Modellierung laminarer und turbulenter Flüssig-Sauerstoff/Wasserstoff-Sprayflammen unter kryogenen Hochdruckbedingungen

Von der Fakultät Energietechnik
der
Universität Stuttgart
zur
Erlangung der Würde eines
Doktors der Ingenieurwissenschaften
(Dr.-Ing.)
genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

Dipl.– Ing. Dominik Schlotz

geboren in Frankfurt am Main

Hauptberichterin: Prof. Dr. rer. nat. Eva Gutheil
Mitberichter: Prof. Dr. rer. nat. Ulrich Maas

Tag der mündlichen Prüfung: 15.03.2001

Institut für Technische Verbrennung
Universität Stuttgart
2001

Modellierung laminarer und turbulenter Flüssig-Sauerstoff/Wasserstoff-Sprayflammen unter kryogenen Hochdruckbedingungen

Von der Fakultät Energietechnik
der
Universität Stuttgart
zur
Erlangung der Würde eines
Doktors der Ingenieurwissenschaften
(Dr.-Ing.)
genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

Dipl.– Ing. Dominik Schlotz

geboren in Frankfurt am Main

Hauptberichterin: Prof. Dr. rer. nat. Eva Gutheil
Mitberichter: Prof. Dr. rer. nat. Ulrich Maas

Tag der mündlichen Prüfung: 15.03.2001

Institut für Technische Verbrennung
Universität Stuttgart
2001

Inhaltsverzeichnis

I Einführung und Motivation 3

II Grundgleichungen für reaktive Zwei-Phasen-Strömungen 7

II.1 Erhaltungsgleichungen der Gasphase 7
II.1.1 Die allgemeinen Erhaltungsgleichungen der Gasphase 7
II.1.2 Die Erhaltungsgleichung für die Gesamtmasse 8
II.1.3 Bilanzen für die Massenanteile der chemischen Spezies 8
II.1.4 Die Impulserhaltungsgleichung 10
II.1.5 Die Energieerhaltungsgleichung 10
II.1.6 Schließung des Erhaltungsgleichungssystems 11

II.2 Transportprozesse in der Gasphase 11
II.2.1 Massentransport 11
II.2.2 Impulstransport 12
II.2.3 Energietransport 13

II.3 Das chemische Reaktionsmodell 13

II.4 Beschreibung der flüssigen Phase 14
II.4.1 Das Zwei-Film-Modell für die Tröpfchenverdampfung 14
II.4.2 Tröpfchenaufheizung 20
II.4.3 Tropfenbewegung 22

II.5 Stoffdaten 22
II.5.1 Stoffdaten der Gasphase 22
II.5.2 Stoffdaten der flüssigen Phase 26
II.5.3 Thermodynamisches Gleichgewicht binärer Systeme 26

III Laminare Sprayflammen 31

III.1 Die Gegenstromkonfiguration 31

III.2 Spezielle Form der Modellgleichungen 32
III.2.1 Gasphase 32
III.2.2 Die Quellterme des Phasenaustauschs 35
III.2.3 Flüssige Phase 36

III.3 Transformation des Gleichungssystems 38
III.3.1 Das dimensionsbehaftete Gleichungssystem 38
III.3.2 Einführung von Referenzgrößen 38

III.3.3 Transformation der Gleichungen 43

III.4 Analyse der Randbedingungen 48
III.4.1 Stöchiometrie 48
III.4.2 Spraydichte 48

III.5 Das numerische Lösungsverfahren 51
III.5.1 Diskretisierung der Differentialgleichungen 51
III.5.2 Das adaptive Berechnungsgitter 54
III.5.3 Numerische Lösung des Gleichungssystems 55

III.6 Ergebnisteil 58
III.6.1 Validierung der Teilmodelle 58
III.6.1.1 H_2/Luft-Gasdiffusionsflamme 58
III.6.1.2 Verdampfung von LOX-Tröpfchen in Wasserstoff 60
III.6.2 Berechnung von H_2/O_2-Gasdiffusionsflammen 63
III.6.3 Berechnung von LOX/H_2-Sprayflammen 65
III.6.3.1 Untersuchung der äußeren Flammenstruktur 65
III.6.3.2 Untersuchung der inneren Flammenstruktur 70

IV Turbulente Sprayflammen 75

IV.1 Struktur turbulenter Diffusionsflammen 75

IV.2 Turbulenzmodellierung 75
IV.2.1 Das chemische Reaktionsmodell 76
IV.2.1.1 Einfluß der Turbulenz auf chemische Reaktionen 76
IV.2.1.2 Mischungsbruch und skalare Dissipationsgeschwindigkeit 77
IV.2.1.3 Der *Flamelet*-Bereich in Phasendiagrammen 79
IV.2.1.4 Schwankung skalarer Größen im Strömungsfeld 82
IV.2.2 Die gemittelten Gasphasengleichungen 83
IV.2.3 Modellierung der flüssigen Phase 87

IV.3 Ergebnisteil 89
IV.3.1 Generierung von Startdaten 89
IV.3.1.1 Startwerte der Gasphase 90
IV.3.1.2 Startwerte der flüssigen Phase 92
IV.3.1.3 Variation der Startwerte 95
IV.3.2 Diskussion der Berechnungsergebnisse 98

V Zusammenfassung und Ausblick 110

Symbolverzeichnis 114

Literatur 118

Teil I

Einführung und Motivation

Die Verbrennung von Brennstoffsprays in Luft findet breite technische Anwendung z.B. im Bereich der motorischen Verbrennung, bei industriellen Gasturbinen und Flugzeugtriebwerken oder Industrieöfen. Auch bei Raketenantrieben wie z.B. dem Haupttriebwerk des Space Shuttle SSME (*Space Shuttle Main Engine*) oder dem Triebwerk Vulcaine der Ariane 5 werden Sprays verbrannt. Allerdings wird hier im Gegensatz zur konventionellen Sprayverbrennung umgekehrt flüssiger Sauerstoff (LOX – *liquid oxygen*) als Oxidator in gasförmigen Wasserstoff eingedüst. Die Spraybildung, das Aufheizen und Verdampfen der Tröpfchen, die Wechselwirkung zwischen einzelnen Tröpfchen sowie zwischen dem Spray und dem turbulenten Strömungsfeld, die Gemischbildung, und schließlich die Zündung und Verbrennung sind komplexe physikalisch-chemische Prozesse, die bisher nicht so gut verstanden sind wie die homogene Gasphasenverbrennung, so daß auf dem Gebiet der Sprayverbrennung ein noch größerer Forschungsbedarf besteht. Zielsetzung ist das Erreichen einer stabilen, sicheren und sauberen Verbrennung mit hohem Wirkungsgrad.

Im Hinblick auf die Anwendung der Sprayverbrennungstechnik in der Raumfahrt wird in dieser Arbeit das Flüssig-Sauerstoff/Wassertoff-System untersucht. Grundsätzlich lassen sich die hier vorgestellten Modelle aber auch auf Brennstoffspray/Luft-Systeme anwenden. Um eine hohe Energiedichte und großen Schub zu erreichen, erfolgt die Verbrennung in Raketentriebwerken unter sehr hohem Druck – er beträgt bis zu 10 MPa und liegt damit weit über dem kritischen Druck von Sauerstoff (p_{c,O_2}=5,043 MPa). Die Reaktanden werden bei Triebwerken ohne Vorbrennersystem mit einer kryogenen Eintrittstemperatur von 100 K in die Brennkammer eingedüst. Der flüssige Sauerstoff tritt in der Regel durch mehrere ringförmig angeordnet koaxiale Injektoren als Flüssigkeitsstrahl in die Raketenbrennkammer ein; Abb. (I.0.1) zeigt die Bauweise des Raktentriebwerkes Vulcaine [1]. Jede Einspritzdüse liegt in einem Ringspalt, durch den der gasförmige Wasserstoff eingedüst wird. Die Eintrittsgeschwindigkeiten betragen etwa 20 und 300 m/s für das Spray bzw. das Trägergas. Durch Scherkräfte werden die Flüssigkeitsstrahle in Ligamente (primäre Zerstäubung) und weiter stromab in viele kleine Tröpfchen (sekundäre Zerstäubung) aufgebrochen. Das so gebildete Spray verdampft im Strömungsfeld. Turbulenz in der Brennkammer sorgt für eine gute Durchmischung von Sauerstoff und Wasserstoff. Die Verbrennung findet in Flammenschichten statt, die durch Verwirbelungen gestreckt, gekrümmt und teilweise getrennt sind. Balakrishnan [2] hat gezeigt, daß die LOX/H_2-Verbrennung im *Flamelet*-Bereich turbulenter Reaktionszonen [3, 4, 5] liegt. Das heißt, daß die Diffusionsflammenfronten als ein Ensemble vieler kleiner laminarer, gestreckter Flämmchen aufgefaßt werden können, deren Struktur der der Gegenstromkonfiguration sehr ähnlich ist.

Deshalb werden zunächst laminare H_2/O_2-Gasflammen und LOX/H_2-Sprayflammen in der Gegenstromkonfiguration untersucht und die Ergebnisse in Flammenbiliotheken nie-

dergelegt, die in der Berechnung turbulenter Flammen Verwendung finden. Somit haben die entwickelten Flammenbibliotheken einen direkten praktischen Nutzen. Aber auch aus dem Blickwinkel des Grundlagenforschers ist die Untersuchung laminarer Flammenstrukturen in der Gegenstromkonfiguration interessant, trägt diese Untersuchung doch zu einem besseren Verständnis der komplexen Vorgänge in Gas- und Sprayflammen bei. Die Gegenstromkonfiguration eignet sich insbesondere deswegen, weil sie ein wohldefiniertes Strömungsfeld aufweist, das mathematisch einfach zu beschreiben und somit leicht zu modellieren ist, weiterhin aber auch, weil diese Konfiguration im Labor leicht realisierbar ist und Randbedingungen im Experiment gut variiert werden können.

Continillo und Sirignano [6, 7] formulierten ein mathematisches Modell für Gegenstrom-Sprayflammen mit monodispersem Brennstoffspray. Sie führten die Ähnlichkeitstransformation in diesen mit Tröpfchen beladenen Zwei-Phasen-Grenzschichtströmungen durch und leiteten ähnliche Lösungen her, die an jedem Ort in der Strömung für jede Tröpfchenkonzentration innerhalb der Grenzen vernachlässigbarer Partikel-Partikel Wechselwirkungen gültig sind.

Die oben genannte Ähnlichkeitstransformation reduziert das zweidimensionale, stationäre Erhaltungsgleichungssystem auf ein eindimensionales, stationäres Problem. Des-

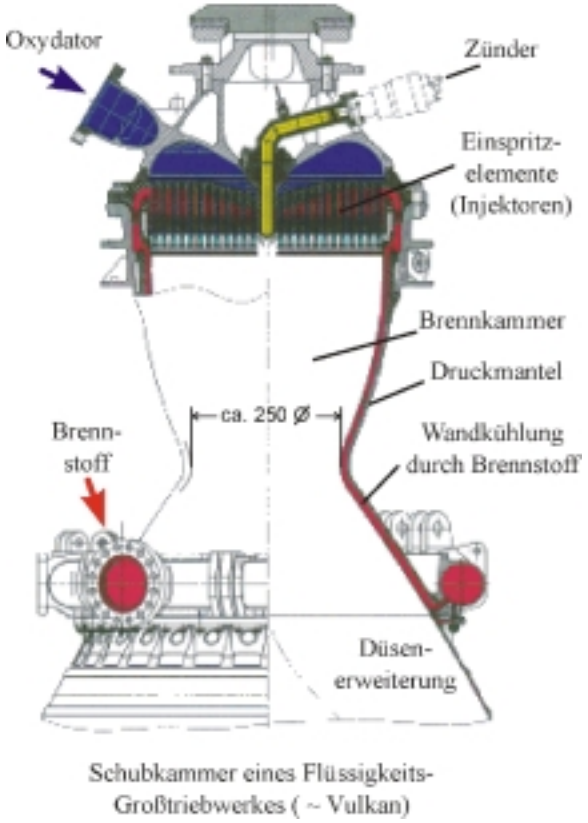

Abbildung I.0.1: Darstellung des Raketentriebwerks Vulkaine [1].

halb ist ein oben bereits erwähnter Vorteil der Gegenstromkonfiguration die einfache Form der das System beschreibenden Gleichungen. Wie in einer Studie von Gutheil und Sirignano [8] kürzlich gezeigt wurde, wird dadurch die Berücksichtigung eines detaillierten chemischen Reaktionsmechanismus und detaillierten Transports im Modell möglich. Damit ist die Untersuchung der Reaktionskinetik in Gegenstrom-Flammen und die Ermittlung der Verlöschbedingungen möglich. Auf den vorhergehenden Studien [6, 7, 8] aufbauend erfolgt hier die Weiterentwicklung des mathematischen Modells für das Flüssig-Sauerstoff/Wasserstoff-System. Es wird nicht nur für mono- sondern allgemein für polydisperse Sprays formuliert.

Den Hochdruckbedingungen in Raketentriebwerken wird bei der Modellierung der Zweiphasenströmung dadurch Rechnung getragen, daß in dem benutzten Zwei-Film-Verdampfungsmodell von Abramzon und Sirignano [9, 10, 11] das Raoult'sche Gesetz durch eine thermodynamische Gleichgewichtsberechnung für binäre H_2/O_2-Mischungen ersetzt wird, die die druck- und temperaturabhängige Gemischzusammensetzung an der Tröpfchenoberfläche liefert. Für diese Gleichgewichtsberechnung wird eine kubische Realgasgleichung benutzt. Da in dieser Arbeit nur dünne Sprays behandelt werden, sind Wechselwirkungen zwischen Tröpfchen vernachlässigbar [12, 13], und die Tröpfchen können näherungsweise als einzelne Punktquellen betrachtet werden. Rangel und Sirignano diskutieren in [14] die hier gegebene Gültigkeit der Punktquellennäherung. Für den Temperaturbereich von 80 bis 300 K werden weiterhin Stoffdaten bereitgestellt.

Innerhalb der Arbeitsgruppe fanden in den vergangenen Jahren weitere Forschungsaktivitäten auf dem Gebiet der Simulation turbulenter Methanol-Sprayflammen statt, die ebenfalls im *Flamelet*-Bereich turbulenter Verbrennung liegen. Hollmann und Gutheil [15, 16] formulierten ein System von gemittelten zweidimensionalen Gasphasen-Erhaltungsgleichungen, die Quellterme des Phasenaustauschs beinhalten und durch das k-ϵ -Turbulenzmodell geschlossen werden. Das Spray kann durch ein diskretes Tröpfchenmodell beschrieben werden [12, 17] bei dem es in Tröpfchengrößenklassen mit spezifischer Tröpfchenanzahldichte für jede Tröpfchengrößenklasse eingeteilt ist. Zur Berechnung des Massen- und Energietransfers zwischen den Tröpfchen einer Größenklasse und der Gasphase werden für jede Größenklasse wiederum das Zwei-Film-Modell von Abramzon und Sirignano mit Gleichungen für die Tröpfchenaufheizung und Verdampfung, und zudem Bewegungsgleichungen benutzt, die den Tröpfchentransport durch das turbulente Strömungsfeld beschreiben. Die gelösten Spraygleichungen erlauben die Bestimmung der Quellterme des Phasensaustauschs. Die Berechnung der mittleren Massenbrüche des Gasgemisches erfolgt über die Integration der mit Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen für den Mischungsbruch ξ und die skalare Dissipationsgeschwindigkeit χ multiplizierten laminaren Massenbrüche. Diese werden in Abhängigkeit von ξ und χ einer Flammenbibliothek entnommen. Beide Phasen sind durch einen Euler-Lagrange Formalismus miteinander gekoppelt.

Dieses Modell für ein Methanolspray in Luft wird für ein Sauerstoffspray in Wasserstoff umformuliert. Nach Durchführung der erforderlichen Änderungen in dem zweidimensionalen Strömungscode CORA 2 wurde unter Verwendung der im ersten Teil vorgestellten H_2/O_2-Gasflammenbibliothek eine turbulente LOX/H_2-Sprayflamme berechnet. Dabei

werden Startwerte aus Experimenten, deren Generierung im Detail erläutert wird, variiert, um die Sensitivität des Systems, d.h. den Einfluß der Parameteränderungen auf die Flammenstruktur zu testen. Die Ergebnisse werden mit experimentellen Daten von Sender *et al.* [18] verglichen, die an der Mikrobrennkammer M3 der DLR Lampoldshausen gemessen wurden.

Nach dieser Einführung in die Thematik der vorliegenden Arbeit folgt im sich anschließenden Abschnitt eine Zusammenfassung der Grundgleichungen für reaktive Zwei-Phasen-Strömungen. In diesem Teil werden die Gleichungen der Gas- und Flüssigphase, das detaillierte chemische Reaktionsmodell und die Stoffdaten für kryogene Hochdruckbedingungen behandelt. Der dritte Abschnitt beschäftigt sich mit laminaren H_2/O_2-Gasflammen und Flüssig-Sauerstoff/Wasserstoff-Sprayflammen in der Gegenstromkonfiguration. Neben der Aufstellung und Transformation der von den Grundgleichungen des Abschnitts Zwei abgeleiteten speziellen Modellgleichungen werden nach einer Analyse der Randbedingungen und der Vorstellung des numerischen Lösungsverfahrens die Ergebnisse diskutiert. Einer Validierung der Teilmodelle schließt sich die Untersuchung sowohl laminarer H_2/O_2-Gasdiffusionsflammen als auch laminarer LOX/H_2-Sprayflammen in der Gegenstromkonfiguration an. Die zusammengestellte Gasflammenbibliothek wird in Abschnitt Vier verwendet, der sich mit der Berechnung turbulenter LOX/H_2-Sprayflammen beschäftigt. Nach Vorstellung des eingesetzten Turbulenzmodells wird auf die Generierung der Startwerte aus experimentellen Daten eingegangen. Anschließend erfolgt die Darstellung und Diskussion der Berechnungsergebnisse.

Teil II

Grundgleichungen für reaktive Zwei-Phasen-Strömungen

II.1 Erhaltungsgleichungen der Gasphase

II.1.1 Die allgemeinen Erhaltungsgleichungen der Gasphase

Eine allgemeine Form der Erhaltungsgleichungen für die extensiven Größen Masse, Impuls und Energie läßt sich aus einer Bilanz an einem Kontrollvolumen herleiten. Eine solche Bilanz beschreibt die Änderung der extensiven Größe $\Phi(t)$ im Kontrollvolumen Ω_{CV} mit der Zeit t. Die Änderung von $\Phi(t)$ kann durch drei verschiedene Prozesse verursacht werden: Durch einen Fluß $\vec{F}_\Phi \vec{n} \mathrm{d}S$ der betrachteten Größe $\Phi(t)$ durch die Oberfläche $\partial\,\Omega_{\mathrm{CV}}$ des Kontrollvolumens, durch Produktion q_Φ der extensiven Größe im Kontrollvolumen, oder durch Fernwirkungen s_Φ auf das Kontrollvolumen. Der Transport der Größe Φ durch die Oberfläche des Kontrollvolumens kann beispielsweise durch Konvektion, Diffusion und Wärmeleitung verursacht sein. Eine Produktion von Φ im Inneren des Kontrollvolumens erfolgt durch chemische Reaktionen oder auch durch Phasenwechsel bei Zweiphasenströmungen. Sprays müssen bei der Formulierung eines solchen Produktionsterms die Bedingung erfüllen, daß ihr Volumenfluß gegenüber dem Volumenfluß der Gasphase vernachlässigbar ist, so daß die Fluiddichte näherungsweise der Gasdichte entspricht [19]. Unter den Bereich Fernwirkungen fallen z.B. der Energietransport durch Wärmestrahlung, Gravitation oder elektromagnetische Kräfte.

Führt man die zur extensiven Größe Φ gehörende Dichte $\phi\ (\vec{r}, t) = \mathrm{d}\Phi(t)/\ \mathrm{d}V$ ein, kann die zeitliche Änderung von Φ geschrieben werden als [20]

$$\frac{\partial\,\Phi}{\partial\,t} = \int\limits_{\Omega_{\mathrm{CV}}} \frac{\partial\,\phi}{\partial\,t} \mathrm{d}V\ . \tag{II.1.1}$$

Nach Integration des Flusses über die Oberfläche $\partial\,\Omega_{\mathrm{CV}}$ und Integration der Produktions- und Fernwirkungsterme über das Kontrollvolumen Ω_{CV} erhält man zusammenfassend folgende Erhaltungsgleichung in integraler Form:

$$\underbrace{\int\limits_{\Omega_{\mathrm{CV}}} \frac{\partial\,\phi}{\partial\,t} \mathrm{d}V}_{\text{zeitl. Änderung}} + \underbrace{\int\limits_{\partial\Omega_{\mathrm{CV}}} \vec{F}_\Phi \vec{n} \mathrm{d}S}_{\text{Fluß}} = \underbrace{\int\limits_{\Omega_{\mathrm{CV}}} q_\Phi \mathrm{d}V}_{\text{Produktion}} + \underbrace{\int\limits_{\Omega_{\mathrm{CV}}} s_\Phi \mathrm{d}V}_{\text{Fernwirkung}}\ . \tag{II.1.2}$$

Das Oberflächenintegral läßt sich mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes durch ein Vo-

lumenintegral ersetzen

$$\int\limits_{\partial\Omega_{\mathrm{CV}}} \vec{F}_\Phi \vec{n} \mathrm{d}S = \int\limits_{\Omega_{\mathrm{CV}}} \mathrm{div}\vec{F}_\Phi \, \mathrm{d}V \ . \tag{II.1.3}$$

Führt man den Grenzübergang $\Omega \rightarrow 0$ aus, erhält man schließlich die differentielle, koordinatenfreie Form der Erhaltungsgleichung

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathrm{div}\vec{F}_\Phi = q_\Phi + s_\Phi \, . \tag{II.1.4}$$

Diese allgemeine Form der Erhaltungsgleichung läßt sich nun für die extensiven Größen Masse, Impuls und Energie formulieren.

II.1.2 Die Erhaltungsgleichung für die Gesamtmasse

Die Erhaltungsgleichung für die Gesamtmasse wird auch als Kontinuitätsgleichung bezeichnet. Sie sagt aus, daß die Gesamtmasse des Systems erhalten bleibt, d.h. daß weder Masse produziert noch vernichtet wird.

Für die Herleitung der Gesamtmassenbilanz werden die in Gl. (II.1.4) auftretenden Größen bestimmt. Die Dichte der extensiven Größe Masse m ist gegeben durch die Massendichte ρ . Der Fluß ist $\vec{F}_m = \rho \, \vec{v}$, wobei $\vec{v}$ der Geschwindigkeitsvektor ist.

Bei der Modellierung von Zweiphasenströmungen wird ein Produktionsterm q_m in der Kontinuitätsgleichung der Gasphase berücksichtigt, der den Austausch von Masse zwischen flüssiger Phase und Gasphase durch Verdampfung oder auch durch Kondensation beschreibt. Die Definition der Phasenaustauschterme aller Erhaltungsgleichungen werden getrennt für laminare und turbulente Sprayflammen in den Kapiteln (III.2.2) bzw. (IV.2.2) angegeben.

Ein Fernwirkungsterm tritt in der Erhaltungsgleichung für die Gesamtmasse nicht auf.

Setzt man die hergeleiteten Zuordnungen in Gl. (II.1.4) ein, erhält man die folgende Form der Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}(\rho \, \vec{v}) = q_m \, . \tag{II.1.5}$$

II.1.3 Bilanzen für die Massenanteile der chemischen Spezies

In diesem Unterkapitel werden Bilanzgleichungen für die Masse der einzelnen chemischen Komponenten i hergeleitet. Die Dichte der Masse m_i ist die Partialdichte $\rho_\,\mathrm{i} = Y_\mathrm{i}\rho$, dabei ist $Y_\mathrm{i} = m_\mathrm{i}/\, m$ der Massenbruch. Die Teilchengeschwindigkeit $\vec{v}_\mathrm{i}$ kann als zusammengesetzte Geschwindigkeit

$$\vec{v}_\mathrm{i} = \vec{v} + \vec{V}_\mathrm{i} \tag{II.1.6}$$

betrachtet werden. In Gl. (II.1.6) ist $\vec{v}$ die massenmittlere Strömungsgeschwindigkeit oder synonym auch Schwerpunktgeschwindigkeit und $\vec{V}_{\mathrm{i}}$ die Relativgeschwindigkeit zwischen individueller Teilchengeschwindigkeit und der Schwerpunktgeschwindigkeit; $\vec{V}_{\mathrm{i}}$ wird auch als Diffusionsgeschwindigkeit bezeichnet. Damit setzt sich die Gesamtstromdichte aus einem konvektiven Anteil $\vec{F}^{\mathrm{K}}_{m_{\mathrm{i}}} = \rho_{\mathrm{i}}\vec{v}$ und einem diffusiven Anteil $\vec{F}^{\mathrm{D}}_{m_{\mathrm{i}}} = \rho_{\mathrm{i}}\vec{V}_{\mathrm{i}}$ zusammen.

Der diffusive Anteil der Gesamtstromdichte teilt sich in zwei Bestandteile auf, eine Stromdichte durch molekulare Diffusion $\vec{j}_{\mathrm{i}}$ und eine Stromdichte durch Thermodiffusion $\vec{j}^{\mathrm{T}}_{\mathrm{i}}$. Die Diffusionsgeschwindigkeit $\vec{V}_{\mathrm{i}}$ ist die Summe beider Stromdichten dividiert durch die Dichte. Wärme- und Stoffübertragung sind in dem diffusiven Anteil der Gesamtstromdichte $\vec{F}^{\mathrm{D}}_{m_{\mathrm{i}}}$ also gekoppelt.

In den Bilanzen für die Massenanteile treten keine Fernwirkungsterme auf. Wie schon in der Erhaltungsgleichung für die Gesamtmasse muß jedoch durch den Phasenübergang ein Produktionsterm formuliert werden; er ist für ein Einkomponenten-Spray

$$q_{m_{\mathrm{i}}} = \delta_{\mathrm{i,S}}\, q_m. \tag{II.1.7}$$

Dabei ist $\delta_{\mathrm{i,S}}$ das Kronecker Symbol, welches den Zahlenwert Eins annimmt, sofern die Bilanz für die als Spray vorliegende Komponente (Index 'S') formuliert ist, und sonst den Zahlenwert Null.

Zusätzlich ist ein Produktionsterm

$$q_{m_{\mathrm{i}},\mathrm{c}} = W_{\mathrm{i}}\dot{\omega}_{\mathrm{i}} \tag{II.1.8}$$

zu berücksichtigen, der in reaktiven Strömungen die Umsetzung der chemischen Komponenten beschreibt. Es ist $\dot{\omega}_{\mathrm{i}}$ die molare Bildungsgeschwindigkeit der Spezies i und W_{i} ihre Molmasse. Werden alle Terme zusammengesetzt, erhält man insgesamt für die Bilanzen der Massenanteile der chemischen Spezies

$$\frac{\partial \rho_{\mathrm{i}}}{\partial t} + \mathrm{div}(\rho_{\mathrm{i}}\vec{v}) = -\mathrm{div}(\vec{j}_{\mathrm{i}} + \vec{j}^{\mathrm{T}}_{\mathrm{i}}) + W_{\mathrm{i}}\dot{\omega}_{\mathrm{i}} + \delta_{\mathrm{i,S}}\, q_m\,. \tag{II.1.9}$$

Unter Zuhilfenahme der Beziehungen

$$\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} Y_{\mathrm{i}} = 1\,, \tag{II.1.10}$$

$$\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} (\vec{j}_{\mathrm{i}} + \vec{j}^{\mathrm{T}}_{\mathrm{i}}) = 0 \tag{II.1.11}$$

$$\text{und} \quad \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} W_{\mathrm{i}}\dot{\omega}_{\mathrm{i}} = 0 \tag{II.1.12}$$

kann leicht gezeigt werden, daß sich durch Summation von Gl. (II.1.9) über alle Komponenten K die Kontinuitätsgleichung (II.1.5) ergibt.

II.1.4 Die Impulserhaltungsgleichung

Die Impulserhaltungsgleichung erhält man auf die gleiche Weise wie die zuvor vorgestellten Erhaltungsgleichungen für die skalare Größe Masse durch Definition des Flusses und der Produktions- und Fernwirkungsterme. In der Impulserhaltungsgleichung wird eine extensive Vektorgröße, der Impuls bilanziert. Er ist gegeben durch $\vec{\Phi}_p = m\vec{v}$. Die daraus abgeleitete Impulsdichte, eine intensive Größe, ist $\vec{\phi}_p = \rho\,\vec{v}$. Die Impulsstromdichte $\overline{\overline{F}}_p$ hat zwei Bestandteile, einen konvektiven Anteil $\rho\,\vec{v}\otimes\vec{v}$ und einen Anteil $\overline{\overline{p}}$, der den Impulstransport durch Druck- und Reibungskräfte (Oberflächenkräfte) beschreibt.[1]

Der Quellterm des Phasenwechsels $\vec{q}_p$ wird in den Kapiteln (III.2.2) bzw. (IV.2.2) für die in dieser Arbeit behandelten Berechnungsprobleme definiert.

Weiterhin muß die Massenkraft als Fernwirkungsterm berücksichtigt werden; es gilt $\vec{s}_p = \rho\,\vec{g}$. Dabei ist $\vec{g}$ der Vektor der Gravitationsbeschleunigung. Das Einsetzen dieser Terme in die allgemein formulierte Erhaltungsgleichung (II.1.4) liefert

$$\frac{\partial\,(\rho\,\vec{v})}{\partial\,t} + \mathrm{div}(\rho\,\vec{v}\otimes\vec{v}) = -\mathrm{div}\,\overline{\overline{p}} + \rho\,\vec{g} + \vec{q}_p\,. \qquad \text{(II.1.13)}$$

II.1.5 Die Energieerhaltungsgleichung

Durch Anwendung der allgemeinen Erhaltungsgleichung (II.1.4) wird jetzt eine Bilanzgleichung für die spezifische Gesamtenergie e hergeleitet. Anschließend wird diese Gleichung umgeformt in eine Gleichung für die spezifische Enthalpie.

Begonnen wird mit der Definition der Terme in Gl. (II.1.4): Die Energiedichte ist gegeben durch $\phi_e = \rho\,e$. Die Energiestromdichte $\vec{F}_e$ ist die Summe aus einer konvektiven Stromdichte $\rho\,e\vec{v}$, einer durch Wärmeleitung, Diffusion und Konzentrationsgradienten hervorgerufenen Stromdichte $\vec{j}_e$ sowie einer durch Druck- und Reibungskräfte induzierten Stromdichte $\overline{\overline{p}}\vec{v}$.

Wegen des Austauschs von Energie zwischen der Gasphase und der flüssigen Phase muß zusätzlich der Produktionsterm q_e mit in die Energieerhaltungsgleichung aufgenommen werden. Weiterhin ist ein Strahlungsterm q_r zu formulieren, sofern Strahlung als Fernwirkung auftritt.

Setzt man die Bestandteile der Energieerhaltungsgleichung entsprechend Gl. (II.1.4) zusammen, erhält man

$$\frac{\partial\,(\rho\,e)}{\partial\,t} + \mathrm{div}(\rho\,e\vec{v} + \vec{j}_e) + \mathrm{div}(\overline{\overline{p}}\vec{v}) = q_e + q_\mathrm{r}\,. \qquad \text{(II.1.14)}$$

Mit Hilfe der Definition für die spezifische Gesamtenergie e wird jetzt eine Erhaltungsgleichung für die spezifische innere Energie hergeleitet. Die spezifische Gesamtenergie ist

[1] Mit dem Zeichen für das dyadische Produkt $\otimes$ werden zwei Vektoren miteinander verknüpft; das Ergebnis ist ein Tensor.

die Summe aus der spezifischen kinetischen Energie $\frac{1}{2}|\vec{v}|^2$, dem Schwerepotential G und der spezifischen inneren Energie u_{in} [20]:

$$e = \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + G + u_{\mathrm{in}}\,. \tag{II.1.15}$$

Das Schwerepotential G ist mit der Erdbeschleunigung $\vec{g}$ über die Beziehung $\vec{g} = -\mathrm{grad}\,G$ verknüpft. Nach Einsetzen der Definition für die spezifische Gesamtenergie, Gl. (II.1.15), in die Energiegleichung (II.1.14) und unter Verwendung der Kontinuitäts- und Impulsgleichung erhält man mit der Beziehung

$$\rho\, h = \rho\, u_{\mathrm{in}} + p \tag{II.1.16}$$

eine Erhaltungsgleichung für die spezifische Enthalpie h [22, 23]

$$\begin{aligned}\frac{\partial\,(\rho\, h)}{\partial\, t} - \frac{\partial\, p}{\partial\, t} + \mathrm{div}\left(\rho\, h\vec{v} + \vec{j}_e\right) + \overline{\overline{p}} : \mathrm{grad}\,\vec{v} - \mathrm{div}(p\vec{v}) = \\ (\frac{1}{2}|\vec{v}|^2 - G)q_m - \vec{v}\cdot\vec{q}_p + q_e + q_{\mathrm{r}}\,.\end{aligned} \tag{II.1.17}$$

II.1.6 Schließung des Erhaltungsgleichungssystems

Die Erhaltungsgleichungen für die Gesamtmasse, die Masse der chemischen Spezies, den Impuls und die Energie werden durch das ideale Gasgesetz geschlossen. Es erlaubt die Berechnung der Dichte eines Gases in Abhängigkeit von Druck und Temperatur:

$$\rho = \frac{p\overline{W}}{RT}\,. \tag{II.1.18}$$

R ist die allgemeine Gaskonstante.

Bei den Bedingungen in dieser Arbeit mit Drücken bis 3 MPa sind Realgaseffekte sehr klein [25, 26] und werden vernachlässigt. Deshalb ist die Verwendung des idealen Gasgesetzes zur Schließung des Gleichungssystems ausreichend genau.

II.2 Transportprozesse in der Gasphase

II.2.1 Massentransport

Die molekulare Diffusion ist ein Transport von Masse aufgrund eines Konzentrationsgradienten, der empirisch mit Hilfe des ersten Fickschen Gesetzes beschrieben wird [23, 24]

$$\vec{j}_{\mathrm{i}} = -\frac{\rho\, D_{\mathrm{i}}}{\overline{W}}\mathrm{grad}\left(Y_{\mathrm{i}}\overline{W}\right), \tag{II.2.1}$$

wobei D_i der mittlere Diffusionskoeffizient der Spezies i in die Mischung ist. Die molare Masse der Mischung $\overline{W}$ ist gegeben durch

$$\overline{W} = \left(\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} \frac{Y_\mathrm{i}}{W_\mathrm{i}} \right)^{-1} . \tag{II.2.2}$$

Dabei ist K die Anzahl der Komponenten im System und W_i die molare Masse der Spezies i. Ändert sich die molare Masse der Mischung im Strömungsfeld nur unwesentlich, so gilt für Gl. (II.2.1) die im turbulenten Teil dieser Arbeit benutzte Näherung

$$\vec{j}_\mathrm{i} = -\rho\, D_\mathrm{i}\, \mathrm{grad} Y_\mathrm{i} . \tag{II.2.3}$$

Der Transport chemischer Spezies durch Thermodiffusion entsteht aufgrund von Temperaturgradienten [20]. Dieser physikalische Vorgang wird auch Soret-Effekt genannt. Er ist nur für leichte Komponenten wie atomaren oder molekularen Wasserstoff von Bedeutung. Die Stromdichte durch Thermodiffusion ergibt sich in Abhängigkeit von dem Thermodiffusionskoeffizienten D_i^T zu [23, 24]

$$\vec{j}_\mathrm{i}^\mathrm{T} = -\frac{D_\mathrm{i}^\mathrm{T}}{T} \mathrm{grad} T . \tag{II.2.4}$$

Druckdiffusion aufgrund von Druckgradienten ist bei Verbrennungsprozessen in der Regel vernachlässigbar.

Aus der Addition der durch die Dichte dividierten Diffusions-Massenflüsse $\vec{j}_\mathrm{i}$ und $\vec{j}_\mathrm{i}^\mathrm{T}$ resultiert die Diffusionsgeschwindigkeit:

$$\vec{V}_\mathrm{i} = -\frac{D_\mathrm{i}}{\overline{W}} \mathrm{grad} \left(Y_\mathrm{i} \overline{W} \right) - \frac{D_\mathrm{i}^\mathrm{T}}{\rho\, T} \mathrm{grad} T . \tag{II.2.5}$$

Die vorstehende Gleichung ist eine von Hirschfelder *et al.* angegebene Näherung [24].

II.2.2 Impulstransport

Eine empirisch gewonnene Gleichung für den Impulstransport stellt den Zusammenhang zwischen dem Spannungszustand und dem Verformungszustand eines Volumenelementes her. Der Spannungszustand ist durch die angreifenden Oberflächenkräfte, die von dem Verformungszustand abhängen, bestimmt. Sofern Relaxation in der Strömung vernachlässigt wird, ist die dynamische Viskosität μ die einzige Transportgröße.

Unter der Annahme, daß es sich bei dem strömenden Medium um ein Newtonsches Fluid handelt (diese Annahme erfüllen alle Gase und auch viele Flüssigkeiten, wie beispielsweise Wasser), wird der Spannungszustand durch den Drucktensor

$$\overline{\overline{p}} = p \overline{\overline{E}} + \overline{\overline{\Pi}} \tag{II.2.6}$$

beschrieben. In Gl. (II.2.6) ist p der statische Druck und $\overline{\overline{E}}$ die Einheitsmatrix. Das Produkt $p\overline{\overline{E}}$ bildet den hydrostatischen Anteil und $\overline{\overline{\Pi}}$ den viskosen Anteil des Drucktensors. Der viskose Anteil ist nach dem Newtonschen Schubspannungsgesetz proportional zu dem Geschwindigkeitsgradienten und unter Benutzung der Stokesschen Hypothese (vergl. [21]) gegeben als

$$\overline{\overline{\Pi}} = -\mu\left[(\mathrm{grad}\vec{v}) + (\mathrm{grad}\vec{v})^{\mathrm{T}}\right] + \frac{2}{3}\mu(\mathrm{div}\vec{v})\overline{\overline{E}}\,. \tag{II.2.7}$$

Der erste Term dieser Gleichung, der Deformationstensor, beinhaltet die Verformungsgeschwindigkeiten.

II.2.3 Energietransport

Die Energiestromdichte $\vec{j}_e$ in der Energieerhaltungsgleichung spaltet sich auf in eine Stromdichte durch Wärmeleitung $\vec{j}_e^{\,\mathrm{c}}$, eine Stromdichte durch Diffusion $\vec{j}_e^{\,\mathrm{d}}$ und eine Stromdichte aufgrund von Konzentrationsgradienten $\vec{j}_e^{\,\mathrm{D}}$ (Dufour-Effekt). Letztere kann bei Verbrennungsprozessen vernachlässigt werden.

Die Energiestromdichte durch Wärmeleitung $\vec{j}_e^{\,\mathrm{c}}$ ist nach Fourier auf folgende Weise mit dem Temperaturfeld verbunden [23, 24]:

$$\vec{j}_e^{\,\mathrm{c}} = -\lambda\,\mathrm{grad}\,T\ , \tag{II.2.8}$$

dabei ist λ die Wärmeleitfähigkeit.

Die Energiestromdichte durch Diffusion $\vec{j}_e^{\,\mathrm{d}}$ ist durch den Ausdruck

$$\vec{j}_e^{\,\mathrm{d}} = \rho\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} h_{\mathrm{i}}\vec{V}_{\mathrm{i}} \tag{II.2.9}$$

gegeben. Dabei ist $\vec{V}_{\mathrm{i}}$ die in Gl. (II.2.5) angegebene Diffusionsgeschwindigkeit.

II.3 Das chemische Reaktionsmodell

Die molare Bildungsgeschwindigkeit $\dot{\omega}$ in dem chemischen Produktionsterm (II.1.8) der Bilanzen für die Massenanteile der chemischen Spezies ergibt sich aus der Beziehung

$$\dot{\omega} = \sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{N}} \left(\nu''_{\mathrm{ij}} - \nu'_{\mathrm{ij}}\right)\dot{\omega}_{\mathrm{j}}\ , \tag{II.3.1}$$

in der N die Anzahl der Reaktionen ist (siehe z.B. [8]). ν'_{ij} und ν''_{ij} sind die stöchiometrischen Koeffizienten auf der Edukt- bzw. Produktseite einer wie folgt allgemein

formulierten chemischen Reaktion j:

$$\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} \nu'_{\mathrm{ij}} \mathcal{A}_{\mathrm{i}} \rightleftharpoons \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} \nu''_{\mathrm{ij}} \mathcal{A}_{\mathrm{i}} \,. \tag{II.3.2}$$

Hier sind $\mathcal{A}_{\mathrm{i}}$ Stoffsymbole, und das Zeichen $\rightleftharpoons$kennzeichnet reversible Reaktionen. Die Reaktionsgeschwindigkeit $\dot{\omega}_{\mathrm{j}}$ wird mit der Arrhenius-Gleichung für den Geschwindigkeitskoeffizienten $k_{\mathrm{j}} = A_{\mathrm{j}} T^{b_{\mathrm{j}}} e^{-E_{\mathrm{j}}/(RT)}$ (z.B. [20]) bestimmt:

$$\dot{\omega}_{\mathrm{j}} = k_{\mathrm{j}} \prod_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} \left(\frac{Y_{\mathrm{i}} p \overline{W}}{RT\, W_{\mathrm{i}}} \right)^{\nu_{\mathrm{ij}}} \,. \tag{II.3.3}$$

In der Arrhenius-Gleichung ist A_{j} der präexponentielle Faktor, b_{j} der Temperaturexponent und E_{j} die Aktivierungsenergie der chemischen Reaktion j.

In Tabelle (II.3.1) ist der detaillierte Reaktionsmechanismus für das Wasserstoff/Sauerstoff-System [20] zusammengefaßt, der für Gasflammen bis zu 100 MPa verifiziert wurde [25, 26]. Er enthält 38 Reaktionsgleichungen mit den 8 Spezies O, H, OH, HO_2, H_2O_2, H_2O, O_2 und H_2.

II.4 Beschreibung der flüssigen Phase

Zwischen der flüssigen Phase und der Gasphase werden aufgrund der Verdampfung einzelner Tröpfchen bzw. eventuell auch durch Kondensation von Gasphase an der Tröpfchenoberfläche Masse, Impuls und Energie ausgetauscht. Die Kopplung beider Phasen erfolgt durch Quellterme in den Erhaltungsgleichungen der Gasphase. In die Verdampfungs-Quellterme gehen die Verdampfungsgeschwindigkeit $\dot{m}$ und die für einen Phasenwechsel benötigte Energie $\dot{q}$ ein. Diese beiden Größen müssen mit Hilfe eines Verdampfungsmodells bestimmt werden.

II.4.1 Das Zwei-Film-Modell für die Tröpfchenverdampfung

Abramzon und Sirignano [9, 10, 11] entwickelten ein Modell für einzelne Brennstofftröpfchen, die bei einem Druck von bis zu 1 MPa in einer konvektiven Umgebung verdampfen. Die sogenannte Filmtheorie wird herangezogen, um im Modell den Einfluß von Konvektion, hervorgerufen durch die relative Tröpfchenbewegung im Gasstrom, zu berücksichtigen. Es wird angenommen, daß das Tröpfchen von einem Film oder auch Grenzschicht genannt, umgeben ist, durch den der Widerstand bei dem Austausch von Masse und Energie mit der Gasphase modelliert wird, siehe Abb. (II.4.1). Die Filmdicken δ_{M0} und δ_{T0} werden für den diffusiven und thermischen Austausch wie folgt berechnet:

$$\delta_{\mathrm{M0}} = \frac{2\,R}{Sh_0 - 2}, \qquad \delta_{\mathrm{T0}} = \frac{2\,R}{Nu_0 - 2}\,. \tag{II.4.1}$$

										A	b	E
**********												
** 1. H_2/O_2 Reaktionen (ohne HO_2 und H_2O_2) **										A	b	E
**********										(cm,mol,s)	(-)	(kJ/mol)
O_2	+	H	$\rightleftharpoons$	OH	+	O				2.00E+14	0.00	70.30
H_2	+	O	$\rightleftharpoons$	OH	+	H				5.06E+04	2.67	26.30
H_2	+	OH	$\rightleftharpoons$	H_2O	+	H				1.00E+08	1.60	13.80
OH	+	OH	$\rightleftharpoons$	H_2O	+	O				1.50E+09	1.14	0.42
**********												
** 2. Rekombinationsreaktionen **********												
**********												
H	+	H	+	M'	$\rightleftharpoons$	H_2	+	M'		1.80E+18	-1.00	0.00
H	+	OH	+	M'	$\rightleftharpoons$	H_2O	+	M'		2.20E+22	-2.00	0.00
O	+	O	+	M'	$\rightleftharpoons$	O_2	+	M'		2.90E+17	-1.00	0.00
**********												
** 3. HO_2-Bildung und -Verbrauch **********												
**********												
H	+	O_2	+	M'	$\rightleftharpoons$	HO_2	+	M'		2.30E+18	-0.80	0.00
HO_2	+	H			$\rightleftharpoons$	OH	+	OH		1.50E+14	0.00	4.20
HO_2	+	H			$\rightleftharpoons$	H_2	+	O_2		2.50E+13	0.00	2.90
HO_2	+	H			$\rightleftharpoons$	H_2O	+	O		3.00E+13	0.00	7.20
HO_2	+	O			$\rightleftharpoons$	OH	+	O_2		1.80E+13	0.00	-1.70
HO_2	+	OH			$\rightleftharpoons$	H_2O	+	O_2		6.00E+13	0.00	0.00
**********												
** 4. H_2O_2-Bildung und -Verbrauch **********												
**********												
HO_2	+	HO_2			$\rightleftharpoons$	H_2O_2	+	O_2		2.50E+11	0.00	-5.20
OH	+	OH	+	M'	$\rightleftharpoons$	H_2O_2	+	M'		3.25E+22	-2.00	0.00
H_2O_2	+	H			$\rightleftharpoons$	H_2	+	HO_2		1.70E+12	0.00	15.70
H_2O_2	+	H			$\rightleftharpoons$	H_2O	+	OH		1.00E+13	0.00	15.00
H_2O_2	+	O			$\rightleftharpoons$	OH	+	HO_2		2.80E+13	0.00	26.80
H_2O_2	+	OH			$\rightleftharpoons$	H_2O	+	HO_2		5.40E+12	0.00	4.20

Tabelle II.3.1: Detaillierter Reaktionsmechanismus für das Wasserstoff/Sauerstoff-System [20]. M' ist ein Stoßpartner in trimolekularen Reaktionen.

Dabei ist R der Tröpfchenradius. Die Sherwood-Zahl Sh_0 beschreibt das Verhältnis von Stoffübergangs- zu Diffusionsstrom. Die Nusselt-Zahl Nu_0 hingegen gibt das Verhältnis von Wärmeübergangs- zu Wärmeleitstrom an. Der Index '0' wird verwendet, wenn der Massenfluß der verdampfenden Komponente, der sogenannte Stefan-Fluß, unberücksichtigt bleibt. Mit zunehmender Konvektion werden Sherwood- und Nusselt-Zahl größer,

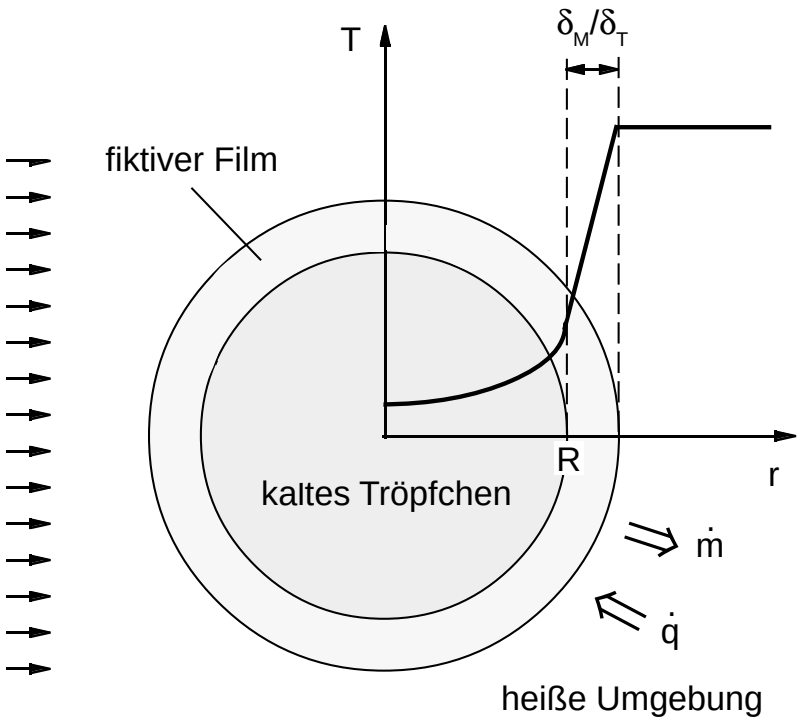

Abbildung II.4.1: Darstellung eines in heißer, konvektiver Umgebung verdampfenden Tröpfchens, das von einem fiktiven Film umgeben ist.

so daß die Filmdicken und damit auch der Widerstand der Filme, der den Stoff- und Wärmeübergang einschränkt, abnehmen. Clift *et al.* [27] empfehlen folgende Korrellationen für die Berechnung von Sh_0 und Nu_0:

$$Sh_0 = 1 + (1 + Re\,Sc)^{\frac{1}{3}} f(Re) \tag{II.4.2}$$

$$Nu_0 = 1 + (1 + Re\,Pr)^{\frac{1}{3}} f(Re)\,. \tag{II.4.3}$$

Dabei ist die Funktion der Tröpfchen-Reynolds-Zahl gegeben durch

$$f(Re) = \max(1, Re^{0,077}) \qquad \text{mit} \tag{II.4.4}$$

$$Re = \frac{2R\rho\,|\Delta\vec{v}|}{\mu_{g,f}}. \tag{II.4.5}$$

Für die Berechnung der Tröpfchen-Reynolds-Zahl wird also die Dichte des umgebenden Gases und die dynamische Viskosität im Film verwendet.

Tritt keine Relativgeschwindigkeit zwischen Tröpfchen und umgebendem Gas auf ($\Delta\vec{v} = 0$), ist die Reynolds-Zahl gleich Null und Sh_0 und Nu_0 nehmen den Wert Zwei für eine ruhende Kugel an. Die Verdampfung führt zu einer Aufweitung der umgebenden laminaren Grenzschicht [21]. Deshalb werden die Sherwood-Zahl und die Nusselt-Zahl wie folgt korrigiert:

$$\widetilde{Sh} = 2 + (Sh_0 - 2)/\,F_{\mathrm{M}}, \qquad \widetilde{Nu} = 2 + (Nu_0 - 2)/\,F_{\mathrm{T}}\,. \tag{II.4.6}$$

Die Korrekturfaktoren F_M und F_T geben die relative Änderung der Filmdicke durch den Stefan-Fluß an:

$$F_\mathrm{M} = \frac{\delta_\mathrm{M}}{\delta_\mathrm{M0}}, \qquad F_\mathrm{T} = \frac{\delta_\mathrm{T}}{\delta_\mathrm{T0}}. \tag{II.4.7}$$

Anhand eines Modellproblems [10] wurde eine universelle Funktion $F(B)$ ermittelt, die durch Einsetzen der Spalding-Stoffüberganszahl B_M bzw. der Wärmeübergangszahl B_T die Korrekturfaktoren $F_\mathrm{M} = F(B_\mathrm{M})$ und $F_\mathrm{T} = F(B_\mathrm{T})$ liefert:

$$F(B) = (1+B)^{0,7}\frac{\ln(1+B)}{B}. \tag{II.4.8}$$

Die Spalding-Transferzahlen B_M und B_T werden aus zwei Bilanzen, einer Massen- und einer Energiebilanz erhalten, die jeweils von R (der Tröpfchenoberfläche) bis unendlich integriert werden, siehe [28]. Die Transferzahlen sind Funktionen des Konzentrationsgefälles der verdampfenden Komponente bzw. des Temperaturgefälles zwischen Tröpfchenoberfläche und Gasphase.

An dieser Stelle muß beachtet werden, daß die verdampfende Komponente bei der Problemstellung dieser Arbeit flüssiger Sauerstoff ist und der Brennstoff Wasserstoff gasförmig vorliegt. Bei konventionellen technischen Anwendungen wie etwa bei Verbrennungsmotoren oder Gasturbinen-Brennkammern wird hingegen umgekehrt flüssiger Kraftstoff in Oxidationsmittel Luft eingedüst. Die Transferzahlen werden in der vorliegenden Arbeit deshalb in Abhängigkeit vom Massenbruch des Sauerstoffs an der Tröpfchenoberfläche $Y_{\mathrm{O_2,s}}$ und in der Umgebung $Y_{\mathrm{O_2}}$ bzw. in Abhängigkeit von der spezifischen Wärmekapazität von Sauerstoff im Film $c_{p,\mathrm{O_2,f}}$ und der Verdampfungsenthalpie von Sauerstoff $L_{\mathrm{v,O_2}}(T_\mathrm{s})$ bei der Oberflächentemperatur des Tröpfchens T_s formuliert:

$$B_\mathrm{M} = \frac{Y_{\mathrm{O_2,s}} - Y_{\mathrm{O_2}}}{1 - Y_{\mathrm{O_2,s}}}, \qquad B_\mathrm{T} = \frac{c_{p,\mathrm{O_2,f}}(T - T_\mathrm{s})}{L_{\mathrm{v,O_2}}(T_\mathrm{s}) + \dot{q}/\dot{m}}. \tag{II.4.9}$$

Bei niedrigem Druck kann in Gl. (II.4.9) die latente Verdampfungswärme von Sauerstoff eingesetzt werden, welche die Enthalpie ist, die aufgewendet werden muß, um gesättigten flüssigen Sauerstoff in seinem eigenen Dampf ohne Anwesenheit weiterer Komponenten bei Siedetemperatur (und entsprechendem Siededruck) zu verdampfen [30].

Die Verdampfungsenthalpie von Sauerstoff in einer Gleichgewichtszusammensetzung mit Wasserstoff ist im Gegensatz zur latenten Verdampfungswärme von reinem Sauerstoff nicht nur von der Temperatur sondern auch stark vom Druck abhängig (siehe z.B. [31]). Bei überkritischem Druck und Annäherung an die kritische Mischungstemperatur geht die Verdampfungsenthalpie gegen Null (siehe auch Abb. (II.5.5)). Eine thermodynamische Gleichung von $L_{\mathrm{v,O_2}}$ für das Wasserstoff/Sauerstoff-System wird in Kapitel (II.5.3) eingeführt.

Wenn thermodynamisches Gleichgewicht an der Tröpfchenoberfläche zwischen flüssigem und gasförmigem Sauerstoff angenommen wird und der Druck kleiner dem kritischem Druck ist, kann der Sauerstoff-Molenbruch $X_{\mathrm{O_2,s}}$ mit dem Raoult'schen Gesetz bestimmt

werden:

$$X_{\mathrm{O_2,s}} = \frac{p_{\mathrm{s}}(T_{\mathrm{s}})}{p}. \tag{II.4.10}$$

Hier bezeichnet $p_{\mathrm{s}}(T_{\mathrm{s}})$ den Dampfdruck von Sauerstoff in Abhängigkeit von der Temperatur an der Tröpfchenoberfläche.

Bei hohem Druck löst sich Gas aus der Umgebung in der Flüssigkeit. Im Raoult'schen Gesetz muß in diesem Fall der Dampfdruck von Sauerstoff durch den Partialdruck von Sauerstoff in der Mischung der flüssigen Phase ersetzt werden. Wird thermodynamisches Gleichgewicht zwischen binären H_2/O_2-Gemischen auf der Flüssigkeits- und Gasseite der Tröpfchenoberfläche angenommen, läßt sich die Gemischzusammensetzung auf beiden Seiten der Tröpfchenoberfläche in Abhängigkeit von Druck und Temperatur berechnen. Auch darauf wird in dem Kapitel über das thermodynamische Gleichgewicht binärer Systeme, Kapitel (II.5.3), näher eingegangen.

Ist der Molenbruch $X_{\mathrm{O_2,s}}$ bekannt, erhält man den Massenbruch $Y_{\mathrm{O_2,s}}$ aus der Beziehung

$$Y_{\mathrm{O_2,s}} = \frac{X_{\mathrm{O_2,s}} W_{\mathrm{O_2}}}{X_{\mathrm{O_2,s}} W_{\mathrm{O_2}} + (1 - X_{\mathrm{O_2,s}}) W_{\mathrm{H_2}}}. \tag{II.4.11}$$

Eine Massenbilanz um das Tröpfchen liefert eine Gleichung für den verdampften Massenstrom $\dot{m}$

$$\dot{m} = 2\pi \rho_{\mathrm{f}} D_{\mathrm{f}} R \widetilde{Sh} \ln(1 + B_{\mathrm{M}}). \tag{II.4.12}$$

Diese Gleichung läßt sich mit Hilfe einer Energiebilanz auch umformen zu:

$$\dot{m} = 2\pi \frac{\lambda_{\mathrm{f}}}{c_{p,\mathrm{O_2,f}}} R \widetilde{Nu} \ln(1 + B_{\mathrm{T}}). \tag{II.4.13}$$

Setzt man die Gln. (II.4.12) und (II.4.13) gleich, dann erhält man eine weitere Beziehung für B_{T}:

$$B_{\mathrm{T}} = (1 + B_{\mathrm{M}})^{\Phi} - 1 \tag{II.4.14}$$

mit

$$\Phi = \frac{1}{Le_{\mathrm{f}}} \frac{c_{p,\mathrm{O_2,f}}}{c_{p,\mathrm{f}}} \frac{\widetilde{Sh}}{\widetilde{Nu}} \tag{II.4.15}$$

und

$$Le_{\mathrm{f}} = \left(\frac{Sc}{Pr}\right)_{\mathrm{f}} = \frac{\lambda_{\mathrm{f}}}{c_{p,\mathrm{f}} \rho_{\mathrm{f}} D_{\mathrm{f}}}. \tag{II.4.16}$$

Die Lewis-Zahl Le_{f} ist allein von den Eigenschaften im Film abhängig. Dort werden die sich von der Tröpfchenoberfläche über die Filmdicke hin änderenden Stoff- und Transportdaten mit einer mittleren Filmtemperatur T_{f} und mittleren Massenbrüchen im Film $Y_{\mathrm{i,f}}$ unter Anwendung der sogenannten „1/3-Regel“ bestimmt [11, 32]:

$$T_{\mathrm{f}} = T_{\mathrm{s}} + \frac{1}{3}(T - T_{\mathrm{s}}) \tag{II.4.17}$$

$$Y_{\mathrm{i,f}} = Y_{\mathrm{i,s}} + \frac{1}{3}(Y_{\mathrm{i}} - Y_{\mathrm{i,s}})\,. \tag{II.4.18}$$

In Untersuchungen von Hubbard *et al.* [32] hat sich der in dieser Arbeit verwendete Wert 1/ 3 als am günstigsten erwiesen. Dies ist ein rein empirisch ermittelter Wert, der keine physikalische Bedeutung hat.

Die Abnahme der Tröpfchenmasse läßt sich auch durch folgende Gleichung beschreiben:

$$\dot{m} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{4}{3}\pi R^3 \rho_{\,\mathrm{l}}\right). \tag{II.4.19}$$

Setzt man die Gln. (II.4.12,II.4.19) gleich, erhält man einen Ausdruck für den sich mit der Zeit ändernden Tröpfchenradius:

$$\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}t} = -\frac{\rho_{\,\mathrm{f}} D_{\mathrm{f}}}{2\,\rho_{\,\mathrm{l}} R}\widetilde{Sh}\,\ln(1 + B_{\mathrm{M}})\,. \tag{II.4.20}$$

Eine Energiebilanz liefert schließlich eine Gleichung für den Energiefluß $\dot{q}$, der auf das Tröpfchen einwirkt und dieses aufheizt. Der Energiefluß $\dot{q}$ berechnet sich zu [10]

$$\dot{q} = \dot{m}\left(\frac{c_{p,\mathrm{f}}(T - T_{\mathrm{s}})}{B_{\mathrm{T}}} - L_{\mathrm{v,O_2}}(T_{\mathrm{s}})\right). \tag{II.4.21}$$

Die Änderung des Tröpfchenradius mit der Zeit läßt sich nach Lösung von Gl. (II.4.12) durch eine Massenbilanz um das Tröpfchen berechnen (vergl. Gl.(II.4.19)):

$$\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}t} = -\frac{\dot{m}}{4\pi\rho_{\,l} R^2}\,. \tag{II.4.22}$$

Es wird hier davon ausgegangen, daß die Dichte des flüssigen Sauerstoffs räumlich und zeitlich konstant ist. Das heißt eine thermische Expansion des Tröpfchens durch Aufheizung wird in Gl. (II.4.22) nicht mit berücksichtigt. Die thermische Ausdehnung des Tropfens kann insbesondere zu Beginn der Verdampfung, in der instationären Phase, Einfluß auf die Lebensdauer des Tröpfchens nehmen. Die folgende, in dieser Arbeit jedoch nicht berücksichtigte Gleichung erfaßt diesen physikalischen Vorgang [28]:

$$\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}t} = -\frac{\dot{m}}{4\pi\rho_{\,\mathrm{l}} R^2} - \frac{1}{\rho_{\,\mathrm{l}} R^2}\int_0^R \frac{\partial\,\rho_{\,\mathrm{l}}}{\partial\,t} r^2 \mathrm{d}r\,. \tag{II.4.23}$$

Der Stoff- und Energieaustausch zwischen Tröpfchen und umgebendem Gas ist nun ausreichend beschrieben. Die Oberflächentemperatur des Tropfens und die Molmassen beider Komponenten sind gegeben. Der Druck kann aufgrund kleiner Mach-Zahlen im Strömungsfeld als konstant angenommen werden. Damit können über die Gln. (II.4.10, II.4.11) der Massenbruch von Sauerstoff an der Phasengrenze sowie mit Gl. (II.4.9) die Spalding-Massentransferzahl B_{M} bestimmt werden. Daraufhin werden mit der „1/3-Regel“, Gln. (II.4.17,II.4.18), die Temperatur im Film und die dort vorliegende Zusammensetzung der Komponenten ermittelt, so daß Stoff- und Transportdaten für die

Mischung im Film, und damit auch die Lewis-Zahl nach Gl. (II.4.16) und die Reynolds-Zahl nach Gl. (II.4.5) bestimmbar sind. Die Wärmeübergangszahl B_T wird iterativ ermittelt, da die Größe Φ in Gl. (II.4.15) über die korrigierte Nusselt-Zahl $\widetilde{Nu}$ von B_T selbst abhängt (siehe Gl. (II.4.7)). Nach der Ermittlung der Transferzahlen B_M und B_T können mit den Gln. (II.4.2) bis (II.4.8) die korrigierte Sherwood- und Nusselt-Zahl berechnet werden. Nun sind alle Größen für die Bestimmung des Massenstroms $\dot{m}$ und des Energieflusses $\dot{q}$ bekannt.

II.4.2 Tröpfchenaufheizung

Die Aufheizung des Tröpfchens hat über die sich zeitlich ändernde Oberflächentemperatur T_s Einfluß auf den Verdampfungsprozeß. Drei verschiedene Modellannahmen für den Energietransport im Tropfen sind denkbar.

Wenn die Zeitskala für den Phasenübergang sehr viel kürzer ist als die Zeitskala für den Transport von Energie in das Tropfeninnere durch Wärmeleitung, kann der Aufheizungsvorgang vernachlässigt werden. In diesem Fall ändert sich die Temperatur im Tröpfchen nicht; lediglich ein dünner Film an der Tröpfchenoberfläche heizt sich auf und erreicht die sogenannte *wet bulb* Temperatur. Bei Erreichen dieses Gleichgewichtszustandes wird die zur Tröpfchenoberfläche transportierte Energie allein für die Verdampfung, nicht für die Tröpfchenaufheizung genutzt [33]. Die Tröpfchenoberfläche nimmt linear mit der Zeit ab; ein Verhalten, das als D^2-Gesetz bekannt ist und experimentell beobachtet werden kann. Dieses Modell wird in der Literatur als *Thin Skin Model* (TS) bezeichnet [29].

Die dazu konträre Annahme ist, daß die Zeitskala für den Phasenübergang sehr viel größer ist als die Zeitskala für den Energietransport. Diese Annahme ist bei einer unendlichen Wärmeleitfähigkeit der Flüssigkeit erfüllt. Wiederum stellt sich ein uniformes Temperaturprofil ein, das sich jedoch mit der Zeit ändert. Das Modell wird deshalb *Uniform Temperature Model* (UT) oder auch *Rapid Mixing Model* genannt.

Das realistischste Modell ist das sogenannte *Conduction Limit Model* (CL), bei dem der radiale Energietransport ins Tröpfcheninnere berücksichtigt wird. Die Temperatur im Tröpfchen wird in Abhängigkeit von Raum und Zeit durch Lösen der Energiegleichung berechnet. Der numerische Aufwand nimmt durch das Lösen dieser zusätzlichen partiellen Differentialgleichung stark zu.

In Abb. (II.4.2) sind die verschiedenen Modellannahmen und die daraus resultierenden, sich zeitlich ändernden Temperaturprofile im Tröpfcheninneren noch einmal einander gegenübergestellt. Im Falle des TS-Modells wird kein Energietransport in das Tropfeninnere berücksichtigt. Der Aufwand für die Berechnung des Verdampfungsprozesses ist daher minimal. Bei dem UT-Modell wird eine Gesamt-Energiebilanz für das Tröpfchen aufgestellt, die die Berechnung der Temperaturänderung $\mathrm{d}T_\mathrm{l}$ erlaubt:

$$\dot{q} = m_\mathrm{l} c_{p,\mathrm{l}} \frac{\mathrm{d}T_\mathrm{l}}{\mathrm{d}t}\,. \tag{II.4.24}$$

Komplizierter wird es im Falle des CL-Modells. Es muß eine partielle Differentialgleichung für den radialen Energietransport gelöst werden, so daß $T_\mathrm{l} = f(r,t)$ berechnet werden kann. Berücksichtigt man eine sich lokal mit der Zeit ändernde Wärmeleitfähigkeit im Tropfen, lautet die Energieerhaltungsgleichung [29]

$$\frac{\partial T_\mathrm{l}}{\partial t} = \alpha_\mathrm{l}\left(\frac{\partial^2 T_\mathrm{l}}{\partial r^2} + \left(\frac{2}{r} + \frac{1}{\lambda_\mathrm{l}}\frac{\partial \lambda_\mathrm{l}}{\partial r}\right)\frac{\partial T_\mathrm{l}}{\partial r}\right) . \tag{II.4.25}$$

Diese Gleichung vereinfacht sich, wenn – wie bei den Berechnungen der laminaren Sprayflammen in dieser Arbeit – eine konstante Wärmeleitfähigkeit im Tröpfchen angenommen wird:

$$\frac{\partial T_\mathrm{l}}{\partial t} = \frac{\alpha_\mathrm{l}}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial T_\mathrm{l}}{\partial r}\right) . \tag{II.4.26}$$

Hier ist $\alpha_\mathrm{l} = \lambda_\mathrm{l}/\left(\rho_\mathrm{l} c_{p,\mathrm{l}}\right)$ die thermische Wärmeleitfähigkeit, die in Abhängigkeit vom Druck und der Anfangstemperatur des Tröpfchens bestimmt und als konstant angenommen wird. Zur Lösung dieser Energiegleichung müssen das Temperaturprofil zur Zeit $t = 0$ und zwei Randbedingungen vorgegeben werden:

$$T_\mathrm{l}(t=0) = T_\mathrm{l0} \tag{II.4.27}$$

$$\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=0} = 0 \tag{II.4.28}$$

$$\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=R} = \frac{\dot{q}}{4\pi R^2 \lambda_\mathrm{l,s}} . \tag{II.4.29}$$

Man beachte, daß hierbei jedoch nicht explizit die Änderung des Tröpfchenradius beschrieben wird.

Während das *Thin Skin Model* die Lebensdauer eines Tröpfchens weit unterschätzt, kann mit dem *Uniform Temperature Model* die Lebensdauer schon wesentlich genauer

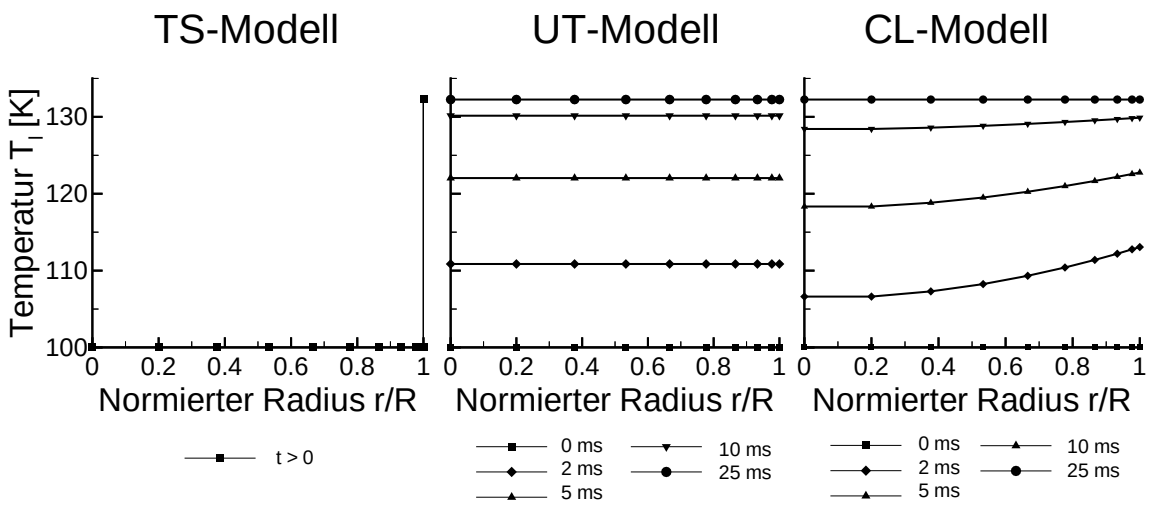

Abbildung II.4.2: Schematische Darstellung der zeitlichen Entwicklung des Temperaturprofils im Tröpfchen für das TS-, UT- und CL-Modell im Vergleich.

berechnet werden. Erwartungsgemäß liefert aber das *Conduction Limit Model* die besten Ergebnisse. Die mit diesem Modell ermittelte Lebensdauer liegt zwischen der mit dem TS- und dem UT-Modell berechneten Lebensdauer. Dies wird in [28, 29] für ein frei fallendes, in Stickstoff verdampfendes Heptantröpfchen gezeigt. In Unterkapitel (III.6.1.2) erfolgt eine Validierung des CL-Modells für Sauerstofftröpfchen in gasförmigem Wasserstoff für den hohen unterkritischen Druckbereich.

II.4.3 Tropfenbewegung

Die Tropfenbewegung wird durch Lösen der Impulsgleichungen in x- und y-Richtung berechnet. In Vektorschreibweise lautet die Impulsgleichung für ein Tröpfchen [34]:

$$\frac{4}{3}\pi R^3 \rho_{\mathrm{l}} \frac{\mathrm{d}\vec{v}_{\mathrm{l}}}{\mathrm{d}t} = \pi R^2 \frac{1}{2} \rho \left(\vec{v} - \vec{v}_{\mathrm{l}}\right) |\vec{v} - \vec{v}_{\mathrm{l}}| C_{\mathrm{D}} + \frac{4}{3}\pi R^3 \rho_{\mathrm{l}} \vec{g} \,. \tag{II.4.30}$$

Die Impulsänderung des Tröpfchens, gegeben durch die linke Seite der Gl.(II.4.30), ist gleich der Summe aller angreifenden Kräfte, welche die Trägheitskraft und die Gravitation sind. Die für die Lösung der Impulsgleichung erforderlichen Randbedingungen lauten:

$$\vec{x}_{\mathrm{l}}(t=0) = \vec{x}_{\mathrm{l},0}, \qquad \vec{v}_{\mathrm{l}}(t=0) = \vec{v}_{\mathrm{l},0} \,. \tag{II.4.31}$$

Das Stokessche Gesetz [27] liefert den Widerstandsbeiwert C_{D} für eine Kugel:

$$C_{\mathrm{D}} = \frac{24}{Re} \,. \tag{II.4.32}$$

Wird die Kugel von Gas umströmt, wird der Widerstandsbeiwert beispielsweise nach Putnams Vorschlag [39] wie folgt korrigiert:

$$C_{\mathrm{D}} = \frac{24}{Re} \left(1 + \frac{Re^{2/3}}{6}\right) \,. \tag{II.4.33}$$

Gleichung (II.4.33) gilt, solange die Tröpfchen-Reynolds-Zahl Re (siehe Gl. (II.4.5)) kleiner als 1000 ist.

II.5 Stoffdaten

II.5.1 Stoffdaten der Gasphase

Bei den Stoffdaten wird zwischen den thermodynamischen Daten und den Transportkoeffizienten unterschieden.

Als thermodynamische Daten werden für jede Spezies i die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck $c_{p,\mathrm{i}}$ sowie die spezifische Enthalpie h_{i} benötigt. Diese Daten

werden mit einem Paket von Polynomen fünften bzw. sechsten Grades in Abhängigkeit der Temperatur berechnet [40]:

$$c_{p,\mathrm{i}} = R \sum_{\mathrm{n}=1}^{5} a_{c_p,\mathrm{i,n}} T^{\,\mathrm{n}-1}\,, \tag{II.5.1}$$

$$h_{\mathrm{i}} = R\,T \sum_{\mathrm{n}=1}^{6} a_{c_p,\mathrm{i,n}} T^{\,\mathrm{n}-1}\,. \tag{II.5.2}$$

Die Koeffizienten $a_{c_p,\mathrm{i,n}}$ werden für zwei Temperaturbereiche, den niedrigen von 300 bis 1000 K und den hohen von 1000 bis 3000 K, vorgegeben.

Weiterhin sind für alle chemischen Komponenten drei temperaturabhängige Transportkoeffizienten bereitzustellen: die spezifische Wärmeleitfähigkeit λ, die dynamische Viskosität μ und die binären Diffusionskoeffizienten $D_{\mathrm{i,j}}$. Letztere sind zusätzlich druckabhängig. In der vorliegenden Arbeit werden diese Transportkoeffizienten mit Polynomen dritten Grades berechnet [40]:

$$\begin{aligned} \ln \lambda_{\mathrm{i}} &= \sum_{\mathrm{n}=1}^{4} a_{\lambda,\mathrm{i,n}} (\ln T)^{\mathrm{n}-1}, \\ \ln \mu_{\mathrm{i}} &= \sum_{\mathrm{n}=1}^{4} a_{\mu,\mathrm{i,n}} (\ln T)^{\mathrm{n}-1}, \\ \ln (p\, D_{\mathrm{i,j}}) &= \sum_{\mathrm{n}=1}^{4} a_{D,\mathrm{i,n}} (\ln T)^{\mathrm{n}-1}\,. \end{aligned} \tag{II.5.3}$$

Die Koeffizienten $a_{\lambda,\mathrm{i,n}}$, $a_{\mu,\mathrm{i,n}}$ und $a_{D,\mathrm{i,n}}$ gelten für den Temperaturbereich von 300 bis 5000 K.

Thermodiffusion wird nur für die leichten Spezies H und H_2 berücksichtigt. Der Thermodiffusionskoeffizient berechnet sich zu [20]

$$D_{\mathrm{i}}^{\mathrm{T}} = \sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{K}} \frac{R_{T^*}(W_{\mathrm{i}} - W_{\mathrm{j}}) X_{\mathrm{i}} X_{\mathrm{j}}}{W_{\mathrm{i}} + W_{\mathrm{j}}}\,. \tag{II.5.4}$$

Dabei ist der Reduktionsfaktor R_{T^*} eine universelle Funktion der reduzierten Temperatur $T^* = (T\,k)/\sqrt{(\epsilon_{\mathrm{i}}\epsilon_{,\mathrm{j}})}$ wobei ϵ_{i} die Tiefe des Lennard-Jones Potentials ist und k die Boltzmannkonstante [20, 41]. Werte für R_{T^*} sind in [24] angegeben. Näherungsweise läßt sich der Reduktionsfaktor durch die Gleichung

$$R_{T^*} = a_{D^{\mathrm{T}},1} + a_{D^{\mathrm{T}},2} T^* + a_{D^{\mathrm{T}},3}\,. \tag{II.5.5}$$

bestimmen. Die Koeffizienten $a_{D^{\mathrm{T}},1}$, $a_{D^{\mathrm{T}},2}$ und $a_{D^{\mathrm{T}},3}$ sind dabei abhängig von der reduzierten Temperatur T^*.

Die Transportkoeffizienten für die Spezies H_2 und O_2, die als einzige Komponenten in Bereichen niedriger Temperaturen unterhalb von 300 K vorhanden sind, weichen bei Annäherung an die jeweilige kritische Temperatur (T_{c,O_2}=154,6 K, T_{c,H_2}=32,3 K) zunehmend von den extrapolierten NASA Polynomen ab und zeigen dort eine starke Druckabhängigkeit. Deshalb werden die Transporteigenschaften von Wasserstoff und Sauerstoff JSME-Tabellen [42] entnommen, die den Temperaturbereich von 80 bis 300 K und den Druckbereich von 0,1 bis 20 MPa abdecken. Die Abbildungen (II.5.1,II.5.2) zeigen die Druck- und Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärmeleitfähigkeit und der dynamischen Viskosität von Sauerstoff.

Zur Berechnung der Stoffeigenschaften einer Gasmischung werden Mischungsregeln benötigt, die in einem Bericht von Kee *et al.*[40] veröffentlicht sind. Die spezifische Wärmeleitfähigkeit einer Mischung wird danach wie folgt berechnet:

$$\overline{\lambda} = \frac{1}{2}\left[\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} X_{\mathrm{i}}\lambda_{\mathrm{i}} + \left(\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} \frac{X_{\mathrm{i}}}{\lambda_{\mathrm{i}}}\right)^{-1}\right] . \tag{II.5.6}$$

Die dynamische Viskosität einer Mischung wird analog zu Gl. (II.5.6) bestimmt:

$$\overline{\mu} = \frac{1}{2}\left[\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} X_{\mathrm{i}}\mu_{\mathrm{i}} + \left(\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} \frac{X_{\mathrm{i}}}{\mu_{\mathrm{i}}}\right)^{-1}\right] . \tag{II.5.7}$$

Die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck einer Gasmischung ist

$$\overline{c}_p = \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} Y_{\mathrm{i}} c_{p,\mathrm{i}} . \tag{II.5.8}$$

Der Diffusionskoeffizient, der den molekularen Transport einer Spezies in einer Gasmischung beschreibt, wird ebenfalls nach [40] mit der folgenden Mischungsregel berechnet:

$$D_{\mathrm{i}} = \frac{1 - Y_{\mathrm{i}}}{\sum\limits_{\mathrm{j}\neq\mathrm{i}}^{\mathrm{K}} \frac{X_{\mathrm{j}}}{D_{\mathrm{i,j}}}} . \tag{II.5.9}$$

Im Computercode werden zu Beginn eines Programmlaufs die Stoffdaten aller Spezies für den Temperaturbereich von 80 bis 5000 K in 1 K-Schritten mittels der NASA-Polynome berechnet und abgespeichert. Eine Ausnahme bilden die Stoffdaten von Wasserstoff und Sauerstoff in dem Temperaturbereich von der Siedetemperatur der betrachteten Komponente bis 300 K; sie werden in Abhängigkeit des vorgegebenen Drucks den JSME-Tabellen entnommen. Während einer laufenden Rechnung werden alle Stoffdaten zwischen den abgespeicherten temperaturabhängigen Werten linear interpoliert. Durch die Interpolation der Stoffdaten zwischen Tabellenwerten wird die aufwendige Bestimmung mittels Polynomen vermieden und dadurch eine Verkürzung der Berechnungszeit erzielt.

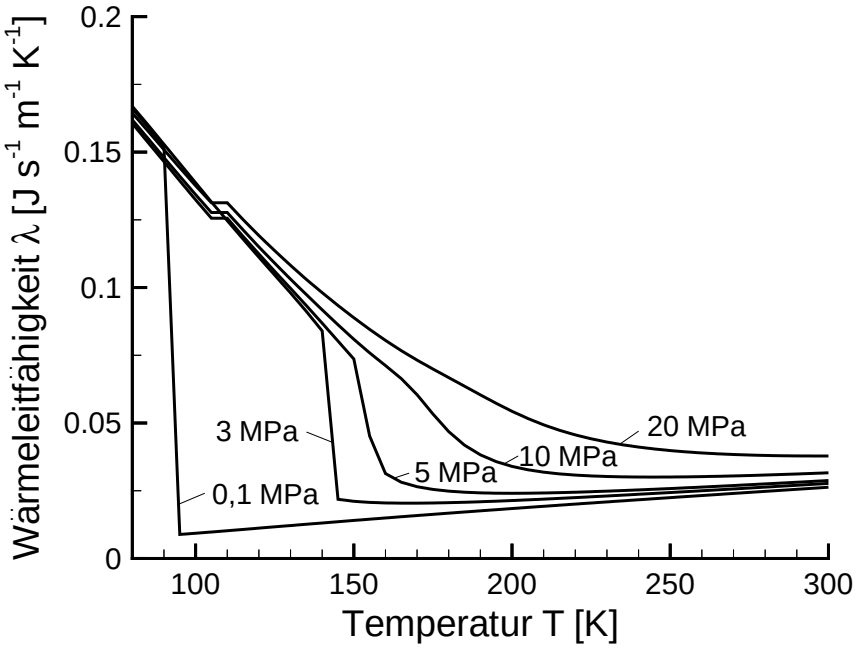

Abbildung II.5.1: Die druck- und temperaturabhängige spezifische Wärmeleitfähigkeit von Sauerstoff in dem Temperaturbereich $80 < T < 300$ K, Daten aus [42].

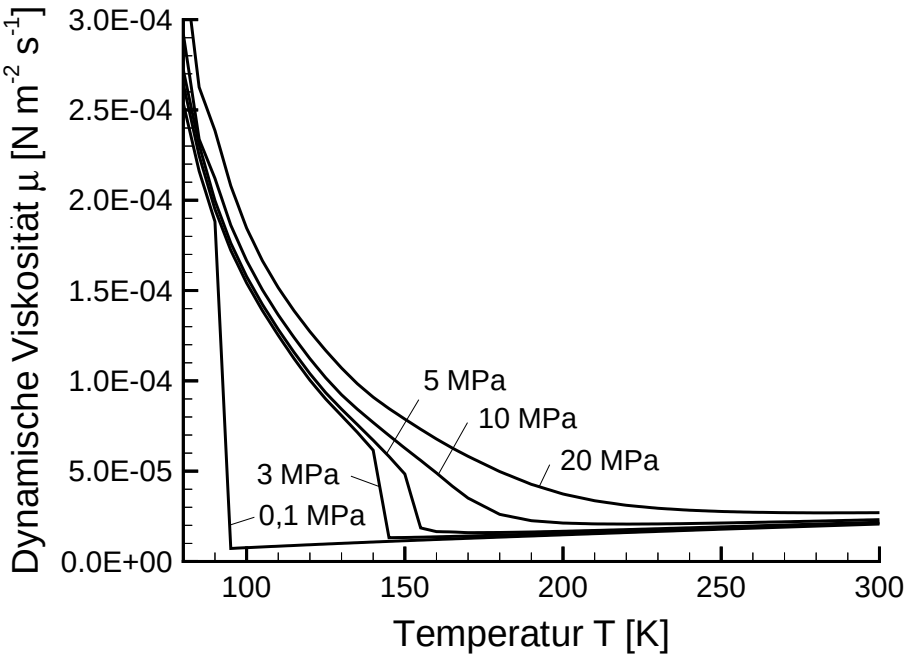

Abbildung II.5.2: Die druck- und temperaturabhängige dynamische Viskosität von Sauerstoff in dem Temperaturbereich $80 < T < 300$ K, Daten aus [42].

II.5.2 Stoffdaten der flüssigen Phase

Da in dieser Arbeit LOX/H_2-Sprayflammen behandelt werden, sind hier insbesondere die Stoffdaten von flüssigem Sauerstoff von Interesse. Diese Daten werden ebenfalls den JSME-Tabellen [42] für den Druckbereich von 0,1 bis 20 MPa und Temperaturen zwischen 80 K und der Siedetemperatur entnommen. Die tabellierten Werte werden wiederum im Code linear interpoliert.

Es wird hier lediglich ein Einkomponenten-Spray betrachtet, bei dem sich kein Gas in den Tröpfchen löst. Deshalb sind keine Mischungsregeln für die flüssige Phase zu berücksichtigen.

II.5.3 Thermodynamisches Gleichgewicht binärer Systeme

Vorraussetzung für thermodynamisches Gleichgewicht binärer Systeme sind nach Prausnitz *et al.* [35] die folgenden Beziehungen für die Temperatur T, den Druck p und die Fugazitäten f_i beider Komponenten des binären Systems an der Grenzfläche zwischen Flüssigkeit (l) und Gas (g)

$$\begin{aligned} T^{\mathrm{l}} &= T^{\mathrm{g}} \\ p^{\mathrm{l}} &= p^{\mathrm{g}} \\ f^{\mathrm{l}}_{\mathrm{H_2}} &= f^{\mathrm{g}}_{\mathrm{H_2}} \\ f^{\mathrm{l}}_{\mathrm{O_2}} &= f^{\mathrm{g}}_{\mathrm{O_2}} \,. \end{aligned} \tag{II.5.10}$$

Die Fugazität kann als korrigierter Druck interpretiert werden, der für eine Komponente in einer idealen Gasmischung gleich dem Partialdruck der Komponente ist. Die Korrektur des Druckes ist wegen des nicht idealen Verhaltens der Gasmischung erforderlich und erfolgt über die Einführung des Realgasfaktors Z:

$$Z = \frac{p\overline{M}}{\rho\, RT} = \frac{pV_{\mathrm{m}}}{RT}, \tag{II.5.11}$$

wobei V_{m} das molare Volumen ist. Für ein ideales Gas ist der Realgasfaktor gleich Eins; Gleichung (II.5.11) geht dann in das ideale Gasgesetz über (vergl. Gl. (II.1.18)). Zur Berechnung des Realgasfaktors wird hier der Arbeit von Hsieh *et al.* [31] folgend die modifizierte Soave-Redlich-Kwong Realgasgleichung [36, 37] verwendet:

$$p = \frac{RT}{V_{\mathrm{m}} - b} - \frac{\alpha a}{V_{\mathrm{m}}(V_{\mathrm{m}} + b)}. \tag{II.5.12}$$

Durch Einsetzen von Gl. (II.5.11) in Gl. (II.5.12) erhält man die Realgasgleichung als ein Polynom dritten Grades in Z:

$$Z^3 - Z^2 + (A - B - B^2)Z - AB = 0 \tag{II.5.13}$$

mit

$$A = \frac{\alpha a\, p}{R^2 T^2} \quad \text{und} \quad B = \frac{b\, p}{RT}\,. \tag{II.5.14}$$

Die Größen αa und b sind Funktionen der Molenbrüche X_i und werden mit Mischungsregeln nach Prausnitz *et al.* [35] berechnet:

$$\alpha a = \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} \sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{K}} X_\mathrm{i} X_\mathrm{j} \alpha_\mathrm{ij} a_\mathrm{ij} \quad \text{und} \quad b = \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} X_\mathrm{i} b_\mathrm{i} \tag{II.5.15}$$

mit

$$a_\mathrm{i} = a_\mathrm{ii} = \frac{\Omega_{\mathrm{a_i}} R^2 T_\mathrm{c,i}^2}{p_\mathrm{c,i}}, \quad b_\mathrm{i} = \frac{\Omega_{\mathrm{b_i}} R T_\mathrm{c,i}}{p_\mathrm{c,i}}, \quad \alpha_\mathrm{ij} a_\mathrm{ij} = (1 - k_\mathrm{ij}) \sqrt{\alpha_\mathrm{i} \alpha_\mathrm{j} a_\mathrm{i} a_\mathrm{j}} \tag{II.5.16}$$

und

$$\alpha_{\mathrm{O_2}} = \left[1 + 0,51924 \left(1 - \sqrt{T \,/\, T_{\mathrm{c,O_2}}}\right)\right]^2, \tag{II.5.17}$$

$$\alpha_{\mathrm{H_2}} = 1,202 \exp(-0,30228\, T \,/\, T_{\mathrm{c,H_2}})\,. \tag{II.5.18}$$

Weiterhin werden für das H_2/O_2-System die folgende Konstanten benötigt, die in [38] angegeben sind:

$$\begin{aligned} k_\mathrm{ij} &= 0,04 & k_\mathrm{ii} &= 0 \\ \Omega_{\mathrm{a_{O_2}}} &= 0,42800 & \Omega_{\mathrm{b_{O_2}}} &= 0,08700 \\ \Omega_{\mathrm{a_{H_2}}} &= 0,42478 & \Omega_{\mathrm{b_{H_2}}} &= 0,08664\,. \end{aligned}$$

Eine generell gültige und exakte Gleichung für die Berechnung der Fugazitäten f_i der Komponenten H_2 und O_2 in beiden Phasen liefert die Thermodynamik [35]:

$$RT \ln \frac{f_\mathrm{i}}{X_\mathrm{i} p} = \int_V^\infty \left[\left(\frac{\partial\, p}{\partial\, n_\mathrm{i}} \right)_{T,V,n_{\mathrm{j}\neq\mathrm{i}}} - \frac{RT}{V} \right] \mathrm{d}V \; - RT \ln Z\,. \tag{II.5.19}$$

Integration von Gl. (II.5.19) unter Benutzung der Realgasgleichung (II.5.12) liefert einen expliziten Ausdruck für die Fugazität jeder Komponente [31]:

$$\begin{aligned} \ln \left(\frac{f_\mathrm{i}}{X_\mathrm{i} p} \right) =& \frac{b_\mathrm{i}}{b}(Z-1) - \ln(Z-B) \\ & - \frac{A}{B} \left[\frac{2 \sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{K}} X_\mathrm{j} \alpha_\mathrm{ij} a_\mathrm{ij}}{\alpha a} - \frac{b_\mathrm{i}}{b} \right] \ln \left(1 + \frac{B}{Z} \right)\,. \end{aligned} \tag{II.5.20}$$

Setzt man Gl. (II.5.20) in das Gleichungssystem (II.5.10) ein, erhält man bei gegebenem Druck und gegebener Temperatur zwei Gleichungen mit den beiden Unbekannten $X_{\mathrm{O_2}}^\mathrm{l}$ und $X_{\mathrm{O_2}}^\mathrm{g}$. Die Molenbrüche $X_{\mathrm{H_2}}^\mathrm{l}$ und $X_{\mathrm{H_2}}^\mathrm{g}$ werden durch die Beziehungen

$$X_{\mathrm{H_2}}^\mathrm{l} = 1 - X_{\mathrm{O_2}}^\mathrm{l} \tag{II.5.21}$$

$$X_{\mathrm{H_2}}^\mathrm{g} = 1 - X_{\mathrm{O_2}}^\mathrm{g} \tag{II.5.22}$$

substituiert. Das Gleichungssystem läßt sich mit einem Newton-Verfahren lösen.

Die Verdampfungsenthalpien beider Komponenten ergeben sich aus

$$L_{\mathrm{v,i}} = h_{\mathrm{i}}^{\mathrm{g}} - h_{\mathrm{i}}^{\mathrm{l}} \tag{II.5.23}$$

mit der thermodynamischen Beziehung für die Enthalpie

$$\frac{h_{\mathrm{i}} - h_{\mathrm{i}}^{0}}{RT^{2}} = -\frac{\partial}{\partial T}\left[\ln\frac{f_{\mathrm{i}}}{pX_{\mathrm{i}}}\right], \tag{II.5.24}$$

in der der hochgestellte Index '0' die Größe im idealen Gaszustand bezeichnet.

In Abb. (II.5.3) ist das in dieser Arbeit berechnete thermodynamische Gleichgewicht des binären H_2/O_2-Gemisches für den Druckbereich von 1 bis 20 MPa dargestellt. Die flüssige Phase wird durch eine gestrichelte, die gasförmige Phase durch eine durchgezogene Linie repräsentiert. Dort, wo sich beide Linientypen treffen, liegt im unterkritschen Druckbereich die Siedetemperatur von Sauerstoff, beim kritischen Druck die kritische Temperatur von Sauerstoff und bei überkritischen Drücken die sogenannte kritische Mischungstemperatur der Mischung vor. Bei überkritischen Drücken werden diese Punkte als kritische Mischungspunkte bezeichnet.

Anhand eines Beispiels sei erklärt, wie sich die Zusammmensetzungen der sich im Gleichgewicht befindenden Mischungen ablesen läßt. Bei einem Druck von 10 MPa und einer

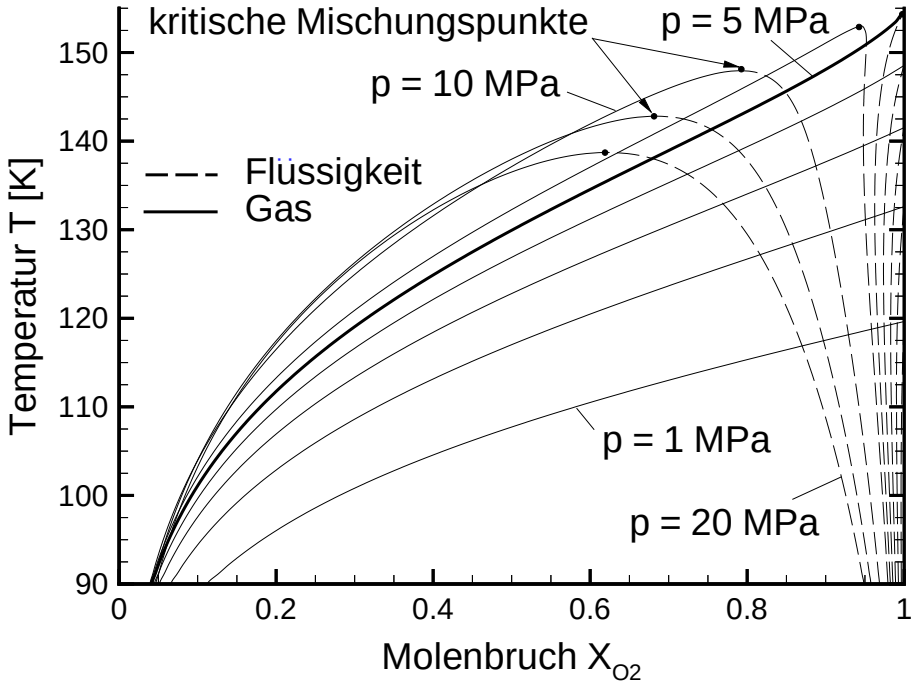

Abbildung II.5.3: Thermodynamisches Gleichgewicht zwischen flüssiger und gasförmiger Phase eines binären H_2/O_2-Gemisches.

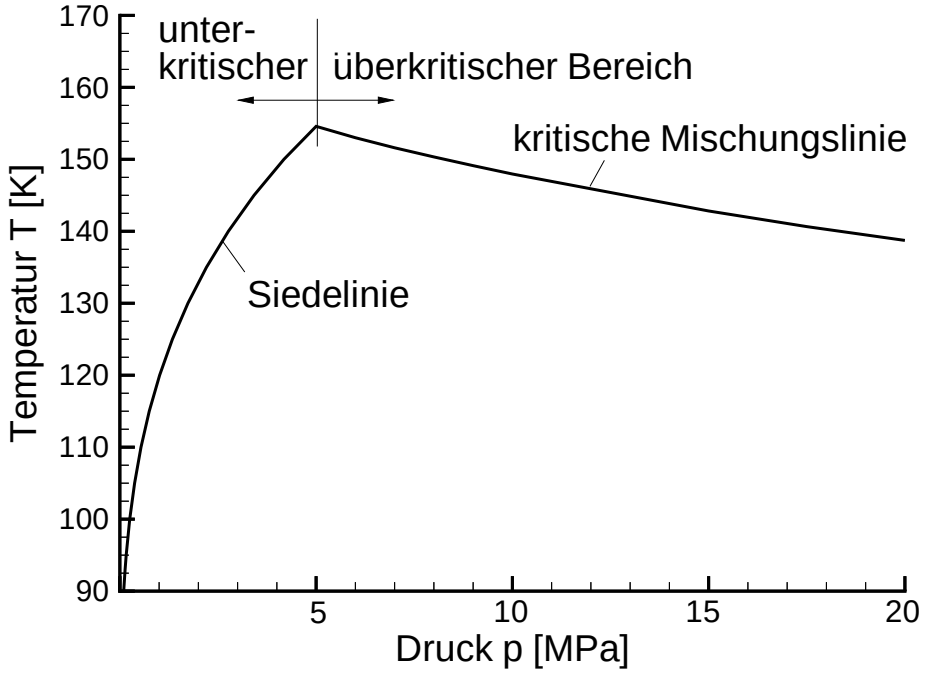

Abbildung II.5.4: Siedelinie und kritische Mischungslinie.

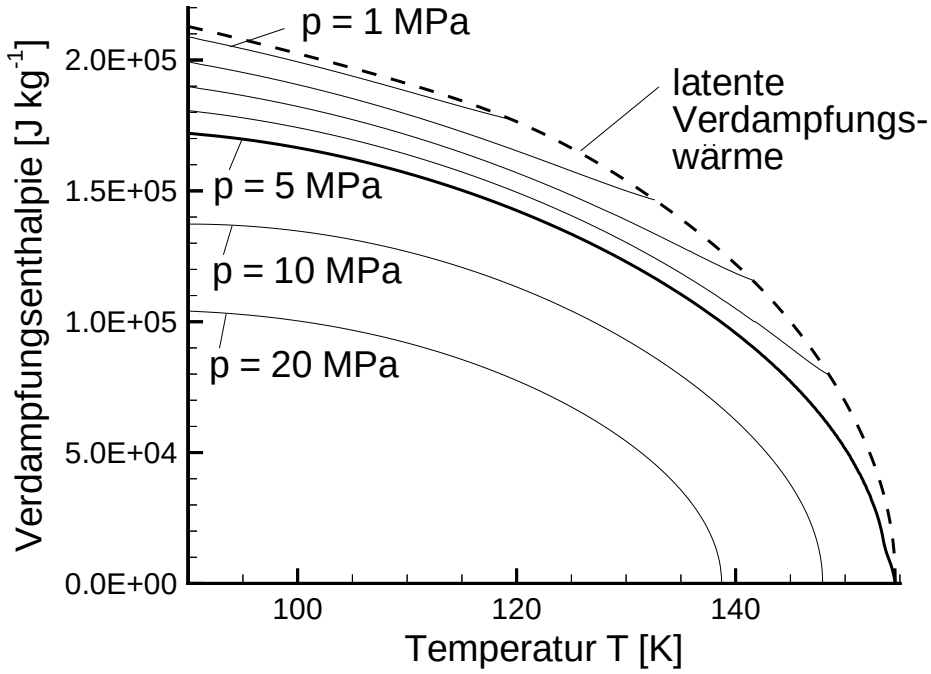

Abbildung II.5.5: Die druck- und temperaturabhängige Verdampfungsenthalpie von Sauerstoff in dem binären Wasserstoff/Sauerstoff-System, sowie die latente Verdampfungswärme von reinem Sauerstoff.

Temperatur von 100 K setzt sich die flüssige Phase aus 97 % Sauerstoff und 3 % Wasserstoff zusammen, die gasförmige Phase besteht aus 9 % Sauerstoff und 91 % Wasserstoff. Mit steigendem Druck nimmt der Anteil von in flüssigem Sauerstoff gelöstem Wasserstoff zu.

In Abb. (II.5.4) wurden die Siedepunkte bzw. die kritischen Mischungspunkte aus Abb. (II.5.3) in ein Temperatur/Druck-Diagramm übertragen. Dadurch erhält man die Siedelinie bzw. die kritische Mischungslinie. Die kritische Mischungslinie hat die Besonderheit, daß sie mit steigendem überkritischem Druck abfällt.

Abbildung (II.5.5) zeigt die Druck- und Temperaturabhängigkeit der Verdampfungsenthalpie von Sauerstoff in dem binären Wasserstoff/Sauerstoff-System berechnet nach Gl. (II.5.24). Dargestellt ist auch die Enthalpie, die aufgebracht werden muß, um reinen gesättigten Sauerstoff in seinem eigenem Dampf von dem flüssigen in den gasförmigen Aggregatzustand zu überführen; dies ist die latente Verdampfungswärme.

Teil III

Laminare Sprayflammen

III.1 Die Gegenstromkonfiguration

Abbildung (III.1.1) zeigt die schematische Darstellung der in dieser Arbeit untersuchten Flammenstuktur für laminare Gegenstrom-Sprayflammen. Sauerstoff-Tröpfchen mit geringer Spraydichte werden in Trägergas Wasserstoff eingedüst und strömen gegen einen entgegengerichteten Wasserstoffstrahl. Die Eintrittstemperaturen des Sprays und der Gasströme sind kryogen und der Druck liegt im hohen unterkritischen Bereich, d.h. unterhalb des kritischen Drucks von Sauerstoff (p_{c,O_2}=5,043 MPa). Zwischen den Düsen liegt die Stauebene in deren Nähe sich die heiße Flamme ausbildet. In Bild (III.1.2) ist das Photo einer Heptan/Luft Gegenstom-Sprayflamme gezeigt [43]. Man beobachtet im Experiment eine laminare, stationäre, zweidimensionale Flamme, die sehr dünn ist und nahezu keine Krümmung hat. Entsprechende experimentelle Untersuchungen für das H_2/O_2-System wurden bisher nicht durchgeführt.

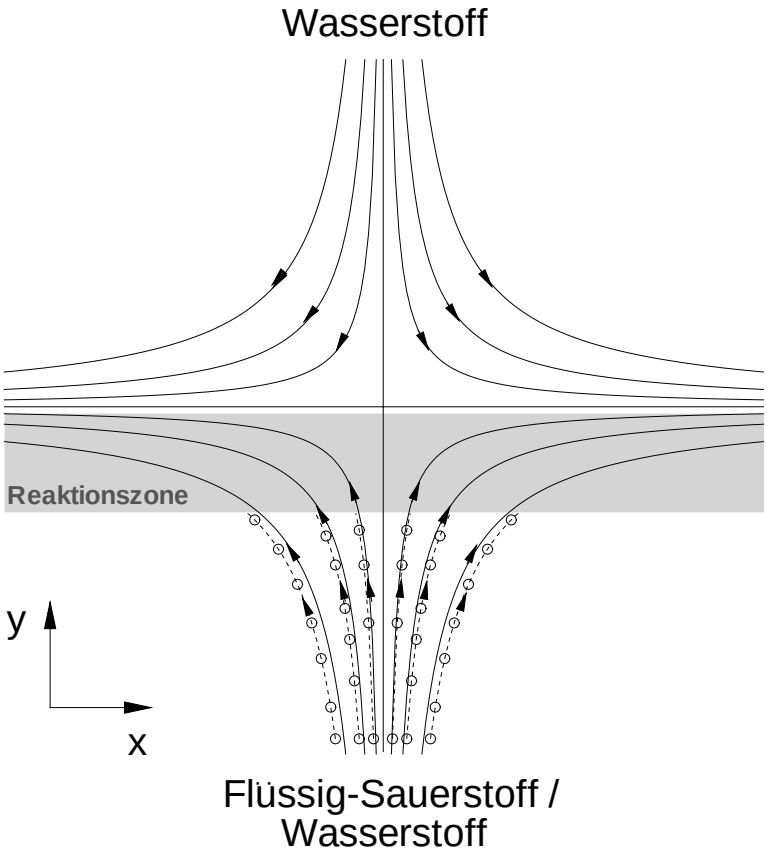

Abbildung III.1.1: Schematische Darstellung der Flammenstruktur einer Flüssig-Sauerstoff/ Wasserstoff Gegenstrom-Sprayflammen.

Abbildung III.1.2: Photo einer Heptan/Luft Gegenstrom-Sprayflamme [43].

III.2 Spezielle Form der Modellgleichungen

III.2.1 Gasphase

Die in Kapitel (II.1) hergeleiteten Erhaltungsgleichungen der Gasphase werden hier für das zweidimensionale, stationäre Strömungsproblem der Gegenstrom-Flamme formuliert und mit Hilfe der Grenzschichtnäherung vereinfacht. Weiterhin werden die Randbedingungen für die Lösung der Gleichungen angegeben. Die in den Grenzschicht-Gleichungen auftretenden Verdampfungs-Quellterme werden in Kapitel (III.2.2) erklärt.

Kontinuitätsgleichung

Die Kontinuitätsgleichung, Gl. (II.1.5), geht über in [6]

$$\frac{\partial\,(\rho\,u)}{\partial\,x} + \frac{\partial\,(\rho\,v)}{\partial\,y} = q_m\,. \tag{III.2.1}$$

Diese Gleichung beschreibt die Massenerhaltung in einer planaren Gegenstromkonfiguration. Durch Einführung der Größe α wird die Kontinuitätsgleichung allgemeiner für eine planare bzw. auch eine axialsymmetrische Konfiguration formuliert. In der planaren Konfiguration treten die entgegengerichteten Ströme durch breite Schlitze, in der axialsymmetrischen Konfiguration durch kreisrunde Düsen aus, wobei das Strömungsfeld im letzteren Fall symmetrisch zur Rotationsachse ist. Die Kontinuitätsgleichung lautet in der allgemeineren Form:

$$\frac{\partial\,([\alpha+1]\rho\,u)}{\partial\,x} + \frac{\partial\,(\rho\,v)}{\partial\,y} = q_m\,. \tag{III.2.2}$$

Die Größe α ist gleich Null für die planare bzw. gleich Eins für die axialsymmetrische Konfiguration.

Als Randbedingung der Kontinuitätsgleichung wird die axiale Eintrittsgeschwindigkeit auf der Sprayseite der Gegenstromkonfiguration (Position $y = -\infty$) vorgegeben:

$$v(y = -\infty) = v_{-\infty}\,. \tag{III.2.3}$$

Bilanzgleichungen für die Massenanteile der chemischen Spezies

Die Bilanzen der Massenanteile für ein stationäres, ebenes Problem unter Anwendung der Grenzschichtnäherung lauten [6]:

$$\rho\, u \frac{\partial\, Y_{\mathrm{i}}}{\partial\, x} + \rho\, v \frac{\partial\, Y_{\mathrm{i}}}{\partial\, y} = -\frac{\partial\,(\rho\, V_{\mathrm{i},y})}{\partial\, y} + W_{\mathrm{i}}\dot{\omega}_{\mathrm{i}} + (\delta_{\mathrm{i}} - Y_{\mathrm{i}})\, q_m\,. \tag{III.2.4}$$

In Gl. (III.2.4) wird mit $V_{\mathrm{i},y}$ die Diffusionsgeschwindigkeit in y-Richtung zusammengefaßt, die durch folgende Gleichung gegeben ist (vergl. Gl. (II.2.5)):

$$V_{\mathrm{i},y} = -\frac{D_{\mathrm{i}}}{\overline{W}} \frac{\partial\,(\overline{W} Y_{\mathrm{i}})}{\partial\, y} - \frac{D_{\mathrm{i}}^{\mathrm{T}}}{\rho\, T} \frac{\partial\, T}{\partial\, y}. \tag{III.2.5}$$

Als Randbedingungen werden die Massenbrüche an den Einströmrändern

$$Y_{\mathrm{i}}(y = -\infty) = Y_{\mathrm{i},-\infty} \quad \text{und} \quad Y_{\mathrm{i}}(y = +\infty) = Y_{\mathrm{i},+\infty} \tag{III.2.6}$$

vorgegeben.

Impulserhaltungsgleichung

Wird die Kontinuitätsgleichung (II.1.5) in die Impulserhaltungsgleichung (II.1.13) eingesetzt und auf zwei kartesische Ortskoordinaten reduziert, ergibt sich folgende Form der Gleichung für die x- und y-Richtung [21]:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial\, u}{\partial\, t} + \rho\, u \frac{\partial\, u}{\partial\, x} + \rho\, v \frac{\partial\, u}{\partial\, y} &= -\frac{\partial\, p}{\partial\, x} + \frac{\partial}{\partial\, x}\left[\mu\left(2\frac{\partial\, u}{\partial\, x} - \frac{2}{3}\left(\frac{\partial\, u}{\partial\, x} + \frac{\partial\, v}{\partial\, y}\right)\right)\right] \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial\, y}\left[\mu\left(\frac{\partial\, u}{\partial\, y} + \frac{\partial\, v}{\partial\, x}\right)\right] + \rho\, g_x + q_{p,x} - u q_m\,, \end{aligned} \tag{III.2.7}$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial\, v}{\partial\, t} + \rho\, u \frac{\partial\, v}{\partial\, x} + \rho\, v \frac{\partial\, v}{\partial\, y} &= -\frac{\partial\, p}{\partial\, y} + \frac{\partial}{\partial\, y}\left[\mu\left(2\frac{\partial\, v}{\partial\, y} - \frac{2}{3}\left(\frac{\partial\, u}{\partial\, x} + \frac{\partial\, v}{\partial\, y}\right)\right)\right] \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial\, x}\left[\mu\left(\frac{\partial\, u}{\partial\, y} + \frac{\partial\, v}{\partial\, x}\right)\right] + \rho\, g_y + q_{p,y} - v q_m\,. \end{aligned} \tag{III.2.8}$$

Aus den Impulsgleichungen lassen sich die Grenzschichtgleichungen für ein stationäres System ableiten [6, 21]:

$$\rho\, u \frac{\partial\, u}{\partial\, x} + \rho\, v \frac{\partial\, u}{\partial\, y} = -\frac{\partial\, p}{\partial\, x} + \frac{\partial}{\partial\, y}\left(\mu \frac{\partial\, u}{\partial\, y}\right) + q_{p,x} - u q_m\,, \tag{III.2.9}$$

$$0 = -\frac{\partial\, p}{\partial\, y}. \tag{III.2.10}$$

In einer Grenzschicht ist demnach der Druck quer zur Hauptströmungsrichtung konstant und wird der Grenzschicht von der Außenströmung quasi aufgeprägt. Der Druck ist daher als bekannte Funktion anzusehen, die nur von x abhängt. Der Druckgradient in radialer Richtung wird durch die Eulergleichung bestimmt, die am Einströmrand auf der Sprayseite ($y = -\infty$) ausgewertet wird:

$$-\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x} = \left(\rho\, u \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right)\bigg|_{-\infty}. \tag{III.2.11}$$

Es können jetzt die Gln. (III.2.9,III.2.11) zu der folgenden Form der Impulserhaltungsgleichung in x-Richtung zusammengefaßt werden:

$$\rho\, u \frac{\partial\, u}{\partial\, x} + \rho\, v \frac{\partial\, u}{\partial\, y} = \left(\rho\, u \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right)\bigg|_{-\infty} + \frac{\partial}{\partial\, y}\left(\mu \frac{\partial\, u}{\partial\, y}\right) + q_{p,x} - u q_m\,. \tag{III.2.12}$$

Die beiden Randbedingungen, die zur Lösung dieser Differentialgleichung erforderlich sind, lauten:

$$u(y = -\infty) = u_{-\infty} \qquad \text{und} \qquad u(y = +\infty) = u_{+\infty}\,. \tag{III.2.13}$$

Energieerhaltungsgleichung

Aus der Energieerhaltungsgleichung für die spezifische Enthalpie (II.1.17) kann die hier angestrebte Form für die Temperatur gewonnen werden, indem der für ideale Gase gültige Zusammenhang $\mathrm{d}h = c_p \mathrm{d}T$ in Gl. (II.1.17) eingesetzt wird. Durch Anwendung der Grenzschichttheorie und unter der Voraussetzung kleiner Mach-Zahlen (geringer Strömungsgeschwindigkeit) ergibt sich die erwünschte Form der Energieerhaltungsgleichung [6]

$$\rho\, u c_p \frac{\partial\, T}{\partial\, x} + \rho\, v c_p \frac{\partial\, T}{\partial\, y} = \frac{\partial}{\partial\, y}\left(\lambda \frac{\partial\, T}{\partial\, y}\right) - \rho \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} V_{\mathrm{i},y} c_{p,\mathrm{i}} \frac{\partial\, T}{\partial\, y} - \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} W_{\mathrm{i}} \dot{\omega}_{\mathrm{i}}\, h_{\mathrm{i}} + q_T\,, \tag{III.2.14}$$

in der die Quellterme des Phasenaustauschs mit der Größe q_T wie folgt zusammengefaßt sind:

$$q_T = \left(\frac{1}{2}|\vec{v}|^2 - h - u^2\right) q_m + q_e\,. \tag{III.2.15}$$

Die Randbedingungen für die Energiegleichung lauten

$$T\,(y = -\infty) = T_{-\infty} \quad \text{und} \quad T\,(y = +\infty) = T_{+\infty}\,. \tag{III.2.16}$$

III.2.2 Die Quellterme des Phasenaustauschs

Quellterm in den Massenerhaltungsgleichungen

Der Quellterm des Phasenaustauschs q_m in der Kontinuitätsgleichung und in den Bilanzen für die Massenanteile der chemischen Spezies ist durch folgende Gleichung gegeben:

$$q_m = \sum_{\mathrm{d}=1}^{\mathrm{D}} (n\dot{m})_{\mathrm{d}} \ . \tag{III.2.17}$$

Dabei ist n die Anzahl der Tröpfchen pro Gasvolumen, die sogenannte Tröpfchenanzahldichte, und $\dot{m}$ der von einem einzelnen Tröpfchen verdampfte Massenstrom bzw. der an einem einzelnen Tröpfchen kondensierte Massenstrom (siehe Kapitel (II.4)). Im allgemeinen Fall wird ein polydisperses Spray eingedüst, d.h. ein Spray, welches Tröpfchen verschiedener Größenklassen enthält. Der Gesamt-Austauschterm setzt sich dann additiv aus der Summe der einzelnen Austauschterme einer jeden Tröpfchengrößenklasse (Index 'd') zusammen.

Quellterm in der Impulserhaltungsgleichung

Der Quellterm des Phasenwechsels in der Vektorform der Impulserhaltungsgleichung ist durch den Ausdruck

$$\vec{q}_p = \sum_{\mathrm{d}=1}^{\mathrm{D}} \left(n\dot{m}\vec{v}_{\mathrm{l}} - nm_{\mathrm{l}}\frac{\mathrm{d}\vec{v}_{\mathrm{l}}}{\mathrm{d}t} \right)_{\mathrm{d}} \tag{III.2.18}$$

gegeben. Die in Gl. (III.2.12) auftretende Komponente quer zur Hauptströmungsrichtung von $\vec{q}_p$ ist

$$q_{p,x} \ = \ \sum_{\mathrm{d}=1}^{\mathrm{D}} \left(n\dot{m}u_{\mathrm{l}} - nm_{\mathrm{l}}\frac{\mathrm{d}u_{\mathrm{l}}}{\mathrm{d}t} \right)_{\mathrm{d}} \ . \tag{III.2.19}$$

Diese Gleichung berücksichtigt, daß der verdampfende oder auch kondensierende Massenfluß einen Impuls zwischen flüssiger Phase und Gasphase überträgt und daß gleichzeitig Kraft für die Beschleunigung der Tröpfchen aufgewendet werden muß. Es ist $\dot{m}$ der Massenstrom der verdampfenden Komponente, $\vec{v}_{\mathrm{l}}$ der Geschwindigkeitsvektor mit den Komponenten u_{l} und v_{l} und m_{l} die Masse eines Tröpfchens. Der Index 'l' kennzeichnet Größen der flüssigen Phase; 'l' steht für englisch *liquid* (flüssig). Mit dem Index 'd' wird wiederum die Polydispersität des Sprays gekennzeichnet.

Quellterm in der Energieerhaltungsgleichung

Eine Energiebilanz für die flüssige Phase liefert folgenden Quellterm des Phasenaustauschs:

$$q_T = \sum_{\mathrm{d}=1}^{\mathrm{D}} \left(-n \left[\dot{q} + \dot{m} \left(\overline{c}_{p,\mathrm{f}}(T - T_{\mathrm{s}}) + L_{\mathrm{v,O_2}}(T_{\mathrm{s}}) \right) \right] \right)_{\mathrm{d}} \ . \tag{III.2.20}$$

Dabei ist $\dot{q}$ der Wärmeleitstrom in das Tröpfcheninnere, $L_{\mathrm{v,O_2}}(T_\mathrm{s})$ die Verdampfungsenthalpie des flüssigen Sauerstoffs bei der Oberflächentemperatur T_s und $\overline{c}_{p,\mathrm{f}}$ die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck der Gasmischung in einem fiktiven, das Tröpfchen umgebenden Film (siehe Kapitel (II.4.1)). Sofern es sich um ein polydisperses Spray handelt, wird der Quellterm des Phasenaustauschs wieder über alle Tröpfchengrößenklassen (Index 'd') aufsummiert.

III.2.3 Flüssige Phase

Die Quellterme des Phasenaustauschs in Kapitel (III.2.2) sind Funktionen der Tröpfchenanzahldichte. Diese wird hier in Abhängigkeit der axialen Position eines Tröpfchens im Strömungsfeld hergeleitet.

Wenn keine Tröpfchen erzeugt oder zerstört werden, gilt für die Tröpfchenanzahldichte n bei gegebenem Tröpfchen-Geschwindigkeitsvektor $\vec{v}_\mathrm{l}$ und stationärem Zustand die Gleichung [6, 7]

$$\mathrm{div}\,(n\vec{v}_\mathrm{l}) = 0\,. \tag{III.2.21}$$

Dies ist eine Erhaltungsgleichung für die Anzahl der Tröpfchen, die bei einem zweidimensionalen Problem mit folgender Form äquivalent ist:

$$u_\mathrm{l}\frac{\partial\, n}{\partial\, x} + v_\mathrm{l}\frac{\partial\, n}{\partial\, y} + n\frac{\partial\, u_\mathrm{l}}{\partial\, x} + n\frac{\partial\, v_\mathrm{l}}{\partial\, y} = 0\,. \tag{III.2.22}$$

Zur Herleitung der einzelnen Terme in Gl. (III.2.22) werden die totalen Ableitungen von v_l und n benutzt. Es gilt

$$\frac{\mathrm{d}v_\mathrm{l}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial\, v_\mathrm{l}}{\partial\, t} + u_\mathrm{l}\frac{\partial\, v_\mathrm{l}}{\partial\, x} + v_\mathrm{l}\frac{\partial\, v_\mathrm{l}}{\partial\, y} \tag{III.2.23}$$

und

$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial\, n}{\partial\, t} + u_\mathrm{l}\frac{\partial\, n}{\partial\, x} + v_\mathrm{l}\frac{\partial\, n}{\partial\, y}. \tag{III.2.24}$$

Da es sich um ein stationäres Strömungsproblem handelt, sind die partiellen Zeitableitungen gleich Null. Weiterhin ist der Term $\partial\, v_\mathrm{l}/\,\partial\, x$ in Gl. (III.2.23) gemäß der Grenzschichtnäherung gleich Null. Zur Bestimmung des Terms $\partial\, u_\mathrm{l}/\,\partial\, x$ wird die Größe s eingeführt [6, 7]:

$$s = \frac{x_\mathrm{l}}{u_{\mathrm{l},0}}\,. \tag{III.2.25}$$

Dabei bezeichnet der Index '0' Größen zum Zeitpunkt t=0. Setzt man diese Definition für s in die Beziehung $u_\mathrm{l} = \mathrm{d}x_\mathrm{l}/\,\mathrm{d}t$ ein, erhält man für die partielle Ableitung $\partial\, u_\mathrm{l}/\,\partial\, x$:

$$\frac{\partial\, u_\mathrm{l}}{\partial\, x} = \frac{1}{s}\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t} + x_\mathrm{l}\frac{\partial}{\partial\, x}\left(\frac{1}{s}\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}\right)\,. \tag{III.2.26}$$

Wenn $s_0 =$ konst., dann ist s unabhängig von x und Gl. (III.2.26) reduziert sich zu

$$\frac{\partial\, u_\mathrm{l}}{\partial\, x} = \frac{1}{s}\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}\,. \tag{III.2.27}$$

Gleichung (III.2.22) wird mit Hilfe der Gln. (III.2.23,III.2.24,III.2.27) umgeformt in

$$\frac{1}{n}\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t} + \frac{1}{s}\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t} + \frac{1}{v_\mathrm{l}}\frac{\mathrm{d}v_\mathrm{l}}{\mathrm{d}t} = 0\,. \tag{III.2.28}$$

Aus Gl. (III.2.28) folgt weiter

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(nsv_\mathrm{l}\right) = nsv_\mathrm{l}\left(\frac{1}{n}\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t} + \frac{1}{s}\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t} + \frac{1}{v_\mathrm{l}}\frac{\mathrm{d}v_\mathrm{l}}{\mathrm{d}t}\right) = 0\,. \tag{III.2.29}$$

Die Integration von Gl. (III.2.29) führt schließlich zu der gesuchten Form der Gleichung für die Tröpfchenanzahldichte [6, 7]:

$$n = n_0 \frac{s_0\, v_{\mathrm{l},0}}{s\, v_\mathrm{l}}\,. \tag{III.2.30}$$

Die vorhergehende Gleichung ist wegen $s \neq f(x)$ und $v_\mathrm{l} \neq f(x)$ unabhängig von der x-Koordinate.

III.3 Transformation des Gleichungssystems

III.3.1 Das dimensionsbehaftete Gleichungssystem

In den vorherigen Unterkapiteln wurden alle Gleichungen zur Modellierung von laminaren Sprayflammen in der Gegenstromkonfiguration hergeleitet. Um einen Überblick über das zu lösende Gleichungssystem zu erhalten, werden hier alle Gleichungen zusammenfassend dargestellt. Die Tabelle (III.3.1) enthält die Erhaltungsgleichungen der Gasphasen sowie das ideale Gasgesetz, Tabelle (III.3.2) beinhaltet alle Gleichungen zur Beschreibung der flüssigen Phase und Tabelle (III.3.3) umfaßt schließlich die Quellterm des Phasenaustauschs durch Verdampfung. Weiterhin sind jeweils die Randbedingungen, die zur Lösung der Differentialgleichungen erforderlich sind, angegeben.

Die dimensionsbehafteten physikalischen Größen werden hier mit einem Dach '$\widehat{\ }$' gekennzeichnet. Im folgenden Unterkapitel werden geeignete Referenzgrößen mit dem Hochindex '*' eingeführt, mit deren Hilfe alle dimensionsbehafteten Gleichungen des Gesamtmodells dimensionslos gemacht werden [6, 7]. Durch diese Prozedur werden in den Modellgleichungen Terme gleicher Größenordnung erzielt. Die dimensionslosen Größen werden im folgenden ohne Index dargestellt. Für eine dimensionslose physikalische Größe ϕ gilt dann allgemein

$$\phi = \frac{\widehat{\phi}}{\phi^*}. \tag{III.3.1}$$

Die dimensionslosen Gleichungen werden in einem weiteren Schritt transformiert. Speziell die Erhaltungsgleichungen der Gasphase werden einer Ähnlichkeitstransformation unterzogen, die den zweidimensionalen Satz von Gleichungen auf einen eindimensionalen Satz reduziert.

III.3.2 Einführung von Referenzgrößen

Als Referenzzeit eignet sich eine hier zu ermittelnde charakteristische Strömungszeit für die Gegenstromkonfiguration. Um diese zu bestimmen, wird zunächst das Geschwindigkeitsfeld näher betrachtet. Die äußere reibungsfreie Potentialströmung der Gegenstromanordnung wird durch folgende Gleichungen für die Geschwindigkeitskomponenten $\widehat{u}$ und $\widehat{v}$ in x- und y-Richtung beschrieben:

$$\widehat{y} < 0: \qquad \widehat{u}(\widehat{x}) = \widehat{a}_- \, \widehat{x}\,, \qquad \widehat{v}(\widehat{y}) = -\widehat{a}_- \, \widehat{y} \tag{III.3.2}$$

$$\widehat{y} > 0: \qquad \widehat{u}(\widehat{x}) = \widehat{a}_+ \, \widehat{x}\,, \qquad \widehat{v}(\widehat{y}) = -\widehat{a}_+ \, \widehat{y} \tag{III.3.3}$$

Es sind $\widehat{a}_-$ und $\widehat{a}_+$ die Streckungsgeschwindigkeiten am linken ($\widehat{y} < 0$) bzw. rechten Rand ($\widehat{y} > 0$) der Stauebene. Die Streckungsgeschwindigkeiten sind äquivalent mit den Geschwindigkeitsgradienten und haben die Einheit [1/s]. Wenn keine mit chemischen Reaktionen oder Stößen einhergehende Dichteänderungen erfolgen, sind sie auf der jeweiligen Seite konstant. In einem x,y-Diagramm können obige Gleichungen als Stromlinien wie in Abb. (III.3.1) dargestellt werden.

Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial\left([\alpha+1]\widehat{\rho}\widehat{u}\right)}{\partial\,\widehat{x}}+\frac{\partial\left(\widehat{\rho}\widehat{v}\right)}{\partial\,\widehat{y}}=\widehat{q}_m$$

mit der Randbedingung

$$\widehat{v}(\widehat{y}=-\infty)=\widehat{v}_{-\infty}$$

Bilanzen für die Massenanteile der chemischen Spezies:

$$\widehat{\rho}\widehat{u}\frac{\partial\,Y_{\mathrm{i}}}{\partial\,\widehat{x}}+\widehat{\rho}\widehat{v}\frac{\partial\,Y_{\mathrm{i}}}{\partial\,\widehat{y}}=-\frac{\partial\left(\widehat{\rho}\widehat{V}_{\mathrm{i},y}\right)}{\partial\,\widehat{y}}+\widehat{W}_{\mathrm{i}}\widehat{\dot{\omega}}_{\mathrm{i}}+\left(\delta_{\ \mathrm{i}}-Y_{\mathrm{i}}\right)\widehat{q}_{\mathrm{m}}$$

mit den Randbedingungen

$$Y_{\mathrm{i}}(\widehat{y}=-\infty)=Y_{\mathrm{i},-\infty}\qquad\text{und}\qquad Y_{\mathrm{i}}(\widehat{y}=+\infty)=Y_{\mathrm{i},+\infty}$$

Impulserhaltungsgleichung:

$$\widehat{\rho}\widehat{u}\frac{\partial\,\widehat{u}}{\partial\,\widehat{x}}+\widehat{\rho}\widehat{v}\frac{\partial\,\widehat{u}}{\partial\,\widehat{y}}=\left(\widehat{\rho}\widehat{u}\frac{\mathrm{d}\widehat{u}}{\mathrm{d}\widehat{x}}\right)\Bigg|_{-\infty}+\frac{\partial}{\partial\,\widehat{y}}\left(\widehat{\mu}\frac{\partial\,\widehat{u}}{\partial\,\widehat{y}}\right)+\widehat{q}_{p,x}-\widehat{u}\widehat{q}_m$$

mit den Randbedingungen

$$\widehat{u}(\widehat{y}=-\infty)=\widehat{u}_{-\infty}\qquad\text{und}\qquad\widehat{u}(\widehat{y}=+\infty)=\widehat{u}_{+\infty}$$

Energieerhaltungsgleichung:

$$\widehat{\rho}\widehat{u}\widehat{c}_p\frac{\partial\,\widehat{T}}{\partial\,\widehat{x}}+\widehat{\rho}\widehat{v}\widehat{c}_p\frac{\partial\,\widehat{T}}{\partial\,\widehat{y}}=\frac{\partial}{\partial\,\widehat{y}}\left(\widehat{\lambda}\frac{\partial\,\widehat{T}}{\partial\,\widehat{y}}\right)-\widehat{\rho}\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}}\widehat{\vec{V}}_{\mathrm{i}}\widehat{c}_{p,\mathrm{i}}\mathrm{grad}\widehat{T}-\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}}\widehat{W}_{\mathrm{i}}\widehat{\dot{\omega}}_{\mathrm{i}}\widehat{h}_{\mathrm{i}}+\widehat{q}_T$$

mit den Randbedingungen

$$\widehat{T}(\widehat{y}=-\infty)=\widehat{T}_{-\infty}\qquad\text{und}\qquad\widehat{T}(\widehat{y}=+\infty)=\widehat{T}_{+\infty}$$

sowie den Diffusions-Geschwindigkeitskomponenten

$$\widehat{V}_{\mathrm{i},x}=-\frac{\widehat{D}_{\mathrm{i}}}{\widehat{\overline{W}}}\frac{\partial\left(\widehat{\overline{W}}Y_{\mathrm{i}}\right)}{\partial\,\widehat{x}}-\frac{\widehat{D}_{\mathrm{i}}^{\mathrm{T}}}{\widehat{\rho}\widehat{T}}\frac{\partial\,\widehat{T}}{\partial\,\widehat{x}}$$

$$\widehat{V}_{\mathrm{i},y}=-\frac{\widehat{D}_{\mathrm{i}}}{\widehat{\overline{W}}}\frac{\partial\left(\widehat{\overline{W}}Y_{\mathrm{i}}\right)}{\partial\,\widehat{y}}-\frac{\widehat{D}_{\mathrm{i}}^{\mathrm{T}}}{\widehat{\rho}\widehat{T}}\frac{\partial\,\widehat{T}}{\partial\,\widehat{y}}$$

Ideales Gasgesetz:

$$\widehat{\rho}=\frac{\widehat{p}\widehat{\overline{W}}}{\widehat{R}\widehat{T}}$$

Tabelle III.3.1: Die dimensionsbehafteten Erhaltungsgleichungen der Gasphase.

Tröpfchenverdampfung:

$$\frac{\mathrm{d}\widehat{R}}{\mathrm{d}\widehat{t}} = -\frac{\widehat{\rho}_{\mathrm{g,f}}\widehat{D}_{\mathrm{g,f}}}{2\,\widehat{\rho}_{\mathrm{l}}\widehat{R}}\,\widetilde{Sh}\,\ln(1+B_{\mathrm{M}})$$

mit der Randbedingung

$$\widehat{R}(\widehat{t}=0) = \widehat{R}_0$$

Tröpfchenaufheizung:

$$\frac{\partial\,\widehat{T}_{\mathrm{l}}}{\partial\,\widehat{t}} = \frac{\widehat{\alpha}_{\mathrm{l}}}{\widehat{r}^2}\frac{\partial}{\partial\,\widehat{r}}\left(\widehat{r}^2\frac{\partial\,\widehat{T}_{\mathrm{l}}}{\partial\,\widehat{r}}\right)$$

mit den Randbedingungen

$$\left.\frac{\partial\,\widehat{T}_{\mathrm{l}}}{\partial\,\widehat{r}}\right|_{\widehat{r}=0} = 0$$

$$\left.\frac{\partial\,\widehat{T}_{\mathrm{l}}}{\partial\,\widehat{r}}\right|_{\widehat{r}=\widehat{R}} = \frac{\widehat{\dot{q}}}{4\pi\widehat{R}^2\widehat{\lambda}_{\mathrm{l,s}}}$$

Tröpfchenbewegung in radialer und axialer Richtung:

$$\frac{4}{3}\pi\widehat{R}^3\widehat{\rho}_{\mathrm{l}}\frac{\mathrm{d}\widehat{u}_{\mathrm{l}}}{\mathrm{d}\widehat{t}} = \pi\widehat{R}^2\frac{1}{2}\widehat{\rho}(\widehat{u}-\widehat{u}_{\mathrm{l}})|\widehat{u}-\widehat{u}_{\mathrm{l}}|C_{\mathrm{D}} + \frac{4}{3}\pi\widehat{R}^3\widehat{\rho}\,\widehat{g}_x$$

$$\frac{4}{3}\pi\widehat{R}^3\widehat{\rho}_{\mathrm{l}}\frac{\mathrm{d}\widehat{v}_{\mathrm{l}}}{\mathrm{d}\widehat{t}} = \pi\widehat{R}^2\frac{1}{2}\widehat{\rho}(\widehat{v}-\widehat{v}_{\mathrm{l}})|\widehat{v}-\widehat{v}_{\mathrm{l}}|C_{\mathrm{D}} + \frac{4}{3}\pi\widehat{R}^3\widehat{\rho}\,\widehat{g}_y$$

mit den Randbedingungen

$$\widehat{x}_{\mathrm{l}}(\widehat{t}=0) = \widehat{x}_{\mathrm{l,0}}$$
$$\widehat{y}_{\mathrm{l}}(\widehat{t}=0) = \widehat{y}_{\mathrm{l,0}}$$
$$\widehat{u}_{\mathrm{l}}(\widehat{t}=0) = \widehat{u}_{\mathrm{l,0}}$$
$$\widehat{v}_{\mathrm{l}}(\widehat{t}=0) = \widehat{v}_{\mathrm{l,0}}$$

Tröpfchenanzahldichte:

$$\widehat{n} = \widehat{n}_0\frac{\widehat{s}_0\,\widehat{v}_{\mathrm{l,0}}}{\widehat{s}\,\widehat{v}_{\mathrm{l}}}$$

Tabelle III.3.2: Die dimensionsbehafteten Gleichungen der flüssigen Phase.

Gesamtmasse:	$\widehat{q}_m = \sum_{\mathrm{d}=1}^{\mathrm{D}} \left(\widehat{n}\widehat{\dot{m}}\right)_{\mathrm{d}}$
Impuls:	$\widehat{q}_{p,x} = \sum_{\mathrm{d}=1}^{\mathrm{D}} \left(\widehat{n}\widehat{\dot{m}}\widehat{u}_{\mathrm{l}} - \widehat{n}\widehat{m}_{\mathrm{l}}\frac{\mathrm{d}\widehat{u}_{\mathrm{l}}}{\mathrm{d}\widehat{t}}\right)_{\mathrm{d}}$
Energie:	$\widehat{q}_T = \sum_{\mathrm{d}=1}^{\mathrm{D}} \left(-\widehat{n}\left[\widehat{\dot{q}} + \widehat{\dot{m}}(\widehat{\overline{c}}_{p,\mathrm{f}}(\widehat{T} - \widehat{T}_{\mathrm{s}}) + \widehat{L}_{\mathrm{v,O_2}}(T_{\mathrm{s}}))\right]\right)_{\mathrm{d}}$

Tabelle III.3.3: Die dimensionsbehafteten Quellterme der Verdampfung in den Erhaltungsgleichungen der Tabelle (III.3.1).

Eine Impulsbilanz über die entgegengerichteten Ströme liefert den Zusammenhang $\widehat{\rho}_-\widehat{a}_-^2 = \widehat{\rho}_+\widehat{a}_+^2$ zwischen den Streckungsgeschwindigkeiten am linken und rechten Rand der Konfiguration [6, 7]. Wenn auf beiden Seiten der Gegenstromanordnung Gase gleicher Temperatur und Zusammensetzung eingedüst werden und keine chemischen Reaktionen und Verdichtungsstöße stattfinden, ist die Dichte im gesamten Strömungsfeld konstant. Für die Streckungsgeschwindigkeit gilt dann aufgrund der obigen Impulsbilanz $\widehat{a} = \widehat{a}_- = \widehat{a}_+$; sie läßt sich durch Ermittlung des Geschwindigkeitsgradienten in x- oder y-Richtung an einer beliebigen Stelle in der Strömung bestimmen.

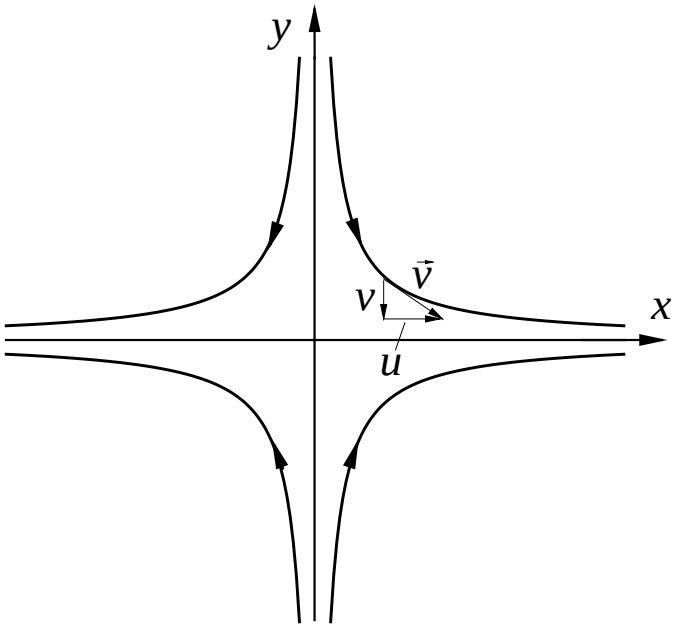

Abbildung III.3.1: Potentialströmung der Gegenstromkonfiguration.

In Abb. (III.3.2) ist die axiale Geschwindigkeitskomponente $\widehat{v}$ über der axialen Ortskoordinate $\widehat{y}$ für $\widehat{y}$ <0 aufgetragen. Mit dem Index '$-\infty$' werden Werte am linken Rand, der Sprayseite der Konfiguration bezeichnet.

Für die Bestimmung einer charakteristischen Strömungszeit wird die Gleichung $\mathrm{d}\widehat{t} = \mathrm{d}\widehat{y}/\,\widehat{v}(\widehat{y})$ von $\widehat{t}_0 = 0$ bis $\widehat{t}$ integriert:

$$\widehat{t} = \frac{1}{\widehat{a}}\, ln \frac{\widehat{v}(\widehat{y}_0)}{\widehat{v}(\widehat{y}(\widehat{t}))}\,. \tag{III.3.4}$$

Dabei ist $\widehat{v}(\widehat{t}) = -\widehat{a}\,\widehat{y}(\widehat{t}) + \widehat{v}_{-\infty}$. Die in Gl. (III.3.4) berechnete Zeit $\widehat{t}$ ist die Zeit, die benötigt wird, um die Strömung von $\widehat{v}(\widehat{y}_0)$ auf $\widehat{v}(\widehat{y}(\widehat{t}))$ abzubremsen. Der Bruch $1/\,\widehat{a}$ ist die gesuchte charakteristische Strömungszeit, die beim Dimensionslosmachen der Gasphasen-Gleichungen als Referenzzeit benutzt wird. Da sich bei reaktiven Strömungen die Streckungsgeschwindigkeit mit dem Ort ändert, wird als Referenzzeit der fixe Wert am linken Rand $1/\,\widehat{a}_{-\infty}$ gewählt.

Continillo und Sirignano [6, 7] führen die Referenzzeit $t^* = 1/\,\widehat{a}_{-\infty}$ und weitere wie folgt definierte Referenzgrößen für die Gleichungen der Gasphase ein:

$$l^* = \sqrt{\widehat{\nu}_{-\infty}/\,\widehat{a}_{-\infty}} \qquad \rho^* = \widehat{\rho}_{-\infty} \qquad c_p^* = \widehat{c}_{p-\infty},$$
$$T^* = \widehat{T}_{-\infty}, \qquad W^* = \widehat{W}_{-\infty}\,.$$

Durch das Dimensionslosmachen der Erhaltungsgleichungen ergeben sich folgende von

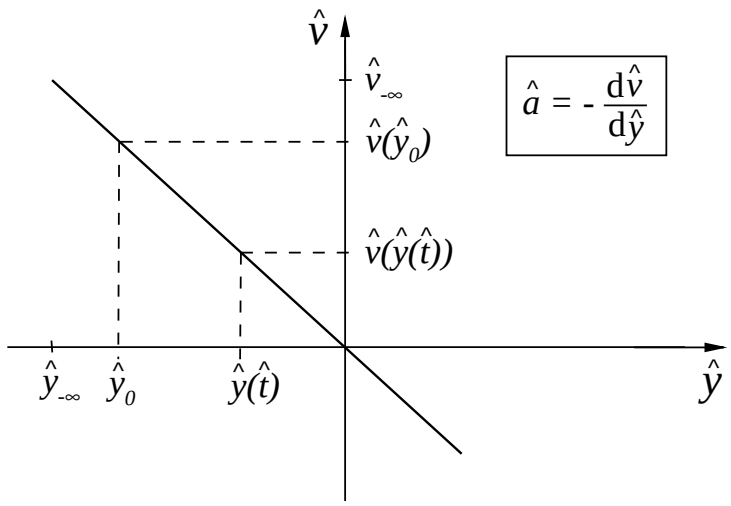

Abbildung III.3.2: Axiale Geschwindigkeitskomponente $\widehat{v}$ aufgetragen über der Ortskoordinate $\widehat{y}$, wenn Dichteänderungen nicht berücksichtigt werden.

den obigen Größen abgeleitete Referenzwerte:

$$
\begin{aligned}
u^* &= l^*/\,t^*, & p^* &= \rho^* u^{*2}, & (W\dot{\omega})^* &= \rho^* u^*/\,l^*,\\
q_m^* &= \rho^* u^*/\,l^*, & q_{p,x}^* &= \rho^* u^{*2}/\,l^*, & q_T^* &= \rho^* u^* c_p^* T^*/\,l^*,\\
\mu^* &= \rho^* u^* l^*, & \lambda^* &= \rho^* u^* l^* c_p^*, & h^* &= c_p^* T^*,\\
V^* &= u^*, & D^* &= l^{*2}/\,t^*, & D^{T*} &= \rho^* l^{*2}/\,t^*\,.
\end{aligned}
$$

Weitere Referenzgrößen werden für die Gleichungen der flüssigen Phase und die Quellterme eingeführt [6, 7]:

$$
\begin{aligned}
l_\mathrm{l}^* &= \widehat{R}_0, & t_\mathrm{l}^* &= \frac{\widehat{l}_\mathrm{l}^{*2}}{\widehat{\alpha}_\mathrm{l}}, & T_\mathrm{l}^* &= T^*, & \alpha_\mathrm{l}^* &= \frac{l^{*2}}{t^*},\\
\lambda_\mathrm{l}^* &= \alpha_\mathrm{l}^* \rho^* c_p^*, & \dot{m}^* &= \rho^* u^* l^{*2}, & \dot{q}^* &= \dot{m}^* c_p^* T^*, & M^* &= \rho^* l^{*3},\\
M_\mathrm{l}^* &= 4/\,3\pi l_\mathrm{l}^{*3} \widehat{\rho}_\mathrm{l}, & \rho_\mathrm{g,f}^* &= \rho^*, & D_\mathrm{g,f}^* &= l^{*2}/\,t^*, & n^* &= 1/\,l^{*3}\\
u_\mathrm{l}^* &= l^*/\,t^*, & L_\mathrm{v}^* &= c_p^* T^*, & \dot{m}_\mathrm{l}^* &= M_\mathrm{l}^*/\,t_\mathrm{l}^*\,.
\end{aligned}
$$

Auf die Darstellung des dimensionslosen Gleichungssystems wird hier verzichtet, da die Umformung der Gleichungen trivial ist.

III.3.3 Transformation der Gleichungen

Die Gasphasengleichungen werden einer Ähnlichkeitstransformation unterzogen, die das Ziel hat, die Erhaltungsgleichungen der Gasphase von zwei- auf eindimensionale Gleichungen zu reduzieren. Dazu wird angenommen, daß das Strömungsfeld ähnlich ist, d.h. daß die Erhaltungsgrößen unabhängig von der Ortskoordinate quer zur axialen Strömungsrichtung sind. Dadurch entfallen in der Spezies-, Impuls- und Energieerhaltungsgleichung die partiellen Ableitungen $\partial\,\phi\;/\;\partial\,x$.

Die Reduktion der Gasphasengleichungen von zwei- auf eindimensionale Gleichungen wird durch Einführung der Stromfunktion f erreicht [6, 7]:

$$
f = \int_0^\eta \frac{u}{x}\,\mathrm{d}\eta. \tag{III.3.5}
$$

In Gl. (III.3.5) ist η die Ähnlichkeitsvariable, die als dichtegewichtete axiale Ortskoordinate definiert ist [6, 7]:

$$
\eta = \int_0^y \rho\;\mathrm{d}y\,. \tag{III.3.6}
$$

Die Transformation der dimensionslosen Kontinuitätsgleichung führt auf einen einfachen Ausdruck für die axiale Geschwindigkeit:

$$
v = -\frac{1}{\rho}([\alpha+1]f + f_\mathrm{v}) \tag{III.3.7}
$$

mit

$$f_v = -\int_0^{\eta} \frac{1}{\rho}\, q_m \, \mathrm{d}\eta. \tag{III.3.8}$$

Nach Umformung der Spezies-, Impuls- und Energieerhaltungsgleichungen mit den dazugehörigen Randbedingungen aus Tabelle (III.3.1) in dimensionslose Gleichungen, liefert die Ähnlichkeitstransformation die in Tabelle (III.3.4) dargestellten Gleichungen, wobei die transformierte Kontinuitätsgleichung (III.3.7) in jede der drei Erhaltungsgleichungen eingesetzt wurde.

Für die Transformation der Gleichungen der flüssigen Phase im nächsten Schritt werden die folgenden Größen verwendet [6, 7]:

$$\xi_\mathrm{s} = \frac{\widehat{R}}{\widehat{R}_0}, \qquad \mathrm{d}\tau = \frac{\mathrm{d}\widehat{t}}{\xi_\mathrm{s} t_\mathrm{l}^*}, \qquad \xi = \frac{\widehat{r}}{\widehat{R}} \qquad \text{sowie} \qquad \mathrm{d}\eta = \rho \; \mathrm{d}y_\mathrm{l}\,. \tag{III.3.9}$$

ξ_s ist der dimensionslose Tröpfchenradius, τ eine dimensionslose Zeit, ξ die dimensionslose radiale Ortskoordinate, die ihren Ursprung im Zentrum eines Tröpfchens hat, und η die transformierte, mit der Dichte gewichtete axiale Position eines Tröpfchens im Strömungsfeld der Gegenstromkonfiguration.

Die transformierten Gleichungen der flüssigen Phase sind in Tabelle (III.3.5) zusammengefaßt.

Wegen der Annahme der Ähnlichkeit sind in der Tröpfchen-Impulsgleichung für die axiale Strömungsrichtung alle Koeffizienten bis auf den Tröpfchenradius $\widehat{R}$ unabhängig von $\widehat{x}$. Wird auch die Änderung des Tröpfchenradius mit der Zeit bei Bewegung durch das Strömungsfeld als unabhängig von $\widehat{x}$ angenommen, bedeutet dies, daß alle Tröpfchen die gleiche $\widehat{y}$-Trajektorie haben. Die Bedingung $\widehat{R} \neq f(\widehat{x})$ ist dann erfüllt, wenn die Randbedingungen der $\widehat{y}$-Impulsgleichung in Tabelle (III.3.2) von $\widehat{x}$ unabhängig sind. Sie werden deshalb wie in Tabelle (III.3.5) angegeben gewählt.

Nachdem die dimensionsbehafteten Quellterme der Tabelle (III.3.3) mit den bereits eingeführten Referenzgrößen in dimensionslose Quellterme umgeformt sind, erfolgt deren Transformation unter Benutzung der Gln. (III.3.5,III.3.6,III.3.9).

Für die dimensionslose Verdampfungsgeschwindigkeit $\dot{m}$ ergibt sich nach Transformation von Gl. (II.4.22) [6, 7]

$$\dot{m} = -3 \frac{M_\mathrm{l}^*}{M^*} \frac{t^*}{t_\mathrm{l}^*} \xi_\mathrm{s} \frac{\mathrm{d}\xi_\mathrm{s}}{\mathrm{d}\tau}\,. \tag{III.3.10}$$

Aus der Beziehung $\widehat{u}_\mathrm{l} = \mathrm{d}\widehat{x}_\mathrm{l} / \,\mathrm{d}\widehat{t}$ wird die folgende Gleichung für die dimensionslose axiale Tröpfchengeschwindigkeit hergeleitet:

$$u_\mathrm{l} = \frac{t^*}{t_\mathrm{l}^*} \frac{1}{\xi_\mathrm{s}} \frac{x_\mathrm{l}}{s} \frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}\tau}\,. \tag{III.3.11}$$

Kontinuitätsgleichung:

$$v = -\frac{1}{\rho}([\alpha+1]f + f_v) \qquad \text{mit} \quad f_v = -\int_0^\eta \frac{1}{\rho}\, q_m \,\mathrm{d}\eta$$

mit der Randbedingung

$$f(\eta = -\infty) = f_{-\infty}$$

Bilanzen für die Massenanteile der chemischen Spezies:

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}(\rho\, V_{\mathrm{i}\eta}) + ([\alpha+1]f + f_v)\frac{\mathrm{d}Y_\mathrm{i}}{\mathrm{d}\eta} = -\frac{W_\mathrm{i}\dot{\omega}_\mathrm{i}}{\rho} - (\delta_\mathrm{i} - Y_\mathrm{i})\frac{q_m}{\rho}$$

mit den Randbedingungen

$$Y_\mathrm{i}(\eta = -\infty) = Y_{\mathrm{i},-\infty} \qquad \text{und} \qquad Y_\mathrm{i}(\eta = +\infty) = Y_{\mathrm{i},+\infty}$$

Impulserhaltungsgleichung:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}\left(\rho\,\mu\frac{\mathrm{d}f'}{\mathrm{d}\eta}\right) + ([\alpha+1]f + f_v)f'' = (f')^2 - \frac{1}{\rho} - \frac{q_{p,x} - u q_m}{\rho\, x}$$

mit den Randbedingungen

$$f'(\eta = -\infty) = 1 \qquad \text{und} \qquad f'(\eta = +\infty) = \sqrt{\frac{\rho_{-\infty}}{\rho_{+\infty}}}$$

Energieerhaltungsgleichung:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}\left(\lambda\rho\,\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}\eta}\right) + c_p([\alpha+1]f + f_v)\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}\eta} = \rho\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} V_{\mathrm{i}\eta} c_{p\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}\eta} + \frac{1}{\rho}\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} W_\mathrm{i}\dot{\omega}_\mathrm{i}\, h_\mathrm{i} - \frac{q_T}{\rho}$$

mit den Randbedingungen

$$T(\eta = -\infty) = 1 \qquad \text{und} \qquad T(\eta = +\infty) = T_{+\infty}$$

sowie der Diffusions-Geschwindigkeitskomponente

$$V_{\mathrm{i},\eta} = -\frac{\rho\, D_\mathrm{i}}{\overline{W}}\frac{\partial\,(\overline{W} Y_\mathrm{i})}{\partial\,\eta} - \frac{D_\mathrm{i}^\mathrm{T}}{T}\frac{\partial\, T}{\partial\,\eta}$$

Ideales Gasgesetz:

$$\rho = \frac{\overline{W}}{T}$$

Tabelle III.3.4: Die transformierten, dimensionslosen Erhaltungsgleichungen der Gasphase, entnommen einer Veröffentlichung von Gutheil [8].

Tröpfchenverdampfung:

$$\frac{\mathrm{d}\xi_\mathrm{s}}{\mathrm{d}\tau} = -\frac{1}{9}\, a\, \rho_{\,\mathrm{g,f}} D_{\mathrm{g,f}}\, \widetilde{Sh}\, \ln(1 + B_\mathrm{M})$$

mit der Randbedingung

$$\xi_\mathrm{s}(\tau = 0) = 1$$

Tröpfchenaufheizung:

$$\frac{\partial\, T_\mathrm{l}}{\partial\, \tau} = \left(\frac{2}{\xi_\mathrm{s}\xi} + \frac{\xi}{\xi_\mathrm{s}}\frac{\mathrm{d}\xi_\mathrm{s}}{\mathrm{d}\tau}\right)\frac{\partial\, T_\mathrm{l}}{\partial\, \xi} + \frac{1}{\xi_\mathrm{s}}\frac{\partial^{\,2} T_\mathrm{l}}{\partial\, \xi^2}$$

mit den Randbedingungen

$$\left.\frac{\partial\, T_\mathrm{l}}{\partial\, \xi}\right|_{\xi=0} = 0$$

$$\left.\frac{\partial\, T_\mathrm{l}}{\partial\, \xi}\right|_{\xi=\xi_\mathrm{s}} = \frac{1}{4\pi\lambda_\mathrm{l} b\, \xi_\mathrm{s}}\dot{q}$$

Tröpfchenbewegung in radialer und axialer Richtung:

$$\frac{\mathrm{d}^2 x_\mathrm{l}}{\mathrm{d}\tau^2} - \frac{1}{\xi_\mathrm{s}}\left(\frac{\mathrm{d}\xi_\mathrm{s}}{\mathrm{d}\tau} - a\mu\right)\frac{\mathrm{d}x_\mathrm{l}}{\mathrm{d}\tau} = ab\,\mu\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\eta}x_\mathrm{l} + b^{\,2}\xi_\mathrm{s}^2 g_x$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\eta}{\mathrm{d}\tau^2} + \rho\,\frac{\mathrm{d}\rho^{\,-1}}{\mathrm{d}\tau}\frac{\mathrm{d}\eta}{\mathrm{d}\tau} - \frac{1}{\xi_\mathrm{s}}\left(\frac{\mathrm{d}\xi_\mathrm{s}}{\mathrm{d}\tau} - a\mu\right)\frac{\mathrm{d}\eta}{\mathrm{d}\tau} = -ab\,\mu(f + f_v) + \rho\, b^{\,2}\xi_\mathrm{s} g_\eta$$

mit den Randbedingungen

$$x_\mathrm{l}(\tau = 0) = x_{\mathrm{l},0}$$
$$\eta(\tau = 0) = \eta_{\mathrm{l},0}$$
$$x_\mathrm{l}'(\tau = 0) = u_{\mathrm{l},0}$$
$$\eta_\mathrm{l}'(\tau = 0) = \eta_{\mathrm{l},0}'$$

Tröpfchenanzahldichte:

$$n = n_0\frac{s_0\,\eta_{\mathrm{l},0}'}{s\,\eta_\mathrm{l}'}$$

Konstanten:

$$a = 6\pi\frac{t_\mathrm{l}^*}{t^*}\frac{M^*}{M_\mathrm{l}^*}\frac{l_\mathrm{l}^*}{l^*}$$
$$b = \frac{t_\mathrm{l}^*}{t^*}$$

Tabelle III.3.5: Die transformierten, dimensionslosen Gleichungen der flüssigen Phase, entnommen einer Veröffentlichung von Gutheil [8].

Gesamtmasse:

$$-\frac{q_m}{\rho} = \sum_{\mathrm{d}=1}^{\mathrm{D}} \left(3 \frac{M_\mathrm{l}^*}{M^*} \frac{t^*}{t_\mathrm{l}^*} \frac{n}{\rho} \xi_\mathrm{s} \frac{\mathrm{d}\xi_\mathrm{s}}{\mathrm{d}\tau} \right)_\mathrm{d}$$

Impuls:

$$-\frac{q_{p,x} - u q_m}{\rho\, x} = \sum_{\mathrm{d}=1}^{\mathrm{D}} \left(\frac{M_\mathrm{l}^*}{M^*} \left(\frac{t^*}{t_\mathrm{l}^*} \right)^2 \frac{n}{\rho\, s} \left[2 \frac{\mathrm{d}\xi_\mathrm{s}}{\mathrm{d}\tau} \frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}\tau} + \xi_\mathrm{s} \frac{\mathrm{d}^2 s}{\mathrm{d}\tau^2} - 3 \frac{t_\mathrm{l}^*}{t^*} \xi_\mathrm{s} f' s \frac{\mathrm{d}\xi_\mathrm{s}}{\mathrm{d}\tau} \right] \right)_\mathrm{d}$$

Energie:

$$-\frac{q_T}{\rho} = \sum_{\mathrm{d}=1}^{\mathrm{D}} \left(\frac{M_\mathrm{l}^*}{M^*} \frac{t^*}{t_\mathrm{l}^*} \frac{\widehat{\dot{m}}}{\dot{m}_\mathrm{l}^*} \frac{n}{\rho} \frac{\widehat{c}_{p,\mathrm{F}}}{c_p^*} \left(T - T_{\mathrm{l,s}} \frac{T_\mathrm{l}^*}{T^*} \right) \frac{1 + B_\mathrm{T}}{B_\mathrm{T}} \right)_\mathrm{d}$$

Tabelle III.3.6: Die transformierten, dimensionslosen Quellterme des Phasenaustauschs, entnommen einer Veröffentlichung von Gutheil [8].

Die dimensionslose Beschleunigung eines Tröpfchens in axialer Richtung ist

$$\frac{\mathrm{d}u_\mathrm{l}}{\mathrm{d}t} = \frac{t^*}{t_\mathrm{l}^*} \frac{1}{\xi_\mathrm{s}} \frac{x_\mathrm{l}}{s} \left[\frac{\mathrm{d}^2 s}{\mathrm{d}\tau^2} - \frac{1}{\xi_\mathrm{s}} \frac{\mathrm{d}\xi_\mathrm{s}}{\mathrm{d}\tau} \frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}\tau} \right] . \tag{III.3.12}$$

Nach Einsetzen der Gln. (III.3.10,III.3.11,III.3.12) in die Gleichungen der Tabelle (III.3.3) erhält man die in Tabelle (III.3.6) aufgeführten Terme für die transformierten, dimensionslosen Quellterm des Phasenaustauschs.

III.4 Analyse der Randbedingungen

III.4.1 Stöchiometrie

Wesentlichen Einfluß auf die Struktur einer laminaren Sprayflamme hat die gewählte Stöchiometrie auf der Sprayseite der Gegenstromkonfiguration. Das Verhältnis von eingedüstem Brennstoff- zu Oxidatormassenfluß ist daher eine wichtige Größe. Dieses Verhältnis wird durch Angabe des Äquivalenzverhältnisses

$$E = \frac{\frac{n_{\mathrm{Br}}}{n_{\mathrm{Ox}}}}{\left(\frac{n_{\mathrm{Br}}}{n_{\mathrm{Ox}}}\right)_{\mathrm{st}}} \tag{III.4.1}$$

vorgegeben. Dabei bezeichnet n_{i} die Stoffmenge. Ist das Äquivalenzverhältnis größer Eins, liegt Brennstoff im Überschuß vor, die Mischung ist fett, ist das Äquivalenzverhältnis gleich Eins, handelt es sich um eine stöchiometrische Mischung, ist das Äquivalenzverhältnis kleiner Eins, mangelt es an Brennstoff, die Mischung ist mager.

Wendet man diese Definition des Äquivalenzverhältnisses auf das LOX/Wasserstoff-System bzw. das Methanolspray/Luft-System an, erhält man für das Verhältnis von Spray- zu Trägergas-Massenfluß die Beziehungen

$$\frac{\dot{m}_{\mathrm{O_2,l}}}{\dot{m}_{\mathrm{H_2}}} = \nu_{\mathrm{st}} \frac{W_{\mathrm{O_2}}}{W_{\mathrm{H_2}}} \frac{1}{E} \approx \frac{8}{E}, \tag{III.4.2}$$

$$\frac{\dot{m}_{\mathrm{CH_3OH,l}}}{\dot{m}_{\mathrm{O_2}}} = \frac{1}{\nu_{\mathrm{st}}} \frac{W_{\mathrm{CH_3OH}}}{W_{\mathrm{O_2}}} E \approx \frac{2}{3} E, \tag{III.4.3}$$

mit den stöchiometrischen Verhältnissen der Molmengen $\nu_{\mathrm{st}} = (n_{\mathrm{O_2}}/\, n_{\mathrm{H_2}})_{\mathrm{st}} = 0{,}5$ bzw. $\nu_{\mathrm{st}} = (n_{\mathrm{O_2}}/\, n_{\mathrm{CH_3OH}})_{\mathrm{st}} = 1{,}5$.

Während bei dem Sauerstoffspray/Wasserstoff-System das Massenflußverhältnis umgekehrt proportional zum Äquivalenzverhältnis fällt, steigt es beim Methanolspray/Luft-System linear an. Um bei LOX/H_2-Flammen ein Äquivalenzverhältnis von Eins einzustellen, muß deshalb ein im Verhältnis zum Gasmassenfluß sehr viel größerer Spraymassenfluß als bei Methanolspray/Luft-Flammen eingedüst werden. Das ist der Grund, weshalb Flammenstrukturen beider Systeme gerade im Bereich kleiner Äquivalenzverhältnisse nicht vergleichbar sind.

III.4.2 Spraydichte

In diesem Unterkapitel wird eine Gleichung hergeleitet, die die Berechnung der Tröpfchenanzahldichte n in Abhängigkeit der Massenbrüche Y_{i} und des Äquivalenzverhältnisses E am Einströmrand auf der Sprayseite der Gegenstromkonfiguration (Index '$-\infty$')

ermöglicht. Durch Einführung der Größe

$$z = \frac{\dot{m}_{\mathrm{O_2,l}}}{\dot{m}_{\mathrm{O_2,l}} + \dot{m}_{\mathrm{O_2,g}}} \tag{III.4.4}$$

wird in den folgenden Gleichungen dem allgemeinen Fall Rechnung getragen, daß gasförmiger Sauerstoff dem Trägergas beigemengt ist, welches dann eine höhere Temperatur als das Sauerstoffspray haben muß. Zudem werden die Gleichungen der besseren Übersichtlichkeit wegen nur für ein monodisperses Spray formuliert.

Die Tröpfchenanzahldichte ist definiert als

$$n = \frac{\text{Anzahl Tröpfchen}}{V} \tag{III.4.5}$$

$$= \frac{\dot{m}_{\mathrm{O_2,l}}}{\dot{m}} \frac{\rho}{\rho_{\mathrm{O_2,l}}} \frac{1}{4/\,3\pi R^3}. \tag{III.4.6}$$

Dabei ist V das Gasvolumen, $\dot{m}$ der Trägergas-Massenfluß und ρ seine Dichte, R ist der Tröpfchenradius. Nach Gl. (III.4.2) unter zusätzlicher Berücksichtigung des Massenflusses $\dot{m}_{\mathrm{O_2,g}}$ ist das Äquivalenzverhältnis am Einströmrand

$$E_{-\infty} = \nu_{\mathrm{st}} \left(\frac{\dot{m}_{\mathrm{H_2}}}{\dot{m}_{\mathrm{O_2,l}} + \dot{m}_{\mathrm{O_2,g}}} \right)_{-\infty} \frac{W_{\mathrm{O_2}}}{W_{\mathrm{H_2}}}. \tag{III.4.7}$$

Verknüpft man Gl. (III.4.7) mit der Größe z erhält man für den LOX-Massenfluß

$$\dot{m}_{\mathrm{O_2,l},-\infty} = \nu_{\mathrm{st}} \frac{z_{-\infty}}{E_{-\infty}} \frac{W_{\mathrm{O_2}}}{W_{\mathrm{H_2}}} \dot{m}_{\mathrm{H_2},-\infty}. \tag{III.4.8}$$

Die letzte Beziehung in Gl. (III.4.6) eingesetzt, liefert schließlich die gesuchte Gleichung für die Tröpfchenanzahldichte

$$n_{-\infty} = \nu_{\mathrm{st}} \frac{z_{-\infty}}{E_{-\infty}} \frac{W_{\mathrm{O_2}}}{W_{\mathrm{H_2}}} \frac{\rho_{-\infty}}{\rho_{\mathrm{O_2,l},-\infty}} \frac{Y_{\mathrm{H_2},-\infty}}{4/\,3\pi R_0^3}. \tag{III.4.9}$$

Abbildung (III.4.1) zeigt die Tröpfchenanzahldichte $n_{-\infty}$ in Abhängigkeit von Druck und Tröpfchengröße für $E_{-\infty} = 1$, $z_{-\infty} = 1$, $Y_{\mathrm{H_2},-\infty} = 1$, $T_{\mathrm{l},0}$=80 K und T= 100 K. Bei einem Druck von 3 MPa und einem Tröpfchenradius von 25 μm beträgt danach die Tröpfchenanzahldichte $n_{-\infty}$=0,74 $\cdot$ 10^{12} m^{-3}.

Die Spraydichte ist definiert als das Verhältnis von Spray- zu Gesamt-Volumenfluß (vergl. Gln. (III.4.8,III.4.9)):

$$\left(\frac{\dot{V}_{\mathrm{O_2,l}}}{\dot{V}_{\mathrm{O_2,l}} + \dot{V}_{\mathrm{H_2}}} \right)_{-\infty} = \left(1 + \left(\frac{4}{3} \pi R_0^3 n_{-\infty} / \, Y_{\mathrm{H_2},-\infty} \right)^{-1} \right)^{-1} \tag{III.4.10}$$

$$= \left(1 + \left(\nu_{\mathrm{st}} \frac{z_{-\infty}}{E_{-\infty}} \frac{W_{\mathrm{O_2}}}{W_{\mathrm{H_2}}} \frac{\rho_{-\infty}}{\rho_{\mathrm{O_2,l},-\infty}} \right)^{-1} \right)^{-1}. \tag{III.4.11}$$

Einsetzen der oben verwendeten Parameter (p=3 MPa, $E_{-\infty} = 1$, $z_{-\infty} = 1$, $Y_{\mathrm{H_2},-\infty} = 1$, $T_{\mathrm{l},0}$=80 K, T= 100 K) in Gl. (III.4.11) ergibt eine Spraydichte von 4,6 %. Damit ist es noch gerechtfertigt, das Volumen der flüssigen Phase gegenüber dem Volumen der Gasphase zu vernachlässigen, d.h. das Spray als dünn zu betrachten.

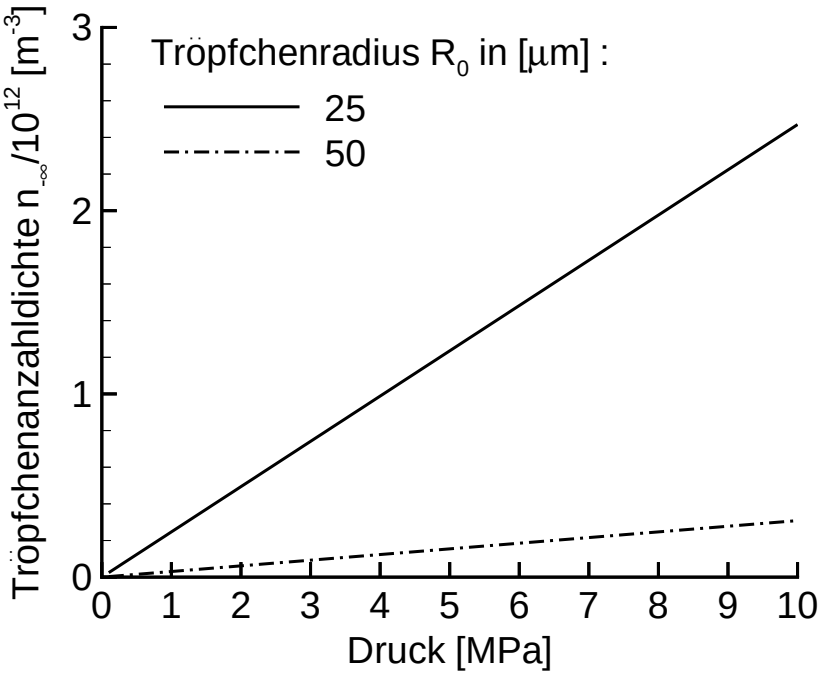

Abbildung III.4.1: Tröpfchenanzahldichte in Abhängigkeit von Druck und Tröpfchengröße; Bedingungen siehe Text.

III.5 Das numerische Lösungsverfahren

III.5.1 Diskretisierung der Differentialgleichungen

Nach der mathematischen Modellierung werden die partiellen Differentialgleichungen (PDEs – *partial differential equations*) des Gesamtgleichungssystems nach der Methode der finite Differenzen diskretisiert mit dem Ziel, ein System von algebraischen Gleichungen für die Erhaltungsgrößen an den Gitterpunkten im Strömungsfeld zu erhalten.

Dazu ist es erforderlich, ein Gitter auf das Berechnungsgebiet zu legen, um anschließend an jedem Gitterpunkt die partiellen Ableitungen jeder PDE des Gleichungssystems durch approximierte Terme zu ersetzen. Das Ergebnis ist eine algebraische Gleichung an jedem Gitterpunkt, in der die jeweilige Erhaltungsgröße ϕ an diesem und an einer bestimmten Anzahl von benachbarten Gitterpunkten als Unbekannte auftreten.

Alle Differentialgleichungen des zu lösenden Gesamtgleichungssystems sind maximal zweiter Ordnung. Sie haben folgende Form:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = A\frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} + B\frac{\partial \phi}{\partial \eta} + C\phi + D\,. \tag{III.5.1}$$

Ziel der Berechnung ist die Ermittlung der stationären Lösung des Gleichungssystems.

Die Ortsableitungen erster und zweiter Ordnung in Gl. (III.5.1) werden hier durch eine approximierende Parabel $\phi = a\eta^2 + b\eta + c$ beschrieben. Die Koeffizienten a, b und c lassen sich durch Auswertung der Parabel an drei benachbarten Punkten eindeutig bestimmen [44]. Dazu wird das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \phi_{i+1} &= a_i\eta_{i+1}^2 + b_i\eta_{i+1} + c_i \\ \phi_i &= a_i\eta_i^2 + b_i\eta_i + c_i \\ \phi_{i-1} &= a_i\eta_{i-1}^2 + b_i\eta_{i-1} + c_i\,. \end{aligned} \tag{III.5.2}$$

gelöst, mit dem Ziel, die Koeffizienten a_i und b_i für die Bestimmung der Ableitungen

$$\left.\frac{\partial \phi}{\partial \eta}\right|_{\eta_i} = 2a_i\eta_i + b_i \tag{III.5.3}$$

$$\left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2}\right|_{\eta_i} = 2a_i \tag{III.5.4}$$

am Ort η_i zu berechnen. Die Lösung des Gleichungssystems (III.5.2) ergibt

$$a_i = \frac{\frac{1}{\Delta\eta_i}\phi_{i-1} - \left(\frac{1}{\Delta\eta_i} + \frac{1}{\Delta\eta_{i+1}}\right)\phi_i + \frac{1}{\Delta\eta_{i+1}}\phi_{i+1}}{\Delta\eta_i + \Delta\eta_{i+1}} \tag{III.5.5}$$

$$b_i = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta\eta_i} - a_i(\eta_{i-1} + \eta_i)\,. \tag{III.5.6}$$

Dabei gilt die Notation $\Delta\eta_{+1} = \eta_{+1} - \eta$ für den Gitterabstand. Werden die Koeffizienten a_{i} und b_{i} in Gl. (III.5.3) eingesetzt, erhält man die folgende Approximation für die erste Ableitung:

$$\left.\frac{\partial\,\phi}{\partial\,\eta}\right|_{\eta_{\mathrm{i}}} = G_1 \frac{\phi_{\ \mathrm{i}} - \phi_{\ \mathrm{i-1}}}{\Delta\eta} + G_2 \frac{\phi_{\ \mathrm{i+1}} - \phi_{\ \mathrm{i}}}{\Delta\eta_{+1}} \tag{III.5.7}$$

mit den Gewichtungsfaktoren

$$G_1 = \frac{\Delta\eta_{+1}}{\Delta\eta + \Delta\eta_{+1}}\,, \tag{III.5.8}$$

$$G_2 = \frac{\Delta\eta}{\Delta\eta + \Delta\eta_{+1}}\,. \tag{III.5.9}$$

Bei Verwendung eines äquidistanten Gitters nehmen die Gewichtungsfaktoren G_1 und G_2 den Wert 1/2 an. In diesem Fall ist Gl. (III.5.7) eine zentrale Differenz, d.h. eine Gerade mit der Steigung der ersten Ableitung am Ort η läuft durch die Nachbarpunkte η_{-1} und η_{+1} (siehe Abb. (III.5.1)).

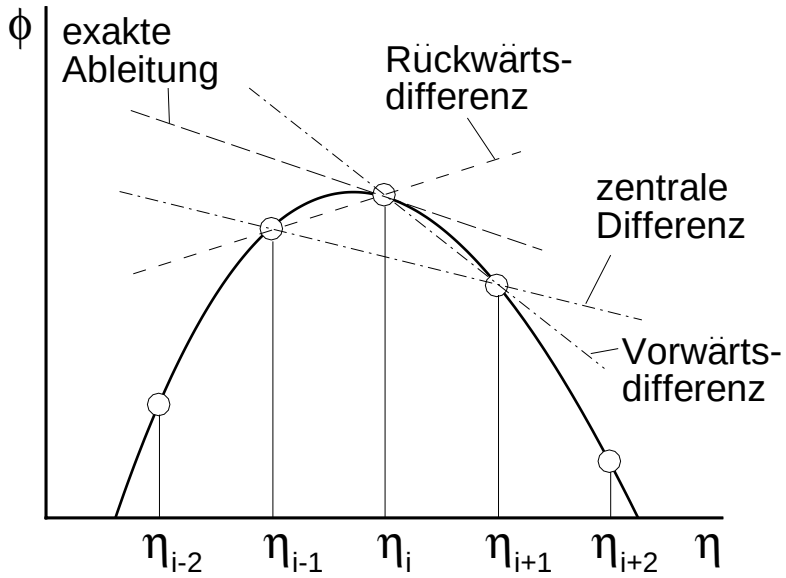

Abbildung III.5.1: Approximation der ersten Ableitung.

Wie später gezeigt wird, ist der Einsatz eines äquidistanten Gitters aufgrund großer Gradienten in den Profilen der Erhaltungsgrößen nicht möglich. Im Gegenstrom-Computerprogramm wird deshalb aus Gründen der numerischen Stabilität die von Gl. (III.5.7)

abgeleitete Näherung der ersten Ableitung

$$\left.\frac{\partial\,\phi}{\partial\,\eta}\right|_{\eta_\mathrm{i}} = \frac{1}{2}\frac{\phi_{\ \mathrm{i}} - \phi_{\ \mathrm{i-1}}}{\Delta\eta} + \frac{1}{2}\frac{\phi_{\ \mathrm{i+1}} - \phi_{\ \mathrm{i}}}{\Delta\eta_{+1}} \tag{III.5.10}$$

$$= -\frac{1}{2}\frac{1}{\Delta\eta}\phi_{\ \mathrm{i-1}} + \left(\frac{1}{\Delta\eta} - \frac{1}{\Delta\eta_{+1}}\right)\phi_{\ \mathrm{i}} + \frac{1}{2}\frac{1}{\Delta\eta_{+1}}\phi_{\ \mathrm{i+1}} \tag{III.5.11}$$

$$= K_{1,\mathrm{i}}\,\phi_{\ \mathrm{i-1}} + K_{2,\mathrm{i}}\,\phi_{\ \mathrm{i}} + K_{3,\mathrm{i}}\,\phi_{\ \mathrm{i+1}} \tag{III.5.12}$$

angewandt, die variable Gitterabstände berücksichtigt.

Die Verwendung der zentralen Differenz für konvektive Terme kann Probleme bereiten. Es kommt leicht zu Instabilitäten und zu Überschwingern in den Profilen der abhängigen Variablen [45]. Deshalb wird in diesem Fall in Abhängigkeit von dem Vorzeichen des Faktors B_i^t in Gl. (III.5.1) die Vorwärts- bzw. Rückwärtsdifferenz als Diskretisierungsmethode benutzt, vergl. Abb. (III.5.1).

$$B_\mathrm{i}^t > 0 \Rightarrow \text{Vorwärtsdifferenz}: \quad \left.\frac{\partial\,\phi}{\partial\,\eta}\right|_{\eta_\mathrm{i}} = \frac{\phi_{\ \mathrm{i+1}} - \phi_{\ \mathrm{i}}}{\Delta\eta_{+1}} \tag{III.5.13}$$

$$= -\frac{1}{\Delta\eta_{+1}}\phi_{\ \mathrm{i}} + \frac{1}{\Delta\eta_{+1}}\phi_{\ \mathrm{i+1}} \tag{III.5.14}$$

$$= K_{2,\mathrm{i}}\,\phi_{\ \mathrm{i}} + K_{3,\mathrm{i}}\,\phi_{\ \mathrm{i+1}} \tag{III.5.15}$$

$$B_\mathrm{i}^t < 0 \Rightarrow \text{Rückwärtsdifferenz}: \quad \left.\frac{\partial\,\phi}{\partial\,\eta}\right|_{\eta_\mathrm{i}} = \frac{\phi_{\ \mathrm{i}} - \phi_{\ \mathrm{i-1}}}{\Delta\eta} \tag{III.5.16}$$

$$= -\frac{1}{\Delta\eta}\phi_{\ \mathrm{i-1}} + \frac{1}{\Delta\eta}\phi_{\ \mathrm{i}} \tag{III.5.17}$$

$$= K_{1,\mathrm{i}}\,\phi_{\ \mathrm{i-1}} + K_{2,\mathrm{i}}\,\phi_{\ \mathrm{i}}\,. \tag{III.5.18}$$

Die zweite Ableitung ergibt sich nach Einsetzen des Koeffizienten a_i (Gl. (III.5.5)) in Gl. (III.5.4):

$$\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial\,\eta^2}\right|_{\eta_\mathrm{i}} = \frac{2}{\Delta\eta(\Delta\eta + \Delta\eta_{+1})}\phi_{\ \mathrm{i-1}} - \frac{2}{\Delta\eta\Delta\eta_{+1}}\phi_{\ \mathrm{i}} + \frac{2}{\Delta\eta_{+1}(\Delta\eta + \Delta\eta_{+1})}\phi_{\ \mathrm{i+1}} \tag{III.5.19}$$

$$= K_{4,\mathrm{i}}\,\phi_{\ \mathrm{i-1}} + K_{5,\mathrm{i}}\,\phi_{\ \mathrm{i}} + K_{6,\mathrm{i}}\,\phi_{\ \mathrm{i+1}}\,. \tag{III.5.20}$$

In Gl. (III.5.1) wird schließlich die Ableitung der Erhaltungsgröße ϕ nach der Zeit mit dem folgenden Ausdruck angenähert:

$$\left.\frac{\partial\,\phi}{\partial\,t}\right|_{t+\Delta t} = \frac{\phi_{\ \mathrm{i}}^{\ t+\Delta t} - \phi_{\ \mathrm{i}}^{\ t}}{\Delta t}\,. \tag{III.5.21}$$

Nachdem Approximationen für alle Ableitungen der PDE eingeführt sind, können diese in Gl. (III.5.1) eingesetzt werden. Es ergibt sich das folgende Gleichungssystem

$$\alpha_{\mathrm{i}}^{t}\,\phi_{\ \mathrm{i-1}}^{\ t+\Delta t} + \beta_{\mathrm{i}}^{t}\,\phi_{\ \mathrm{i}}^{\ t+\Delta t} + \gamma_{\mathrm{i}}^{t}\,\phi_{\ \mathrm{i+1}}^{\ t+\Delta t} = \delta_{\ \mathrm{i}}^{\ t} \tag{III.5.22}$$

mit

$$\alpha_{\mathrm{i}}^{t} = A_{\mathrm{i}}^{t}\,K_{4,\mathrm{i}} + B_{\mathrm{i}}^{t}\,K_{1,\mathrm{i}} \tag{III.5.23}$$

$$\beta_{\mathrm{i}}^{t} = A_{\mathrm{i}}^{t}\,K_{5,\mathrm{i}} + B_{\mathrm{i}}^{t}\,K_{2,\mathrm{i}} + C_{\mathrm{i}}^{t} - \frac{1}{\Delta t} \tag{III.5.24}$$

$$\gamma_{\mathrm{i}}^{t} = A_{\mathrm{i}}^{t}\,K_{6,\mathrm{i}} + B_{\mathrm{i}}^{t}\,K_{3,\mathrm{i}} \tag{III.5.25}$$

$$\delta_{\ \mathrm{i}}^{\ t} = -\left(\frac{\phi_{\ \mathrm{i}}^{\ t}}{\Delta t} + D_{\mathrm{i}}^{t}\right). \tag{III.5.26}$$

In Matrix-Schreibweise kann Gl. (III.5.22) geschrieben werden als

$$\begin{pmatrix} \beta_2^t & \gamma_2^t & 0 & & & & \\ & \alpha_3^t & \beta_3^t & \gamma_3^t & & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & & \alpha_{\mathrm{m-2}}^t & \beta_{\mathrm{m-2}}^t & \gamma_{\mathrm{m-2}}^t \\ & & & & & 0 & \alpha_{\mathrm{m-1}}^t & \beta_{\mathrm{m-1}}^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{\ 2}^{\ t+\Delta t} \\ \phi_{\ 3}^{\ t+\Delta t} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \phi_{\ \mathrm{m-2}}^{\ t+\Delta t} \\ \phi_{\ \mathrm{m-1}}^{\ t+\Delta t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_{\ 2}^{\ t} - \alpha_2^t \phi_{\ 1}^{\ t+\Delta t} \\ \delta_{\ 3}^{\ t} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \delta_{\ \mathrm{m-2}}^{\ t} \\ \delta_{\ \mathrm{m-1}}^{\ t} - \gamma_{\mathrm{m-1}}^t \phi_{\ \mathrm{m}}^{\ t+\Delta t} \end{pmatrix}.$$

Es handelt sich um ein tridiagonales lineares Gleichungssystem zur Bestimmung des Lösungsvektors $(\phi_{\ 2}^{\ t+\Delta t}, ..., \phi_{\ \mathrm{m-1}}^{\ t+\Delta t})^{\mathrm{T}}$. Es werden die Koeffizienten A, B, C, D und a, b, c, d zur Zeit t bestimmt und die Ortsableitungen der Erhaltungsgrößen zur Zeit $t + \Delta t$.

Die Lösung des Gleichungssystems ist nur möglich, wenn Randbedingungen, d.h. Werte für $\phi_{\ 1}^{\ t+\Delta t}$ und $\phi_{\ \mathrm{m}}^{\ t+\Delta t}$ bekannt sind. Die Randwerte sind entweder als fixe Größen (z.B. Randbedingungen der Spezies-, Impuls- und Energieerhaltugsgleichungen der Gasphase) oder indirekt in Form eines Gradienten (Randbedingung der Energiegleichung für die Berechnung der Tröpfchenaufheizung) vorzugeben.

Zur Lösung des Gleichungssystems (III.5.22) wird der Thomas-Algorithmus [46] benutzt, bei dem die tridiagonale Matrix in eine untere und obere Matrix zerlegt und das lineare Gleichungssystem in effizienter Weise durch Vorwärts- und Rückwärtssubstitution gelöst wird.

III.5.2 Das adaptive Berechnungsgitter

Berechnungen von flüssig Sauerstoff/Wasserstoff Gegenstrom-Sprayflammen haben gezeigt, daß die Gradienten der Erhaltungsgrößen am Ort einer Flammenfront sehr steil sind. Deshalb ist die Verwendung eines adaptiven Gitters notwendig, welches an Stellen großer Gradienten stark verfeinert ist. Die obere linke Hälfte der Abb. (III.5.2) zeigt den

typischen Verlauf eines Temperaturprofils in einer Gegenstrom-Sprayflamme mit zwei Reaktionszonen und dazu im unteren linken Teil der Abbildung den lokal variierenden Gitterabstand.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Programmmodul entwickelt, das die Berechnung des adaptiven Gitters in Abhängigkeit von dem aktuellen Ort eines Temperaturpeaks berechnet. Damit ein glatter Übergang zwischen den groben und feinen Gitterbereichen gewährleistet ist, wird, wie in der rechten Hälfte von Abb. (III.5.2) gezeigt, die Kurve für den Gitterabstand aus Parabelstücken zusammengesetzt. Weiterhin müssen der maximal erlaubte Gitterabstand, die minimale und maximale erlaubte Änderung des Gitterabstandes zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten sowie der Grad der Gitterverfeinerung vorgegeben werden.

Da sich insbesondere zu Beginn einer neuen Rechnung alle Profile in axialer Richtung verschieben, ist es erforderlich, nach einigen Iterationen das Gitter neu zu berechnen. Somit ist auch die Wiederholungsrate der Gitterberechnung anzugegeben. Bei Verschiebung des Gitters werden die Profile auf das neue Gitter durch lineare Interpolation umgerechnet.

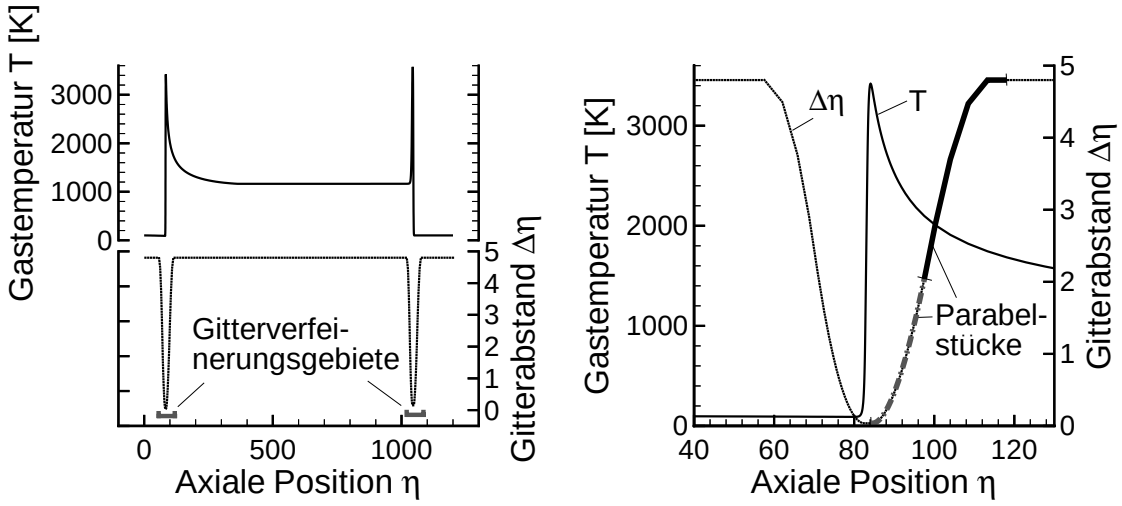

Abbildung III.5.2: Das adaptive Berechnungsgitter. Links oben Darstellung des Temperaturverlaufs, links unten des Gitterabstandes im gesamten Berechnungsgebiet, rechts eine Ausschnittsvergrößerung der linken Abbildung.

III.5.3 Numerische Lösung des Gleichungssystems

In Tabelle (III.5.3) ist die numerische Lösung des Gesamt-Gleichungssystems schematisch dargestellt. Zu Beginn einer Rechnung erfolgt die Initialisierung der Startwerte. Entweder werden Startwerte abgeschätzt oder das Ergebnis einer vorgehenden Rechnung als Startwertedatensatz vorgegeben. Sofern erforderlich, wird anschließend ein neues Berechnungsgitter generiert, das in den Bereichen großer Gradienten verfeinert ist. In den nächsten beiden Schritten werden die Gleichungen der flüssigen Phase in Lagrange-

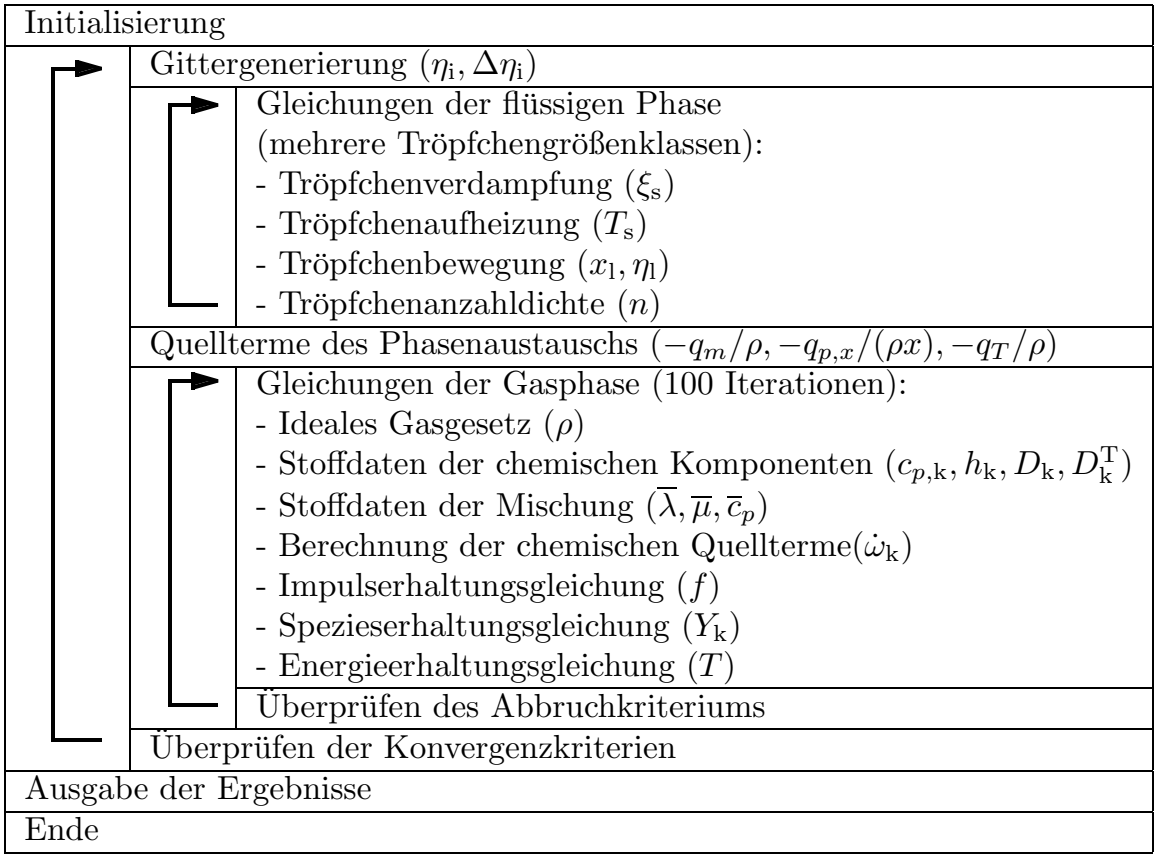

Abbildung III.5.3: Schematische Darstellung der Lösung des Gesamt-Gleichungssystems.

scher Weise gelöst und die Quellterme des Phasenaustauschs berechnet. Nachdem die Quellterme bekannt sind, erfolgt die iterative Lösung der Gasphasengleichungen. Eine Gasphaseniteration besteht aus der Berechnung der Gasdichte, der Stoffdaten und der sequentiellen Lösung der einzelnen eulerischen Erhaltungsgleichungen, für die jeweils der Thomas-Algorithmus als Solver benutzt wird. Erfahrungsgemäß ist die Durchführung von 100 Gasphaseniterationen sinnvoll bevor das Konvergenzverhalten der Rechnung überprüft wird und gegebenenfalls mit der erneuten Berechnung eines Gitters und der Lösung der Gleichungen der flüssigen Phase fortgefahren wird. Wenn sich gegen Ende der Rechnung der Lösungsvektor nur noch geringfügig ändert, ist die Anpassung des Gitters nicht mehr erforderlich und die Routinen der Gittergenerierung werden im Code übersprungen.

Die Rechnung ist erfolgreich beendet, wenn für die stromfunktionsähnliche Größe f das Kriterium

$$\frac{\sum_{\mathrm{i}=2}^{\mathrm{M}-1} (f_\mathrm{i}^{t+\Delta t} - f_\mathrm{i}^{t})}{f_1^{t+\Delta t}} < 10^{-5} \qquad \text{(III.5.27)}$$

erfüllt ist und die Residuen $\mathrm{R}_{\mathrm{i,j}}$ aller Gasphasengleichungen der folgenden Vorschrift

genügen:

$$\frac{\sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{J}} \left(\sum_{\mathrm{i}=2}^{\mathrm{M}-1} [(\mathrm{R}_{\mathrm{i,j}})^2 \Delta\eta] \right)}{\mathrm{J} \sum_{\mathrm{i}=2}^{\mathrm{M}-1} \Delta\eta} < 10^{-8} \,. \tag{III.5.28}$$

J ist die Anzahl der Gleichungen, in diesem Berechnungsfall gleich 10 (wenn die Kontinuitätsgleichung in die Impuls-, die Energie- und in die acht Bilanzgleichungen für die Massenanteile der chemischen Spezies eingesetzt wird), M die Anzahl der Gitterpunkte. Das Residuum der Gleichung j an dem Gitterpunkt i ist definiert als

$$\mathrm{R}_{\mathrm{i,j}} = -A^t_{\mathrm{i,j}} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} \right)^{t+\Delta t}_{\mathrm{i,j}} - B^t_{\mathrm{i,j}} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)^{t+\Delta t}_{\mathrm{i,j}} - C^t_{\mathrm{i,j}} \left(\phi \right)^{t+\Delta t}_{\mathrm{i,j}} - D^t_{\mathrm{i,j}} \,. \tag{III.5.29}$$

III.6 Ergebnisteil

III.6.1 Validierung der Teilmodelle

Aus Gründen der Sicherheit werden Experimente mit flüssigem Sauerstoff und Wasserstoff selten durchgeführt. Die Handhabung dieser äußerst reaktiven Komponenten bedarf höchster Sorgfalt. Der labortechnische Aufwand ist für Drücke bis 10 MPa und kryogene Temperaturen von 100 K sehr hoch. Der im Experiment realisierbare Druck ist begrenzt durch die Stabilität der Fenster im Reaktor, die für den optischen Zugang des Systems mit Laserstrahlen erforderlich sind. Daher verfährt man im allgemeinen entweder so, daß Reaktionen ausgeschlossen werden, indem man Wasserstoff durch ein Inertgas ersetzt, oder daß Messungen bei niedrigen Drücken durchgeführt werden. Die experimentelle Erforschung der physikalisch-chemischen Vorgänge im hohen unterkritischen und überkritischen Druckbereich speziell für das LOX/H_2-System ist also schwierig. Deshalb ist der Weg über numerische Simulationen sehr vielversprechend.

Aufgrund der oben beschriebenen Problematik stehen keine experimentellen Daten von Flüssig-Sauerstoff/Wasserstoff-Spraydiffusionsflammen in der Gegenstromkonfiguration zur Verfügung. Daher ist es nicht möglich, das gesamte mathematische Modell durch direkten Vergleich mit einem einzigen Experiment zu validieren. Eine gewisse Sicherheit bezüglich der Richtigkeit des Gesamtmodells kann dennoch erlangt werden, indem Teilmodelle isoliert betrachtet und mit Literaturdaten verglichen werden. Generell stützt man sich bei der Validierung des Modells vorzugsweise auf experimentelle Daten. Wenn solche jedoch nicht vorhanden sind, lohnt auch der Vergleich mit Berechnungsergebnissen.

In den folgenden beiden Unterkapiteln werden zwei Teilprozesse unabhängig voneinander genauer untersucht, zum einen eine H_2/Luft-Gasdiffusionsflamme in der Gegenstromkonfiguration und zum anderen die Verdampfung eines einzelnen LOX-Tröpfchens in ruhender Wasserstoffumgebung.

III.6.1.1 H_2/Luft-Gasdiffusionsflamme

Eine Validierung des Codes für Gasdiffusionsflammen in der Gegenstromkonfiguration ist aufgrund einiger Experimente und numerischer Untersuchungen leicht möglich. Darabiha *et. al.* [47] und Gutheil *et. al.* [48] berechnen jeweils Wasserstoff/Luftflammen in der Gegenstromkonfiguration unter Berücksichtigung detaillierter Chemie. In [48] werden zusätzlich reduzierte Reaktionsmechanismen studiert. Der Druck beträgt 0,1 MPa in [47] bzw. bis zu 2 MPa in [48]. Die in diesen Referenzen veröffentlichten Ergebnisse stimmen mit den hier berechneten Flammenstrukturen sehr gut überein. Trevino und Mauss [49] berechnen Wasserstoff/Luft-Gasdiffusionsflammen bei Drücken bis 4 MPa und hohen Streckungsgeschwindigkeiten bis hin zur Verlöschung. In dieser Studie werden ein reduzierter Zwei-Schritt-Reaktionsmechanismus und vier verschiedene Näherungen für die stationären Konzentrationen OH und HO_2 getestet.

Neben diesen rein numerischen Untersuchungen haben sich Brown *et. al.* [50] zusätzlich mit der experimentellen Untersuchung von H_2/Luft-Gasdiffusionsflammen bei niedrigen Streckungsgeschwindigkeiten und einem Druck von 0,1 MPa beschäftigt. Die experimentellen Daten von Brown *et. al.* [50] werden zur Validierung des in dieser Arbeit weiterentwickelten Codes herangezogen.

Abbildung (III.6.1) zeigt gemessene (Symbole) und berechnete (Linien) Profile für eine Wasserstoff/Luft-Gasdiffusionsflamme bei Atmosphärendruck und einer luftseitigen Streckungsgeschwindigkeit von 100/s. Die Eintrittstemperaturen betragen sowohl am linken als auch am rechten Einströmrand 300 K. Es sind Fehlerbalken für die aus Konzentrationsmessungen berechneten Temperaturen eingezeichnet. Die Konzentrationen der Hauptkomponenten (O_2, N_2, H_2O und H_2) wurden mit Raman-Spektroskopie, die OH-Konzentration mittels der Meßmethode der laserinduzierten Fluoreszenz (LIF) gemessen. Wasserstoff strömt von links gegen einen entgegengerichteten Luftstrahl. An der axialen Position y=0 mm befindet sich der Staupunkt. Nur in dem heißen Bereich der Flamme, die auf der Luftseite der Konfiguration liegt, finden chemische Reaktionen statt; das wird an dem Molenbruchprofil des Produktes Wasser deutlich, das mit dem Temperaturprofil korrespondiert.

Ein Vergleich der gemessenen Molenbrüche von H_2, O_2 und H_2O mit den berechneten Molenbrüchen zeigt eine sehr gute Übereinstimmung. Das Maximum und die Breite des H_2O-Peaks sind quasi identisch. Auch die berechnete Temperaturkurve liegt nahe

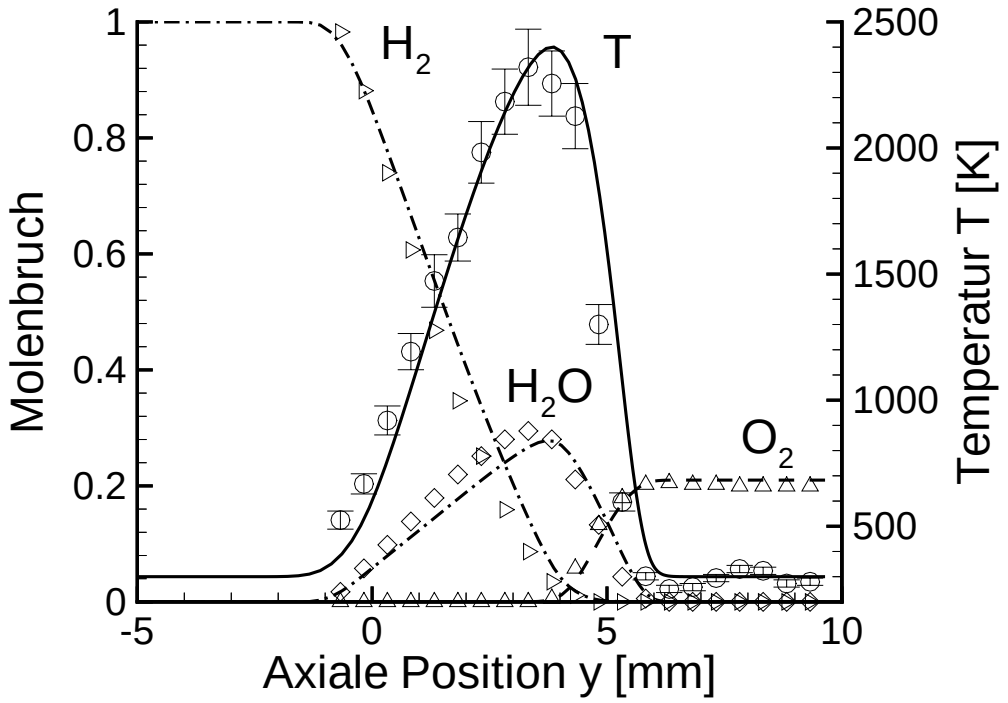

Abbildung III.6.1: Vergleich von gemessenen [50] und berechneten Profilen der Temperatur und der Hauptkomponenten einer H_2/Luft-Gasdiffusionsflamme.

an den von Brown *et. al.* [50] angegebenen Daten. Alle in Abb. (III.6.1) gezeigten berechneten Profile sind geringfügig, um etwa 0,3 mm zur Luftseite hin verschoben. Das Maximum des Temperaturprofils liegt innerhalb der von den Experimentatoren angegebenen Fehlergrenzen.

III.6.1.2 Verdampfung von LOX-Tröpfchen in Wasserstoff

Da keine experimentellen Daten für die Verdampfung von LOX-Tröpfchen in gasförmigem Wasserstoff bekannt sind, ist lediglich ein Vergleich zwischen verschiedenen, theoretisch hergeleiteten Verdampfungsmodellen möglich. Die bekannten Verdampfungsmodelle sind problemlos anwendbar, solange bei konstantem Druck die Temperatur im Tröpfchen während des gesamten Verdampfungsvorganges unterkritisch bleibt und eine Grenzfläche zwischen flüssiger und gasförmiger Phase vorhanden ist.

Bei sehr hohen Drücken übersteigt die Oberflächentemperatur des Tröpchens die kritische Mischungstemperatur. Der Druck, bei dem der Umschlag von der unter- zur überkritischen Verdampfung stattfindet, hängt auch von der Temperatur des umgebenden Gases ab, liegt aber bei allen in der Literatur behandelten Fällen oberhalb des kritischen Drucks von Sauerstoff [51, 52, 53].

Die Oberflächenspannung geht bei Annäherung an den kritischen Punkt auf Null zurück. Deshalb wird das Aufbrechen eines Tröpchens in mehrere kleine Tröpfchen durch angreifende Scherkräfte bei den in Raketentriebwerken typischen Bedingungen möglich. Während nach einer Analyse von Litchford und Jeng [38] das Aufbrechen eines Tröpfchens erst nach Erreichen des kritischen Mischungszustandes auftritt, fanden Delplanque und Sirignano [54, 55, 56], daß dieser Effekt auch schon vor Erreichen dieses Zustandes in einem Modell zu berücksichtigen ist; als Kriterium für das Aufbrechen der Tröpfchen wird das Verhältnis von Weber-Zahl zur Wurzel der Tröpfchen-Reynolds-Zahl ($We/\sqrt{Re}$) benutzt. Die Weber-Zahl ist gegeben durch $(2\,R\,\rho\;\Delta u^2)/\;\sigma$ [57] und beinhaltet damit die Oberflächenspannung σ , welche direkten Einfluß auf die Stabilität eines Tröpfchens hat. In der vorliegenden Arbeit ist das Verhältnis $We/\sqrt{Re}$ weit unterhalb des kritischen Wertes von 0,5. Daher wird das Aufbrechen von Tröpfchen hier nicht modelliert.

Erreicht die Oberflächentemperatur des Tröpfchens die kritische Mischungstemperatur, verschwindet die scharfe Phasengrenze zwischen Flüssigkeit und Gas. Die Dichte und Temperatur sowie deren Gradienten ändern sich kontinuierlich vom Tröpfchenmittelpunkt bis zur umgebenden Gasphase. Die Temperatur im Tröpfcheninneren bleibt unterkritisch. Bei hohem Druck wird die Verdampfung als ein langsamer Wärme- und Massentransportprozeß in einer einzigen dichten Phase betrachtet.

Um die Abnahme des Tröpfchenradius bei Erreichen der kritischen Mischungstemperatur zu beschreiben, muß das Zwei-Film-Verdampfungsmodell im Hinblick auf die Definition einer (nicht mehr vorhandenen) Phasengrenze erweitert werden. In der Literatur finden sich die folgenden beiden Lösungsansätze: Delplanque *et al.* [51] und Yang *et al.* [58] definieren als Phasengrenze die Position, an der die kritische Mischungstemperatur vorliegt. Nicoli *et. al.* [52] empfehlen dagegen, als Tröpfchen den Bereich zu definieren, in dem die

kritische Gemischzusammensetzung nicht erreicht ist. Unter dieser Vorraussetzung wird als Tröpfchen das Gebiet interpretiert, in dem der Massenbruch von Sauerstoff größer als sein Wert am kritischen Mischungspunkt ist. Die Autoren rechtfertigen ihren Ansatz mit dem Argument, daß der Mischungsprozeß der Komponenten im überkritschen Fall dominierend ist und deshalb der Massenbruch von Sauerstoff als Kriterium dienen sollte. Beide Annahmen erlauben, den Prozeß des Wärme- und Massentransports auch bei Überschreiten der kritischen Mischungstemperatur zu berechnen.

Nicoli *et al.* [52] lösen in dem von ihnen entwickelten Verdampfungsmodell eindimensionale Erhaltungsgleichungen für die Gesamtmasse, die Spezies O_2 und die Energie. Diese Gleichungen werden vor Erreichen der kritischen Mischungstemperatur jeweils für die flüssige und die gasförmige Phase getrennt gelöst, wobei Randbedingungen an der Phasengrenze formuliert werden. Wird die Oberflächentemperatur während des Verdampfungsprozesses überkritisch, entfallen die Randbedingungen an der Phasengrenze; die Erhaltungsgleichungen werden dann quasi nur noch für eine dichte Phase gelöst. Um dennoch eine Verdampfungsgeschwindigkeit berechnen zu können, wird, wie oben erläutert, der Punkt zeitlich verfolgt, an dem die Gemischzusammensetzung derjenigen bei der kritischen Mischungstemperatur entspricht.

Das in Kapitel (II.4.1) vorgestellte Zwei-Film-Verdampfungsmodell gilt nicht im Überkritischen. Es ist aber mit Hilfe der im folgenden erläuterten Modifikationen möglich, eine Anpassung des Modells an Hochdruckbedingungen vorzunehmen, so daß das erweiterte Zwei-Film-Modell mit dem Verdampfungsmodell von Nicoli *et al.* [52] verglichen werden kann.

Um bei Erhöhung des Drucks in den hohen unter- und überkritischen Bereich seinen zunehmenden Einfluß auf den Vedampfungsprozeß zu berücksichtigen, wird das Zwei-Film-Modell mit Wärmeleitung im Tröpfcheninneren (CL-Modell) von Abramzon *et al.* [11] wie in [55] durch Implementierung der druck- und temperaturabhängigen Verdampfungsenthalpie von Sauerstoff und der binären Gleichgewichtszusammensetzung an der Phasengrenze erweitert. Außerdem wird bei Überschreiten der Siedetemperatur an der Tröpfchenoberfläche der Ort im Tröpfchen ermittelt, an dem die Siedetemperatur von Sauerstoff vorliegt, um dann die flüssige Masse, die eine höhere Temperatur als die Siede- bzw. kritische Mischungstemperatur hat, von der Tröpfchenmasse abzuziehen. Dieses Abschneideverfahren ist deshalb physikalisch begründet, da keine Flüssigkeit mit einer höheren Temperatur als der Siede- bzw. kritischen Mischungstemperatur vorliegen kann. Eine Tröpfchen-Lebensdauerberechnung ohne diese Prozedur wäre also nicht sinnvoll.

In Abb. (III.6.2) wird die von Nicoli *et al.* [52] berechnete Lebensdauer eines in gasförmigem Wasserstoff verdampfenden einzelnen LOX-Tröpfchens mit der Lebensdauer verglichen, die sich bei Verwendung des Zwei-Film-Modells mit Wärmeleitung im Tröpfcheninneren ergibt. Konvektion bleibt im Verdampfungsmodell von Nicoli *et al.* unberücksichtigt und wird deshalb auch im Zwei-Film-Modell ausgeschaltet, indem die Relativgeschwindigkeit zwischen umgebendem Gas und Tröpfchen auf Null gesetzt wird. Bei beiden Modellen wird die Rechnung abgebrochen, wenn 97 % der anfänglichen Tröpfchenmasse verdampft sind. Die Temperatur des Wasserstoffs beträgt 300 K. Das LOX-

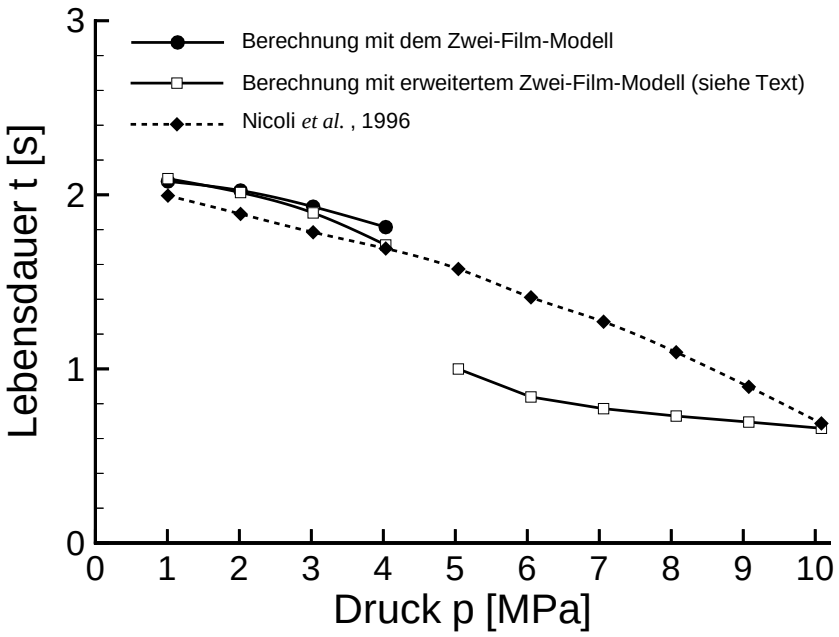

Abbildung III.6.2: Lebensdauer eines in ruhendem Wasserstoff verdampfenden LOX-Tröpfchen in Abhängigkeit vom Druck; Bedingungen siehe Text.

Tröpfchen hat eine Anfangstemperatur von 100 K und einen anfänglichen Durchmesser von 1 mm. Der Druck wird im Bereich von 1 bis 10 MPa variiert. In dem CL-Modell wird vereinfachend die thermische Ausdehnung der Flüssigkeit beim Aufheizen vernachlässigt und mit konstanten Stoffdaten im Tröpfchen gerechnet.

Abbildung (III.6.2) zeigt, daß erst bei einem Druck ab 3 MPa die mit dem erweiterten Zwei-Film-Modell (siehe vorletzter Abschnitt) berechnete Tröpfchenlebensdauer von der mit dem Standard-Zwei-Film-Modell berechneten Lebensdauer abzuweichen beginnt. Bei Drücken bis 4 MPa liegen alle Kurven, auch diejenige von Nicoli sehr nahe beieinander. Der Unterschied zwischen den berechneten Tröpfchenlebensdauern beträgt in diesem Bereich weniger als 5 %. Bei einem Druck oberhalb von 4 MPa wird beim Zwei-Film-Modell die Siedetemperatur im Tröpfcheninneren erreicht. Es wird deutlich, daß im erweiterten Zwei-Film-Modell das oben beschriebene Abschneideverfahren der zu heißen flüssigen Phase zu einer deutlichen Verringerung der Lebensdauer führt. Die Kurve weicht sehr stark von dem nahezu linearen Kurvenverlauf von Nicoli ab. Das erweiterte Zwei-Film-Modell mit dem groben Abschneideverfahren ist deshalb oberhalb eines Drucks von 4 MPa keine Alternative zu dem numerisch aufwendigen Verdampfungsmodell von Nicoli.

III.6.2 Berechnung von H_2/O_2-Gasdiffusionsflammen

In diesem Kapitel werden laminare Wasserstoff/Sauerstoff-Gasflammen in der Gegenstromkonfiguration bis zur Verlöschung berechnet, um zum einen die Ergebnisse mit Daten von Sohn *et. al.* [26] zu vergleichen und zum anderen eine H_2/O_2-Gasflammenbibliothek bei 0,5 MPa zur Verfügung zu stellen, die für eine Simulation der turbulenten LOX/H_2-Verbrennung benutzt wird.

Abbildung (III.6.3) zeigt die äußere Flammenstruktur einer H_2/O_2-Gasdiffusionsflamme bei einem Druck von 0,5 MPa. Die Eintrittstemperatur auf der Wasserstoffseite beträgt 100 K. Am Einströmrand auf der Sauerstoffseite wurde eine Temperatur von 110 K gewählt; damit liegt diese Temperatur knapp oberhalb der Siedetemperatur von O_2, die bei dem angegebenen Druck 108,96 K ist. Die Streckungsgeschwindigkeiten auf der Brennstoffseite betragen 10^4/s im linken und 10^6/s im rechten Teil der Abbildung. Man erkennt, daß die Flammenbreite um den Faktor Zehn abnimmt und die maximale Flammentemperatur aufgrund der Erhöhung der Streckung von 3300 K auf 2440 K sinkt. Die zu den Gasdiffusionsflammen der Abb. (III.6.3) gehörenden Molenbruchprofile der Spezies O, H und OH sind in Bild (III.6.4) dargestellt.

In Abb. (III.6.5) ist die Abhängigkeit der maximalen Gastemperatur von der Streckungsgeschwindigkeit bei Drücken von 0,5 und 3 MPa sowie verschiedenen Eintrittstemperaturen dargestellt. Mit steigender Streckungsgeschwindigkeit nimmt die maximale Flammentemperatur bis hin zur Verlöschung ab. Die Streckungsgeschwindigkeit bei Verlöschung beträgt für die Bedingungen der Abb. (III.6.3) $2{,}652 \cdot 10^6$/s. Mit Erhöhung des Drucks steigen die maximale Flammentemperatur und die Streckungsgeschwindigkeit bei Verlöschung an. Eine Erhöhung der Eintrittstemperaturen führt zu einem weite-

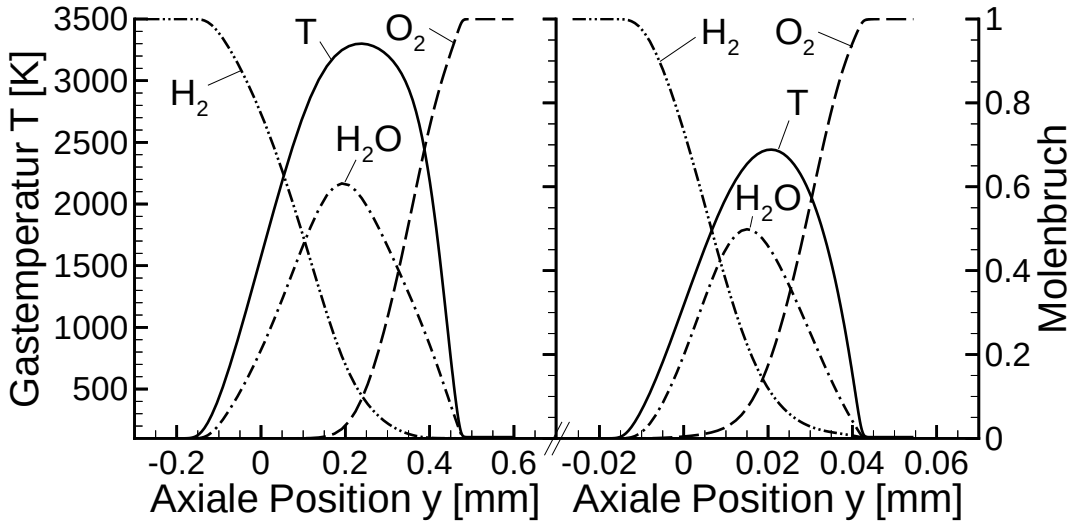

Abbildung III.6.3: H_2/O_2-Gasdiffusionsflammen in der Gegenstromkonfiguration bei einem Druck von 0,5 MPa und brennstoffseitigen Streckungsgeschwindigkeiten von 10^4/s (links) bzw. 10^6/s (rechts).

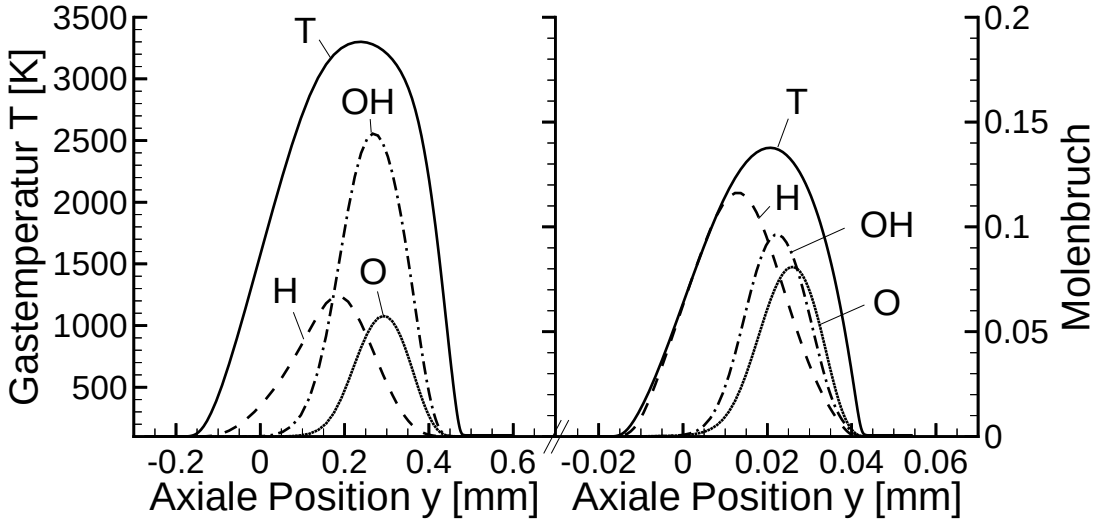

Abbildung III.6.4: Innere Flammenstruktur der H_2/O_2-Gasdiffusionsflammen in Abb. (III.6.3), brennstoffseitige Streckungsgeschwindigkeiten von 10^4/s (links) bzw. 10^6/s (rechts).

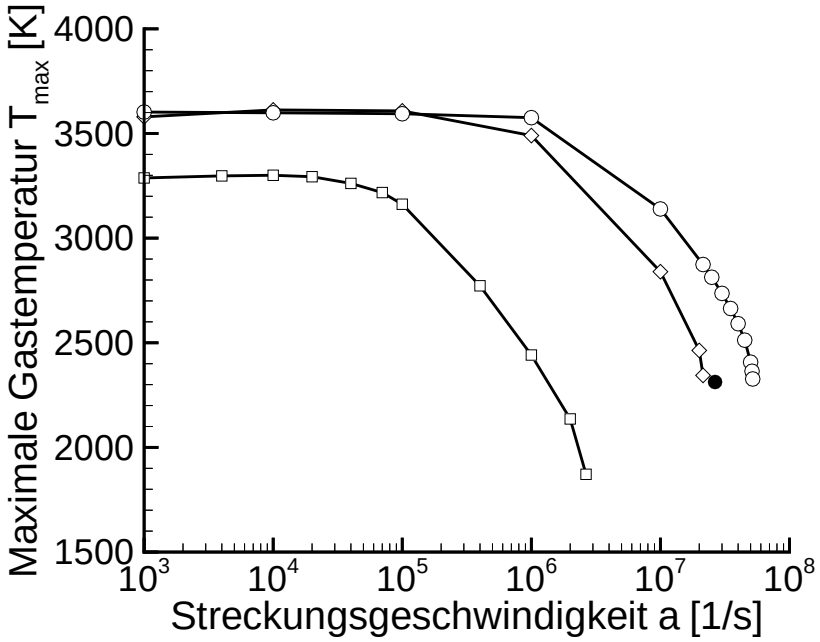

Abbildung III.6.5: Verlöschung von H_2/O_2-Gasdiffusionsflammen; □ p=0,5 MPa, $T_{-\infty}$=100 K, $T_{+\infty}$=110 K; ◇ p=3 MPa, $T_{-\infty}$=100 K, $T_{+\infty}$=142 K; ○ p=3 MPa, $T_{-\infty}$=500 K, $T_{+\infty}$=160 K; ● p=3 MPa, $T_{-\infty}$=500 K, $T_{+\infty}$=160 K [26].

ren Anstieg der Verlösch-Streckungsgeschwindigkeit; die maximale Flammentemperatur bei Verlöschung bleibt aber annähernd konstant.

Bei einem Druck von 3 MPa und den Eintrittstemperaturen von $T_{-\infty}$=500 K und $T_{+\infty}$=160 K stimmt die in dieser Arbeit berechnete Streckungsgeschwindigkeit bei Verlöschung mit der in [26] angegebenen Streckungsgeschwindigkeit recht gut überein (siehe Abb. (III.6.5)).

III.6.3 Berechnung von LOX/H_2-Sprayflammen

Die weiteren Unterkapitel dieses Ergebnisteils beschäftigen sich mit der detaillierten Untersuchung der Flammenstrukturen von laminaren LOX/H_2-Sprayflammen in Abhängigkeit von dem Äquivalenzverhältnis, der Streckungsgeschwindigkeit und der Dispersität des Sprays. Einige der hier gezeigten Ergebnisse werden in den Referenzen [60, 61, 62, 63, 64] diskutiert.

Wie im vorherigen Unterkapitel wird auch hier zwischen der äußeren und der inneren Flammenstruktur, d.h. zwischen den Profilen der Hauptkomponenten und den Profilen der übrigen Komponenten unterschieden. Man beachte, daß mit der inneren Flammenstruktur nicht die Struktur um ein einzelnes Tröpfchen gemeint ist und mit dem verwendeten mathematischen Modell eine makroskopische Betrachtung der Flammenstrukturen vorgenommen wird.

III.6.3.1 Untersuchung der äußeren Flammenstruktur

Variation des Äquivalenzverhältnisses

In Kapitel (III.4.1) wurde gezeigt, daß das Verhältnis von eingedüstem Spray- zu Trägergas-Massenfluß bei LOX/H_2-Flammen stark von dem gewählten Äquivalenzverhältnis auf der Sprayseite der Konfiguration abhängt. Bei Erhöhung des Äquivalenzverhältnisses von 1 auf 10 wird bei konstantem Wasserstoffmassenfluß eine um den Faktor 10 geringerer Spraymasse eingedüst; entsprechend nimmt die Tröpfchenanzahldichte um den Faktor 10 ab. Wie im folgenden gezeigt wird, hat dies wesentlichen Einfluß auf die Flammenstruktur.

Abbildung (III.6.6) präsentiert die prinzipielle äußere Flammenstruktur einer Flüssig-Sauerstoff/Wasserstoff-Sprayflamme bei einem Druck von 3 MPa. Das LOX-Spray in Trägergas Wasserstoff von der linken Seite einströmend ist einem von rechts eingedüsten Wasserstoff-Gasstrahl entgegengerichtet. Die Streckungsgeschwindigkeit am Einströmrand auf der Sprayseite der Konfiguration ist 3000/s. Dort beträgt das Äquivalenzverhältnis 1 (linker) bzw. 10 (rechter Teil der Abbildung) und die Eintrittsgeschwindigkeiten von Gas und Spray sind gleich 1,827 m/s. Diese Geschwindigkeit wurde innerhalb des stabilen Bereichs der LOX/H_2-Flammen gewählt. Der anfängliche Tröpfchenradius R_0 des monodispersen Sprays ist 25 μm. Die Eintrittstemperatur des Sprays beträgt

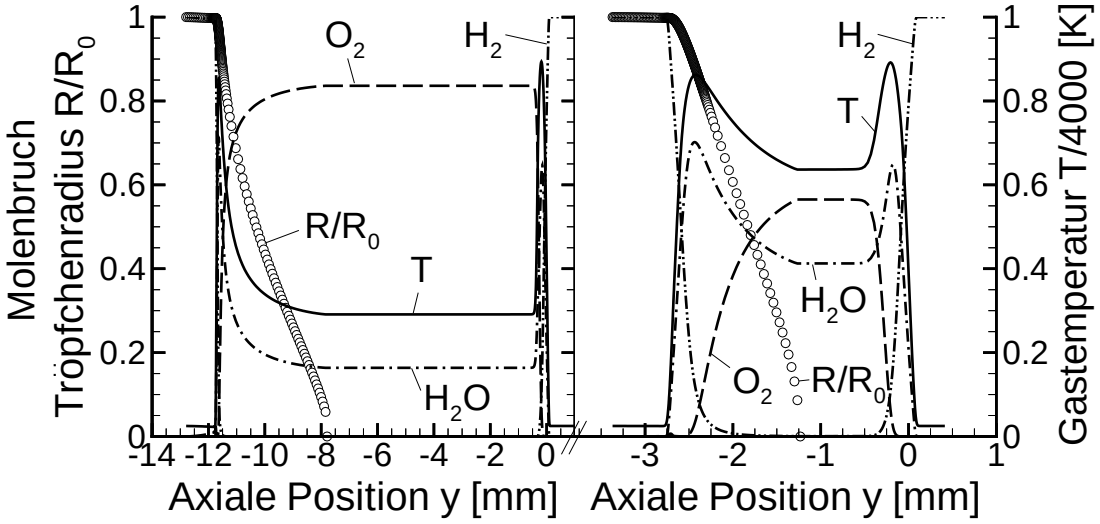

Abbildung III.6.6: LOX/H_2-Sprayflammen in der Gegenstromkonfiguration bei einem Druck von 3 MPa, einer Streckungsgeschwindigkeit von 3000/s und einem Äquivalenzverhältnis von 1 (links) bzw. 10 (rechts).

80 K, die der Wasserstoffströme jeweils 100 K. Während die Symbole die Position der Tröpfchen und deren mit dem Anfangs-Tröpfchenradius R_0 normierten Radius anzeigen, werden mit Linien die Feldgrößen der Gasphase dargestellt.

Bei geringer Streckungsgeschwindigkeit wird eine typische Flamme mit zwei Reaktionszonen beobachtet. Die eine Reaktionszone befindet sich nahe der Tröpfcheneindüsung und die andere beim Gasphasen-Staupunkt der Konfiguration (y=0 mm). Es wird in Abb. (III.6.6) der starke Einfluß des Äquivalenzverhältnisses auf die äußere Flammenstruktur deutlich. Bei Anhebung des Äquivalenzverhältnisses nimmt die Tröpfchenanzahldichte stark ab (vergl. Gl. (III.4.9)) und daher wird weniger Energie für die Verdampfung des Sprays verbraucht, so daß die maximale Gastemperatur in der Verdampfungszone leicht von 3420 K auf 3448 K ansteigt und verdampfter Sauerstoff verstärkt chemisch umgesetzt wird. Aus diesen Gründen und auch wegen des reduzierten Spraymassenflusses sinkt der Molenbruch von Sauerstoff zwischen den beiden Reaktionszonen erheblich. Die erhöhten chemischen Umsatzgeschwindigkeiten sind Ursache für die verstärkte Wasserdampfproduktion. Aufgrund der geringeren Tröpfchenanzahldichte nehmen der Impuls des Sprays und damit auch die Flammenbreite wesentlich ab. Als Folge wird die Verdampfungszone enger.

Variation der Streckungsgeschwindigkeit

In Abb. (III.6.7) wird die äußere Flammenstruktur bei einem Äquivalenzverhältnis von Eins für zwei verschiedene Streckungsgeschwindigkeiten, nämlich 1000/s (links) und 5000/s (rechts) gezeigt. Die Eintrittsgeschwindigkeit des Gases auf der Sprayseite der Konfiguration ist proportional zur Wurzel der Streckungsgeschwindigkeit, sie beträgt

1,055 m/s bei der niedrigen bzw. 2,359 m/s bei der erhöhten Streckungsgeschwindigkeit. Die Tröpfchen werden mit gleicher Geschwindigkeit wie das Gas eingedüst, d.h. ihr Impuls nimmt mit steigender Streckungsgeschwindigkeit zu. Anfängliche Tröpfchengröße und Eintrittstemperaturen sind wie im vorigen Berechnungsfall gewählt.

Wie bei Gasflammen in Kapitel (III.6.2) gezeigt, nimmt auch bei Sprayflammen durch Anhebung der Streckungsgeschwindigkeit die Breite der Reaktionszone stark ab. Außerdem verbreitert sich die Verdampfungszone wegen des tieferen Eindringens der Tröpfchen in die Flamme. Gleichzeitig nimmt die Temperatur stark ab; die maximale Flammentemperatur auf der Gaseite der Konfiguration sinkt von 3885 K (linker) auf 933 K (rechte Teil von Abb. (III.6.7)). Bei dieser niedrigen Temperatur finden keine chemischen Reaktionen statt, so daß eine Verlöschung der Flamme auf der Gasseite der Konfiguration beobachtet wird. Die Verlöschung ist Folge der erhöhten Streckungsgeschwindigkeit. Die Aufweitung der Verdampfungszone und die hohe Streckung verursachen den verringerten Wasser- und den erhöhten Sauerstoffanteil am Gasphasen-Staupunkt.

Mit Erhöhung der Streckungsgeschwindigkeit nimmt die Eintrittsgeschwindigkeit der Tröpfchen zu. Ihr Impuls wird dadurch so hoch, daß sie den Staupunkt durchdringen und eine Umkehr ihrer Bewegungsrichtung erfahren. Dieses Phenomen wurde auch für Methanol/Luft- und Ethanol/Luft-Sprayflammen gefunden [8, 66]. Abbildung (III.6.8) zeigt LOX/H_2-Flammenstrukturen mit Streckungsgeschwindigkeiten von 30000/s (links) und 50000/s (rechts) auf der Sprayseite der Konfiguration bei sonst gleichen Randbedingungen wie in den zuvor behandelten Fällen.

Bei einer Streckungsgeschwindigkeit um 30000/s durchqueren die Tröpfchen den Staupunkt der Gasphase. Ist die Streckung noch höher, kommt es zur Tröpfchenumkehr. Aufgrund der niedrigen Gastemperatur bei gleichzeitig großem Sauerstoffanteil kondensiert im Bereich des Staupunktes Gas an der Tröpfchenoberfläche.

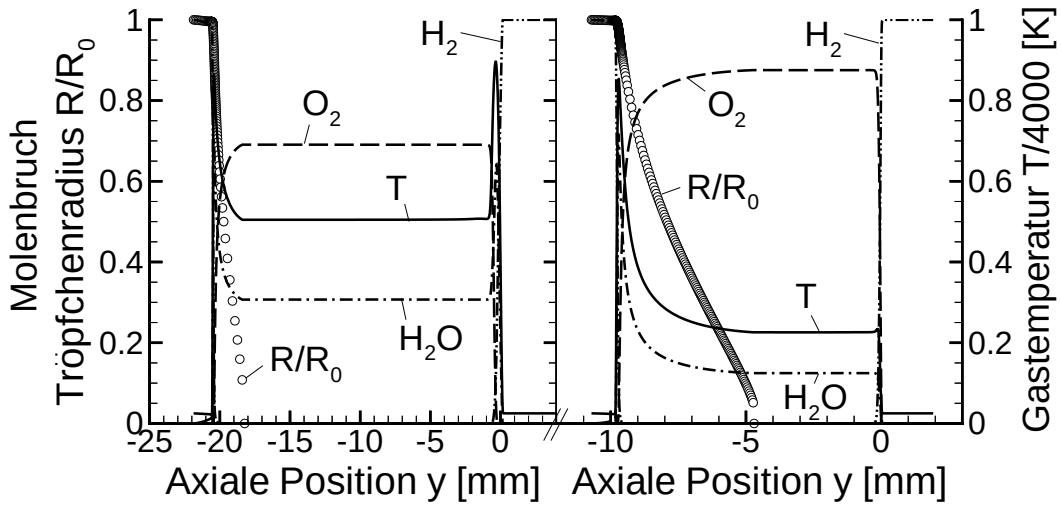

Abbildung III.6.7: LOX/H_2-Sprayflammen in der Gegenstromkonfiguration bei einem Druck von 3 MPa, einem Äquivalenzverhältnis von 1, und Streckungsgeschwindigkeiten von 1000/s (links) bzw. 5000/s (rechts).

Im unteren Teil von Bild (III.6.8) sind die Gas- und Tröpfchengeschwindigkeiten graphisch dargestellt. Bei der hohen Streckung von 50000/s wird die Tröpfchengeschwindigkeit nach Erreichen des ersten Umkehrpunktes an der axialen Position y=4,4 mm negativ. Eine weitere Umkehr der Bewegungsrichtung erfahren die Tröpfchen an der Position y=−1,2 mm kurz vor der vollständigen Verdampfung, dort wird die Tröpfchengeschwindigkeit wieder positiv. Der hohe Impuls der großen Tröpfchen ist Ursache für die Geschwindigkeitsdifferenz zwischen Spray und Gas.

Ab einer Streckungsgeschwindigkeit von etwa 250000/s tritt das Spray nach Umkehr seiner Bewegungsrichtung auf der Gasseite der Konfiguration auf der Seite der Spray-Eindüsung aus dem Berechnungsgebiet aus, ohne daß es zu einer Verlöschung der Flamme kommt. Deshalb wird sich eine Verlöschung der Sprayflamme nur erzwingen lassen, wenn bei weiterem Anstieg der Streckungsgeschwindigkeit auf der Sprayseite (und da-

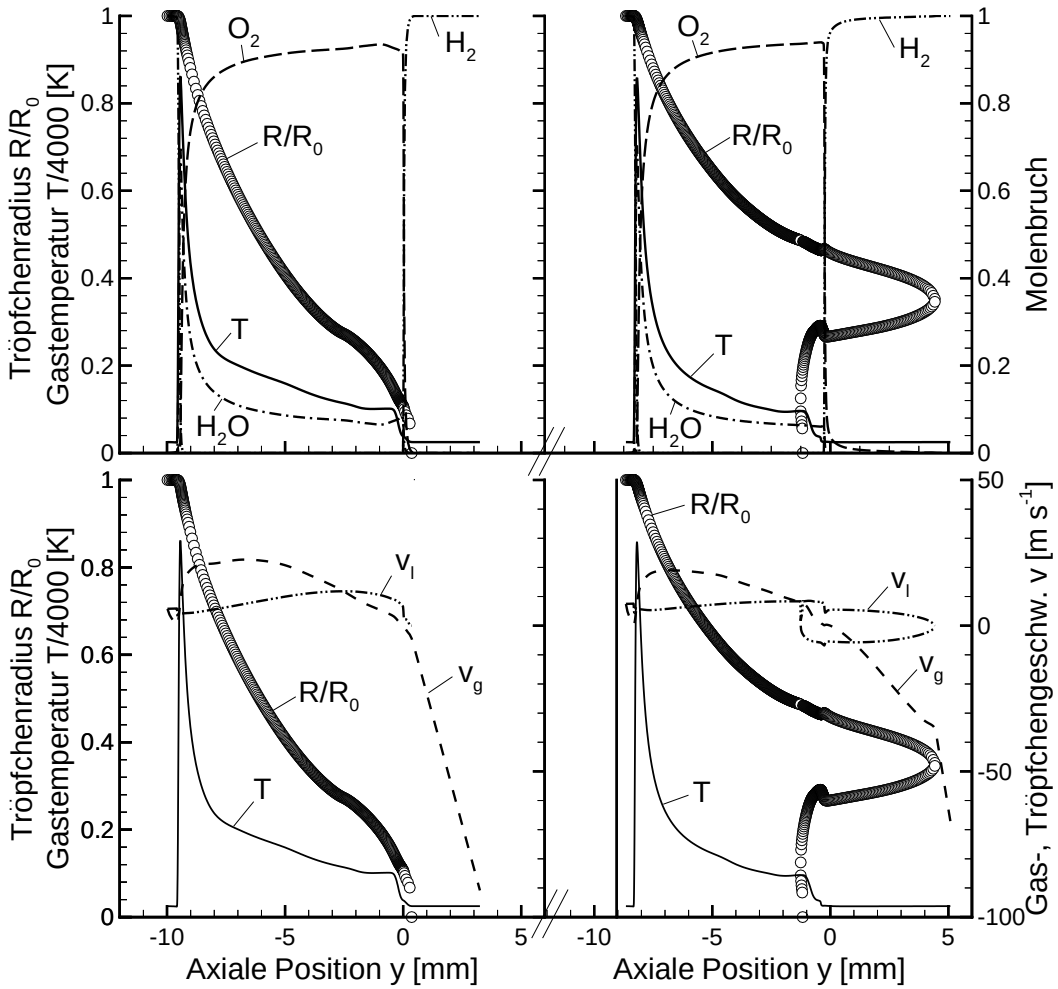

Abbildung III.6.8: LOX/H_2-Sprayflammen in der Gegenstromkonfiguration bei einem Druck von 3 MPa, einem Äquivalenzverhältnis von 1 und Streckungsgeschwindigkeiten von 30000/s (links) bzw. 50000/s (rechts).

mit der Gas-Eintrittsgeschwindigkeit) die Tröpfchengeschwindigkeit reduziert wird. Hier besteht für die Ermittlung von Verlöschbedingungen noch Bedarf an weiteren Untersuchungen.

Dispersität des Sprays

Im folgenden wird der Einfluß der Dispersität des Sprays auf die Flammenstruktur untersucht. Abbildung (III.6.9) zeigt die äußeren Flammenstrukturen einer bidispersen (linke) und einer monodispersen Sprayflamme (rechte Seite). Die anfänglichen Tröpfchenradien des bidispersen Sprays sind $R_{\mathrm{A},0}$=10 μm und $R_{\mathrm{B},0}$=25 μm, wobei die gesamte flüssige Masse auf beide Tröpfchengruppen gleichmäßig verteilt ist. Der anfängliche Tröpfchenradius des monodispersen Sprays ist gleich dem Sauterradius $R_{32,0}$ des bidispersen Sprays ($R_{32,0}$=14,3 μm). Das Äquivalenzverhältnis ist gleich sechs, die Streckungsgeschwindigkeit beträgt 3000/s.

Beide Flammen weisen die gleiche Struktur mit zwei Reaktionszonen auf und die Maxima des Temperatur- und der Molenbruchprofile sind nahezu gleich groß. Unterschiede werden für die flüssige Phase beobachtet. Im bidispersen Fall verdampfen die kleinen Tröpfchen nahe der Sprayeindüsung, die großen Tröpfchen dringen weit in die Flamme ein. Dadurch ist der Temperaturpeak weniger stark ausgeprägt. Die Verdampfungszone und damit auch die Flamme sind breiter als im monodispersen Berechnungsfall.

Im unteren Teil von Abb. (III.6.9) sind die Profile der Verdampfungsgeschwindigkeit für alle Tröpfchengruppen dargestellt. Die Verdampfung kleiner Tröpfchen verursachen einen schmalen, scharfen Peak in der Verdampfungsgeschwindigkeit $q_{m,\mathrm{A}}$, während die großen Tröpfchen mit erhöhtem Impuls aufgrund ihres tieferen Eindringens in die Flamme ein breites, weniger stark ausgeprägtes Verdampfungsgeschwindigkeits-Profil $q_{m,\mathrm{B}}$ liefern. Es wird dadurch deutlich, daß bei geringer Streckungsgeschwindigkeit die kleinen Tröpfchen des bidispersen Sprays den größeren Einfluß auf die Flammenstruktur haben.

Abbildung (III.6.10) zeigt das Molenbruch-Profil von Sauerstoff im Bereich der Verdampfungszone auf der Sprayseite der Gegenstromanordnung für die zuvor vorgestellte bidisperse Sprayflamme. Das O_2-Profil weist einen stark nicht-monotonen Verlauf auf, der sich anhand der konkurrierenden Prozesse der Verdampfung und dem chemischen O_2-Umsatz erklären läßt. In Abb. (III.6.10) sind die Profile der Gesamt-Verdampfungsgeschwindigkeit $(1-Y_{\mathrm{O}_2})\ (q_{m,\mathrm{A}}+q_{m,\mathrm{B}})$ und die Reaktionsgeschwindigkeit von Sauerstoff $\dot{\omega}_{\mathrm{O}_2}$ aufaddiert worden (dicke durchgezogene Linie). Der O_2-Molenbruch steigt aufgrund der Verdampfung des bidispersen LOX-Sprays solange an, bis in dem Bereich des Temperaturanstiegs der Verbrauch von gasförmigem Sauerstoff in chemischen Reaktionen größer ist als durch Verdampfung frei wird – die Summe $(1-Y_{\mathrm{O}_2})(q_{m,\mathrm{A}}+q_{m,\mathrm{B}})+\dot{\omega}_{\mathrm{O}_2}$ wird negativ und der O_2-Molenbruch nimmt ab. Weiter stromab nach Erreichen des Temperaturmaximums überwiegt erneut der Verdampfungsprozeß und der Molenbruch steigt weiter an.

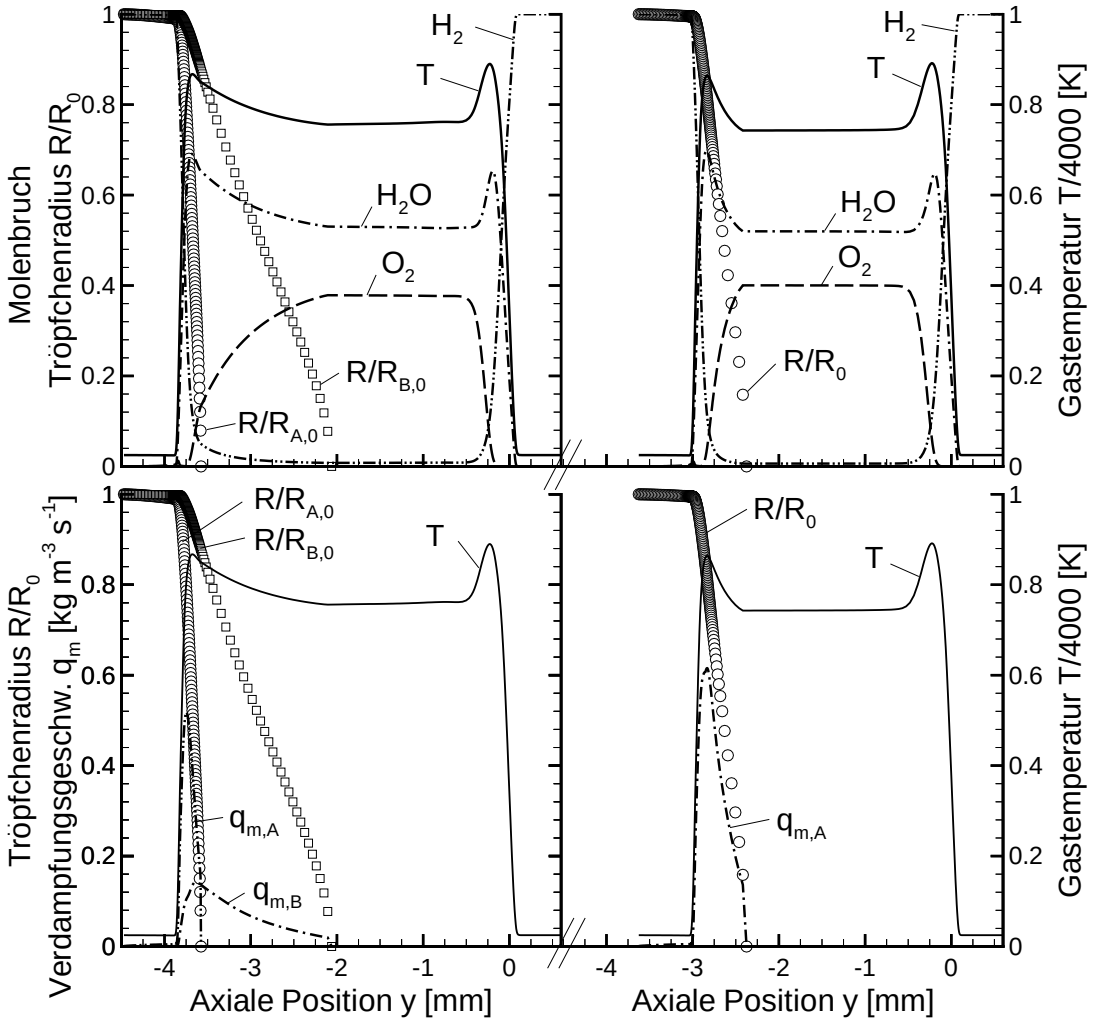

Abbildung III.6.9: Bi- (links) und monodisperse (rechts) LOX/H_2-Sprayflammen in der Gegenstromkonfiguration bei einem Druck von 3 MPa, einem Äquivalenzverhältnis von 6 und einer Streckungsgeschwindigkeit von 3000/s.

III.6.3.2 Untersuchung der inneren Flammenstruktur

Abbildung (III.6.11) zeigt die innere Flammenstruktur der bidispersen (links) und der monodispersen (rechts) LOX/H_2-Flamme auf der Sprayseite der Gegenstromkonfiguration. In beiden Situationen hat der Verdampfungsprozeß den gleichen oben beschriebenen Effekt auf die Sauerstoffkonzentration. Nur die relativen Positionen in Bezug auf den Staupunkt unterscheiden sich.

Weiterhin sind in Abb. (III.6.11) die Molenbruchprofile von HO_2 und H_2O_2 dargestellt,

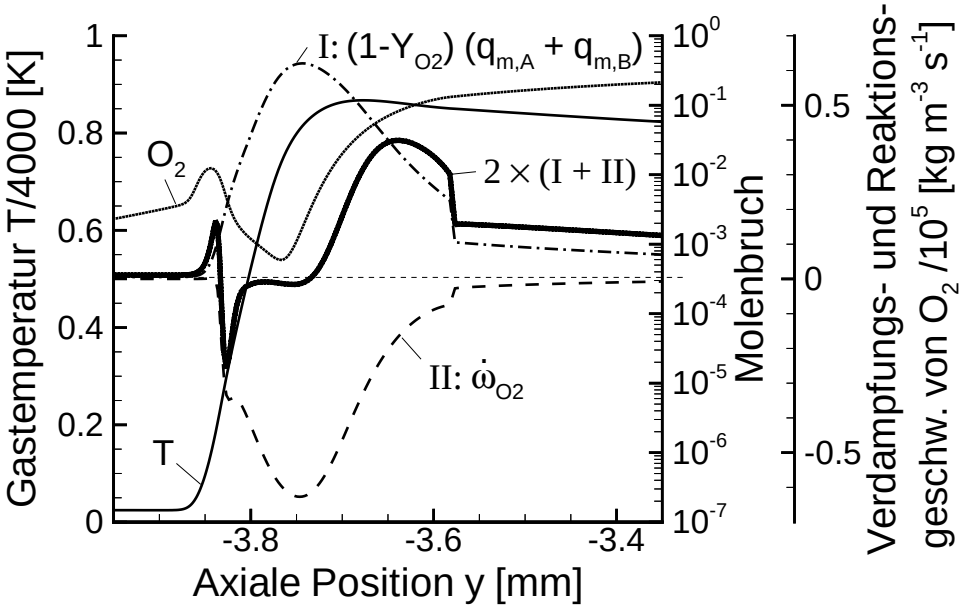

Abbildung III.6.10: Einfluß von Verdampfung und chemischen Reaktionen auf das Molenbruch-Profil von Sauerstoff im Bereich der Verdampfungszone auf der Sprayseite der Gegenstromanordnung.

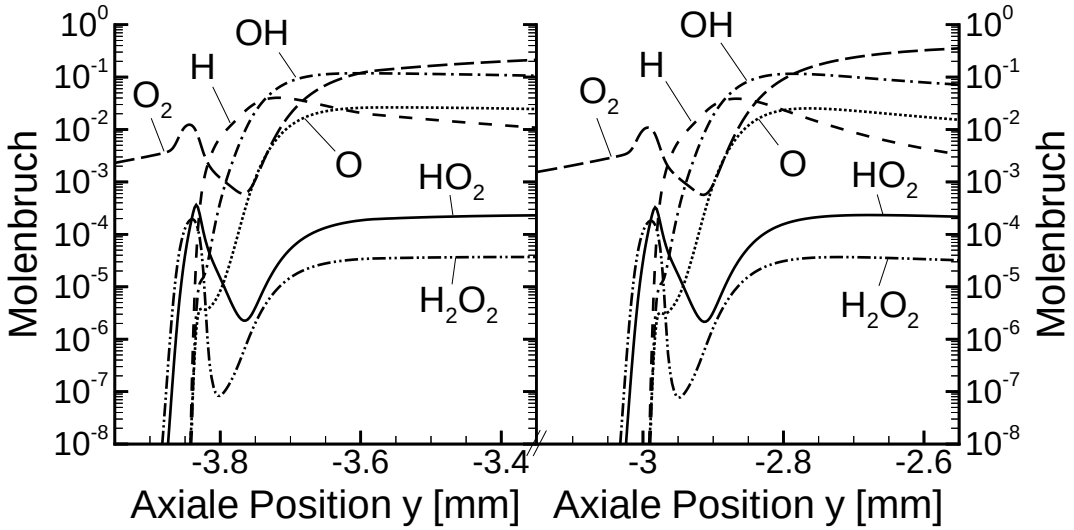

Abbildung III.6.11: Die innere Flammenstruktur auf der Sprayseite der Gegenstromkonfiguration mit bidispersem (links) und monodispersem (rechts) Spray; Bedingungen siehe Text in Paragraph „Dispersität des Sprays“ des Kapitels (III.6.3.1).

die dem nicht-monotonen Verlauf des Sauerstoffprofils folgen. Die Spezies HO_2 und H_2O_2 werden hauptsächlich in Reaktionen produziert, die O_2 und direkte Reaktionsprodukte wie OH enthalten.

Abbildung (III.6.12) zeigt eine Analyse der Reaktionsgeschwindigkeiten der wichtigsten Elementarreaktionen für die Produktion und den Verbrauch der Spezies HO_2 (links) und H_2O_2 (rechts) des Berechnungsfalls mit bidispersem Spray.

Die Spezies HO_2 wird hauptsächlich durch die Elementarreaktion

$$\text{I} \qquad H + O_2 + M \Leftrightarrow HO_2 + M$$

gebildet und durch den Reaktionsschritt

$$\text{II} \qquad HO_2 + H \Leftrightarrow OH + OH$$

verbraucht, wobei Reaktion II nur einen sehr geringen Beitrag zur OH-Produktion leistet und deshalb den glatten Verlauf des OH-Profils (siehe Abb. (III.6.11)) nicht stört. Die Reaktionen

$$\text{III} \qquad HO_2 + H \Leftrightarrow H_2 + O_2$$

$$\text{IV} \qquad HO_2 + H \Leftrightarrow H_2O + O$$

sind von untergeordneter Bedeutung für den HO_2-Abbau.

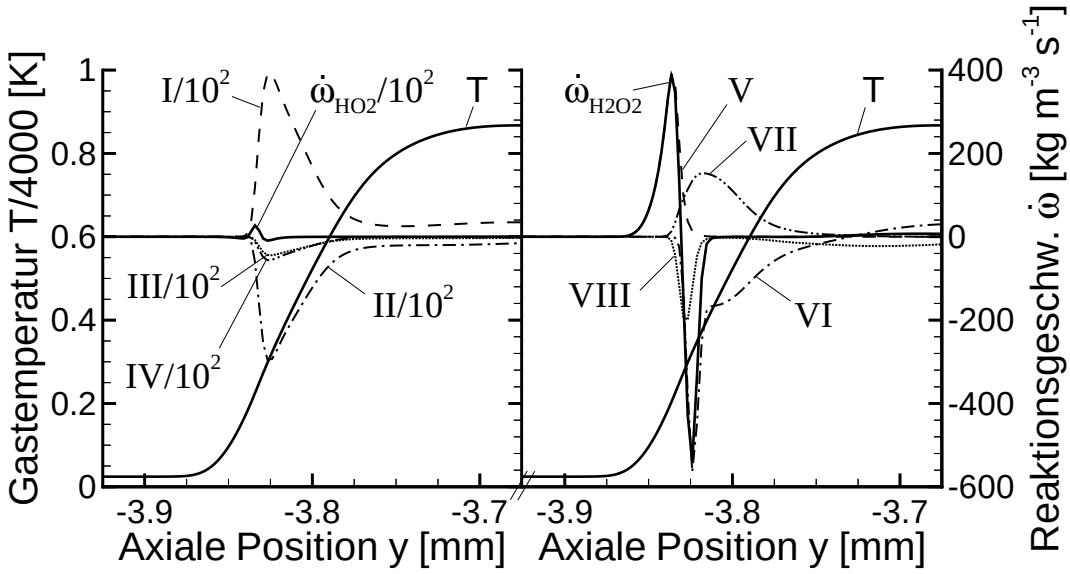

Abbildung III.6.12: Reaktionsgeschwindigkeiten der Spezies HO_2 (links) und H_2O_2 (rechts) des Berechnungsfalls mit bidispersem Spray.

Die Spezies H_2O_2 wird im wesentlichen durch Reaktion

$$\text{V} \qquad HO_2 + HO_2 \Leftrightarrow H_2O_2 + O_2$$

in relativ kalten Bereichen der Flamme gebildet. Mit ansteigender Gastemperatur wird H_2O_2 durch die Elementarreaktion

$$\text{VI} \qquad H_2O_2 + M \Leftrightarrow OH + OH + M$$

verbraucht, wobei auch durch diese Reaktion nur verhältnismäßig wenig OH gebildet wird und der Einfluß auf das OH-Molenbruchprofile gering ist.

Durch die Elementarreaktion

$$\text{VII} \qquad H_2 + HO_2 \Leftrightarrow H_2O_2 + H$$

wird etwa halb soviel H_2O_2 produziert wie durch Reaktion V. Der Bereich, in dem die H_2O_2-Produktion erfolgt ist jedoch doppelt so breit. Der Reaktionsschritt

$$\text{VIII} \qquad H_2O_2 + H \Leftrightarrow H_2O + OH$$

leistet nur einen geringen Beitrag zum H_2O_2-Verbrauch; der Peak der Reaktionsgeschwindigkeit ist sehr schmal und erreicht etwa die gleiche Höhe wie derjenige von Reaktion VII.

Zum Vergleich mit der Reaktionszone auf der Sprayseite ist in Abb. (III.6.13) die innere Flammenstruktur auf der Gasseite der Gegenstromanordnung wiederum für den bidispersen Berechnungsfall (s.o.) dargestellt. Das LOX-Spray ist in dem gezeigten Bereich vollständig verdampft. Die Komponenten H_2 und O_2 verbrennen in einer reinen Gasdiffusionsflamme. Es werden keine nicht-monotonen Molenbruchprofile beobachtet. Dadurch wird die These gestützt, daß das nicht-monotone O_2-Profil durch Tröpfchenverdampfung verursacht wird.

Die Gasphasenverbrennung zeigt die typischen Eigenschaften der in Kapitel (III.6.2) untersuchten H_2/O_2-Gasdiffusionsflammen. Sowohl auf der Spray- wie auch auf der Gasseite der Konfiguration liegen die Maxima der Molenbrüche von O und OH an dem Ort der maximalen Gastemperatur. Die Maxima der Komponente H sind zur Brennstoffseite, d.h. zu den Einströmrändern hin verschoben, wo reiner Wasserstoff eingedüst wird. Die hohen Konzentrationen zwischen den beiden Reaktionszonen sind mit der erhöhten Streckungsgeschwindigkeit und der hohen Gastemperatur zu erklären.

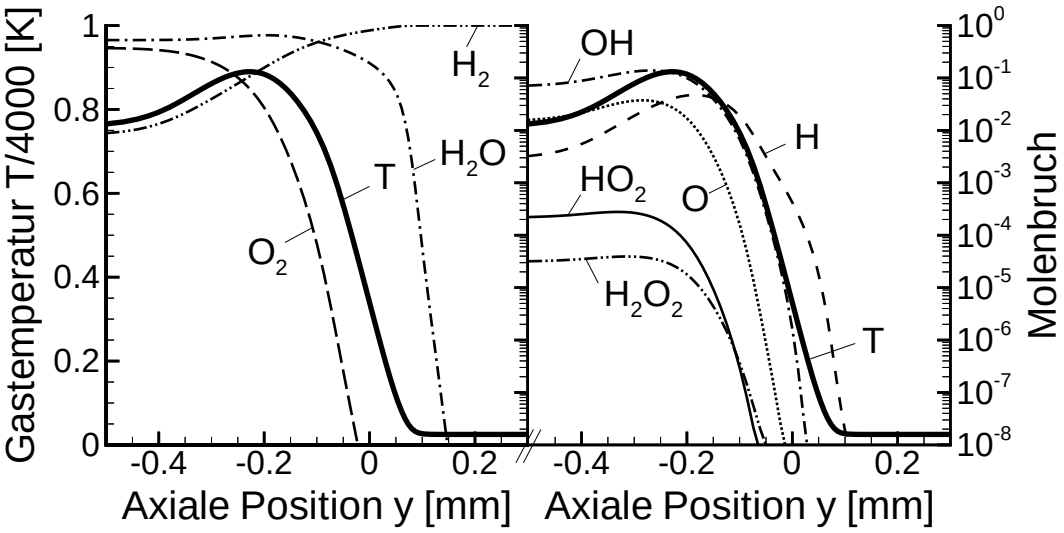

Abbildung III.6.13: Die innere Flammenstruktur auf der Gasseite der Gegenstromkonfiguration mit bidispersem Spray; links die Hauptkomponenten, rechts die Radikale sowie die Spezies HO_2 und H_2O_2; vergl. mit linker Seite von Abb. (III.6.11).

Teil IV

Turbulente Sprayflammen

IV.1 Struktur turbulenter Diffusionsflammen

Abbildung (IV.2.1) zeigt die schematische Darstellung einer turbulenten Diffusionsflamme, bei der sich im Gegensatz zu vorgemischten Flammen Brennstoff und Oxidationsmittel erst in der Brennkammer vermengen. In dem Bereich direkt hinter der Brennstoffdüse kann sich ein laminares Mischungsgebiet ausbilden, in der der Brennstoff in einer dünnen Reaktionszone verbrennt. Instabilitäten weiter stromab, die durch Scherkräfte zwischen Fluidschichten hervorgerufen werden, führen zu einem Umschlag der laminaren in eine turbulente Strömung. Durch die auftretenden Wirbel werden die Reaktionszonen gestreckt und gekrümmt – der Brenntstoff verbrennt jetzt in einer turbulenten Strömung. Im Experiment ist oft zu beobachten, daß sich in dem hinteren Bereich der Flamme brennende Turbulenzballen loslösen [67], was darauf hindeutet, daß die Reaktionszonen aufgerissen werden und sich Teile der Flamme komplett ablösen können. Dennoch ist es möglich, daß die Reaktionszonen so dünn sind, daß sie lokal eben bleiben und die Reaktanden, wie in Bild (IV.2.1) skizziert, in kleinen laminaren Flämmchen, sogenannten *flamelets* verbrennen.

Die Struktur der *flamelets* ist der Struktur von Gegenstromflammen sehr ähnlich. Deshalb gilt die Gegenstromkonfiguration als die repräsentativste Geometrie für die Untersuchung von chemischen Reaktionsmodellen und des molekularen Transports in laminaren kleinen Flammen. Diese Konfiguration hat zudem den Vorteil, daß sie sich nach einer Ähnlichkeitstransformation der zweidimensionalen Erhaltungsgleichungen durch ein eindimensionales Gleichungssystem beschreiben läßt [6, 7], siehe Kapitel (III.3.3), wodurch der Rechenaufwand deutlich reduziert wird.

Bei Anwendung des *Flamelet*-Modells wird davon ausgegangen, daß eine turbulente Diffusionsflamme als ein statistisches Ensemble kleiner laminarer Diffusionsflammen aufgefaßt werden kann. Die kleinen Diffusionsflammen bestehen dabei aus einer schmalen Reaktionszone und umgebenden inerten Mischungszonen. Dieses Konzept der Modellierung wurde von Zeldovich und Frank-Kamenetskii 1938 eingeführt [68]; es hat in einem weiten praktischen Anwendungsgebiet Gültigkeit. So findet auch die Verbrennung von flüssigem Sauerstoff und Wasserstoff im *Flamelet*-Bereich turbulenter Verbrennung statt [2].

IV.2 Turbulenzmodellierung

Inhalt dieses Kapitels ist die Modellierung der chemischen Reaktionen in einem turbulenten Strömungsfeld, die Zusammenstellung gemittleter Eulerischer Gasphasengleichungen und die Lagrangsche Formulierung der Gleichungen der flüssigen Phase.

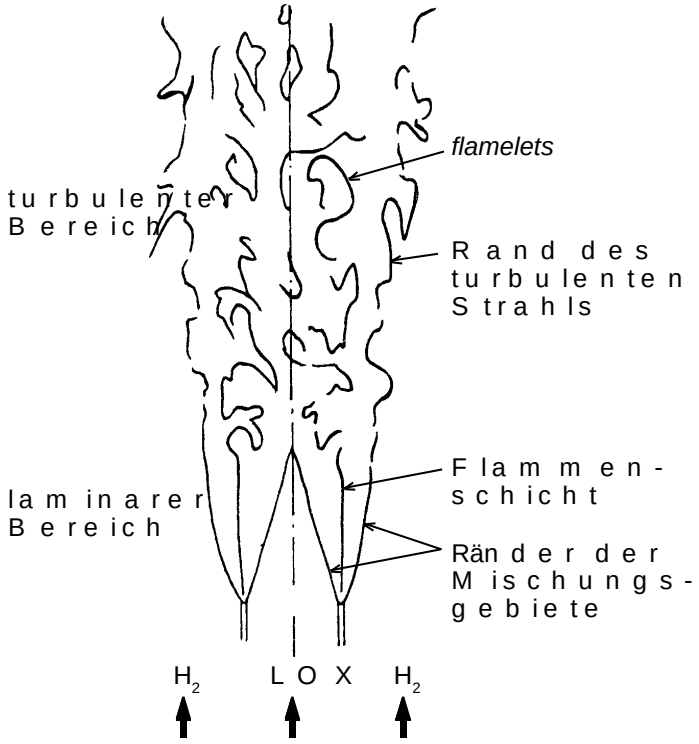

Abbildung IV.2.1: Struktur einer turbulenten Diffusionsflamme [67] hier für das LOX/H_2-System gezeigt.

IV.2.1 Das chemische Reaktionsmodell

IV.2.1.1 Einfluß der Turbulenz auf chemische Reaktionen

In der Vergangenheit hat man turbulente Diffusionsflammen unter der vereinfachenden Annahme unendlich schneller Chemie berechnet, um globale Eigenschaften der Flammen auf Basis semi-empirischer Turbulenzmodelle vorherzusagen [3, 69, 70]. Die Chemie wird dabei durch eine einzige Bruttoreaktion, die den Umsatz von Brennstoff und Oxidationsmittel zu Reaktionsprodukten beschreibt, wiedergegeben:

$$\nu'_{\mathrm{F}}\,\mathrm{F} + \nu'_{\mathrm{O}}\,\mathrm{Ox} \rightarrow \nu''_{\mathrm{P}}\,\mathrm{P}.$$

Die Besonderheit dieses Modells liegt in der Einführung einer von der Reaktionskinetik unabhängigen skalaren Erhaltungsgröße, dem Mischungsbruch ξ. Der Mischungsbruch ist eindeutig mit den skalaren Größen Temperatur, Konzentrationen und Dichte verknüpft. Solange die Zeitskalen für konvektive und diffusive Transportprozesse sehr viel größer sind als die chemische Zeitskala, d.h. solange der geschwindigkeitsbestimmende Schritt die Vermischung der chemischen Spezies ist, ist die Annahme der sofortigen

chemischen Umsetzung der Reaktionspartner berechtigt und es ergeben sich erhebliche Vereinfachungen durch die Elimination vieler Parameter der Reaktionskinetik.

Die Annahme unendlich schneller chemischer Reaktionskinetik ist in turbulenten reaktiven Strömungen jedoch nicht korrekt, da die Diffusionszeitskalen durch die Turbulenz lokal stark variieren. Zonen mit lokaler Verlöschung werden dort beobachtet, wo die Zeitskala für Diffusion in der gleichen Größenordnung wie die chemische Zeitskala liegt. Bei noch größeren Diffusionszeitskalen kann die Flamme sogar abheben oder ganz verlöschen. Zur Beschreibung dieser Nicht-Gleichgewichtseffekte ist die Verwendung eines detaillierten chemischen Reaktionsmechanismus und detaillierter Transportmodelle erforderlich. Es muß zudem mindestens eine weitere Variable berücksichtigt werden. Peters hat in [3] als zusätzlichen Parameter die skalare Dissipationsgeschwindigkeit bei stöchiometrischen Bedingungen χ_{st} eingeführt.

IV.2.1.2 Mischungsbruch und skalare Dissipationsgeschwindigkeit

Während chemische Spezies in Reaktionen verbraucht oder gebildet werden, bleibt die Masse der chemischen Elemente stets konstant. Daher ist der Massenbruch Z_{j} des Elementes j eine Erhaltungsgröße. Der Element-Massenbruch ist wie folgt definiert [71]:

$$Z_{\mathrm{j}} = \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} \mu_{\mathrm{ij}} Y_{\mathrm{i}}. \tag{IV.2.1}$$

Die Koeffizienten μ_{ij} beschreiben die Massenanteile des Elementes j in der Komponente i, Y_{i} ist der Massenbruch der Komponente i. Wegen $\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} Y_{\mathrm{i}} = 1$ gilt der Zusammenhang $\sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{J}} Z_{\mathrm{j}} = 1$.

Betrachtet man eine Flamme als ein Zweistromproblem mit Brennstoff als Strom 1 und Oxidationsmittel als Strom 2, ist der Mischungsbruch durch

$$\xi = \frac{Z_{\mathrm{i}} - Z_{\mathrm{i},2}}{Z_{\mathrm{i},1} - Z_{\mathrm{i},2}} \tag{IV.2.2}$$

gegeben [20]. In dieser Definition können beide Ströme vorgemischt sein.

Speziell für H_2/O_2-Diffusionsflammen (in denen Wasserstoff die Brennstoffkomponente ist) gilt $Z_{\mathrm{H},1}$=$\mu_{\mathrm{H_2,H}}$=1 und $Z_{\mathrm{H},2}$=0. Für den Mischungsbruch erhält man bei diesem System die einfache Beziehung

$$\xi = Z_{\mathrm{H}} = \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}} \mu_{\mathrm{i,H}} Y_{\mathrm{i}}\,. \tag{IV.2.3}$$

Der stöchiometrische Mischungsbruch ergibt sich zu [3]

$$\xi_{\mathrm{st}} = \left\{ 1 + \frac{Y_{\mathrm{F},1} \nu'_{\mathrm{O_2}} M_{\mathrm{O_2}}}{Y_{\mathrm{O},2} \nu'_{\mathrm{F}} M_F} \right\}^{-1}. \tag{IV.2.4}$$

Im H_2/O_2-System ist $\xi_{st} = 0,11$.

Peters [3] zeigt, daß der Einfluß des Strömungsfeldes auf die Struktur eines *flamelets* durch einen Term in den Erhaltungsgleichungen für die chemischen Spezies und die Energie, die sogenannte *skalare Dissipationsgeschwindigkeit* beschrieben werden kann. Sie ist wie folgt definiert [3]:

$$\chi = 2D \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 . \tag{IV.2.5}$$

Die skalare Dissipationsgeschwindigkeit hat die Dimension [1/s] und kann als Inverse einer charakteristischen Diffusionszeit interpretiert werden. Sie beinhaltet implizit Konvektion und Diffusion normal zur Fläche stöchiometrischer Mischung [3] und wird nach Peters Vorschlag [3] an der Stelle in der Flamme ausgewertet, an der der stöchiometrische Mischungsbruch vorliegt.

Durch Anheben der Streckungsgeschwindigkeit nimmt die Breite der Reaktionszone ab. Gleichzeitig steigt der Gradient des Mischungsbruchs am Ort stöchiometrischer Mischung, wodurch der Diffusionsmassenfluß ansteigt. Damit führt nach Gl. (IV.2.5) eine Erhöhung der Streckung zu einem Anstieg der skalaren Dissipationsgeschwindigkeit. Bei großen Werten für χ_{st} verkürzt sich also die Aufenthaltszeit der chemischen Spezies in der Reaktionszone, so daß es zu einer verstärkten Wärmeabfuhr von der Reaktionszone in die benachbarten inerten Mischungszonen und damit zu einem Absinken der Flammentemperatur kommt. Wird die skalare Dissipationsgeschwindigkeit so groß, daß der kritische Wert χ_q (Index 'q' für *quenching*) erreicht ist, kann die Wärmeabfuhr nicht mehr durch Wärmeproduktion ausgeglichen werden und die Flamme verlöscht. Dieses Verhalten ist in Abb. (IV.2.2) gezeigt, in der die maximale Flammentemperatur gegenüber χ_{st}^{-1} aufgetragen ist.

Der obere Ast der S-Kurve beschreibt die stabil brennende Flamme. Mit Erhöhung von χ_{st} nähert man sich dem Punkt Q, an dem Verlöschung eintritt. Im Diagramm bewegt man sich an der Stelle $\chi_{st} = \chi_q$ senkrecht vom oberen auf den unteren Ast der Kurve. Der untere Ast kennzeichnet den verlöschten Zustand. Wird die skalare Dissipationsgeschwindigkeit von diesem Zustand aus erhöht, setzt ein Selbstzünden der Flamme erst am Punkt I ein; im Diagramm gelangt man auf direktem Wege auf den oberen Ast. Selbstzündungen sind bei Diffusionsflammen jedoch praktisch nicht möglich, da die kleinen Werte für χ_{st}, d.h. die langen Aufenthaltszeiten der chemischen Spezies in der Reaktionszone nicht erreicht werden. Die Kurve zwischen den Punkten I und Q beschreibt einen instabilen Zustand der Flamme.

Es wird deutlich, daß die skalare Dissipationsgeschwindigkeit bei Verlöschung χ_q, bei der die endlich schnelle Reaktionskinetik gerade noch im Gleichgewicht mit der Diffusion ist, für Diffusionsflammen eine charakteristische Größe ist, die Nicht-Gleichgewichtseffekte beschreibt.

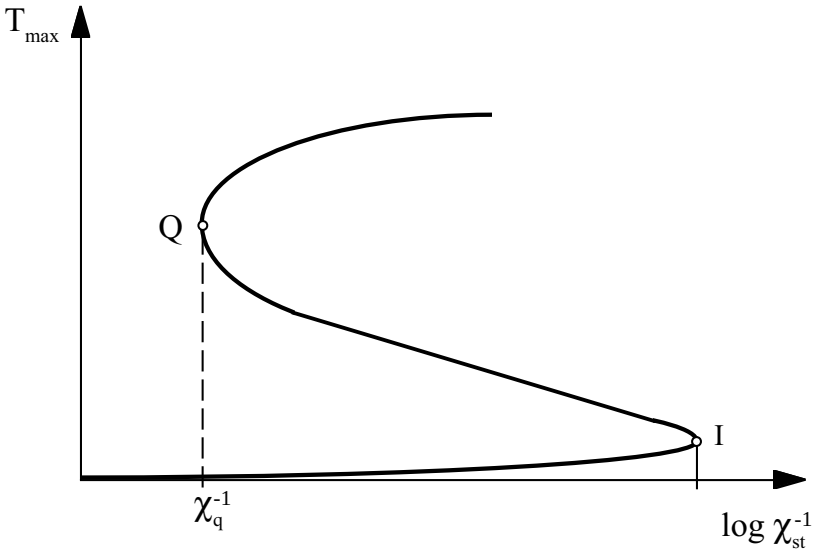

Abbildung IV.2.2: Die S-Kurve für Diffusionsflammen, auf der der Verlöschpunkt Q und der Punkt der Selbstzündung I aufgetragen sind [4].

IV.2.1.3 Der *Flamelet*-Bereich in Phasendiagrammen

In einem Phasendiagramm können mit Hilfe dimensionsloser Kennzahlen unterschiedliche Bereiche ermittelt werden, die das Erscheinungsbild der Flammenfronten in turbulenten Flammen charakterisieren. Peters [5] leitete ein solches Diagramm für Diffusionsflammen von einem Diagramm für vorgemischte Flammen ab, welches von Borghi [72] entwickelt wurde.

Im abgeleiteten Borghi-Diagramm [5] wird die mit $\xi_{\mathrm{st}}(1-\xi_{\mathrm{st}})$ normierte Fluktuation des Mischungsbruchs $\xi''_{\mathrm{st}} = \sqrt{\widetilde{\xi''^2}}\Big|_{\tilde{\xi}=\xi_{\mathrm{st}}}$ über dem Verhältnis $t_{\mathrm{t}}/\,t_{\mathrm{c}}$ logarithmisch aufgetragen (vergl. Abb. (IV.2.3)). Die turbulente Zeitskala t_{t} ist ein Maß für die Zerfallszeit der größten Wirbel in einer turbulenten Strömung; sie ist gegeben durch

$$t_{\mathrm{t}} = \frac{l_{\mathrm{t}}}{u''} = \frac{2}{3}\frac{\tilde{k}}{\tilde{\epsilon}}\,, \tag{IV.2.6}$$

dabei ist die integrale Längenskala l_{t} ein Maß für die größten Wirbel. In Gl. (IV.2.6) ist u'' die Fluktuation der Geschwindigkeit. Weiterhin sind $\tilde{k}$ die favre-gemittelte turbulente kinetische Energie und $\tilde{\epsilon}$ die favre-gemittelte turbulente Dissipationsgeschwindigkeit. Auf die Splittung der fluid-mechanischen Größen in Mittel- und Schwankungswert wird in Kapitel (IV.2.2) eingegangen.

Die chemische Zeitskala bei Verlöschung t_c wird von Peters [5] wie folgt definiert:

$$t_c = \frac{\xi_{st}^2 (1-\xi_{st})^2}{\chi_q} \,. \tag{IV.2.7}$$

Mit dem empirischen Ausdruck für die skalare Dissipationsgeschwindigkeit [5]

$$\tilde{\chi}_{st} = \frac{3}{2}\frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \left(\xi_{st}''\right)^2 \tag{IV.2.8}$$

kann unter Verwendung der Gln. (IV.2.6,IV.2.7) das Verhältnis $\tilde{\chi}_{st}/\chi_q$ wie folgt angegeben werden:

$$\frac{\tilde{\chi}_{st}}{\chi_q} = \frac{t_c}{t_t}\frac{\left(\xi_{st}''\right)^2}{\xi_{st}^2(1-\xi_{st})^2} \,. \tag{IV.2.9}$$

Durch diese Gleichung ist die Wahl der Achsen im Borghi-Diagramm motiviert. Denn bei $\tilde{\chi}_{st} = \chi_q$ wird im Phasendiagramm der Bereich der Verlöschung durch eine Gerade mit der Steigung 1/2 von dem Bereich, in dem kleine Flämmchen existieren, getrennt (siehe Abb. (IV.2.3)).

Ist die Fluktuation des Mischungsbruch ξ_{st}'' größer als die Breite der Reaktionszone σ_R im Mischungsbruchraum, werden verbundene Reaktionszonen aufgerissen. Deshalb kann im Borghi-Diagramm durch eine Gerade $\xi_{st}'' = \sigma_R$ der Bereich verbundener Reaktionszonen von dem Bereich isolierter Flämmchen abgetrennt werden.

Wenn die chemische Zeitskala t_c größer als die Zeitskala für den Zerfall der kleinsten Wirbel t_k wird, sind die chemischen Reaktionen so langsam, daß die Spezies durch die Turbulenz wie in einem idealen Rührkessel sehr gut durchmischt und die Flammenfronten aufgerissen werden. Daher wird durch die Senkrechte $t_c = t_k$ ein vierter Bereich im Borghi-Diagramm abgetrennt. Die Lage dieser Senkrechten ist durch die Beziehung für die turbulente Reynoldszahl

$$\sqrt{Re_t} = \sqrt{\frac{u'' l_t}{\nu}} = \frac{t_t}{t_k} \tag{IV.2.10}$$

festgelegt. Die Zeitskala t_k wird als Kolmogorov-Zeitskala bezeichnet; sie ist gegeben durch $t_k = \sqrt{\nu / \tilde{\epsilon}}$

In das Borghi-Diagramm Abb. (IV.2.3) sind im unteren Bereich Punkte eingezeichnet, die die Zustände in der Modellbrennkammer M3 der DLR Lampoldshausen nach Berechnungsergebnissen, die in Kapitel (IV.3) vorgestellte werden, wiedergibt. Vergleicht man die dargestellte Situation mit Methanolsprayflammen [15, 73] und n-Oktan/Luft-Diffusionsflammen [74, 75, 76], stellt man fest, daß die Lage der hier gezeigten Punkte aufgrund der schnellen H_2/O_2-Chemie verhältnismäßig weit im rechten Teil des Diagramms liegen.

Ein weiteres Phasendiagramm für turbulente Diffusionsflammen und auch turbulente vorgemischte Flammen wurde von Williams [77] entwickelt. In diesem Diagramm identifizierte Balakrishnan [2] den *Flamelet*-Bereich für Hochgeschwindigkeits-Verbrennung,

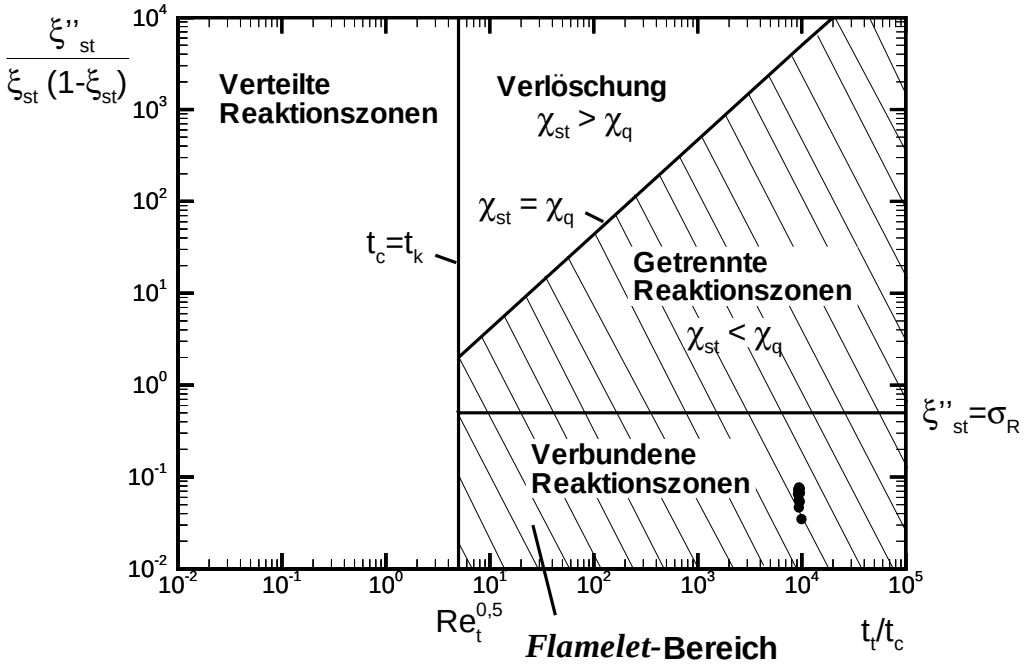

Abbildung IV.2.3: Das Borghi-Diagramm für turbulente, nicht vorgemischte Flammen; Punkte geben die Situation in der Mikro-Brennkammer M3 wieder.

bei der die Mach-Zahl der in die Brennkammer eintretenden Strömung größer Eins ist. So hohe Mach-Zahlen in Brennkammern werden in Triebwerken für supersonische Flüge erreicht. Die Brennkammer-Mach-Zahl beträgt etwa 1/3 der Flug-Mach-Zahl [78]. Abbildung (IV.2.4) zeigt dieses Diagramm; es wird durch die Damköhler-Zahl Da_l und die Reynolds-Zahl Re_l – beide Größen basierend auf der integralen Länge l – aufgespannt. Sie sind wie folgt definiert:

$$\mathrm{Da}_l = \frac{l}{u'' t_\mathrm{c}} = \frac{t_\mathrm{l}}{t_\mathrm{c}}\,, \tag{IV.2.11}$$

$$\mathrm{Re}_l = \rho_0 u'' l / \mu_0\,. \tag{IV.2.12}$$

Dabei sind ρ_0 die Dichte und μ_0 die dynamische Viskosität bei einem charakteristischen Zustand '0' (z.B. bei den Bedingungen am Rand eines Strömungsfeldes). Bei kleiner Reynolds-Zahl und großer Damköhler-Zahl ist die Turbulenz schwach und die Chemie schnell. Erhöht man von diesem Zustand ausgehend die Reynolds-Zahl bei konstanter Damköhler-Zahl, krümmen sich die Flammenfronten und brechen in eine Vielzahl von Flammenschichten auf. Die Turbulenz hat in diesem Bereich, der mit *Einzelne Flammenschichten/Ensemble von Flammenschichten* bezeichnet wird, keinen Einfluß auf die Struktur der Reaktionszonen. Ist dagegen die Damköhler-Zahl klein, d.h. sind die chemischen Reaktionen langsam, werden die chemischen Spezies wie in einem Rührkessel ideal durchmischt und reagieren homogen; in dem Phasendiagramm ist dies der Bereich der

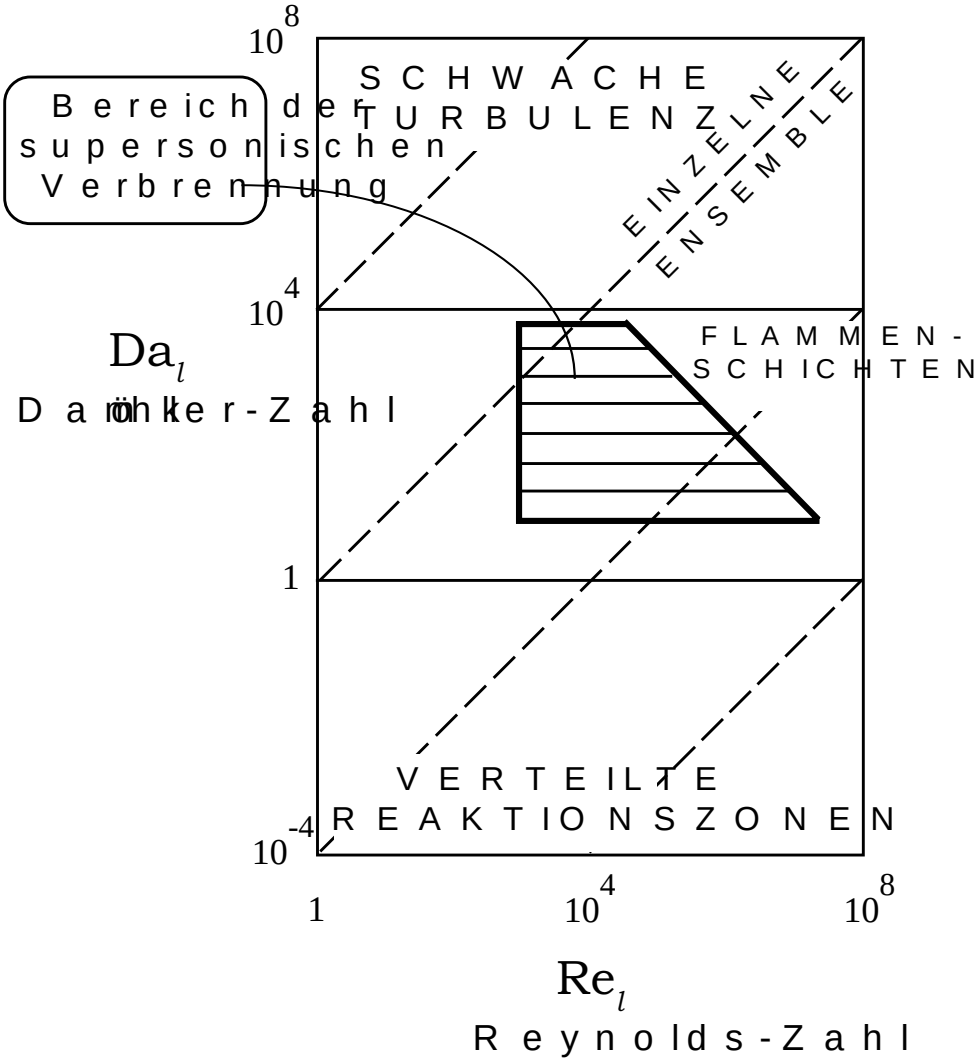

Abbildung IV.2.4: Das Klimov-Williams-Diagramm für turbulente, nicht vorgemischte Flammen [2].

verteilten Reaktionszonen. Die supersonische Verbrennung findet im *Flamelet*-Bereich turbulenter Verbrennung statt, in dem die Flammenfronten aufbrechen und chemische Reaktionen in vielen einzelnen kleinen Flammen stattfinden.

IV.2.1.4 Schwankung skalarer Größen im Strömungsfeld

Wie in Kapitel (IV.2.1.1) beschrieben, ist es möglich, die Struktur einer laminaren Flamme allein durch den Mischungsbruch ξ und die skalare Dissipationsgeschwindigkeit am Ort stöchiometrischer Mischung χ_{st} zu beschreiben. Dieser Ansatz wird als Zwei-Variablen-Näherung bezeichnet. Die favre-gemittelten Massenbrüche der chemi-

schen Spezies $\tilde{Y}_{\mathrm{i}}$ werden in Abhängigkeit von ξ und χ_{st} mit Hilfe einer vorangenommenen, favre-gemittelten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\tilde{P}$ (pdf – *propability density function*) nach dem folgenden allgemeinen Ansatz berechnet:

$$\tilde{Y}_{\mathrm{i}}(\vec{x}) = \int_{\chi=0}^{\infty} \int_{\xi=0}^{1} Y_{\mathrm{i}}(\xi, \chi_{\mathrm{st}}) \tilde{P}(\xi, \chi, \vec{x}) \, \mathrm{d}\xi \, \mathrm{d}\chi \, . \tag{IV.2.13}$$

Wird statistische Unabhängigkeit von ξ und χ angenommen (was jedoch einer kritischen Überprüfung bedarf), kann vereinfachend die zweidimensionale Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\tilde{P}(\xi, \chi, \vec{x})$ als das Produkt zweier eindimensionaler Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen $\tilde{P}_{\xi}(\xi, \vec{x})$ und $\tilde{P}_{\chi}(\chi, \vec{x})$ dargestellt werden. Gleichung (IV.2.13) vereinfacht sich dadurch zu

$$\tilde{Y}_{\mathrm{i}}(\vec{x}) = \int_{\chi=0}^{\infty} \int_{\xi=0}^{1} Y_{\mathrm{i}}(\xi, \chi_{\mathrm{st}}) \tilde{P}_{\xi}(\xi, \vec{x}) \tilde{P}_{\chi}(\chi, \vec{x}) \, \mathrm{d}\xi \, \mathrm{d}\chi \, . \tag{IV.2.14}$$

Für die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion des Mischungsbruchs wird eine β-Funktion gewählt [4], die bei Berechnungen reaktiver turbulenter Strömungen im Ingenieurwesen breite Anwendung findet [86]:

$$\tilde{P}_{\xi}(\xi) = \xi^{\alpha-1}(1-\xi)^{\beta-1} \frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\,\Gamma(\beta)} \, . \tag{IV.2.15}$$

Die Parameter α und β sind gegeben durch die Gleichungen $\tilde{\xi} = \alpha / (\alpha+\beta)$ und $\widetilde{\xi''^2} = \tilde{\xi}(1-\tilde{\xi}) / (1+\alpha+\beta)$. α und β und damit auch die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\tilde{P}_{\xi}(\xi)$ lassen sich demnach aus den im folgenden Kapitel angegebenen Erhaltungsgleichungen für den Mischungsbruch $\tilde{\xi}$ und dessen Varianz $\widetilde{\xi''^2}$ berechnen.

Zur Lösung von Gl. (IV.2.14) ist weiterhin eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die skalare Dissipationsgeschwindigkeit χ erforderlich. Es wird hier eine logarithmische Normalverteilung [15]

$$\tilde{P}_{\chi}(\chi) = (\sqrt{2\pi}\chi\,\sigma_{\log})^{-1} \exp\left[-\frac{(\ln\chi - \mu_{\log})^2}{2\sigma^2}\right] \tag{IV.2.16}$$

angenommen.

IV.2.2 Die gemittelten Gasphasengleichungen

Ausgehend von den in Kapitel (II.1) eingeführten allgemein formulierten Gasphasengleichungen werden in diesem Kapitel Erhaltungsgleichungen für eine stationäre, zweidimensionale, axialsymmetrische turbulente Sprayflamme angegeben. Bei den meisten turbulenten Strömungsproblemen der Praxis reichen Informationen über die gemittelten Werte der fluid-mechanischen Größen aus. Deshalb werden durch Einsetzen einer in

Mittel- und Schwankungswert aufgeteilten Feldgröße Φ in die Erhaltungsgleichungen der Gasphase Gleichungen für die gemittelten Erhaltungsgrößen hergeleitet. Aufgrund der großen Dichteschwankungen in turbulenten reaktiven Strömung ist es erforderlich, zur Mittelung der Feldgrößen Φ die dichtegewichtete Mittelung nach Favre zu verwenden [79]:

$$\Phi = \tilde{\Phi} + \Phi'' \,. \tag{IV.2.17}$$

Dabei ist $\tilde{\Phi} = \overline{\rho\,\Phi}/\,\overline{\rho}$ der dichtegewichtete Mittelwert und Φ'' seine Fluktuation.

Mit der Definition des favre-gemittelten Transportoperators $q(\tilde{\Phi})$

$$q(\tilde{\Phi}) \equiv \frac{\partial\,(\overline{\rho}\tilde{u}\tilde{\Phi})}{\partial\,x} + \frac{1}{r}\frac{\partial\,(r\overline{\rho}\tilde{v}\tilde{\Phi})}{\partial\,r} - \frac{\partial}{\partial\,x}\left(\Gamma_{\Phi,\mathrm{eff}}\frac{\partial\,\tilde{\Phi}}{\partial\,x}\right) - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\,r}\left(r\Gamma_{\Phi,\mathrm{eff}}\frac{\partial\,\tilde{\Phi}}{\partial\,r}\right) \tag{IV.2.18}$$

läßt sich eine Erhaltungsgleichung in der allgemeinen Form

$$q(\tilde{\Phi}) = q_{\mathrm{Gas},\tilde{\Phi}} + q_{\mathrm{Spray},\tilde{\Phi}} \tag{IV.2.19}$$

schreiben (siehe Veröffentlichung von Hollmann und Gutheil [73]). Dabei sind $q_{\mathrm{Gas},\tilde{\Phi}}$ und $q_{\mathrm{Spray},\tilde{\Phi}}$ Quellterme der Gas- bzw. Flüssig-Phase. Dieses Gleichungssystem wird durch das ideale Gasgesetz $\overline{\rho} = \overline{p}\overline{M}/\,(R\tilde{T})$ geschlossen.

Durch die Mittelung der Erhaltungsgleichungen für den Mischungsbruch, den Impuls und die Energie treten zusätzliche Terme der Form $\overline{\rho\,u_{\mathrm{i}}''\Phi''}$auf. Zur Schließung der Erhaltungsgleichungen werden diese Terme mit Hilfe des Gradientenflußansatzes [15, 78, 80] modelliert, nach dem der Term $\overline{\rho\,u_{\mathrm{i}}''\Phi''}$proportional zum Gradienten von $\tilde{\Phi}$ gesetzt wird:

$$\overline{\rho\,u_{\mathrm{i}}''\Phi''} = -\overline{\rho}\,\Gamma_{\Phi,\mathrm{t}}\,\mathrm{grad}\tilde{\Phi}\,. \tag{IV.2.20}$$

Dabei ist $\Gamma_{\Phi,\mathrm{t}}$ der turbulente Austauschkoeffizient. Der effektive Austauschkoeffizient $\Gamma_{\Phi,\mathrm{eff}}$ in Gl. (IV.2.18) ist über folgende Beziehung mit dem turbulenten Austauschkoeffizienten verknüpft:

$$\Gamma_{\Phi,\mathrm{eff}} = \Gamma_{\Phi,\mathrm{t}} + \frac{\mu_{\mathrm{t}}}{\sigma_{\,\Phi,\mathrm{t}}}\,. \tag{IV.2.21}$$

Die turbulente Viskosität μ_{t} wird in Abhängigkeit der gemittelten turbulenten kinetischen Energie $\tilde{k}$ und der turbulenten Dissipationsgeschwindigkeit $\tilde{\epsilon}$ nach der Wirbelviskositätshypothese von Prandtl und Kolomogorov bestimmt, nach der $\mu_{\mathrm{t}} = C_D\overline{\rho}\tilde{k}/\,\tilde{\epsilon}$ ist. $\sigma_{\,\Phi,\mathrm{t}}$ ist die Prandtl-Schmidt-Zahl der Erhaltungsgröße Φ.

In Tabelle (IV.2.1), die von Hollmann und Gutheil [73] für Methanol/Luft-Sprayflammen zusammengestellt wurde, sind die Quellterme beider Phasen zusammengefaßt. Die Quellterme der flüssigen Phase hängen u.a. von der Tröpfchenanzahl in einem Paket k pro Zeit und Volumen $\dot{N}_{\mathrm{p,k}}$, von der Masse eines Tropfenpaketes $m_{\mathrm{p,k}}$ und von der Gesamtanzahl der Pakete $\mathrm{N_p}$ ab. Änderungen, die sich durch Übergang von dem Methanol/Luft- auf das H_2/O_2-System ergeben, sind in Tabelle (IV.2.1) bereits eingearbeitet und werden im folgenden erläutert.

$\tilde{\Phi}$	$q_{\mathrm{Gas},\tilde{\Phi}}$	$q_{\mathrm{Spray},\tilde{\Phi}}$
1	0	$\sum_{\mathrm{k=1}}^{\mathrm{N_p}} (\dot{N}m)_{\mathrm{p,k}} \equiv \overline{q}_m$
$\tilde{u}$	$-\frac{\partial \overline{p}}{\partial x} - \frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial x}\left[\mu_{\mathrm{eff}}\left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} + \frac{1}{r}\frac{\partial (r\tilde{v})}{\partial r}\right)\right] + \overline{\rho} g$	$\sum_{\mathrm{k=1}}^{\mathrm{N_p}} (\dot{N}mu)_{\mathrm{p,k}}$
$\tilde{v}$	$-\frac{\partial \overline{p}}{\partial r} - \frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial r}\left[\mu_{\mathrm{eff}}\left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} + \frac{1}{r}\frac{\partial (r\tilde{v})}{\partial r}\right)\right] - 2\frac{\mu_{\mathrm{eff}}\tilde{v}}{r^2}$	$\sum_{\mathrm{k=1}}^{\mathrm{N_p}} (\dot{N}mv)_{\mathrm{p,k}}$
$\tilde{h}$	0	$\sum_{\mathrm{k=1}}^{\mathrm{N_p}} (\dot{N}mh)_{\mathrm{p,k}}$
$\tilde{\xi}$	0	0
$\widetilde{\xi''^2}$	$2\Gamma_{\widetilde{\xi''^2},\mathrm{t}}\mathrm{div}^2(\tilde{\xi}) - 2\overline{\rho}\frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}}\widetilde{\xi''^2}$	$-\overline{q}_m\widetilde{\xi''^2}$
$\tilde{k}$	$G_k - \overline{\rho}\tilde{\epsilon}$	$\sum_{\mathrm{k=1}}^{\mathrm{N_p}} \vec{u}''(\dot{N}m\vec{v})_{\mathrm{p,k}}$
$\tilde{\epsilon}$	$(c_{\epsilon,1}G_k - c_{\epsilon,2}\overline{\rho}\tilde{\epsilon})\frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}}$	$\frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}}\sum_{\mathrm{k=1}}^{\mathrm{N_p}} \vec{u}''(\dot{N}m\vec{v})_{\mathrm{p,k}}$

Tabelle IV.2.1: Die Quellterme der Gas- und Flüssigphase in den Erhaltungsgleichungen der Gasphase nach Hollmann und Gutheil [73].

Eine zunächst ungemittelte Gleichung für den Mischungsbruch ξ wird durch Multiplikation der Bilanz für die Massenanteile der chemischen Spezies mit dem Koeffizienten $\mu_{\mathrm{i,H}}$ (siehe Kapitel (IV.2.1.2)) und anschließendes Aufsummieren aller Gleichungen gewonnen. Durch diese Operation erhält man wegen $Z_{\mathrm{H}} = \sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{K}} \mu_{\mathrm{i,H}} Y_{\mathrm{i}}$

$$\frac{\partial\,(\rho\, Z_{\mathrm{H}})}{\partial\, t} + \mathrm{div}(\rho\,\vec{v} Z_{\mathrm{H}}) = \mathrm{div}\,(\Gamma_m\,\mathrm{grad} Z_{\mathrm{H}}) + \underbrace{\sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{K}} \mu_{\mathrm{i,H}} W_{\mathrm{i}} \dot{\omega}_{\mathrm{i}}}_{=0} + \underbrace{\sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{K}} \mu_{\mathrm{i,H}} \delta_{\ \mathrm{i,S}} q_m}_{=0}. \qquad \text{(IV.2.22)}$$

In dieser Gleichung ist der Austauschkoeffizient $\Gamma_m = \rho\, D$, wobei der Diffusionskoeffizient D_{i} für die Diffusion der Spezies i in die Mischung durch einen mittleren Diffusionskoeffizienten D ersetzt wurde. Wegen der Erhaltung der Elementmasse ist der chemische Produktionsterm gleich Null. Bei der Turbulenzmodellierung hat dies den großen Vorteil, daß kein mittlerer chemischer Quellterm modelliert werden muß und damit Parameter, die abgeschätzt werden müßten, an dieser Stelle entfallen.

Im Flüssig-Sauerstoff/Wasserstoff-System verschwindet der Quellterm des Phasenaustauschs in Gl. (IV.2.22) für den Elementmassenbruch von Wasserstoff Z_{H} ebenfalls, da bei $\delta_{\ \mathrm{O_2,S}} = 1$ (i=Sauerstoffkomponente) der Koeffizient $\mu_{\mathrm{O_2,H}}$ gleich Null ist und für die restlichen Komponenten $\delta_{\ \mathrm{i,S}} = 0$ gilt. Formuliert man die Erhaltungsgleichung für den Elementmassenbruch von Sauerstoff Z_{O}, bleibt freilich ein Quellterm des Phasen-

austauschs in dieser Gleichung stehen, da das Produkt $\mu_{\mathrm{O_2,O}}\delta_{\ \mathrm{O_2,S}}$ gleich Eins ist. Für den Elementmassenbruch Z_{O} gilt:

$$\frac{\partial\,(\rho\,Z_{\mathrm{O}})}{\partial\,t}+\mathrm{div}(\rho\,\vec{v}Z_{\mathrm{O}})=\mathrm{div}\,(\Gamma_m\,\mathrm{grad}Z_{\mathrm{O}})+\underbrace{\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}}\mu_{\mathrm{i,O}}W_{\mathrm{i}}\dot{\omega}_{\mathrm{i}}}_{=0}+\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{K}}\mu_{\mathrm{i,O}}\delta_{\ \mathrm{i,S}}q_m\,. \quad \text{(IV.2.23)}$$

Bei Anwendung der Beziehung $Z_{\mathrm{H}}+Z_{\mathrm{O}}=1$ kann leicht gezeigt werden, daß aus einer Addition der Gleichungen (IV.2.22) und (IV.2.23) die Kontinuitätsgleichung resultiert.

Wird der Elementmassenbruch Z_{H} durch den Mischungsbruch ξ ersetzt und eine Favre-Mittelung durchgeführt, erhält man schließlich die gesuchte Gleichung für den Mischungsbruch.

Zur Bestimmung der turbulenten Viskosität μ_{t} werden zwei weitere Erhaltungsgleichungen für $\tilde{k}$ und $\tilde{\epsilon}$ benötigt, die sich aus der Impulserhaltungsgleichung bzw. einer Erhaltungsgleichung für u_{i}'' herleiten lassen [15] und in Tabelle (IV.2.1) aufgeführt sind. Die empirischen Modellparameter des k-ϵ -Modells werden gemäß den Empfehlungen von Launder und Spalding gewählt [81].

Die Erhaltungsgleichung für die Varianz des Mischungsbruchs wird durch Kombination der ungemittelten Erhaltungsgleichungen für die Masse und den Mischungsbruch gewonnen [15]. Nach zeitlicher Mittelung und Anwendung des Gradientenflußansatzes erhält man folgende Gleichung [15]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\,\left(\overline{\rho}\widetilde{\xi''^2}\right)}{\partial\,t}+\frac{\partial\,(\overline{\rho}\tilde{u}\widetilde{\xi''^2})}{\partial\,x}+\frac{1}{r}\frac{\partial\,(r\overline{\rho}\tilde{v}\widetilde{\xi''^2})}{\partial\,r}-\frac{\partial}{\partial\,x}\left(\Gamma_{\widetilde{\xi''^2},\mathrm{eff}}\frac{\partial\,\widetilde{\xi''^2}}{\partial\,x}\right)-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\,r}\left(r\Gamma_{\widetilde{\xi''^2},\mathrm{eff}}\frac{\partial\,\widetilde{\xi''^2}}{\partial\,r}\right)\\ =2\Gamma_{\widetilde{\xi''^2},\mathrm{t}}\mathrm{div}^2(\tilde{\xi})-2\overline{\rho}\frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}}\widetilde{\xi''^2}+\overline{\xi''^2q_m}-\overline{2\xi''\xi q_m}.\end{aligned} \quad \text{(IV.2.24)}$$

Die beiden letzten Terme in Gl. (IV.2.24) treten aufgrund der Tröpfchenverdampfung auf und müssen modelliert werden. Dazu werden zunächst unter Anwendung der Beziehung $\widetilde{(q_m/\,\rho)}=\overline{q}_m/\,\overline{\rho}$ die Sprayterme umformuliert:

$$\overline{\xi''^2q_m}-\overline{2\xi''\xi q_m}=-\overline{q}_m\widetilde{\xi''^2}-2\,\tilde{\xi}\,\overline{\rho\,\left(\frac{q_m}{\rho}\right)''\xi''}. \quad \text{(IV.2.25)}$$

Der Term $\overline{\rho\,(q_m/\,\rho)''\xi''}$ ist ungeschlossen und bedarf einer weiteren Modellierung. Wird angenommen, daß die Varianzen $(q_m/\,\rho)''$ und ξ'' mit einer Konstanten $c_{T,1}$ korrelieren

$$\widetilde{\left(\frac{q_m}{\rho}\right)''\xi''}=c_{T,1}\sqrt{\widetilde{\left(\frac{q_m}{\rho}\right)''^2}}\sqrt{\widetilde{\xi''^2}} \quad \text{(IV.2.26)}$$

und außerdem die Turbulenzgrade proportional sind

$$\frac{\sqrt{\widetilde{\left(\frac{q_m}{\rho}\right)''^2}}}{\widetilde{\left(\frac{q_m}{\rho}\right)}} = c_{T,2}\frac{\sqrt{\widetilde{\xi''^2}}}{\tilde{\xi}}\,, \tag{IV.2.27}$$

erhält man folgende Gleichung für die Sprayterme:

$$\overline{\xi''^2 q_m} - \overline{2\xi''\xi q_m} = -\overline{q}_m\widetilde{\xi''^2}(1+2c_T) \qquad \text{mit } c_T = c_{T,1}c_{T,2}\,. \tag{IV.2.28}$$

Die rechte Seite von Gl. (IV.2.28) ist unabhängig von $\tilde{\xi}$. Daher kann die Bedingung, daß $\widetilde{\xi''^2}$ an der Stelle $\tilde{\xi} = 0,5$ ein Maximum hat [15] nicht zur Bestimmung von c_T ausgenutzt werden. Aufgrund dieser Schwierigkeit wird hier die Annahme der statistischen Unkorreliertheit von $q_m/\,\rho$ und ξ getroffen. Dadurch reduziert sich der in Gl. (IV.2.25) angegebene Sprayterm auf

$$\overline{\xi''^2 q_m} - \overline{2\xi''\xi q_m} = -\overline{q}_m\widetilde{\xi''^2}\,. \tag{IV.2.29}$$

Die Erhaltungsgleichung für die Varianz des Mischungsbruchs ist nun vollständig bestimmt. Damit ist die in Kapitel (IV.2.1.4) vorgestellte Berechnung einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion möglich, durch die die in einer laminaren *Flamelet*-Bibliothek abgelegten Massenbrüche Y_i mit den gemittelten Massenbrüchen im turbulenten Strömungsfeld $\tilde{Y}_\mathrm{i}$ verknüpft sind.

IV.2.3 Modellierung der flüssigen Phase

Das Spray wird wie bei der Berechnung der laminaren Sprayflammen in Tröpfchengrößenklassen eingeteilt. Für jede Größenklasse werden Tröpfchenpakete gepackt. Die mittlere Größe eines Tröpfchens in einem Paket wird mit dem Sauterradius angegeben:

$$R_\mathrm{p,k} = \frac{\int_0^\infty R_\mathrm{p}^3 f_\mathrm{p}\mathrm{d}R_\mathrm{p}}{\int_0^\infty R_\mathrm{p}^2 f_\mathrm{p}\mathrm{d}R_\mathrm{p}}\,. \tag{IV.2.30}$$

Dabei ist f_p die Tröpfchengrößenverteilung und $f_\mathrm{p}\mathrm{d}R_\mathrm{p}$ die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Tröpfchen in dem Größenintervall $[R_\mathrm{p}, R_\mathrm{p} + \mathrm{d}R_\mathrm{p}]$ liegt. $R_\mathrm{p,k}$ ist ein mittlerer Tröpfchenradius, bei dem das Verhältnis von Tröpfchenvolumen zu Tröpfchenoberfläche dem des gesamten Sprays entspricht.

Die Pakete werden entsprechend der Spraycharakteristik am Einströmrand radial verteilt und bewegen sich auf einer individuellen Trajektorie durch das zweidimensionale Strömungsfeld. Dabei heizen sich die Tröpfchen in der konvektiven Umgebung auf und verdampfen.

Wie schon im Modell zur Berechnung laminarer Sprayflammen kommt das Zwei-Film-Modell von Abramzon und Sirignano zur mathematischen Beschreibung dieser Prozesse zum Einsatz. Es wird unverändert Kapitel (II.4.1) entnommen. Allerdings wird vereinfachend die Tröpfchenaufheizung mit dem *Uniform Temperature Model* modelliert, dem die Annahme einer unendlich großen Wärmeleitfähigkeit im Tröpfcheninneren zugrunde liegt. Durch Wahl dieses Modells wird der numerische Aufwand in Grenzen gehalten, da für die uniforme Temperaturänderung im Tröpfchen lediglich Gl. (II.4.24) gelöst werden muß. Die Abnahme des Tröpfchenradius mit der Zeit wird mit der Massenbilanz, Gl. (II.4.22), bestimmt.

Die Bewegung eines Tropfenpaketes auf einer Trajektorie durch das Strömungsfeld wird mit einer Impulsgleichung berechnet:

$$\frac{4}{3}\pi R_{\mathrm{p,k}}^3 \rho_{\mathrm{l}} \frac{\mathrm{d}\vec{u}_{\mathrm{p,k}}}{\mathrm{d}t} = \pi R_{\mathrm{p,k}}^2 \frac{1}{2} \overline{\rho} (\tilde{\vec{u}} + \vec{u}'' - \vec{u}_{\mathrm{p,k}}) |\tilde{\vec{u}} + \vec{u}'' - \vec{u}_{\mathrm{p,k}}| C_{\mathrm{D}} + \frac{4}{3}\pi R_{\mathrm{p,k}}^3 \rho_{\mathrm{l}} \vec{g} \,. \quad \text{(IV.2.31)}$$

Diese Gleichung unterscheidet sich von der Impulsgleichung (II.4.30) für den laminaren Berechnungsfall dadurch, daß sie hier nicht für ein einzelnes Tröpfchen, sondern für ein Tröpfchenpaket mit dem Sauterradius $R_{\mathrm{p,k}}$ formuliert ist. Zudem wird durch Einsetzen der momentanen Gasgeschwindigkeit $\tilde{\vec{u}} + \vec{u}''$ der Einfluß der Turbulenz auf die Bewegung der Tropfenpakete berücksichtigt. Die Modellierung der mittleren Schwankung der Gasgeschwindigkeit $\vec{u}''$ erfolgt durch eine Gaußverteilung mit der Varianz $2/\,3\,\tilde{k}$ und dem Erwartungswert Null [83]:

$$G(|\vec{u}''|) = \left(\frac{4}{3}\pi\tilde{k}\right)^{-1/2} \exp\left(-\frac{3}{4\tilde{k}}|\vec{u}''|^2\right) . \quad \text{(IV.2.32)}$$

Der Widerstandsbeiwert C_{D} in Gl. (IV.2.31) wird als Funktion der Tröpfchen-Reynolds-Zahl Re nach folgenden Korrelationen [84] bestimmt:

$$\begin{aligned} C_{\mathrm{D}} &= \frac{24}{Re}\left(1 + \frac{Re^{2/3}}{6}\right) && \text{für} \quad Re < 1000 \\ C_{\mathrm{D}} &= 0.424 && \text{für} \quad Re \geq 1000 \,. \end{aligned} \quad \text{(IV.2.33)}$$

Die Reynolds-Zahl eines Tröpfchens ist durch die Gleichung

$$Re = \frac{2\overline{\rho}|\tilde{\vec{u}} + \vec{u}'' - \vec{u}_{\mathrm{l}}| R_{\mathrm{p,k}}}{\mu_{\mathrm{eff}}} \quad \text{(IV.2.34)}$$

gegeben. Sie hängt von der momentanen Gasgeschwindigkeit und der effektiven Viskosität μ_{eff} ab.

IV.3 Ergebnisteil

Wie anfangs erwähnt, wird in dieser Arbeit eine turbulente LOX/H_2-Sprayflamme berechnet, für die Meßdaten aus Versuchen der DLR Lampoldshausen an der Mikrobrennkammer M3 zur Verfügung stehen [18]. Mittels CARS-Messungen wurden radiale Temperaturprofile an drei axialen Positionen in der Brennkammer bei einem Druck von 0,5 MPa ermittelt. Weiterhin wurden mit der sogenannten *Particle Image Velocimetry* (PIV) die Position, Größe und Geschwindigkeit der LOX-Tröpfchen bestimmt. Auch OH-Emissionen wurden bereits an der Brennkammer gemessen. Allerdings liefern die Meßergebnisse nur eine qualitative Aussage über das OH-Konzentrationsfeld.

IV.3.1 Generierung von Startdaten

Abbildung (IV.3.1) zeigt die Aufnahme der Mikrobrennkammer M3. Sie ist 140 mm lang und hat einen Querschnitt von 60 × 60 mm. Fenster an den Seiten der Brennkammer erlauben den optischen Zugang für die Lasermeßtechnik. In der M3 herrscht ein Druck von 0,5 MPa und die Massenflüsse von LOX und Wasserstoff betragen am Ort der Eindüsung 39 g/s und 5,5 g/s.

Erst im hinteren Teil der Brennkammer hat sich das Spray gleichmäßig ausgebreitet und kann als dünn betrachtet werden. Deshalb wird nur der in Abb. (IV.3.2) schraffiert eingezeichnete Bereich simuliert.

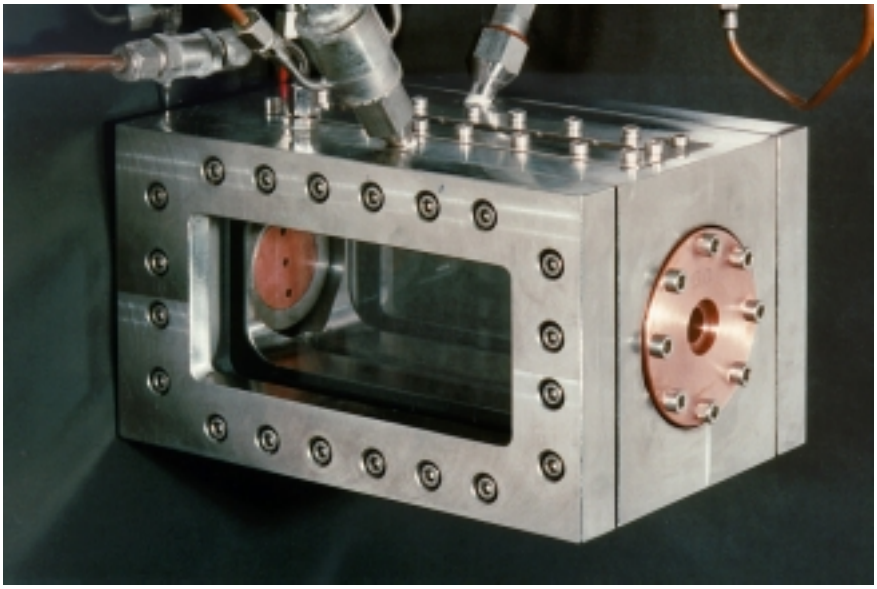

Abbildung IV.3.1: Aufnahme der Mikro-Brennkammer M3. Mit freundlicher Genehmigung der DLR Lampoldshausen ©.

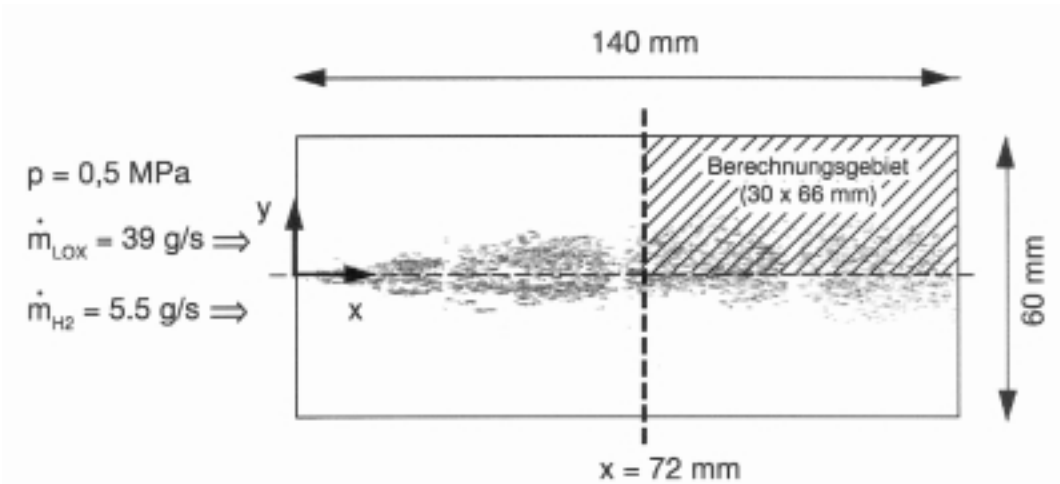

Abbildung IV.3.2: Darstellung des Berechnungsgebietes in der Mikro-Brennkammer M3.

IV.3.1.1 Startwerte der Gasphase

An der axialen Position x=72 mm (halbe Brennkammerlänge) werden radiale Profile für die Temperatur, die chemischen Spezies, die Geschwindigkeit, die turbulente kinetische Energie sowie die turbulente Dissipationsgeschwindigkeit aus Meßdaten [18] ermittelt bzw. approximiert.

Abbildung (IV.3.3) zeigt die an den drei axialen Positionen x=52, 87 und 127 mm gemessenen radialen Temperaturprofile und das an der axialen Position x=72 mm zwischen den Meßdaten interpolierte radiale Temperaturprofil, welches zur Brennkammerachse und zur Brennkammerwand hin wegen mangelnder Daten extrapoliert werden mußte. Nach Angabe der Experimentatoren beträgt die Wandtemperatur 400 K [90]. Der Abfall der Temperatur in Nähe der Brennkammerwand kann nur abgeschätzt werden.

Über die radialen Speziesprofile an der axialen Position x=72 mm liegen keinerlei Informationen aus den Experimenten vor. Deshalb ist man auch hier auf Abschätzungen angewiesen. Es wird angenommen, daß im Bereich des Sprays ($0 \leq y \leq 9$ mm, siehe Abb. (IV.3.4)) nur die Komponenten Sauerstoff und Wasser vorliegen. Führt man eine Berechnung des chemischen Gleichgewichts bei 0,5 MPa und 2300 K für eine stöchiometrische H_2/O_2-Mischung durch, liefert diese einen H_2O-Molenbruch von 0,6. Dieser Wert wird deshalb auf der Brennkammerachse (y=0 mm) gewählt. Weiterhin wird angenommen, daß an der radialen Position y=17 mm, an der ein kleiner Temperaturpeak liegt, H_2 und O_2 in stöchiometrischem Verhältnis vorliegen. Die Speziesprofile werden anschließend so durch die zuvor abgeschätzten Punkte gelegt, daß sich glatte Molenbruchprofile ergeben. Nach Abschätzung der Gastemperatur und der Speziesprofile ist es jetzt möglich, die Dichte mit dem idealen Gasgesetz zu approximieren.

Auch die Ermittlung eines Profils für die axiale Gasgeschwindigkeit u bringt Schwierig-

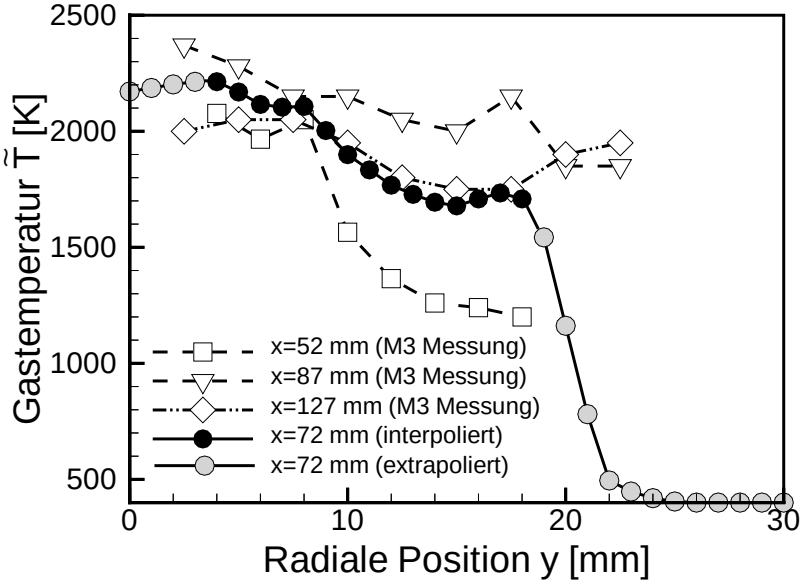

Abbildung IV.3.3: Gemessene und inter- bzw. extrapolierte radiale Temperaturprofile [90].

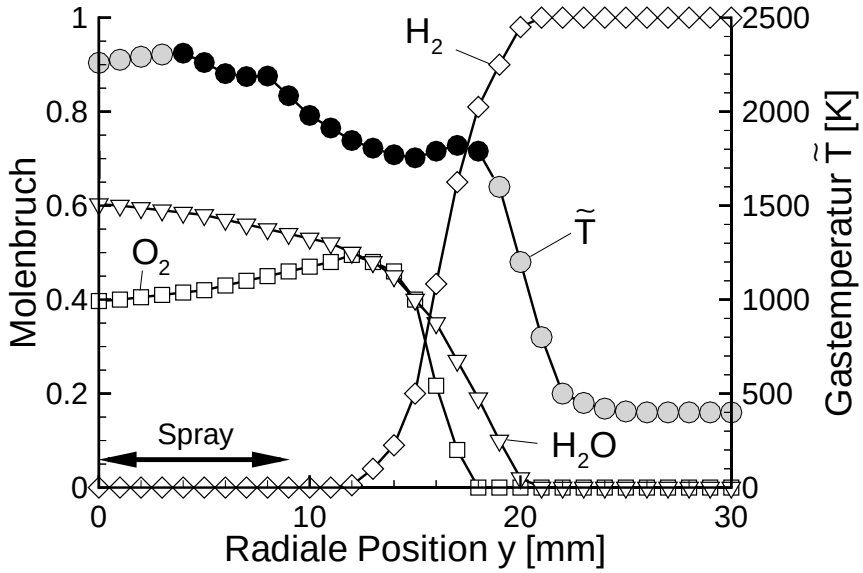

Abbildung IV.3.4: Abgeschätzte radiale Speziesprofile.

keiten mit sich, da keine direkten Meßdaten vorliegen. Im Bereich des Sprays wurden mit der *Droplet Tracking Velocimetry* die Geschwindigkeiten und Größe einzelner Tröpfchen gemessen. Wegen der geringen Trägheit der kleinsten Tröpfchen bietet es sich an, die Gasgeschwindigkeit mit deren Geschwindigkeit gleichzusetzen. Abbildung (IV.3.5) zeigt aber, daß die Geschwindigkeiten der kleinsten (und auch der größten) Tröpfchen weit streuen und die Ableitung eines Gasgeschwindigkeitsprofils aus diesen Daten problematisch ist. Deshalb wird im Bereich des Sprays die Kontinuitätsgleichung $\overline{\rho}\tilde{u}$=const.

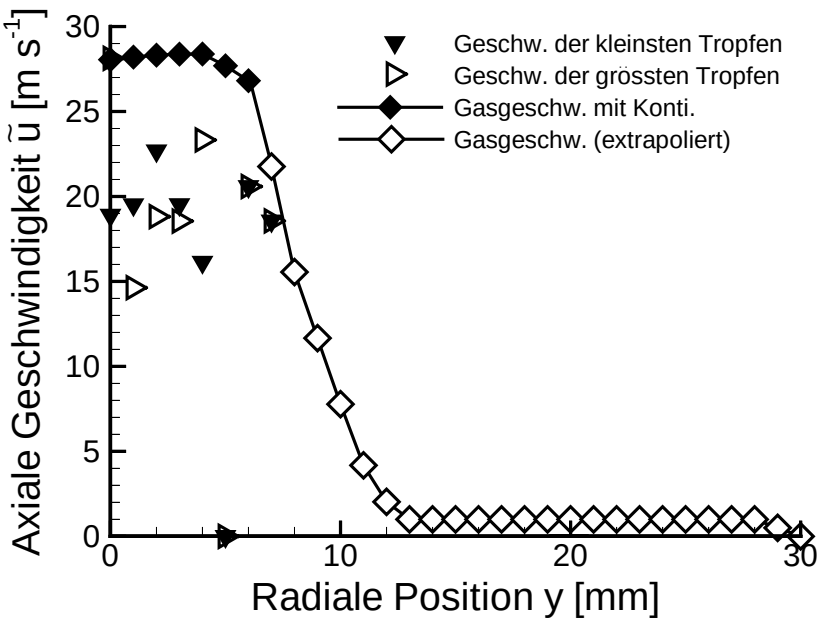

Abbildung IV.3.5: Abgeschätzte radiale Profile der axialen Geschwindigkeit.

angesetzt, d.h. der Quellterm des Phasenaustauschs wird vernachlässigt. Als Referenzwerte werden die maximale Tröpfchengeschwindigkeit und die Gasdichte an der radialen Position y=0 mm gewählt. Der Verlauf des $\tilde{u}$-Profils von dem äußeren Rand des Spraybereichs bis zur Brennkammerwand wird wie in Abb. (IV.3.5) eingezeichnet, abgeschätzt. Schließlich ist noch die Bestimmung radialer Profile für die turbulente kinetische Energie und die turbulente Dissipationsgeschwindigkeit erforderlich. Auch hier können keine Meßdaten herangezogen werden. Es werden deshalb zwei Gleichungen aus dem Benutzerhandbuch des Strömungscodes PHOENICS [91] verwendet:

$$\tilde{k} = 0,003\,\tilde{u}^2 \tag{IV.3.1}$$

$$\tilde{\epsilon} = \frac{0,09\,\tilde{k}^{2/3}}{0,01\,D} \quad \text{mit} \quad \begin{cases} D = 2\,y_{\text{in}} & \text{für } 0 \leq y \leq y_{\text{in}}, \\ D = 2\,(y_{\text{a}} - y_{\text{in}}) & \text{für } y_{\text{in}} < y \leq y_{\text{a}}\,. \end{cases} \tag{IV.3.2}$$

Dabei werden der Innenradius mit dem Radius des Spraybereichs (y_{in}=9 mm) und der Außenradius mit der halben Brennkammerhöhe (y_{a}=30 mm) gleichgesetzt. Abbildung (IV.3.6) zeigt die auf diese Weise berechneten radialen $\tilde{k}$- und $\tilde{\epsilon}$-Profile.

IV.3.1.2 Startwerte der flüssigen Phase

Nicht nur für die Gasphase sondern auch für die flüssige Phase sind die Bedingungen am Einströmrand des Berechnungsgebietes zu spezifizieren. Ziel ist das Packen von Tröpfchenpaketen, die Tröpfchen einer Größenklasse beinhalten und über den radialen Einströmbereich verteilt werden.

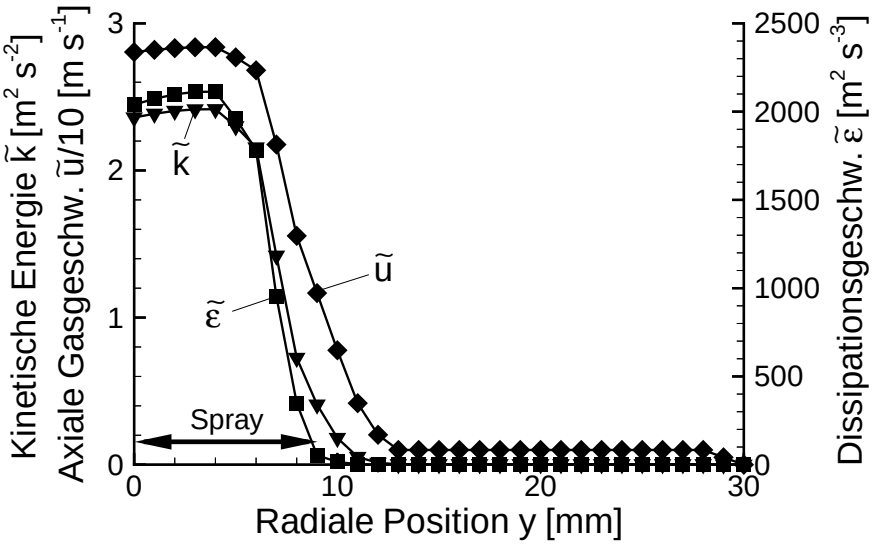

Abbildung IV.3.6: Die radialen Profile für $\tilde{k}$ und $\tilde{\epsilon}$.

Dazu wurden die aus der *Particle Image Velocimetry* zur Verfügung stehenden Informationen nach der im folgenden vorgestellten Methode ausgewertet. Abbildung (IV.3.7) zeigt die Unterteilung des Spraybereichs am Rand des Berechnungsgebietes, an der axialen Position x=72 mm, in Volumenelemente der Größe $\Delta x \times \Delta y \times \Delta z$. Dabei ist Δz=0,5 mm die Tiefenschärfe der photographischen Aufnahme.

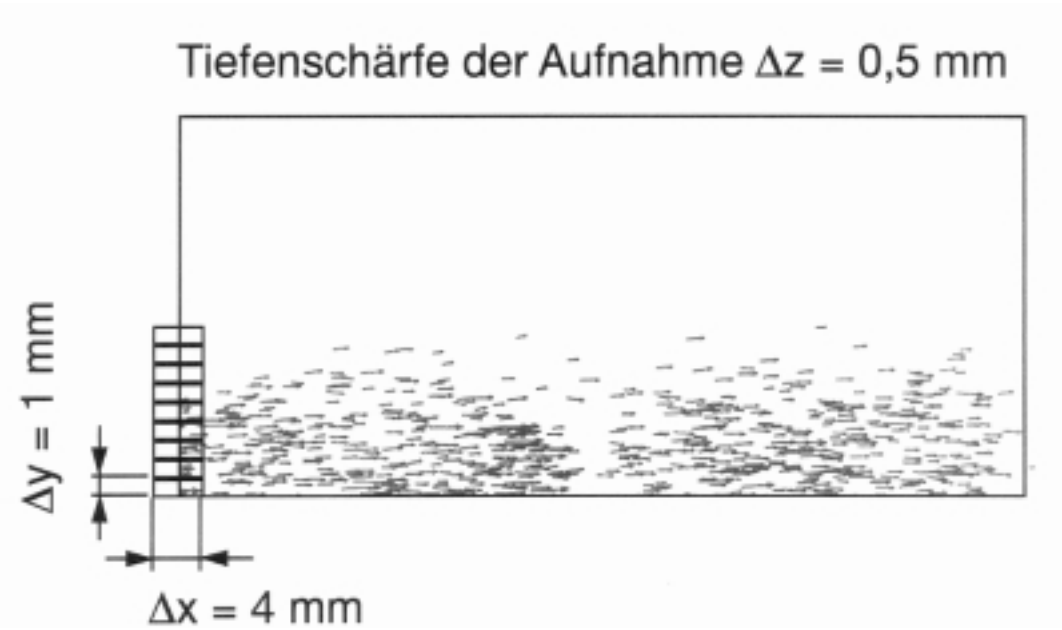

Abbildung IV.3.7: Auswertung der Spraydaten am linken Rand des Berechnungsgebietes (x=72 mm).

Δx wird gleich 4 mm und Δy gleich 1 mm gesetzt. Damit läßt sich der Spraybereich in neun radiale Positionen unterteilen:

$$y_{\mathrm{i}} = \frac{\Delta y}{2} + (\mathrm{i}-1)\Delta y \qquad \text{für } \mathrm{i} = 1, ..., 9\,. \tag{IV.3.3}$$

Außerdem werden 10 Tröpfchengrößenklassen eingeführt, die den Größenbereich von 0 bis 60 μm abdecken:

$$\begin{aligned}
\mathrm{j}=1: &\quad 0 \le R \le 5\,\mu\mathrm{m}\\
\mathrm{j}=2: &\quad 5 < R \le 10\,\mu\mathrm{m}\\
\mathrm{j}=3: &\quad 10 < R \le 15\,\mu\mathrm{m}\\
\mathrm{j}=4: &\quad 15 < R \le 20\,\mu\mathrm{m}\\
\mathrm{j}=5: &\quad 20 < R \le 25\,\mu\mathrm{m}\\
\mathrm{j}=6: &\quad 25 < R \le 30\,\mu\mathrm{m}\\
\mathrm{j}=7: &\quad 30 < R \le 37,5\,\mu\mathrm{m}\\
\mathrm{j}=8: &\quad 37,5 < R \le 45\,\mu\mathrm{m}\\
\mathrm{j}=9: &\quad 45 < R \le 52,5\,\mu\mathrm{m}\\
\mathrm{j}=10: &\quad 52,5 < R \le 60\,\mu\mathrm{m}\,.
\end{aligned}$$

Mehrere Messungen lieferten 16 Datensätze, in denen die Größe, Geschwindigkeit und Position der meßtechnisch erfaßten Tröpfchen abgespeichert sind. Diese Daten erlauben die Bestimmung einer Tröpfchenrate in Abhängigkeit der radialen Position y_{i} und der Tröpfchengrößenklasse j in einem Ringspalt der Breite Δx und der Höhe Δy (siehe Abb. (IV.3.8)).

Wenn $\mathrm{N}_{\mathrm{d_{i,j}}}$ die Tröpfchenanzahl im radialen Bereich $(y_{\mathrm{i}} - \Delta y/\,2) \le y < (y_{\mathrm{i}} + \Delta y/\,2)$ innerhalb der Größenklasse j ist, kann der spezifische LOX-Massenfluß durch ein Kontrollvolumen $\Delta x \times \Delta y \times \Delta z$ nach folgender Formel bestimmt werden:

$$\dot{m}''_{\mathrm{LOX_{i,j}}} = \frac{\frac{4}{3}\pi\rho_{\,\mathrm{LOX}}\left(\sum\limits_{\mathrm{n}=1}^{\mathrm{N_{d_{i,j}}}} R_{\mathrm{n}}^3 u_{\mathrm{n}}\right)}{\Delta x \Delta y \Delta z}\,. \tag{IV.3.4}$$

Damit beträgt der Massenfluß durch einen Ringspalt

$$\dot{m}_{\mathrm{LOX_{i,j}}} = \dot{m}''_{\mathrm{LOX_{i,j}}} \mathrm{A_{Ring_i}} = \dot{m}''_{\mathrm{LOX_{i,j}}} 2\pi y_{\mathrm{i}} \Delta y\,. \tag{IV.3.5}$$

Die Tröpfchenrate in einem Ringspalt erhält man schließlich aus der Beziehung

$$\dot{N}_{\mathrm{d_{i,j}}} = \frac{\mathrm{d\,N_{d_{i,j}}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\dot{m}_{\mathrm{LOX_{i,j}}}}{\frac{4}{3}\pi \overline{R}_{\mathrm{i,j}}^3\,\rho_{\,\mathrm{LOX}}}\,. \tag{IV.3.6}$$

Dabei ist $\overline{R}_{\mathrm{i,j}}$ der arithmetisch gemittelte Tröpfchenradius an der radialen Position i in der Größenklasse j.

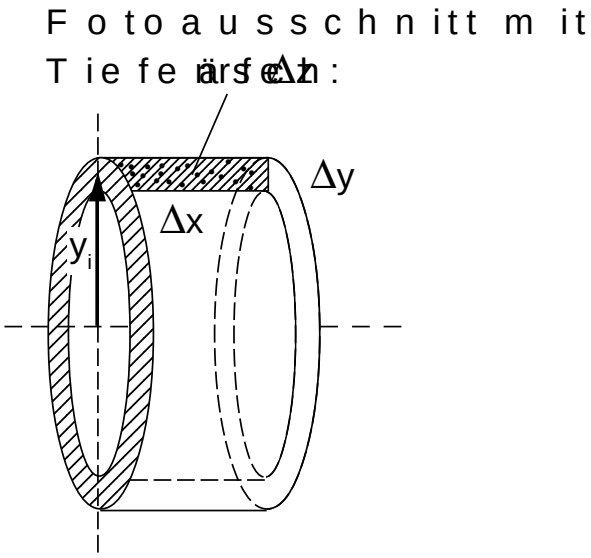

Abbildung IV.3.8: Ringspalt als Kontrollvolumen für die Bestimmung von Tröpfchenraten.

An jeder radialen Position $y_1, ..., y_9$ werden die Tröpfchen auf 400 Pakete verteilt, d.h. N_{P_i}=400. Die Paketanzahl an der radialen Position i für Größenklasse j wird mit $N_{P_{i,j}}$ bezeichnet. Unter der Annahme, daß das Pakete-Verhältnis $N_{P_{i,j}}/\,N_{P_i}$ gleich dem Tröpfchenraten-Verhältnis $\dot{N}_{d_{i,j}}/\,\dot{N}_{d_i}$ ist, berechnet sich $N_{P_{i,j}}$ zu

$$N_{P_{i,j}} = \left[N_{P_i} \left(\frac{\dot{N}_{d_{i,j}}}{\sum\limits_{j=1}^{10} \dot{N}_{d_{i,j}}} + \frac{1}{2} \right) \right] . \qquad \text{(IV.3.7)}$$

Abbildung (IV.3.9) zeigt auf der linken Seite die Tröpfchenrate und auf der rechten Seite die Paketanzahl an den radialen Positionen y_1 bis y_9 nach Auswertung der Meßergebnisse. Berechnet man mit $\dot{m}_{LOX} = \sum_{i=1}^{9} \sum_{j=1}^{10} \dot{m}_{LOX_{i,j}}$ den in der oberen Brennkammerhälfte meßtechnisch erfaßten Spraymassenfluß an der axialen Position x=72 mm, erhält man einen Wert von 2,1677 g/s. Umgerechnet auf die gesamte Brennkammerhöhe entspricht dies 11,1% des in die Brennkammer eingedüsten Spraymassenflusses. Da es nicht möglich ist, die insgesamt vorhandene Spraymasse experimentell zu bestimmen, ist noch eine weitere unbekannte Größe im Spiel.

IV.3.1.3 Variation der Startwerte

Es wurden drei Berechnungen mit variierten Parametern am Einströmrand durchgeführt. Die Startwerte für die erste Berechnungsvariante I wurden eingangs vorgestellt. Bei Berechnungsvariante II wird das radiale Profil der Gasgeschwindigkeit wie in Abb. (IV.3.10) dargestellt geändert. Die Profile für $\tilde{k}$ und $\tilde{\epsilon}$ werden mit Gl. (IV.3.1) neu bestimmt. Bei

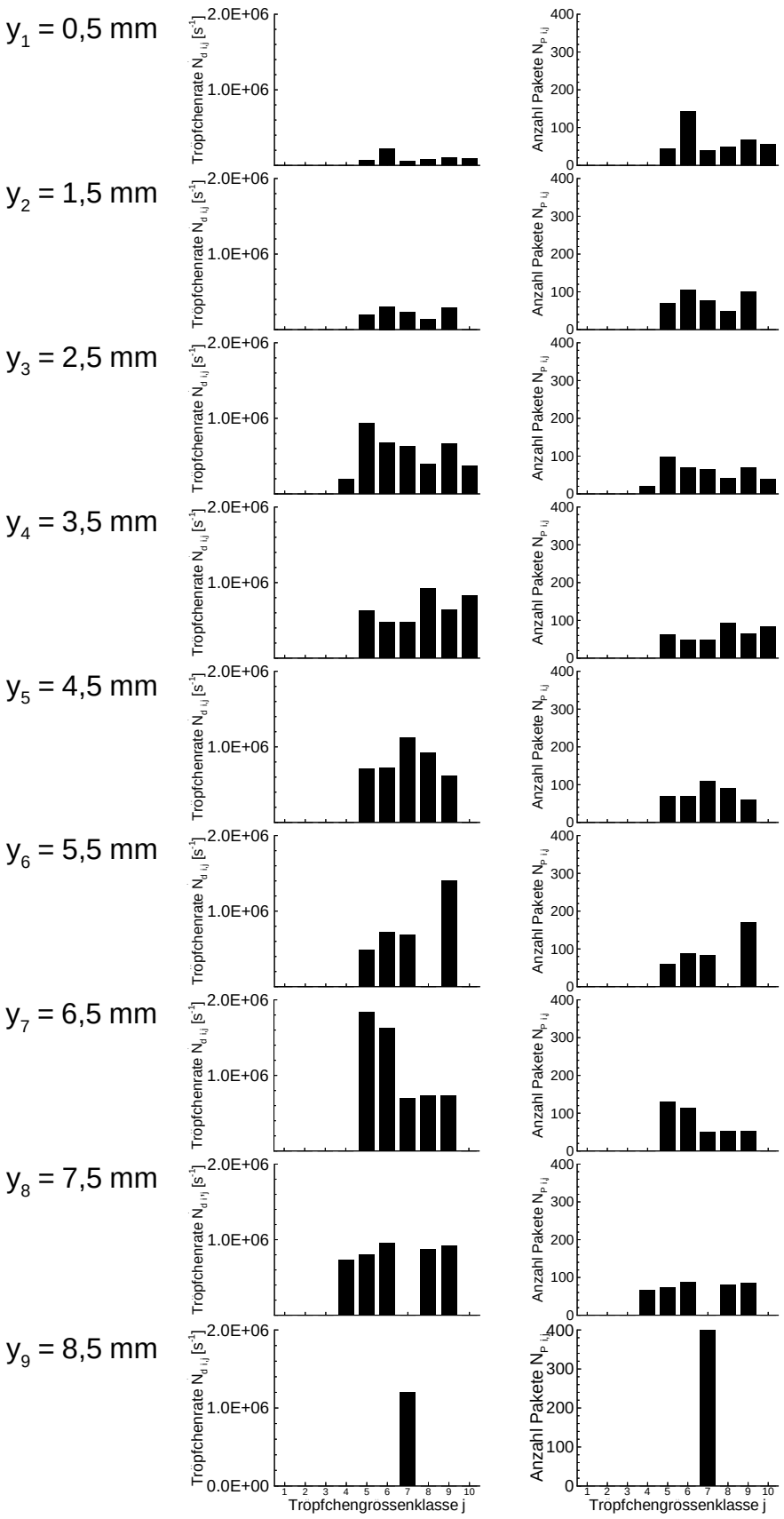

Abbildung IV.3.9: Tröpfchenrate (links) und Paketanzahl (rechts) als Funktion von radialer Position y_i und Tröpfchengrößenklasse j.

den Rechnungen I und II wird mit dem meßtechnisch erfaßten Spraymassenfluß gerechnet (s.o.). In Variante III wird der Spraymassenfluß auf 9,75 g/s hochgesetzt. Dies entspricht 50% des Spraymassenflusses am Injektor. Dabei wurde das Geschwindigkeitsprofil am Rand des Berechnungsgebietes wie in Rechnung II gewählt. Die Motivation für die Wahl dieser Startwerte wird in Zusammenhang mit der Diskussion der Berechnungsergebnisse geliefert.

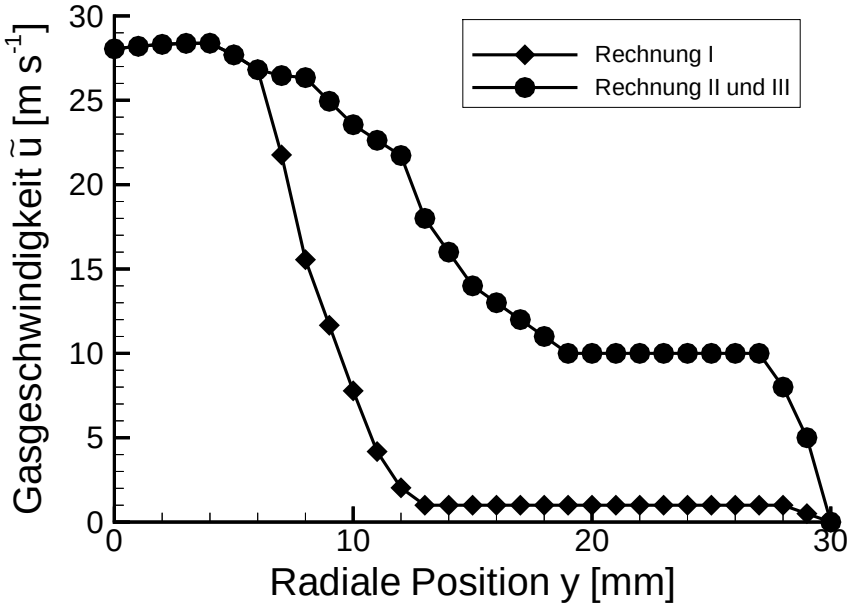

Abbildung IV.3.10: Die radialen Profile der axialen Gasgeschwindigkeit an der Position x=72 mm für die Berechnungsbeispiel I-III.

Durch die Anhebung der Gasgeschwindigkeit erhöhen sich die Gesamtmassenflüsse der eintretenden Fluide; sie sind zusammen mit dem Spraymassenfluß und dem Äquivalenzverhältnis in Tabelle (IV.3.1) zusammengestellt. Das Äquivalenzverhältnis wurde mit Gl. (III.4.7) unter Verwendung der Gesamtmassenflüsse berechnet. Es handelt sich also um ein Äquivalenzverhältnis, das auf den gesamten Einströmrand bezogen ist.

	Rechnung I	Rechnung II	Rechnung III
$\dot{m}_{H_2}$	0,201	2,095	2,095
$\dot{m}_{O_2}$	1,448	3,839	3,839
$\dot{m}_{LOX}$	2,168	2,168	9,750
E	0,46	2,79	1,23

Tabelle IV.3.1: Die in das Berechnungsgebiet eintretenden Massenflüsse in [g/s] (obere Brennkammerhälfte) und das am Einströmrand vorliegende Äquivalenzverhältnis unter Berücksichtigung der flüssigen Phase.

IV.3.2 Diskussion der Berechnungsergebnisse

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Berechnung von turbulenten LOX/H_2-Sprayflammen auf Basis der zuvor abgeschätzten Anfangsbedingungen vorgestellt. Abbildung (IV.3.11) zeigt die Temperaturfelder für die drei Varianten der Randwerte (I oben, II mitte, III unten). Unmittelbar nach Eindüsung der Stoffströme reagieren der gasförmige Sauerstoff mit dem Wasserstoff und die Gastemperatur steigt stark an. Die Temperaturmaxima liegen jeweils oberhalb von 2500 K und befinden sich in dem Mischungsbereich der beiden Reaktionspartner an dem Ort, an dem der Mischungsbruch gleich dem stöchimetrischen Wert ξ=0,11 ist.

Im Berechnungsfall I ist die Geschwindigkeit im äußeren Bereich der Brennkammer so gering, daß sich im hinteren Teil des Berechnungsgebietes eine Rückströmung ausbildet, die den heißen Stoffstrom zur Brennkammerwand hin lenkt. Wie nach Fertigstellung der vorliegenden Auswertung der Berechnungsergebnisse von Seiten der Experimentatoren berichtet wurde [90], konnte auch beim Versuch eine Rückströmung beobachtet werden. Um bei den numerischen Untersuchungen die maximale Wandtemperatur der Brennkammer in allen Bereichen unterhalb von 400 K zu halten, wurde in Berechnungsvariante II die Eintrittsgeschwindigkeit des kalten Wasserstoffs im Wandbereich erhöht (siehe Abb. (IV.3.10)). Die zusätzliche Erhöhung des Spraymassenflusses – Berechnungsvariante III – erbringt eine Senkung der Temperatur im hinteren Bereich der Brennkammer nahe der Brennkammerachse, da der Gasphase mehr Energie zur Aufheizung und Verdampfung des Sprays entzogen wird. Dies dokumentiert auch Abb. (IV.3.12), in der für die Berechnungen I bis III das axiale Temperaturprofil und das axiale Profil des Energie-Phasenaustauschterms $\overline{q}_e$ an der radialen Position y=5 mm zeigt. Es wurde y so gewählt, daß für alle drei Berechnungsfälle der Maximalwert des Phasenaustauschterms der Energiegleichung $\overline{q}_e$ auf der Schnittlinie liegt. Der Maximalwert von $\overline{q}_e$ der Variante III ist sehr viel größer als der der Varianten I und II, da zur Verdampfung der doppelten Spraymasse mehr Energie der Gasphase entzogen wird.

Leider liegen keine Meßdaten für die Konzentrationen der chemischen Komponenten und damit auch keine Hinweise für eine Korrektur der abgeschätzten Speziesprofile am Rand des Berechnungsgebietes vor. Durch Erhöhung des Wasserdampfanteils oder auch durch ein anderes Mischungsverhältnis von Wasserstoff und Sauerstoff wäre eine Dämpfung der chemischen Reaktionen möglich, die den Temperaturanstieg direkt nach Eintritt in das Berechnungsgebiet im Mischungsbereich der Komponenten H_2 und O_2 unterbinden würde. Eine Gegenüberstellung der berechneten mit den gemessenen radialen Temperaturprofilen an drei verschiedenen axialen Positionen in der Brennkammer (siehe Abb. (IV.3.13)) macht deutlich, daß das berechnete Temperaturniveau im Spray- und Wandbereich der Strömung zu niedrig und im Mischungsbereich zu hoch ist. Die radialen Temperaturprofile sind unmittelbar geprägt durch die Bedingungen stromauf. Ohne weitere Informationen über die chemische Zusammensetzung am Einströmrand ist die Erzielung genauerer Berechnungsergebnisse deshalb schwierig.

Der Mischungsbruch ist für die Berechnungsfälle I bis III in Abb. (IV.3.14) gegeben. Wie bereits in Abb. (IV.3.11) gezeigt, verläuft die Isolinie $\tilde{\xi}=\xi_{\mathrm{st}}$ entlang der Temperaturmaxi-

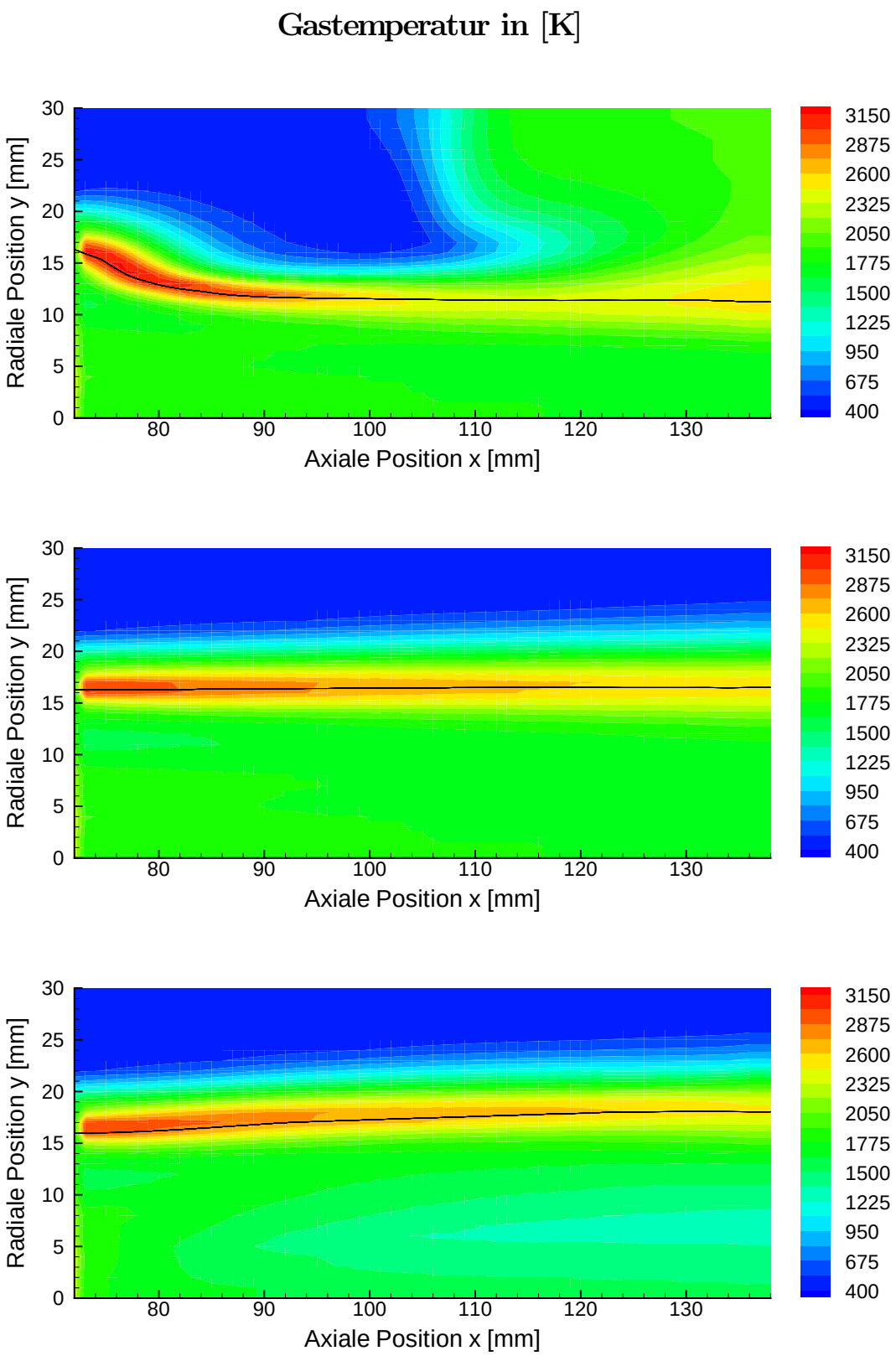

Abbildung IV.3.11: Temperaturfelder der Berechnungsfälle I bis III mit den Isolinien $\xi = \xi_{\mathrm{st}} = 0,11$.

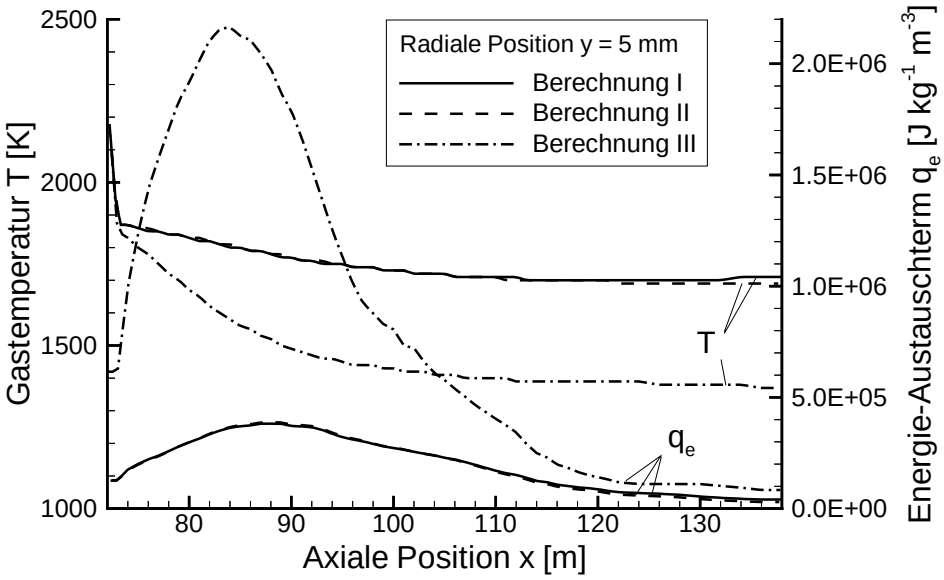

Abbildung IV.3.12: Axiale Profile der Gastemperatur und des Energie-Phasenaustauschterms an der radialen Position y=5 mm für die Berechnungsvarianten I bis III.

ma. Im äußeren Bereich der Strömung wird reiner Wasserstoff eingedüst; dort ist der Mischungsbruch gleich Eins. Nahe der Brennkammerachse, in der Kernzone der Strömung, liegt ein Gemisch aus O_2 und H_2O vor, der Mischungsbruch ist dort kleiner als 0,1. Die Kontourplots für den Mischungsbruch und den H_2-Massenbruch ähneln sich sehr, da der Mischungsbruch auf atomaren Wasserstoff bezogen ist (siehe Abb. (IV.3.15)). Es dringt kein Wasserstoff in den Bereich der O_2/H_2O-Strömung ein. Kern- und Außenströmung sind durch die Reaktionszone voneinander getrennt. Dies zeigt auch der Kontourplot des Sauerstoffmassenbruchs, Abb. (IV.3.16). Wasserdampf wird im heißen Bereich der Flamme gebildet. Das H_2O-Konzentrationsfeld ist deshalb dem Temperaturfeld ähnlich, siehe Abb. (IV.3.17). Schließlich sind noch die OH-Konzentrationen in Abb. (IV.3.18) gezeigt. Die Peaks des OH-Feldes fallen mit den Temperaturpeaks zusammen.

In Abb. (IV.3.19) sind die Speziesprofile der Komponenten O, H, OH, H_2O, H_2, O_2, HO_2 und H_2O_2 sowie das Temperaturprofil an der axialen Position x=127 mm für die Berechnungsvarianten I bis III dargestellt. Es wird hier noch einmal deutlich, daß sich Variante I durch die hohe Wandtemperatur und den hohen Wasserdampfanteil in der Außenströmung des hinteren Brennkammerabschnitts von den Varianten II und III unterscheidet. Die Kernströmung ist in den drei behandelten Fällen einander sehr ähnlich. Deutlich ist auch in dieser Darstellung das Einbrechen der Temperatur in der Kernströmung bei erhöhtem Spraymassenfluß (Variante III) zu sehen.

In Abb. (IV.3.20) wird der aus den experimentellen Daten ermittelte Sauterradius des Sprays in Abhängigkeit der radialen Position an der axialen Stelle x=104 mm mit den berechneten Sauterradius-Profilen der Variante I verglichen. Die Profile aus Experiment und Simulation liegen nahe beieinander und weisen durch Turbulenz bedingte

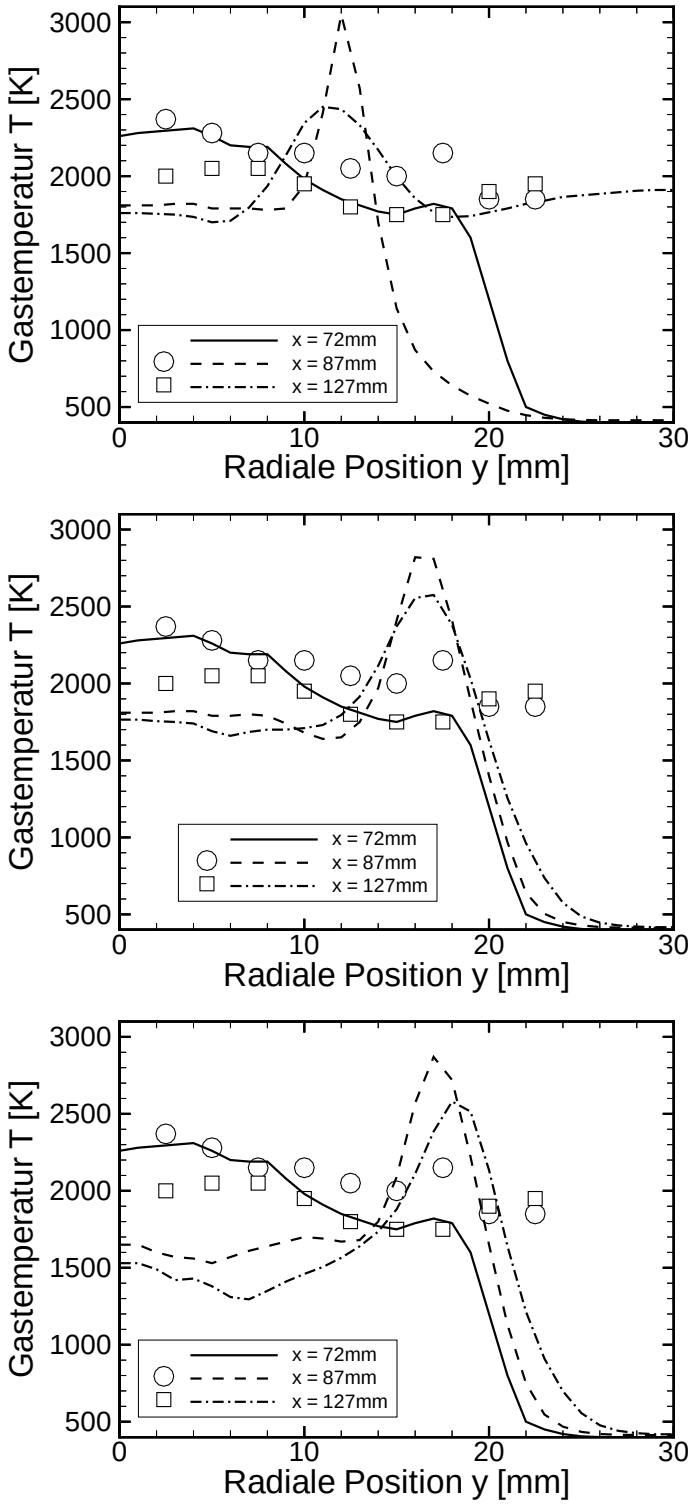

Abbildung IV.3.13: Radiale Temperaturprofile der Berechnungsfälle I bis III (Linien) und Meßwerte (Symbole).

Schwankungen gleicher Größenordnung auf. Gemessene Tröpfchengrößen wurden nur bis zu einer radialen Position von 10 mm und einer axialen Position von 104 mm zur Verfügung gestellt. Deshalb bricht in Abb. (IV.3.20) das Profil des Sauterradius an der Stelle y=±10 mm ab. Das simulierte Sauterradius-Profil, das nur für die obere Brennkammerhälfte berechnet ist, wurde an der Brennkammerachse (y=0 mm) gespiegelt, um einen Vergleich mit den gemessenen Daten in der unteren Hälfte der Brennkammer zu ermöglichen. Die Profile des Sauterradius der Berechnungsvarianten II und III unterscheiden sich an der axialen Position x=104 mm nur im Bereich y >10 mm und dort auch nur geringfügig. Deshalb werden diese Profile hier nicht gezeigt.

Aufgrund der hohen Gastemperatur am linken Rand des Berechnungsgebiets im Bereich der Mischungszone von Brennstoff und Oxidator sollte man für die Simulation erwarten, daß die Tröpfchen insgesamt schneller verdampfen als im Experiment beobachtet. Der Vergleich der Sauterradien in Abb. (IV.3.20) zeigt jedoch, daß die Tröpfchengrößen bei Simulation und Experiment recht gut übereinstimmen und sich somit die kurzzeitig zu hohe Gastemperatur nicht stark mindernd auf den Sauterradius des Sprays auswirkt.

Abbildung (IV.3.21) dokumentiert schließlich, daß auch die axialen Geschwindigkeiten des Sprays, die im Experiment ermittelt wurden, recht gut zu den Tröpfchenpaket-Geschwindigkeiten der Simulation passen. Es wurden hier radiale Geschwindigkeitsprofile der axialen Geschwindigkeitskomponente an der Position x=104 mm ausgewertet. Die Schwankungen in der Geschwindigkeit in radialer Richtung liegen bei Experiment und Simulation in der gleichen Größenordnung. Wegen der Trägheit der Tröpfchen erreichen diese nur mit zeitlicher Verzögerung die Gasgeschwindigkeit, die aufgrund der Temperaturerhöhung in Hauptströmungsrichtung zunimmt. An der Position x=104 mm ist die Spraygeschwindigkeit deutlich geringer als die Gasgeschwindigkeit.

Bei fortsetzenden Untersuchungen sollte überprüft werden, wie gut das am Einströmrand angenommene Gasgeschwindigkeitsprofil ist. Weiterhin sind dringend Informationen über die chemische Zusammensetzung des Gasstroms an dieser Stelle notwendig, um die korrekte Berechnung des Temperaturfeldes zu erreichen. Es ist bereits sehr ermutigend, daß die berechneten Tröpfchengrößen- und Tröpfchengeschwindigkeitsprofile gut mit den experimentellen Daten übereinstimmen. Dies zeigt, daß die Wechselwirkungen zwischen Gasströmung und Spray durch das mathematische Modell erfaßt werden. Allerdings muß auch festgehalten werden, daß eine endgültige Validierung des Modells für das LOX/H_2-System erst dann möglich sein wird, wenn alle erforderlichen Randbedingungen aus dem Experiment verfügbar sind.

Nach den erfolgreichen Berechnungen von turbulenten Methanolsprayflammen bestätigt diese Arbeit, daß das verwendete mathematische Modell allgemein gültig ist und so auch auf flüssig Sauerstoff/Wasserstoff-Sprayflammen angewendet werden kann. Auch hier tragen die numerischen Untersuchungen zu einem besseren Verständnis der komplexen Vorgänge in turbulenten reaktiven Strömungen bei.

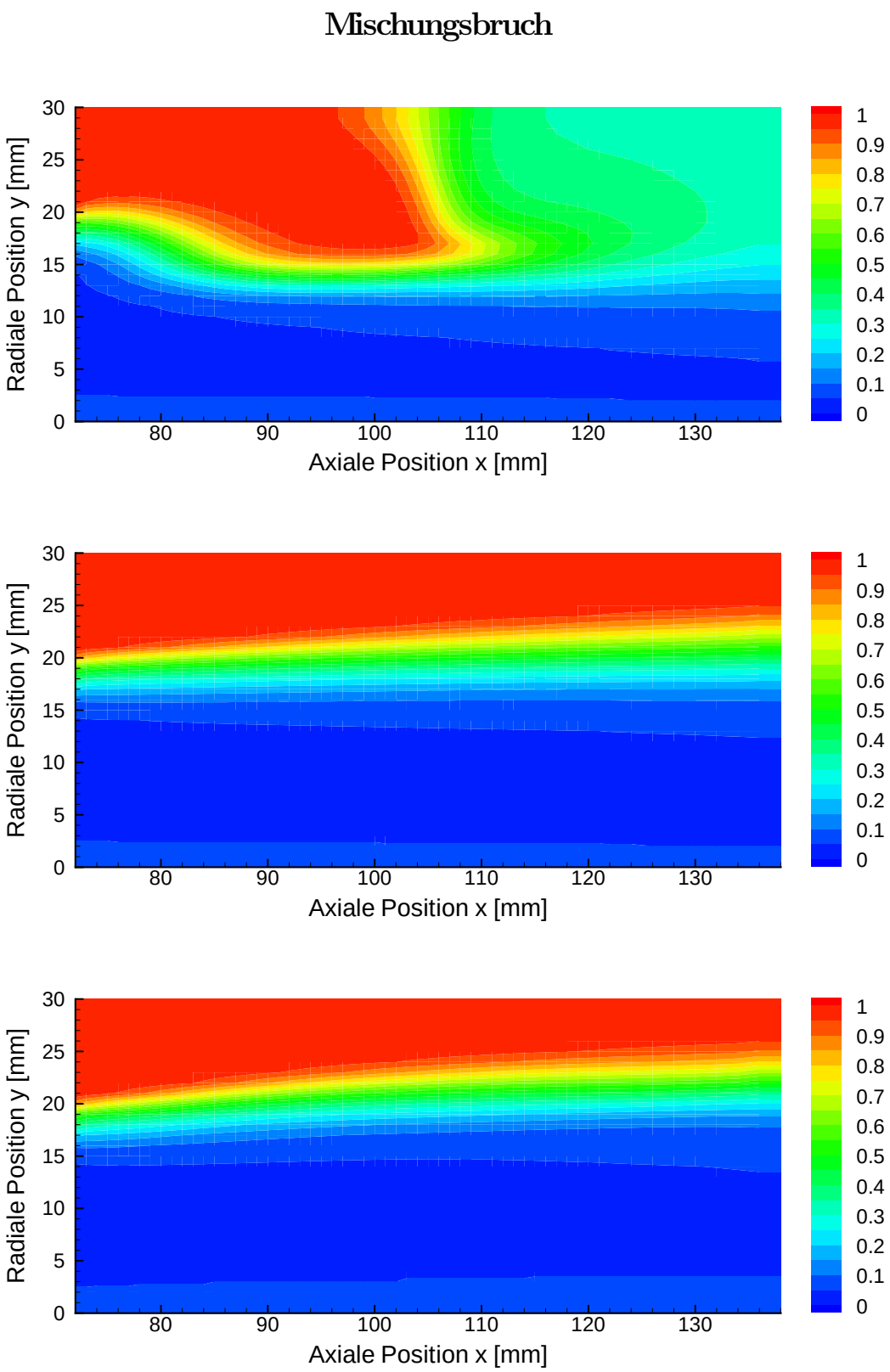

Abbildung IV.3.14: Mischungsbruch der Berechnungsfälle I bis III.

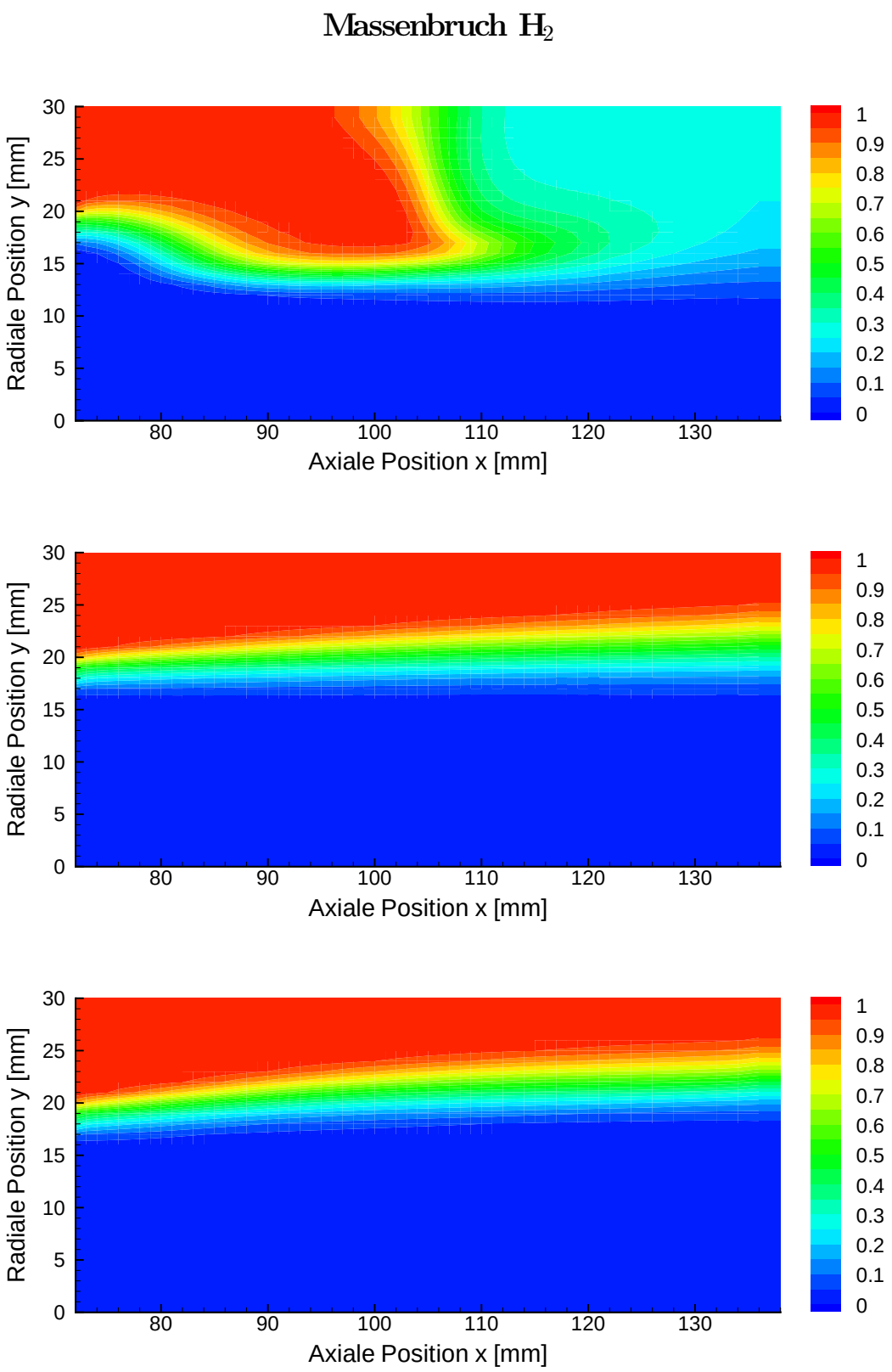

Abbildung IV.3.15: Massenbruch von Wasserstoff der Berechnungsfälle I bis III.

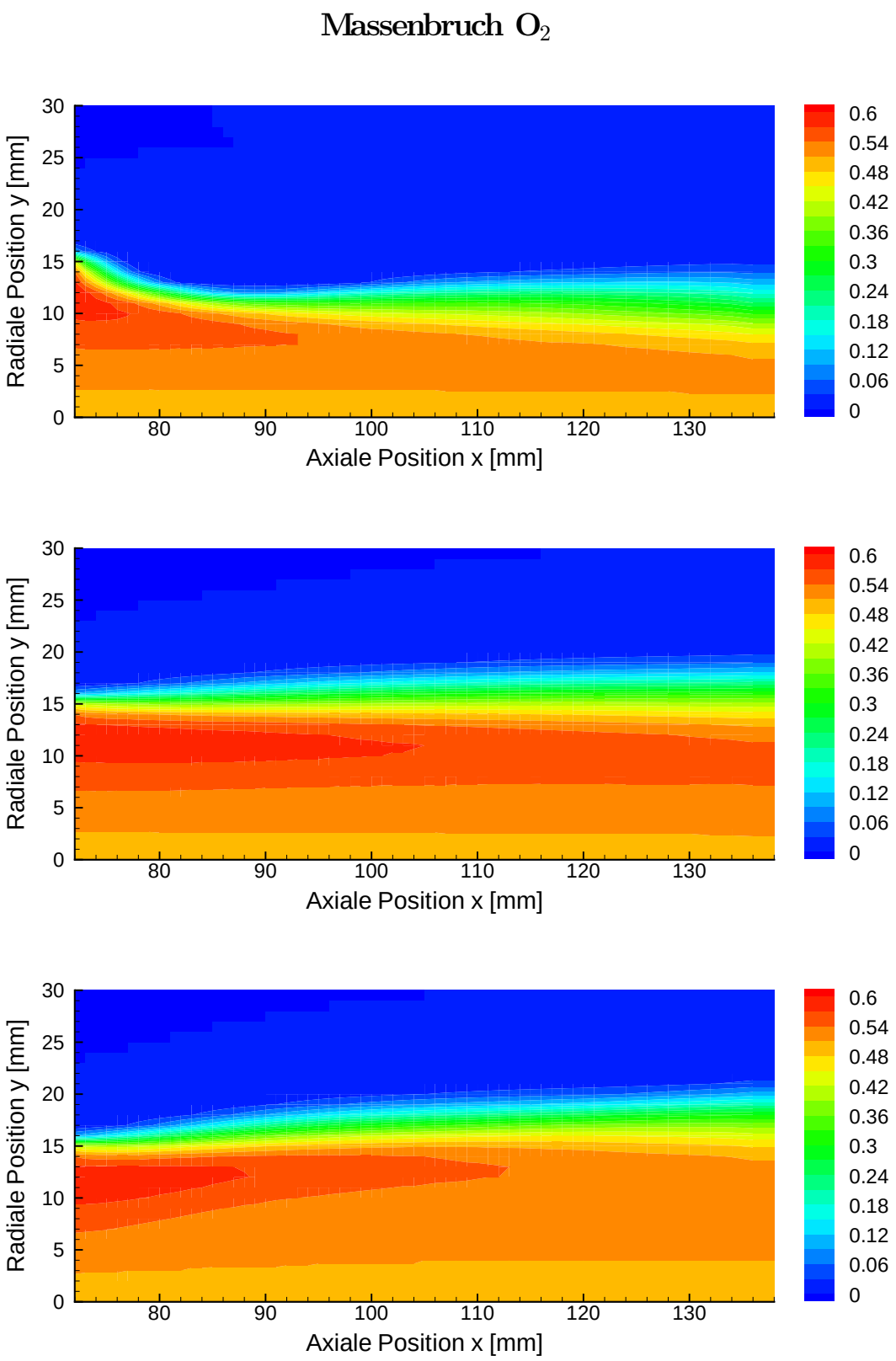

Abbildung IV.3.16: Massenbruch von Sauerstoff der Berechnungsfälle I bis III.

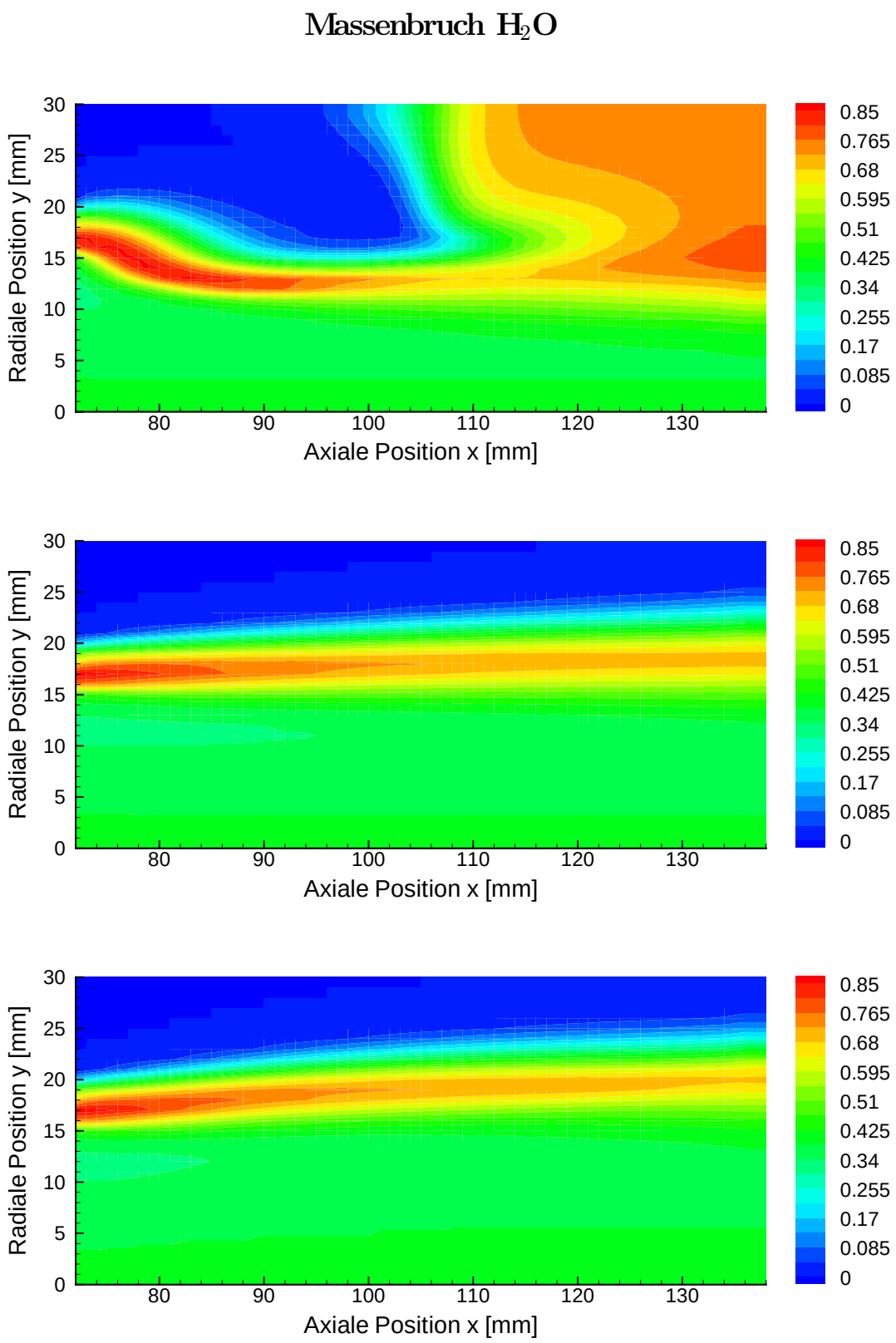

Abbildung IV.3.17: Massenbruch von Wasser der Berechnungsfälle I bis III.

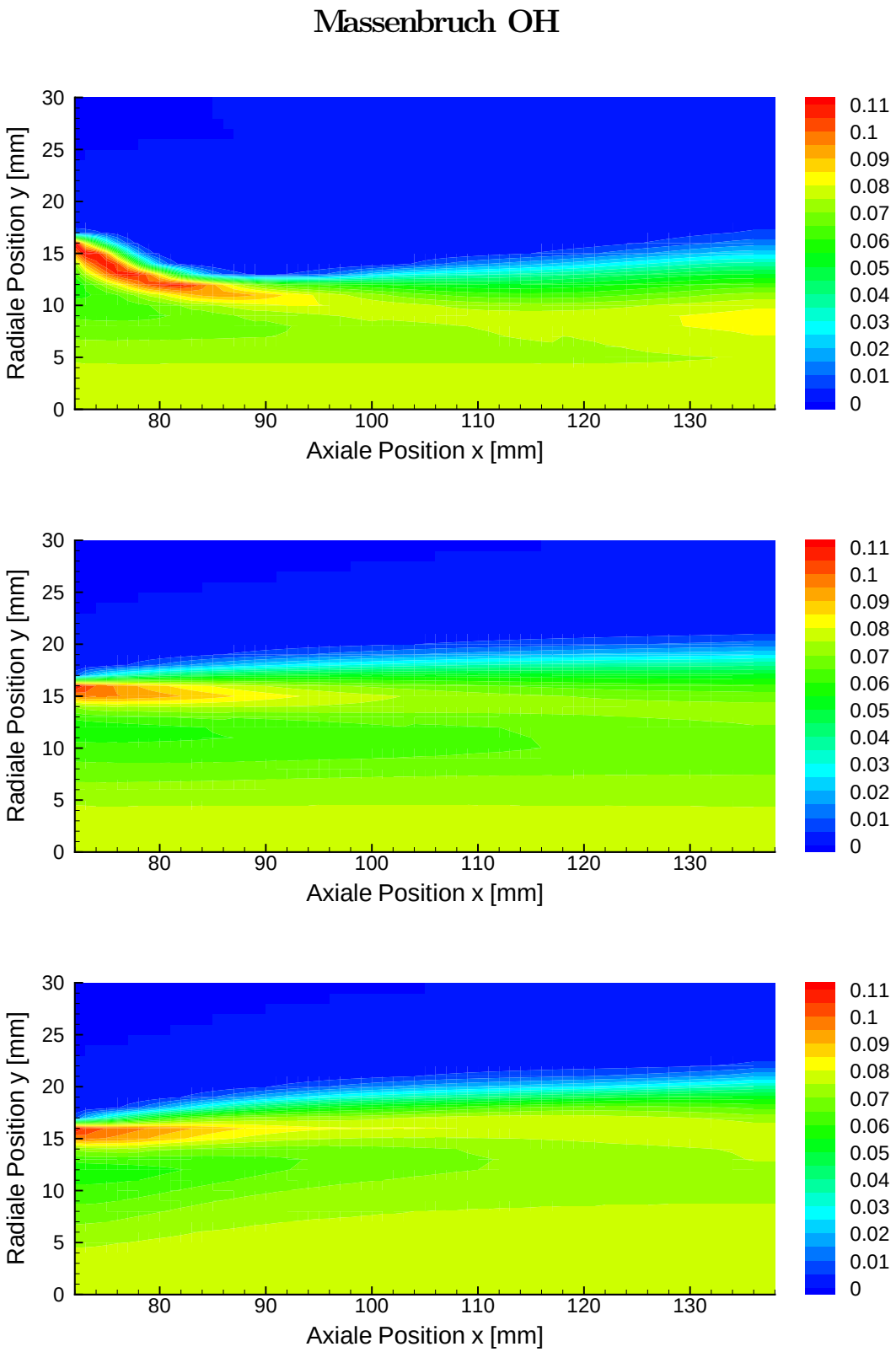

Abbildung IV.3.18: Massenbruch von OH der Berechnungsfälle I bis III.

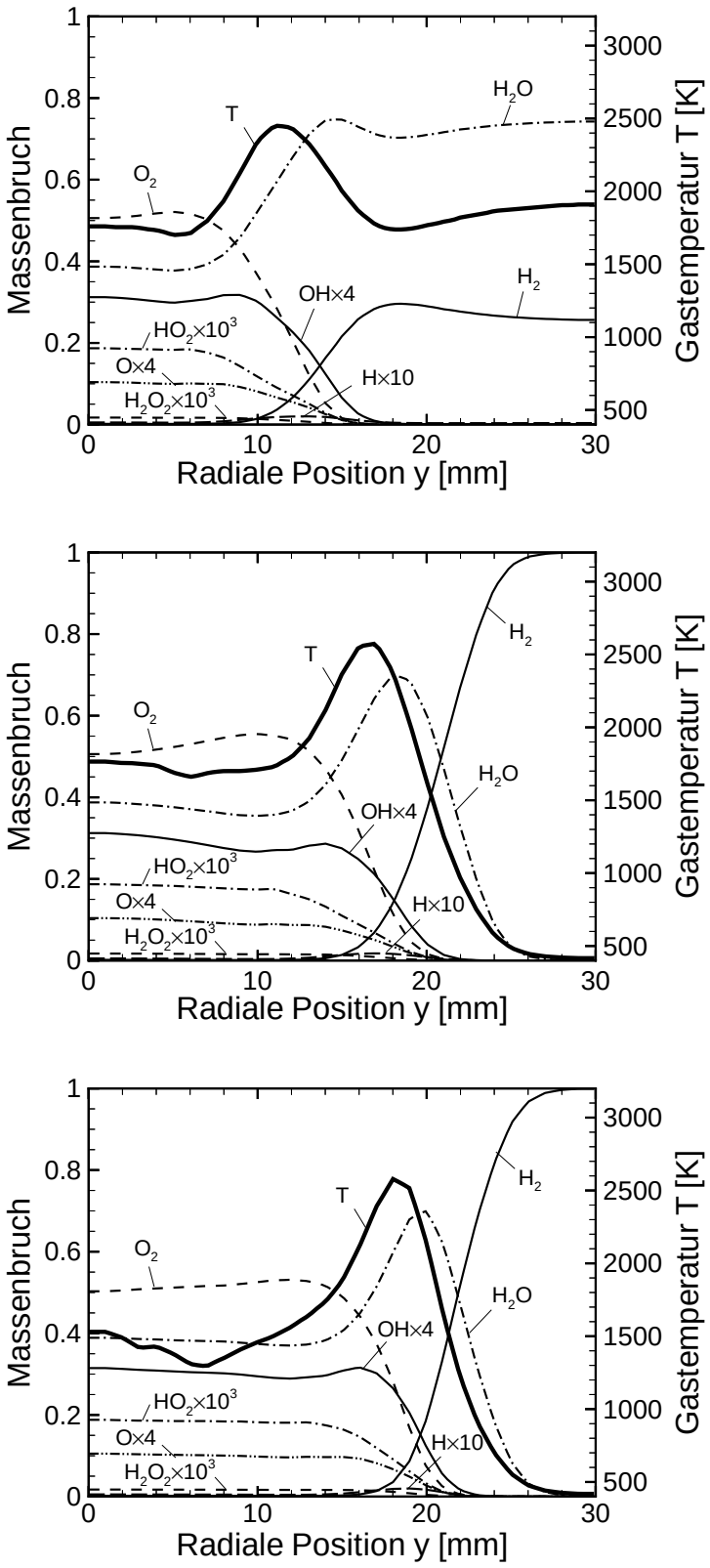

Abbildung IV.3.19: Radiale Spezies- und Temperaturprofile der Berechnungsfälle I bis III an der axialen Position x=127 mm.

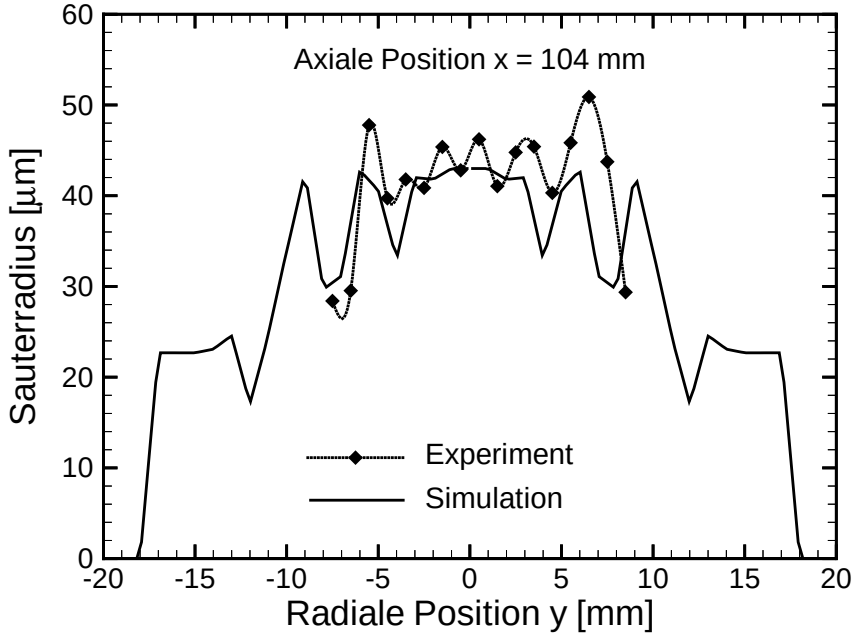

Abbildung IV.3.20: Radiale Profile des Sauterradius aus Experiment und Simulation (Berechnungsvariante I) an der axialen Position x=104 mm.

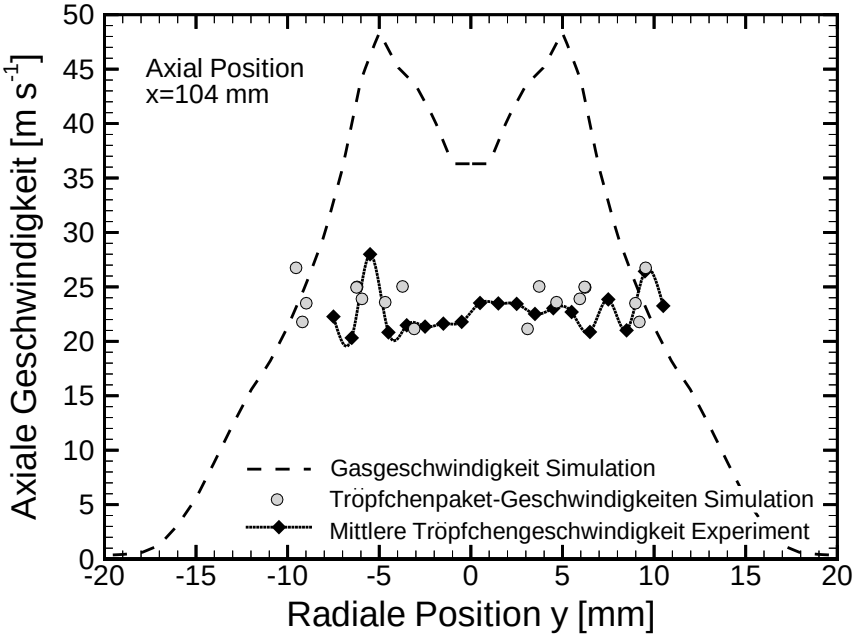

Abbildung IV.3.21: Radiale Profile der axialen Geschwindigkeiten von Gas und Spray an der axialen Position x=104 mm.Vergleich der im Experiment bestimmten mittleren Tröpfchengeschwindigkeit mit berechneten Geschwindigkeiten einzelner Tröpfchenpakete (Berechnungsvariante I).

Teil V

Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurden laminare und turbulente LOX/H_2-Sprayflammen modelliert und numerisch untersucht. Nach einer Übersicht über die Grundgleichungen der Gas- und Flüssigphase sowie der Vorstellung von Modellen für Transportprozesse und der detaillierten Reaktionskinetik wurden separat für den laminaren und den turbulenten Teil der Arbeit die Modellgleichungen beschrieben. Anschließend erfolgte jeweils eine Diskussion der Berechnungsergebnisse. Die wesentlichen Erkenntnisse sollen im folgenden zusammengefaßt werden.

Durch Vergleich von berechneten Temperatur- und Konzentrationsprofilen in einer H_2/Luft-Gasdiffusionsflamme mit experimentellen Daten von Brown [50] konnte der Gegenstromcode erfolgreich validiert werden.

Weiterhin wurde das Zwei-Film-Modell von Abramzon und Sirignano [11], welches die Aufheizung und Verdampfung einzelner LOX Tröpfchen in einer ruhenden Wasserstoffumgebung beschreibt, untersucht. Vergleicht man mit dem Zwei-Film-Verdampfungsmodell und mit dem detaillierteren Modell von Nicoli *et al.* [52] berechnete Tröpfchenlebensdauern, wird eine sehr gute Übereinstimmung beider Modelle bei Drücken bis 4 MPa festgestellt. Durch Berücksichtigung der druck- und temperaturabhängigen Gleichgewichtszusammensetzung an der Tröpfchenoberfläche nähert sich die mit dem Zwei-Film-Modell berechnete Lebensdauer den von Nicoli angegebenen Werten weiter an. Die Unterschiede der betrachteten Modelle sind im unterkritischen Druckbereich unwesentlich. Das Zwei-Film-Modell bietet allerdings zwei Vorteile: Zum einen wird der Einfluß von Konvektion auf den Verdampfungsprozeß mitberücksichtigt und zum anderen sind die Rechenzeiten verhaltnismäßig kurz. Deshalb gilt das Verdampfungsmodell von Abramzon und Sirignano als das geeignetste Modell für die Integration in einen Strömungscode. Mit dem Zwei-Film-Modell stößt man im hohen Druckbereich aber auch auf Grenzen. Erreicht die Tröpfchenoberfläche die Siedetemperatur bzw. bei überkritischen Drücken die kritische Mischungstemperatur kann auch durch die beschriebene Korrektur der Tröpfchengröße die Lebensdauer nicht genauer berechnet werden, bei der bei jedem Zeitschritt die Flüssigkeit, die im Bereich der Tröpfchenoberfläche die kritische Temperatur übersteigt, als verdampft angesehen wird. Bei Drücken oberhalb von 4 MPa weicht die mit dem Zwei-Film-Modell berechnete Lebensdauer stark von der von Nicoli *et al.* [52] berechneten Lebensdauer ab. Da in dieser Arbeit der Druck jedoch stets unterhalb von 4 MPa gewählt wurde, kann ohne weiteres das Zwei-Film-Modell verwendet werden. Es ist davon auszugehen, daß oberhalb eines Druckes von 4 MPa das detailliertere Modell von Nicoli *et al.* den überkritischen Phasenübergang besser beschreibt. Experimente zur Verdampfung von LOX-Einzeltröpfchen in ruhender Wasserstoffumgebung wurden nach Wissen des Autors bisher nicht durchgeführt. Ursache dafür sind die im Labor schwer handhabbaren hohen Drücke, die niedrige Temperatur und die Reaktivität des H_2/O_2-Systems. Eine Validierung der Verdampfungsmodelle im

trans- und überkritischen Bereich ist deshalb schwierig.

Nach Validierung der Teilmodelle wurden zunächst H_2/O_2-Gasdiffusionsflammen bei Drücken von 0,5 MPa und 3 MPa berechnet. Zielsetzungen waren zum einen die Bestimmung der Streckungsgeschwindigkeiten bei Verlöschung und zum anderen die Erzeugung einer Gasflammenbibliothek für p=0,5 MPa, die im zweiten Teil der Arbeit für die Simulation einer turbulenten Flamme benutzt wird. Bei dem höheren Druck wurde der Wert für die Verlöschgrenze mit einem Berechnungsergebnis von Sohn *et al.* [26] verglichen. Die maximalen Flammentemperaturen bei Verlöschung stimmen sehr gut überein, die Streckungsgeschwindigkeiten bei Verlöschung weichen leicht voneinander ab.

Im nächsten Schritt wurde die Flammenstruktur laminarer LOX/H_2-Gegenstromsprayflammen in Abhängigkeit der Parameter Äquivalenzverhältnis, Streckungsgeschwindigkeit und Dispersität des Sprays systematisch untersucht.

Die Anhebung des Äquivalenzverhältnisses E ist gleichbedeutend mit der Eindüsung eines geringeren Spraymassenflusses. Bei großem E wird der Gasphase weniger Energie für die Aufheizung des Sprays entzogen. Daher steigt die maximale Flammentemperatur an und verdampfter Sauerstoff wird verstärkt umgesetzt. Gleichzeitig nimmt die Flammenbreite aufgrund des geringeren Impulses der flüssigen Phase stark ab. Bei dem LOX/H_2-System ist das Verhältnis von flüssigem zu gasförmigem Massenfluß umgekehrt proportional zum Äquivalenzverhältnis; somit wird die Flammen mit zunehmendem Äquivalenzverhältnis schmaler. Bei einem Brennstoffspray/Luft-System hingegen verbreitert sich die Flamme mit zunehmendem Äquivalenzverhältnis, da hier das Verhältnis von flüssigem zu gasförmigem Massenfluß proportional zu E ist. Das heißt beide Systeme reagieren bezüglich der Flammenbreite entgegengesetzt auf die Änderung des Äquivalenzverhältnisses.

Wird die Streckungsgeschwindigkeit a am Einströmrand auf der Sprayseite der Gegenstromkonfiguration erhöht, steigt dort die Eintrittsgeschwindigkeit des Gases proportional zu $\sqrt{a}$. Da die Eintrittsgeschwindigkeit der Tröpfchen stets gleich der der Gasphase gesetzt wurde, nimmt der Impuls des Sprays mit Anstieg der Streckungsgeschwindigkeit zu, wodurch die Tröpfchen weiter in die Flamme eindringen und sich die Verdampfungszone verbreitert. Wie auch bei Gasflammen zu beobachten ist, nimmt die Breite der Reaktionszone mit Anhebung von a ab und die maximale Flammentemperatur auf der Gasseite der Konfiguration sinkt stark bis die Reaktionszone auf dieser Seite verschwindet. Bei einer sehr großen Streckungsgeschwindigkeit ab ca. 30000/s (E=1) durchdringen die Tröpfchen den Staupunkt der Gasphase. Bei weiterer Erhöhung der Streckung erfahren die Tröpfchen eine Umkehr ihrer Bewegungsrichtung und durchqueren erneut den Staupunkt, wobei Gas an der Tröpfchenoberfläche kondensiert. Die Kondensation tritt aufgrund der hohen Sauerstoffkonzentration und der niedrigen Gastemperatur am Staupunkt auf. Im Gegensatz zu Methanol- und Ethanolflammen (siehe [66]) ändern die Tröpfchen ihre Bewegungsrichtung bei den untersuchten Bedingungen nicht mehr als zweimal. Die Tröpfchen verdampfen nach dem zweiten Durchbrechen des Staupunktes stets auf der Sprayseite der Konfiguration, bzw. treten bei Streckungsgeschwindigkeiten oberhalb von 250000/s auf der Seite ihrer Einspritzung aus dem Berechnungsgebiet aus. Dabei bleibt die Reaktionszone auf der Sprayseite stets erhalten. Eine komplet-

te Verlöschung der Flamme konnte also nicht festgestellt werden. Diese wird sicherlich erzielt, wenn bei Anhebung der Streckungsgeschwindigkeit die Eintrittsgeschwindigkeit der Tröpfchen unabhängig von der Eintrittsgeschwindigkeit des Wasserstoffes reduziert wird. Weitere Untersuchungen sind hier zur Bestimmung der Verlöschbedingungen erforderlich.

Inhalt der Arbeit war weiterhin die Untersuchung des Einflusses der Dispersität des Sprays auf die Struktur von Gegenstromsprayflammen. Dazu wurden eine bidisperse mit einer monodispersen LOX/H_2-Sprayflamme verglichen, wobei der Tröpfchenradius des monodispersen Sprays gleich dem Sauterradius des bidispersen Sprays gesetzt wurde. Während die Temperatur- und Konzentrationsprofile beider Flammenstrukturen einander sehr ähnlich sind, werden Unterschiede in Bezug auf die flüssige Phase festgestellt. Die kleinen Tröpfchen des bidispersen Sprays verdampfen nahe des Einströmrandes, die großen Tröpfchen dringen im Vergleich zum monodispersen Spray weiter in die Flamme ein. Dadurch kommt es zu einer Aufweitung der Verdampfungszone und gleichzeitig zu einer Verbreiterung der gesamten Flamme. Ein Vergleich der Verdampfungsgeschwindigkeiten zeigt, daß die kleinen Tropfen des bidispersen Sprays den größeren Einfluß auf die Flammenstruktur haben.

Im Bereich der Reaktionszone auf der Sprayseite der Gegenstromanordnung wurde bei allen untersuchten Flammen ein nicht-monotoner Verlauf des Sauerstoff-Profils beobachtet. Es konnte gezeigt werden, daß die Schwankungen durch die konkurrierenden Prozesse LOX-Verdampfung und Sauerstoffverbrauch in chemischen Reaktionen begründet sind. Die Profile von HO_2 und H_2O_2 folgen dem Sauerstoffprofil, da diese Spezies in Reaktionen produziert werden, die O_2 und direkte Reaktionsprodukte wie OH enthalten. Auf der Gasseite der Konfiguration verbrennt verdampfter Sauerstoff und Wasserstoff in einer reinen Gasdiffusionsflamme – das Molenbruchprofil von gasförmigem Sauerstoff hat einen monotonen Verlauf.

Probleme bei der Untersuchung der laminaren LOX/H_2-Sprayflammen bereiteten insbesondere die hohen Rechenzeiten, die eine umfassendere Parameterstudie zur Bestimmung der Verlöschbedingungen einschränken und auch die Erzeugung einer vollständigen Sprayflammenbibliothek erschwert. Aufgrund der schnellen H_2/O_2-Reaktionskinetik mit den kleinen chemischen Zeitskalen erfolgen bei moderaten Strömungsgeschwindigkeiten chemische Umsätze auf engstem Raum. Die örtliche Auflösung bedarf eines sehr feinen Berechnungsgitters, das wiederum einen kleinen Zeitschritt bei der Berechnung erzwingt. Fortschritte können durch eine voll implizite Formulierung der Modellgleichungen erzielt werden. Die Problematik der zu hohen Rechenzeiten taucht nicht bei der Untersuchung von Brennstoffspray/Luft-Flammen auf, da die chemischen Zeitskalen um den Faktor 10 - 100 größer sind. Weiterhin ist für die Untersuchung der Sprayflammen bei hohem unterkritischen oder auch überkritischem Druck sowohl die Berücksichtigung einer Realgasgleichung zur Schließung des Gleichungssystems als auch die Implementierung eines Verdampfungsmodells, welches den Phasenübergang richtig beschreibt, erforderlich.

Weiterer Gegenstand der Arbeit war die numerische Untersuchung einer turbulenten LOX/H_2-Sprayflamme bei 0,5 MPa. Dazu wurde das von Hollmann und Gutheil [15, 16] entwickelte mathematische Modell für turbulente Methanol/Luft-Sprayflammen auf

H_2/O_2-Chemie umgestellt. Zudem wurde durch Modifikation des Zwei-Film-Verdampfungsmodells für Sauerstoff-Tröpfchen in dem Strömungscode CORA2 die Berechnung von LOX-Sprays ermöglicht. Die verwendete *Flamelet*-Bibliothek beinhaltet die in dieser Arbeit erzeugten H_2/O_2-Gasflammenstrukturen.

Auf Basis von experimentellen Daten der DLR Lampoldshausen, die an der Mikrobrennkammer M3 gemessen wurden, erfolgte die Generierung von Startwerten für die numerische Untersuchung einer LOX/H_2-Sprayflamme. Da nur radiale Temperaturprofile und Daten zu Tröpfchengröße und -geschwindigkeit zur Verfügung stehen, mußten die Bedingungen am Rand des Berechnungsgebietes abgeschätzt werden. Aufgrund der entsprechend unsicheren Randbedingungen konnten von den Berechnungsergebnissen von vornherein nur qualitative Aussagen erwartet werden. Detailliertere Informationen über die Zusammensetzung der Gasmischung, die Gasphasengeschwindigkeit und den Gesamtmassenfluß des Sprays sind für eine genauere Rechnung, die den Meßergebnissen näher kommt, unerläßlich. Trotz dieser Schwierigkeiten konnte gezeigt werden, daß der entwickelte Sprayflammencode die physikalisch-chemischen Prozesse und so auch die prinzipielle Struktur der Flamme qualitativ richtig wiedergibt.

Eine Verbesserung der Berechnungsergebnisse ist auch durch Einbindung einer Sprayflammenbibliothek zu erwarten, da in ihr der Einfluß des Sprays auf die laminare Flammenstruktur berücksichtigt ist. Diese Biliothek sollte Flammenstrukturen mit polydispersen Sprays beinhalten, da sich ihre Verlöschbedingungen deutlich von denen für monodisperse Sprayflammen unterscheiden [66].

Symbol	Bezeichnung	Einheit
a	Streckungsgeschwindigkeit	s^{-1}
A_j	präexponentieller Faktor der chemischen Reaktion j	m, mol, s
$\mathcal{A}_\mathrm{i}$	Stoffsymbol	
b_j	Temperaturexponent der chemischen Reaktion j	
B_M	Spalding-Stoffübergangszahl	
B_T	Spalding-Wärmeübergangszahl	
c_p	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck	$\mathrm{J\ kg^{-1}\ K^{-1}}$
$\overline{c}_p$	spezifische Wärmekapazität einer Mischung bei konstantem Druck	$\mathrm{J\ kg^{-1}\ K^{-1}}$
c_v	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen	$\mathrm{J\ kg^{-1}\ K^{-1}}$
C_D	Widerstandsbeiwert	
D	Anzahl der Tröpfchengrößenklassen	
D_i	Diffusionskoeffizient der Spezies i	$\mathrm{kg\ m^{-2}}$
$D_\mathrm{i,j}$	binärer Diffusionskoeffizient der Spezies i und j	$\mathrm{kg\ m^{-2}}$
D_i^T	Thermodiffusionskoeffizient der Spezies i	$\mathrm{kg\ m^{-2}}$
Da	Damköhler-Zahl	
E	Gesamtenergie	J
E	Äquivalenzverhältnis	
e	spezifische Gesamtenergie	$\mathrm{J\ kg^{-1}}$
$\overline{\overline{E}}$	Einheitsmatrix	
E_j	Aktivierungsenergie der chemischen Reaktion j	$\mathrm{J\ mol^{-1}}$
$\vec{F}_\Phi$	Fluß der extensiven Größe Φ	
F_M	Korrekturfaktor für die Filmdicke bei diffusivem Austausch	
F_T	Korrekturfaktor für die Filmdicke bei thermischem Austausch	
f	stromfunktionsähnliche Größe	
f_i	Fugazität der Komponente i	MPa
f_p	Tröpfchengrößenverteilung	
$\vec{g}$	Vektor der Gravitationsbeschleunigung	$\mathrm{m\ s^{-2}}$
G	Schwerepotential	$\mathrm{m^2\ s^{-2}}$
h	spezifische Enthalpie	$\mathrm{J\ kg^{-1}}$
$h_\mathrm{p,k}$	spezifische Enthalpie eines Tröpfchenpaketes	$\mathrm{J\ kg^{-1}}$
$\vec{j}_\mathrm{i}$	Massenfluß durch molekulare Diffusion der Spezies i	$\mathrm{kg\ m^{-2}\ s^{-1}}$
$\vec{j}_\mathrm{i}^\mathrm{T}$	Massenfluß durch Thermodiffusion der Spezies i	$\mathrm{kg\ m^{-2}\ s^{-1}}$
$\vec{j}_e$	Energiefluß aufgrund von Diffusion und Wärmeleitung	$\mathrm{J\ m^{-2}\ s^{-1}}$
$\vec{j}_e^\mathrm{c}$	Energiefluß aufgrund von Wärmeleitung	$\mathrm{J\ m^{-2}\ s^{-1}}$
$\vec{j}_e^\mathrm{d}$	Energiefluß aufgrund von Diffusion	$\mathrm{J\ m^{-2}\ s^{-1}}$
$\vec{j}_e^\mathrm{D}$	Energiefluß aufgrund von Konzentrationsgradienten	$\mathrm{J\ m^{-2}\ s^{-1}}$
k	turbulente kinetische Energie	$\mathrm{m^2\ s^{-2}}$
k_j	Geschwindigkeitskoeffizient der Reaktion j	$\mathrm{m^3\ mol^{-1}\ s^{-1}}$
K	Anzahl der chemischen Komponenten	
l_t	integrale Längenskala	m
L_v	Verdampfungsenthalpie	$\mathrm{J\ kg^{-1}}$
Le	Lewis-Zahl	

m	Masse	kg
m_{i}	Masse der Spezies i	kg
m_{l}	Masse eines Tröpfchens	kg
$m_{\mathrm{p,k}}$	Masse eines Tröpfchenpaketes	kg
$\dot{m}$	Verdampfungsgeschwindigkeit	kg s^{-1}
Ma	Mach-Zahl	
N	Anzahl der chemischen Reaktionen	
$\mathrm{N_p}$	Anzahl Tröpfchenpakete	
$\dot{N}_{\mathrm{p,k}}$	auf ein Paket bezogene Tröpfchenrate	s^{-1} m^{-3}
n	Tröpfchenanzahldichte	m^{-3}
n_{i}	Stoffmenge der Komonente i	mol
Nu_0	Nusselt-Zahl ohne Berücksichtigung des Stefan-Flusses	
$\widetilde{Nu}$	korrigierte Nusselt-Zahl	
p	Druck	MPa
p_{c}	kritischer Druck	MPa
p_{s}	Dampfdruck	MPa
$\overline{\overline{p}}$	Drucktensor	MPa
P	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion	
Pr	Prandtl-Zahl	
q_Φ	Quellterm der Größe Φ	
q	spezifische Wärme	J kg^{-1}
$q_{m_{\mathrm{i}},\mathrm{c}}$	chemischer Quellterm in der Spezieserhaltungsgleichung	kg s^{-1}
q_{c}	chemischer Quellterm in der Energieerhaltungsgleichung	J m^{-3} s^{-1}
q_{r}	Strahlungs-Quellterm in der Energieerhaltungsgleichung	J m^{-3} s^{-1}
q_m	Phasenaustauschterm in der Kontinuitätsgleichung	kg m^{-3} s^{-1}
$q_{m_{\mathrm{i}}}$	Phasenaustauschterm in der Spezieserhaltungsgleichung	kg m^{-3} s^{-1}
$\vec{q}_p$	Phasenaustauschterm in der Impulserhaltungsgleichung	kg m^{-2} s^{-2}
$q_{p,x}$	x-Komponente des Phasenaustauschterms der Impulsgl.	kg m^{-2} s^{-2}
$q_{p,y}$	y-Komponente des Phasenaustauschterms der Impulsgl.	kg m^{-2} s^{-2}
q_e	Quellterm des Phasenaustauschs in der Energiegleichung für die spezifische Gesamtenergie	J m^{-3} s^{-1}
q_T	Quellterm des Phasenaustauschs in der Energiegleichung für die Temperatur	J m^{-3} s^{-1}
q_h	Quellterm des Phasenaustauschs in der Energiegleichung für die Enthalpie	J m^{-3} s^{-1}
$\dot{q}$	Wärmeleitstrom	J s^{-1}
r	radiale Koordinate	m
R	Tröpfchenradius	m
R_0	anfänglicher Tröpfchenradius zur Zeit $t = 0$	m
R	allgemeine Gaskonstante	kg J^{-1} K^{-1}
$\vec{r}$	Ortsvektor	m
Re	Reynolds-Zahl	
s_Φ	Fernwirkungsterm	
Sh_0	Sherwood-Zahl ohne Berücksichtigung des Stefan-Flusses	
$\widetilde{Sh}$	korrigierte Sherwood-Zahl	

Sc	Schmidt-Zahl	
s	transformierte radiale Ortskoordinate eines Tröpfchens	
T	Temperatur	K
T_{l}	Temperatur in einem Tröpfchen	K
T_{s}	Oberflächentemperatur eines Tröpfchens	K
t	Zeit	s
t_{c}	chemische Zeitskala	s
u	Geschwindigkeitskomponente	m s^{-1}
u_{l}	radiale Komponente der Tröpfchengeschwindigkeit	m s^{-1}
u_{in}	spezifische innere Energie	J kg^{-1}
V	Volumen	m^3
$\dot{V}$	Volumenfluß	m^3 s^{-1}
v	Geschwindigkeitskomponente	m s^{-1}
$\vec{V}_{\mathrm{i}}$	Diffusionsgeschwindigkeit der Spezies i	m s^{-1}
$V_{\mathrm{i},y}$	Diffusionsgeschwindigkeit der Spezies i in y-Richtung	m s^{-1}
$\vec{v}$	Geschwindigkeitsvektor	m s^{-1}
$\vec{v}_{\mathrm{i}}$	Teilchengeschwindigkeit der Spezies i	m s^{-1}
$\vec{v}_{\mathrm{l}}$	Geschwindigkeitsvektor eines Tröpfchens	m s^{-1}
$\vec{v}_{\mathrm{p,k}}$	Geschwindigkeitsvektor eines Tröpfchenpaketes	m s^{-1}
v_{l}	axiale Komponente der Tröpfchengeschwindigkeit	m s^{-1}
V_{m}	molares Volumen	m^3 mol^{-1}
$\overline{W}$	molare Masse einer Gasmischung	kg mol^{-1}
W_{i}	molare Masse der Spezies i	kg mol^{-1}
We	Weber-Zahl	
x	radiale Ortskoordinate	m
x_{l}	radiale Ortskoordinate eines Tröpfchens	
Y_{i}	Massenbruch der Spezies i	
y	axiale Ortskoordinate	m
y_{l}	axiale Ortskoordinate eines Tröpfchens	
Z	Realgasfaktor	
Z_{j}	Element-Massenbruch des Elements j	

Griechische Buchstaben

Symbol	**Bezeichnung**	**Einheit**
α	planare/axialsymmetrische Gegenstromkonfiguration	
α_{l}	thermische Diffusivität einer Flüssigkeit	
Γ	Austauschkoeffizient	kg m^{-1} s^{-1}
δ_{i}	Kronecker Symbol	
δ_{M}	Filmdicke bei diffusivem Austausch mit Stefanfluß	m
δ_{T}	Filmdicke bei thermischem Austausch mit Stefanfluß	m
δ_{M0}	Filmdicke bei diffusivem Austausch ohne Stefanfluß	m
δ_{T0}	Filmdicke bei thermischem Austausch ohne Stefanfluß	m
ϵ	turbulente Dissipationsgeschwindigkeit	m^2 s^{-3}

η	Ähnlichkeitsvariable, dimensionslose axiale Koordinate	
η	dimensionslose axiale Position eines Tröpfchens	
κ	Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten	
λ	Wärmeleitfähigkeit	J m^{-1} s^{-1} K^{-1}
$\overline{\lambda}$	Wärmeleitfähigkeit einer Mischung	J m^{-1} s^{-1} K^{-1}
μ	dynamische Viskosität	kg m^{-1} s^{-1}
μ_{t}	turbulente Viskosität	kg m^{-1} s^{-1}
μ_{ij}	Massenanteil des Elementes j in Komponente i	
ν'_{ij}	stöchiometrischer Koeffizient, Eduktseite	
ν''_{ij}	stöchiometrischer Koeffizient, Produktseite	
ν	mittlere kinematische Viskosität	m^2 s^{-1}
ξ	dimensionslose radiale Koordinate	
ξ_{s}	dimensionsloser Tröpfchenradius	
ξ	Mischungsbruch	
ρ	Massendichte	kg m^{-3}
ρ_{i}	Partialdichte der Spezies i	kg m^{-3}
τ	dimensionslose Zeit	
$\overline{\overline{\Pi}}$	viskoser Anteil des Drucktensors	MPa
Φ	extensive Größe	
$\phi\ (\vec{r}, t)$	Dichte der extensive Größe Φ	
χ	skalare Dissipationsgeschwindigkeit	s^{-1}
Ω_{CV}	Kontrollvolumen	
$\dot{\omega}_j$	Reaktionsgeschwindigkeit der Reaktion j	mol s^{-1}
$\dot{\omega}_i$	molare Bildungsgeschwindigkeit der Spezies i	mol s^{-1}

Indizes

Symbol	**Bezeichnung**
∞	Zustand in der Umgebung
$-\infty$	linker Einströmrand der Gegenstromkonfiguration
$+\infty$	rechter Einströmrand der Gegenstromkonfiguration
Br	Brennstoff
eff	effektiv
f	Film
g	Gasphase
l	flüssige Phase
m	molar
Ox	Oxidationsmittel
p	Tröpfchenpaket
q	Verlöschung
s	Tröpfchenoberfläche
st	stöchiometrisch
t	Turbulenz
0	Zeitpunkt t=0

Literatur

[1] Broschüre *Nationales Technologieprogramm Kryogene Raketenantriebe (TEKAN)* des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR), Abteilung Raumfahrtantriebe, Lampoldshausen, 1998.

[2] Balakrishnan, G.: Studies of Hydrogen-Air Diffusion Flames and of Compressibility Effects Related to High-Speed Propulsion, Ph.D. Thesis, University of California, San Diego, CA, USA, 1992.

[3] Peters, N.: Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Turbulent Combustion, *Prog. Energy Combust. Sci.*, 10:319-339, 1984.

[4] Peters, N.: Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion, *Twenty-First Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1231-1250, 1986.

[5] Peters, N.: Length Scales in Laminar and Turbulent Flames in: *Numerical Approaches to Combustion Modeling*, (Oran, E. S., Boris, J. P., Eds.), Progress in Astronautics and Aeronautics, 135:155-182, 1991.

[6] Continillo, G., Sirignano, W. A.: Counterflow Spray Combustion Modelling, *AIAA 27th Aerospace Science Meeting*, Reno, Nevada, AIAA-89-0051, 1989.

[7] Continillo, G., Sirignano, W. A.: Counterflow Spray Combustion Modeling, *Combust. Flame*, 81:325-340, 1990.

[8] Gutheil, E., Sirignano, W. A.: Counterflow Spray Combustion Modeling Including Detailed Transport and Detailed Chemistry, *Combust. Flame*, 113:92-105, 1998.

[9] Abramzon, G., Sirignano, W. A.: Approximate Theory of a Single Droplet Vaporization in a Convective Field: Effects of Variable Properties, Stefan Flow, and Transient Liquid Heating, *Proceedings of the 2nd ASME-JSME Thermal Engineering Joint Conference*, Honululu, Hawai, 1:11-18, 1987.

[10] Abramzon, G., Sirignano, W. A.: Droplet Vaporization Model for Spray Combustion Calculations, *AIAA 26th Aerospace Science Meeting*, Reno, Nevada, AIAA-88-0636, 1988.

[11] Abramzon, G., Sirignano, W. A.: Droplet Vaporization Model for Spray Combustion Calculations, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 9:1605-1618, 1989.

[12] Feath, G. M.: Evaporation and Combustion of Sprays, *Prog. Energy Combust. Sci*, 9:1-76, 1983.

[13] Law, C. K.: Recent Advances in Droplet Vaporization an Combustion, *Prog. Energy Combust. Sci*, 8:171-201, 1982.

[14] Rangel, R. H., Sirignano, W. A.: An Evaluation of the Point-Source Approximation in Spray Calculations, *Numerical Heat Transfer*, Part A, 16:37-57, 1989.

[15] Hollmann, C.: Modellierung turbulenter Sprayflammen unter Verwendung detaillierter chemischer Reaktionsmechanismen, Disseration, Universität Heidelberg, Heidelberg, 1997.

[16] Hollmann, C., Gutheil, E.: Flamelet-Modeling of Turbulent Spray Diffusion Flames Based on Laminar Spray Flame Library, *Combust. Sci. and Tech.*, 135:175-192, 1998.

[17] Feath, G. M.: Spray Combustion Phenomena, *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1593-1612, 1996.

[18] Sender, J., Lecourt, R., Oschwald, M., Haiden, O. J.: Application of Droplet-Tracking-Velocimetry to LOX/GH_2 Coaxial-Spray Combustion with Varying Combustion Chamber Pressures, *Proceedings of the 13th Annual Conference on Liquid Atomization on Spray Systems*, Florence, Italy, 145-154, 1997.

[19] Williams, F. A., *Combustion of Liquid Fuel Sprays*, Butterworth & Co (Publishers) Ltd, 1990.

[20] Warnatz, J., Maas, U., Dibble, R. W.: *Combustion*, 2nd Edn., Springer, Heidelberg, 1996.

[21] Schlichting, H., K. Gersten: *Grenzschicht-Theorie*, 9th Edn., Springer, Berlin Heidelberg, 1997.

[22] Hirschfelder, J. O., Curtiss, C. F.: Theory of Propagation of Flames, Part I: General Equations, *Third Symposium (International) on Combustion*, 121-127, The Combustion Institut, 1949.

[23] Bird, R. B., Stewart, W. E., Lightfoot, E. N.: *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1960.

[24] Hirschfelder, J. O., Curtiss, C. F., Bird, R. B.: *Molecular Theory of Gases and Liquids*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1964.

[25] El-Gamal, M., Gutheil, E., Warnatz, J.: The Structure of Laminar Premixed H_2-Air Flames at Elevated Pressures, *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 214(4):419-435, 2000.

[26] Sohn, C. H., Chung, S. H., Lee, S. R., Kim, J. S.: Structure and Acoustic-Pressure Response of Hydrogen-Oxygen Diffusion Flames at High Pressure, *Combust. Flame*, 115 (3):299-312, 1998.

[27] Clift, R., Grace, J. R., Weber, M. E.: *Bubbles, Drops and Particles*, Academic Press, New York, 1978.

[28] Stengele, J., Willmann, M., Wittig, S.: Experimental and Theoretical Study of Droplet Vaporization in a High Pressure Environment, *ASME* 97-GT-151, 1997.

[29] Schmehl, R., Klose, G., Koch, R., Wittig, S.: Droplet Evaporation and Transport, *Brite Euram Report*, Low Emission Combustor Technology Program - Phase III, Aeronautics Contract BRPR-CT95-0122, 1998.

[30] Bošnjaković, F., Knoche, K. F.: *Technische Thermodynamik*, Teil 1, 7. Auflage, Steinkopff Verlag Darmstadt, 1988.

[31] Hsieh, K. C., Shuen, J. S., Yang, V.: Droplet Vaporization in High-Pressure Environments I: Near Critical Conditions, *Combust. Sci. and Tech.*, 76:111-132, 1991.

[32] Hubbard, G. L., Denny, V. E., Mills, A. F.: Droplet Evaporation: Effects of Transients and Variable Properties, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 18:1003-1008, 1975.

[33] Givler, S. D., Abraham, J.: *Supercritical Droplet Vaporization and Combustion Studies*, *Prog. Energy Combust. Sci.*, 22:1-28, 1996.

[34] Sirignano, W. A.: Fuel Droplet Vaporization and Spray Combustion, *Prog. Energy Combust. Sci.*, 9:291-322, 1983.

[35] Prausnitz, J. M., Lichtenthaler, R. N., de Avezedo, E. G.: *Molecular Thermodynamics of Fluid-phase Equilibria*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1986.

[36] Graboski, M. S., Daubert, T. E.: A Modified Soave Equation of State for Phase Equilibrium Calculations. 1. Hydrocarbon Systems, *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development*, 17:443-448, 1978.

[37] Graboski, M. S., Daubert, T. E.: A Modified Soave Equation of State for Phase Equilibrium Calculations. 2. Systems Containing CO_2, H_2S, N_2, and CO, *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development*, 17:448-454, 1978.

[38] Litchford, R. R., Jeng, S.-M.: LOX Vaporization in High-Pressure, Hydrogen-Rich Gas, *AIAA/SAE/ASME/ASEE 26th Joint Propulsion Conference*, Orlando, Florida, AIAA-90-2191, 1990.

[39] Putnam, A., *ARS J.*, 31, 1467, 1961.

[40] Kee, J. R., Warnatz, J., Miller, J. A.: A FORTRAN Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Viscosities, Conductivities, and Diffusion Coefficients, *Sandia National Laboratories Report*, No. SAND83-8209, 1988.

[41] Warnatz, J.: The Structure of Freely Propagating and Burner-Stabilized Flames in the H_2-CO-O_2 System, *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, 83:950, 1979.

[42] Japan Society of Mechanical Engineers (JSME) Data Book: *Thermophysical Properties of Fluids*, 1983.

[43] Lacas, F., Darabiha, N., Versaevel, P., Rolon, J. C., Candel, S.: Influence of Droplet Number Density on the Structure of Strained Laminar Spray Flames, *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1523-1529, 1992.

[44] Maas, U.: Mathematische Modellierung instationärer Verbrennungsprozesse unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen, Dissertation, Universität Heidelberg, Heidelberg, 1988.

[45] John, F.: *Partial Differential Equations*, 4th Edn., Springer, Heidelberg, 1982.

[46] Press, W. H., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T.: *Numerical Recipes, The Art of Scientific Computing (FORTRAN Version)*, 1st Edn., Cambridge University Press, Cambridge, 1989.

[47] Darabiha, N., Candel, S.: The Influence of the Temperature on Extinction and Ignition Limits of Strained Hydrogen-Air Diffusion Flames, *Combust. Sci. and Tech.*, 86:67-85, 1992.

[48] Gutheil, E., Balakrishnan, G., Williams, F. A.: *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems* (Peters, N., Rogg, B., Eds.), Springer, Berlin Heidelberg, 177-195, 1993.

[49] Treviño, C., Mauss, F.: Structure and Extinction of Non-Diluted Hydrogen-Air Diffusion Flames in: *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems* (Peters, N., Rogg, B., Eds.), Springer, Berlin Heidelberg, 159-176, 1993.

[50] Brown, T. M., Tanoff, M. A., Osborne, R. J., Pitz, R. W., Smooke, M. D.: Experimental and Numerical Investigation of Laminar Hydrogen-Air Counterflow Diffusion Flames, *Combust. Sci. and Tech.*, 129:71-88, 1997.

[51] Delplanque, J.-P., Sirignano, W. A.: Numerical Study of the Transient Vaporization of an Oxygen Droplet at Sub- and Supercritical Conditions, *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 36(2):303-314, 1993.

[52] Nicoli, C., Haldenwang, P., Daou, J.: Substitute Mixtures for Lox Droplet Vaporization Study, *Combust. Sci. and Tech.*, 112:55-74, 1996.

[53] Haldenwang, P., Nicoli, C., Daou, J.: High Pressure Vaporization of LOX Droplet Crossing the Critical Conditions, *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 39(16):3453-3464, 1996.

[54] Delplanque, J.-P.: Liquid-Oxygen Droplet Vaporization and Combustion: Analysis of Transcritical Behavior and Application to Liquid-Rocket Combustion Instability, Ph.D. Thesis, University of California, Irvine, CA, USA, 1992.

[55] Delplanque, J.-P.: Boundary-Layer Stripping Effects on Droplet Transcritical Convective Vaporization, *Atomization and Sprays*, 4:325-349, 1994.

[56] Sirignano, W. A., Delplanque, J.-P.: Transcritical Vaporization of Liquid Fuels and Propellants, *Journal of Propulsion and Power*, 15(6):896-902, 1999.

[57] Sirignano, W. A.: *Fluid Dynamics and Transport of Droplets and Sprays*, Camebridge University Press, 1999.

[58] Yang, V., Lin, N. N., Shuen, J. S.: Vaporization of Liquid Oxygen (LOX) Droplets in Supercritical Hydrogen Environments, *Combust. Sci. and Tech.*, 97:247-270, 1994.

[59] Gicquel, P., Vingert, L.: Experimental Investigations of Cryogenic Sprays in Combustion, *15th Annual Conference on Liquid Atomization on Spray Systems*, Toulouse, France, 1999.

[60] Schlotz, D., Gutheil, E.: Modeling of LOX Combustion in the Counterflow Configuration for Conditions of High-Speed Combustion, *Proceedings of the 13th Annual Conference on Liquid Atomization on Spray Systems*, Florence, Italy, 1997.

[61] Schlotz, D., Gutheil, E.: Modeling of Laminar Mono- and Bidisperse LOX/H_2 Spray Flames for Cryogenic Conditions, *15th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*, Toulouse, France, 1999.

[62] Schlotz, D., Gutheil, E.: Modellierung laminarer Sprayflammen unter Hochdruckbedingungen, *VDI-Flammentag*, Dresden, VDI-Bericht Nr. 1492, 499-504, 1999.

[63] Schlotz, D., Gutheil, E.: Modeling of Laminar LOX/H_2 Flames in the Counterflow Configuration, *17th International Colloquium on Dynamics of Explosions and Reactive Systems*, Heidelberg, 1999.

[64] Schlotz, D., Gutheil, E.: Modeling of Laminar Mono- and Bidisperse Liquid Oxygen/Hydrogen Spray Flames in the Counterflow Configuration, *Combust. Sci. and Tech.* accepted 2000.

[65] Gutheil, E.: Numerical Investigation of Ignition of Dilute Fuel Sprays Including Detailed Chemistry, *Combust. Flame*, 93, 239-254, 1993.

[66] Gutheil, E.: Structure and Extinction of Laminar Ethanol/Air Spray Flames, *Twenty-Eighth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, submitted, 1999.

[67] Williams, F. A.: Recent Advances in Theoretical Descriptions of Turbulent Diffusion in: *Turbulent Mixing in Non-Reactive and Reactive Flows*, (S.N.B. Murthy, Ed.) Plenum Press, N.Y., 189-208, 1975.

[68] Zeldovich, Y. B., Frank-Kamenetskii, D. A.: The Theory of Thermal Propagation of Flames, Zhur. Fiz. Khim. 12, 100, 1938.

[69] Becker, H. A., *Fifteenth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 601, 1975.

[70] Lockwood, F. C., Naguib, A. S., *Combust. Flame*, 24:109, 1975.

[71] Williams, F. A.: *Combustion Theory*, 2nd Ed., Benjamin/Cummings, Menlo Park, CA, 1985

[72] Borghi, R.: *Recent Advances in Aeronautical Science* (Bruno, C., Casci, C., Eds.), Pergamon, London, 1984.

[73] Hollmann, C., Gutheil, E.: Modeling of Turbulent Spray Diffusion Flames Including Detailed Chemistry, *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1731-1738, 1996.

[74] Gutheil, E.: Modellierung technischer Sprayflammen, Fortschrittsberichte VDI, Reihe 6, Energietechnik, Nr. 390, VDI Verlag, 1998.

[75] Gill, A.: Modellierung der Verbrennung in einem Schichtlademotor unter Verwendung detaillierter chemischer Reaktionsmechanismen, Dissertation, Universität Stuttgart, Stuttgart, 1995.

[76] Gansert, K.-P.: Rechnerische Untersuchung des Einspritzstrahls in einem Schichtlademotor mit Direkteinspritzung, Studienarbeit, Institut für Technische Verbrennung, Universität Stuttgart, Stuttgart, 1993.

[77] Williams, F. A.: Turbulent Combustion, SIAM, Philadelphia, 97-131, 1985.

[78] Libby, P. A., Williams, F. A.: *Turbulent Reacting Flows*, Academic Press, London, 1994.

[79] Favre, A.: Statistical Equations of Turbulent Cases in Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics, SIAM, Philadelphia, 231-266, 1969.

[80] Libby, P. A., Williams, F. A.: *Turbulent Reacting Flows*, Springer, Berlin Heidelberg, 1-43, 1980.

[81] Launder, B. E., Spalding, D. B.: *Mathematical Models of Turbulence*, Academic Press, London/New York, 1972.

[82] Launder, B. E., Morse, A., Rodi, W., Spalding, D. B.: *Proceedings of NASA Conference on Free Shear Flows*, Langley, 1972.

[83] Amsden, A. A., O'Rourke, P. J., Butler, T. D.: *KIVA II, A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays*, Los Alamos National Laboratory Report LA-11560-MS, UC-96, 1989.

[84] Feath, G. M.: Current Status of Droplet and Liquid Combustion, *Prog. Energy Combust. Sci.*, 3:191-224, 1977.

[85] Gutheil, E.: Modellierung turbulenter Kohlenstoffmonoxid/Luft-Diffusionsflammen, Dissertation, Technische Hochschule Darmstadt, Darmstadt, 1988.

[86] Jones, W. P., Kakhi, M.: Mathematical Modeling of Turbulent Flames in: *Unsteady Combustion* (Culick, F. et. al., Eds.) Kluwer Academic Publishers, Niederlande, 411-491, 1996.

[87] Bronstein, I. N., Semendjajew, K. A.: *Taschenbuch der Mathematik*, Verlag Harri Deutsch, Thun; Frankfurt/Main, 24. Auflage, 1989.

[88] Stull, D. R., Prophet, H.: *JANAF Thermochemical Tables*, U.S. Department of Commerce, Washington D. C., 1971.

[89] Jones, W. P., Whitelaw, J. H.: Calculation Methods for Reacting Turbulent Flows: A Review, *Combust. Flame*, 48:1-26, 1982.

[90] Clauss, P.: nach persönlicher Mitteilung, 1999.

[91] Rosten, H. I., Spalding, D. B.: PHOENICS-User Manual, Concentration Heat and Momentum LTD TR/100, 1986.

Danksagung

An dieser Stelle danke ich all denjenigen sehr, die durch ihren persönlichen Einsatz zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Besonders sind dies:

- Frau Prof. Dr. Eva Gutheil, die mit großem Einsatz diese wissenschaftliche Arbeit betreut hat und mir durch anregende Diskussionen stets eine wertvolle Unterstützung war.

- Herr Prof. Dr. Dr. h. c. Jürgen Warnatz, der mich in den vergangenen Jahren sehr förderte und zusammen mit Frau Prof. Dr. Eva Gutheil für die finanzielle Sicherung meiner Stelle gesorgt hat.

- Herr Prof. Dr. Ulrich Maas, der freundlicher Weise den Mitbericht übernommen und mir als externer Promotionsstudent den Weg an der Universität Stuttgart geebnet hat.

- Dr. Christoph Hollmann, der noch nach seiner Promotion einige Stunden damit zubrachte, das Berechnungsprogramm CORA lauffähig zu machen, und so seinen Beitrag zum turbulenten Teil dieser Arbeit leistete.

- Dipl.-Ing. Joachim Sender von der DLR Lampoldshausen, der mir freundlicherweise Meßdaten der Mikrobrennkammer M3 zur Verfügung stellte und bei deren Auswertung hilfreich zur Seite stand.

- Meine Kollegen Dr. Miles Elsden, Dr. Malte Braak, Dipl.-Hyd. Simon Hoeg und Dipl.-Phys. Markus Brunner, mit denen ich lange Zeit ein Arbeitszimmer teilte und eine schöne Zeit verbrachte.

- All die netten Kollegen des Instituts für Technische Verbrennung der Universität Stuttgart und des Interdisziplinären Zentrums für Wissenschaftliches Rechnen der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, die beim Lösen von wissenschaftlichen wie auch technischen Problemen immer sehr hilfsbereit waren.

- Meine Eltern, denen ich besonders verbunden bin, da sie mich während der gesamten Ausbildungszeit großartig unterstützt haben und dabei nicht nur die akademische Laufbahn sondern auch die persönliche Entwicklung im Blick hatten.

- Meine liebe Frau Martina, die bis zum Erreichen dieser Zeilen wieder einmal lange ausharren mußte und mir in all den letzten Jahren mit überaus großer Geduld und Verständnis bei der Anfertigung dieser Arbeit zur Seite stand.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Dominik Schlotz
geb. am 19.09.1969 in Frankfurt/Main
verheiratet, 1 Kind

Schulausbildung

1976 - 1980	Grundschule Hinsbleek, Hamburg
1980 - 1989	Gymnasium Johanneum, Hamburg

Studium

10/1989 - 07/1995	Studium des Maschinenbaus an der RWTH Aachen in der Vertiefungsrichtung Wärmetechnik
01/1992 - 05/1994	Studentische Hilfskraft am Institut für Getriebetechnik und Maschinendynamik der RWTH Aachen
06/1994 - 10/1994	Studienarbeit an der „University of California“ in Davis, USA und am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, RWTH Aachen
11/1994 - 07/1995	Diplomarbeit am Institut für Verfahrenstechnik, RWTH Aachen
07/1995	Abschluß mit dem Diplom

Beruf

01/1996 - 02/2000	Wissenschaftlicher Angestellter am Interdisziplinären Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen (IWR) der Universität Heidelberg
08/1998 - 10/1998	Tätigkeit als Trainee in der Entwicklung von Rolls-Royce plc in Derby, England, im „Combustion Department“ des Bereichs „Aero Engines“
03/2001	Abschluß der Promotion an der Universität Stuttgart, Fakultät Energietechnik
seit 03/2000	Tätigkeit als Projektingenieur bei der Firma Altair Engineering GmbH in Böblingen