

LESEPROBE • MASTERARBEIT

## **Kapitel 3**

### **Simulationsaufbau**

Numerische Strömungssimulation der  
Verdampfung von CO<sub>2</sub> in einem vertikalen  
Rohr mit Ansys® Fluent®

Kevin Nekkah

Masterstudiengang Produktentwicklung und Simulation

Fachhochschule Dortmund, 2023

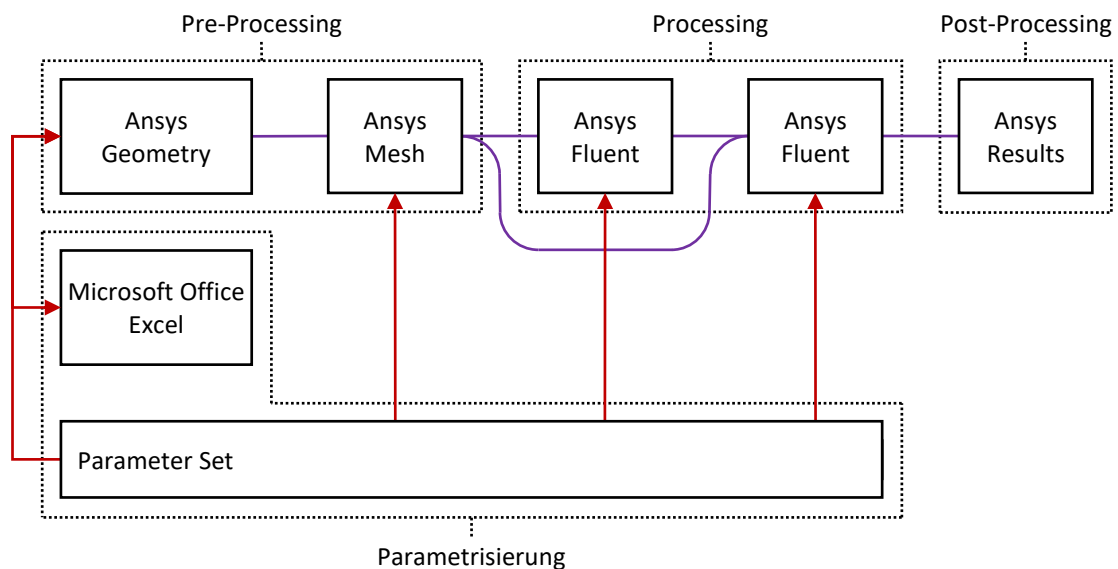
Auszug aus der Originalarbeit, Seiten 42 bis 59

[www.kevinnekkah.com](http://www.kevinnekkah.com)

### 3 Simulationsaufbau

Die Simulation wird in Ansys Workbench durchgeführt und besteht aus drei wesentlichen Abschnitten: *Pre-Processing*, *Processing* und *Post-Processing*. Zusätzlich ist ein vierter Abschnitt integriert, der zur Parametrisierung der Simulation verwendet wird. Im *Pre-Processing* wird die Geometrie des Modells entworfen und das Berechnungsnetz erstellt, mit dem das Strömungsgebiet diskretisiert wird. Das *Processing* besteht aus zwei aufeinanderfolgenden, nahezu identischen CFD-Simulationen. In der ersten Simulation wird die Strömung initialisiert, jedoch ohne dem System Wärme zuzuführen. Dadurch werden die Anfangsbedingungen für die Strömung festgelegt. In der zweiten Simulation wird der zuvor initialisierten Strömung Wärme zugeführt, wodurch der eigentliche Verdampfungsprozess simuliert wird. Im *Post-Processing* werden die Ergebnisse der Simulation ausgewertet und Rückschlüsse auf den Verdampfungsprozess gezogen. Im Parameterbereich werden die Parameter abschnittsübergreifend verknüpft und mit Werten belegt.

Abbildung 3-1 zeigt den schematischen Aufbau der Simulation in Ansys Workbench. Die violette Linie stellt den Datenpfad dar. Die roten Pfeile stellen die einzelnen Parameterpfade und ihre Fließrichtungen dar.



**Abbildung 3-1** Schematischer Aufbau der Simulation in Ansys Workbench

#### 3.1 Ansys Geometry

Die in der Simulation verwendete Geometrie basiert auf einem stark vereinfachten U-Rohrbündel-Wärmetauscher und stellt ein einfaches vertikales Rohr dar, in das das Kohlendioxid flüssig eintritt und gasförmig austritt. Das Rohr ist in drei Segmente unterteilt:

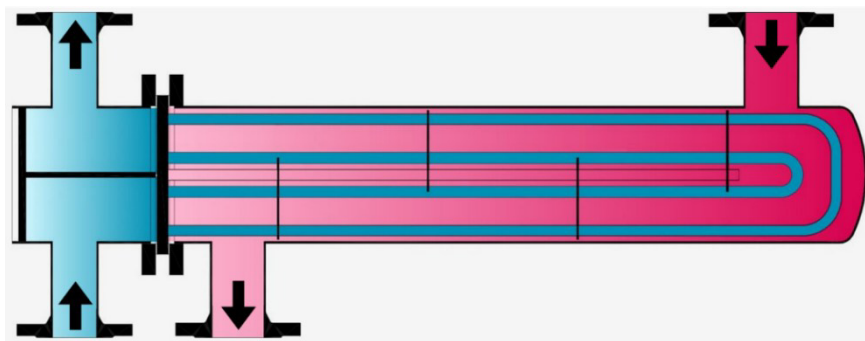
- Einlass,
- Verdampfer und

- Auslass.

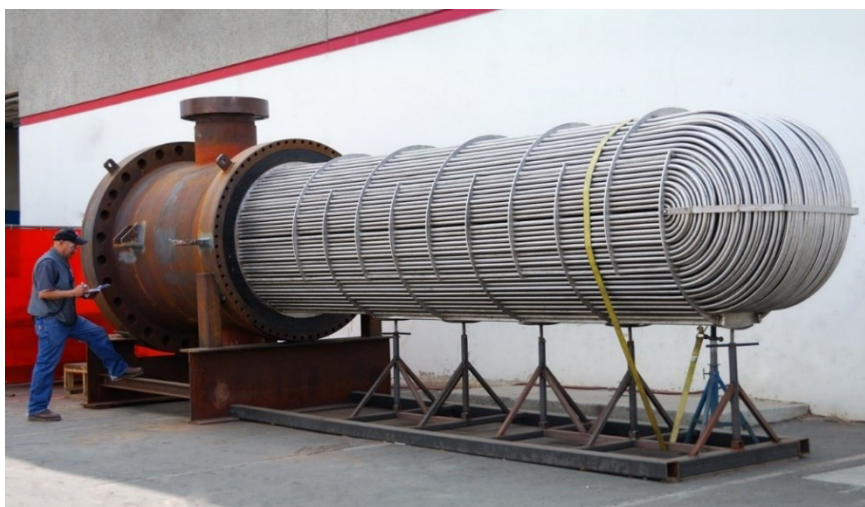
Am Einlass tritt die Strömung in das Rohr ein und bildet sich vollständig aus. Im Verdampfer wird das Kohlendioxid durch Wärmezufuhr verdampft und stellt somit den zentralen Bereich dar, der in der Simulation untersucht wird. Am Auslass tritt die Strömung aus dem Rohr aus, wobei es aufgrund von Rückströmungen zu leichten Turbulenzeffekten kommt.

Die Strömung ist aufwärtsgerichtet, Ein- und Auslass sind adiabat und das Rohr ist gerade, so dass mögliche Einflüsse auf die Strömung ausgeschlossen sind. Auf die Modellierung von Konstruktionsmerkmalen wie Schweißnähten, Anschlussflanschen oder Dichtungen wird verzichtet.

Abbildung 3-2 zeigt eine Prinzipdarstellung eines U-Rohrbündel-Wärmetauschers. Das Kohlendioxid ist blau und das wärmeabgebende Fluid rot dargestellt. Abbildung 3-3 zeigt einen solchen U-Rohrbündel-Wärmeübertrager im geöffneten Zustand. Auffällig sind nicht nur die Abmessungen der Anlage und die U-förmigen Rohre, sondern auch die Umlenkbleche, die zur Umlenkung des wärmeabgebenden Fluids, aber auch zur Versteifung der Gesamtkonstruktion dienen.



**Abbildung 3-2** Prinzipdarstellung eines U-Rohrbündel-Wärmetauschers, überarbeitete Darstellung nach [29]



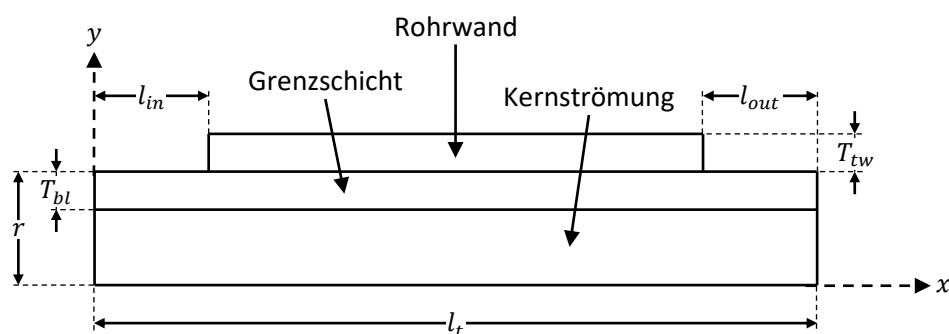
**Abbildung 3-3** Offener U-Rohrbündel-Wärmetauscher der Firma TITAN Metall Fabricators, Inc. [30]

Aufgrund der Achsensymmetrie des Rohres und der in axialer Richtung wirkenden Schwerkraft kann die Simulation in 2D achsensymmetrisch durchgeführt werden. Dadurch wird nicht nur die Modellierung vereinfacht, sondern auch der spätere Rechenaufwand und die damit verbundene Rechenzeit drastisch reduziert. Dies ist darauf zurückzuführen, dass bei der 2D-Modellierung im Vergleich zur 3D-Modellierung wesentlich weniger Knoten/Elemente benötigt werden.

Durch die vorhandene Symmetrie genügt es, die rotationssymmetrische Hälfte des Querschnitts zu skizzieren. Da Ansys Fluent lediglich die x-Achse als Symmetrieachse für 2D-Berechnungen zulässt, muss die Geometrie der vertikalen Rohrströmung entsprechend um die x-Achse skizziert werden. Dies bedeutet unter anderem, dass die Höhe und die Erdbeschleunigung entlang der x-Achse verlaufen und nicht entlang der z-Achse, was im Folgenden berücksichtigt werden muss.

Die Skizze wird nicht, wie bei rotationssymmetrischen 3D-Teilen üblich, mit dem *Revolve-Feature* um die Rotationsachse gedreht. Stattdessen wird aus der Skizze eine infinitesimal dünne Fläche erzeugt. Zur Abgrenzung der Kernströmung und der Grenzschicht wird die so entstandene Fläche durch eine zweite Skizze, bestehend aus einer Linie, durchschnitten. Schließlich wird aus einer dritten Skizze, die ebenfalls aus einer Linie besteht, ein negativer *Extrude* erzeugt, der die Fläche in zwei *Parts* teilt. Der größere *Part* stellt die Strömung dar und wird als *Fluid* definiert. Der kleinere *Part* stellt die Rohrwand dar und wird als *Solid* definiert. Die Bemaßung wird parametrisiert, sodass sie später über ein Parameter-Tool gesteuert werden kann.

Abbildung 3-4 stellt die erzeugte Geometrie schematisch dar. Es ist zu erkennen, dass die Geometrie aus *Solid* und *Fluid* besteht und dass das *Fluid* in Kernströmung und Grenzschicht aufgeteilt ist. Die in der Geometrie implementierten Parameter sind in Tabelle 3-1 aufgeführt.



**Abbildung 3-4** Schematische Darstellung der erzeugten Geometrie

**Tabelle 3-1** Die in der Geometrie implementierten Parameter

| ID | Parameter Name                  | Zeichen   |
|----|---------------------------------|-----------|
| P1 | Length_Total                    | $l_t$     |
| P2 | Length_Inlet                    | $l_{in}$  |
| P3 | Length_Outlet                   | $l_{out}$ |
| P4 | Radius                          | $r$       |
| P5 | Thickness_of_the_Boundary_Layer | $T_{bl}$  |
| P6 | Thickness_of_the_Tube_Wall      | $T_{tw}$  |

[28] (Kap. 44.3.), [29], [30]

### 3.2 Ansys Mesh

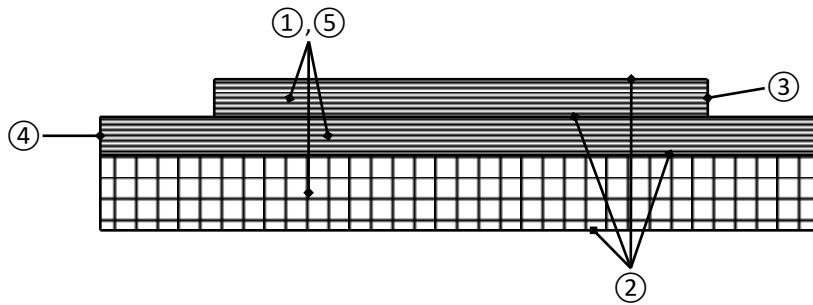
Für die Simulation wird ein strukturiertes Netz bestehend aus Quadraten erzeugt. Dies erfolgt in der Kernströmung durch Vorgabe der Größe der Netzelemente unter *Mesh* sowie durch Einfügen eines *Edge Sizings* vom Typ *Element Size* an den horizontalen Modellrändern, d. h. am Außen- und Innenradius sowie an der Rohrmittellinie.

Um die Grenzschicht fehlerfrei zu erfassen, muss das Berechnungsnetz von innen nach außen gleichmäßig verfeinert werden. Ziel ist es, dass die äußerste Randschicht eine bestimmte maximale Dicke unterschreitet, so dass der vorgegebene dimensionslose Wandabstand ( $Y^+$ ) erreicht wird. Dies wird durch Einfügen eines zweiten *Edge Sizings*, diesmal vom Typ *Number of Division* mit *Bias Factor*, erreicht.

Zur Vermeidung von zu großen Sprüngen zwischen den einzelnen Elementen der Grenzschicht und der Rohrwand wird die innerste Elementschicht der Wand so fein wie die zweitäußerste Schicht der Grenzschicht gewählt. Damit die Anzahl der Elemente in der Rohrwand möglichst klein bleibt, werden die Elemente von innen nach außen immer gröber ausgelegt. Wie bei der Grenzschicht wird dies durch Einfügen eines *Edge Sizings* vom Typ *Number of Division* mit *Bias Factor* realisiert.

Um schließlich ein strukturiertes *Mesh* zu gewährleisten, wird *Face Meshing* mit aktiviertem *Mapped Mesh* und der *Quadrilateral*-Methode auf das gesamte Modell angewendet.

Abbildung 3-5 und Tabelle 3-2 zeigen, an welchen Stellen die *Edge Sizings* und das *Face Meshing* angebracht sind und deren Einstellungen.



**Abbildung 3-5** Erstellte *Edge Sizings* und *Face Meshing* in Ansys Mesh

**Tabelle 3-2** Wesentliche Netzeinstellungen in Ansys Mesh

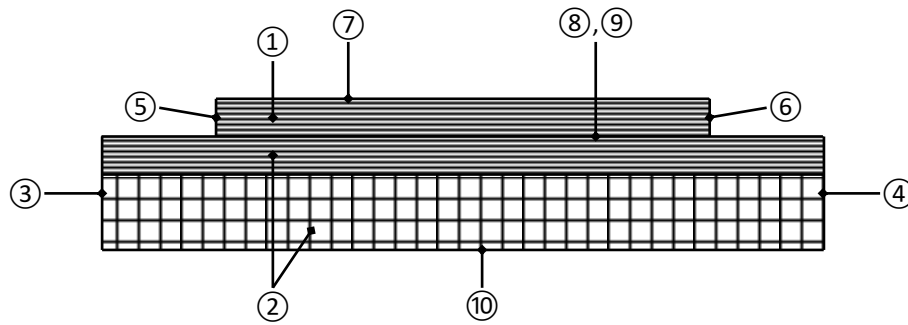
| Nr. | Bezeichnung                | Typ          | ID Element Size /<br>ID Number of Division | ID Bias<br>Factor |
|-----|----------------------------|--------------|--------------------------------------------|-------------------|
| ①   | General Mesh               | Mesh         | P7                                         | –                 |
| ②   | Edge Sizing Horizontal     | Edge Sizing  | P8                                         | –                 |
| ③   | Edge Sizing Tube           | Edge Sizing  | P9                                         | P10               |
| ④   | Edge Sizing Boundary Layer | Edge Sizing  | P11                                        | P12               |
| ⑤   | Face Meshing               | Face Meshing | –                                          | –                 |

Damit das Netz variabel ist, wird es mit Hilfe von Parametern ausgelegt, die später mit dem bereits erwähnten *Parameter-Tool* verwaltet werden. Eine detaillierte Liste der implementierten Parameter ist in Tabelle 3-3 zu finden.

**Tabelle 3-3** Im Berechnungsnetz implementierte Parameter

| ID  | Parametername                                          | Zeichen    |
|-----|--------------------------------------------------------|------------|
| P7  | Mesh_Element_Size                                      | $s$        |
| P8  | Edge_Sizing                                            | $s$        |
| P9  | Number_of_Layers_in_the_Tube_Wall                      | $n_{tw}$   |
| P10 | Growth_Factor_between_the_Layers_of_Tube_the_Wall      | $r_{t,tw}$ |
| P11 | Number_of_Sublayers_of_the_Boundary_Layer              | $n_{bl}$   |
| P12 | Growth_Factor_between_the_Layers_of_the_Boundary_Layer | $r_{t,bl}$ |

Abschließend werden *Named Selections* erzeugt, wodurch die Konfiguration in Ansys Fluent erheblich vereinfacht wird. Die *Named Selections* sind in Abbildung 3-6 dargestellt, Tabelle 3-4 enthält die zugehörige Legende.



**Abbildung 3-6** Übersicht der in Ansys Mesh erstellten *Named Selections*

**Tabelle 3-4** Legende für die in Ansys Mesh erstellten *Named Selections*

| Nr. | Bezeichnung     | Nr. | Bezeichnung     |
|-----|-----------------|-----|-----------------|
| ①   | Tube            | ②   | Fluid           |
| ③   | Inlet           | ④   | Outlet          |
| ⑤   | Wall_Tube_Lower | ⑥   | Wall_Tube_Upper |
| ⑦   | Wall_Tube_Outer | ⑧   | Wall_Tube_Inner |
| ⑨   | Wall_Fluid      | ⑩   | Axis            |

### 3.3 Ansys Fluent

Nach Durchführung allgemeiner Einstellungen in Ansys Fluent Launcher werden zunächst die Materialien in Ansys Fluent zugewiesen, wobei Kohlendioxid mit Hilfe einer RGP-Tabelle definiert wird. Anschließend werden die in der Simulation verwendeten Parameter sowie die für die Randbedingungen notwendigen *Report Definitions* angelegt. Danach erfolgt die eigentliche Konfiguration der Simulation. Detaillierte Angaben zur Konfiguration der einzelnen Modellparameter finden sich im Anhang in der Datei „Modellbildung und Algorithmen“.

#### 3.3.1 Ansys Fluent Launcher

Beim ersten Start und bei jedem Start von Ansys Fluent nach einem Update der *Upstream*-Komponenten wird Ansys Fluent Launcher automatisch geöffnet, ansonsten muss Ansys Fluent explizit über *Setup* gestartet werden. In Ansys Fluent Launcher sind zunächst *Dimensions* und *Double Precision* von Bedeutung.

Unter *Dimensions* wird festgelegt, ob die Simulation zwei- oder dreidimensional berechnet wird. Da die Geometrie als zweidimensionales Modell definiert wurde, ist sowohl für Ansys Mesh als auch für Ansys Fluent 2D vorgegeben.

Die Aktivierung von *Double Precision* erhöht die Genauigkeit der Ergebnisse. Dies ist insbesondere notwendig, wenn:

- die Geometrie sehr unterschiedliche Längen enthält (z. B. ein sehr langes, dünnes Rohr),

- die Netzelemente hohe Seitenverhältnisse aufweisen oder
- mehrphasige Strömungen untersucht werden.

Da es sich bei der Simulation um einen Verdampfungsprozess handelt, ist die Aktivierung von *Double Precision* erforderlich. Die Tabelle 3-5 gibt Aufschluss über die in Ansys Fluent Launcher vorgenommenen Einstellungen.

**Tabelle 3-5** Übersicht über die vorgenommenen Einstellungen in Ansys Fluent Launcher

| Bezeichnung      | Wert      |
|------------------|-----------|
| Dimensions       | 2D        |
| Double Precision | Aktiviert |

[28] (Kap. 4.1.2.2.)

### 3.3.2 RGP-Tabellen und Materials

Um eine realistische Verdampfung abbilden zu können, ist es wichtig, mit möglichst präzisen Zustandswerten zu rechnen. Dies wird durch die Einbindung einer sog. Real-Gas-Properties-Tabelle (RGP-Tabelle) erreicht. Diese wird im Vorfeld unter Vorgabe von Fehlergrenzen und Bereichsfeldern erstellt und anschließend in die Simulation implementiert. Dadurch wird die geforderte Genauigkeit der Zustandswerte gewährleistet und der Rechenaufwand während der Simulation reduziert. [31]

#### 3.3.2.1 RGP-Tabelle

Es wird die RGP-Tabelle für Kohlendioxid mit der Bezeichnung „CO2\_Very\_High“ generiert, indem die .bat-Datei „systemcoupling“ geöffnet und der entsprechende Programmcode eingefügt wird. Dieser kann der Datei „Modellbildung und Algorithmen“ im Anhang entnommen werden. Bei einer normalen Installation der Studentenversion von Ansys Workbench befindet sich *systemcoupling* unter folgendem Pfad: *C:\Program Files\ANSYS Inc\ANSYS Student\vx\bin\SystemCoupling\bin*. Die wichtigsten Parameter der RGP-Tabelle für das Kohlendioxid sind in Tabelle 3-6 dargestellt.

**Tabelle 3-6** Maximale Interpolationsfehler sowie Temperatur- und Druckbereich der RGP-Tabelle für Kohlendioxid

| Parameter            | Wert      | Einheit |
|----------------------|-----------|---------|
| Interpolationsfehler | $1e - 5$  | —       |
| $T_{min}$            | 216,6     | K       |
| $T_{max}$            | 500,0     | K       |
| $p_{min}$            | 100000.0  | Pa      |
| $p_{max}$            | 7500000.0 | Pa      |

[32]

### 3.3.2.2 Materials

RGP-Tabellen werden in Ansys Fluent mit dem *Table File Manager* implementiert, der sich im Register *File* befindet. Unter *Read* wird *CO2\_Very\_High* importiert und eine Tabelle für flüssiges Kohlendioxid mit dem Namen „co2l“ und eine Tabelle für gasförmiges Kohlendioxid mit dem Namen „co2v“ erzeugt. Durch anschließendes Aktivieren der Optionen *Store in case file* und *Create/update RGP material* in den *Settings* werden aus den beiden Tabellen gleichnamige Stoffe erzeugt und unter *Materials* eingefügt.

Als Werkstoff für Rohre wird in der Regel Kupfer verwendet. Dazu wird das Material *copper (cu)* aus der Ansys Fluent-Datenbank unter *Materials* → *Solid* kopiert und als neues Material in die Simulation eingefügt. [28] (Kap. 3.6., 8.16., 44.5)

### 3.3.3 Named Expressions

Zur Parametrisierung der Konfiguration von Ansys Fluent wird mit variablen Parametern (*Input Parameters*) und Funktionen (*Expressions*) gearbeitet. Diese werden unter *Expressions* angelegt und mit vorläufigen Werten initialisiert, die im Zuge der Parametrisierung überschrieben werden. In Tabelle 3-7 sind die angelegten *Input Parameters* in alphabetischer Reihenfolge aufgelistet. Eine Auflistung der erstellten *Expressions* in alphabetischer Reihenfolge befindet sich in Tabelle 3-8.

**Tabelle 3-7** *Input Parameters* mit Dimensionen und Einheiten in alphabetischer Reihenfolge

| Bezeichnung                 | Definition                              |
|-----------------------------|-----------------------------------------|
| Average_Mass_Flux           | 1 [kg/(m <sup>2</sup> s)]               |
| Average_Turbulent_Intensity | 1                                       |
| Average_Velocity_Initial    | 1 [m/s]                                 |
| Density_Operating           | 1 [kg/m <sup>3</sup> ]                  |
| Heat_Flux                   | 1 [kg/s <sup>3</sup> ]                  |
| Hydraulic_Diameter          | 1 [m]                                   |
| Pressure_Gradient_Initial   | 1 [kg/(m <sup>2</sup> s <sup>2</sup> )] |
| Pressure_Inlet_Initial      | 1 [kg/(m s <sup>2</sup> )]              |
| Pressure_Operating          | 1 [kg/(m s <sup>2</sup> )]              |
| Pressure_Reference_Location | 1 [m]                                   |
| Roughness_Height            | 1 [mm]                                  |
| Standard_Gravity            | 1 [m/s <sup>2</sup> ]                   |
| Temperature_Inlet           | 1 [K]                                   |
| Temperature_Operating       | 1 [K]                                   |

**Tabelle 3-8** Expressions mit den Definitionen der Funktionen in alphabetischer Reihenfolge

| Bezeichnung         | Definition                                                                 |
|---------------------|----------------------------------------------------------------------------|
| Mass_Flux           | $2 * \text{Average\_Mass\_Flux} * \text{Parabolic\_Function}$              |
| Parabolic_Function  | $1 - (2 * y / \text{Hydraulic\_Diameter})^2$                               |
| Pressure_Initial    | $\text{Pressure\_Gradient\_Initial} * x + \text{Pressure\_Inlet\_Initial}$ |
| Turbulent_Intensity | $2 * \text{Average\_Turbulent\_Intensity} * \text{Parabolic\_Function}$    |
| Velocity_Initial    | $2 * \text{Average\_Velocity\_Initial} * \text{Parabolic\_Function}$       |

### 3.3.4 Report Definitions

In Ansys Fluent sind *Report Definitions* Funktionen, die es dem Anwender ermöglichen, Berechnungsergebnisse zu extrahieren. Durch die Extraktion sowie die Rückführung einzelner Werte können variable Vorgabeparameter erzeugt werden. Die für die Simulation verwendeten *Report Definitions* sind in Tabelle 3-9 detailliert aufgeführt.

**Tabelle 3-9** Die für die Simulation verwendeten *Report Definitions*

| Bezeichnung                   | Report Type           | Field Variable      | Phase   | Surfaces |
|-------------------------------|-----------------------|---------------------|---------|----------|
| total-temperature-at-outlet   | Area-Weighted Average | Total Temperature   | mixture | outlet   |
| turbulent-intensity-at-outlet | Area-Weighted Average | Turbulent Intensity | mixture | outlet   |

### 3.3.5 General

Es werden der Typ des *Solvers*, die Formulierung der Geschwindigkeit, die Zeitabhängigkeit, das räumliche Modell und die Einbeziehung der Erdbeschleunigung festgelegt.

Zur Auswahl des *Solvertyps* stehen *Pressure-Based* und *Density-Based* zur Verfügung. Es wird der Typ *Pressure-based* aktiviert, da dieser in der Lage ist, Mehrphasenströmungen zu berechnen. Die Geschwindigkeit kann absolut oder relativ ausgedrückt werden. Aufgrund der statischen Modellgeometrie gleichen sich beide Formulierungen, es wird *Absolute* gewählt. Hinsichtlich der möglichen Zeiteinstellungen stehen *Steady* und *Transient* zur Verfügung. Da es sich um einen zeitabhängigen Prozess handelt, fällt die Wahl auf *Transient*.

Unter *2D Space* kann zwischen *Planar*, *Axisymmetric* und *Axisymmetric Swirl* gewählt werden. Da es sich um eine Rohrströmung ohne Drall handelt, kann der Prozess am besten mit *Axisymmetric* beschrieben werden.

Für eine realistische Nachbildung des Prozesses ist die Berücksichtigung der Erdbeschleunigung unerlässlich, weshalb *Gravity* aktiviert wird. Wie in 3.1 erläutert, wirkt die Erdbeschleunigung in x-Richtung, so dass für  $X [m/s^2]$  die Normfallbeschleunigung durch Einfügen der Expression *Standard\_Gravity* eingestellt wird. Die Parameter  $Y [m/s^2]$  und  $Z [m/s^2]$  behalten den

Standardwert 0 bei. Die unter *General* vorgenommenen Einstellungen sind in Tabelle 3-10 dargestellt.

**Tabelle 3-10** Übersicht über die unter *General* vorgenommenen Einstellungen

| Bezeichnung           | Wert             |
|-----------------------|------------------|
| Type                  | Pressure-Based   |
| Velocity Formulation  | Absolute         |
| Time                  | Transient        |
| 2D Space              | Axisymmetric     |
| Gravity               | Aktiviert        |
| X [m/s <sup>2</sup> ] | Standard_Gravity |
| Y [m/s <sup>2</sup> ] | 0                |
| Z [m/s <sup>2</sup> ] | 0                |

[28] (Kap. 10.2., 32.1., 44.3), [33] S.70

### 3.3.6 Operating Conditions

Unter *Operating Conditions* werden die Betriebsbedingungen wie Betriebsdruck, -temperatur und -dichte des betrachteten Systems festgelegt. Es ist sinnvoll, diese Parameter genau zu definieren, um Fehler zu minimieren. Der Absolutdruck kann beispielsweise als Betriebsdruck festgelegt werden, wodurch im Folgenden der jeweilige Druck stets in Bezug auf den Absolutdruck und nicht in Bezug auf den Standardwert angegeben wird. Bei der Dichte hingegen ist die richtige Einstellung entscheidend, um den Prozess realitätsgetreu zu modellieren.

Analog zur Normfallbeschleunigung werden unter *Operating Pressure*, *Reference Pressure Location* und *Operating Temperature* die entsprechenden Expressions *Pressure\_Operating*, *Pressure\_Reference\_Location* und *Temperature\_Operating* hinzugefügt. Tabelle 3-11 enthält die in *Operating Conditions* hinterlegten Einstellungen.

**Tabelle 3-11** Übersicht über die in *Operating Conditions* hinterlegten Einstellungen

| Bezeichnung                 | Wert                        |
|-----------------------------|-----------------------------|
| Operating Pressure          | Pressure_Operating          |
| Reference Pressure Location |                             |
| X [m]                       | Pressure_Reference_Location |
| Y [m]                       | 0                           |
| Z [m]                       | 0                           |
| Operating Temperature       | Temperature_Operating       |
| Specified Operating Density | Aktiviert                   |
| Density Operating           | Density_Operating           |

[28] (Kap. 7.3., 44.6.)

### 3.3.7 Multiphase Models

In *Multiphase Models* werden die Parameter für die Modellierung der Mehrphasenströmung definiert. Dazu gehören das zu verwendende Mehrphasenmodell, die Anzahl der Phasen und die Art und Weise, wie die Phasen miteinander interagieren.

#### 3.3.7.1 Models

Es wird das VOF-Modell mit zwei Euler'schen Phasen definiert. Die Formulierung ist explizit, die Grenze für den Volumenanteil und die Courant-Zahl werden mit  $1e-10$  und  $0,25$  angegeben. Der Modellierungstyp für die Oberflächengrenzen ist *Sharp*. *Interfacial Anti-Diffusion* und *Implicit Body Force* sind aktiviert (siehe Abschnitt 5.4.1). Tabelle 3-12 fasst die unter *Models* vorgenommenen Einstellungen zusammen.

**Tabelle 3-12** Zusammenfassung der Einstellungen unter *Models*

| Bezeichnung                       | Wert               |
|-----------------------------------|--------------------|
| Model                             | Volume of Fluid    |
| Level Set                         | Nicht aktiviert    |
| Formulation                       | Explicit           |
| Volume Fraction Cutoff            | $1e-10$            |
| Courant Number                    | $0,25$             |
| Implicit Body Force               | Aktiviert          |
| Number of Eulerian Phases         | 2                  |
| Open Channel Flow                 | Nicht aktiviert    |
| Type                              | Sharp              |
| Interfacial Anti-Diffusion        | Aktiviert          |
| Sub-Time Calculation Method       | Hybrid             |
| Solve VOF Every Iteration         | Nicht aktiviert    |
| Advance Volume Fraction Filtering | Aktiviert          |
| Filtering Options                 | Node Based Flotsam |

#### 3.3.7.2 Phases

Als primäre Phase wird flüssiges Kohlendioxid (*co2l*) und als sekundäre Phase gasförmiges Kohlendioxid (*co2v*) definiert. Wie in Tabelle 3-13 zu sehen ist, werden sie außerdem als *liquid* für Flüssigkeit bzw. *vapor* für Dampf bezeichnet. Bei einer umgekehrten Zuordnung hat sich gezeigt, dass physikalisch fehlerhafte Phänomene auftreten, wie z. B. die schlagartige Verdampfung der Flüssigkeit bei Eintritt in die Rohrströmung (siehe Abschnitt 8.2.7).

**Tabelle 3-13** Zuordnung der Phasen im Untermenü *Phases*

| Phase           | Bezeichnung | Substanz |
|-----------------|-------------|----------|
| Primary Phase   | liquid      | co2l     |
| Secondary Phase | vapor       | co2v     |

### 3.3.7.3 Forces

Unter *Forces* werden die zwischen den beiden Phasen wirkenden Kräfte definiert. Die Einstellungen der einzelnen Parameter sind Tabelle 3-14 zu entnehmen.

**Tabelle 3-14** Einstellungen der einzelnen Parameter unter *Forces*

| Bezeichnung                    | Wert                     |
|--------------------------------|--------------------------|
| Surface Tension Force Modeling | Aktiviert                |
| Model                          | Continuum Surface Stress |
| Wall Adhesion                  | Aktiviert                |
| Surface Tension Coefficient    | rgp-table-sat            |

### 3.3.7.4 Heat, Mass, Reactions

Im Untermenü *Heat, Mass, Reactions* wird der Mechanismus für den Massentransport konfiguriert. Es wird der *Evaporation-Condensation*-Mechanismus unter Verwendung des Lee-Modells ausgewählt. Die Sättigungstemperatur wird mit Hilfe der RGP-Tabelle erfasst. Tabelle 3-15 fasst die im Untermenü *Heat, Mass, Reactions* hinterlegte Konfiguration zusammen. Die Verdampfungs- und Kondensationsfrequenzen werden noch nicht eingestellt, da sie während der Simulation untersucht werden sollen.

**Tabelle 3-15** Übersicht über die im Untermenü *Heat, Mass, Reactions* hinterlegte Konfiguration

| Bezeichnung                             | Wert                     |
|-----------------------------------------|--------------------------|
| Number of Mass Transfer Mechanisms      | 1                        |
| From Phase                              | liquid                   |
| To Phase                                | vapor                    |
| Mechanism                               | evaporation-condensation |
| Evaporation/Condensation Model          | Lee                      |
| From Phase Frequency [s <sup>-1</sup> ] | –                        |
| To Phase Frequency [s <sup>-1</sup> ]   | –                        |
| Saturation Temperature [K]              | rgp-table-sat            |

### 3.3.8 Viscous

Unter *Model* wird das k- $\omega$ -Zweigleichungsmodell wegen der genauen Auflösung der Turbulenz in Wandnähe gewählt. Um die guten Eigenschaften des k- $\epsilon$ -Modells im restlichen Strömungsfeld zu nutzen, wird es zusätzlich um das SST-Modell erweitert. Da eine deutlich turbulente Strömung simuliert werden soll, werden weder *Low-Re Corrections* noch *Transition Options* verwendet. Üblicherweise wird anhand der Brinkman-Zahl geprüft, ob die Berücksichtigung viskoser Kräfte erforderlich ist. Dies ist der Fall, wenn  $Br \geq 1$ . Da die betrachtete Strömung jedoch kompressibel ist, sind die viskosen Kräfte grundsätzlich relevant und eine Prüfung somit überflüssig. Um die Erzeugung turbulenter kinetischer Energie zu begrenzen, wird *Production Limiter* aktiviert, nicht jedoch *Production Kato-Launder*. Weiterhin wird *Turbulence Damping* aktiviert und behält den Standardwert 10. Die im Untermenü *Viscous* vorgenommenen Einstellungen sind in Tabelle 3-16 zusammengefasst. Die Modellkonstanten unter *Model Constants* werden nicht verändert.

**Tabelle 3-16** Zusammenfassung der Einstellungen im Untermenü *Viscous*

| Bezeichnung                           | Wert            |
|---------------------------------------|-----------------|
| Model                                 | k-omega (2 eqn) |
| k-omega Model                         | SST             |
| Low-Re Corrections                    | Nicht aktiviert |
| Viscous Heating                       | Aktiviert       |
| Production Kato-Launder               | Nicht aktiviert |
| Production Limiter                    | Aktiviert       |
| Transition Model                      | none            |
| Turbulent Viscosity                   | none            |
| Stress Blending (SBES) / Shielded DES | Nicht aktiviert |
| Turbulence Damping                    | Aktiviert       |
| Damping Factor                        | 10              |

[2] (Kap. 2.3), [22] (Kap. 4.2.1., 4.3.8., 5.2.1.5., 44.1., 44.3.)

### 3.3.9 Cell Zone Conditions

Im Untermenü *Cell Zone Conditions* wird das Rohr, also der *Solid*, dem Werkstoff Kupfer zugewiesen.

### 3.3.10 Boundary Conditions

Unter *Boundary Conditions* werden die einzelnen *Named Selections* den entsprechenden Typen zugeordnet. So wird z. B. die *Named Selection Axis* dem Typ *axis* und die *Named Selection Inlet* dem Typ *mass-flow-inlet* zugeordnet. Tabelle 3-17 zeigt die vollständige Zuordnung der *Named*

*Selections*. Tabelle 3-18 bis Tabelle 3-20 geben einen Überblick über die getroffenen Randbedingungen.

**Tabelle 3-17** Zuordnung der *Named Selections*

| Named Selection | Type            |
|-----------------|-----------------|
| Axis            | axis            |
| Inlet           | mass-flow-inlet |
| Outlet          | pressure-outlet |
| Wall_Fluid      | interface       |
| Wall_Tube_Inner | interface       |
| Wall_Tube_Lower | wall            |
| Wall_Tube_Outer | wall            |
| Wall_Tube_Upper | wall            |

**Tabelle 3-18** Randbedingungen am *Inlet*

| Bezeichnung                        | Wert                                          |
|------------------------------------|-----------------------------------------------|
| Reference Frame                    | Absolute                                      |
| Supersonic/Initial Gauge Pressure  | Pressure_Inlet_Initial (Input Parameter)      |
| Direction Specification Method     | Normal to Boundary                            |
| Specification Method               | Intensity and Hydraulic Diameter              |
| Turbulent Intensity                | Average_Turbulent_Intensity (Input Parameter) |
| Hydraulic Diameter                 | Hydraulic_Diameter (Input Parameter)          |
| Total Temperature                  | Temperature_Inlet (Input Parameter)           |
| Mass Flow Specification Method (l) | Mass Flux with Average Mass Flux              |
| Mass Flux (l)                      | Mass_Flux (Expression)                        |
| Average Mass Flux (l)              | Average_Mass_Flux (Input Parameter)           |
| Mass Flow Specification Method (v) | Mass Flow Rate                                |
| Mass Flow Rate [kg/s] (v)          | 0                                             |

**Tabelle 3-19** Randbedingungen am *Outlet*

| Bezeichnung                             | Wert                                                |
|-----------------------------------------|-----------------------------------------------------|
| Pressure Specification Method           | Gauge Pressure                                      |
| Gauge Pressure [Pa]                     | 0                                                   |
| Pressure Profile Multiplier             | 1                                                   |
| Backflow Direction Specification Method | From Neighboring Cell                               |
| Backflow Pressure Specification         | Total Pressure                                      |
| Specification Method                    | Intensity and Hydraulic_Diameter                    |
| Backflow Turbulent Intensity            | {turbulent-intensity-at-outlet} (Report Definition) |

**Tabelle 3-19** Fortsetzung

| Bezeichnung                              | Wert                                              |
|------------------------------------------|---------------------------------------------------|
| Backflow Hydraulic Diameter              | Hydraulic_Diameter (Input Parameter)              |
| Backflow Total Temperature               | {total-temperature-at-outlet} (Report Definition) |
| Volume Fraction Specification Method (v) | From Neighboring Cell                             |

**Tabelle 3-20** Randbedingungen an den *Walls*

| Bezeichnung                              | Wert                                |
|------------------------------------------|-------------------------------------|
| Wall Motion                              | Stationary Wall                     |
| Motion                                   | Aktiviert (Vorgegeben)              |
| Shear Condition                          | No Slip                             |
| Roughness Models                         | Standard                            |
| Roughness Height [m]                     | Roughness_Height (Input_Parameter)  |
| Roughness Constant                       | 0,5                                 |
| Contact Angles [deg]                     | 90.00001299439 (Standardwert)       |
| Thermal Conditions                       | Coupled / Heat Flux / Heat Flux     |
| Wall Thickness [m]                       | 0                                   |
| Heat Generation Rate [W/m <sup>3</sup> ] | – / Heat_Flux (Input Parameter) / 0 |
| Material Name                            | Copper                              |

### 3.3.11 Methods

Unter *Methods* werden verschiedene Parametereinstellungen vorgenommen, darunter für die Druck-Geschwindigkeitskopplung, die räumliche Diskretisierung und die transiente Formulierung. Tabelle 3-21 fasst die Eingabe unter *Methods*.

**Tabelle 3-21** Zusammenfassung der Eingaben unter *Methods* zusammen

| Bezeichnung                  | Wert                         |
|------------------------------|------------------------------|
| Scheme                       | PISO                         |
| Skewness Correction          | 0                            |
| Neighbor Correction          | 1                            |
| Skewness-Neighbor Cell Based | Nicht aktiviert              |
| Gradient                     | Green Gauss Cell Based       |
| Pressure                     | Modified Body Force Weighted |
| Density                      | Second Order Upwind          |
| Momentum                     | Second Order Upwind          |
| Volume Fraction              | Modified HRIC                |
| Turbulent Kinetic Energy     | Second Order Upwind          |
| Specific Dissipation Rate    | Second Order Upwind          |

**Tabelle 3-21** Fortsetzung

| Bezeichnung                      | Wert                 |
|----------------------------------|----------------------|
| Energy                           | Second Order Upwind  |
| Pseudo Time Method               | Off (vorgegeben)     |
| Transient Formulation            | First Order Implicit |
| Non-Iterative Time Advancement   | Nicht aktiviert      |
| Frozen Flux Formulation          | Nicht anwählbar      |
| Warped-Face Gradient Correction  | Nicht aktiviert      |
| High Order Term Relaxation       | Nicht aktiviert      |
| Settings Optimization            | Aktiviert            |
| Advanced Stabilization           | Aktiviert            |
| Additional Stability Controls    | Off                  |
| Velocity Limiting                | Aktiviert            |
| Maximum Velocity Magnitude [m/s] | 5000                 |

### 3.3.12 Controls

Unter *Controls* werden die Unterrelaxationsfaktoren der vom *Solver* verwendeten Gleichungen sowie die Grenzwerte für die verschiedenen Zustandswerte festgelegt. Durch Anpassung der Unterrelaxationsfaktoren kann der Einfluss der einzelnen Gleichungen auf die Gesamtkonvergenz des Systems gesteuert werden. Ein höherer Unterrelaxationsfaktor führt zu einer schnelleren Konvergenz, aber u. U. zu einer geringeren Genauigkeit, während ein niedrigerer Faktor zu einer langsameren Konvergenz, aber u. U. zu einer höheren Genauigkeit führt. Die Wahl der Relaxationsfaktoren ist maßgeblich für ein ausgewogenes Verhältnis zwischen Konvergenzgeschwindigkeit und Genauigkeit. Tabelle 3-22 enthält die unter *Controls* vorgenommene Konfiguration.

**Tabelle 3-22** Übersicht der unter *Controls* eingestellten Unterrelaxationsfaktoren und Grenzwerte

| Bezeichnung               | Wert      |
|---------------------------|-----------|
| Pressure                  | 0,7       |
| Density                   | 0,3       |
| Body Forces               | 0,9       |
| Momentum                  | 0,5       |
| Vaporization Mass         | 0,5       |
| Turbulent Kinetic Energy  | 0,5       |
| Specific Dissipation Rate | 0,5       |
| Turbulent Viscosity       | 0,9       |
| Energy                    | 1         |
| Flow                      | Aktiviert |

**Tabelle 3-22** Fortsetzung

| Bezeichnung                                                    | Wert      |
|----------------------------------------------------------------|-----------|
| Volume Fraction                                                | Aktiviert |
| Turbulence                                                     | Aktiviert |
| Energy                                                         | Aktiviert |
| Minimum Absolute Pressure [Pa]                                 | 1         |
| Maximum Absolute Pressure [Pa]                                 | 5e+10     |
| Minimum Static Temperature [K]                                 | 1         |
| Maximum Static Temperature [K]                                 | 5000      |
| Minimum Turb. Kinetic Energy [m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ] | 1e-14     |
| Minimum Spec. Dissipation Rate [s <sup>-1</sup> ]              | 1e-20     |
| Maximum Turb. Viscosity Ratio                                  | 100000    |

[28] (Kap. 32.3., 32.6.), [22] (Kap. 24.4.4.)

### 3.3.13 Residual Monitors

Unter *Residual Monitors* werden Einstellungen zu den Konvergenzbedingungen vorgenommen. So wird für die einzelnen Residuen der Navier-Stokes-Gleichungen sowie der Transportgleichungen des verwendeten Turbulenzmodells angegeben:

- ob sie überwacht werden sollen,
- ob ihre Konvergenz als Kriterium für die Konvergenz des gesamten Gleichungssystems herangezogen werden soll und
- ab wann das jeweilige Residuum als konvergiert betrachtet wird.

Wie in Tabelle 3-23 ersichtlich, werden grundsätzlich alle Residuen sowohl überwacht als auch als Konvergenzkriterium für das Gleichungssystem verwendet. Die jeweiligen Konvergenzkriterien sind in Abhängigkeit der betreffenden Gleichung festgelegt.

**Tabelle 3-23** Einstellung der Abbruchkriterien

| Residuum   | Monitor   | Check Convergence | Absolute Criteria |
|------------|-----------|-------------------|-------------------|
| continuity | Aktiviert | Aktiviert         | 0,0001            |
| x-velocity | Aktiviert | Aktiviert         | 1e-05             |
| y-velocity | Aktiviert | Aktiviert         | 1e-05             |
| energy     | Aktiviert | Aktiviert         | 1e-06             |
| k          | Aktiviert | Aktiviert         | 1e-05             |
| omega      | Aktiviert | Aktiviert         | 1e-05             |

[28] (Kap. 32.15., 45.2.)

### 3.3.14 Time Advancement

Unter *Time Advancement* werden Einstellungen zu den Zeitschritten vorgenommen. Tabelle 3-24 zeigt die unter *Time Advancement* vorgenommenen Einstellungen.

**Tabelle 3-24** Einstellungen unter *Time Advancement*

| Bezeichnung                    | Wert            |
|--------------------------------|-----------------|
| Total Time [s]                 | 14              |
| Courant Number                 | 1               |
| Number of Fixed Time Steps     | 5               |
| Initial Time Step Size [s]     | 1e-05           |
| Max Iterations/Time Step       | 100             |
| Reporting Interval             | 1               |
| Profile Update Interval        | 1               |
| Time Step Size Update Interval | 1               |
| Minimum Time Step Size [s]     | 1e-05           |
| Maximum Time Step Size [s]     | 0.01            |
| Minimum Step Change Factor     | 0.4             |
| Maximum Step Change Factor     | 1.6             |
| Physics Based Constraint       | Nicht aktiviert |