling Issues of Hybrid DSMC/Navier-Stokes Solvers*. In: *32nd Thermophysics Conference*, Nr. 97-2507, S. 9, Atlanta, 1997.
- [32] HÄNEL, D.: *Molekulare Gasdynamik*. Springer, 2004.
- [33] IVANOV, M. S. und S. F. GIMELSHEIN: *Computational Hypersonic Rarefied Flow*. Annual Review of Fluid Mechanics, 30:469–505, 1998.
- [34] LAUX, M.: *Direkte Simulation verdünnter, reagierender Strömungen*. Doktorarbeit, Institut für Raumfahrtsysteme, Universität Stuttgart, 1996.

- [35] LAUX, M.: *Optimization and Parallelization of the DSMC Method on Unstructured Grids*. In: *32nd Thermophysics Conference*, Nr. AIAA 97-2512, Atlanta, 1997.
- [36] LAUX, M.: *Local Time Stepping with Automatic Adaptation for the DSMC Method*. In: *7th Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference*, Nr. AIAA 98-2670, Albuquerque, 1998.
- [37] LEMMON, E. W. und R. T. JACOBSEN: *Viscosity and Thermal Conductivity Equations for Nitrogen, Oxygen, Argon, and Air*. International Journal of Thermophysics, 25(1):21–69, Jan. 2004.
- [38] MACROSSAN, M. N.: *Scaling Parameters for Hypersonic Flow: Correlation of Sphere Drag Data*. In: *25th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, St. Petersburg, Russia, Jul. 2006.
- [39] MARSHAK, R. E.: *Note on the Spherical Harmonic Method as Applied to the Milne Problem for a Sphere*. Physical Review, 71:443–446, 1947.
- [40] ORAN, E. S., C. K. OH und B. Z. CYBYK: *Direct Simulation Monte Carlo: Recent Advances and Applications*. Annual Review of Fluid Mechanics, 30:403–41, 1998.
- [41] PATTERSON, G. N.: *Molecular Flow of Gases*. Wiley, 1956.
- [42] PLÄHN, K.: *Experimentelle Untersuchung und Modellierung von Abgasstrahlen aus Kleintriebwerken in der Kryo-Vakuum-Anlage STG*. Doktorarbeit, Universität Hannover, 1999. Forschungsbericht 1999-39.
- [43] PRASANTH, P. S. und J. K. KAKKASSERY: *Direct simulation Monte Carlo (DSMC): A numerical method for transition-regime flows — A review*. Journal of the Indian Institute of Science, 86:169–192, 2006.
- [44] ROSENHAUER, M.: *Kopplung von Navier-Stokes- und Direktsimulationsverfahren in Düsenfreistrahlen*. Doktorarbeit, RWTH Aachen, 2002.
- [45] SCHAAF, S. A. und P. L. CHAMBRÉ: *Flow of Rarefied gases*. Princeton University Press, 1961.
- [46] SCHROCK, C. R.: *Entropy Generation as a Means of Examining Continuum Breakdown*. Diplomarbeit, Airforce Institute of Technology, March 2005.

- [47] SCHROCK, C. R., R. J. McMULLAN und J. A. CAMBEROS: *Calculation of Entropy Generation Rates via DSMC with Application to Continuum/Equilibrium Onset*. In: *38th AIAA Thermophysics Conference*, Nr. AIAA 2005-4830, 2005.
- [48] SCHWARTZENTRUBER, T. E., I. D. BOYD, und L. C. SCALABRIN: *A modular particle-continuum numerical method for hypersonic non-equilibrium gas flows*. *Journal of Computational Physics*, in press, 2007.
- [49] SCHWARTZENTRUBER, T. E. und I. D. BOYD: *A hybrid particle-continuum method applied to shock waves*. *Journal of Computational Physics*, 215:402 – 416, 2006.
- [50] SHEN, C.: *Rarefied Gas Dynamics*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2005.
- [51] SMOLDEREN, J. J.: *The Evolution of the Equations of gas Flow at Low Density*. In: KÜCHEMANN, D. und L. H. G. STERNE (Hrsg.): *Progress in Aeronautical Sciences*, Bd. 6, S. 1–132. Pergamon Press, 1965.
- [52] SUN, Q., I. D. BOYD und G. V. CANDLER: *A hybrid continuum/particle approach for modeling subsonic, rarefied gas flows*. *Journal of Computational Physics*, 194:256–277, 2004.
- [53] TIWARI, S.: *Coupling of the Boltzmann and Euler equations with automatic domain decomposition*. *Journal of Computational Physics*, 144:710–726, 1998.
- [54] VINCENTI, W. G. und C. H. KRUGER: *Introduction to physical gas dynamics*. Robert E. Krieger Publishing Company, 2. Aufl., 1986.
- [55] VOJTA, G. und M. VOJTA: *Teubner-Taschenbuch der statistischen Physik*. B. G. Teubner, 2000.
- [56] WADSWORTH, D. C. und D. A. ERWIN: *One-Dimensional Hybrid Continuum/Particle Simulation Approach for Rarefied Hypersonic Flows*. In: *AIAA/ASME 5th Joint Thermophysics and heat Transfer Conference*, Nr. AIAA 90-1690, 1990.
- [57] WADSWORTH, D. C. und D. A. ERWIN: *Two-Dimensional Hybrid Continuum/Particle Approach for Rarefied Flows*. In: *AIAA 23rd Plasmadynamics and Lasers Conference*, Nr. AIAA 92-2975, 1992.



- [58] WAGNER, W.: *A convergence proof for Bird's direct simulation Monte Carlo method for the Boltzmann equation*. Journal of Statistical Physics, 66(3/4):1011–1044, 1992.
- [59] WANG, W.-L. und I. D. BOYD: *Continuum breakdown in hypersonic viscous flows*. In: *40th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, AIAA Paper 2002-0651, Reno, US-NV, Januar 2002.
- [60] WANG, W.-L. und I. D. BOYD: *Hybrid DSMC-CFD simulations of hypersonic flow over sharp and blunted bodies*. In: *36th AIAA Thermophysics Conference*, AIAA Paper 2003-3644, Orlando, US-FL, Juni 2003.
- [61] WANG, W.-L., Q. SUN und I. D. BOYD: *Towards development of a hybrid DSMC-CFD method for simulating hypersonic interacting flows*. In: *8th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference*, AIAA Paper 2002-3099, St. Louis, US-MO, Juni 2002.
- [62] WU, J.-S., Y.-Y. LIAN, G. CHENG, R. KOOMULLIL und K.-C. TSENG: *Development and verification of a coupled DSMC-NS scheme using unstructured mesh*. Journal of Computational Physics, 219:579–607, 2006.
- [63] WU, Z.-N., S.-S. XU, B. GAO und L.-S. ZHUANG: *Review of numerical computation of compressible flows with artificial interfaces*. Computers and Fluids, 36:1657–1679, Mar. 2007.