

**Universität
Rostock**



Traditio et Innovatio



MASTER-ARBEIT

Aerodynamische Simulation von raketentragenen in-situ Dichtemessungen in der MLT-Region

**eingereicht an der Fakultät für Maschinenbau und Schiffstechnik
der Universität Rostock**

**vorgelegt von: Tristan Staszak
Matrikel-Nr.: 8200895**

Bearbeitungszeitraum: 28 Wochen

**Erstgutachter: Dr. rer. nat. Martin Brede, Lehrstuhl Strömungsmechanik,
Universität Rostock**

**Zweitgutachter: Prof. Dr. Jorge L. Chau, Leibniz-Institut
für Atmosphärenphysik e.V. an der Universität Rostock**

Lehrstuhl: Strömungsmechanik

Rostock, den 7.Juni 2015



Für meine Tochter.

Kurzfassung

In der vorliegenden Arbeit werden Direct Simulations Monte Carlo (DSMCs) durchgeführt, um aerodynamische Effekte auf in-situ Dichtemessungen des Combined Sensor For Neutrals And Elektrons (CONE)-Instruments in der Mesosphere Lower Thermosphere (MLT)-Region zu quantifizieren.

Für Absolutdichtemessungen ist ein sogenannter Ram-Faktor notwendig. Erstmals wird hierfür der DSMC-Löser der OpenFOAM-Simulationssoftware genutzt.

Zunächst werden theoretische Grundlagen der DSMC-Methode erläutert. Anschließend werden Kriterien für qualitativ hochwertige DSMCs präsentiert.

Nach ausgiebigen Voruntersuchungen zum Skalierungsverhalten und der Aerodynamik der Hauptnutzlast einer Rakete werden zum ersten Mal Simulationsergebnisse für eine realistische, dreidimensionale CONE-Geometrie für eine dreidimensionale Anströmung gezeigt.

Zum Schluss werden Ergebnisse von Simulationen zur Dichtekorrektur einer aktuellen Raketenkampagne vorgestellt. Die ermittelten Ram-Faktoren stehen dabei in bester Übereinstimmung mit verfügbaren Daten von Experimenten und Simulationen.

Abstract

In the present work, the aerodynamical effects on in-situ density measurements in the MLT region of the CONE instrument are quantified by DSMC simulations.

This so called ram-factor is necessary for absolute density measurements.

A new DSMC-tool, available from the OpenFoam-Software package is used.

First, the fundamentals of DSMC are summarized, then criteria for high qualitative DSMCs were investigated.

After extensive studies of scaling capabilities and aerodynamic effects of a rocket main payload, results from a realistic three dimensional CONE model with treatment of the full three dimensional flow direction are presented.

Finally, results from simulations for density correction, derived for recent rocket-flight data are shown. The derived ram-factors are in good agreement with available experimental data and simulations.

Nomenklatur

Akronyme

CAD	Computer Aided Design
CFD	Computational Fluid Dynamics
CONE	Combined Sensor For Neutrals And Elektrons
DSMC	Direct Simulation Monte Carlo
FEM	Finite Elemente Methode
FS	Falling Sphere
FVM	Finite Volumen Methode
GPS	Global Positioning System
HFR	Höhenforschungsrakete
HPC	High Performance Computing
HS	Hard Sphere
IAP	Institut für Atmosphärenphysik
MD	Molecular Dynamik
MLT	Mesosphere Lower Thermosphere
MPI	Multi Processing Interface
NLC	Noctilucent Clouds
NRLMSISE-00	Naval Research Laboratory Mass Spectrometer and Incoherent Scatter Radar Extended
PME	Polar Mesosphere Echos
PMSE	Polar Mesosphere Sommer Echos
PMWE	Polar Mesosphere Winter Echos

STC Scaling-Test-Case

VHS Variable Hard Sphere

WADIS Wellenausbreitung und Dissipation in der mittleren Atmosphäre

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	v
Nomenklatur	vii
Akronyme	vii
1 Einleitung	1
1.1 Phänomene in der MLT-Region	1
1.2 Messungen in der MLT-Region	3
1.3 In-situ Messungen von Neutralgasdichte	4
1.4 Strömungssimulation im Transitionsbereich	6
1.5 Motivation und Zielstellung	8
2 Das CONE Instrument	11
3 Numerische Strömungssimulation im Transitionsbereich zwischen Kontinuumsströmung und freier Molekularströmung	15
3.1 Molekulare Gasdynamik	17
3.1.1 Einfache dünne Gase	17
3.1.2 Kollisionsmodelle	18
3.1.3 Mittlere Kollisionsrate und mittlere freie Weglänge	23
3.1.4 Ermittlung makroskopischer Größen	27
3.1.5 Lokales thermodynamisches Gleichgewicht	28
3.2 Direct Simulation Monte Carlo	29
3.3 DSMC mit <i>OpenFOAM</i>	32
4 Vorbetrachtungen zur Arbeit mit <i>dsmcFoam</i>	37
4.1 Qualitätskriterien einer DSMC-Simulation	37
4.1.1 Gittergenerierung	37
4.1.2 Festlegen des Scalingfaktors	38
4.1.3 Wahl des Zeitschritts	39
4.1.4 Konvergenzverhalten	39
4.2 Skalierung von <i>dsmcFoam</i> auf dem Hochleistungsrechner am IAP	40
5 Vereinfachende Annahmen	45
5.1 Wahl des Simulationsvolumens	46
5.2 Vereinfachung der Geometrie	50

6	Bestimmung einer Korrekturfunktion für das CONE-Instrument der WADISI-Kampagne	55
6.1	Annahmen und Vorbereitung für CONE-Simulationen des WADISI Raketenflugs	55
6.1.1	Atmosphärendaten	56
6.1.2	Flugdaten	57
6.1.3	Geometrie und Rechnernetz	58
6.1.4	Simulationsparameter und Randbedingungen	59
6.1.5	Konvergenz	60
6.2	Entwicklung einer Korrekturfunktion im Höhenbereich von 70 km bis 110 km	62
7	Zusammenfassung und Ausblick	65
	Literaturverzeichnis	I
	Abbildungsverzeichnis	VII
	Tabellenverzeichnis	XI
	Danksagung	XIII
	Eidesstattliche Erklärung	XV

Kapitel 1

Einleitung

Spätestens seit den wissenschaftlich gewonnenen Erkenntnissen um einen anthropogenen Einfluss auf die Atmosphäre ist man weltweit bestrebt, Mechanismen und Zusammenhänge in der Atmosphäre im Detail zu verstehen. Es ist üblich, die Atmosphäre nach dem Verlauf der Temperatur entlang der Höhe in Sphären einzuteilen. Sogenannte Pausen (*pausa [lat.]: Unterbrechung*) bilden die Grenzen der einzelnen Sphären und sind durch ein lokales Temperaturminimum oder -maximum gekennzeichnet.

Nach gründlichen Untersuchungen der Troposphäre (bis ca. 20 km) sind in den letzten Jahren auch die höheren Schichten in den wissenschaftlichen Fokus gelangt.

Dabei zeichnete sich ein Bild hochdynamischer Prozesse und miteinander wechselwirkenden Atmosphärenschichten. Forschungsschwerpunkte am Institut für Atmosphärenphysik (IAP) stellen die Schichten der Mesosphäre (*meso[gr.]: mittig*) und die untere Thermosphäre (*thermós [gr.]: Hitze*) dar, auch wenn dabei Kopplungseffekte der darunter und darüber liegenden Schichten keinesfalls außer Acht gelassen werden.

1.1 Phänomene in der MLT-Region

Die physikalischen Prozesse der MLT-Region sind geprägt durch Staubpartikel, die bei der Ablation von Meteoriten eingebracht werden, von Schwerewellen, die von der Erdoberfläche in Mesopause propagieren und zu Turbulenz führen, sowie globaler Zirkulationen und solarer Einstrahlung. Durch das Zusammenwirken dieser (und weiterer) Prozesse werden beispielsweise Radarechos in polaren Breiten, Polar Mesosphere Echos (PME), beobachtet, die über das ganze Jahr hinweg detektierbar sind. Diese Echos sind auf Braggstreuung, infolge von Brechungsindexschwankungen durch Elek-

tronendichteänderung, zurückzuführen. In den Wintermonaten sind die schwächeren Polar Mesosphere Winter Echos (PMWE) in Höhen von ungefähr 50-80 km vorhanden. Getrennt von Transitionsphasen im Frühjahr und Herbst, werden im Sommer starke Polar Mesosphere Sommer Echos (PMSE) in einer Höhe von 80-90 km detektiert [37]. Diese Schichten können Schichtdicken von 150 m bis zu einigen Kilometern aufweisen [37]. In polaren Breiten sind im Sommer ebenfalls Noctilucent Clouds (NLC), leuchtende Nachtwolken, in der Höhe von ca. 82.5 km teilweise mit dem bloßem Auge zu sehen [27, 37].

Wie bei PMSE ist dieses Phänomen auf Eisteilchen zurückzuführen. Diese 100 m bis 3 km dicken Eisteilchenwolken werden noch von der Sonne bestrahlt, während der Betrachter bereits von der Sonne unbeleuchtet ist. Sind die Eisteilchen groß genug, reflektieren diese genügend Licht um vom Betrachter beobachtet werden zu können.

Das Vorkommen von Eisteilchen in der Sommerhemisphäre ist erstaunlich, da die permanente Sonneneinstrahlung zunächst eine insgesamt wärmere Atmosphäre vermuten ließe.

Tatsächlich aber weist die Sommermesopause deutlich niedrigere Temperaturen im Vergleich mit der von der Sonne weitgehend unbeleuchteten Wintermesopause auf. Die MLT-Region über der Arktis ist mit Temperaturminima von ≈ 130 K der kälteste Ort der Erdatmosphäre [26]. Nur bei diesen niedrigsten Temperaturen und bei ausreichender Konzentration von Kondensationskeimen und Wasser ist Eisbildung in diesen Höhen bzw. den dort vorherrschenden Dichten möglich.

Eine Vermutung ist, dass die Kondensationskeime durch die Ablation von Meteoriten in diese Schichten eingebracht werden.

Ursache dieses Phänomens ist, neben chemischen und mikrophysikalischen Prozessen, das Zusammenwirken dynamischer Prozesse. So transportiert eine globale Zirkulation vom Sommer- zum Winterpol Luftpakete adiabat in große Höhen, die dort expandieren und abkühlen und sich am Winterpol unter adiabatischer Kompression erwärmen. Die globale Zirkulation wird durch das Brechen von Schwerewellen in mittleren Breiten angetrieben [37].

Während die Phänomene der PMSE und NLC zum Teil schon gut erklärt werden können, sind Effekte wie PMWE noch unerklärt.

1.2 Messungen in der MLT-Region

Neben Fernerkundungsmethoden wie Lidar- und Radarsystemen, die oftmals kontinuierliche oder quasikontinuierliche Messungen zulassen, jedoch im Auflösungsvermögen beschränkt sind, bieten in-situ Messungen die einzige Möglichkeit, das Messinstrument am Ort des Geschehens (*in-situ*[lat.]) messen zu lassen, siehe Abb. 1.1.

Mittels in-situ Verfahren sind räumlich und zeitlich hochauflösende, direkte Messungen verschiedener Phänomene möglich, die Fernerkundungsmethoden verwehrt bleiben. So können kleinskalige Phänomene, wie Dissipation von Turbulenz und lokale Spurengasverteilungen, nur mit der Hilfe von in-situ Messtechniken nachgewiesen werden [17].

Auch der direkte Nachweis von geladenen, aber insbesondere ungeladenen Staubpartikeln kann nur in-situ erfolgen.

Des Weiteren bieten diese Techniken die Möglichkeit, mehrere Experimente simultan am selben Ort messen zu lassen. Dies lässt bspw. eindeutige Schlüsse auf Wechselwirkungen und Korrelationen mehrerer Phänomene zu.

Neben aktiven Messungen im Messvolumen in der direkten Nähe der Rakete sind zusätzlich auch passive Messungen eines Säulenvolumens mittels Photometrie, Radiometrie und optischen Instrumenten möglich [17].

Für die Erkundung der MLT können Instrumente nur von Raketen an den Ort der Messung getragen werden.

Nur mithilfe von in-situ Messungen von Raketen sind bspw. Neutralgasdichteprofile innerhalb einer PME mit einer Auflösung von ≥ 10 cm überhaupt realisierbar, siehe z.B. [44].

Jedoch ist der Flug einer Höhenforschungsrakete (HFR) über einen weiten Teil der Messungen supersonisch. Je nach Messung auf der Rakete muss dieser Einfluss auf die Messwerte beachtet werden.

Gerade Dichtemessungen, z.B. von Neutralgas für Temperaturmessungen oder Meteorstaubpartikelmessungen, unterliegen einem beachtlichen Einfluss der Strömung auf die Messwerte, ohne deren Berücksichtigung die Messwerte unbrauchbar sind.

Das Strömungsregime verändert über den Messbereich (~ 60 km - ~ 120 km) seine Eigenschaften infolge der sinkenden Dichten und der Strömungsphänomene bei hohen Geschwindigkeiten: von Kontinuumsströmung in den unteren Schichten, über einen

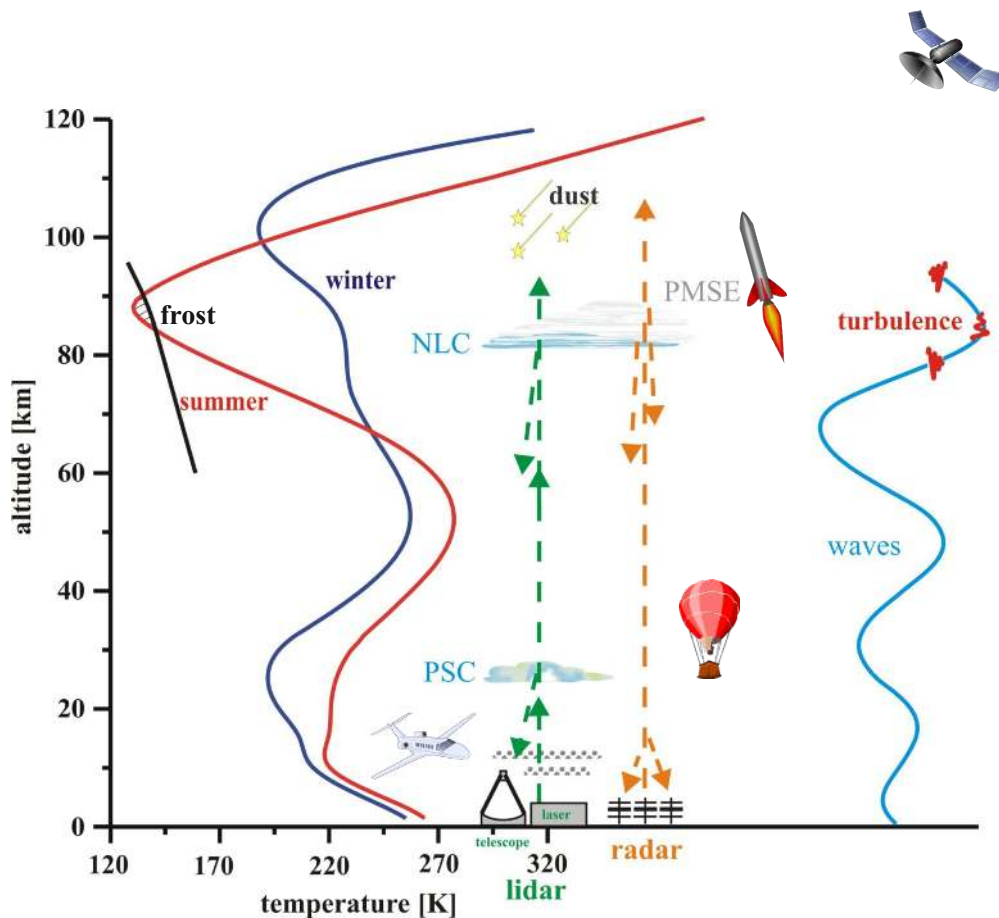


Abbildung 1.1: Temperaturprofile der Atmosphäre für Sommer und Winter. Zudem sind einige der wichtigsten Phänomene und die jeweils zur Untersuchung genutzten Instrumente gezeigt. In den Sommermonaten sinkt die Temperatur der Mesopause durch adiabate Entspannung unter den Gefrierpunkt Wasser.

Transitionsbereich, bis hin zu einer Molekularströmung in der Thermopause [8].

1.3 In-situ Messungen von Neutralgasdichte

Um dynamische Prozesse, wie das Brechen von Schwerewellen, Plasmawellen und Phänomene wie PMWE in der MLT-Region zu untersuchen, sind Dichtemessungen von essentieller Bedeutung.

In-situ Dichtemessungen wurden seit langer Zeit mit fallenden Kugeln durchgeführt. Beim Fallende-Kugel-Experiment wird eine radarreflektive Kugel aus einer kleinen

Rakete ausgeworfen und mittels Radar beobachtet. Aus der ermittelten Trajektorie werden Beschleunigungen im Höhenbereich der MLT ermittelt [45]. Die Entwicklung geht dabei bis in die sechziger Jahre zurück, vgl. [48, 34].

Das Fallende-Kugel-Experiment bietet jedoch nur eine Auflösung von einigen Kilometern. Zum genaueren Verständnis der Phänomene, die im Zusammenhang mit kleinskaligen Strukturen von Dichte und Temperatur stehen, ist eine höhere Auflösung notwendig.

Diese Messungen werden seit 1992 mittels TOTAL-Sensor¹ durchgeführt.

Das TOTAL-Instrument bietet mit einer Zeitkonstante von 4.5 ms die Möglichkeit, auch Turbulenzparameter und kleinskalige Strukturen aufzulösen [45, 21].

Die Weiterentwicklung des TOTAL-Sensors an der Universität Bonn führte zum CONE-Sensor. Dieser zeichnet sich durch die offene Geometrie aus, die zu einer deutlichen Verbesserung der zeitlichen Auflösung und einer vom Strömungswinkel weniger abhängigen Messung führt [31].

Der CONE-Sensor ermöglicht mit einer Zeitkonstante von 0.3 ms eine Auflösung des gesamten relevanten Turbulenzspektrums, von einigen zehn Zentimetern bis zu einigen Kilometern. Absolutwerte der Neutralgasdichte können mit einer Auflösung von 200 m gemessen werden [45].

Das CONE-Instrument misst Dichten in der Anströmung der Rakete. Für eine Messung im Upleg², wird das Instrument vorne auf der Rakete verbaut. Messwerte für den Downleg³ werden gewonnen, indem der CONE-Sensor am hinteren Ende der Nutzlast montiert und nach der Motorseparation freigegeben wird. Um einer Modulation durch die Drehbewegung der Rakete (*Spin*) entgegenzuwirken, wird das CONE-Instrument achsensymmetrisch verbaut. Die Störung durch die Schockfront der Hauptnutzlast wird verringert, indem das Instrument auf einem Zylinder montiert ist und so über einen weiten Teil des Fluges aus dieser Schockfront herausragt.

Eine Schockfrontentwicklung am CONE-Sensor selbst kann nicht verhindert werden, sodass Messwerte um den Einfluss dieser Schockeffekte bereinigt werden müssen. Diese Korrektur ist notwendig, damit Absolutwerte der Neutralgasdichte und daraus abgelei-

¹Der Name TOTAL nimmt Bezug auf die Eigenschaft des Instruments, die totale Anzahldichte von Neutralgas in der Atmosphäre zu messen

²Flugbahn von der Erde (Pärigäum) bis zum fernsten Abstand (Apogäum)

³analog zum Upleg: Strecke vom Apogäum zum Pärigäum

tete Größen gewonnen werden können.

1.4 Strömungssimulation im Transitionsbereich

Der Messbereich des CONE-Sensors liegt zwischen 50 und 110 km. Innerhalb des Raketenflugs ändert sich die Dichte somit exponentiell.

Einhergehend mit dieser Dichteabnahme ändert sich der Charakter der Strömung. Dieser variiert von einem Bereich, in dem die Kontinuumsannahme eine gute Näherung darstellt, über einen Transitionsbereich, bis hin zur molekularen Strömung, siehe Abb. 1.2.

Strömungen wie sie um Instrumente einer HFR herum entstehen, sind über einen großen Bereich weder mit kontinuumsmechanischen Annahmen, noch mit Annahme einer freien Molekularströmung adäquat zu berechnen. Sie liegen vom Charakter her zwischen diesen Annahmen.

Üblicherweise werden Strömungen mittels Knudsenzahl charakterisiert, um die Gültigkeit der Kontinuumsannahme bzw. der Annahme einer Molekularströmung zu überprüfen.

Die Knudsenzahl ist eine dimensionslose Kennzahl, die aus dem Verhältnis aus mittlerer freier Weglänge und einer charakteristischen Länge gebildet wird [9].

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (1.1)$$

Dabei beschreibt λ die mittlere freie Weglänge der Moleküle, also die Strecke, die ein Teilchen bis zur Kollision mit einem anderen im Mittel zurücklegt. Als charakteristische Länge L kann zur groben Abschätzung eine Länge der umströmten Geometrie verwendet werden. Eine genauere Abschätzung ergibt sich, wenn

$$L = \frac{\Phi}{\frac{\delta\Phi}{\delta x}} \quad (1.2)$$

lokal, anhand des Gradienten einer Strömungsgröße Φ bestimmt wird [9].

Die mittlere freie Weglänge ändert sich mit der Höhe der Atmosphäre ebenfalls exponentiell. Der Überschallflug der Rakete sorgt für große Gradienten in den Strömungsgrößen (Schockwelle), (Gl. 1.2) und hat somit ebenso einen Einfluss auf das Strömungsre-

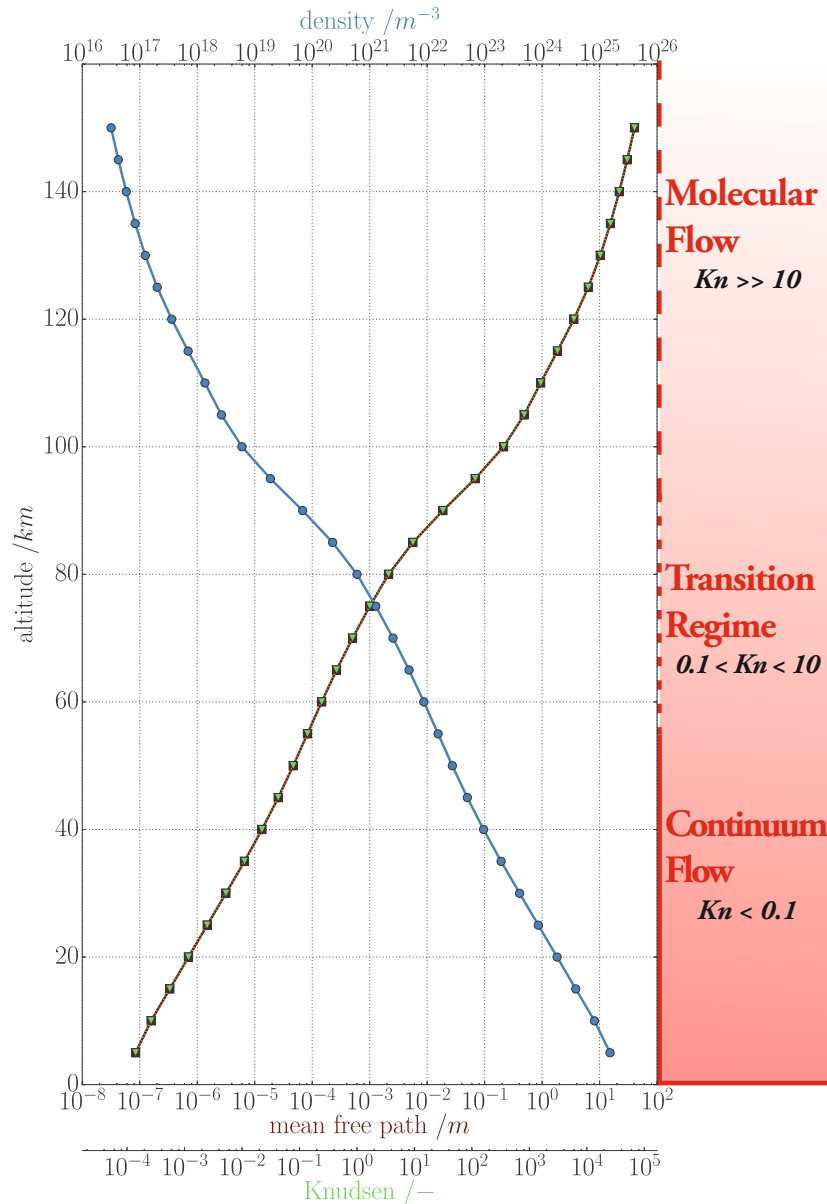


Abbildung 1.2: Dichte und daraus abgeleitete Größen zur Charakterisierung einer Strömung für Atmosphärendaten (Andøya, 69 °N) im 15-Jahre Mittel [36]

gime, charakterisiert durch Gl. 1.1. Wenn die dimensionslose Kennzahl $Kn \leq 0.1$ ist, so gilt die Kontinuumsannahme und die Strömung lässt sich mit dem Navier-Stokes Ansatz beschreiben. Bei Werten ab $Kn \sim 0.2$ verliert die Annahme eines Kontinuums ihre Gültigkeit und der molekulare Charakter der Strömung gewinnt an Einfluss. Es kommt zu Temperatur- und Geschwindigkeitssprüngen an umströmten Oberflächen. Eine molekulardynamische Beschreibung der Strömung wird notwendig [9]. Dabei ist im Transitionsbereich zu beachten, dass der Impulsaustausch einzelner Mole-

küle durch intermolekulare Stoßprozesse immer noch von großer Bedeutung ist und im Gegensatz zur freien Molekularströmung nicht vernachlässigt werden kann.

1.5 Motivation und Zielstellung

Für Simulationen im Transitionsbereich hat sich die DSMC-Methode bewährt. Diese Methode verbindet die molekulardynamische Beschreibung mit dem Monte Carlo Verfahren und ist somit effektiver als direkte molekulardynamische Simulationen.

Im Bereich der raketengestützten Atmosphärenphysik finden kostenlose DSMC-Programme von G. A. Bird und Eigenentwicklungen breiten Einsatz [17, 38, 16, 15, 19, 22, 25].

Alle bislang in der Atmosphärenphysik-Community eingesetzten Programme verfügen nur über Singlecore-Strategien. Dies bereitet für die Berechnung von dreidimensionalen Geometrien, aber auch bei der Simulation von komplexeren Deckaufbauten zweidimensionaler Problemstellungen, erhebliche Schwierigkeiten.

Oft führten Arbeiten für Simulationen von Raketennutzlasten zu keinen aussagekräftigen Ergebnissen [35, 23].

Mit dem *dsmcFoam*-Löser als Bestandteil des freien und offenen OpenFOAM-Softwarepakets, steht ein DSMC-Löser zur Verfügung, der auch auf großen Rechenclustern und Hochleistungsrechnern angewendet wird [43].

Im Rahmen dieser Arbeit soll die Eignung des Tools zur Berechnung höhenforschungsspezifischer Problemstellungen erstmals untersucht werden.

Dafür soll der Einsatz auf einem Hochleistungsrechner vorbereitet werden.

Zur Ermittlung einer Korrekturfunktion werden Korrekturwerte, sog. Ram-Faktoren, für einzelne Höhen aus einer Reihe von Simulationen bestimmt.

Es soll eine Funktion zur Korrektur der aerodynamischen Einflüsse für den CONE-Sensor ermittelt werden.

Daraufhin kommen die ermittelten Korrekturen für Dichtemessungen der aktuellen Wellenausbreitung und Dissipation in der mittleren Atmosphäre (WADIS)I-Kampagne erstmals zur Anwendung.

Abschließend werden weitere Einsatzmöglichkeiten der Software für die Atmosphärenforschung mittels Höhenforschungsraketen diskutiert und wünschenswerte Erweiterungen der unter der GNU GPL⁴ lizenzierten Software vorgeschlagen.

⁴**GNU General Public Licence:** 1989 von Richard Stallman. Hauptideen sind eine freie und offene Softwarenutzung, -veränderung und -weitergabe sowie das Copyleft [12]

Kapitel 2

Das CONE Instrument

Der CONE-Sensor ist eine Kombination zweier Messeinheiten, die Elektronendichte und Neutralgasdichten über einen Strom messen. Die offene Bauweise sorgt für eine kleine Zeitkonstante, ermöglicht somit Messungen mit hoher räumlicher Auflösung und ist unempfindlicher gegen Einflüsse des Anströmwinkels als vergleichbare Instrumente.

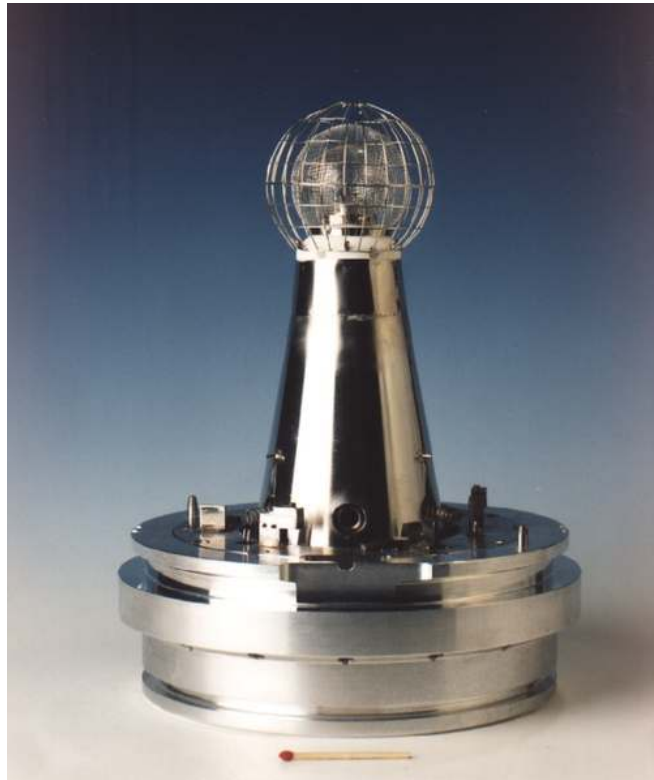


Abbildung 2.1: Fotoaufnahme eines CONE-Sensors, montiert auf einem Flansch. Zum Schutz des Glühfadens (Kathode) wird der Sensor vor einer Messung mit einer Haube, die mit dem Flansch abschließt, in einem Vakuum ($\sim 10^{-8}$ mbar) gehalten [24].

Eine schematische Übersicht des CONE-Instruments wird in Abb. 2.2 gegeben. Das äußere Gitter besitzt ein positives Potential und dient zur Messung von Elektronen und schirmt diese gleichzeitig von den innen gelegenen Messelementen ab.

Die darunter gelegene Gitterkugel ist von negativem Potential und dient als Abschirmung des darauffolgenden Ionisationsmanometers von negativ geladenem Plasma sowie als Barriere für Elektronen des Ionisationsmanometers, die sich in Richtung der äußeren Elektronensonde bewegen.

Das Ionisationsmanometer besteht aus Anode, Ionenkollektor und einem Glühfaden (Kathode 10V), aus dem Elektronen thermisch gelöst werden und zur Anode, die ein vielfach stärkeres Potential aufweist, hin beschleunigt werden. Dabei ionisieren die Elektronen das neutrale Gas durch Ausschlagen von Elektronen. Das ionisierte Gas wird anschließend über den Ionenkollektor mit Nullpotential gemessen [45].

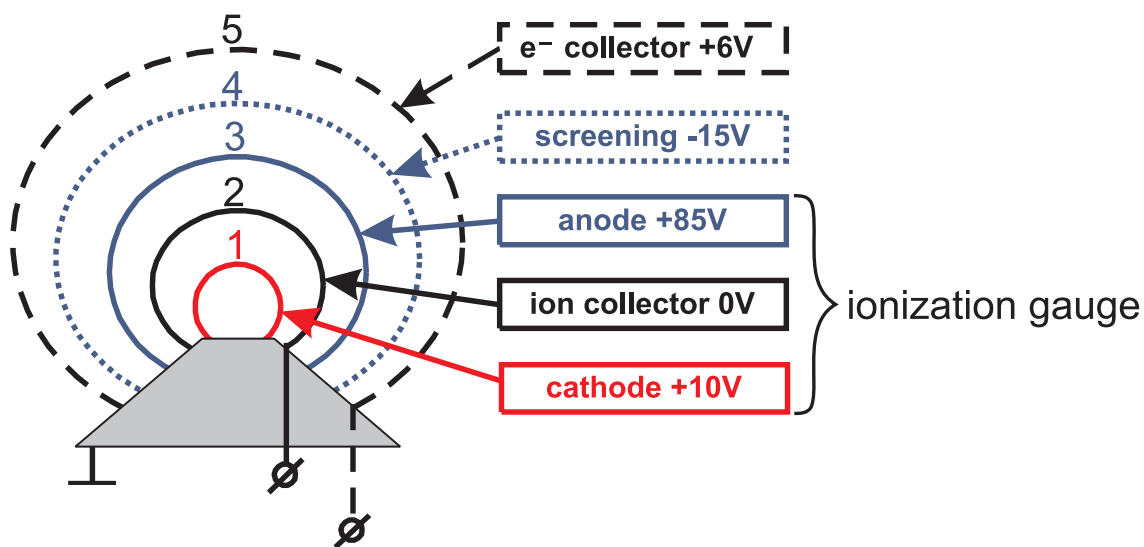


Abbildung 2.2: Schematischer Aufbau des CONE Sensors mit Elektronen- und Neutralgasmess-einheit[24]

Die gemessene Größe ist jeweils ein Strom, wobei der Emissionsstrom der Kathode unter Regelung der Spannung im Bereich von 2 V - 30 V konstant gehalten wird und der gemessene Strom direkt proportional zur Neutralgasdichte ist [45].

Durch eine Kalibrierung des CONE-Instruments im Vorfeld einer Messkampagne lassen sich absolute Werte der Dichte messen. Die Kalibrierung erfolgt in einer Hochvakuumkammer unter Aufnahme einer Kalibrierkurve, siehe Abb. 2.3. Dazu wird eine Eichung mit einem Standardmessgerät (Baratron) über den gesamten Druckbereich der späteren Messung vorgenommen.

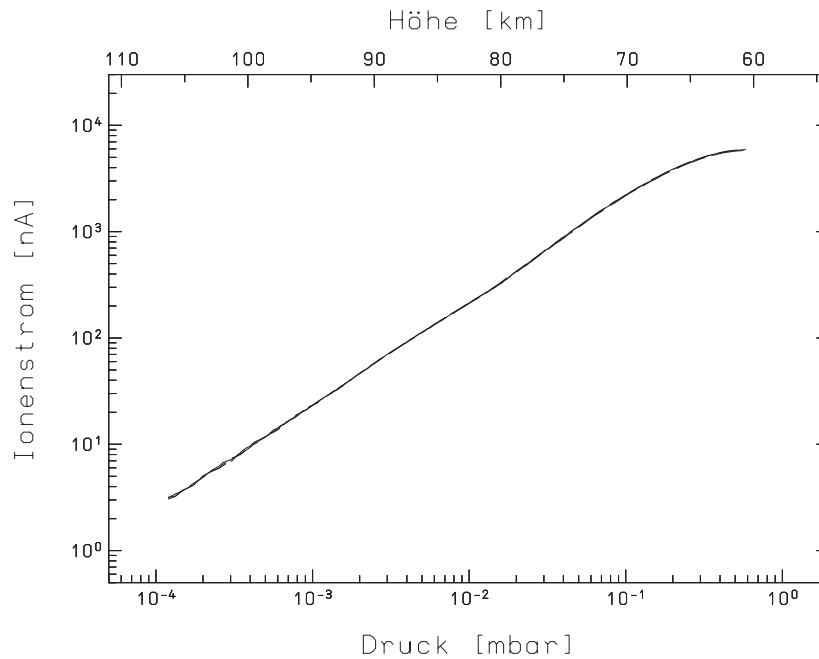
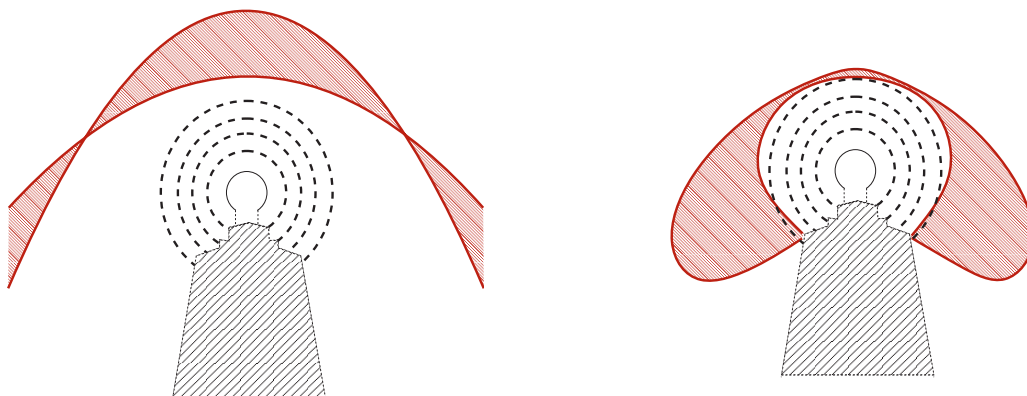


Abbildung 2.3: Kalibrierkurve für Absolutdichtemessungen mit dem CONE-Instrument [30]

Mit der Boltzmannkonstante k_B , Kenntnis der Temperatur T und mit Annahme eines idealen Gases wird dann die Anzahldichte über die Proportionalität zum gemessenen Strom bestimmt.

$$p = nk_B T \quad (2.1)$$

Die Messungen während des Raketenflugs unterliegen einem starken aerodynamischen Einfluss, der größtenteils durch das Instrument selbst verursacht wird, siehe Abb. 2.4.



(a) Machprofile bei höheren Dichten

(b) Blasenförmige Störungen bei niedrigen Dichten

Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der aerodynamischen Störung um den CONE-Sensor

Diese Einflüsse müssen bei der Auswertung berücksichtigt werden. Deshalb werden Korrekturfaktoren f_{RAM} ermittelt [38].

$$n_{amb} = \frac{n_{meas}}{f_{RAM}} \quad (2.2)$$

Dabei ist n_{amb} die ungestörte Dichte der Umgebung und n_{meas} die über den Strom gemessene Dichte. Der Faktor f_{RAM} , auch Ram-Faktor, ist dabei keine konstante Größe, sondern ändert sich im Laufe des Raketenfluges.

Unter der Annahme eines hydrostatischen Gleichgewichts kann aus dem gemessenen Neutralgasdichteprofil die Temperatur in der Höhe z berechnet werden.

$$T(z) = \frac{1}{n(z)} \left(n(z_0)T(z_0) - \frac{M}{k_B} \int_{z_0}^z n(z')g(z')dz' \right) \quad (2.3)$$

Dabei ist M die mittlere molare Masse der Atmosphäre, k_B die Boltzmannkonstante, n die Dichte, T die Tempertur und g die Erdbeschleunigung. Die Werte $n(z_0)$ und $T(z_0)$ sind die Startwerte der Integration und werden aus Atmosphärenmodellen wie CIRA [40] oder MSISE [36] entnommen. Als Startwerte wird die Höhe des Apogäums gewählt. Der anfängliche Fehler der Temperatur verringert sich mit exponentiell ansteigender Dichte ebenfalls exponentiell [45]. So beträgt der Fehler für die Temperatur beispielsweise bei 90 km noch etwa 0.2 %. Aufgrund des stark ansteigenden Gehalts an atomarem Sauerstoff O sind Absolutdichtemessungen ab einer Höhe von ≈ 110 km zu sehr von Sauerstoffreaktionen beeinflusst und werden deshalb auf den Höhenbereich von unter ≈ 110 Kilometer beschränkt.

Damit eine Temperatur mit einer Genauigkeit von ca. 3 K erreicht werden kann, wird Gl. 2.3 über einen Bereich von $\Delta z \approx 200$ m gemittelt, um der Signalmodulation der Spinbewegung entgegenzuwirken [45, 38].

Im Gegensatz zur Messung der Dichte ist die Temperatur nicht direkt vom Wert der Dichte abhängig, sondern vom Verhältnis der Dichten $n(z)/n(z_0)$. Somit hat der Anstieg einer Korrekturfunktion df_{RAM}/dz einen Einfluss auf die Genauigkeit der ermittelten Temperatur [45].

Kapitel 3

Numerische Strömungssimulation im Transitionsbereich zwischen Kontinuumsströmung und freier Molekularströmung

Strömungen, deren Eigenschaften über die eines Kontinuums¹ hinaus gehen und deren molekularer Charakter nicht mehr vernachlässigbar ist, werden als Transitionsströmungen² bezeichnet.

Wie bereits an Gleichung 1.1 in Abschnitt 1.4 zu erkennen ist, ist die Zuordnung einer Strömung mittels Knudsenzahl abhängig von der Länge des lokalen Gradienten einer Strömung und der freien Weglänge, welche im Bereich der MLT-Region mit steigender Höhe und fallender Dichte rasant ansteigt.

Steigt die freie Weglänge in die Größenordnung des ≈ 10 -fachen der charakteristischen Länge (Gleichung 1.2), sind intermolekulare Prozesse vernachlässigbar und freie Molekularströmung liegt vor.

Transitionsströmung wird oftmals in einem Bereich von $0.1 > Kn > 10$ definiert (z.B. [9, 38]). Diese Strömung verlangt nach einer molekular dynamischen Beschreibung.

¹im Sinne der Kontinuumsmechanik: Beschreibung von Körpern als Festkörper, deren molekulare Eigenschaft vernachlässigt werden kann.

²Dieser Begriff wird ebenfalls im Bereich der laminar-turbulenten Transition verwendet. In dieser Arbeit, bezieht sich dieser jedoch ausschließlich auf den Übergangsbereich zwischen Kontinuumsströmung und freier Molekularströmung und ist damit konsistent zur Literatur zum Thema.

Für Höhen von 60 km bis 110 km, die typische Messhöhen von HFR darstellen, ergeben sich mittels gemittelter Atmosphärenmodelldaten [36] freie Weglängen von $\lambda_{VHS} \approx 0.15 \cdot 10^{-3}$ m bis 1.00 m.

Bestimmt man zur ersten Approximation eine globale Knudsenzahl, ergibt sich diese mit Wahl einer charakteristischen Länge des CONE-Sensors in einem Bereich von $Kn \approx 0.25$ bis $Kn \approx 1600$.³ Das untersuchte CONE-Instrument durchfliegt somit den gesamten Strömungsbereich, von einer Strömung in der die Kontinuumsannahme gilt, bis hin zur freien Molekularströmung.

Strömungssimulationen für diesen Transitionsbereich basieren auf Formulierungen der molekularen Gasdynamik, deren Grundzüge zu Anfang dieses Kapitels gezeigt werden. Eine auf dieser Theorie aufbauende Simulationsmethode -DSMC verbindet die molekulare Gasdynamik mit der probabilistischen Monte Carlo Methode und ist für Strömungssimulationen im Transitionsbereich, gerade in der Raumfahrt bei großen mittleren freien Weglängen, aber auch in der Nanotechnologie bei sehr kleinen charakteristischen Längen, eine weit verbreitete Methode [49, 4, 17, 2, 3].

Bei Strömungssimulationen für Instrumente von HFR werden bislang DSMC-Programme des Departments Atmosphärenphysik an der Universität Stockholm (MISU) [17, 16, 15] und Programme von G. A. Bird [5] benutzt. Die Grundzüge der DSMC-Programme werden im Folgenden gezeigt.

DSMC-Programme sind überwiegend zur zweidimensionalen Strömungsberechnung ausgelegt. Die neuste Version des DSMC-Programms von G. A. Bird (*DS3V*) bietet zwar eine dreidimensionale Strömungssimulation, jedoch verfügt diese Version sowie die zuvor genannten nicht über Multiprocessing Möglichkeiten. Dies macht eine dreidimensionale Strömungsberechnung in den meisten Fällen praktisch unmöglich.

Auch komplexe zweidimensionale Geometrien, wie bspw. von ganzen Deckaufbauten, sind aufgrund fehlender Multiprocessingmöglichkeiten immer wieder gescheitert.

Am Ende dieses Kapitels wird deshalb ein an der Universität Strathclyde (Glasgow, UK) entwickeltes DSMC-Programm vorgestellt [41], das über unbegrenzte Multiprocessingfähigkeiten verfügt und in aktuellen Versionen des CFD-Softwaretools *OpenFOAM* zur Verfügung steht.

³Es wurde der Drahtdurchmesser des Elektronenkollektors (0.6 mm) gewählt. Der Elektronenkollektordraht zeigt im Nachlauf eine Strömungscharakteristik, die sich deutlich von der Umgebung abhebt. Im Nachlauf der feineren Strukturen des Ionisationsmanometergitters ist die Strömung hingegen weitestgehend homogen. Die Wahl des charakteristischen Durchmessers wurde in der Vergangenheit nicht einheitlich getroffen [17, 16]

3.1 Molekulare Gasdynamik

Anstelle von makroskopischen Größen wie Temperatur, Druck, Dichte und Geschwindigkeit, die die abhängigen Variablen der Navier-Stokes-Formulierung bilden, werden in der Molekularen Gasdynamik mikroskopische Größen jedes einzelnen Moleküls betrachtet.

Diese enthalten Positions-, Geschwindigkeits- und Zustandsinformationen jedes Partikels und können durch Mittlung über viele Partikel zu makroskopischen Größen umgerechnet werden [9].

Diese Beschreibungsform bildet die Grundlage der in Abschnitt 3.2 vorgestellten Methode. Ein Großteil der nachfolgenden Erläuterungen geht auf Monographien [9, 11] von G. A. Bird zurück.

3.1.1 Einfache dünne Gase

Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird an dieser Stelle eine Beschreibung der Molekulardynamik anhand eines einfachen Gases vorgenommen. In späteren Simulationen werden jedoch Mehrkomponentengase verwendet.

Ein einfaches Gas besteht lediglich aus einer Phase, d.h. alle Teilchen dieses Gases haben die gleichen Struktur- und Masseneigenschaften. Des Weiteren wird von einem dünnen Gas ausgegangen. Dieses zeichnet sich dadurch aus, dass der mittlere Abstand der Teilchen δ um Größenordnungen größer als der Moleküldurchmesser d ist [9].

$$\delta \gg d \quad (3.1)$$

Der mittlere Teilchenabstand ergibt sich aus dem mittleren Volumen V , welches jedem Teilchen zu Verfügung steht [9].

$$V = \frac{1}{n} \quad (3.2)$$

Dabei ist n die Teilchendichte. Der mittlere Abstand ergibt sich aus der Kantenlänge einer gedachten Box, identisch mit dem mittleren Volumen V .

$$\delta = n^{-\frac{1}{3}} \quad (3.3)$$

Diese Annahme erlaubt es, Kollisionen mit nur zwei Teilchen betrachten zu können. An Gl. 3.3 ist zu erkennen, dass die Definition aus Gl. 3.1 für größere Dichten nicht mehr zutrifft.

Zur Prüfung der Annahme eines dünnen Gases wird deshalb zunächst der mittlere Abstand δ mittels Standarddichte n_0 bei Standardnormalbedingungen berechnet.

$$n_0 = \frac{p_0}{k_B T_0} = 2.6867 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3} \Rightarrow \delta = 3.339 \cdot 10^{-9} \quad (3.4)$$

Anschließend wird das Verhältnis von δ/d gebildet. Zur etwaigen Abschätzung wird der „Hard Sphere“⁴ Durchmesser von Luft $d_{air} = 4.19 \cdot 10^{-10}$ [9] gewählt. Das resultierende Verhältnis $\delta/d = 7.99$ erfüllt die Bedingung in Gl.3.1 kaum. Untersucht man dieses Verhältnis für Naval Research Laboratory Mass Spectrometer and Incoherent Scatter Radar Extended (NRLMSISE-00)-Atmosphärendaten [36]⁵ für eine Höhe von 60 km, ergibt sich aus $n_{60km} = 8.776 \cdot 10^{21}$ analog zu Gl. 3.4 ein Verhältnis von $\delta/d = 115.7$. Dieser Wert erfüllt die Annahme eines dünnen Gases in guter Näherung.

3.1.2 Kollisionsmodelle

In der Molekulardynamik gibt es viele Modelle, mit denen intermolekulare Wechselwirkungen beschrieben werden. In einer Veröffentlichung von Gustav Mie [28] wird ein erstes Modell beschrieben, das die van der Waalschen Kohäsionskräfte und die repulsiven Kräfte in einer vom Abstand zweier Moleküle abhängigen Funktion eines Potentials beschreibt.

Für die Beschreibung der Potentiale dieser Funktion werden Potenzansätze gemacht. Ein bekannter Ansatz ist bspw. das Lennard-Jones (12,6)-Potential [20]. Für DSMC-Modelle werden oftmals, wie auch in der vorliegenden Arbeit, einfachere Modelle in Anlehnung an das „Hard Sphere“ Modell verwendet. Diese Modelle sind zwar weniger genau, bieten aber eine höhere Performance bei den ohnehin rechenintensiven DSMC-Simulationen.

Grundlage zur Beschreibung des Impulsaustauschs zweier Teilchen ist der *Stoß*. Bei einfacheren Modellen wird von einem völlig elastischen Stoß ausgegangen [9]. Das heißt, die durch den Stoß übertragene Energie bleibt als kinetische Energie erhalten,

⁴Annahme eines unveränderlichen Teilchendurchmessers. Das harte Kugeln Modell bildet die einfachste Modellvorstellung des Teilchendurchmessers.

⁵Mittelwert 27.Juni 2000-2014: Starttermin der WADISI-Kampagne im 15 Jahre Mittel, siehe 6

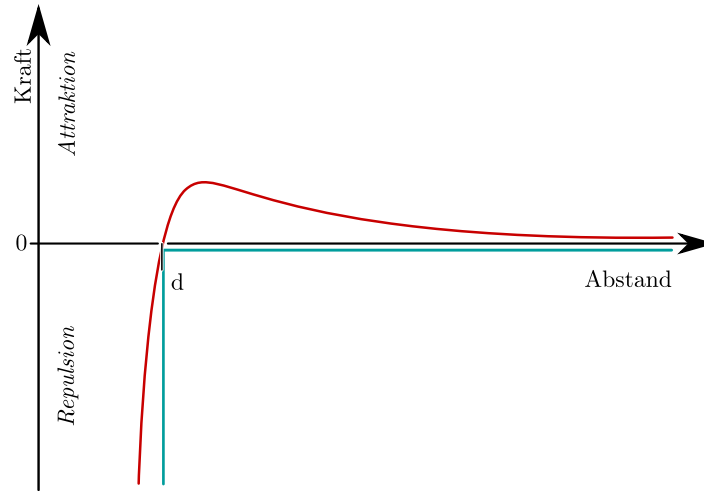


Abbildung 3.1: Wechselwirkungspotentiale. (rot): Anziehende Kräfte (van-der-Waals und Dipolkräfte) in einiger Entfernung. Starke und stark ansteigende, abstoßende Kräfte wirken bei Erreichen eines „kritischen“ Durchmessers. In großer Entfernung gehen die Wechselwirkungskräfte gegen Null [20].
(türkis): Einfacheres „Hard Sphere“-Modell. Bei Unterschreiten eines „kritischen“ Durchmessers wirkt eine starke, abstoßende Kraft.

während in der Realität ein Teil der Energie in Schwingungs- und Rotationsenergie übergeht⁶.

Binäre Kollision

Um den elastischen Stoßvorgang zu beschreiben, wird von der Beschreibung nach G. A. Bird [9] ausgegangen. Ein Großteil der folgenden Erläuterung sind dem entsprechenden Kapitel entnommen.

Für einen elastischen Stoß zweier Massen i und j ergibt sich mit der Impulserhaltung und dem Geschwindigkeitsvektor $\vec{c}$ vor dem Stoß und dem Geschwindigkeitsvektor $\vec{c}'$ nach dem Stoß:

$$m_i \vec{c}_i + m_j \vec{c}_j = m_i \vec{c}'_i + m_j \vec{c}'_j = (m_i + m_j) \vec{c}_m \quad (3.5)$$

Da Energie beim elastischen Stoß als kinetische Energie erhalten bleibt, gilt:

$$m_i c_i^2 + m_j c_j^2 = m_i c_i'^2 + m_j c_j'^2 \quad (3.6)$$

⁶Ein Ansatz von *Larsen-Borgnakke* zur realistischeren Modellierung des Stoßes, ist die Begrenzung des Anteils an kinetischer Energie der einzelnen Partikel, der an der Kollision beteiligt ist [9].

Dabei ist $\vec{c}_m$ die Geschwindigkeit im Massenmittelpunkt der beiden stoßenden Massen. Die relativen Geschwindigkeiten ergeben sich durch $\vec{c}_r = \vec{c}_i - \vec{c}_j$ und $\vec{c}'_r = \vec{c}'_i - \vec{c}'_j$ nach dem Stoß. Damit lassen sich die Geschwindigkeiten der kollidierenden Massen i und j auch mit

$$\begin{aligned}\vec{c}_i &= \vec{c}_m + \frac{m_j}{m_i + m_j} \cdot \vec{c}_r \\ \vec{c}_j &= \vec{c}_m - \frac{m_i}{m_i + m_j} \cdot \vec{c}_r\end{aligned}\tag{3.7}$$

$$\begin{aligned}\vec{c}'_i &= \vec{c}_m + \frac{m_j}{m_i + m_j} \cdot \vec{c}'_r \\ \vec{c}'_j &= \vec{c}_m - \frac{m_i}{m_i + m_j} \cdot \vec{c}'_r\end{aligned}$$

für Geschwindigkeiten vor und nach dem Stoß beschreiben. Ohne Einwirkung externer Kräfte bleibt die Geschwindigkeit $\vec{c}_m$ unverändert. Der Betrag der relativen Geschwindigkeit vor dem Stoß ist gleich dem Betrag der relativen Geschwindigkeit nach dem Stoß, $|\vec{c}| = |\vec{c}'|$.

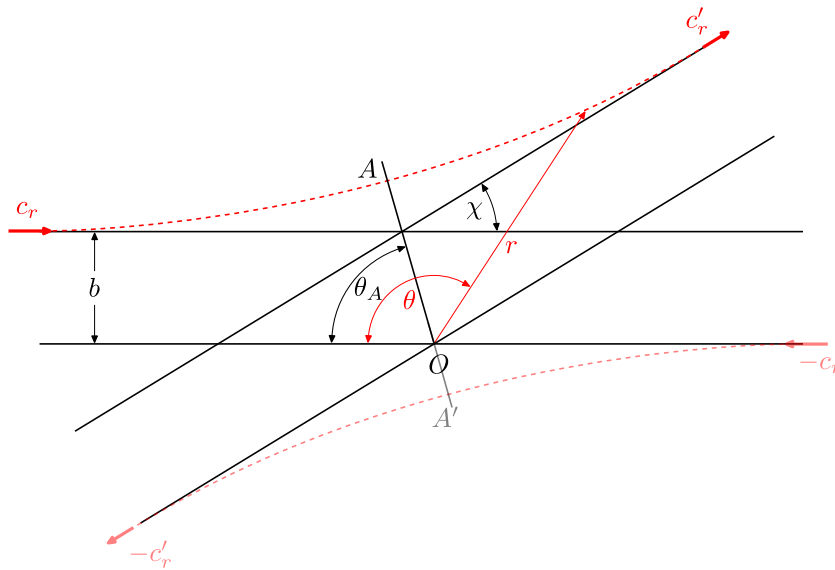


Abbildung 3.2: Skizze einer binären Kollision mit relativen Geschwindigkeiten, reduzierten Massen und einem festen Streupunkt O . Zusammengefasst nach Skizzen in [9].

Die Geschwindigkeiten $\vec{c}_m$ und $\vec{c}_r$ können mit Kenntnis der Geschwindigkeiten vor dem Stoß berechnet werden. Für die Geschwindigkeitskomponenten nach dem Stoß muss nur noch die Geschwindigkeitsänderung der relativen Geschwindigkeit in χ -Richtung ermittelt werden.

Die Bewegungsgleichung der beiden Massen mit den Positionsvektoren $\vec{r}_i$ und $\vec{r}_j$ lautet:

$$\begin{aligned} m_i \ddot{\vec{r}}_i &= F_i = F \\ m_j \ddot{\vec{r}}_j &= F_j = -F \end{aligned} \quad (3.8)$$

Dabei verhalten sich die Kräfte an beiden Massen nach dem „Actio gleich Reactio“-Prinzip, $\sum F = 0$. Betrachtet man nun die relative Beschleunigung beider Massen $\ddot{\vec{r}} = \ddot{\vec{r}}_i - \ddot{\vec{r}}_j$ lassen sich beide Bewegungsgleichungen mit Einführung der relativen Masse $m_r = m_i m_j / (m_i + m_j)$, zu einer Gleichung zusammenführen:

$$m_r \ddot{\vec{r}} = F \quad (3.9)$$

Die zwischen den Molekülen wirkende Kraft F kann durch ein Potential Φ beschrieben werden.

$$F = -\frac{d\Phi}{dr} \quad (3.10)$$

Die Energiebilanz mit Berücksichtigung des Potentials und der kinetischen Energien aus Translations- und Rotationsbewegung im Moment der Wechselwirkung und der rein kinetischen Energie, wenn beide Moleküle genügend weit voneinander entfernt sind, ergibt:

$$\frac{1}{2} m_r (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) + \Phi = \frac{1}{2} m_r c_r^2 \quad (3.11)$$

Vom Wechselwirkungszentrum O ausgehend (siehe Abb.3.2), gilt für die Impulserhaltung bei weiter Entfernung der Moleküle $r \rightarrow \infty$:

$$r^2 \dot{\theta} = b c_r = \text{const.} \quad (3.12)$$

Mit den Gleichungen 3.11 und 3.12 ergibt sich für die Kreisbahn:

$$\left(\frac{dr}{d\theta} \right)^2 = \frac{r^4}{b^2} - r^2 - \frac{\Phi r^4}{1/2 m_r c_r^2 b^2}. \quad (3.13)$$

Substituiert man nun b/r mit der dimensionslosen Koordinate W , erhält man:

$$\left(\frac{dW}{d\theta}\right)^2 = 1 - W^2 - \frac{\Phi}{(1/2m_r c_r^2)} \quad (3.14)$$

Der Winkel θ ergibt sich somit als Integral über der Koordinate W :

$$\theta = \int_0^W \left(1 - W^2 - \frac{\Phi}{(1/2m_r c_r^2)}\right)^{-1/2} \quad (3.15)$$

Für den Schnittpunkt der Kreisbahn mit der Apsis $\overline{OA}$ gilt:

$$\theta = \theta_A \quad (3.16)$$

Somit ergibt sich für θ_A :

$$\theta_A = \int_0^W \left(1 - W^2 - \frac{\Phi}{(1/2m_r c_r^2)}\right)^{-1/2} \quad (3.17)$$

Und wegen $b/r = \text{const.}$ und folglich $\frac{dW}{d\theta} = 0$, kann man das Verhältnis W mittels

$$1 - W^2 - \frac{\Phi}{(1/2m_r c_r^2)} \quad (3.18)$$

berechnen. Der Reflektionswinkel ergibt sich dann zu:

$$\chi = \pi - 2\theta_A. \quad (3.19)$$

Die Geschwindigkeitskomponenten nach der Kollision c'_r lassen sich dann mit

$$c'_r = c_r \begin{pmatrix} \cos\chi \\ \sin\chi \cos\epsilon \\ \sin\chi \sin\epsilon \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

ermitteln. Der Winkel ϵ ist dabei der Winkel zwischen einer zum Geschwindigkeitsvektor senkrechten Ebene und einer Referenzebene. Dieser Winkel wird zufällig aus einer gleich verteilten Menge zwischen $[-\pi, \pi]$ gewählt.

Für die Ermittlung des Wechselwirkungsquerschnitts, der die Wahrscheinlichkeit der Streuung angibt, gilt folgender Zusammenhang [9, 14]:

$$\sigma d\Omega = b db d\epsilon \quad (3.21)$$

Dabei ist $d\Omega$ die Raumwinkeleinheit des resultierenden Geschwindigkeitsvektors.

$$d\Omega = \sin\chi d\chi d\epsilon \quad (3.22)$$

Der differentielle Wechselwirkungsquerschnitt ergibt sich dann zu:

$$\sigma = \left(\frac{b}{\sin\chi} \right) \left| \frac{db}{d\chi} \right|. \quad (3.23)$$

Der totale Wechselwirkungsquerschnitt ergibt sich aus dem Integral des differentiellen Wechselwirkungsquerschnitts über den gesamten Raumwinkel $d\Omega$.

$$\sigma_T = \int_0^{2\pi} \sigma d\Omega = 2\pi \int_0^\pi \sigma \sin\chi d\chi \quad (3.24)$$

3.1.3 Mittlere Kollisionsrate und mittlere freie Weglänge

Bewegen sich zwei Moleküle auf Ihren Bahnkurven aufeinander zu, so kommt es mit der vereinfachenden Annahme der harten Kugeln zur Kollision, wenn der Abstand der Partikelmittelpunkte kleiner als der Durchmesser der Moleküle wird, siehe Abb. 3.3.

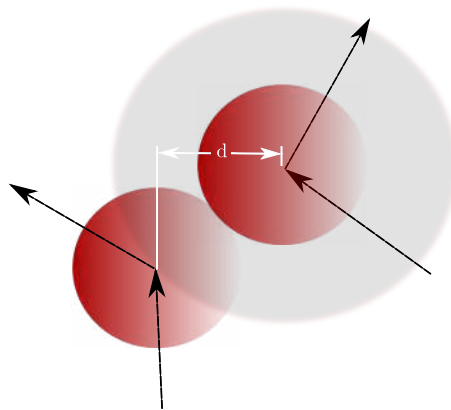


Abbildung 3.3: Wechselwirkungsquerschnitt zweier Moleküle unter der Annahme von „Hard Sphere“ Durchmessern, nach [9].

Definiert man einen Kreis um den Mittelpunkt eines Teilchens, entsteht eine Fläche σ_T , die Wechselwirkungsquerschnitt genannt wird. Dringt ein zweites Teilchen in diese Fläche ein, so kommt es zum Stoß.

Kollisionsrate

Um die Häufigkeit dieser Stoßereignisse zu verifizieren, wird die mittlere Kollisionsfrequenz ermittelt. Dazu betrachtet man ein einzelnes Testpartikel in einem Feld von weiteren Partikeln. Das Testpartikel besitzt die Geschwindigkeit c_T , die Geschwindigkeit der anderen Partikel unterliegt einer unbestimmten Verteilung. Ein Teilchen im Feld hat eine Geschwindigkeit im Bereich von c bis $c + \Delta c$. Dieser Bereich bildet die Geschwindigkeitsklasse $\mathbf{c}$ mit einer Anzahldichte Δn . [9]

Für das Einsetzen eines Stoßereignisses ist die relative Geschwindigkeit $c_r = c_T - \mathbf{c}$ bedeutend. In einem Intervall Δt wird mit dem Wechselwirkungsquerschnitt σ_T ein Volumen aufgespannt, siehe Abb. 3.4.

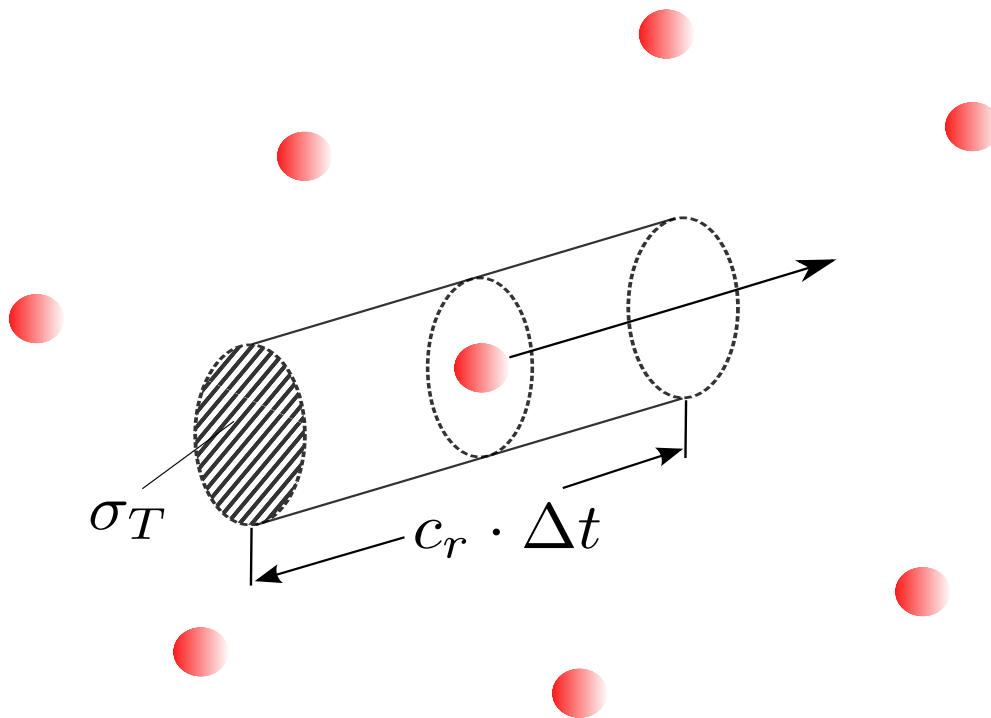


Abbildung 3.4: Effektives Volumen eines Testpartikels, aufgespannt durch den effektiven Wechselwirkungsquerschnitt und die relative Geschwindigkeit des Moleküls im Geschwindigkeitsfeld, nach [9]

Die Wahrscheinlichkeit einer Kollision ergibt sich aus dem Produkt der Teilchendichte Δn und dem Volumen $\sigma_T c_r \Delta t$. Die Summe für alle resultierenden Geschwindigkeiten c_r der Geschwindigkeitsklassen $\mathbf{c}$ im Intervall Δt ergibt die Kollisionsfrequenz ν [9].

$$\nu = \sum \Delta n \cdot \sigma_T \cdot c_r = n \underbrace{\sum \frac{\Delta n}{n}}_{=1} \cdot \sigma_T \cdot c_r \quad (3.25)$$

Dabei ist n der mittlere Wert über alle Klassen mit Δn . Der normierende Ausdruck $\Delta n/n$ geht mit der Summe über alle Teilchen gegen eins. Mit einem mittleren Wechselwirkungsquerschnitt $\overline{\sigma_T}$ und einer mittleren Geschwindigkeit $\overline{c_r}$ erhält man die mittlere Kollisionsfrequenz [9].

$$\nu = n \cdot \overline{\sigma_T} \cdot \overline{c_r} \quad (3.26)$$

Um die absolute Anzahl von Stoßereignissen N zu ermitteln, multipliziert man die Teilchendichte n hinzu [9].

$$N = \frac{1}{2} \cdot n^2 \cdot \overline{\sigma_T} \cdot \overline{c_r} \quad (3.27)$$

Mit dem Faktor $1/2$ wird ein Zählen der Kollision eines Teilchen mit sich selbst verhindert.

Mittlere freie Weglänge

Als mittlere freie Weglänge λ wird die Strecke bezeichnet, die ein Teilchen zwischen zwei Kollisionen zurücklegt. Es wird angenommen, dass alle Teilchen, die für Kollisionen infrage kommen, dieselbe „Feldgeschwindigkeit“ haben wie ein betrachtetes Teilchen. Deshalb ist nur die thermische Bewegung der Teilchen von Bedeutung. Sie ergibt sich aus der mittleren Geschwindigkeit der Maxwell-Boltzmann-Verteilung $\overline{v}$ und der Kollisionsrate ν [9].

$$\lambda = \frac{\overline{v}}{\nu} = \frac{\overline{v}}{n \cdot \overline{\sigma_T} \cdot \overline{c_r}} \quad (3.28)$$

Durch Betragsbildung und Mittlung von c_r gelangt man schließlich auf die Definition der freien Weglänge für ein dünnes Gas unter Annahme eines „Hard Sphere“-Verhaltens.

$$\lambda = \frac{\bar{v}}{\nu} = \frac{\bar{v}}{\sqrt{2}n \cdot \bar{\sigma}_T \cdot \bar{c}_r} \quad (3.29)$$

VHS-Modell

Das Variable Hard Sphere (VHS)-Modell [9] ist das dominierende Molekül-Modell in DSMC-Simulationen und beruht auf einem Spezialfall des inversen Potenzgesetzes für Wechselwirkungspotenziale von Teilchen [11, 9]. Grundlage für das VHS-Modell ist das Hard Sphere (HS)-Modell. Für zwei Teilchen mit den Durchmessern d_1 und d_2 wirkt eine starke, repulsive Kraft in einem Radius r bzw. im Wechselwirkungsdurchmesser d_{12} .

$$r = \frac{1}{2} (d_1 + d_2) = d_{12} \quad (3.30)$$

Der Abstand der ungestörten Trajektorien b kann mit Kenntnis des Winkels θ_A (siehe Abb.3.2) und des Wechselwirkungsdurchmessers ermittelt werden.

$$b = d_{12} \sin \theta_A = d_{12} \cos (1/2 \chi) \quad (3.31)$$

Aus der differentiellen Änderung über den Rückstreuwinkel θ

$$\left| \frac{db}{d\chi} \right| = \frac{1}{2} d_{12} \sin (1/2 \chi) \quad (3.32)$$

ergibt sich dann mit $\sigma = d_{12}^2/4$ aus Gl. 3.23 analog zu Gl. 3.24 der „bekannte“ totale Wechselwirkungsquerschnitt des HS-Modells.

$$\sigma_T = \int_0^{4\pi} \sigma d\Omega = \pi d_{12}^2 \quad (3.33)$$

Dieses Modell hat den Vorteil der einfach zu berechnenden Wechselwirkung zweier Teilchen. Jedoch wird die Tatsache, dass der Wechselwirkungsquerschnitt abhängig von Geschwindigkeit, kinetischer Energie und Temperatur ist, vernachlässigt, was zu unrealistischen Ergebnissen führt.

Eine Annäherung zu realistischeren Ergebnissen gibt ein Potenzansatz mit einem Referenzdurchmesser d_{ref} und einer Referenzgeschwindigkeit $c_{r,ref}$ für eine festgelegte

Temperatur T_{ref} .

$$d = d_{ref} (c_{r,ref}/c_r)^\nu \quad (3.34)$$

Der Reflexionswinkel ergibt sich nach Gl. 3.32 zu:

$$\chi = 2arccos\left(\frac{b}{d}\right) \quad (3.35)$$

Mit Hilfe dieses Ansatzes können genauere Werte der Kollisionsfrequenz ν_{VHS} für die Dichte n und Temperatur T ermittelt werden. Somit wird die mittlere freie Weglänge, analog zu Gl. 3.26 bestimmt.

$$\nu_{VHS} = 2\sqrt{\pi} n d_{ref}^2 \left(\frac{2 k_B T_{ref}}{m_r}\right)^{1/2} \cdot \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^{1-\omega} \quad (3.36)$$

$$\lambda_{VHS} = \frac{1}{\sqrt{2} \pi d_{ref}^2 n \left(\frac{T_{ref}}{T}\right)^{\omega-1/2}} \quad (3.37)$$

3.1.4 Ermittlung makroskopischer Größen

Eine Strömung wird in den meisten Fällen durch makroskopische Größen quantifiziert. Im Kontinuumsansatz sind diese makroskopischen Größen wie Dichte, Druck, Temperatur und Geschwindigkeiten die Variablen der mathematischen Modelle. Betrachtet man eine Strömung auf molekularer Ebene, werden die mikroskopischen Größen (Position, Geschwindigkeit und Energie) durch die Berechnung der Bewegung der Teilchen ermittelt. Anschließend werden zeitliche und räumliche Mittelwerte oder Ensemblemittelwerte vieler Teilchen gebildet. Dabei unterliegen alle Teilchen der Geschwindigkeitsverteilung $f(\vec{c})$. Um eine mittlere Größe $\bar{Q}$ zu ermitteln, wird über die Geschwindigkeitskomponenten $\vec{c}$ integriert[17].

$$\bar{Q} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int Q f(c) d\vec{c} \quad (3.38)$$

Betrachtet man z.B. den Fluss in x-Richtung, ergibt sich: [17]

$$\overline{uQ} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int Q f(c) u d\vec{c} \quad (3.39)$$

Die Geschwindigkeit eines Moleküls ergibt sich aus der Summe von makroskopischer, bzw. mittlerer Geschwindigkeit $\vec{c}$ und thermischer Geschwindigkeit $\hat{c}$.

$$\vec{c} = \vec{c} + \hat{c} \quad (3.40)$$

Der Impuls, der mit der Geschwindigkeit $\vec{c}$ verbunden ist, lässt sich mit der Dichte $Q = \rho$, mit

$$\frac{I}{V} = i = \rho \vec{c} \quad (3.41)$$

darstellen. Betrachtet man nur die Fluktuationen von $\hat{c}$ und multipliziert den Impuls (pro Volumen) mit den weiteren Komponenten von $\hat{c}$, entsteht ein Drucktensor.

$$p_{ij} = \rho \overline{\hat{c}_i \hat{c}_j} \quad (3.42)$$

Der skalare Druck ergibt sich als Mittelwert der Komponenten auf der Symmetrieachse.

$$p = \frac{1}{3} \rho \left(\overline{\hat{u}^2} + \overline{\hat{v}^2} + \overline{\hat{w}^2} \right) \quad (3.43)$$

Die innere Energie verteilt sich auf jeden Freiheitsgrad mit $1/2 n R T$. Die Temperatur T_{tr} ergibt sich aus der inneren Energie der Teilchen für drei Richtungen und der kinetischen Energie.

$$\frac{3}{2} R T_{tr} = \frac{1}{2} \overline{\hat{c}^2} \quad (3.44)$$

3.1.5 Lokales thermodynamisches Gleichgewicht

Wird ein thermodynamisches Gleichgewicht auf makroskopischer Ebene angenommen, so sind makroskopische Parameter, wie Dichte und Temperatur, im Mittel über alle Moleküle konstant. Die innere Energie im System hat einen konstanten Wert angenommen. Die Entropie hat das Maximum, den Zustand größtmöglicher Unordnung, erreicht [20]. Das lokale System ist ein kleines Volumen mit einer hinreichenden Anzahl an

Partikeln mit denselben makroskopischen Eigenschaften. Für ein solches System können Geschwindigkeiten $|\hat{c}|$ mit der Maxwell-Boltzmann-Verteilung beschrieben werden. Die Verteilungsdichte der Maxwell-Boltzmann-Verteilung für ein einzelnes Teilchen ist:

$$f_0(\hat{c}) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{m \hat{c}^2}{2 k_B T}} \quad (3.45)$$

Integriert man Gl. 3.45 über den Geschwindigkeitsintervall $[\hat{c}; \hat{c} + d\hat{c}]$, so erhält man:

$$f_c(\hat{c}) = 4 \cdot \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \hat{c}^2 \cdot e^{-\frac{m \hat{c}^2}{2 k_B T}} \quad (3.46)$$

Aus dieser Verteilung können dann Größen wie die wahrscheinlichste Geschwindigkeit

$$\bar{\hat{c}} = \sqrt{\frac{8 k_B T}{\pi m}} \quad (3.47)$$

sowie die mittlere Geschwindigkeit bestimmt werden.

$$\hat{c}_m = \sqrt{\frac{2 k_B T}{m}} \quad (3.48)$$

Für die intermolekularen Stöße sind die resultierenden mittleren Geschwindigkeiten $\vec{c}_{res} = |\vec{c}_1 - \vec{c}_2|$ zweier Moleküle von Bedeutung, siehe Abschnitt 3.1.2. Diese können ebenfalls aus der Maxwell-Boltzmann-Verteilung ermittelt werden.

$$|\vec{c}_{res}| = \sqrt{\frac{16 k_B T}{\pi m}} \approx \sqrt{2} \hat{c} \quad (3.49)$$

3.2 Direct Simulation Monte Carlo

Der Begriff *Direct Simulation Monte Carlo* geht auf G. A. Bird zurück, der seine Entwicklung bereits 1963 erstmalig veröffentlicht hat [6]. Während der Ausdruck „*Direct Simulation*“ die Eigenschaft bezeichnet, dass bei der DSMC-Methode die Stoßprozesse direkt simuliert werden und nicht auf mathematischen Modellen der Boltzmann Gleichung beruhen, kennzeichnet der Terminus „*Monte Carlo*“ den zugrunde liegenden Charakter einer Zufallssimulation.

Für Strömungssimulationen im Transitionsbereich hat sich die DSMC als Standard simulationsverfahren in der Luft- und Raumfahrt etabliert. Die Ursache ist, dass eine direkte Lösung der Boltzmann-Transportgleichung

$$\left(\frac{\delta}{\delta t} + \vec{c} \cdot \nabla_{\vec{x}} + \frac{1}{m} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{c}} \right) f(\vec{x}, \vec{c}, t) = \frac{\delta f}{\delta t} \Big|_{Kollision} \quad (3.50)$$

aufgrund des Kollisionsintegrals $\delta f / \delta t|_{Kollision}$ der rechten Seite nur mit sehr großem Aufwand und für einfache Probleme lösbar ist. In der Boltzmann-Transportgleichung beschreibt die linke Seite die zeitliche Änderung der Verteilungsdichte $f(\vec{x}, \vec{c}, t)$, den Transport und die Änderung der äußeren Feldkräfte.

Die DSMC-Methode ist ein phänomenologisches Modell, das die Beschreibungsformen der Molekulardynamik mit Zufallsmethoden kombiniert.

Im Wesentlichen ist die DSMC dadurch charakterisiert, dass anstelle der Moleküle, die in einer Strömung einer bestimmten Dichte vorhanden sind, nur ein kleiner Teil ($\approx 10^{-10}$) der Moleküle in Form von Testpartikeln simuliert werden.

Des Weiteren wird die Annahme gemacht, dass die Bewegung der Partikel und intermolekulare Kollisionen voneinander unabhängig sind. Diese Annahme ist für einen genügend kleinen Zeitschritt⁷ Δt gültig.

Weiterhin wird von binären Stößen ausgegangen, wie sie in Abschnitt 3.1.2 beschrieben werden. Diese Annahme beschränkt die Anwendung auf dünne Gase. Die durchschnittliche Anzahl von Kollisionen wird durch das Produkt aus potentiell möglichen Kollisionen

$$\frac{N(N-1) F_N (\sigma_{TCr})_{max}}{2V_c} \quad (3.51)$$

und der Wahrscheinlichkeit P , mit der eine Kollision jedes Paares in einer Zelle auftritt, bestimmt.

$$P = \frac{\sigma_{TCr}}{(\sigma_{TCr})_{max}} \quad (3.52)$$

Dabei ist N die Anzahl der Partikel im Zellvolumen V_c und F_N die Anzahl an realen Molekülen, die durch ein Testpartikel repräsentiert werden [9].

⁷kleiner als die mittlere Zeit zwischen den Kollisionen, siehe Abschnitt 4.1

Voranstehende Annahmen machen die DSMC-Methode äußerst effektiv im Vergleich zu Molecular Dynamik (MD)-Simulationen. Eine Konvergenz gegen die Boltzmann-Transportgleichung konnte mit einer Partikelzahl gegen unendlich sowie verschwindend kleinen Zellgrößen und Zeitschritten nachgewiesen werden [18, 50].

Mit der DSMC-Methode können transiente und stationäre Strömungen berechnet werden, da die physikalischen Prozesse direkt simuliert werden. Die Ergebnisse konvergieren jedoch nicht im Sinne einer Computational Fluid Dynamics (CFD)-Simulation, sondern schwanken auch im stationären Zustand um einen Wert. Dieses Schwanken kann auf die statistisch schwankenden Zustände der „wenigen“ Testpartikel zurückgeführt werden und verhält sich proportional zu $\sqrt{N}$ mit der Partikelanzahl N . Durch Mittlung lassen sich diese Schwankungen herausrechnen.

In aktuelleren Versionen von DSMC-Programmen [5] können auch dreidimensionale Probleme berechnet werden. Dies gibt die Möglichkeit, dreidimensionale Geschwindigkeiten, wie sie bspw. durch die Präzisionsbewegung einer HFR entstehen können, in Simulationen zu berücksichtigen [22]. Jedoch sind die Möglichkeiten von 3D-Simulationen ohne Multiprocessing auf einfache bzw. kleine Simulationen begrenzt, da der Rechenbedarf mit drei Raumrichtungen schnell $\approx x^3$ ansteigt.

Alle DSMC Programme basieren seit Beginn der DSMC auf einer ähnlichen Programmstruktur. Diese gliedert sich in drei Phasen. Im Vorfeld dieser Phasen wird ein Gitter erstellt, Randbedingungen vorgegeben und Kontrollparameter, wie Zeitschritt und das Verhältnis von Testpartikeln und realen Molekülen, vorgegeben. In einer ersten Phase, der **Initialisierung**, werden die Partikel einzelnen Positionen zugeordnet und ihre Geschwindigkeit und Energie anhand der vorgegebenen Randbedingungen (Einströmgeschwindigkeit und Temperatur) ermittelt.

In einer nächsten Phase, der **Hauptphase**, werden die Partikel zunächst anhand ihrer Geschwindigkeit und des Zeitschritts versetzt. Daraufhin werden Reflexionen mit den Wänden berechnet und Partikel an den Rändern gelöscht oder hinzugegeben. Im Anschluss werden die (Zell-)Positionen der Partikel gespeichert.

Wenn die Summe der vergangenen Zeitschritte größer ist, als die Zeit zwischen den Kollisionen zweier Partikel in den Zellen mit einer bestimmten Anzahldichte, werden die Kollisionen in kleineren Subzellen berechnet. Dafür wird davon ausgegangen, dass die beiden Partikel miteinander wechselwirken, die sich am nächsten sind (vgl. *Nearest Neighbour* [10]). In einer letzten Prozedur werden **makroskopische Eigenschaften** über Mittelwertbildung in den Zellen **berechnet**.

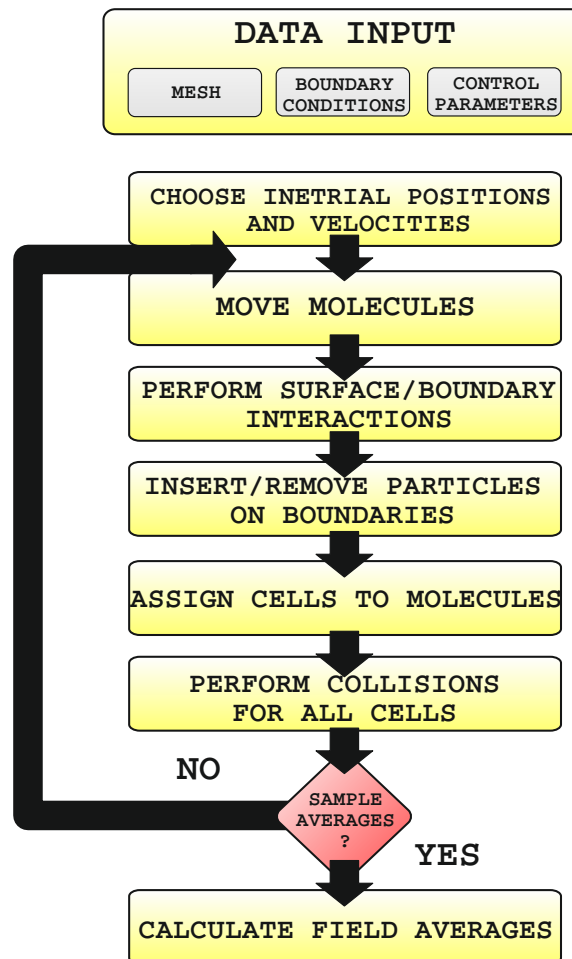


Abbildung 3.5: DSMC Programmstruktur. Diese Struktur ist allgemeingültig für die DSMC-Methode.

3.3 DSMC mit *OpenFOAM*

OpenFOAM (*Open Field and Operation*) ist ein offenes und freies CFD-Softwaretool mit dem Schwerpunkt der numerischen Kontinuumsmechanik. Es beinhaltet viele C++ Bibliotheken, die sich in drei Bereiche untergliedern, siehe Abb. 3.6.

Zur Diskretisierung des Raumes werden viele Meshing-Tools durch das OpenFoam-Softwarepaket zur Verfügung gestellt. Es können jedoch ebenso eine Reihe von Tools anderer und auch kommerzieller Anbieter genutzt werden. Diese können mittels Programmen der Bibliothek „Utilities“ in ein unterstütztes Format konvertiert werden. Die Bibliothek „Utilities“ enthält ebenfalls zahlreiche Postprocessing-Routinen, mit denen Datenfelder manipuliert/berechnet werden können. Auch Samplingroutinen

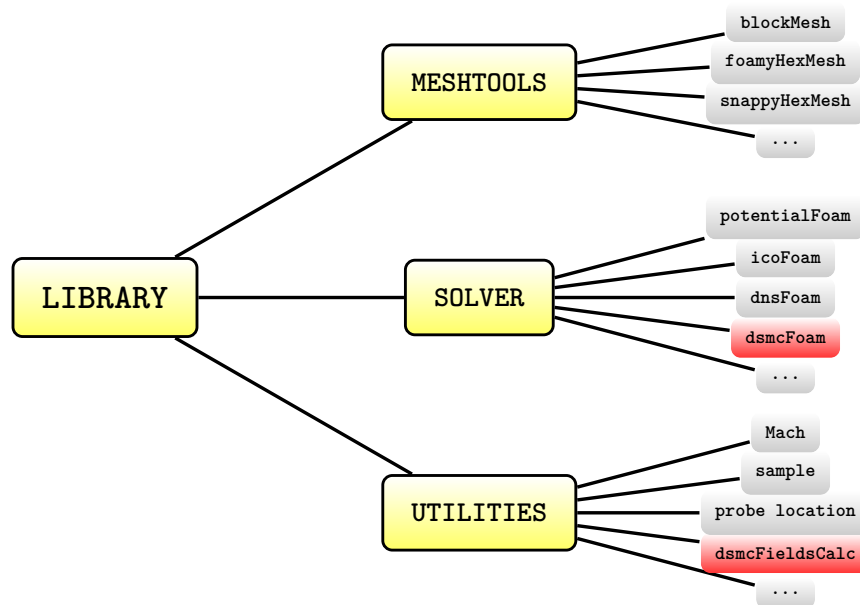


Abbildung 3.6: Struktur der OpenFOAM C++ Bibliotheken

zum Auswerten bestimmter Punkte im Raum sind in dieser Bibliothek zu finden. Als räumliche Diskretisierungsverfahren kommen Finite Elemente Methode (FEM) und Finite Volumen Methode (FVM) zum Einsatz.

Mit dem *dsmcFoam*-Tool steht seit der Version 1.6 der offenen C++ CFD-Toolbox ein DSMC-Löser zur Verfügung. Der von Scanlon u.a. [41] implementierte Code basiert auf einer frühen Version von G. A. Bird [7].

Neben einer gut sortierten modularen Architektur und der Möglichkeit, Programme nach belieben zu verändern oder hinzuzufügen, ist die Multiprocessing-Möglichkeit, die auf unterer Ebene gesetzt wird, eine der herausragendsten Eigenschaften des OpenFOAM- Softwarepakets. Das Rechengebiet wird dazu in beliebig viele Teilgebiete unterteilt, der Informationsaustausch erfolgt mittels Multi Processing Interface (MPI). Es fallen keine Lizenzkosten für die Nutzung verschiedener CPU's an. Somit eignet sich OpenFOAM besonders für den Einsatz auf großen Rechenmaschinen.

Strömungssimulationen sind in OpenFOAM immer dreidimensional angelegt. Diese Möglichkeit kann auch für den *dsmcFoam*-Löser genutzt werden [33].

Für die Generierung eines Netzes steht eine Vielzahl von Programmen zur Verfügung. Besonders erwähnenswert sind dabei die auch für die hier vorgestellten Ergebnisse verwendeten Programme *blockMesh* für die Erzeugung eines ersten Basisnetzes, *refine-HexMesh* für Rechennetze mit sehr vielen Zellen und *snappyHexMesh*. Diese Programme

sind im OpenFOAM-Paket (z.B. Version 3.1.0) enthalten. Mit dem Tool *snappyHexMesh* lassen sich dreidimensionale STL-Geometrien, die in einem CAD-Programm erstellt wurden, automatisch vernetzen. Die Aufteilung des Rechengebiets für parallele Rechnungen erfolgt mit Hilfe des *decomposePar* genannten Programms. Die Initialisierung wird mit *dsmcInitialize* durchgeführt. Die Hauptroutine trägt den Namen *dsmcFoam*. Zusammenfassend lassen sich folgende Merkmale des *dsmcFoam*-Lösers ableiten [41]:

- Unbegrenztes Multiprocessing (High Performance Computing (HPC))
- Zwei- und dreidimensionale Geometrien
- Verwendung von STL-Files aus CAD Programmen
- Periodische Randbedingungen (keine Wedge-Geometrien)
- Nearest-Neighbour-Modell für die Auswahl der Kollisionspartner mittels automatischer Subcell-Routine
- VHS-Kollisionsmodell
- Nutzung vieler gängiger Gasarten
- Energieberechnung der Rotation nach Larsen-Borgnakke⁸.
- Maxwell Gas-Oberflächen-Interaktion
- Freistromrandbedingungen (Geschwindigkeitsvektor und Temperatur auf den Rändern)

Der Verlauf einer Rechnung kann anhand von *log-Files* nachvollzogen und z.B. mittels Python-Script ausgewertet werden.

Nach Erreichen eines hinreichend genauen Ergebnisses⁹, werden die Teillösungen der Unterrechengebiete mittels *reconstructPar* wieder zusammengeführt.

Das Postprocessing kann anschließend mit dem OpenFOAM-Paket kommenden Programm *ParaView* erfolgen.

Das *dsmcFoam*-Tool ist bereits jetzt eine voll einsatzfähige Software, die insbesondere an der Strathclyde Universität weiterentwickelt wird. Seit Kurzem ist, ähnlich wie in den Programmen von G. A. Bird, ein chemisches Modell in *dsmcFoam* implementiert, siehe [42]. Dieses konnte zur Bearbeitungszeit jedoch nicht validiert werden.

Eine Anpassung des Codes zur Steigerung der Performance bei spezifischen Problemen

⁸in den hier präsentierten Berechnungen nicht verwendet. Mehr Informationen in [9]

⁹Näheres zur „Konvergenz“ einer DSMC in Abschnitt 4.1.4

oder das Einarbeiten weiterer Modellkomponenten ist mittels OpenFOAM aufgrund der freien Nutzung und Möglichkeiten der Modifizierungen und der übersichtlichen Struktur relativ leicht umsetzbar.

Kapitel 4

Vorbetrachtungen zur Arbeit mit *dsmcFoam*

Zur Vorbereitung auf die in Kapitel 6 durchgeführten Simulationen werden einige der im Vorfeld der Simulationen für das Cone-Instrument praktizierten Rechnungen, gezeigt. Dazu werden zunächst Vorüberlegungen für eine praktische Umsetzung einer DSMC-Simulation getätigt. Daraufhin werden Ergebnisse einiger Testfälle vorgestellt: Zum einen eine Studie zum Verhalten des *dsmcFoam*-Lösers auf mehreren CPUs, zum anderen Ergebnisse einer Untersuchung zur Vereinfachung der Geometrie und des Rechengebiets, die nötig wird, da ein feines Gitter gerade bei DSMC zu sehr großem Ressourcenbedarf führt.

4.1 Qualitätskriterien einer DSMC-Simulation

Wie bei anderen CFD-Simulationen ist bei einer DSMC einige Vorarbeit zu leisten, um ein qualitativ hochwertiges Ergebnis zu erzielen. Maßgeblich dafür sind die Schritte **Gittergenerierung**, Festlegen des **Scalingfaktors** F_N , **Wahl des Zeitschritts** und das **Konvergenzverhalten**.

4.1.1 Gittergenerierung

Mittels Gittergenerierung wird das zu berechnende Volumen räumlich diskretisiert. Über Gitterzellen werden den simulierten Partikeln eine Positionen zugeordnet. Außerdem

werden die zu berechnenden Stöße zweier Partikel mit der Wahl einer Gitterzelle ermittelt. Zusammengefasst lassen sich folgende Kriterien identifizieren:

Partikelzahl in einer Zelle: Um einen aussagekräftigen Mittelwert über alle Teilchen in einer Zelle zu erhalten, ist eine Partikelmindestanzahl erforderlich. Des Weiteren beeinflusst die Partikeldichte den Fehler, der bei der Wahl des Kollisionspartners entsteht. Die Kollisionspartner werden jeweils aus nur einer Zelle ausgewählt. Ist die Partikeldichte zu gering, steigt mit abnehmender Zellbelegung die Wahrscheinlichkeit, dass mehrmals dieselben Kollisionspartner gebildet werden und diese einen weiteren Abstand zueinander haben, als zu einem Teilchen in einer benachbarten Zelle. Die Wahrscheinlichkeit, dass Teilchen weiterer Entfernung zusammenstoßen, ist jedoch tatsächlich geringer als jene zweier näher gelegener Teilchen. Eine Simulation mit einer zu geringen Teilchendichte liefert daher unphysikalische Ergebnisse.

Auf der anderen Seite erhöht sich die benötigte Rechenzeit sowie der Speicherbedarf linear mit steigender Teilchendichte. Im Optimalfall sollten Zellen eine Zellbeladung von ca. 30 bis 40 Partikeln aufweisen [10]. Eine höhere Teilchendichte führt zu Performanceeinbußen. Eine Zellbeladung unter 7 Teilchen führt zu erhöhten Fehlern in den abgeleiteten makroskopischen Größen [10].

Zellenvolumen: Damit die molekulare Eigenschaft der Partikel in der Simulation mit berücksichtigt werden kann, dürfen die Seitenlängen x_{cell} , y_{cell} , z_{cell} nicht zu groß gewählt werden. Als Höchstmaß kann die mittlere freie Weglänge λ herangezogen werden. In Bereichen mit hohen Gradienten der Strömungsgrößen sollten die Zelldimensionen etwa ein Drittel der mittleren freien Weglänge betragen, $(x_{cell}, y_{cell}, z_{cell}) \leq 1/3\lambda$. Diese Wahl liefert beste Übereinstimmungen zu analytischen Lösungen einer Poiseuille-Strömung für unterschiedliche Strömungsbereiche, siehe [47].

Aus praktischen Gründen wird die mittlere freie Weglänge der ungestörten Strömung als Referenz herangezogen.

4.1.2 Festlegen des Scalingfaktors

Der Scalingfaktor F_N beschreibt das Verhältnis von realen Partikeln und den in der Simulation vorhandenen Partikeln. Je größer der Scalingfaktor bei identischer realer Dichte, desto weniger Partikel sind in der Simulation vorhanden. Über den Scalingfak-

tor lässt sich somit direkt die Anzahl der Partikel in der Simulation steuern. Diese hat wiederum einen Einfluss auf die benötigten Rechenkapazitäten und die Genauigkeit des Ergebnisses. Typischerweise überschreitet der Scalingfactor den Größenordnungsbereich von $< 10^{11}$ nicht (z.B. [41, 47, 4]).

Bei steigendem Scalingfaktor steigen die statistischen Ungenauigkeiten an. Sind die Speicherressourcen begrenzt, so dass ein Scalingfaktor $\approx 10^{11}$ nicht mehr realisierbar ist, kann eine Simulation mehrmals gerechnet werden und der Ensemblemittelwert ermittelt werden [9]. Diese Vorgehensweise empfiehlt sich vor allem bei transienten Simulationen.

Auch ein zeitlicher Mittelwert für einen ‚stabilen‘ Zustand vermindert statistische Unsicherheiten. Systematische Fehler, die z.B. durch die Kollisionspartnerauswahl entstehen, lassen sich so jedoch nicht unterdrücken.

4.1.3 Wahl des Zeitschritts

Wie in Abschnitt 3.2 erwähnt, kann die Entkopplung der Translationsbewegung und der Kollisionen nur für genügend kleine Zeitschritte angenommen werden. Die Größenordnung wird ebenfalls über die mittlere freie Weglänge definiert. Der Zeitschritt Δt sollte ein Bruchteil der Zeit zwischen zwei Kollisionen sein. Für den Zeitschritt gilt:

$$\Delta t = \frac{k}{\pi d^2 \bar{c} n} \quad (4.1)$$

Dabei wird die wahrscheinlichste Geschwindigkeit der Maxwell-Boltzmann-Verteilung $\bar{c}$ über die inertielle Temperatur am Rand ermittelt.

Über den Faktor k wird die Größe des Anteils von Δt an der mittleren Zeit zwischen den Kollisionen eingestellt. Dieser ist immer eine reale Zahl kleiner eins, $k < 1$. Da die genauen lokalen Dichten und Temperaturen zu Anfang der Simulation noch unbekannt sind, sollte dieser Wert großzügig, z.B. mit $k = 0.15$ gewählt werden. Um den Rechenaufwand pro Zeitschritt zu verringern, kann k aber auch deutlich kleiner gewählt werden.

4.1.4 Konvergenzverhalten

Eine Konvergenz im Sinne einer stetigen Annäherung gegen einen Grenzwert, wie bei einer mathematischen Folge, existiert bei der DSMC-Methode nicht direkt. Durch die

Zufallscharakteristik bleibt auch bei stationären Simulationen ein Schwanken um einen Mittelwert. Somit konvergieren Ergebnisse einer DSMC nur im Mittel (bei Betrachtung einer Sampleanzahl von $n \rightarrow \infty$) gegen einen konstanten Wert. In Anlehnung an andere Strömungssimulationen, die beispielsweise auf die Navier-Stokes-Gleichungen zurück gehen, soll der Begriff in dieser Arbeit jedoch ebenfalls für das Erreichen stabiler Ergebnisse verwendet werden.

Als Größen zur Beurteilung der Konvergenz bei stationären Problemen eignen sich die Mittelwerte von Energie, Anzahl der Kollisionen oder die Anzahl der im Rechengebiet befindlichen Partikel.

4.2 Skalierung von *dsmcFoam* auf dem Hochleistungsrechner am IAP

Erste Rechnungen auf der IAP-Rechenmaschine sollen eine Aussage über die Skalierung des *dsmcFoam*-Modells ermöglichen.

Als Skalierung wird das Verhältnis von genutzten CPU-Ressourcen zu benötigter Rechenzeit eines Modells verstanden. Modelleigenschaften wie Zeitschritt, Anzahl der Partikel und Größe des Rechengitters haben einen maßgeblichen Einfluss auf die CPU- und Speicherressourcen und müssen daher innerhalb einer Messreihe konstant gehalten werden.

Es werden drei einfache Testfälle betrachtet. Das Rechengebiet der Scaling-Test-Cases (STCs) beinhaltet keine umströmte Geometrie. An den Rändern werden Freistromrandbedingungen für die Geschwindigkeit und die Temperatur angegeben. Diese sind an Einlass, Auslass und den Seiten identisch.

Die wichtigsten Parameter der Simulation sind in Tabelle 4.1 zusammen gefasst.

	cells	F_N	particles	time step	final time
STC1	$20 \times 16 \times 16$	$1.00 \cdot 10^{12}$	271662	$1.1 \cdot 10^{-6} \text{ s}$	0.0200002 s
STC2	$25 \times 20 \times 20$	$5.0 \cdot 10^{11}$	543970		
STC3	$31 \times 25 \times 25$	$2.5 \cdot 10^{11}$	1087502		
STC4	$39 \times 31 \times 31$	$1.25 \cdot 10^{11}$	2174151		

Tabelle 4.1: Setup Parameter der STCs

Die Testfälle werden mit einer Auswahl von einer CPU bis zu 100 Dualcore CPUs gerechnet. Die jeweils benötigten Rechenzeiten sind in Abb. 4.1 gezeigt.

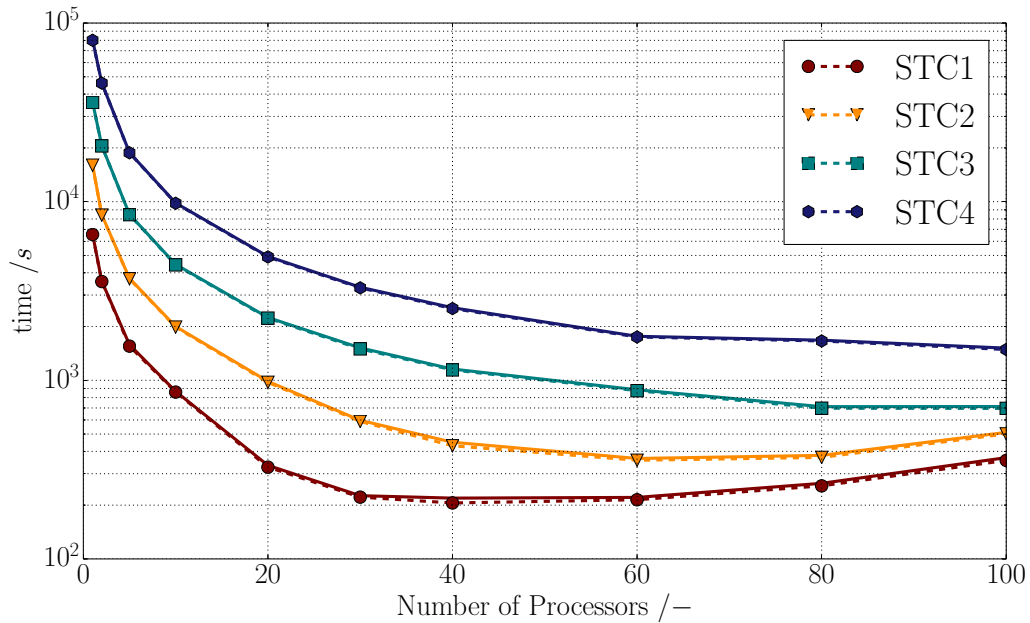


Abbildung 4.1: Ergebnisse der Testrechnungen zur Untersuchung des Skalierungsverhaltens. Gestrichelte Linien (- -): Execution Time, reine Rechenzeit. Durchgehende Linie (—): Clock Time, tatsächlich benötigte Gesamtzeit. Für jeden Testfall ergibt sich ein Optimum von genutzten Prozessoren.

Die benötigten Rechenzeiten unter theoretischer Volllast (execution time) und die tatsächlich beanspruchte Zeit (clock time) liegen in allen Fällen nur wenige Sekunden auseinander. Dies spricht für eine sehr gute Auslastung der einzelnen CPUs. Bei den Testrechnungen wurde, wie bei allen weiteren vorgestellten Rechnungen, die Dekompositionsmethode *scotch* verwendet. Bei dieser Methode werden den Prozessoren in etwa die gleiche Zellenanzahl des Rechengebiets zugeteilt. Es wurde davon ausgegangen, dass diese ungefähr mit der Partikelzahl, die die Rechenlast maßgeblich bestimmt, korreliert. Eine Methode, in der eine bestimmte Partikelanzahl den einzelnen CPUs zugeordnet wird, existiert derzeit noch nicht.

Um das Skalierungsverhalten des Modells zu beurteilen, wird eine Effektivität ϵ eingeführt. Sie soll die zu erwartende Skalierung mit der in der Rechnung festgestellten vergleichen und normieren. Die erwartete Skalierung s_{exp} wird aus dem Verhältnis der genutzten Prozessoren bei Gebrauch von N bzw. $N - M$ -Prozessoren gebildet:

$$s_{exp} = \frac{CPU_{N-M_{used}}}{CPU_{N_{used}}} \quad (4.2)$$

Werden für eine Rechnung z.B. $N = 10$ CPUs benutzt und mit einer Rechnung $N - M = 5$ verglichen, ergibt sich eine erwartete Skalierung von $s_{exp} = 0.5$. Bei Verdoppelung der CPUs halbiert sich die theoretisch benötigte Rechenzeit.

Die in der Rechnung festgestellte Skalierung lässt sich aus dem Verhältnis der benötigten Rechenzeiten bestimmen. Dazu werden die tatsächlichen Zeiten miteinander verglichen.

$$s_{real} = \frac{t_{N-M}}{t_N} \quad (4.3)$$

Die Effektivität ergibt sich dann als Verhältnis von erwarteter und tatsächlicher Skalierung in Prozent.

$$\epsilon = s_{real} / s_{exp} \cdot 100\% \quad (4.4)$$

$$(4.5)$$

Eine Übersicht der Skalierung der Testfälle zeigt Tabelle 4.2.¹

	1	2	5	10	20	30	40	60	80	100
STC1	92.0 %	90.6 %	91.2 %	129.8 %	98.5 %	77.4 %	—	—	—	—
STC2	95.1 %	90.8 %	93.0 %	101.4 %	110.1 %	99.5 %	82.2 %	—	—	—
STC3	87.9 %	96.9 %	95.1 %	91.1 %	98.6 %	98.6 %	87.0 %	93.2 %	—	—
STC4	87.3 %	98.1 %	95.7 %	99.6 %	99.2 %	97.6 %	96.4 %	78.8 %	88.6 %	—

Tabelle 4.2: Effektivität der Skalierung für drei verschiedene Testfälle STC1 bis 3

Insgesamt ergeben sich sehr gute Effektivitätswerte bei den betrachteten Testsimulationen. Bei den kleineren Simulationen STC1 und STC2 tritt ein zusätzlicher Gewinn mit Effektivitätsraten $\epsilon > 100\%$ auf - dieser ist vermutlich maschinenbedingt (Übertakten). Mit einer ungefähren Verdoppelung der Zellenanzahl sowie der Partikelanzahl ergibt sich ein Anstieg der Rechenzeit in einem Bereich von ~ 2 bis ~ 3 . Nach Erreichen eines Rechenzeitminimums steigt die Rechenzeit mit der Hinzunahme weiterer Prozessoren wieder an. Dieser Effekt ist auf den bei *dsmcFoam* nötigen Informationsaustausch an den Grenzen der Rechengebiete einzelner Prozessoren und auf eine geringere Auslastung der einzelnen CPUs zurückzuführen.

¹Dieser Vergleich kann nur korrekt sein, wenn $t_N > t_{N-M}$ ist. Wenn die Rechenzeiten auf mehr CPUs t_N größer ist, als die auf weniger, wird auf die Berechnung einer Effizienz verzichtet.

Des Weiteren wurden die Schreibintervalle der oben gezeigten Rechnungen konstant gehalten. Da die Größe der Ordnerstrukturen mit jedem Prozessor ansteigt, erhöht sich der Schreibaufwand der Zwischenergebnisse jedes Teilrechengebiets. Die Rechenzeiten zeigen einen linearen Zusammenhang mit dem Reziprok der CPU-Anzahl. Dies deckt sich mit Tests von anderen *OpenFOAM*-Lösern [33].

Kapitel 5

Vereinfachende Annahmen

Die DSMC-Methode erfordert im Vergleich zu anderen CFD-Methoden sehr viel mehr Rechenzeit. Daher ist es notwendig, das Rechenggebiet zu begrenzen. Erste Rechnungen zur Netzgenerierung haben gezeigt, dass die CONE Geometrie mit großen Skalenerunterschieden auch für HPC-Anwendungen zu einer unpraktikabel großen Anzahl von Partikeln führt.

Problematisch sind die Skalenerunterschiede zwischen dem Drahtdurchmessern der verwendeten Gitter (0.1-0.6 mm) und dem Durchmesser der Gitterkugeln ($\approx 20\text{-}60\text{ mm}$) von $\approx 10^2$ sowie zum Gesamtsensoraufbau mit Größenordnungsunterschieden von 10^3 . Im Gegensatz zu CFD-Methoden führt ein nur teilweise verfeinertes Rechennetz, z.B. an den Wänden, nicht zu Performanceverbesserung, weil sich die Partikelanzahl in großen Zellen schlicht erhöht, zumal eine Mindestanzahl in den kleinsten Zellen aus Qualitätsgründen einzuhalten ist, vgl. Kapitel 4.

Eine Eingrenzung des Rechengebiets kann unter der Annahme erfolgen, dass der untersuchte Bereich frei von starken Einflüssen auf die Strömung von Quellen außerhalb des Rechengebietes ist, sofern diese nicht als Randbedingung angegeben werden können. Weil sich HFRs einen Großteil eines Fluges im supersonischen Bereich bewegen (siehe Abb. 5.2), ist es notwendig, den Einfluss der entstehenden Störungen zu untersuchen. Der in dieser Arbeit untersuchte WADISI Aufbau ist in Abb. 5.1 gezeigt. Dieser Aufbau ist typisch für eine HFR-Konfiguration mit CONE Messungen.

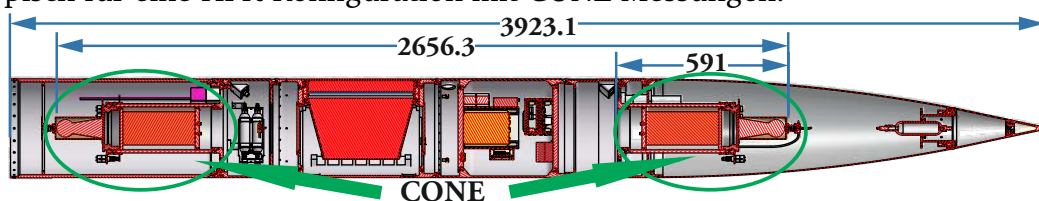


Abbildung 5.1: WADISI Nutzlastaufbau mit CONE-Sensoren vorne und hinten auf der Nutzlast. Der Durchmesser der Nutzlast beträgt 17 Zoll, d.h. 431.8 mm

5.1 Wahl des Simulationsvolumens

Es ist zu untersuchen, ob die Hauptnutzlast einen Einfluss auf die Strömung innerhalb des Messvolumens des CONE-Sensors hat. Diese Untersuchung ist angebracht, um anschließend das Simulationsgebiet auf einen kleinstmöglichen Volumen zu beschränken. Für die Untersuchungen der Lage der Schockfront wird zum einen eine Methode von W.E. Moeckel [29] herangezogen, zum anderen werden diese Ergebnisse mit 2D-Simulationen mittels *dsmcFoam* für dieselben Strömungsbedingungen (Abb. 5.2) verglichen. Erstere Methode wurde bereits zur Untersuchung der Schockwelle für

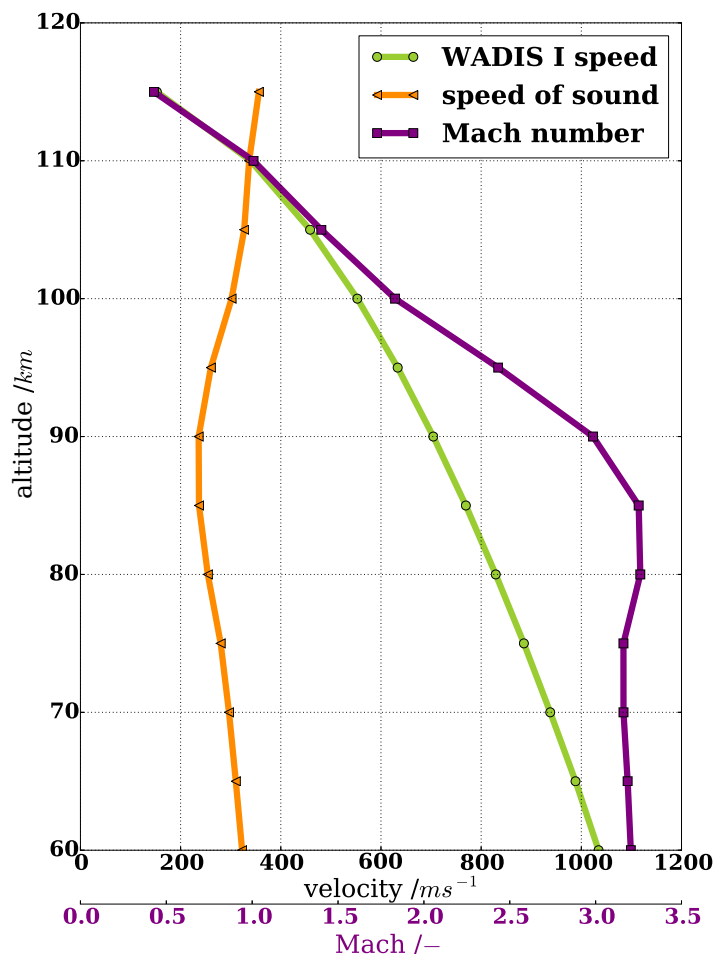


Abbildung 5.2: Machzahlen und Geschwindigkeiten der WADISI-Kampagne, ermittelt für Temperaturen entsprechend der Höhe [36] und spezifischer Wärme[32]

das Raketeninstrument MASERATI¹ umgesetzt [39].

Bei diesem Verfahren handelt es sich um ein Näherungsverfahren, bei dem eine Schockfront mit hyperbolischer Form angenommen wird, die allein von der Machzahl abhängig

¹Middle Atmosphere Spectrometric Experiment on Rockets for Analysis of Trace gas Influences

ist.

$$\beta y_{Shock} = \sqrt{x^2 - x_0^2} \quad (5.1)$$

Die Asymptoten dieser Funktion ergeben die Form eines Mach'schen Kegels. Der Faktor β ist der Kotangens des Mach'schen Winkels $\varphi_{Mach} - \pi/2 = \cot\beta$.

Die Lage der Schockfront wird mittels algebraischen Gleichungen für abgelöste Schockwellen (siehe „Location of Detached Shockwaves“ [29]) bestimmt.

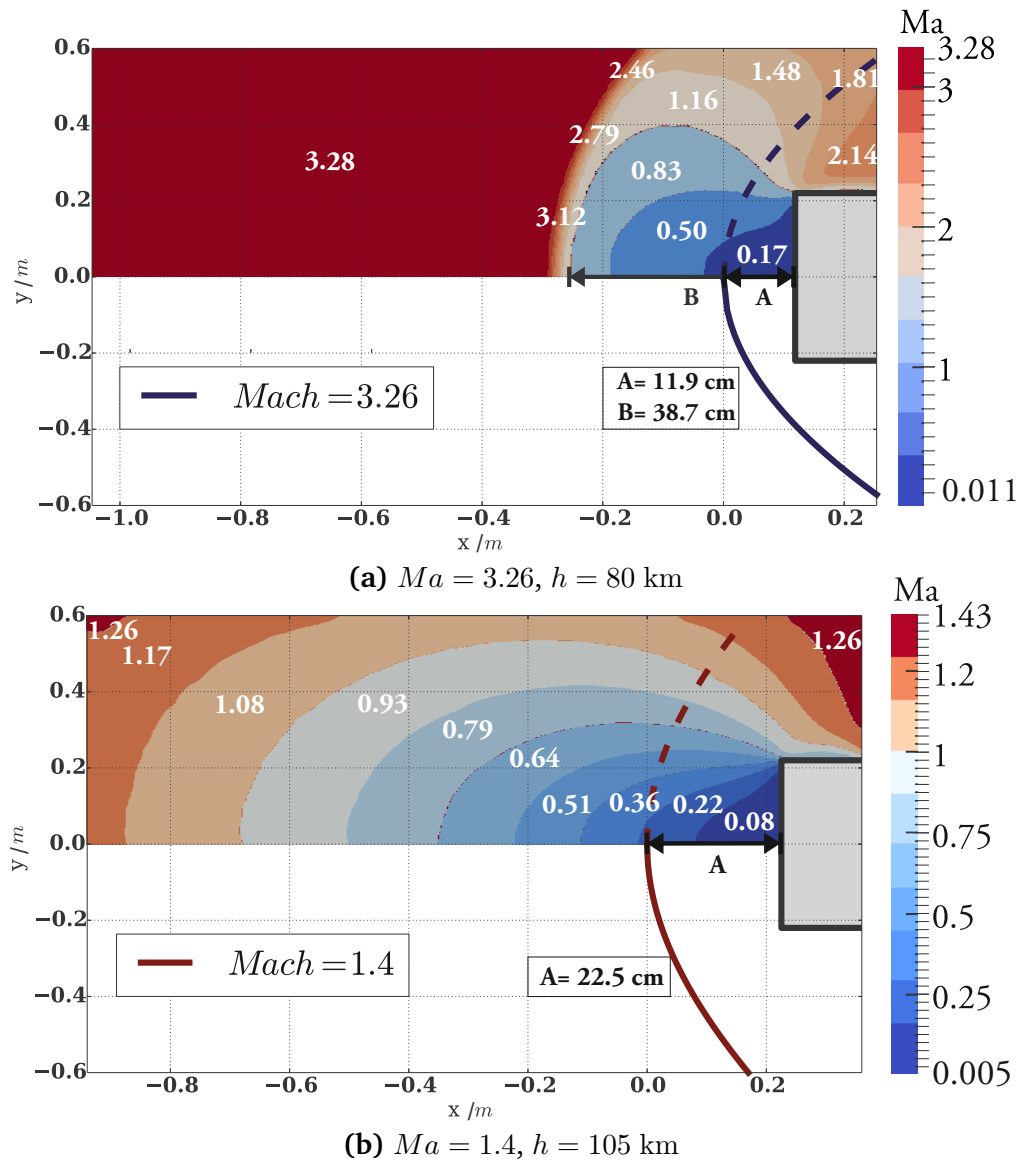


Abbildung 5.3: DSMC Ergebnisse (a,b oben) im Vergleich mit einem analytischen Verfahren nach Moeckel (a,b unten) [29]. Das analytische Verfahren zeigt keine gute Übereinstimmung mit Simulationen für Höhen von 80 und 105 km und den dazugehörigen Geschwindigkeiten.

Diese Gleichungen erlauben eine schnelle und unaufwendige Bestimmung der Schockwelle.

Für beide Methoden werden die Strömungsbedingungen des Uplegs der WADISI-Kampagne betrachtet 5.2. Im Messbereich zwischen 60 km bis 110 km werden jeweils Anströmungen mit maximaler Machzahl $Ma = 3.26$ und mit der kleinsten auftretenden Machzahl $Ma = 1.4$ untersucht.

Bei hoher Machzahl (Abb. 5.3a) geht eine ausgeprägte Schockfront aus der Simulation hervor. Diese zeichnet sich durch große Gradienten der Strömungsgrößen aus. Die Strömung schlägt in einer nur wenige Zentimeter großen Schockwelle vom supersonischen in einen subsonischen Strömungszustand mit $Ma = 0.17$ in der Nähe des angeströmten Querschnitts um.

In einer Entfernung von ≈ 40 cm zum Zylinder ist die Strömung ungestört.

Ein Vergleich mit der analytischen Methode nach Moeckel zeigt eine etwaige Übereinstimmung der Schockwellenform mit einer etwas zu flachen Asymptote. Die Berechnung der Schockwellenlage ist um mehr als $1/3$ der Lage, die sich aus der Simulation ergibt, zu niedrig ermittelt.

Bei den in Abb. 5.3b gezeigten Ergebnissen, ergibt sich keine eindeutige Schockfrontenlage. Dies ist weniger auf die geringe Machzahl $Ma = 1.4$ zurückzuführen, als auf die geringe Dichte in einer Höhe von $h = 105$ km. In dieser Höhe beträgt die mittlere freie Weglänge etwa $\lambda = 0.5$ m und die thermische Geschwindigkeit $\bar{v} \approx 442$ m/s. Die thermische Geschwindigkeit ist somit von der Größenordnung der Anströmung $c = 458.5$ m/s.

Die Störung in der Strömung ergibt sich für molekulare Strömungen typischerweise blasenförmig an der Vorderseite des Zylinders. Die Gradienten der Strömungsgrößen sind deutlich kleiner, erstrecken sich jedoch über einen großen Bereich. Eine störungsfreie Strömung kann erst mit einem Abstand $L \approx 130$ cm vom Hindernis abgeschätzt werden.

Bei Auftreten einer Schockfront überwiegt die Ausdehnung der Störung in Querrichtung zur Anströmung, bei einer blasenartigen Störung ist diese Ausdehnung deutlich geringer.

Dieses Ergebnis ist gerade für die Entwicklung von Messinstrumenten, die seitlich der Raketete messen, von Bedeutung.

Die DSMC Simulationen in Abb. 5.3 und 5.4 zeigen ähnliche Ergebnisse, wie sie in 2D-Simulationen und Windkanalexperimenten einer Raketennutzlast gefunden wurden [16].

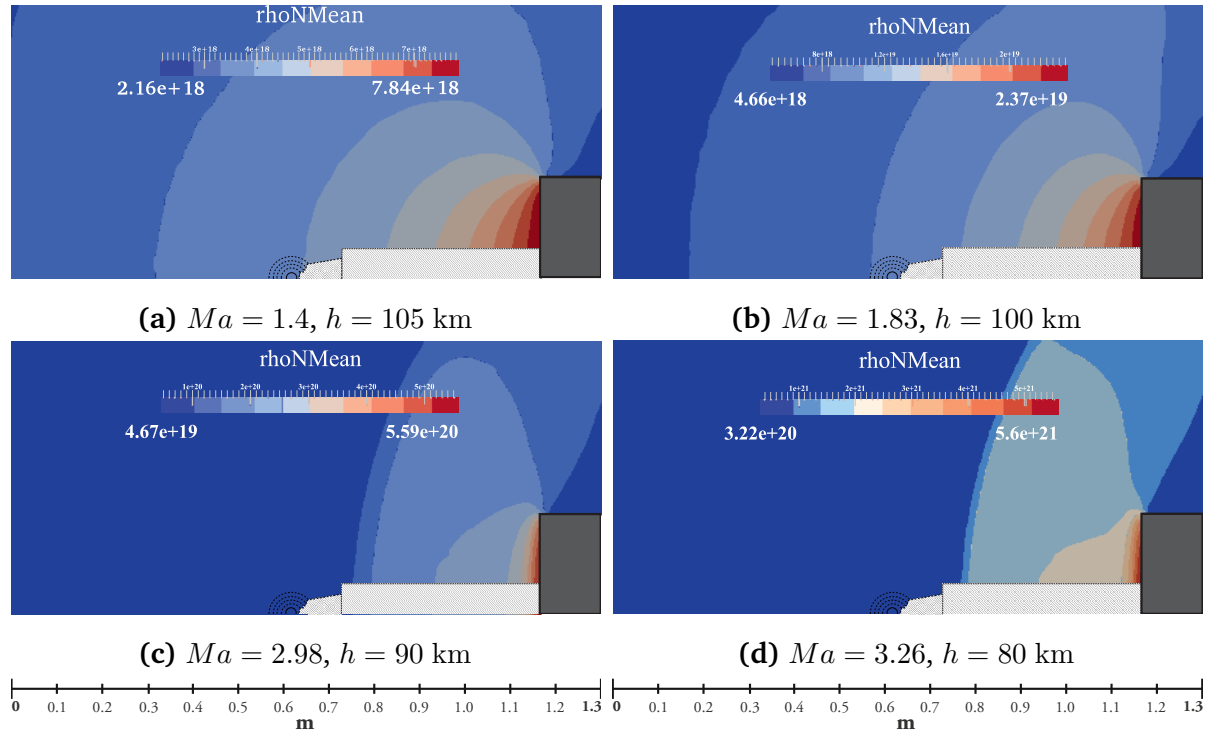


Abbildung 5.4: Anzahldichteprofile der DSMC-Rechnungen für einen achsensymmetrischen, längsangeströmten Zylinder mit eingezeichneter Lage des CONE-Instruments.

In Abb. 5.4 sind Dichteprofile für Simulationen im Höhenbereich zwischen 80 km und 105 km dargestellt. Bei Simulationen über $\approx 95 \text{ km}$ reichen die Störungen im Dichteprofil bis in das Messvolumen des Cone-Sensors hinein, vgl. Abb. 5.1. Die Dichte in Höhe des CONE Messvolumens ist in Abb. 5.4a, 5.4b in etwa um einen Faktor 1.5 - 1.8 erhöht.

Aus voranstehenden Untersuchungen wird deutlich, dass das Volumen in der Nähe des CONE-Sensors bei der WADISI-Kampagne bis zu einer Flughöhe von etwa 95 km keinen durch die Hauptnutzlast hervorgerufenen Störungen unterliegt.

Bei Flughöhen über $\approx 90 \text{ km}$ und freien Weglängen von mehreren 10 cm werden die Gradienten der Strömungsgrößen zunehmend kleiner. In der Folge kommt es zur Beeinflussung des Messvolumens in der Höhe des CONE-Sensors, dessen Entfernung in etwa 550 mm zur Hauptnutzlast beträgt.

Das in der Simulation zu betrachtende Volumen kann für Bereiche unterhalb von 95 km ohne Einfluss auf die Qualität des Ergebnisses auf die unmittelbare Umgebung des CONE-Sensors beschränkt werden.

Das begrenzende Volumen der Simulation ist durch ein Quader mit den Eckmaßen $(0.0364 \ 0 \ 0) \text{ m}$ und $(0.1138 \ 0.0504 \ 0.0504) \text{ m}$ beschrieben. Die Dimensionen der CONE-Geometrie können durch einen Quader den Begrenzungen $(0.0364 \ 0 \ 0) \text{ m}$ und $(0.1062 \ 0.0323 \ 0.0323) \text{ m}$ angegeben werden.

Im Bereich oberhalb von 90km kann diese Vereinfachung durch den Einfluss Hauptnutzlast zu Fehlern in den Ergebnissen führen. Es sei jedoch darauf hingewiesen, dass in der realen Raketenkonfiguration die Strömungsverhältnisse bereits vom CONE-Sensor und dem darunterliegenden Zylinderelement beeinflusst werden. Diese Einflüsse werden für einen insgesamt etwas schwächeren Kompressionseffekt sorgen.

5.2 Vereinfachung der Geometrie

Der Cone-Sensor ist, wie in Kapitel 2 beschrieben, mit feinen Gitterkugeln zur Abschirmung von Elektronen bzw. Ionen versehen. Diese Gitter zeichnen sich durch Stegbreiten von $0.12 - 0.15$ mm des Elektronenschilds bzw. 0.1 mm der Anode des Ionisationsmanometers aus. Die Gitter haben Transparenzen von $Tr_{screen} = 0.8$ des Ionenschirms und $Tr_{anode} = 0.766$ der Anode im Ionisationsmanometer.

Um diese Gitterstrukturen in einem Simulationsvolumen der Größe $(77.4 \times 100.8 \times 100.8)$ mm, die sich aus für eine dreidimensionale Anströmung (ohne Symmetrierandbedingungen) aus den Vorbetrachtungen ergibt, auflösen zu können, sind in etwa $6.0 \cdot 10^9$ Zellen notwendig.

Aus den in Abschnitt 4.1 erläuterten Kriterien ergibt sich damit eine kaum praktikable Anzahl an zu simulierenden Partikeln, auch für HPC-Anwendungen. Des Weiteren wird die Performance einer DSMC durch kleine Gitter enorm eingeschränkt, da die grundlegende Eigenschaft der repräsentativen Partikel zunehmend verloren geht.

Für das oben genannte Gitter wäre ab einer Anzahlichte von $1.25 \cdot 10^{14}$ mit einem $1 : 1$ Verhältnis aus simulierten und zu repräsentierenden Partikeln der Grenzfall erreicht.

Ab einer Höhe von etwa 125 km würde ein Testpartikel in der Simulation nur etwa 100 reale Moleküle repräsentieren. Es ist daher notwendig, Gittergeometrien zu vereinfachen.

Eine elegante Möglichkeit, die bereits in einem DSMC-Code [17] implementiert wurde, ist die Annahme einer Wand-Randbedingung mit einer stochastischen Durchlässigkeit [15].

Da im Rahmen dieser Arbeit keine Implementierung einer solchen Randbedingung erfolgen kann, wurde stattdessen eine direkte Manipulation der Gitter via Computer Aided Design (CAD) umgesetzt und die Auswirkungen einer solchen Änderung untersucht.

Die Gitterparameter (siehe Abb. 5.5) wurden dafür unter Beibehaltung der Transparenz Tr , manipuliert. Um größere Zellvolumen realisieren zu können, wurde die Anzahl der

Stege durch Vergrößerung der Stegbreite reduziert, sodass sich die Gittergeometrie insgesamt größer darstellt.

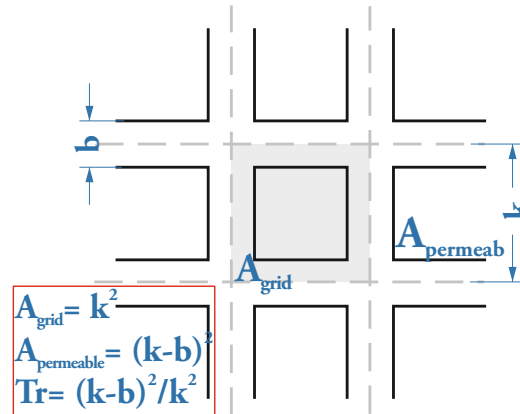


Abbildung 5.5: Definition der Gitterparameter. Bei Beibehaltung der Transparenz Tr und Vorgabe einer Stegbreite b , ergibt sich die Steglänge k .

Der für die Netzgenerierung kritische Parameter ist dabei die Stegbreite b . Diese wird in Testfällen variiert und die resultierenden Ergebnisse werden mit einem bereits in einer zweidimensionalen DSMC-Simulation ermittelten Neutralgasdichte-Korrekturfaktor verglichen. Die zu setzenden Randbedingungen werden ebenfalls dieser Veröffentlichung [38] entnommen.

Die Simulation erfolgt mit zwei Symmetrierandbedingungen in der y - und z -Ebene. Das Simulationsgebiet umfasst somit ein Viertel der in Abb. 5.6 gezeigten Geometrie.

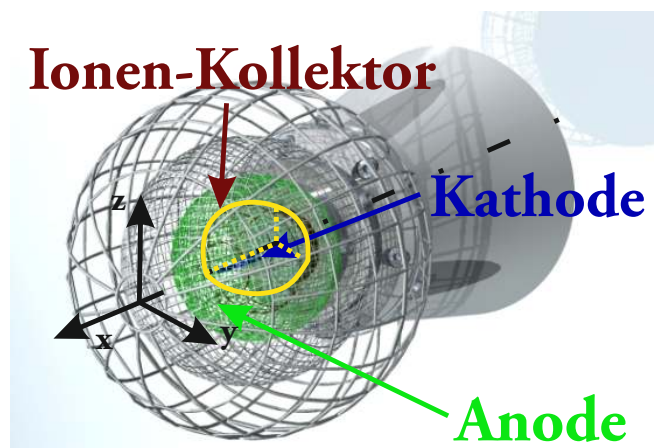
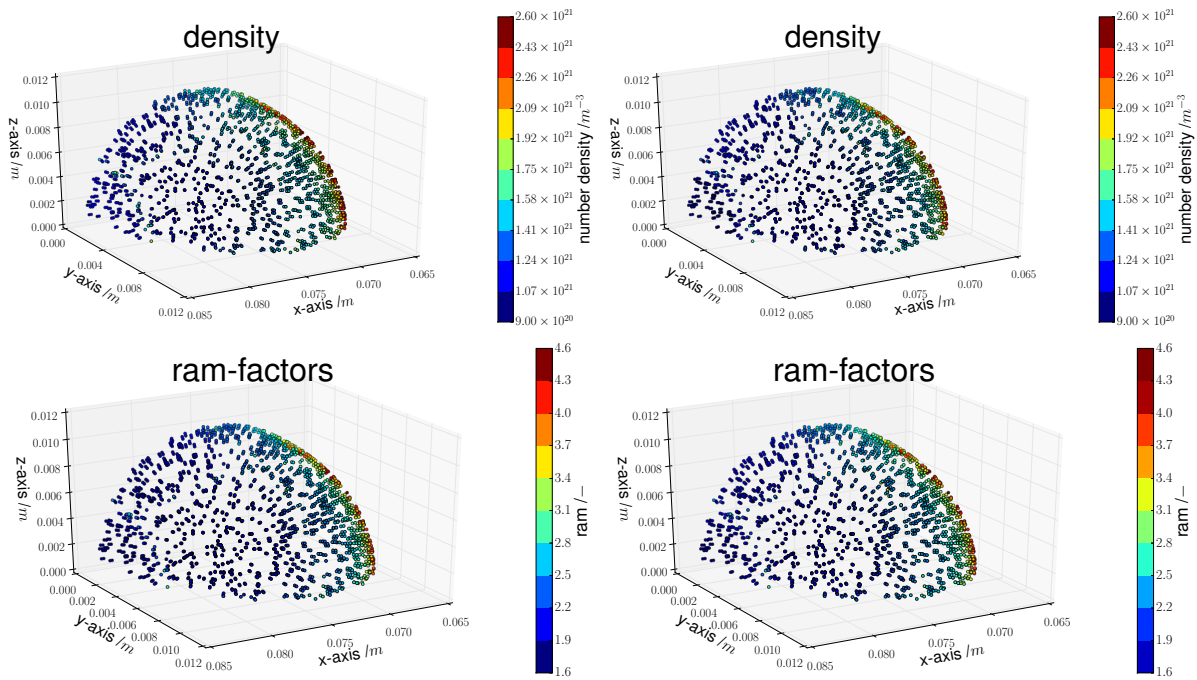


Abbildung 5.6: CAD-Modell des Cone-Sensors. Die in Abb. 5.7 gezeigten Werte werden für Flächen des gelb markierten „Messbereichs“ ermittelt.

Nachdem sich für die Simulation ein stabiler Zustand eingestellt hat, werden die Ergebnisse analysiert.

Mittels Samplingroutine werden auf zwei Kugelflächen kurz vor sowie kurz hinter dem Ionen-Kollektor (siehe Abb. 5.6) Werte an zuvor bestimmten Punkten mittels linearer Interpolation ermittelt.^{2 3} Die Ergebnisse sind in Abb. 5.7 dargestellt. Insgesamt sind die ermittelten Dichten für beide Gittertypen ähnlich.



(a) Anode: $b = 0.3$ mm, $k = 2.404$ mm und **(b)** Anode: $b = 0.6$ mm, $k = 4.81$ mm und $Tr = 0.766$; Ionen-Schirm: $b = 0.3$ mm, $Tr = 0.766$; Ionen-Schirm: $b = 0.6$ mm, $k = 2.841$ mm und $Tr = 0.8$ $k = 5.683$ mm und $Tr = 0.8$

Abbildung 5.7: Anzahldichte und lokale RAM-Faktoren auf zufällig gewählten Messpunkten unter und über dem Ionen-Kollektor (5.7a, 5.7b). Bei beiden Testfällen liegt dieselbe Messpunkteverteilung vor. Die Simulation mit dickerer Stegbreite zeigt etwas höhere lokale Dichte- und Ram-Werte.

Die über die Flächen gemittelten Werte der Dichte betragen $\rho_{b=0.3} = 1.49 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$ und $\rho_{b=0.6} = 1.43 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$. Die Werte des RAM-Faktors $RAM_{b=0.3} = 2.48$ und $RAM_{b=0.6} = 2.37$. Insgesamt ist die Neutralgasdichte und in der Folge auch der RAM-Faktor bei einem feineren Gitter etwas höher.

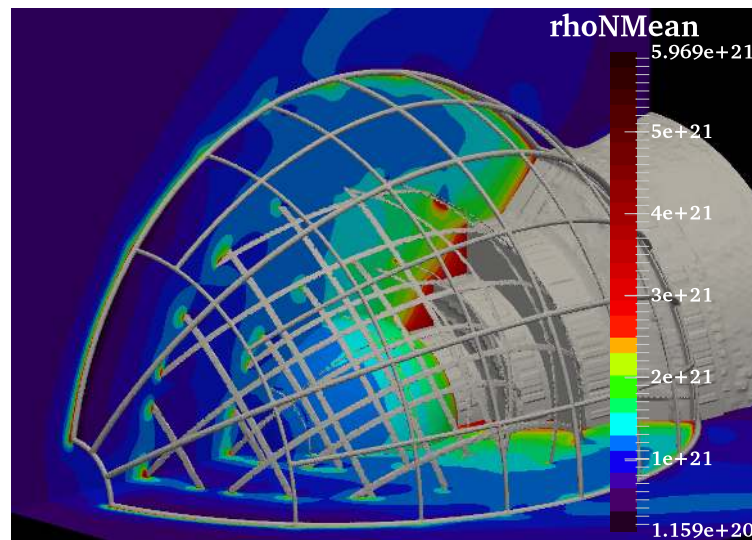
²Zur Generierung der Koordinaten dieser „Messpunkte“ wurde eine Python-Routine geschrieben. Diese basiert auf Zufallszahlen. Es wurde darauf geachtet, Polbildung für einen anschließenden Mittelungsprozess zu vermeiden

³Der eigentliche Samplingvorgang wird mittels OpenFoam-Utility „Sampling“ erledigt.

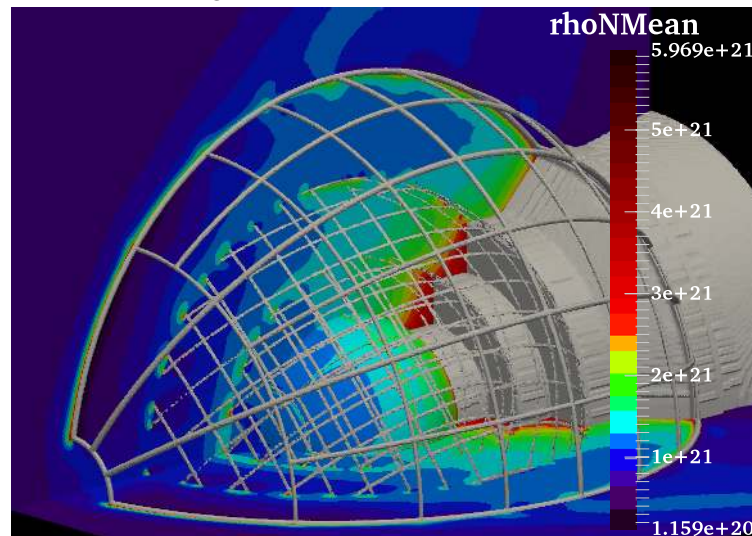
	h /km	T /K	n / m^{-3}	Ma
$b_{0.3 \text{ mm}}$	80	168.8	$5.9 \cdot 10^{20}$	4.35
$b_{0.6 \text{ mm}}$				

Tabelle 5.2: Aerodynamische Parameter der Vergleichsrechnungen [38]

Die Dichteprofile der Simulationsvolumina ist in Abb. 5.8 gezeigt. Für den besseren Vergleich mit einer 2D-DSMC [38] wurden die in Tabelle 5.2 gezeigten Parameter verwendet.



(a) Stegbreite $b = 0.6$ mm, siehe Tab.:5.2



(b) Stegbreite $b = 0.3$ mm, siehe Tab.:5.2

Abbildung 5.8: Dichteprofil des Cone Sensors für zwei Testfälle mit großer und kleinerer Stegbreite und gleicher Transparenz für Ionenschirm und Anode des Ionisationsmanometers

Die Dichteprofile zeigen nur in Gitternähe Unterschiede zwischen kleiner und größerer Stegbreite. Bei feinerer Gittergeometrie bilden sich die Gradienten zunehmend in der (Kugel)Ebene des Gitters aus. Die exakte Gittergeometrie verliert an Einfluss auf das Strömungsbild. Bei sehr feinen Gitterstrukturen ist einzig die Transparenz des Gitters für die Ausbildung der Strömung von Bedeutung.

Untersuchungen im Strömungskanal im Vergleich mit einer stochastisch-transparenten Wandrandbedingung für DSMC [15] bestätigen diese Beobachtung.

Zur Validierung der Ergebnisse werden die ermittelten RAM-Faktoren mit DSMC Rechnungen der Cone Geometrie und Mittelwerten von Falling Sphere (FS) Experimenten verglichen. Die Ergebnisse sind Tab. 5.4 zu entnehmen.

	<i>dsmcFoam</i> $b_{0.3mm}$	<i>dsmcFoam</i> $b_{0.6mm}$	FS[38]	DSMC(Stockholm)[38]
RAM- Faktor	2.48	2.37	2.63	2.43

Tabelle 5.4: Vergleich der gemittelten RAM-Faktoren für die Testfälle ($b = 0.3 \text{ mm}$ und $b = 0.6 \text{ mm}$) DSMC Ergebnissen einer 2D Simulation und gemittelten Werten von Fallenden-Kugel-Experimenten

Die Ergebnisse für Simulationen mit den dreidimensionalen Gitternetzen mit Stegbreiten von $b = 0.3 \text{ mm}$ und $b = 0.6 \text{ mm}$ zeigen eine hervorragende Übereinstimmung mit der Simulation mittels DSMC(Stockholm).

Die relativen Abweichungen zum DSMC(Stockholm)-Ergebnis liegen bei $\pm 2.1 \%$. Dies zeigt, dass die Annahme einer stochastisch durchlässigen Wand, wie sie im DSMC(Stockholm)-Programm implementiert ist, eine gute Näherung darstellt.

Kapitel 6

Bestimmung einer Korrekturfunktion für das CONE-Instrument der WADISI-Kampagne

Am Ende dieser Arbeit soll eine Korrekturfunktion, speziell für die Parameter der WADISI-Kampagne, entwickelt werden. Eine Simulation für die konkreten Flugbedingungen eines Raketenfluges mit CONE-Sensor stellt ein Novum in der raketengestützten Atmosphärenphysik dar.

Zudem wird erstmalig ein Korrekturfaktor für den Höhenbereich von unter 70 km berechnet. Dieser Höhenbereich ist gerade für zukünftige in-situ Messungen im Zusammenhang von PMWE von Interesse, weil die in den Wintermonaten zu beobachtenden Echos im Gegensatz zu den bekannteren PMSE in niedrigeren Höhen von 60 bis 70 km zu beobachten sind [46].

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels werden die Vorbereitungen zur Simulation einzelner Zustände, die durch die Flughöhe bestimmt werden, erläutert.

Anschließend werden die Ergebnisse dieser Simulationen anhand eines RAM-Faktors als Funktion der Höhe vorgestellt.

6.1 Annahmen und Vorbereitung für CONE-Simulationen des WADISI Raketenflugs

Um die Korrekturfunktion möglichst genau zu gestalten, ist es notwendig, die zu Grunde liegenden Simulationen mit möglichst exakten Randbedingungen zu versehen.

Diese Parameter sollen für diesen Zweck in den nächsten Abschnitten erläutert werden.

6.1.1 Atmosphärendaten

Mit steigender Höhe einer Rakete ändert sich die Dichte der ungestörten Strömung nahezu logarithmisch.

Für unterschiedliche Simulationen in den definierten Höhen von 90 und 110 km müssen deshalb verschiedene Dichten an den Rändern des Simulationsvolumens angegeben werden, aus denen der initiale Zustand der Simulation ermittelt wird.

Weil in DSMCs grundsätzlich einzelne Moleküle mit definierten Wechselwirkungsdurchmessern und Massen behandelt werden, ist es angebracht, die einzelnen Gasarten der Atmosphäre in ihrem Anteil bzw. dem absoluten Vorkommen zu bestimmen.

Modelldaten aus dem MSIS-Standardatmosphärenmodell [36] sind hierfür ein geeignetes Mittel.

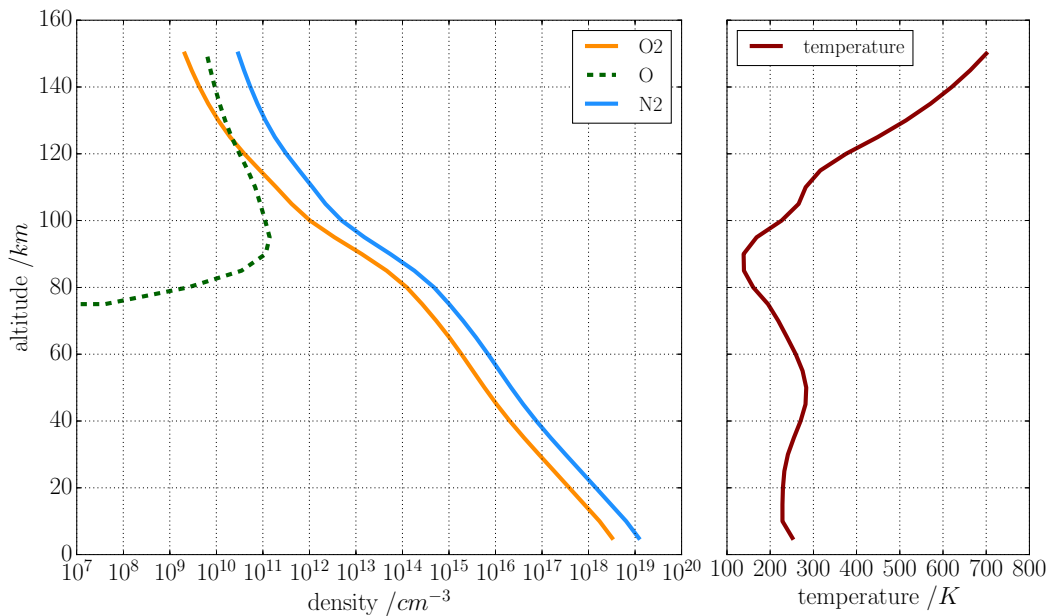


Abbildung 6.1: Anzahldichte über die Höhe. Daten für Andøya (69 °N), ermittelt nach dem NRLMSISE-00-Modell [36]

Für die Simulationen der WADIS I-Kampagne werden Atmosphärendaten für Andøya des Starttermins verwendet, siehe Abb. 6.1.

Aus Abb. 6.1 wird deutlich, dass es über den gesamten Höhenbereich leichte Schwankungen im Stoffanteil der beiden in Luft dominierenden Gasen, Stickstoff N_2 und Sauerstoff O_2 , gibt.

Ab einer Höhe von ca. 90 km steigt der Anteil an atomarem Sauerstoff stark an. Während bis etwa 90 km der Anteil an atomarem Sauerstoff vernachlässigt werden kann, sollte dieser ab dieser Höhe unbedingt berücksichtigt werden.

Da im Programm *dsmcFoam* bislang kein atomarer Sauerstoff behandelt wird, wird dieser in den Simulationen ab 90 km anteilig als Sauerstoff der Verbindung O_2 hinzu gerechnet. Dabei gilt folgende Beziehung der Anzahldichten: $\rho_{O2_{SIM}} = 2 \cdot \rho_O + \rho_{O2}$.

6.1.2 Flugdaten

Während eines Raketenflugs werden laufend Lagedaten der Rakete mittels „Servicemodule“ aufgenommen. Aus diesen Daten und zusätzlichen Informationen über Global Positioning System (GPS) oder Radar ergibt sich ein Set aus Daten zur vollständigen Beschreibung der Trajektorie und des Anströmwinkels.

Das Datenset enthält neben Informationen zu Gier-, Nick- und Rollwinkel, auch Informationen über Höhe und Geschwindigkeiten mit der Rakete als Koordinatenursprung. Der Anströmwinkel¹ zeigt während des Uplegs nur sehr kleine Werte von max. $AoA = 2.8^\circ$. Dieser wird deshalb in den Simulationen vernachlässigt.

In der Simulation werden folglich nur der Geschwindigkeitsvektor (mit den Komponenten v_{north} , v_{east} und v_{up}) und die dazugehörige Höhe verwendet, siehe Tab.6.1.

Höhe /km	$v_{north}/m\ s^{-1}$	$v_{east}/m\ s^{-1}$	$v_{up}/m\ s^{-1}$
60	138.08	-73.95	1022.51
70	137.83	-73.26	924.86
80	137.35	-72.46	814.45
90	136.90	-71.59	687.29
100	136.51	-70.63	531.03
110	136.26	-69.41	303.06

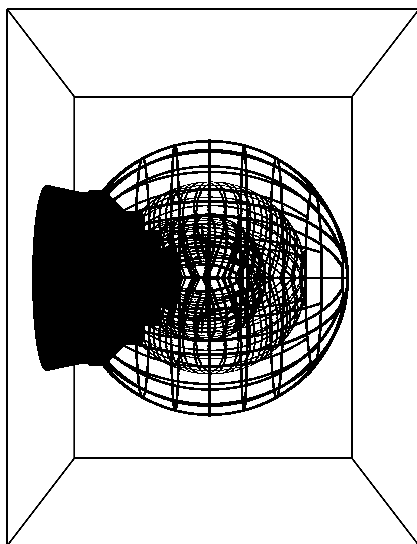
Tabelle 6.1: Ausgewählte Daten der WADISI Trajektorie

¹Winkel zwischen vertikaler Geschwindigkeit und Längsachse der Rakete. Auch: AoA (Angle of Attack [eng.])

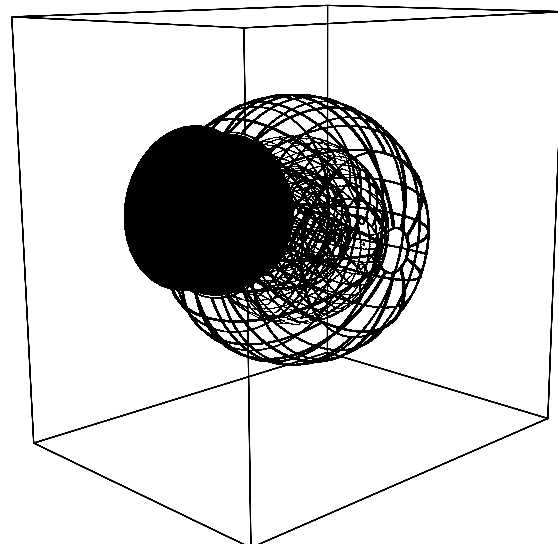
6.1.3 Geometrie und Rechennetz

Das Gesamtvolumen des Rechennetzes beruht auf Untersuchungen in Abschnitt 5.1. Das Simulationsvolumen wurde dabei aus Zeit- und Performancegründen so klein wie möglich gewählt.

Mit dem gewählten Volumen, siehe Abb. 6.2, kann die von dem CONE-Instrument verursachte Strömung korrekt abgebildet werden. Für Höhen ab ca. 95 km ist eine Störung durch die Hauptnutzlast zu erwarten (siehe Abschnitt 5.1). Diese kann mit dem gewählten Volumen nicht dargestellt werden.



(a) Seitenprofil



(b) Isometrische Darstellung

Abbildung 6.2: Rechenvolumen der CONE-Simulationen mit CONE-Geometrie und Berandungen

Die Geometrie ist identisch mit der in Abschnitt 5.2 mit einer Stegbreite von $b = 0.3$ mm. Neben der Tatsache, dass diese Geometrie der Originalgeometrie des CONE-Sensors näher kommt, ist es von Vorteil, dass diese Geometrie nach dem Vernetzen mittels *snappyHexMesh* nur eine geringfügig höhere Zellenanzahl aufweist und ähnlich performant ist.

Das Rechennetz besteht aus Hexaederelementen. In den durchgeführten Simulationen sind diese Elemente, mit Einschränkungen an den Rändern der Geometrie, von gleicher Größe. Das Rechenggebiet verfügt über 130578599 Zellen.

Eine Aufweitung des Netzes an Stellen niedriger Dichten und Partikelanzahl wurde aufgrund der feinen Geometrie nicht realisiert. Ein variables Gitter könnte die Perfor-

mance deutlich erhöhen. Dazu muss der Einfluss der zu vernetzenden Geometrie soweit wie möglich von der Dimensionierung des Rechengitters, aufgrund von Gitteranforderungen, die eine lokaler Variation der Dichte (und mittlerer freier Weglänge) mit sich bringt, entkoppelt werden.

6.1.4 Simulationsparameter und Randbedingungen

Anhand von Simulationsparametern wird das Verhalten der DSMC in OpenFOAM gesteuert. Mittels Randbedingungen wird das Verhalten an den Rändern bestimmt. Im Falle der „Free Stream“-Randbedingung, die an den äußeren Rändern des Simulationsvolumens definiert wird, handelt es sich nicht um eine Randbedingung in Form von festen Werten auf den Rändern (Dirichlet-Randbedingung) bzw. festen Werten für die Ableitung der jeweiligen Größe normal zu den Rändern (Neumann-Randbedingung). Vielmehr dient eine Vorgabe von Geschwindigkeit, Dichte und Temperatur an diesen Rändern zur Bestimmung einer initialen Geschwindigkeits- und Dichteverteilung, die im Laufe der Simulation, mit der Befüllung des Simulationsvolumens, Werte der randnahen Zellen annimmt.

An diesen Rändern werden die Partikel der Simulation je nach Wert von Dichte, Temperatur und Geschwindigkeit der Zellen zugeführt oder nach Versetzen eines Partikels über den Rand hinaus abgezogen.

Die Ränder der Geometrie werden als Wand definiert. Trifft ein Partikel auf eine Wand, so wird dieser reflektiert. Ein Teil der Energie geht dabei auf die Wand über. Bei Wänden mit hoher Temperatur erhalten diese kinetische Energie, wenn sie gegen die Wand stoßen.

Die konkreten Simulationsparameter sind in Tab. 6.2, im Allgemeinen und in Tab.6.3 für die einzelnen Simulationen im Speziellen gezeigt.

Wandrandbedingung	Maxwellian Thermal
Kollisionsmodell	VHS
VHS-Koeffizient	$T_{ref} = 273 \text{ K}$
Einlass Randbedingung	Free Stream
Gasspezies	N_2, O_2 (siehe [9])
Testpartikel	$\approx 1.0 \cdot 10^9$

Tabelle 6.2: Globale Simulationsparameter

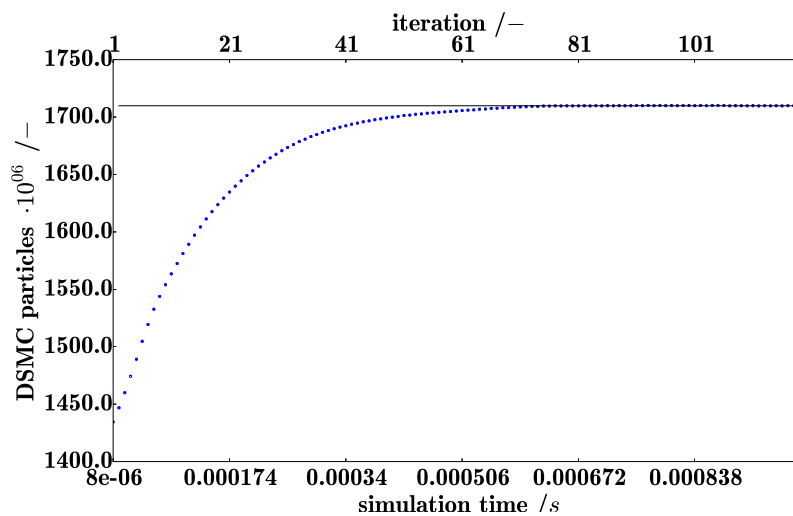
	80	90	110
Zeitschrittauflösung: $k = \Delta t_{sim}/\Delta t_{coll}$	0.20	0.10	0.02
Skalierungsfaktor: F_N	$5.00E10$	$3.63E08$	$2.2E06$

Tabelle 6.3: Individuelle Simulationsparameter für Simulationen in 80,90 und 110 km.

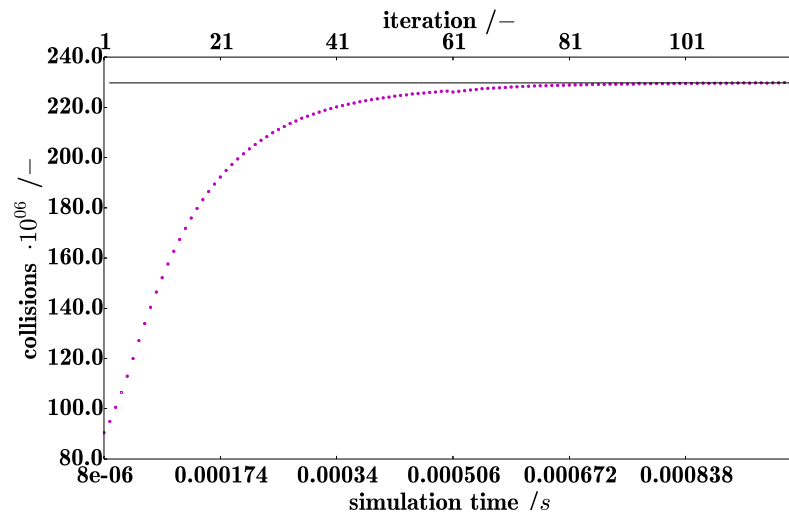
Für die „Free Stream“-Randbedingungen werden Temperaturen und Geschwindigkeiten, aus dem NRLMSISE-00-Modell bzw. Flugdaten der Rakete (vgl. Kap. 5) gewählt. Die Temperatur des Sensors wird mit $T_{CONE} = 273.15$ K angenommen.

6.1.5 Konvergenz

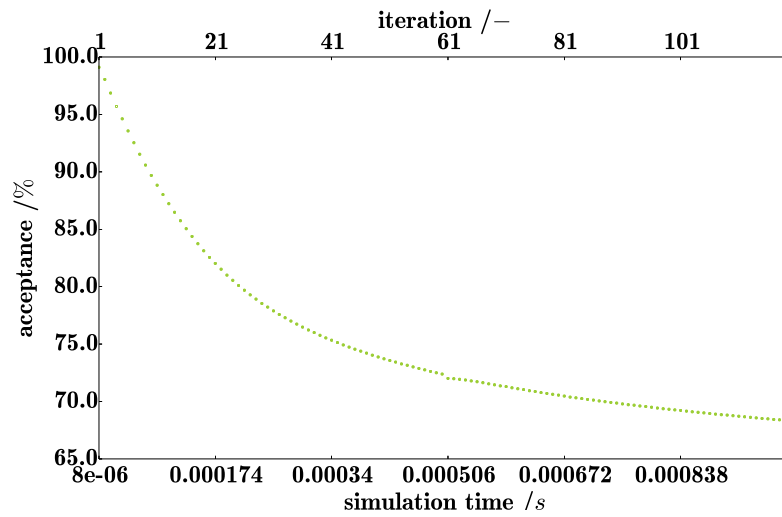
Wie in Kapitel 4 beschrieben, gibt es keine eindeutige Konvergenz der Simulationsgrößen, wie sie bspw. bei der Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen üblich ist. Ein Konvergenzverhalten ergibt sich nur für einen gleitenden Mittelwert, siehe [9, 1]. In Abb. 6.4 sind einige DSMC spezifische Simulationsgrößen über die Simulationszeit aufgetragen.



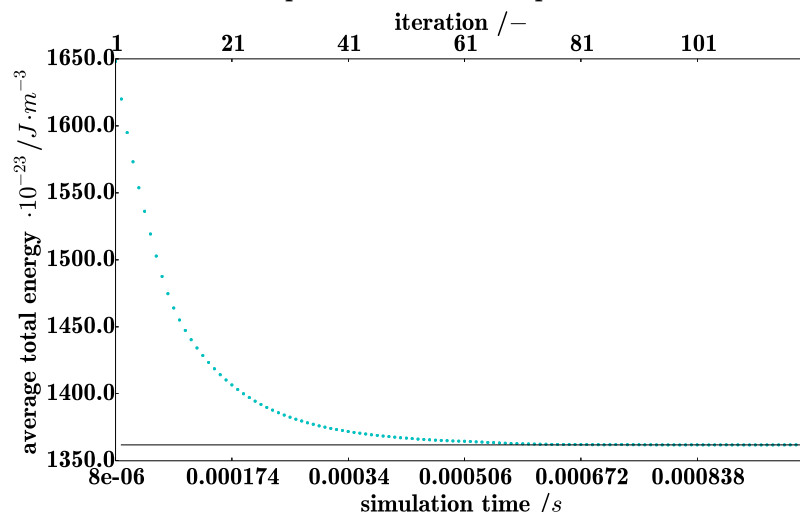
(a) Anzahl der Partikel im Simulationsvolumen



(b) Kollisionsanzahl



(c) Akzeptanz der Kollisionspartnerauswahl



(d) Gesamtenergie im Simulationsvolumen

Abbildung 6.4: Simulationsparameter für eine der DSMC (90 km Höhe) zur Bestimmung der Konvergenz

Zur Beurteilung, ob ein stationärer Zustand erreicht wird, werden die Verläufe der Größen aus Abb. 6.4 betrachtet. Ein stationärer Zustand gilt als erreicht, wenn die Werte sich einem „konstanten“ Wert genügend genau, asymptotisch angenähert haben. In den folgenden Rechnungen wird die Simulation nach etwa dem Zwei- bis Vierfachen der „Einschwingzeit“ $t_{fin} \approx 2 \cdots 5\tau$ beendet. In diesem Zustand ändern sich die Werte um weniger als 10^{-4} .

Die Standardabweichung σ in Abb. 6.4 a,b und d gibt im stationären Zustand einen Hinweis auf die statistische Schwankung der Ergebnisse, die allein durch die Anzahl der Partikel bestimmt wird.

Der Mittelwert (horizontale Linie in Abb. 6.4) wurde für die letzten 10 % der Iterationen ermittelt.

6.2 Entwicklung einer Korrekturfunktion im Höhenbereich von 70 km bis 110 km

Der typische Messbereich des CONE-Instruments erstreckt sich über atmosphärische Höhen von 70 bis 90 km. Zur Korrektur von Höhenprofilen der Absolutdichte kommen bisher Korrekturfunktion für fest definierte Apogäumshöhen von 105 oder 130 km [38] zur Anwendung.

Diese Korrekturfunktionen wurden mit einem einfachen 2D-Modell mittels DSMC-Algorithmus der Universität Stockholm für die Vertikalkomponente der Geschwindigkeit für Sommerbedingungen aufgenommen.

Im Rahmen dieser Arbeit wird eine neue Korrekturfunktion der WADISI-Kampagne, die ebenfalls im Sommer und bei $\approx 70^\circ N$ absolviert wurde und eine Höhe von 115 km erreichte, ermittelt.

Ähnliche Randbedingungen bieten eine gute Grundlage des Vergleichs und können wegen ungefähr gleich anzunehmender Temperatur und Dichte Hinweise darauf geben, inwieweit die individuelle Dynamik der Rakete und die Berücksichtigung eines dreidimensionalen Vektors einen Einfluss auf die Verdichtung der Strömung in der Nähe des Ionen-Kollektors des CONE-Sensors hat.

Die Ergebnisse sind in Abb. 6.5 mit Vergleichswerten aus DSMC-Simulationen dargestellt.

Für einen Vergleich der Simulationspunkte wurde ein zweidimensionaler Fit der bei-

den bereits bekannten Polynome für Apogäumshöhen von 105 und 130 km für das entsprechende WADISI-Apogäum entwickelt.

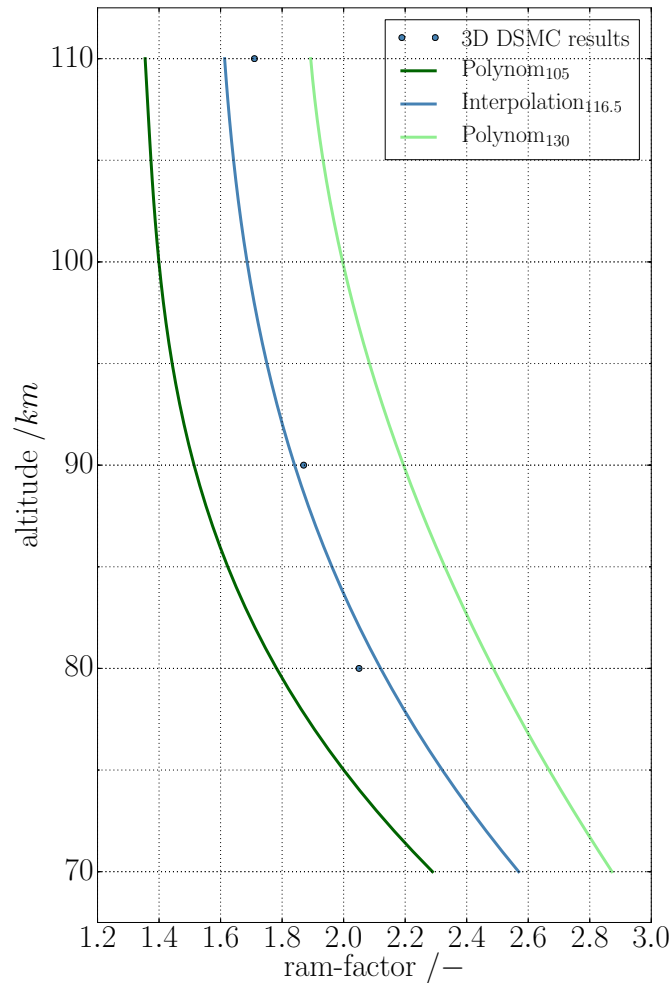


Abbildung 6.5: Ram-Funktionen. Zur Validierung der Ram-Faktoren für die WADISI-Kampagne aus DSMC mittels *dsmcFoam* (rote Marker) wurde ein zweidimensionales Polynom aus den bereits vorhandenen Polynomen (grün) berechnet. Dafür wurde das Apogäum als dritte Variable gesetzt und für ein mit der Absolutgeschwindigkeit korrigiertes Apogäum von 116.5 km bestimmt. Das dunkelgrüne Polynom wurde für Werte aus [38] aus zweidimensionalen DSMC mit senkrechter Anströmung entwickelt. Die hellgrüne Funktion wurde analog dazu für ein Apogäum von 130 km entwickelt.

Dabei wurde der Einfluss der in den Simulationen berücksichtigten Radialgeschwindigkeiten durch eine Korrektur für die Apogäumsvariable berücksichtigt. Diese ergibt sich aus der einfachen Annahme eines schrägen Wurfs, mit einer zusätzlichen Höhe von ca. 1.5 km.

Die Form der Ram-Korrektur kann durch das Verhältnis von gestörter zu ungestörter Dichte erklärt werden, da sich diese mit der Höhe/Dichte nahezu exponentiell ändert.

Die Ergebnisse der DSMC stehen mit relativen Abweichungen von rund 5 % in guter Übereinstimmung mit dem entwickelten Fit. Die größere Abweichung im Höhenbereich von 110 km kann auf ein Einfluss der Annahme hinweisen, dass die Masse von O durch O_2 in den Simulationen substituiert wurde, siehe Abs. 6.1.1. Auch die resultierende Geschwindigkeit unterscheidet sich mit einem Winkel von $\approx 35^\circ$ deutlich von einer in den Vergleichssimulationen angenommenen senkrechten Anströmung.

Insgesamt ergeben die bislang berechneten Korrekturfaktoren mit den Polynomen für die Apögeäen mit 105 bzw. 130 km, eine steilere Funktion.

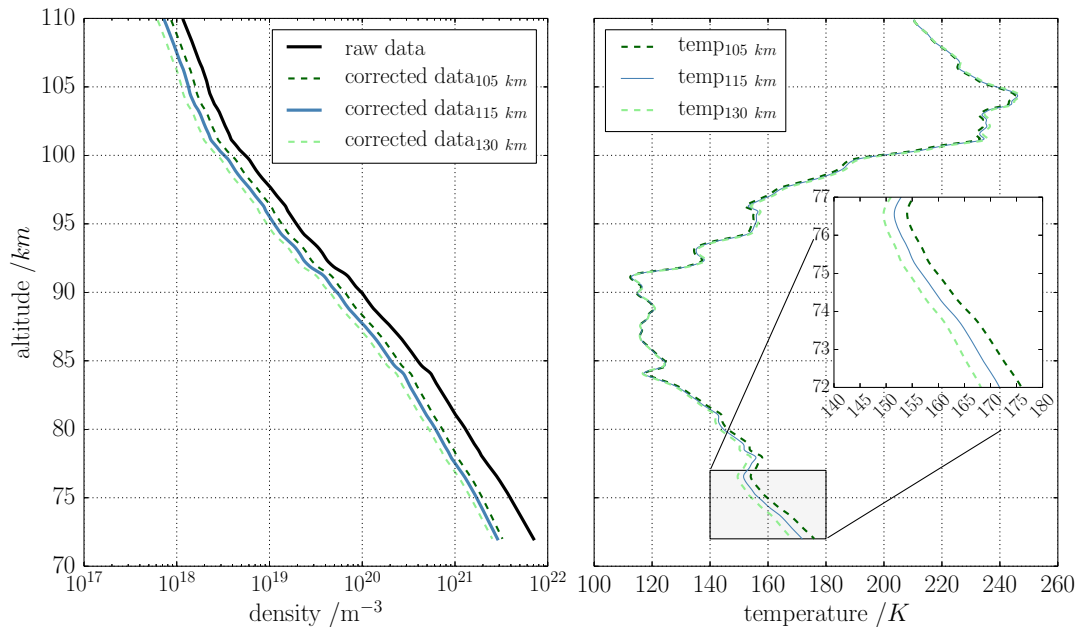


Abbildung 6.6: Dichteprofile über die Höhe (rechts) und durch Integration ermittelte Temperaturen (links). Ein Vergleich der korrigierten Funktionen (blau und grün) zeigt den Einfluss der Ram-Funktionen auf die Rohdaten (schwarz). Neben einem deutlichen Effekt auf die Absolutwerte der Dichte von teilweise einer halben Größenordnung, ist vor allem der Effekt auf den Anstieg herauszustellen. Dieser verursacht signifikante Änderungen der abgeleiteten Temperaturprofile von bis zu ± 4 K.

Erste Vergleiche der aus dem bei der WADISI-Kampagne aufgenommenen Dichteprofil und der abgeleiteten Temperatur zeigen verglichen mit den bestehenden Korrekturen z.B. eine signifikante Änderung der Temperatur um ± 4 K im unteren Korrekturbereich. Änderungen in der Temperatur ergeben sich dabei aus den unterschiedlichen Gradienten der Korrekturfunktion. Dies zeigt einmal mehr die Notwendigkeit hoch aufgelöster Ram-Korrekturen.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit sollte die Eignung des *dsmcFoam*-Lösers, der ein Bestandteil des OpenFOAM-Softwarepakets ist, untersucht werden.

Aufgrund der Multiprocessingmöglichkeiten ist der Einsatz auf Hochleistungscomputern möglich und wegen GNU-Lizensierter Software fallen keine Lizenzkosten an. Dies bietet Möglichkeiten, auch komplexe aerodynamische Probleme unter möglichst realitätsnahen Simulationsbedingungen zu lösen.

Für den Einsatz auf dem Hochleistungsrechner am IAP sollten vorbereitende Untersuchungen mittels *dsmcFoam* durchgeführt werden.

Nach Verifizierung des Simulationsmodells sollen Simulationen für Flugbedingungen in einer Reihe von Flughöhen simuliert werden. Anhand dieser Ergebnisse sollen Ram-Korrekturfaktoren ermittelt werden.

Anhand einer neu zu entwickelnden Korrekturfunktion sollen diese auf Rohdaten von Dichtemessungen der aktuellen WADISI-Kampagne angewendet und mit bestehenden Korrekturfunktionen verglichen werden.

Um die genannten Ziele erfolgreich zu bearbeiten, wurden zunächst die Grundlagen der molekularen Gasdynamik erarbeitet. Diese bilden gleichzeitig das Fundament der genutzten SimulationemethodeDSMC, deren wesentlichen Aspekte studiert wurden.

Daraufhin wurden einige der kritischsten Element einer DSMC herausgearbeitet und basierend auf theoretischen Überlegungen und einer eingehenden Literaturrecherche [9, 5, 13, 47], Kriterien einer „guten“ DSMC benannt.

In Vorbereitung auf den Einsatz des OpenFOAM-Lösers auf dem Hochleistungsrechner des IAP wurde eine Studie zum Skalierungsverhalten durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Studie zeigen sehr gute, nahezu direkt proportionale Skalierungseigenschaften.

Als Vorbereitung einer Strömungssimulation um das CONE-Instrument, deren Notwendigkeit in Kap. 1 ausgiebig erläutert wird, wurde der Einfluss der Hauptnutzlast einer Rakete auf das Messvolumen des Sensors verifiziert. Dabei zeigte sich im Vergleich eines analytischen Verfahrens zur Lagebestimmung der Schockfront mit DSMC Ergebnissen, dass das gewählte analytische Verfahren für die Lagebestimmung dieser Schockfront für die MLT-Region ungeeignet ist. Zusätzlich lassen die Ergebnisse vermuten, dass Messinstrumente, auch in einem Abstand der Rakete, von der Hauptnutzlast beeinflusst werden. Eine detaillierte Studie dieses Sachverhalts konnte aus Rechenzeitgründen im Rahmen dieser Arbeit nicht erfolgen.

In weiterführender Vorbereitung wurde deutlich, dass eine Simulation der original CONE Geometrie deutlich zu rechenaufwendig ist. Für noch niedrigere Dichten, wie sie bei Raketenkampagnen mit höherem Apogäum zu erwarten sind, stößt die DSMC-Methode an ihre physikalischen Grenzen.

Aus diesen Gründen wurde die Geometrie des CONE-Sensors vereinfacht. Um den möglichen Einfluss dieser Vereinfachung festzustellen, wurden verschiedene geometrische Gitterabmessungen bei gleichbleibender Transparenz des Gitters untersucht sowie untereinander und mit einer Publikation zum Thema [38] verglichen. Die Simulationen zeigen dabei eine exzellente Übereinstimmung. Dies macht die gute Qualität der Annahme einer stochastisch durchlässigen Randbedingung deutlich.

Anschließend wurden Simulationen für eine Korrekturfunktion im Höhenbereich von 70-110 km durchgeführt. Dafür wurden für das CONE-Instrument erstmalig Simulationen eines dreidimensionalen Modells mit dreikomponentigen Geschwindigkeitsvektoren durchgeführt.

Ein Vergleich mit Polynomen, die aus einfacheren DSMC Simulationen mit der Annahme einer reinen Vertikalbewegung der Rakete gewonnen wurden, zeigt eine gute Übereinstimmung der ersten Zwischenergebnisse.

Die RAM-Faktoren der Simulationen des WADISI Fluges mit einem Apogäum von 110 km liegen zwischen denen der Vergleichswerte für 105 bzw. 130 km Apogäumshöhe. Gleichzeitig wurden die praktischen Grenzen der DSMC für Simulationen unterhalb von 70 km für ein sehr realitätsnahes 3D-Modell des CONE-Instruments ermittelt.

Die Anwendung der neuen Korrekturfunktion auf Rohmessdaten der WADISI-Kampagne zeigt eine signifikante Änderung der errechneten Temperaturen von ca. ± 4 K.

Um komplexe Gitterstrukturen im Kontext eines größeren Simulationsvolumens effizient mit der DSMC-Methode zur Untersuchung gegenseitiger aerodynamischer Beeinflussung von Messinstrumenten nutzen zu können, ist eine Implementierung einer

speziellen Randbedingung, ähnlich der in [16] und [15] gezeigten, in die OpenFOAM Programmbibliothek, unumgänglich.

Mit der Einführung einer solchen Randbedingung können die Rechennetze den zu erwartenden lokalen freien Weglängen angepasst werden, sodass eine einheitliche Zellbelegung von $10 \cdots 40$ Partikeln realisiert werden kann.

Dies bedeutet, dass insgesamt weniger Partikel in einer Simulation berechnet werden. Hierin liegt ein großes Potential zur Ressourceneinsparung, welche eine deutliche Steigerung der Performance zur Folge hätte.

In weiterführenden Arbeiten ist zu untersuchen, ob der Einfluss von sog. Flatspin-Bewegungen der Nutzlast auf dem Downleg eines Raketenflugs ebenfalls durch Ram-Faktoren heraus gerechnet werden kann. Dies böte die Möglichkeit, die Analyse von bereits vorhandenen Messdaten deutlich zu erweitern. Für zukünftige Messkampagnen, z.B. zur Untersuchung der Struktur von PMWE, die sich in Höhen von 50 bis 85 km befinden, sind weitere Korrekturfaktoren notwendig. Für diesen Höhenbereich kann ein kontinuumsmechanischer Simulationsansatz eine effiziente Alternative zu DSMC-Methoden sein.

Literaturverzeichnis

- [1] AKHLAGHI, Hassan: Study of Convergence Time for Rarefied Gas Simulations Using an Unstructured DSMC Solver. In: *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 68 (2015), Nr. 1, S. 75–91. <http://dx.doi.org/10.1080/10407790.2014.992061>. – DOI 10.1080/10407790.2014.992061. – ISSN 1040–7790
- [2] AMIRI-JAGHARGH, Ali ; ROOHI, Ehsan ; NIAZMAND, Hamid ; STEFANOV, Stefan: Low speed/low rarefaction flow simulation in micro/nano cavity using DSMC method with small number of particles per cell. In: *Journal of Physics: Conference Series* 362 (2012), S. 012007. <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/362/1/012007>. – DOI 10.1088/1742-6596/362/1/012007. – ISSN 1742–6596
- [3] AMIRI-JAGHARGH, Ali ; ROOHI, Ehsan ; STEFANOV, Stefan ; NAMI, Hassan ; NIAZMAND, Hamid: DSMC simulation of micro/nano flows using SBT-TAS technique. In: *Computers & Fluids* 102 (2014), S. 266–276. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2014.07.003>. – DOI 10.1016/j.compfluid.2014.07.003. – ISSN 00457930
- [4] ARLEMARK, Erik ; MARKELOV, Gennady ; NEDEA, Silvia: Rebuilding of Rothe’s nozzle measurements with OpenFOAM software. In: *Journal of Physics: Conference Series* 362 (2012), S. 012040. <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/362/1/012040>. – DOI 10.1088/1742-6596/362/1/012040. – ISSN 1742–6596
- [5] BIRD, G. A.: *DSMC-Programme: DS1V, DS2V, DS3V*. <http://www.gab.com.au>. Version: 08.2013
- [6] BIRD, G. A.: Approach to Translational Equilibrium in a Rigid Sphere Gas. In: *Physics of Fluids* 6 (1963), Nr. 10, S. 1518. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1710976>. – DOI 10.1063/1.1710976. – ISSN 00319171
- [7] BIRD, G. A.: Monte Carlo Simulation of Gas Flows. In: *Annual Review of Fluid Mechanics* 10 (1978), Nr. 1, S. 11–31. <http://dx.doi.org/10.1146/annurev.fl.10.010178.000303>. – DOI 10.1146/annurev.fl.10.010178.000303. – ISSN 0066–4189
- [8] BIRD, G. A.: Aerodynamic effects on atmospheric composition measurements from rocket vehicles in the thermosphere. In: *Special Issue: Atomic Oxygen Abundance in Thermosphere* 36 (1988), Nr. 9, 921–926. [http://dx.doi.org/10.1016/0032-0633\(88\)90099-2](http://dx.doi.org/10.1016/0032-0633(88)90099-2). – DOI 10.1016/0032-0633(88)90099-2. – ISSN 0032–0633

- [9] BIRD, G. A.: *Oxford engineering science series*. Bd. 42: *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*. Oxford and New York : Clarendon Press and Oxford University Press, 1994. – ISBN 9780198561958
- [10] BIRD, G. A.: Sophisticated DSMC: Notes prepared for a short course at the DSMC07 meeting. (2007)
- [11] BIRD, G. A.: *The DSMC method*. Version 1.2. [U.S. : CreateSpace], 2013. – ISBN 1492112909
- [12] FREE SOFTWARE FOUNDATION, INC. ; FREE SOFTWARE FOUNDATION, INC. (Hrsg.): *GNU General Public License*. <http://www.gnu.org/licenses/gpl.html>. Version: Version 3, 2007
- [13] GARCIA, Alejandro L. ; WAGNER, Wolfgang: Time step truncation error in direct simulation Monte Carlo. In: *Physics of Fluids* 12 (2000), Nr. 10, S. 2621. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1289691>. – DOI 10.1063/1.1289691. – ISSN 00319171
- [14] GOLDSTEIN, Herbert ; POOLE, Charles P. ; SAFKO, John L.: *Classical mechanics*. 3rd ed. San Francisco : Addison Wesley, 2002. – ISBN 9780321188977
- [15] GUMBEL, J.: Aerodynamic influences on atmospheric in situ measurements from sounding rockets: Gumbel, Jörg. In: *Journal of Geophysical Research* 106 (2001), S. 10553–10563. – ISSN 0148–0227
- [16] GUMBEL, J.: Rarefied gas flows through meshes and implications for atmospheric measurements. In: *Annales Geophysicae* (2001)
- [17] GUMBEL, Jörg: *Rocket-borne optical measurements of minor constituents in the middle atmosphere*. 1. Edsbruk : Akademitryck AB, 1997. – ISBN 91–7153–693–0
- [18] HADJICONSTANTINOU, Nicolas G.: Analysis of discretization in the direct simulation Monte Carlo. In: *Physics of Fluids* 12 (2000), Nr. 10, S. 2634. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1289393>. – DOI 10.1063/1.1289393. – ISSN 00319171
- [19] HEDIN, J. ; GUMBEL, J. ; RAPP, M.: The aerodynamics of smoke particle sampling. (2005), S. 145–150
- [20] HEINTZ, A.: *Statistische Thermodynamik Grundlagen und Behandlung einfacher chemischer Systeme*. Rostock, 2006
- [21] HILLERT, W. ; LÜBKEN, F.-J. ; LEHMACHER, G.: TOTAL: a rocket-borne instrument for high resolution measurements of neutral air turbulence during DYANA. In: *Dynamic Adapted Network for the the Atmosphere* 56 (1994), Nr. 13–14, 1835–1852. [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9169\(94\)90013-2](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9169(94)90013-2). – DOI 10.1016/0021-9169(94)90013-2. – ISSN 0021–9169
- [22] KURIHARA, J. ; OYAMA, K.-I. ; IWAGAMI, N. ; TAKAHASHI, T.: Numerical simulation of 3-D flow around sounding rocket in the lower thermosphere. In: *An-*

- nales Geophysicae 24 (2006), Nr. 1, S. 89–95. <http://dx.doi.org/10.5194/angeo-24-89-2006>. – DOI 10.5194/angeo-24-89-2006. – ISSN 1432-0576
- [23] LAUTERBACH, S.: *Aerodynamische Berechnungen zu raketengestützten in-situ Neutralgasdichtemessungen in der mittleren Atmosphäre*. Neubrandenburg, Hochschule Neubrandenburg, Diss., 2008
- [24] LEIBNIZ INSTITUT FÜR ATMOSPHÄRENPHYSIK E.V. AN DER UNIVERSITÄT ROSTOCK: *CONE Instrument*. <https://www.iap-kborn.de/forschung/abteilung-radarsondierungen-und-hoehenforschungsraketen/instrumente/hoehenforschungsraketen/cone/>
- [25] LI, Q. ; STRELNIKOV, B. ; RAPP, M.: Active Falling Sphere for High-Resolution Measurements of Density, Temperature and Horizontal Winds in the Middle Atmosphere. In: *21st ESA Symposium on European Rocket & Balloon Programmes and Related Research* (2013), S. 361–366
- [26] LÜBKEN, F.-J.: Thermal structure of the Arctic summer mesosphere. In: *Journal of Geophysical Research Atmospheres* (1999). <http://dx.doi.org/10.1029/1999JD900076>. – DOI 10.1029/1999JD900076
- [27] LÜBKEN, F.-J. ; FRICKE, K.-H. ; LANGER, M.: Noctilucent clouds and the thermal structure near the Arctic mesopause in summer. In: *Journal of Geophysical Research* 101 (1996), Nr. D5, S. 9489. <http://dx.doi.org/10.1029/96JD00444>. – DOI 10.1029/96JD00444. – ISSN 0148-0227
- [28] MIE, Gustav: Zur kinetischen Theorie der einatomigen Körper. In: *Annalen der Physik* 316 (1903), Nr. 8, S. 657–697. <http://dx.doi.org/10.1002/andp.19033160802>. – DOI 10.1002/andp.19033160802. – ISSN 00033804
- [29] MOECKEL, W. E. ; UNITED STATES. NATIONAL ADVISORY COMMITTEE FOR AERONAUTICS: *Approximate Method for Predicting Form and Location of Detached Shock Waves Ahead of Plane Or Axially Symmetric Bodies*. National Advisory Committee for Aeronautics, 1949 (Approximate Method for Predicting Form and Location of Detached Shock Waves Ahead of Plane Or Axially Symmetric Bodies). <http://naca.central.cranfield.ac.uk/report.php?NID=3689>
- [30] MÜLLEMAN, Arno: *Messungen mit der neuen Betriebselektronik des CONE-Sensors: Technischer Bericht*. 2003
- [31] NÄGELE, Martin: *CONE - ein neuartiges Instrument zur Messung von Neutralgas- und Elektronendichten in der Mesosphäre und unteren Thermosphäre*. Bonn, Universität Bonn, Diss., 1993
- [32] http://www.ohio.edu/mechanical/thermo/property_tables/air/air_Cp_Cv.html
- [33] OPENFOAM FOUNDATION ; OPENFOAM FOUNDATION (Hrsg.): *OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox: User Guide*. <http://foam.sourceforge.net/docs/>

Guides-a4/UserGuide.pdf. Version: 2014

- [34] OTTERMAN, J. ; SATTINGER, I. J. ; SMITH, D. F.: Analysis of a falling-sphere experiment for measurement of upper-atmosphere density and wind velocity. In: *Journal of Geophysical Research* 66 (1961), Nr. 3, S. 819–822. <http://dx.doi.org/10.1029/JZ066i003p00819>. – DOI 10.1029/JZ066i003p00819. – ISSN 0148–0227
- [35] PETZSCH, Dörte: *Ein neues Verfahren für in-situ Messung der Neutralgasdichte in der Mesosphäre*. Rostock, Universität Rostock, Diss., 2012
- [36] PICONE, M. ; HEDIN, A. E. ; DROB, D.: *NRLMSISE-00 (Standard atmosphere modell)*. <http://ccmc.gsfc.nasa.gov/modelweb/atmos/nrlmsise00.html>. Version: 2001
- [37] RAPP, M.: *Aerosol layers in the polar summer mesosphere: Interaction with plasma of the D-region and the dependence on temperature dynamics*. Bonn, Universität Bonn, Diss., 20.12.1999
- [38] RAPP, M. ; GUMBEL, J. ; LÜBKEN, F.-J.: Absolute density measurements in the middle atmosphere. In: *Annales Geophysicae* 19 (2001), Nr. 5, S. 571–580. <http://dx.doi.org/10.5194/angeo-19-571-2001>. – DOI 10.5194/angeo-19-571-2001. – ISSN 1432–0576
- [39] RAPP, Markus: *Kalibrierung des raketengetragenen Diodenlaser-Absorptionsspektrometers MASERATI*. Bonn, Universität Bonn, Diss., 1996
- [40] REES, D. ; BARNETT, J. J. ; LABITZKE, K.: COSPAR International Reference Atmosphere: 1986. Pt. 2: Middle atmosphere models. In: *Advances in Space Research* 10 (1990), Nr. 12, S. 525 p.. – ISSN 02731177
- [41] SCANLON, T. J. ; ROOHI, E. ; WHITE, C. ; DARBANDI, M. ; REESE, J. M.: An open source, parallel DSMC code for rarefied gas flows in arbitrary geometries. In: *Computers & Fluids* 39 (2010), Nr. 10, S. 2078–2089. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2010.07.014>. – DOI 10.1016/j.compfluid.2010.07.014. – ISSN 00457930
- [42] SCANLON, Thomas J. ; WHITE, Craig ; BORG, Matthew K. ; PALHARINI, Rodrigo C. ; FARBAR, Erin ; BOYD, Iain D. ; REESE, Jason M. ; BROWN, Richard E.: Open-Source Direct Simulation Monte Carlo Chemistry Modeling for Hypersonic Flows. In: *AIAA Journal* 53 (2015), Nr. 6, S. 1670–1680. <http://dx.doi.org/10.2514/1.J053370>. – DOI 10.2514/1.J053370. – ISSN 0001–1452
- [43] SHANG, Zhi ; CHEN, Shuo: 3D DSMC Simulation of Rarefied Gas Flows around a Space Crew Capsule Using OpenFOAM. In: *Open Journal of Applied Sciences* 03 (2013), Nr. 01, S. 35–38. <http://dx.doi.org/10.4236/ojapps.2013.31005>. – DOI 10.4236/ojapps.2013.31005. – ISSN 2165–3917

- [44] STRELNIKOV, B. ; RAPP, M. ; BLIX, T. A. ; ENGLER, N. ; HÖFFNER, J. ; LAUTENBACH, J. ; LÜBKEN, F.-J. ; SMILEY, B. ; FRIEDRICH, M.: In situ observations of small scale neutral and plasma dynamics in the mesosphere/lower thermosphere at 79 degree N. In: *Advances in Space Research* 38 (2006), Nr. 11, S. 2388–2393. <http://dx.doi.org/10.1016/j.asr.2005.03.097>. – DOI 10.1016/j.asr.2005.03.097. – ISSN 02731177
- [45] STRELNIKOV, Boris ; RAPP, Markus ; LÜBKEN, Franz-Josef ; LEIBNITZ INSTITUT OF ATMOSPHERIC PHYSICS E.V. AT THE ROSTOCK UNIVERSITY (Hrsg.): *In-situ measurements in the mesosphere/lower thermosphere region with the TOTAL and CONE instruments: Handbook*. 2011
- [46] STRELNIKOVA, I. ; RAPP, M.: Statistical characteristics of PMWE observations by the EISCAT VHF radar. In: *Annales Geophysicae* 31 (2013), Nr. 2, S. 359–375. <http://dx.doi.org/10.5194/angeo-31-359-2013>. – DOI 10.5194/angeo-31-359-2013. – ISSN 1432-0576
- [47] SUN, Zhi-Xin ; TANG, Zhen ; HE, Ya-Ling ; TAO, Wen-Quan: Proper cell dimension and number of particles per cell for DSMC. In: *Computers & Fluids* 50 (2011), Nr. 1, S. 1–9. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2011.04.013>. – DOI 10.1016/j.compfluid.2011.04.013. – ISSN 00457930
- [48] TOLEFSON, H. B. ; NATIONAL AERONAUTICS AND SPACE ADMINISTRATION (Hrsg.): *Status of passive inflatable falling-shere technology for atmospheric sensing to 100km*. Washington, D.C and Hampton, Virginia, 1969
- [49] TURANSKY, Craig. P.: *High-Fidelity Dynamics Modeling of Spacecraft in the Continuum-Rarefied Transition Regime*. Boulder, University of Colorado, Diss., 2013. <http://adsabs.harvard.edu/abs/2012PhDT.....186T>
- [50] WAGNER, Wolfgang: A convergence proof for Bird's direct simulation Monte Carlo method for the Boltzmann equation. In: *Journal of Statistical Physics* 66 (1992), Nr. 3-4, S. 1011–1044. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01055714>. – DOI 10.1007/BF01055714. – ISSN 0022-4715

Abbildungsverzeichnis

1.1	Temperaturprofile der Atmosphäre für Sommer und Winter. Zudem sind einige der wichtigsten Phänomene und die jeweils zur Untersuchung genutzten Instrumente gezeigt. In den Sommermonaten sinkt die Temperatur der Mesopause durch adiabate Entspannung unter den Gefrierpunkt Wasser.	4
1.2	Dichte und daraus abgeleitete Größen zur Charakterisierung einer Strömung für Atmosphärendaten (Andøya, 69 °N) im 15-Jahre Mittel [36] .	7
2.1	Fotoaufnahme eines CONE-Sensors, montiert auf einem Flansch. Zum Schutz des Glühfadens (Kathode) wird der Sensor vor einer Messung mit einer Haube, die mit dem Flansch abschließt, in einem Vakuum ($\sim 10^{-8}$ mbar) gehalten [24].	11
2.2	Schematischer Aufbau des CONE Sensors mit Elektronen- und Neutralgasmesseinheit[24]	12
2.3	Kalibrierkurve für Absolutdichtemessungen mit dem CONE-Instrument [30]	13
2.4	Schematische Darstellung der aerodynamischen Störung um den CONE-Sensor	13
3.1	Wechselwirkungspotentiale. (rot): Anziehende Kräfte (van-der-Waals und Dipolkräfte) in einiger Entfernung. Starke und stark ansteigende, abstoßende Kräfte wirken bei Erreichen eines „kritischen“ Durchmessers. In großer Entfernung gehen die Wechselwirkungskräfte gegen Null [20]. (türkis): Einfacheres „Hard Sphere“-Modell. Bei Unterschreiten eines „kritischen“ Durchmessers wirkt eine starke, abstoßende Kraft.	19
3.2	Skizze einer binären Kollision mit relativen Geschwindigkeiten, reduzierten Massen und einem festen Streupunkt O . Zusammengefasst nach Skizzen in [9].	20
3.3	Wechselwirkungsquerschnitt zweier Moleküle unter der Annahme von „Hard Sphere“ Durchmessern, nach [9].	23

3.4	Effektives Volumen eines Testpartikels, aufgespannt durch den effektiven Wechselwirkungsquerschnitt und die relative Geschwindigkeit des Moleküls im Geschwindigkeitsfeld, nach [9]	24
3.5	DSMC Programmstruktur. Diese Struktur ist allgemeingültig für die DSMC-Methode.	32
3.6	<i>Struktur der OpenFOAM C++ Bibliotheken</i>	33
4.1	Ergebnisse der Testrechnungen zur Untersuchung des Skalierungsverhaltens. Gestrichelte Linien (- -): Execution Time, reine Rechenzeit. Durchgehende Linie (—): Clock Time, tatsächlich benötigte Gesamtzeit. Für jeden Testfall ergibt sich ein Optimum von genutzten Prozessoren. .	41
5.1	WADISI Nutzlastaufbau mit CONE-Sensoren vorne und hinten auf der Nutzlast. Der Durchmesser der Nutzlast beträgt 17 Zoll, d.h. 431.8 mm .	45
5.2	Machzahlen und Geschwindigkeiten der WADISI-Kampagne, ermittelt für Temperaturen entsprechend der Höhe [36] und spezifischer Wärme[32]	46
5.3	DSMC Ergebnisse (a,b oben) im Vergleich mit einem analytischen Verfahren nach Moeckel (a,b unten) [29]. Das analytische Verfahren zeigt keine gute Übereinstimmung mit Simulationen für Höhen von 80 und 105 km und den dazugehörigen Geschwindigkeiten.	47
5.4	Anzahldichteprofile der DSMC-Rechnungen für einen achsensymmetrischen, längsangeströmten Zylinder mit eingezeichneter Lage des CONE-Instruments.	49
5.5	Definition der Gitterparameter. Bei Beibehaltung der Transparenz Tr und Vorgabe einer Stegbreite b , ergibt sich die Steglänge k	51
5.6	CAD-Modell des Cone-Sensors. Die in Abb. 5.7 gezeigten Werte werden für Flächen des gelb markierten „Messbereichs“ ermittelt.	51
5.7	Anzahldichte und lokale RAM-Faktoren auf zufällig gewählten Messpunkten unter und über dem Ionen-Kollektor (5.7a,5.7b). Bei beiden Testfällen liegt dieselbe Messpunkteverteilung vor. Die Simulation mit dickerer Stegbreite zeigt etwas höhere lokale Dichte- und Ram-Werte. .	52
5.8	Dichteprofil des Cone Sensors für zwei Testfälle mit großer und kleinerer Stegbreite und gleicher Transparenz für Ionenschirm und Anode des Ionisationsmanometers	53
6.1	Anzahldichte über die Höhe. Daten für Andøya ($69^\circ N$), ermittelt nach dem NRLMSISE-00-Modell [36]	56

6.2	Rechenvolumen der CONE-Simulationen mit CONE-Geometrie und Berandungen	58
6.4	Simulationsparameter für eine der DSMC (90 km Höhe) zur Bestimmung der Konvergenz	61
6.5	Ram-Funktionen. Zur Validierung der Ram-Faktoren für die WADISI-Kampagne aus DSMC mittels <i>dsmcFoam</i> (rote Marker) wurde ein zweidimensionales Polynom aus den bereits vorhandenen Polynomen (grün) berechnet. Dafür wurde das Apogäum als dritte Variable gesetzt und für ein mit der Absolutgeschwindigkeit korrigiertes Apogäum von 116.5 km bestimmt. Das dunkelgrüne Polynom wurde für Werte aus [38] aus zweidimensionalen DSMC mit senkrechter Anströmung entwickelt. Die hellgrüne Funktion wurde analog dazu für ein Apogäum von 130 km entwickelt.	63
6.6	Dichteprofile über die Höhe (rechts) und durch Integration ermittelte Temperaturen (links). Ein Vergleich der korrigierten Funktionen (blau und grün) zeigt den Einfluss der Ram-Funktionen auf die Rohdaten (schwarz). Neben einem deutlichen Effekt auf die Absolutwerte der Dichte von teilweise einer halben Größenordnung, ist vor allem der Effekt auf den Anstieg herauszustellen. Dieser verursacht signifikante Änderungen der abgeleiteten Temperaturprofile von bis zu ± 4 K.	64

Tabellenverzeichnis

4.1	Setup Parameter der STCs	40
4.2	Effektivität der Skalierung für drei verschiedene Testfälle STC1 bis 3 . . .	42
5.2	Aerodynamische Parameter der Vergleichsrechnungen [38]	53
5.4	Vergleich der gemittelten RAM-Faktoren für die Testfälle ($b = 0.3 \text{ mm}$ und $b = 0.6 \text{ mm}$) DSMC Ergebnissen einer 2D Simulation und gemittel- ten Werten von Fallenden-Kugel-Experimenten	54
6.1	Ausgewählte Daten der WADISI Trajektorie	57
6.2	Globale Simulationsparameter	60
6.3	Individuelle Simulationsparameter für Simulationen in 80,90 und 110 km.	60

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich herzlich bei Herrn Dr. Martin Brede für die Übernahme des Erstgutachtens bedanken. Seine konstruktiven Anmerkungen und Kommentare sind der Qualität dieser Arbeit sehr zuträglich.

Des Weiteren geht mein Dank an Herrn Prof. „Koki“ Chau für die Übernahme des Zweitgutachtens dieser Arbeit. Als Leiter der Abteilung *Radarsondierungen und Höhenforschungsraketen* am IAP hatte Herr Chau ein offenes Ohr für Probleme und brachte meiner Arbeit sein Vertrauen entgegen.

Einen großen Dank möchte ich Herrn Dr. Boris Strelnikov aussprechen. Als Leiter der Raketengruppe war Herr Strelinkov jederzeit Ansprechpartner in raketen- und atmosphärenspezifischen Fragen. Er übernahm den Großteil der persönlichen Betreuung, ließ mir viele Freiheiten bei der inhaltlichen Gestaltung dieser Arbeit und unterbreitete mir im richtigen Moment neue Impulse und Anregungen.

Ein weiterer Dank geht an die vielen anderen Mitarbeiter des Instituts, von denen ich immer wieder Einblicke und Erklärungen zu aktuellen Forschungsthemen des IAP erhielt, die mir bei kleineren und größeren Softwareproblemen weiterhalfen und die so einen nennenswerten Beitrag zum Gelingen der Simulationen leisteten. Außerdem möchte ich mich insbesondere bei meinen Mitfahrgelegenheiten, geschätzten Gesprächspartnern und Freunden, Carsten und Heiner, bedanken. Ich danke euch für Fragen, die für mich neue Denkanstöße waren, und für Gespräche die Platz für Neues schafften. Besonders mein Bürokollege Heiner zeigte stets seine Hilfsbereitschaft bei den vielen kleinen Fragen. Deine Hilfe sorgte gerade in der Endphase dieser Arbeit, die mit dem Schreiben eines Artikels über die Ergebnisse zusammenfiel, für das Gelingen beider. Deine fachliche Kompetenz hat mich sehr bereichert.

Zuletzt, doch umso herzlicher, möchte ich meiner Johanna und meiner Familie danken. Ihr habt mich immer unterstützt, wenn es nötig war und euch bei Erfolgen mit mir gefreut.

Eidesstattliche Versicherung

Ich versichere eidesstattlich durch eigenhändige Unterschrift, dass ich die Arbeit selbstständig und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Alle Stellen, die wörtlich oder sinngemäß aus Veröffentlichungen entnommen sind, habe ich als solche kenntlich gemacht. Ich weiß, dass bei Angabe einer falschen Versicherung die Prüfung als nicht bestanden zu gelten hat.

Rostock, 6. Juli 2015
