

Universität der Bundeswehr München
Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik
Institut für Thermodynamik

Simulation turbulenter nicht-vorgemischter Verbrennung bei überkritischen Drücken

Dipl.-Ing. Hagen Müller

Vollständiger Abdruck der von der
Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik
der Universität der Bundeswehr München
zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Prof. Dr.-Ing. habil. Markus Klein
1. Berichterstatter: Prof. Dr. rer. nat. Michael Pfitzner
2. Berichterstatter: Prof. Dr.-Ing. habil. Stefan Hickel

Die Dissertation wurde am 04.04.2016 bei der Universität der Bundeswehr München eingereicht und durch die Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik am 23.11.2016 angenommen.

Tag der Prüfung: 05.12.2016

Vorwort

Die vorliegende Arbeit ist im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Thermodynamik der Universität der Bundeswehr München entstanden.

Ich möchte meinem Doktorvater Prof. Dr. rer. nat. Michael Pfitzner danken, der diese Arbeit ermöglicht und mit seiner Anleitung und zahlreichen Hinweisen wesentlich zum erfolgreichen Abschluss beigetragen hat. Weiterhin danke ich Prof. Dr.-Ing. habil. Stefan Hickel für die gute Zusammenarbeit und die Übernahme des Koreferats sowie Prof. Dr.-Ing. habil. Markus Klein für die Übernahme des Vorsitzes des Promotionsausschusses.

Ganz herzlich möchte ich mich bei allen Kollegen für die Zusammenarbeit und die gute Arbeitsatmosphäre am Institut bedanken. Insbesondere danke ich meinem langjährigen Bürokollegen Thomas Ramcke. Ebenso geht mein Dank an Julian Zips, Mathias Banholzer, Christoph Traxinger und Maximilian Hansinger, die viele interessante Diskussion angestoßen haben und die Arbeiten in den Bereichen Realgastthermodynamik und Verbrennung weiterführen. Für die tolle Vorarbeit und Einarbeitung danke ich Maria-Magdalena Jarczyk sowie Stephanie Pohl.

Ein besonderer Dank geht an Jan Matheis. Die vielen Diskussionen, der Austausch von Ideen und Erfahrungen rund um die thermodynamische Modellierung haben die Arbeiten immer wieder vorangebracht und in teilweise zuvor nicht absehbare Richtungen gelenkt.

Mein Dank geht auch an die Entwickler von OpenFOAM. Deren Einsatz für die Bereitstellung eines quelloffenen und flexiblen Strömungslösers war letztlich die Grundlage für die im Rahmen dieser Arbeit erzielten Ergebnisse.

München, 12.12.2016

Hagen Müller

Kurzzusammenfassung

Schon seit mehr als 50 Jahren werden Flüssigtreibstoffe erfolgreich in Hauptstufentriebwerken von Raumtransportsystemen verwendet. Die prädiktive Berechnung der Mischung und Verbrennung in Raketenbrennkammern ist dennoch nach wie vor eine große Herausforderung. Dies ist vor allem den extremen Betriebsbedingungen geschuldet. Die Drücke in den Brennkammern von Hauptstufentriebwerken übersteigen in der Regel den kritischen Druck der Treibstoffe. Gleichzeitig können die Einspritztemperaturen sehr niedrig sein. Bei diesen Bedingungen treten Realgaseffekte auf, die die Mischung und Verbrennung in Raketenbrennkammern maßgeblich beeinflussen. Numerische Strömungssimulationen können einen wertvollen Beitrag zum besseren Verständnis der relevanten Phänomene liefern. Die vorliegende Arbeit befasst sich daher mit der Entwicklung von Verfahren zur zeitaufgelösten Simulation der nicht-vorgemischten Verbrennung bei überkritischen Drücken. Der Fokus liegt auf der genauen und numerisch effizienten Beschreibung der thermodynamischen Fluideigenschaften sowie deren Wechselwirkung mit der Flamme und dem turbulenten Strömungsfeld. Hierzu wird eine neuartige Volumenkorrekturmethode verwendet, um Ungenauigkeiten der Peng-Robinson-Zustandsgleichung bei Temperaturen unterhalb der Pseudo-Siedetemperatur zu korrigieren. Die thermodynamische Modellierung wird mit der Eulerian-stochastic-fields-Methode sowie dem Flamelet-Ansatz zur Berechnung der turbulenten Verbrennung gekoppelt und in ein druckbasiertes LES-Verfahren eingebunden. In der vorliegenden Arbeit werden die theoretischen Grundlagen der genannten Modellierungen im Hinblick auf die Anwendung in Raketenbrennkammern diskutiert, die benötigten Formulierungen hergeleitet und die numerische Umsetzung beschrieben. Anschließend werden Simulationen zu drei Einspritzkonfigurationen bei überkritischen Drücken vorgestellt und die Ergebnisse anhand verfügbarer experimenteller Messdaten bewertet. In jedem der Testfälle steht ein anderer Modellierungsaspekt im Vordergrund. Anhand der Untersuchung transkritischer Stickstoffjets wird die Sensitivität der LES gegenüber verschiedenen Modellierungsparametern überprüft. Es zeigt sich, dass der thermodynamische Zustand des eingespritzten Fluids sowie die Genauigkeit der Zustandsgleichung einen entscheidenden Einfluss auf das Simulationsergebnis haben. Mit der Volumenkorrekturmethode kann der im Experiment gemessene Dichteverlauf ausgezeichnet wiedergegeben werden. Im zweiten Testfall wird die koaxiale Einspritzung von Stickstoff und Wasserstoff bei überkritischen Drücken untersucht. Hier stehen nicht-lineare Mischungseffekte und deren Auswirkung auf die Strömung im Vordergrund. In der turbulenten Scherschicht tritt eine mischungsbedingte Abkühlung auf und es werden Zustände erreicht, die thermodynamisch instabil sind. Der im Experiment beobachtete Anstieg der Wasserstoff-Partialdichten in diesem Bereich wird in der LES qualitativ wiedergegeben und die berechnete Strahllänge stimmt mit der gemessenen überein. Der dritte Testfall befasst sich mit der Verbrennung von überkritisch eingespritztem Methan und transkritisch eingespritztem Sauerstoff. Ein Vergleich der beiden Verbrennungsmodelle zeigt, dass mit der aufwendigeren Eulerian-stochastic-fields-Methode chemische Nichtgleichgewichts- und Feinstruktureffekte wiedergegeben werden, die bei Verwendung des Flamelet-Ansatzes nicht reproduzierbar sind. Der daraus resultierende Effekt auf die Flammenform ist allerdings gering. Ein Vergleich der LES-Ergebnisse mit der aus Experimenten verfügbaren OH*-Strahlung ist sehr zufriedenstellend und zeigt, dass die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten numerischen Methoden eine aussagekräftige Beschreibung der turbulenten Einspritzung und Verbrennung bei überkritischen Drücken ermöglichen.

Abstract

Liquid propellants have been used in main stage rocket engines for more than 50 years. However, performing predictive simulations of mixing and combustion in rocket engines is still a huge challenge. This is mainly due to the extreme operating conditions. The chamber pressure typically exceeds the critical value of the propellants and the injection temperatures can be very low. Mixing in rocket combustion chambers is thus strongly influenced by real gas effects which are a prominent feature of fluids at these conditions. Numerical methods can help to generate a better understanding of the relevant physics in such flows. This work therefore presents the development of time-resolved simulation techniques to predict non-premixed combustion at supercritical pressures. The focus is on the accurate and numerically efficient description of thermodynamic fluid properties as well as their interaction with the flame and the turbulent flow field. A recent volume correction method is used to correct deficiencies of the Peng-Robinson equation of state at temperatures below the pseudo-critical temperature. The method is coupled with a flamelet approach and the Eulerian stochastic fields method for turbulent combustion and is implemented in a pressure-based LES solver. In this work, the mentioned models are discussed in view of their applicability in rocket combustion chambers, a theoretical framework is established and the numerical implementation presented. Subsequently, three configurations of injection at supercritical pressure are presented and the LES results are assessed with respect to the available experimental data. Each of these test cases focuses on a different aspect. The sensitivity of the LES on different model parameters is evaluated by studying the transcritical injection of nitrogen into a supercritical atmosphere. The result indicates that the thermodynamic condition of the injected fluid as well as the accuracy of the equation of state are decisive for the LES result. By using the volume correction method, the experimental density measurement is reproduced excellently. In the second test case, the coaxial injection of nitrogen and hydrogen at supercritical pressure is examined. The focus is thereby on non-linear mixing effects and their influence on the flow field. A temperature drop can be observed in the turbulent shear layer and the conditions are partly thermodynamically unstable. The available experimental data indicate an increase of hydrogen density in this region, which is qualitatively reproduced in the LES. Also the core length is in good agreement with the measurement. The combustion of transcritical oxygen and supercritical methane is investigated in the third test case. A comparison between the two combustion models shows that chemical non-equilibrium effects and local extinction is reproduced only by the Eulerian stochastic fields method. The associated effect on the flame shape is yet limited. The numerical result is also compared with the experimentally measured OH* radiation. A good agreement can be observed showing that the simulation tools, which have been developed in this work, enable a meaningful prediction of mixing and combustion at supercritical pressures.

Vorveröffentlichungen

Im Rahmen dieser Doktorarbeit wurden in Zusammenarbeit mit anderen Wissenschaftlern mehrere Beiträge in wissenschaftlichen Fachzeitschriften sowie auf Konferenzen veröffentlicht. Die vorliegende Dissertationsschrift basiert in Teilen auf den im Folgenden aufgelisteten Publikationen.

Veröffentlichungen in Fachzeitschriften mit Qualitätssicherung

MÜLLER, H. ; NIEDERMEIER, C. A. ; MATHEIS, J. ; PFITZNER, M. ; HICKEL, S. : Large-eddy simulation of nitrogen injection at trans- and supercritical conditions. In: *Physics of Fluids (1994-present)* 28 (2016), Nr. 1, S. 015102

MATHEIS, J. ; MÜLLER, H. ; LENZ, C. ; PFITZNER, M. ; HICKEL, S. : Volume translation methods for real-gas computational fluid dynamics simulations. In: *Journal of Supercritical Fluids* 107 (2016), S. 422–432

MÜLLER, H. ; MATHEIS, J. ; PFITZNER, M. ; HICKEL, S. : Large-eddy simulation of coaxial LN₂/GH₂ injection at trans- and supercritical conditions. In: *Journal of Propulsion and Power* 32 (2016), Nr. 1, S. 46–56

JARCZYK, M. ; POHL, S. ; MÜLLER, H. ; PFITZNER, M. : CFD-simulation of LOX/H₂ injection and combustion at supercritical pressures. In: *ERCOFTAC Bulletin 96: Reactive Flows and Combustion*. 2013

MÜLLER, H. ; NIEDERMEIER, C. A. ; JARCZYK, M. ; PFITZNER, M. ; HICKEL, S. ; ADAMS, N. A.: Large-eddy simulation of trans- and supercritical injection. In: *EUCASS Book Series, Progress in Propulsion Physics*, im Druck

Konferenzbeiträge

MATHEIS, J. ; MÜLLER, H. ; PFITZNER, M. ; HICKEL, S. : Large eddy simulation of cryogenic coaxial LN₂/GH₂ injection under supercritical pressures. In: *International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP-9)*. Melbourne, Australien, 2015

MÜLLER, H. ; PFITZNER, M. : Large-eddy simulation of transcritical LO_x/CH₄ jet flames. In: *6th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (EUCASS)*. Krakau, Polen, 2015

MÜLLER, H. ; PFITZNER, M. : Large Eddy Simulation turbulenter, nicht-vorgemischter Verbrennung unter Verwendung der Eulerian Stochastic Field Methode in OpenFOAM. In: *27. VDI Flammentag*. Clausthal, Deutschland, 2015

MÜLLER, H. ; PFITZNER, M. ; MATHEIS, J. ; HICKEL, S. : Large-eddy simulation of coaxial LN₂/GH₂ injection at trans- and supercritical conditions. In: *53rd Aerospace Sciences Meeting: AIAA-paper 2015-0843*. Kissimmee, Florida, USA, 2015

MÜLLER, H. ; FERRARO, F. ; PFITZNER, M. : Implementation of a steady laminar flamelet model for non-premixed combustion in LES and RANS simulations. In: *8th International OpenFOAM Workshop*. Jeju, Südkorea, 2013

MÜLLER, H. ; NIEDERMEIER, C. A. ; JARCZYK, M. ; PFITZNER, M. ; HICKEL, S. ; ADAMS, N. A.: Large-eddy simulation of trans- and supercritical injection. In: *5th European Conference for Aerospace Sciences (EUCASS)*. München, Deutschland, 2013

NIEDERMEIER, C. A. ; MÜLLER, H. ; JARCZYK, M. ; HICKEL, S. ; ADAMS, N. A. ; PFITZNER, M. : Large-eddy simulation of turbulent trans- and supercritical mixing. In: *AIAA Computational Fluid Dynamics Conference: AIAA paper 2013-2950*. San Diego, Kalifornien, USA, 2013

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	ix
Symbolverzeichnis	xiii
Abkürzungsverzeichnis	xvii
Abbildungsverzeichnis	xxv
Tabellenverzeichnis	xxviii
1 Einleitung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Stand der Forschung	3
1.3 Gliederung der Arbeit	12
2 Turbulente Strömungen	13
2.1 Grundgleichungen	13
2.2 Large Eddy Simulation	16
2.2.1 Die isotrope Turbulenz	17
2.2.2 Grundidee der Large Eddy Simulation	19
2.2.3 Filterung	21
2.2.4 Die gefilterten Erhaltungsgleichungen	21
2.2.5 Feinstrukturmodellierung	23
2.2.6 Mittelung	24

3	Thermodynamik realer Fluide	27
3.1	Abgrenzung thermodynamischer Bereiche	27
3.2	Reinstoffthermodynamik	29
3.2.1	Die thermische Zustandsgleichung	29
3.2.2	Volumenkorrekturmethode	30
3.2.3	Die kalorische Zustandsgleichung	33
3.2.4	Bewertung der thermodynamischen Modellierung	34
3.3	Mehrstoffthermodynamik	38
3.3.1	Mischungsregeln	39
3.3.2	Phasengleichgewicht in binären Mischungen	42
3.4	Transporteigenschaften	44
4	Verbrennungsmodellierung	47
4.1	Turbulente Flammen	48
4.1.1	Skalen turbulenter nicht-vorgemischter Verbrennung	48
4.1.2	Besonderheiten transkritischer Verbrennung	50
4.2	Chemische Reaktionskinetik	50
4.2.1	Berechnung der Reaktionsraten	51
4.2.2	Reduzierte Reaktionsmechanismen	52
4.3	LES turbulenter nicht-vorgemischter Verbrennung	53
4.3.1	Die Eulerian-stochastic-fields-Methode	54
4.3.2	Der Flamelet-Ansatz	58
5	Numerische Methoden	65
5.1	Druckkorrekturverfahren	65
5.2	Die Strömungslöser	67
5.2.1	RGFoam	67
5.2.2	RGflameletFoam	68
5.2.3	RGstochasticFieldsFoam	71

6	Simulationsergebnisse	75
6.1	Trans- und überkritische N ₂ - Einspritzung	75
6.1.1	Beschreibung des Testfalls	75
6.1.2	Beschreibung der numerischen Simulation	77
6.1.3	Ergebnisse	81
6.1.4	Zusammenfassung	91
6.2	Koaxiale LN ₂ /GH ₂ - Einspritzung	93
6.2.1	Beschreibung des Testfalls	93
6.2.2	Beschreibung der numerischen Simulation	96
6.2.3	Ergebnisse	100
6.2.4	Zusammenfassung	108
6.3	Mascotte V04: Transkritische LOx/GCH ₄ - Verbrennung	109
6.3.1	Beschreibung des Testfalls	109
6.3.2	Beschreibung der numerischen Simulation	110
6.3.3	Ergebnisse	115
6.3.4	Zusammenfassung	129
7	Zusammenfassung und Ausblick	131
A	Modellkoeffizienten und Stoffdaten	135
B	Thermodynamische Zusammenhänge	139
C	Validierung der thermodynamischen Modelle	143
D	Simulationsergebnisse Sandia Flamme D	149
	Literaturverzeichnis	153

Symbolverzeichnis

Lateinisch

A	l, mol, s	Präexponentieller Faktor
a	$(\text{N m}^4)/\text{mol}$	Koeffizient für molekulare Wechselwirkungen
A_p	$\text{kg}/(\text{m}^3 \text{ s})$	Koeffizientenmatrix der Impulsgleichung
a_s	m/s	Schallgeschwindigkeit
b	m^3/mol	Koeffizient für das molekulare Eigenvolumen
b_A	–	Arrhenius-Temperaturexponent
c	mol/m^3	Stoffmengenkonzentration
C_p	$\text{J}/(\text{kg K})$	Isobare Wärmekapazität
D	m^2/s	Diffusionskoeffizient
\mathcal{E}	m^2/s^3	Turbulentes Energiespektrum
e	J/mol	Molare innere Energie
E_A	cal	Arrhenius-Aktivierungsenergie
\mathcal{F}	–	Verbund-PDF
$\tilde{\mathcal{P}}_{sgs}$	–	Favre-gefilterte Verbund-PDF
f	–	Mischungsbruch
\mathcal{G}	–	Filteroperator
g	J/mol	Molare Gibbs-Energie
h	J/mol	Molare Enthalpie
H_p	$\text{kg}/(\text{m}^2 \text{ s}^2)$	Diskretisierter Quellterm der Impulsgleichung
j	–	Impulsstromverhältnis
J	$\text{kg}/(\text{m}^2 \text{ s})$	Massenstromdichte
K	m^2/s^2	Turbulente kinetische Energie
k_b	l, mol, s	Geschwindigkeit der Rückwärtsreaktion
k_f	l, mol, s	Geschwindigkeit der Vorwärtsreaktion
k	1/m	Wellenzahl turbulenter Fluktuationen
L	m	Integrale turbulente Längenskala
l	m	Längenskala der turbulenten Geschwindigkeitsfluktuationen
l_η	m	Kolmogorov-Länge

M	–	Anzahl chemischer Reaktionen
m	kg	Masse
\dot{m}	kg/s	Massenstrom
N	–	Anzahl chemischer Spezies
N_s	–	Anzahl Skalarfelder
N_ζ	–	Anzahl stochastischer Felder
p	Pa	Druck
q	W/m ²	Wärmestromdichte
r	mol/(m ³ s)	Reaktionsrate
S_{ij}	1/s	Scherspannungstensor
s	–	Stöchiometrisches Massenverhältnis
T	K	Temperatur
t	s	Zeit
\mathcal{T}	s	Zeitintervall
u	m/s	Geschwindigkeit
v	m ³ /mol	Molares Volumen
W	kg/mol	Molare Masse
x	m	Kartesische Koordinate
Y	–	Massenbruch
Z	–	Kompressibilitätsfaktor

Griechisch

α, β	–	Formparameter der β -Verteilung
χ	1/s	Skalare Dissipationsrate
δ	–	Delta-Funktion
λ	W/(m K)	Wärmeleitfähigkeit
δ_{ij}	–	Kronecker-Delta
Δ	m	Filterweite
dW	–	Wiener-Prozess
ε	m ² /s ³	Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie
$\bar{\varepsilon}$	–	Abweichung
η	m ² /s	Kinematische Viskosität
Γ	–	Eulersche Gammafunktion
γ	–	Dichotomischer Zufallsvektor
κ	–	Funktion des azentrischen Faktors
κ_{ij}	–	Binärer Interaktionsparameter
μ	kg/(m s)	Dynamische Viskosität
μ^*	kg/(m s)	Künstliche numerische Viskosität
ν	–	Stöchiometrischer Koeffizient

ρ	kg/m^3	Dichte
ω	–	Azentrischer Faktor
$\dot{\omega}$	$1/\text{s}$	Chemischer Quellterm
Ω	$1/\text{s}$	Wirbelstärke
ϕ	–	Skalare Größe
Ψ	–	Thermochemischer Zustandsraum
ψ	s^2/m^2	Kompressibilität
σ	–	Standardabweichung
τ_{ij}	$\text{kg}/(\text{m s}^2)$	Viskoser Spannungstensor
τ_c	s	Chemische Zeitskala
τ_{sgs}	s	SGS-Mischungszeitskala
τ_s	s	Strömungszeitskala
τ_t	s	Charakteristische turbulente Zeitskala
θ	–	Oberflächenanteil in den Mischungsregeln
φ	–	Fugazitätskoeffizient
ζ	–	Stochastisches Feld

Kennzahlen

Da	Damköhler-Zahl
Le	Lewis-Zahl
Ma	Mach-Zahl
Pr	Prandtl-Zahl
Re	Reynolds-Zahl
Sc	Schmidt-Zahl

Konstanten

c_0	$= 3 \cdot 10^9 \text{ m/s}$	Lichtgeschwindigkeit
C_χ	$= 2$	Konstante zur Berechnung der skalaren Dissipationsrate
C_D	$= 2$	Konstante zur Berechnung der SGS-Mischungszeitskala
C_k	$= 1.5$	Kolmogorov-Konstante
C_μ	$= 0.01$	Konstante zur Berechnung der numerischen Viskosität
C_S	$= 0.17$	Smagorinsky-Konstante
C_V	$= 0.07$	Vreman-Konstante
h	$= 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$	Planck-Konstante
λ^*	$= 308 \text{ nm}$	Mittlere Wellenlänge zur Berechnung der OH*-Strahlung
N_A	$= 6.022 \cdot 10^{23} \text{ 1/mol}$	Avogadro-Konstante

π	= 3.141	Kreiszahl
\mathcal{R}	= 8.314 J/(mol K)	Universelle Gaskonstante

Operatoren

$\langle \star \rangle$	Mittelung
$\bar{\star}$	Filter
$\tilde{\star}$	Favre-Filter
\star'	Turbulente Fluktuation

Indizes

0	Idealer Referenzzustand
α, β	Speziesindex
c	Kritischer Wert
g	Gasförmig
i, j, k	Vektorkomponente
f	Flüssig
pb	Pseudo-Siedetemperatur
PR	Peng-Robinson-Zustandsgleichung
r	Reduzierte Größe
R	Realanteil einer kalorischen Zustandsgröße
sgs	Feinstrukturanteil
st	Stöchiometrie
t	Turbulent
vk	Volumenkorrekturanteil

Abkürzungsverzeichnis

bzw.

Beziehungsweise

CERFACS

Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul
Scientifique

CFD

Numerische Strömungsmechanik (engl. *Computational fluid dynamics*)

CORIA

Complexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermochimie

CPU

Hauptprozessor (engl. *Central processing unit*)

CTR

Center for Turbulence Research

DLR

Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt

DNS

Direkte Numerische Simulation

ESF

Eulerian-stochastic-fields

GCH₄

Gasförmiges Methan

GH₂

Gasförmiger Wasserstoff

GN₂

Gasförmiger Stickstoff

GPU

Grafikprozessor (engl. *Graphics processing unit*)

GRI

Gas Research Institute

IEM

Interaction by exchange with the mean

JAXA

Japan Aerospace Exploration Agency

JL

Jones-Lindstedt-Mechanismus

JL-R

Erweiterter Jones-Lindstedt-Mechanismus

KP

Kritischer Punkt

LES

Grobstruktursimulation (engl. *Large eddy simulation*)

LMSE

Linear mean-square estimation

LN₂

Flüssiger Stickstoff

LO_x

Flüssiger Sauerstoff

NASA

National Aeronautics and Space Administration

NIST

National Institute of Standards and Technology

ONERA

Office national d'études et de recherches aérospatiales

PDF

Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (engl. *Propability density funtion*)

TPDF

Transportgleichungs-PDF (engl. *Transported propability density function*)

PISO

Pressure implicit with splitting of operator

PR-ZGL

Peng-Robinson-Zustandsgleichung

RANS

Reynolds-gemittelte Navier-Stokes (engl. *Reynolds-averaged Navier-Stokes*)

SGS

Feinstruktur (engl. *Subgrid-scale*)

SRK-ZGL

Soave-Redlich-Kwong-Zustandsgleichung

TUM

Technische Universität München

AFRL

Air Force Research Laboratory

ZGL

Zustandsgleichung

Abbildungsverzeichnis

2.1	Energiespektrum der isotropen Turbulenz.	18
2.2	Einfluss der Filterweite auf die aufgelöste Turbulenz.	19
2.3	Links: Ungefilterter, gefilterter und gemittelter Wert eines Skalars. Rechts: Zugehörige SGS-Fluktuation und gemittelte SGS-Fluktuation.	20
3.1	v-T-Zustandsdiagramm für N ₂ . Die Bereiche transkritisch (I), überkritisch (II), gasförmig (III), flüssig (IV) und Nassdampfgebiet (V) sind durch Phasengrenze (—), Widom-Linie (---) und kritische Isobare (-...) voneinander getrennt.	28
3.2	Dichteverlauf von N ₂ bei $p = 1.2 p_c$ und $p = 2 p_c$: Vergleich verschiedener thermischer Zustandsgleichungen.	35
3.3	Enthalpie und isobare Wärmekapazität von N ₂ bei $p = 1.2 p_c$ und $p = 2 p_c$: Vergleich der PR-ZGL und der Harstad-Korrektur.	36
3.4	Dichteverlauf in einer binären N ₂ /H ₂ -Mischung bei dem Druck $p = 5$ MPa und den drei Temperaturen $T = 100$ K, $T = 120$ K und $T = 140$ K: Vergleich verschiedener thermischer Zustandsgleichungen.	41
3.5	Enthalpie und isobare Wärmekapazität in einer binären N ₂ /H ₂ -Mischung bei dem Druck $p = 5$ MPa und den drei Temperaturen $T = 100$ K, $T = 120$ K und $T = 140$ K: Vergleich der PR-ZGL und der Harstad-Korrektur.	42
3.6	Phasengleichgewicht in einer binären N ₂ /H ₂ -Mischung bei den drei Temperaturen $T = 100$ K, $T = 107.7$ K und $T = 113$ K.	43
3.7	Viskosität und thermische Leitfähigkeit von N ₂ bei $p = 1.2 p_c$ und $p = 2 p_c$: Validierung des Transportmodells von Chung et al. [31] bei Verwendung verschiedener thermischer Zustandsgleichungen.	45
4.1	Schematische Darstellung der nicht-vorgemischten Verbrennung.	47

4.2	Bereiche turbulenter nicht-vorgemischter Verbrennung als Funktion der turbulenten Damköhler-Zahl und der turbulenten Reynolds-Zahl nach Poinot und Veynante [182].	49
4.3	Schematische Darstellung einer laminaren Gegenstromdiffusionsflamme.	60
5.1	Lösungsalgorithmus RGFoam.	67
5.2	Lösungsalgorithmus RGflameletFoam	69
5.3	Dichte und Kompressibilitätsfaktor als Funktion der Temperatur für O ₂ bei $p = 5.61$ MPa.	70
5.4	Lösungsalgorithmus RGstochasticFieldsFoam	72
5.5	Dichtesignal und dessen zeitliche Ableitung in einer turbulenten Diffusionsflamme: Verifizierung des Rauschfilters.	73
6.1	Thermodynamischer Zustand am Einlass der trans- und überkritischen N ₂ - Einspritzung.	77
6.2	Rechengitter für die LES trans- und überkritischer N ₂ - Einspritzung.	78
6.3	Gemittelttes Dichteprofil auf der Symmetrieachse von Case 3: Gitterstudie.	78
6.4	Gemittelttes Dichteprofil auf der Symmetrieachse von Case 3: Einfluss des Wärmeeintrags im Injektor.	79
6.5	Dichte-Isoflächen bei $\hat{\rho} = 0.5 (\bar{\rho}_{in} + \bar{\rho}_{\infty})$. Die Oberflächen sind mit dem Betrag der Wirbelstärke eingefärbt.	81
6.6	Momentaufnahme des Dichtegradienten. Die rote Linie markiert die mittlere Dichte $\hat{\rho} = 0.5 (\bar{\rho}_{in} + \bar{\rho}_{\infty})$	82
6.7	Normierte Dichte. Die schwarze Linie markiert die mittlere Dichte $\hat{\rho} = 0.5 (\bar{\rho}_{in} + \bar{\rho}_{\infty})$, die weiße gestrichelte Linie die Länge des Strahlkerns.	82
6.8	Momentaufnahme der isobaren Wärmekapazität.	84
6.9	Gemittelttes Dichteprofil auf der Symmetrieachse von Case 3: Einfluss der Einströmtemperatur.	85
6.10	Gemittelttes Dichteprofil auf der Symmetrieachse von Case 3: Einfluss der Zustandsgleichung.	85
6.11	Gemittelttes Dichteprofil auf der Symmetrieachse von Case 3: Einfluss der Feinstrukturmodellierung.	86

6.12	Gemittelttes Dichteprofil auf der Symmetrieachse von Case 4. . . .	87
6.13	Gemittelte Maximalwerte der radialen und axialen Komponente des Reynoldsschen Spannungstensors auf der Symmetrieachse: Vergleich der trans- und überkritischen Einspritzung.	88
6.14	Gemittelte radiale und axiale Komponente des Reynoldsschen Spannungstensors als Funktion des Abstands von der Symmetrieachse: Vergleich der trans- und überkritischen Einspritzung. Gezeigt sind die Profile an den drei axialen Positionen $x/D = 2.5, 5$ und 7.5 . . .	89
6.15	Gemittelte Maximalwerte der radialen und axialen Komponente des Reynoldsschen Spannungstensors auf der Symmetrieachse von Case 3: Einfluss der Zustandsgleichung.	90
6.16	Gemittelte Maximalwerte der radialen und axialen Komponente des Reynoldsschen Spannungstensors auf der Symmetrieachse von Case 3: Einfluss der Feinstrukturmodellierung.	91
6.17	Adiabate Mischungstemperatur der binären N_2/H_2 - Mischung bei $p = 4$ MPa.	95
6.18	Partialdichten der adiabaten N_2/H_2 - Mischung bei $p = 4$ MPa. . .	96
6.19	Rechengitter für die LES koaxialer N_2/H_2 - Einspritzung.	97
6.20	Gemittelte Dichte auf der Symmetrieachse von Testfall E4: Gitterstudie.	98
6.21	Gemittelte Dichte auf der Symmetrieachse von Testfall E4: Einfluss der Wasserstoff-Einlagerung.	98
6.22	Dichte-Isoflächen bei $\hat{\rho} = 0.5 (\bar{\rho}_{N_2} + \bar{\rho}_{H_2})$ mit Dichtegradient in der $y = 0$ Schnittebene. Die Oberflächen sind mit dem Betrag der Wirbelstärke eingefärbt.	101
6.23	Momentaufnahme der Temperatur.	102
6.24	Momentaufnahme der Wasserstoff-Partialdichte.	102
6.25	Zustandsdiagramm für die in der LES berechneten Temperaturen im Mischungsraum mit adiabater Mischungstemperatur und Zweiphasengebiet.	103
6.26	Gemittelte Partialdichten von Wasserstoff und Stickstoff auf der Symmetrieachse.	104
6.27	Maximale gemittelte Wasserstoff-Partialdichte als Funktion des Abstands vom Injektor.	105

6.28	Gemittelte Partialdichten von Wasserstoff und Stickstoff als Funktion des Abstands von der Symmetrieachse an den vier axialen Positionen $x/D = 1, 2, 3$ und 4 . Grau: $\langle \rho_{N_2} \rangle$; Schwarz: $\langle \rho_{H_2} \rangle$	106
6.29	Vergleich der gemessenen und der berechneten Wasserstoff-Partialdichten in der Schnittebene bei $z = 0$ mm.	107
6.30	Rechengitter für die LES transkritischer LOx/GCH ₄ - Verbrennung: Globale Ansicht.	111
6.31	Rechengitter für die LES transkritischer LOx/GCH ₄ - Verbrennung: Detailansicht Injektor.	111
6.32	Flamelet-Ergebnis für die Temperatur in einer LOx/GCH ₄ -Flamme: Vergleich zwischen GRI-3.0 und JL-R.	113
6.33	Flamelet-Ergebnis für die Zusammensetzung in einer LOx/GCH ₄ -Flamme bei $\chi_{st} \approx 0$: Vergleich zwischen GRI-3.0 und JL-R.	113
6.34	Flamelet-Ergebnis für die Temperatur in einer LOx/GCH ₄ -Flamme: Einfluss der skalaren Dissipationsrate und der Mischungsbruchvarianz.	114
6.35	Konfiguration G2-03: Momentaufnahme der stöchiometrischen Isofläche ($\tilde{f}_{st} = 0.2$). Die Oberfläche ist mit der Temperatur eingefärbt.	116
6.36	Konfiguration G2-03: Gemittelte axiale Geschwindigkeit in einer Ebene bei $z = 0$. Die weiße Linie markiert die Rezirkulationszonen ($\langle \tilde{U} \rangle = 0$ m/s).	117
6.37	Konfiguration G2-03: Momentaufnahme der Flamme in einer Ebene bei $z = 0$. Die weiße Linie markiert die Pseudo-Siedetemperatur von Sauerstoff $T_{pb, O_2} = 157.4$ K.	118
6.38	Konfiguration G2-03: Momentaufnahme der Dichte und der künstlichen numerischen Viskosität in einer Ebene bei $z = 0$. Die weiße Linie markiert die stöchiometrische Mischung $\tilde{f}_{st} = 0.2$	119
6.39	Konfiguration G2-03: Gemittelte axiale Geschwindigkeit in einer Ebene bei $z = 0$	120
6.40	Gemittelte Temperatur und Temperaturschwankung in radialer Richtung. Gezeigt sind die Profile an den drei axialen Positionen $x = 15$ mm, 30 mm und 45 mm.	121
6.41	Zustandsdiagramm für die in der LES berechneten Temperaturen im Mischungsbruchraum. Gezeigt sind die Ergebnisse an den drei axialen Positionen $x = 15$ mm, 30 mm und 45 mm.	123
6.42	Flamelet-Ergebnis für die normierten OH und OH* Profile sowie für die normierte Wärmefreisetzung.	124

6.43	Konfiguration G2-03: Vergleich zwischen der mit der Methode von Fiala und Sattelmayer [53] berechneten OH*-Strahlung und dem OH-Massenbruch in einer Ebene bei $z = 0$. Die Felder sind mit ihrem Maximalwert normiert.	126
6.44	Vergleich zwischen der gemessenen und der normierten OH*-Strahlung aus der LES. Die Messdaten im jeweils unteren Teil der Abbildungen entstammen der Arbeit von Singla et al. [209].	127
6.45	Vergleich zwischen der gemessenen OH*-Strahlung und dem gemittelten OH-Massenbruch aus der LES. Die Messdaten im jeweils unteren Teil der Abbildungen entstammen der Arbeit von Singla et al. [209]	128
C.1	Dichteverlauf verschiedener Spezies bei $p = 1.2 p_k$ und $p = 2 p_k$: Vergleich verschiedener thermischer Zustandsgleichungen.	144
C.2	Enthalpie verschiedener Spezies bei $p = 1.2 p_k$ und $p = 2 p_k$: Vergleich der PR-ZGL und der Harstad-Korrektur.	145
C.3	Isobare Wärmekapazität verschiedener Spezies bei $p = 1.2 p_k$ und $p = 2 p_k$: Vergleich der PR-ZGL und der Harstad-Korrektur.	146
C.4	Viskosität verschiedener Spezies bei $p = 1.2 p_k$ und $p = 2 p_k$: Validierung des Transportmodells von Chung et al. [31] bei Verwendung verschiedener thermischer Zustandsgleichungen.	147
C.5	Thermische Leitfähigkeit verschiedener Spezies bei $p = 1.2 p_k$ und $p = 2 p_k$: Validierung des Transportmodells von Chung et al. [31] bei Verwendung verschiedener thermischer Zustandsgleichungen.	148
D.1	Sandia Flamme D: Momentaufnahme der gefilterten Temperatur.	149
D.2	Sandia Flamme D: Gemittelter Mischungsbruch und Temperatur sowie deren Varianzen an verschiedenen axialen Positionen als Funktion des Radius.	150
D.3	Sandia Flamme D: Gemittelter Mischungsbruch und Temperatur sowie deren Varianzen auf der Symmetrieachse.	151

Tabellenverzeichnis

1.1	Übersicht der Forschergruppen im Bereich der Entwicklung von LES-Verfahren zur Simulation überkritischer Einspritzung und Verbrennung.	11
3.1	Maximale, mittlere und Standardabweichung der Dichteberechnung mit verschiedenen Zustandsgleichungen für zwei Isobaren bei $p = 1.2 p_c$ und $p = 2 p_c$. Die Werte beziehen sich auf die Referenzdaten von NIST [1].	37
3.2	Maximale, mittlere und Standardabweichung der Enthalpieberechnung mit verschiedenen Zustandsgleichungen für zwei Isobaren bei $p = 1.2 p_c$ und $p = 2 p_c$. Die Werte beziehen sich auf die Referenzdaten von NIST [1].	38
4.1	Erweiterter Jones-Lindstedt Mechanismus nach Frassoldati et al. [56] mit den Arrhenius Konstanten: $k_f = A T^b \exp(E_a/(RT))$. Die Einheiten sind in cal, l, mol und s angegeben.	53
6.1	Experimentelle Randbedingungen von Mayer et al. [138].	76
6.2	Randbedingungen für die LES trans- und überkritischer N_2 - Einspritzung.	80
6.3	Experimentelle Randbedingungen von Oswald et al. [165].	94
6.4	Randbedingungen für die LES koaxialer N_2/H_2 - Einspritzung.	99
6.5	Experimentelle Randbedingungen von Singla et al. [209].	110
6.6	Kennzahlen der Einspritzung für die LES transkritischer LOx/GCH_4 - Verbrennung bei der gewählten Injektorgeometrie.	112
6.7	Randbedingungen für die LES der LOx/GCH_4 - Verbrennung.	112

A.1 Stoffdaten der verwendeten Spezies.	135
A.2 Koeffizienten zur Auswertung der NASA-Polynome.	136
A.3 Koeffizienten zur Auswertung der Harstad-Korrektur.	137
D.1 Experimentelle Randbedingungen von Barlow et al. [3].	150

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Motivation

Die Raumfahrt hat schon lange Einzug in unseren Alltag gehalten. Weltraumbasierte Navigationssysteme helfen bei der Regelung des Verkehrs, Kommunikationssatelliten ermöglichen den weltweiten Informationsaustausch und der Katastrophenschutz wäre ohne eine großflächige Überwachung der Erdoberfläche, wie sie nur aus dem All möglich ist, weniger wirksam. Den Zugang zum Weltraum und damit die Voraussetzung für die genannten und viele andere Raumfahrtanwendungen ermöglichen Transportsysteme, die in der Lage sind, Satelliten, Astronauten oder Versorgungsgüter zuverlässig in ihren Zielorbit zu befördern. Die Beherrschung einer Antriebstechnologie, die einen für diese Aufgabe ausreichend hohen Schub über längere Zeit kontrolliert generiert, ist eine große technische Herausforderung. In den frühen Jahren der operativen Raumfahrt, Mitte des letzten Jahrhunderts, wurde die Entwicklung im Wesentlichen von den großen Industrienationen, insbesondere von den USA und der Sowjetunion, bestimmt. Mit großem finanziellem und personellem Aufwand wurde die Entwicklung chemischer Raketentriebwerke unter dem Eindruck der politischen Rivalität zwischen den beiden Großmächten vorangetrieben. Viele der in dieser Zeit entwickelten Technologien sind noch heute im Einsatz.

Seit dem Ende des kalten Krieges starten jährlich zwischen 50 und 90 Trägerraketen. Das Feld der Anbieter hat sich deutlich erweitert und neben den großen Raumfahrtationen verfolgen immer mehr Länder eigene Raumfahrtprogramme. Auch in Europa werden seit den 1970er Jahren eigene Trägerraketen entwickelt. Das aktuelle Modell, die Ariane 5, führte im Zeitraum zwischen ihrem Erstflug 1996 und März 2016 85 Raketenstarts durch. Der Nachfolger, die Ariane 6, befindet sich in der Entwicklungsphase und soll 2020 seinen Erstflug absolvieren. Zusätzlich zur wachsenden Anzahl staatlicher Raumfahrtprogramme entwickeln seit Beginn des 21. Jahrhunderts auch private Firmen Trägerraketen und bringen Nutzlasten erfolgreich in den Orbit.

Durch die zunehmende Konkurrenz unter den Anbietern von Raumtransportsystemen steigt der Druck, die verwendeten Technologien beständig weiterzuentwickeln.

Eine der größten Herausforderungen besteht darin, die gewichtsbezogene Leistung der Raketentriebwerke sowie deren Zuverlässigkeit zu steigern, aber gleichzeitig die Betriebs- und Entwicklungskosten zu senken. Bei Raketentriebwerken, in denen Flüssigtreibstoffe verwendet werden, ist die Brennkammer ein in besonders hohem Maße belastetes und daher für die Optimierung interessantes Subsystem. In ihr treten extreme thermische und mechanische Lasten auf, nach deren Berechnung sich die Auslegung der Kühlung, der Schubkammerbauweise und die Wahl der Betriebspunkte, bei denen die Trägerrakete operiert, richtet. Bei der genauen Bestimmung der Lasten und der Charakterisierung der Strömung in Brennkammern können numerische Simulationsverfahren hilfreich sein. Insbesondere vor dem Hintergrund, dass die verfügbare Rechenleistung kontinuierlich steigt, hat die numerische Strömungssimulation das Potential, zu einem besseren Verständnis der Abläufe in Raketentriebkammern beizutragen und prädiktive Aussagen über die zu erwartenden Strömungszustände zu treffen.

Ein weiterer Ansatzpunkt zur Optimierung der Schubkammer, gerade im Hinblick auf eine Senkung der Startkosten, ist die Umstellung von klassischen Treibstoffen wie Wasserstoff oder Kerosin auf Methan. Auch als Alternative für hypergole Treibstoffe, die aufgrund ihrer hohen Giftigkeit mittelfristig nicht mehr in Raketen verwendet werden sollen, ist Methan interessant. Zu den Vorteilen zählt der hohe spezifische Impuls, der bei der Verbrennung mit Sauerstoff erzielt werden kann, die im Vergleich zu Wasserstoff niedrigeren Produktions- und Lagerungskosten sowie die im Vergleich zu Kerosin besseren Kühleigenschaften. Das Verhalten von Methan als Raketentreibstoff ist allerdings noch nicht ausreichend verstanden und wird derzeit erforscht. Auch hier können numerische Methoden den Entwicklungsprozess vorantreiben und zu einem besseren Verständnis beitragen.

Die Berechnung der Strömung in Raketentriebkammern stellt jedoch eine große Herausforderung dar, die sich insbesondere aus den extremen Betriebsbedingungen und den damit verbundenen thermodynamischen Phänomenen ableitet. Moderne Flüssigkeitsraketentriebwerke werden bei hohen Drücken von bis zu 25 MPa (RD-170 Triebwerk) betrieben. Der Kammerdruck liegt somit über dem kritischen Druck der verwendeten Reinstoffe. Eine Unterscheidung zwischen Flüssigkeit und Gas ist somit hinfällig. Gleichzeitig werden die Treibstoffe gekühlt gelagert und je nach Bauart bei Temperaturen unterhalb der kritischen Temperatur eingespritzt. Man spricht von transkritischer Verbrennung. Bei diesen Bedingungen treten die Moleküle verstärkt miteinander in Wechselwirkung, was sich erheblich auf ihr Verhalten auswirkt. Um die Strömung berechnen zu können, bedarf es geeigneter Modellierungen und Zustandsgleichungen, die zum einen die Komplexität des nichtlinearen Verhaltens wiedergeben und gleichzeitig numerisch effizient genug sind, um in Strömungssimulationen angewendet werden zu können. Weitere Herausforderungen bei der Simulation von Raketentriebkammern sind die Beschreibung der turbulenten Mischung sowie die Modellierung der Verbrennung. Die genannten Teilaspekte Verbrennung, Turbulenz und thermodynamische Modellierung beeinflussen sich gegenseitig und etablierte Modelle, bei deren Entwicklung solche Wechselwirkungen nicht berücksichtigt wurden, müssen neu hinterfragt und auf ihre Anwendbarkeit in Raketentriebkammern getestet werden.

Trotz der langjährigen Erfahrung im Bereich der Raumfahrt sind nicht alle physikalischen Prozesse, die bei der Verbrennung in Raketenbrennkammern auftreten, ausreichend verstanden und numerische Verfahren haben noch nicht die nötige Reife erlangt, um zuverlässig und effizient zur Auslegung der transkritischen Verbrennung in Raketenbrennkammern eingesetzt werden zu können. Die vorliegende Arbeit befasst sich daher mit der Weiterentwicklung zeitaufgelöster Simulationsverfahren zur Berechnung der Mischung und Verbrennung in Raketenbrennkammern. Im Fokus steht die Modellierung der thermodynamischen Effekte bei transkritischen Einspritzbedingungen sowie deren Einfluss auf die turbulente Mischung und die Verbrennung von Methan. Es soll ein Beitrag zur Verbesserung bestehender Simulationsverfahren geleistet und durch die Diskussion numerischer Ergebnisse zum besseren Verständnis der Methan-Verbrennung in Raketenbrennkammern beigetragen werden.

1.2 Stand der Forschung

Um ein Gesamtverständnis für die Verbrennung in Raketenbrennkammern zu entwickeln, ist es zum einen erforderlich, die diversen physikalischen Prozesse isoliert zu betrachten und zu verstehen, zum anderen aber auch deren Wechselwirkung miteinander in anwendungsnahen Konfigurationen zu untersuchen. Aus der Verschiedenheit der beiden Zielstellungen ergeben sich unterschiedliche Untersuchungsansätze. Im Folgenden werden daher zunächst Ergebnisse grundlagenorientierter Forschung zu den relevanten Teilaspekten der Verbrennung in Raketenbrennkammern zusammengefasst, bevor in den letzten beiden Abschnitten die experimentellen und numerischen Arbeiten zu anwendungsorientierten Konfigurationen dargestellt sind.

Eigenschaften realer Fluide

Wie eingangs erwähnt, ist eine der Hauptherausforderungen bei der Simulation der Verbrennung in Raketenbrennkammern die Beschreibung der thermodynamischen Eigenschaften des Fluids. Bei hohen Drücken treten verstärkt molekulare Wechselwirkungen auf, die das Fluidverhalten stark beeinflussen. Gerade in der Nähe des kritischen Punkts verlaufen Zustandsänderungen stark nichtlinear, und das bei atmosphärischen Drücken typischerweise verwendete ideale Gasgesetz verliert seine Gültigkeit. Um die Abgrenzung auch begrifflich hervorzuheben, werden Fluide, die vom Verhalten idealer Gase abweichen, als reale Fluide bezeichnet.

Das Verhalten realer Fluide wird bereits seit dem 19. Jahrhundert ausgiebig erforscht [33] und es existieren viele, teils sehr genaue Modellierungsansätze. Das Buch von Poling et al. [183] gibt einen umfassenden Überblick. Im Hinblick auf die Anwendung in der numerischen Strömungsmechanik (CFD für engl. *Computational fluid dynamics*) ist der Aufwand, der zur Berechnung der thermodynamischen Eigenschaften nötig ist, neben der Genauigkeit ein limitierender Faktor bei der Auswahl der Modellierung. Die folgende Betrachtung beschränkt sich daher auf die in der CFD umsetzbaren Methoden zur Beschreibung realer Fluide.

Bereits 1873 entwickelte van der Waals [226] eine Zustandsgleichung, die zwei Parameter enthält, um das Eigenvolumen der Moleküle und deren Anziehung untereinander zu berücksichtigen. Die ursprüngliche Formulierung wurde in den folgenden Jahren weiterentwickelt, ohne jedoch den zu Grunde liegenden funktionalen Zusammenhang der Zustandsgrößen zu verändern. Diese aus der van-der-Waals-Gleichung hervorgegangenen Formulierungen werden als kubische Zustandsgleichungen bezeichnet, da das Volumen bei ihnen in der dritten Potenz in die Modellgleichung eingeht. In der CFD sehr häufig verwendete Vertreter kubischer Zustandsgleichungen sind die Peng-Robinson-Zustandsgleichung (PR-ZGL) [170] sowie die Soave-Redlich-Kwong-Zustandsgleichung (SRK-ZGL) [214]. Sie bilden das nichtlineare Verhalten der Fluide in weiten Teilen gut ab und haben den Vorteil, dass sie aufgrund der recht einfachen Formulierung numerisch effizient ausgewertet werden können. In einigen Bereichen, bei der SRK-ZGL in der Nähe der kritischen Temperatur, bei der PR-ZGL im Bereich unterkritischer Temperaturen, ist die Genauigkeit der beiden Zustandsgleichungen allerdings nicht zufriedenstellend. Eine weitere Verbesserung wurde von Cismondi und Mollerup [32] vorgeschlagen, die die PR-ZGL und die SRK-ZGL kombinieren, um die jeweiligen Stärken auszunutzen. Diese Formulierung wurde unlängst von Kim et al. [105] zur Simulation einer Kerosin-Flamme bei überkritischen Drücken verwendet.

Eine weitere Möglichkeit, die genannten Schwächen der PR-ZGL bzw. der SRK-ZGL zu korrigieren, bietet die Verwendung von Volumenkorrekturmethode. Erstmals von Martin [128] vorgeschlagen, basieren sie auf der Idee den Zustand eines Fluids entlang der Volumenachse bei konstanter Temperatur und konstantem Druck zu verschieben. In der Literatur finden sich viele, teils auf bestimmte thermodynamische Bereiche oder Stoffe spezialisierte Methoden [169, 6, 124, 10, 29, 57]. Die beiden Volumenkorrekturen von Harstad et al. [75] und Abudour et al. [5, 4] werden in dieser Arbeit zur Simulation der Einspritzung bei überkritischen Drücken verwendet.

Neben den kubischen gibt es eine Vielzahl an Zustandsgleichungen, die genauer, aber auch komplexer und numerisch aufwendiger sind. Beispiele sind die Perturbed-Chain-SAFT-[67] oder die GERG-2008-Zustandsgleichung [115]. Sie sind wertvolle Referenzen und werden in der vorliegenden Arbeit zur Bewertung einfacherer Modellierungen verwendet. In der CFD kommen sie jedoch kaum zum Einsatz, da ihre Auswertung zu aufwendig ist. Ausnahmen stellen die Arbeiten von Urbano und Nasuti [224] dar, die die GERG-2004-Zustandsgleichung von Kunz et al. [114] verwenden, um die Strömung in Kühlkanälen bei überkritischen Drücken zu simulieren. Auch Oefelein und Yang [157] verwenden mit der 32-koeffizientigen erweiterten Benedict-Webb-Rubin-Zustandsgleichung von Jacobsen und Stewart [86] für ihre Simulationen überkritischer Scherschichten eine im Vergleich zu kubischen Zustandsgleichungen deutlich komplexere Formulierung.

Nicht nur die Beschreibung der Zustandsgrößen ist durch die molekularen Wechselwirkungen bei den Drücken, die typischerweise in Raketenbrennkammern auftreten, beeinflusst. Auch der Transport, insbesondere bei der Mischung mehrerer Stoffe, ist von Realgaseffekten geprägt. Eine frühe numerische Studie zu den Transportvorgängen an der Oberfläche einzelner Tropfen wurde von Delplanque

und Sirignano [44] vorgestellt. Sie zeigen, dass der Verdampfungsprozess unter Annahme des thermodynamischen Gleichgewichts wie im Unterkritischen ablaufen kann, auch wenn der Druck den kritischen Druck im Tropfen übersteigt. Aufgrund von Mischungseffekten an der Tropfenoberfläche kann sich eine stabile Phasengrenze zwischen dem überkritischen Tropfen und dem umgebenden Fluid ausbilden. Dies wurde auch experimentell von Oldenhof et al. [162] anhand einzelner Aceton-Tropfen in einer bezüglich der Reinstoffe überkritischen Stickstoffatmosphäre gezeigt. Mit der Frage, wann sich zwischen zwei Stoffen bei überkritischen Drücken eine stabile Phasengrenze ausbilden kann, beschäftigen sich auch die Arbeiten von Dahms und Oefelein [40, 41]. Sie verwenden die Dichtegradiententheorie, um die Transportvorgänge an Trennflächen bei überkritischen Drücken anhand eines Vergleichs zwischen der mittleren freien Weglänge der Moleküle und der Grenzflächendicke zu untersuchen und Rückschlüsse auf die Existenz einer Oberflächenspannung zu ziehen. Einen anderen Ansatz, Transportprozesse an der Oberfläche überkritischer Tropfen zu untersuchen, verfolgen Harstad und Bellan [74], die die Fluktuationstheorie von Keizer [102] anwenden, um Nichtgleichgewichtseffekte beim Phasenübergang zu berücksichtigen.

Ausführliche numerische Untersuchungen zur Diffusion und turbulenten Mischung in Mehrkomponenten-Strömungen bei überkritischen Drücken wurden von der Gruppe um Josette Bellan durchgeführt. Anhand direkter numerischer Simulationen (DNS) turbulenter Scherschichten konnte das Mischungsverhalten von Heptan und Wasserstoff [143, 159] sowie Sauerstoff und Wasserstoff [160] untersucht werden. Die Arbeiten zeigen, dass bei hohen Drücken Soret- und Dufour-Effekte nicht mehr vernachlässigbar sind und der Stofftransport gegenläufig zu seinem Gradienten verlaufen kann (uphill diffusion). Eine umfassende Übersicht über die Arbeiten dieser Gruppe gibt der Artikel von Bellan [15].

Turbulenzmodellierung

Für die zuvor beschriebenen numerischen Grundlagenuntersuchungen wurden ausschließlich DNS-Methoden verwendet, in denen alle Längenskalen aufgelöst werden und keine zusätzliche Modellierung der Turbulenz benötigt wird. Wie allerdings schon von Reynolds [192] prognostiziert, wird die DNS in absehbarer Zukunft keine Option sein, um Strömungen in industrienahen Anwendungen, wie beispielsweise einer Raketenbrennkammer, zu berechnen. Die benötigte numerische Auflösung, um auch die kleinsten turbulenten Längenskalen bei hohen Reynolds-Zahlen aufzulösen, ist schlichtweg zu groß.

Numerisch wesentlich weniger aufwendig ist der Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Ansatz (RANS für engl. *Reynolds-averaged Navier-Stokes*), bei dem alle turbulenten Längenskalen modelliert werden und nur das zeitlich gemittelte Strömungsfeld berechnet wird. Hierdurch können wesentlich niedrigere Auflösungen verwendet und Symmetrien in der Geometrie ausgenutzt werden. Bei rotationssymmetrischen Brennkammern reicht es beispielsweise aus, nur ein Brennkammersegment zu berechnen, weswegen schon heute mit überschaubarem numerischen Aufwand industrienaher Brennkammerkonfigurationen berechnet werden können [110]. Da jedoch alle turbulenten Längenskalen, insbesondere die durch die geometrischen Gegebenheiten der Anwendung induzierten, modelliert werden, besteht in der RANS

eine große Abhängigkeit von der Wahl der Modellierung [168, 16]. Auch die im Turbulenzmodell auftretenden Parameter, insbesondere die turbulente Schmidt- und Prandtl-Zahl, können in RANS-Rechnungen einen großen Einfluss auf das Ergebnis haben [103].

Neben der RANS und der DNS bietet die Grobstruktursimulation (LES für engl. *Large eddy simulation*) eine weitere Möglichkeit turbulente Strömungen zu berechnen. In der LES werden die großen Skalen der Turbulenz explizit auf dem Rechengitter aufgelöst, wohingegen der Beitrag kleiner Skalen durch ein Feinstrukturmodell abgebildet wird. Es können daher geringere Auflösungen als bei der DNS verwendet werden. Im Vergleich zur RANS ist der numerische Aufwand jedoch deutlich höher. Der Vorteil der LES besteht unter anderem darin, dass die Fluktuationen bei kleinen Längenskalen einen universelleren Charakter haben als die großen, von der Geometrie induzierten Wirbel. Im Vergleich zur RANS können daher deutlich einfachere Modelle verwendet werden und die Parameterabhängigkeit ist geringer [186, 188]. Seit den ersten Rechnungen im Bereich der Meteorologie von Smagorinsky [211] findet die LES, insbesondere vor dem Hintergrund stetig steigender Rechnerleistung, immer häufiger auch im Bereich der Verbrennungssimulation Anwendung und die benötigten Feinstrukturmodelle und Diskretisierungsverfahren werden stetig weiterentwickelt. Die Bücher von Garnier et al. [61] und Fröhlich [58] geben eine Übersicht aktueller Methoden.

Die etablierten Feinstrukturmodelle wurden allerdings durchweg für Strömungen bei atmosphärischen Drücken entwickelt. Die Notwendigkeit, die dabei getroffenen Annahmen in Hinblick auf die Anwendung bei hohen Drücken zu überprüfen, demonstrieren Selle et al. [204]. Sie verwenden die DNS, um das Mischungsverhalten in turbulenten Scherschichten bei überkritischem Druck zu analysieren. Die Ergebnisse zeigen, dass in der LES unaufgelöste Fluktuationen des thermodynamischen Zustands zu einem nicht vernachlässigbaren turbulenten Spezies- und Wärmetransport führen kann. Dies ist insbesondere auf die Nichtlinearität der thermodynamischen Zustandsgleichung zurückzuführen. In nachfolgenden Arbeiten der selben Gruppe schlagen Borghesi und Bellan [17, 18] eine Modellierung zur Berücksichtigung des zusätzlichen turbulenten Transports vor. Die weitere Entwicklung von Feinstrukturmodellen gestaltet sich jedoch aufgrund fehlender experimenteller Messungen turbulenter Größen schwierig. Einen Vergleich verschiedener etablierter Feinstrukturmodelle findet sich in der Arbeit von Petit et al. [174], die den Einfluss der verschiedenen Formulierungen auf das mittlere Strömungsfeld in der von Mayer et al. [138] untersuchten Stickstoff-Einspritzung bewerten. Zwei der getesteten Modelle, das Modell von Vreman [228] und das Modell von Smagorinsky [211], werden auch im Rahmen der vorliegenden Arbeit verwendet.

In diesen Modellen wird die unaufgelöste Turbulenz explizit modelliert. Ein anderer Ansatz wird von der Gruppe um Stefan Hickel verfolgt, die den Effekt der unaufgelösten Turbulenz auf die Strömung implizit, durch Anpassung der bei der Gleichungsdiskretisierung entstehenden Dissipation abbildet [77, 78]. In den Arbeiten von Matheis et al. [132, 131] wird die Methode verwendet, um die koaxiale Einspritzung bei Bedingungen, die denen in Raketenbrennkammern ähnlich sind, zu simulieren.

Verbrennungsmodellierung

Ein weiterer zentraler Aspekt bei der numerischen Simulation von Raketebrennkammerströmungen ist die Beschreibung der turbulenten Verbrennung. Deren Modellierung gestaltet sich aufgrund der großen Anzahl auftretender Längen- und Zeitskalen sowie der nichtlinearen Interaktion zwischen chemischer Reaktionskinetik und turbulenten Fluktuationen sehr schwierig. Auch nach vielen Jahrzehnten intensiver Forschung, getrieben insbesondere von der großen Bedeutung der turbulenten Verbrennung bei der Energieumwandlung, sind nicht alle Phänomene zufriedenstellend verstanden. Die von Echekki und Mastorakos [47] herausgegebene Zusammenfassung aktueller Modellierungsansätze sowie die Arbeit zur turbulenten Verbrennung in der LES von Pitsch [180] bieten eine gute Übersicht über aktuelle numerische Methoden zur Simulation reagierender Strömungen.

In Raketebrennkammern werden der Treibstoff und der Oxidator separat, oft durch Koaxialinjektoren, in die Brennkammer eingespritzt. Man spricht von nicht-vorgemischter Verbrennung, zu deren Modellierung häufig der Flamelet-Ansatz verwendet wird. Dieser wurde maßgeblich von der Gruppe um Norbert Peters [171, 173] entwickelt. Unter der Annahme, dass die chemischen Reaktionen wesentlich schneller ablaufen als die turbulente Mischung, wird die Struktur der Flamme im Vorfeld der Strömungssimulation berechnet und tabelliert. Da die zeitaufwendige Lösung der chemischen Reaktionskinetik nicht während der Simulation ausgeführt wird, können auch detaillierte Mechanismen verwendet werden, was insbesondere im Hinblick auf die Methan-Verbrennung von Vorteil ist. Bei Flammen, in denen chemische Nichtgleichgewichtseffekte eine untergeordnete Rolle spielen, bietet der Flamelet-Ansatz somit die Möglichkeit, mit überschaubarem numerischem Aufwand komplexe Reaktionsmechanismen zu verwenden [179, 104, 59].

Speziell im Hinblick auf seine Anwendbarkeit zur Simulation der Verbrennung in Raketebrennkammern wurde der Flamelet-Ansatz von Lacaze und Oefelein [119] untersucht. Der Fokus dieser Arbeit lag auf der transkritischen Verbrennung von Sauerstoff und Wasserstoff. Für diese Treibstoffkombination konnte gezeigt werden, dass die Flammenfronten dünn und die typischerweise auftretenden chemischen Zeitskalen kleiner als die der Strömung sind, was die Grundvoraussetzungen für die Verwendung des Flamelet-Ansatzes sind. Auch Streckungseffekte, welche oftmals durch eine zusätzliche Dimension in der Tabellierung berücksichtigt werden, sind bei den von Oefelein und Lacaze untersuchten Bedingungen vernachlässigbar. Weitere Arbeiten zur Untersuchung der Struktur überkritischer Wasserstoff-Flammen wurden von Pohl et al. [181] und Ribert et al. [194] durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen, dass Realgaseffekte aufgrund des schnellen Anstiegs der Temperatur in der Flamme einen geringen Einfluss auf die Flammenstruktur haben. Überkritische Methan-Flammen wurden von Pons et al. [184] und Lapenna et al. [120] untersucht.

Ein weiterer wichtiger Aspekt der Verbrennungsmodellierung in der LES ist die Beschreibung der chemischen Reaktionen, die auf dem Rechengitter nicht aufgelöst werden. Da es in der Regel nicht möglich ist, die Flammenfront in der LES ausreichend aufzulösen, kann die Modellierung der Feinstruktureffekte ausschlaggebend für das Simulationsergebnis sein. Huo und Yang [81] überprüfen daher ob die bei atmosphärischen Drücken häufig verwendeten angenommenen

Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDF für engl. *Probability density function*) auch zur Simulation überkritischer Flammen verwendet werden können. Sie führen eine DNS zur Berechnung der turbulenten Verbrennung transkritisch eingespritzten Sauerstoffs und überkritisch eingespritzten Methans durch, um die kleinskaligen Fluktuationen direkt zu berechnen. Die aus der DNS extrahierte PDF zeigt teils deutliche Abweichungen zu gängigen angenommenen Verteilungen, wie der β - oder der Gauß-Verteilung. Zusätzlich weisen Huo und Yang, wie zuvor auch die Gruppe um Josette Bellan [204, 17, 18], auf den Zusammenhang zwischen der Nichtlinearität der thermodynamischen Zustandsänderung und den turbulenten Flüssen hin.

Eine Alternative zur Verwendung angenommener Verteilungen ist die Berechnung der PDF durch stochastische Methoden [185, 187]. Bei den sogenannten Transport-PDF-Verfahren ist der Grad der Modellierung im Vergleich zur Verwendung angenommener Verteilungen deutlich geringer und der chemische Reaktionsquellterm tritt in geschlossener Form auf. Allerdings ist der numerische Aufwand, um eine genügend genaue stochastische Beschreibung der PDF zu gewährleisten, sehr hoch. Meist werden hierfür Partikelmethode eingesetzt [27, 35, 85]. Alternativ dazu wurde von Valiño [225] die Verwendung kontinuierlicher stochastischer Felder vorgeschlagen. Durch dieses Verfahren kann die PDF in rein Eulerscher Betrachtungsweise beschrieben werden, was gerade in der CFD von Vorteil ist. Einige Jahre nach der Formulierung wurde die Methode von der Gruppe um William Jones für die LES weiterentwickelt [154]. Da schon eine recht geringe Anzahl an stochastischen Feldern ausreicht, um die PDF ausreichend genau zu beschreiben, ist die Methode numerisch vergleichsweise effizient. In den Arbeiten von Jones und Prasad [95] sowie denen von Jones und Navarro-Martinez [94] wird demonstriert, dass auch chemische Nichtgleichgewichtseffekte und starke Wechselwirkungen zwischen Turbulenz und chemischer Reaktionskinetik wiedergegeben werden können. In der vorliegenden Arbeit wird daher das Transport-PDF-Verfahren von Valiño [225] mit einer kubischen Zustandsgleichung gekoppelt und eingesetzt, um die Verbrennung bei überkritischen Drücken zu simulieren.

Experimentelle Untersuchungen

Aufgrund der extremen Bedingungen in Raketenbrennkammern, gestalten sich experimentelle Untersuchungen der Verbrennung bei repräsentativen Bedingungen schwierig und sind mit großem Aufwand verbunden. Zum einen müssen hohe Sicherheitsanforderungen beim Aufbau und Betrieb des Prüfstandes erfüllt werden, zum anderen sind reagierende Strömungen bei überkritischen Brennkammerdrücken und niedrigen Einspritztemperaturen optisch schwer zugänglich, wodurch nur wenige Messverfahren eingesetzt werden können.

Ab Mitte der 1990er Jahre wurden dennoch zahlreiche Messungen durchgeführt, die zu einem deutlich besseren Verständnis der Einspritzung bei hohen Drücken geführt haben. Insbesondere an den Prüfständen des Air Force Research Laboratory (AFRL) in den USA, am P8 und M3 Prüfstand des DLR am Standort Lampoldshausen in Deutschland und am Mascotte Prüfstand der ONERA in Frankreich wurden umfangreiche Messreihen durchgeführt. Die Artikel von Oswald et al. [166] und Chehroudi [26] geben eine gute Übersicht über die koordinierten experimentellen Untersuchungen des DLR und des AFRL. Die von der ONERA durchgeführten

Messungen sind in der Arbeit von Habiballah et al. [69] zusammengefasst.

Um ein grundlegendes Verständnis für die Einspritzung bei transkritischen Bedingungen zu entwickeln, wurden am DLR und am AFLR zunächst inerte Einspritzvorgänge untersucht. Dabei wurde flüssiger Stickstoff (LN_2) bei überkritischem Druck in eine mit warmem Stickstoff (GN_2) gefüllte Kammer eingespritzt und der Einfluss des thermodynamischen Zustands auf den Strahlzerfall durch eine systematische Variation der Einspritzbedingung untersucht [220, 164, 25]. Neben Schlierenaufnahmen des Strahls konnten am DLR auch Messungen der spontanen Raman-Streuung durchgeführt werden [138]. Die Daten sind gerade im Hinblick auf die Validierung numerischer Verfahren sehr wertvoll.

Die inerten Untersuchungen wurden dann auf die koaxiale Einspritzung erweitert. Am AFRL wurden ausführliche Studien zur koaxialen LN_2/GN_2 - Einspritzung durchgeführt [42]. Dabei wurde der Einfluss des Impulsstromverhältnisses auf den Strahlzerfall systematisch untersucht und eine Korrelation für die Strahllänge abgeleitet. Am DLR wurde auch die binäre Einspritzung mit den Stoffkombinationen LN_2 und Helium [136, 137] sowie LN_2 und Wasserstoff (GH_2) [165] untersucht. In den Experimenten zur LN_2/GH_2 - Einspritzung konnten Oschwald et al. [165] Messungen der Raman-Streuung durchführen und die Partialdichten von Wasserstoff und Stickstoff im Strömungsfeld bestimmen. Die Dichteverläufe lassen auf starke Realgaseffekte in der Mischungsschicht schließen. Neuere experimentelle Untersuchungen zur inerten Einspritzung bei überkritischen Drücken wurden bei der japanischen Raumfahrtagentur JAXA von Tani et al. [217] durchgeführt. In dieser Arbeit wurde das instationäre Verhalten der transkritischen Stickstoff-Einspritzung mit optionaler koaxialer Einspritzung untersucht.

Parallel zu den inerten Experimenten wurden auch reagierende Strömungen untersucht. Auf Seiten des DLR wurden umfangreiche Messungen zur Verbrennung von flüssigem Sauerstoff- (LOx) und Wasserstoff-Gemischen durchgeführt. Dabei wurden sowohl Einzel- als auch Multiinjektor-Konfigurationen bei sowohl über- als auch unterkritischen Drücken getestet. Durch zeitlich und räumlich hochaufgelöste Schattenaufnahmen konnten detaillierte Aufnahmen der Flamme gemacht und die Unterschiede zwischen der Verbrennung bei bezüglich der Reinstoffe unterkritischem und überkritischem Kammerdruck visualisiert werden [139, 136]. Bei unterkritischem Druck ist der Zerfall des flüssigem Sauerstoffstrahls von Tröpfchenbildung, Verdampfung und anschließender Zündung geprägt, wohingegen sich bei überkritischem Druck fingerförmige Strukturen vom dichten Kern lösen und kontinuierlich mit dem umgebenden Fluid mischen.

Auch am Mascotte Teststand der ONERA wurden umfangreiche Messungen zur LOx/GH_2 - Verbrennung bei überkritischen Drücken durchgeführt [69]. In den Experimenten konnte die OH^* -Strahlung gemessen und durch Anwendung der Abel-Transformation die gemittelte Flammenstruktur bestimmt werden [23, 98]. Singla et al. [209, 210] erweiterten den Prüfstand, um auch die Verbrennung von LOx und Methan (GCH_4) untersuchen zu können. In diesen Arbeiten wurde sowohl die OH^* - als auch die CH^* -Strahlung gemessen, was eine quantitative Bewertung von CFD-Verfahren ermöglicht.

Eine gemeinsame Übersicht der experimentellen Arbeiten von ONERA und DLR gibt der Artikel von Haidn und Habiballah [70]. Um zu einem besseren Verständnis für die Entstehung von Verbrennungsinstabilitäten in Raketenbrennkammern zu gelangen, konzentrieren sich die aktuellen Untersuchungen der beiden Institutionen auf die Wechselwirkung zwischen der Brennkammerakustik und der turbulenten Verbrennung. Hierzu wurden Prüfstände entwickelt, in denen hochfrequente transversale akustische Störungen aufgeprägt werden können. In den Arbeiten von Méry et al. [141, 142] wird die OH^* - und die CH^* -Strahlung in einer akustisch angeregten Multiinjektor-Brennkammer für die Treibstoffkombination LOx/GCH_4 gemessen. Die akustisch angeregte LOx/GH_2 - Verbrennung wird von Hardi et al. [73] untersucht. In beiden Arbeiten nimmt die Länge des zeitgemittelten LOx -Kerns bei akustischer Anregung deutlich ab.

Numerische Simulationen

Parallel zu den Fortschritten bei den experimentellen Untersuchungen, wurden auch die numerischen Verfahren dahingehend weiterentwickelt, die Einspritzung und Verbrennung in Raketenbrennkammern realitätsnah abzubilden. Die Pionierarbeit im Bereich der LES stammt von Oefelein and Yang [158, 157] von der Pennsylvania State University (Penn State), die bereits in den späten 1990er Jahren transkritische LOx/GH_2 - Flammen unter Verwendung der 32-koeffizientigen Benedict-Webb-Rubin Zustandsgleichung simulierten. Die später von derselben Gruppe vorgestellten Simulationen inerter Einspritzung bei transkritischen Bedingungen geben einen detaillierten Einblick in die Wechselwirkungen zwischen Realgasthermodynamik und Turbulenz [233, 232]. Einen Überblick über diese frühen Arbeiten findet sich in den Übersichtsartikeln von Yang [231] und von Oefelein [156]. In neueren Arbeiten der Gruppe um Joseph Oefelein wurde der Strömungslöser RAPTOR des Sandia National Laboratory (Sandia) zur massiv-parallelen Simulation transkritischer Verbrennung eingesetzt. Beispiele sind die Arbeiten von Ruiz et al. [195], in denen eine zweidimensionale LOx/GH_2 - Flamme mit DNS-Auflösung als Referenz für andere LES-Verfahren simuliert wurde, oder die von Gottiparthi et al. [66], in denen ein wandnormal eingespritzter Strahl (Jet-in-Crossflow) mit einer Auflösung von 3.2 Milliarden Rechenzellen und Grafikkarten-Beschleunigung zur Auswertung der thermodynamischen Modellierung berechnet wurde.

Gegen Ende des letzten Jahrzehnts erweiterten Schmitt et al. [199, 203] den von der CERFACS entwickelten LES-Strömungslöser AVBP¹ um eine thermodynamische Modellierung auf der Basis kubischer Zustandsgleichungen und validierten ihn anhand der Experimente zur transkritischen Stickstoff-Einspritzung von Mayer et al. [138] und der Experimente zur LOx/GH_2 - Verbrennung von Candel et al. [24]. AVBP wurde seither beständig weiterentwickelt und verwendet, um die transkritische LOx/GCH_4 - Verbrennung [200] sowie die inerte Einspritzung bei transversaler akustischer Anregung [201] zu untersuchen. In den aktuellen Arbeiten dieser Gruppe wurde auch die Interaktion zwischen der turbulenten Verbrennung und akustischen Störungen untersucht. In den Arbeiten von Schmitt et al. [198] wurden Simulationen zur Verbrennung in der von Méry et al. [142] experimentell untersuchten Multiinjektor-Brennkammer durchgeführt. Die Ergebnisse geben die

¹www.cerfacs.fr/avbp7x

Institut	Strömungslöser	Veröffentlichungen
Penn State, Sandia	RAPTOR	Oefelein und Yang [158, 157, 231, 156], Zong et al. [233, 232], Huo und Yang [81], Ruiz et al. [195], Gottiparthi et al. [66]
CERFACS	AVBP	Schmitt et al. [199, 203, 200, 201, 198], Hakim et al. [72], Ruiz et al. [195]
CORIA	SITCom-B	Petit et al. [174, 175], Ribert et al. [193]
JAXA	-	Matsuyama et al. [134, 133]
Universität Tokio	-	Terashima und Koshi [222, 223], Ka- wai et al. [101]
TUM	INCA	Matheis et al. [132, 131], Niedermei- er et al. [155], Hickel et al. [78]
CTR	CharlesX	Hickey et al. [80, 79]
Georgia Tech	LESLIE	Masquelet et al. [130], Guezennec et al. [68]

Tabelle 1.1: Übersicht der Forschergruppen im Bereich der Entwicklung von LES-Verfahren zur Simulation überkritischer Einspritzung und Verbrennung.

im Experiment beobachtete Verkürzung der Flamme bei akustischer Anregung gut wieder. Den Effekt der akustischen Anregung in Einzelinjektor-Konfigurationen wurde von Hakim et al. [72] untersucht.

Neben diesen beiden Gruppen beschäftigen sich insbesondere seit Beginn dieses Jahrzehnts eine zunehmende Zahl an Forschergruppen mit der Berechnung der Einspritzung und Verbrennung bei überkritischen Drücken. Eine Übersicht über die Gruppen und deren Arbeiten ist in Tabelle 1.1 gezeigt. Das französische Forschungsinstitut CORIA verfolgt beispielsweise die Entwicklung des Strömungslösers SITCom-B² [174] und konzentriert sich dabei insbesondere auf die Entwicklung von Tabellierungsmethoden zur effizienten Berechnung des thermodynamischen Zustands [175] und auf die Entwicklung niedrig-dissipativer Diskretisierungsverfahren zur numerischen Auflösung des hohen Dichtegradienten bei transkritischen Strömungen [193]. Letzteres steht auch im Fokus der Arbeiten von Matheis et al. [132] an der Technischen Universität München (TUM), die den impliziten LES-Löser INCA³ zur Berechnung inerter Realgasströmungen verwenden. Auch der vom Center of Turbulence Research (CTR) der Universität Stanford entwickelte Strömungslöser CharlesX wurde um eine Modellierung der Thermodynamik realer Fluide auf Basis der PR-ZGL erweitert. In den Arbeiten von Hickey et al. [80, 79] wird die Implementierung und die Kopplung mit einem Flamelet-basierten Verbrennungsmodell präsentiert. Am Georgia Institute of Technology (Georgia Tech) entwickelt die Gruppe um Suresh Menon den Strömungslöser LESLIE⁴. Dieser wurde in den Arbeiten von Masquelet et al. [130] und Guezennec et al. [68] um eine kubische Zustandsgleichung erweitert und es wurde die von Singla et al. [209] experimentell untersuchte

²www.coria-cfd.fr/index.php/SiTCom-B

³www.inca.org

⁴www.ccl.gatech.edu/leslie-code-capabilities

transkritische LOx/GCH₄ - Verbrennung simuliert. Auch bei der japanischen Raumfahrtagentur JAXA [134, 133] und an der Universität Tokio [222, 223, 101] werden LES-Verfahren zur Simulation der transkritischen Einspritzung und Verbrennung entwickelt. Letztere beschäftigen sich mit der Entwicklung numerischer Verfahren zur oszillationsfreien Diskretisierung starker Dichtegradienten.

All diese Arbeiten wurden mit dichte-basierten Lösern angefertigt. Aufgrund der typischerweise geringen Mach-Zahlen in Brennkammern, ist das dabei verwendete Gleichungssystem steif und es werden mitunter Präkonditionierungsverfahren benötigt, um die Strömungsgleichungen effizient lösen zu können [140]. Eine Alternative stellt die Verwendung druckbasierter Lösungsverfahren dar. Dieses in der RANS sehr häufig verwendete Verfahren [107, 167] wurde von Jarczyk [89] zur zeitaufgelösten Berechnung von Realgasströmungen auf die LES übertragen und zur Simulation der inertten Einspritzung bei trans- und überkritischen Bedingungen angewendet. Sie verwendete dafür den quelloffenen Strömungslöser OpenFOAM⁵, den sie um eine auf der PR-ZGL basierte thermodynamische Modellierung erweiterte. Die vorliegende Arbeit baut auf dieser Implementierung auf.

1.3 Gliederung der Arbeit

Im ersten Teil dieser Arbeit werden die Grundlagen zur Simulation der Strömung in Raketenbrennkammern vorgestellt. Diese lassen sich im Wesentlichen in drei Teilbereiche gliedern. Die Grundlagen zur Beschreibung turbulenter Strömungen werden in Kapitel 2 erläutert. Die Grundidee der LES wird vorgestellt und die gefilterten Erhaltungsgleichungen hergeleitet. Auf die thermodynamischen Eigenschaften realer Fluide sowie deren Modellierung wird in Kapitel 3 eingegangen. Insbesondere werden verschiedene Modellierungen bei für Raketenbrennkammern repräsentativen Bedingungen verglichen und bewertet. Hierbei werden auch Mischungseffekte berücksichtigt und Berechnungen des Phasengleichgewichts in binären Mischungen vorgestellt. Die Grundlagen zur Beschreibung der turbulenten nicht-vorgemischten Verbrennung sowie Modellierungsansätze für die LES werden in Kapitel 4 geschildert.

Im zweiten Teil der Arbeit werden die verwendeten numerischen Methoden sowie die Simulationsergebnisse gezeigt. In Kapitel 5 werden die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Strömungslöser dargestellt und deren Implementierung in OpenFOAM umrissen. Im darauffolgenden Kapitel 6 werden die LES-Ergebnisse dargestellt und diskutiert. Dabei werden zunächst die Ergebnisse zur inertten Einspritzung von Stickstoff präsentiert, später die zur koaxialen Einspritzung von Stickstoff und Wasserstoff. Der letzte Testfall beschäftigt sich mit der transkritischen Verbrennung von Sauerstoff und Methan. Schlussendlich wird die Arbeit in Kapitel 7 zusammengefasst und ein Ausblick auf die sich daraus ableitenden zukünftigen Projekte gegeben.

⁵www.openfoam.com

Kapitel 2

Turbulente Strömungen

Turbulente Strömungen können mit Hilfe der Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie, den Navier-Stokes-Gleichungen, beschrieben werden. Deren Einführung ist Gegenstand des ersten Abschnitts dieses Kapitels. Im zweiten Abschnitt wird das Konzept der LES erläutert und die gefilterten Erhaltungsgleichungen hergeleitet. Zwei Feinstrukturmodelle (SGS für engl. *Subgrid-scale*) zur Beschreibung der unaufgelösten Turbulenz werden eingeführt und deren Implementierung validiert. Mehr Details zur numerischen Beschreibung turbulenter Strömungen, die den Rahmen dieser Arbeit sprengen würden, können in den Büchern von Garnier et al. [61], Fröhlich [58] und Pope [186] gefunden werden.

2.1 Grundgleichungen

In der vorliegenden Arbeit werden Strömungen ausschließlich aus einer makroskopischen, eulerschen Betrachtungsweise heraus beschrieben. Dies bedeutet, dass sich die betrachteten, diskreten Kontrollvolumen zum einen nicht bewegen und zum anderen groß genug sind, um das enthaltene Fluid mittels makroskopischer Größen, wie etwa der Temperatur, dem Druck oder der Dichte, zu beschreiben. Die zeitliche Änderung einer nicht reagierenden Strömung kann dann über die Erhaltungsgleichungen für die Größen Masse, Impuls und Energie beschrieben werden. Diese werden im Bereich der numerischen Strömungsmechanik hinlänglich unter dem Begriff Navier-Stokes-Gleichungen zusammengefasst, benannt nach Claude Louis Marie Henri Navier und George Gabriel Stokes, die im 19. Jahrhundert unabhängig voneinander den Impulssatz für newtonsche und reibungsbehaftete Fluide aufstellten. Eine detaillierte Herleitung der Navier-Stokes-Gleichungen findet sich in den Büchern von Anderson [7] und Schlichting [197]. Bei reagierenden Strömungen ist es zusätzlich notwendig, die zeitliche Änderung der an der Reaktion beteiligten Spezies über eigene Transportgleichungen zu beschreiben. Im Folgenden werden die Navier-Stokes- sowie die Speziestransportgleichungen für kompressible, newtonsche Fluide eingeführt.

Massenerhaltung

Außer bei der Kernspaltung oder der Kernfusion kann Masse weder generiert noch zerstört werden. Daraus leitet sich die Kontinuitäts- oder Massenerhaltungsgleichung ab, welche besagt, dass die zeitliche Änderung der Masse in einem Kontrollvolumen dem konvektiven Fluss über dessen Grenzen entspricht. In differentieller Form führt dieser Zusammenhang zu dem Ausdruck:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j)}{\partial x_j} = 0. \quad (2.1)$$

Zur kompakten Darstellung der Formeln wird die Einsteinsche Summenkonvention verwendet. x_i und u_i bezeichnen den Positions- bzw. den Geschwindigkeitsvektor im kartesischen Koordinatensystem. Die Dichte ist mit ρ , die Zeit mit t gekennzeichnet.

Impulserhaltung

Die Basis für die Impulserhaltung wurde 1687 durch Isaac Newton in seinem ersten Gesetz postuliert, welches besagt, dass ein Körper in Ruhe verharrt oder sich gleichförmig bewegt, sofern keine äußeren Kräfte auf ihn wirken. Die relevanten Kräfte sind hier die Oberflächenkraft, verursacht durch den Druckgradienten $\partial p / \partial x_i$, sowie der viskose Spannungstensor τ_{ij} . Die Bilanzierung dieser Kräfte an einem Kontrollvolumen führt zum Impulserhaltungssatz:

$$\frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}. \quad (2.2)$$

Auf der linken Seite von Gleichung 2.2 stehen die zeitliche Änderung des Impulses sowie dessen konvektiver Transport.

Volumenkräfte, wie etwa die Gravitation, werden in der vorliegenden Arbeit nicht berücksichtigt. Des Weiteren werden alle Stoffe als newtonsche Fluide betrachtet und der viskose Spannungstensor wird mit Hilfe der Stokesschen Hypothese beschrieben:

$$\tau_{ij} = 2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} S_{kk} \right). \quad (2.3)$$

Dabei ist S_{ij} der symmetrische Scherspannungstensor

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.4)$$

und μ die dynamische Viskosität. δ_{ij} steht für das Kronecker-Delta.

Energieerhaltung

Nach dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik kann Energie nicht zerstört werden, wohl aber ihre Erscheinungsform ändern. Daraus kann eine weitere Erhaltungsgleichung abgeleitet werden, deren Form allerdings nicht eindeutig ist. So ist es im Feld der numerischen Strömungsmechanik gängig die Energieerhaltung über die Bilanzierung der totalen Energie oder Enthalpie zu formulieren. Ebenso finden

jedoch Entropie-, Temperatur oder Druckformulierungen Anwendung. Hier wird auf die Enthalpieform zurückgegriffen:

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i h)}{\partial x_i} = \frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i}. \quad (2.5)$$

Der Wärmestrom wird über das Fouriersche Wärmeleitungsgesetz beschrieben:

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}. \quad (2.6)$$

λ ist die thermische Leitfähigkeit und T die Temperatur. In dieser Formulierung wird der diffusive Wärmefluss aufgrund von Druck- und Konzentrationsgradienten vernachlässigt. Wie in den Arbeiten von Bellan [15] dargestellt, ist diese Annahme bei Strömungen, in denen thermodynamische Zustände nahe am kritischen Punkt erreicht werden, nicht hinreichend erfüllt. Sie schlägt die Verwendung der Fluktuationstheorie von Keizer [102] zur genaueren Berechnung der diffusiven Flüsse vor. Diese wurde beispielsweise von Okong'o *et al.* [160, 159] zur Untersuchung transitioneller Mischungsschichten verwendet.

Eine weitere Vereinfachung in Gleichung 2.5 stellt die Vernachlässigung der viskosen Arbeit dar. Deren Einfluss beschränkt sich auf Strömungen, in denen hohe Mach-Zahlen erreicht werden. Die hier betrachteten Strömungen sind jedoch nur schwach kompressibel und in keiner der betrachteten Anwendungen werden Mach-Zahlen erreicht, die größer als $Ma = 0.2$ sind.

Zur Berechnung der Wärme- und Stofftransportgrößen λ und μ sind oftmals einfache Modelle ausreichend, da deren Abhängigkeit vom thermodynamischen Zustand des Fluids bei atmosphärischen Bedingungen nur schwach nichtlinear ist. So wird beispielsweise oft auf das Modell von Sutherland [216] zurückgegriffen, bei dem die Druckabhängigkeit vernachlässigt und die Temperaturabhängigkeit über eine empirische Potenzfunktion angepasst wird. In den hier untersuchten Realgasströmungen, insbesondere bei transkritischen Bedingungen, sind die Transporteigenschaften jedoch stark nichtlineare Funktionen von Druck und Temperatur und es müssen komplexere Modelle verwendet werden. Daher wird hier das empirische Modell von Chung *et al.* [31] verwendet, welches das Verhalten in der Nähe des kritischen Zustands realistisch abbildet. Details finden sich in Kapitel 3.4.

Speziestransport

In reagierenden Strömungen reicht es nicht die Eigenschaften des Stoffgemischs zu kennen, um deren zeitliche Entwicklung zu beschreiben. Auch die Zusammensetzung, also die Konzentration der einzelnen Spezies, muss bekannt sein. In der vorliegenden Arbeit werden, wenn nicht explizit anders benannt, Massenbrüche verwendet, um die Zusammensetzung eines Gemischs zu beschreiben:

$$Y_k = \frac{m_k}{m}. \quad (2.7)$$

m_k und m bezeichnen jeweils die anteilige Masse der Spezies k und die Gesamtmasse im betrachteten Kontrollvolumen. Per Definition addieren sich die Massenbrüche aller Spezies in einem Stoffgemisch zu Eins.

Die Transportgleichung für die Massenbrüche in einem Gemisch mit k Komponenten kann ausgedrückt werden als

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i Y_k)}{\partial x_i} = -\frac{\partial J_{ik}}{\partial x_i} + \dot{\omega}_k. \quad (2.8)$$

Dabei bezeichnet J_{ik} den diffusiven Massenstrom, der hier über das Fick'sche Diffusionsgesetz mit dem Massenbruchgradienten verknüpft wird:

$$J_{ik} = -D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}. \quad (2.9)$$

Hierbei wird isotrope Diffusion angenommen. Weiterhin wird, analog zu den Annahmen, die zur Berechnung des diffusiven Wärmeflusses getroffen wurden, der Massenstrom aufgrund von Druck- und Temperaturgradienten vernachlässigt. Es sei wiederum darauf hingewiesen, dass diese Vereinfachung bei Anwendungen, in denen thermodynamische Zustände in der Nähe des kritischen Punkts erreicht werden, zu Abweichungen bei der Berechnung des diffusiven Massenstroms führen kann.

Der Diffusionskoeffizient D_k kann auch als Funktion der dimensionslosen Lewis-Zahl

$$Le_k = \frac{\lambda}{\rho c_p D_k} \quad (2.10)$$

ausgedrückt werden, welche das Verhältnis von Wärmeleitung zu Diffusion angibt. c_p ist dabei die isobare Wärmekapazität. In der vorliegenden Arbeit wird davon ausgegangen, dass die Lewis-Zahl aller Spezies Eins ist ($Le_k = 1$). Das ist gerade in Strömungen, in denen Spezies stark unterschiedlicher molarer Masse auftreten, eine Annahme, die sorgsam überprüft werden muss.

Der Speziesquellterm $\dot{\omega}_k$ in Gleichung 2.8 kann über die Lösung eines kinetischen Reaktionsmechanismus berechnet werden. Kapitel 4.2 beschäftigt sich ausführlicher mit diesem Thema.

2.2 Large Eddy Simulation

Turbulente Strömungen sind generell zeitabhängig, dreidimensional und chaotisch [58]. Trotzdem sind sie durch die Navier-Stokes-Gleichungen in Verbindung mit einer thermodynamischen Zustandsgleichung in der Form $p = f(T, \rho)$ und $h = f(T, \rho)$ im Rahmen der vorweg getroffenen Annahmen vollständig beschrieben. Eine allgemeingültige, analytische Lösung wurde jedoch noch nicht gefunden, weswegen sie meist mit Hilfe numerischer Methoden beschrieben werden. So können die Erhaltungsgleichungen unter Verwendung des Finite-Volumen-Verfahrens diskretisiert und mit geeigneten Randbedingungen iterativ gelöst werden. Eine solche direkte Lösung der Erhaltungsgleichungen ist allerdings sehr rechenintensiv und derzeit nur für wenige Anwendungen realisierbar. Dies liegt insbesondere an der großen Bandbreite der auftretenden turbulenten Längen- und Zeitskalen bei technisch relevanten Bedingungen. Die größten auftretenden Wirbel werden gewöhnlich

durch die betrachtete Geometrie vorgegeben. Auf den kleinsten Wirbelskalen, der Kolmogorov Skala l_η , dissipiert Turbulenz. In der DNS werden alle Längenskalen aufgelöst, d.h. es werden Rechenzellen verwendet, die kleiner als l_η sind. Dies ist momentan und in absehbarer Zukunft für technisch relevante Applikationen aufgrund des hohen Rechenaufwands jedoch nicht umsetzbar. Dennoch ist die DNS eine, vor allem im Bereich der Forschung, verbreitete Methode, um grundlegende Erkenntnisse über das turbulente Strömungsverhalten zu gewinnen.

Eine andere Methode, welche weitaus geringere Anforderungen an die Gitterauflösung und damit an die Rechenleistung stellt, ist die RANS-Simulation. Hierbei werden nur zeitlich gemittelte Größen betrachtet und somit alle turbulenten Längenskalen modelliert. Dies ist numerisch effizient und mit der aktuell zur Verfügung stehenden Rechenkapazität können auch sehr komplexe Strömungen beschrieben werden.

Einen dritten Ansatz zur numerischen Beschreibung turbulenter Strömungen bietet die LES. Hier werden große, energiereiche Wirbel auf dem Rechengitter aufgelöst. Kleinere, energiearme Wirbel werden modelliert. Dies hat den Vorteil, dass transiente Strömungseffekte abgebildet werden und sich die Modellierung der kleinskaligen Wirbel im Vergleich zum RANS-Ansatz, wo alle Längenskalen modelliert werden, wesentlich einfacher gestaltet. Letzteres liegt vor allem daran, dass kleinskalige Turbulenz einen universelleren Charakter aufweist und die Interaktion mit den geometrischen Besonderheiten des Anwendungsfalls gering ist. Die LES hat also das Potential, bei im Vergleich zur DNS deutlich reduzierten Kosten und im Vergleich zur RANS geringerer Modellabhängigkeit, transiente Strömungsinformationen zu liefern. Keinesfalls ist die LES jedoch als ohne Einschränkung überlegen anzusehen. So ergeben sich neue Probleme aus der wichtigen Rolle der numerischen Diskretisierungsmethoden, der Gitterabhängigkeit oder der Notwendigkeit transienter Randbedingungen. Eine Zusammenfassung konzeptioneller Schwierigkeiten der LES findet sich beispielsweise bei Pope [188]. Des Weiteren ist der numerische Aufwand deutlich höher als bei RANS Simulationen und auch bei Verwendung moderner Superrechner für viele industrielle Anwendungen zu hoch.

2.2.1 Die isotrope Turbulenz

Zum besseren Verständnis der LES, ist es hilfreich den Spezialfall der isotropen Turbulenz zu betrachten. Dieser zeichnet sich dadurch aus, dass alle statistischen Größen richtungsunabhängig und deren Gradienten daher null sind. Es findet daher im Mittel kein Energieaustausch zwischen der mittleren Strömung und den turbulenten Fluktuationen statt, was eine isolierte Betrachtung des Energieaustauschs zwischen den verschiedenen turbulenten Skalen ermöglicht. Hierzu ist es sinnvoll, die Strömungsgrößen im Frequenzbereich darzustellen. Nach einer Fourier-Transformation, können die Geschwindigkeitsfluktuationen dann anhand ihrer Wellenzahlen k Wirbeln unterschiedlicher charakteristischer Längenskalen l zugeordnet werden:

$$k = 2\pi/l. \quad (2.11)$$

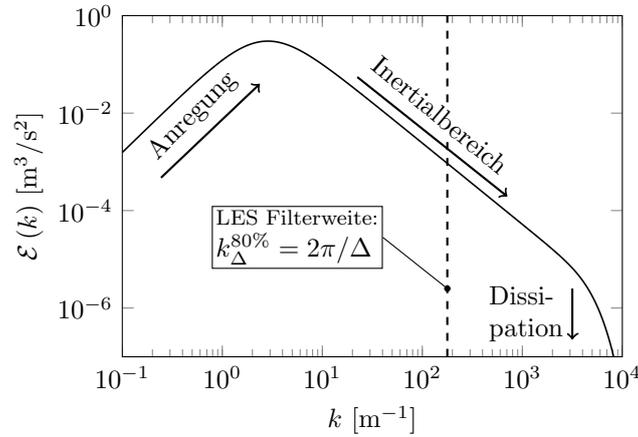


Abbildung 2.1: Energiespektrum der isotropen Turbulenz.

Jeder Wellenzahl kann dann eine Energie in der Form $\mathcal{E}(k)$ zugeordnet werden, deren Summe die turbulente kinetische Energie ergibt:

$$K = \sum_k \mathcal{E}(k). \quad (2.12)$$

Das in Abb. 2.1 gezeigte Energiespektrum $\mathcal{E}(k)$ der isotropen Turbulenz wurde nach der bei Pope [186] beschriebenen Modellierung für die Reynolds-Zahl $Re = \sqrt{K}L/\eta = 10^4$ berechnet. Dabei ist L die charakteristische Länge der größten turbulenten Skalen und η die kinematische Viskosität des Fluids.

Das turbulente Energiespektrum lässt sich nach den dominierenden physikalischen Effekten in drei Bereiche unterteilen. Auf den großen Skalen (hier $k < 3 \text{ m}^{-1}$) dominiert die Anfachung der Turbulenz. Diese wird im Wesentlichen durch Scherung des mittleren Strömungsfeldes generiert, welche in technischen Anwendungen meist durch die Randbedingungen, z.B. bei der Freistahlströmung, oder durch die Geometrie, z.B. bei der Strömung über eine rückwärtsgewandte Stufe, aufgeprägt werden. In diesem Bereich spielt die Dissipation turbulenter Energie keine Rolle. Im Inertialbereich hingegen (hier $3 \text{ m}^{-1} < k < 10^3 \text{ m}^{-1}$) entspricht die Dissipation der Anfachung. Wirbel einer gewissen Wellenzahl nehmen dann genauso viel Energie von größeren Wirbeln auf, wie sie an kleinere Wirbel abgeben. Dieser Mechanismus wird auch als Kolmogorovsche Energiekaskade bezeichnet. Die Energie ist in diesem Bereich nur von der Wellenzahl und der Dissipationsrate ε abhängig:

$$\mathcal{E}(k) = C_k \varepsilon^{2/3} k^{-5/3}. \quad (2.13)$$

C_k bezeichnet die Kolmogorov-Konstante welche den Wert 1.5 annimmt. Bei noch kleineren Längenskalen (hier $k > 10^3 \text{ m}^{-1}$) dominiert die Dissipation und das Energiespektrum klingt ab. Die kleinste auftretende Längenskala wird als Kolmogorov-Länge bezeichnet und ist von der Viskosität η sowie der Dissipationsrate ε abhängig:

$$l_\eta = \left(\frac{\eta^3}{\varepsilon} \right)^{1/4}. \quad (2.14)$$

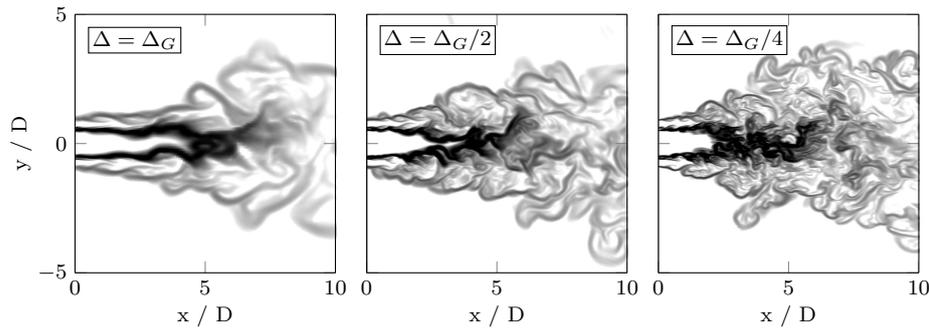


Abbildung 2.2: Einfluss der Filterweite auf die aufgelöste Turbulenz.

Bei der zuvor beschriebenen Methode der DNS müssen diese kleinsten Skalen der Turbulenz aufgelöst werden. Daraus leitet sich ab, dass die Größe der finiten Volumen, die in der Strömungssimulation verwendet werden, kleiner sein muss als die Kolmogorov-Länge. In dem Zusammenhang ist anzumerken, dass die Form des Energiespektrums und auch die Kolmogorov-Länge stark von der turbulenten Reynolds-Zahl abhängt. So gilt für die isotrope Turbulenz der Zusammenhang:

$$\frac{L}{l_\eta} = Re_t^{3/4}. \quad (2.15)$$

Daraus ergibt sich ein direkter Zusammenhang zwischen benötigter Gitterauflösung in der DNS und der turbulenten Reynolds-Zahl. Wie später gezeigt wird gilt dieser Zusammenhang nicht für die LES. Eine ausführlichere Darstellung der Theorie isotroper Turbulenz findet sich in den Büchern von Fröhlich [58] oder Batchelor [14]. Insbesondere sei darauf hingewiesen, dass die hergeleiteten Zusammenhänge nur im Rahmen der getroffenen Annahmen gelten und nicht ohne Weiteres auf anisotrope Strömungen übertragen werden können.

2.2.2 Grundidee der Large Eddy Simulation

Auch wenn die Erkenntnisse aus der Betrachtung der isotropen Turbulenz nicht direkt auf beliebige turbulente Strömungen übertragen werden können, so bleibt festzuhalten, dass Turbulenz ein Mehrskalenproblem ist. Die turbulenten Strukturen weisen also je nach ihrer charakteristischen Länge unterschiedliche Eigenschaften auf. So sind die großen Wirbel in der Regel geometrie- bzw. randbedingungsabhängig, energiereich, diffusiv und anisotrop, wohingegen die kleinsten Wirbel energiearm, dissipativ und isotrop sind. Des Weiteren geht die Energie im Inertial- und Dissipationsbereich im statistischen Mittel gerichtet von den großen auf die kleinen Skalen über. Diese Eigenschaften des turbulenten Energiespektrums werden in der LES ausgenutzt, indem die großen Wirbel explizit berechnet, also auf dem Rechengitter aufgelöst, werden, während die kleineren Wirbel modelliert werden. Dieses Prinzip der Skalentrennung hat den Vorteil, dass sich die Modellierung der kleinskaligen Turbulenz einfach gestaltet, da sie einen universellen Charakter hat, sie also nicht von den Besonderheiten der untersuchten Strömung abhängt. In der

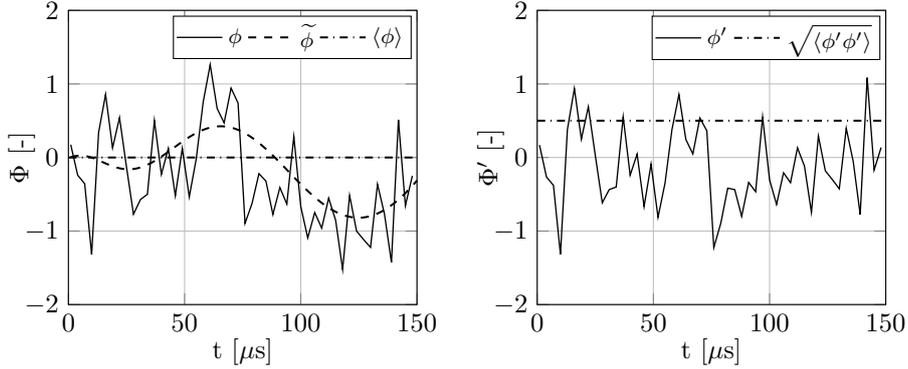


Abbildung 2.3: Links: Ungefilterter, gefilterter und gemittelter Wert eines Skalars. Rechts: Zugehörige SGS-Fluktuation und gemittelte SGS-Fluktuation.

vorliegenden Arbeit werden hierfür zwei sogenannte Feinstrukturmodelle verwendet, welche im Kapitel 2.2.5 diskutiert werden.

Ein viel diskutierter Punkt ist die Wahl der Wellenzahl, bei der die Skalentrennung vorgenommen wird. Diese ist in Strömungssimulationen in der Regel an die Gitterauflösung geknüpft ($k_\Delta = 2\pi/\Delta$), da nur Wirbel aufgelöst werden können, deren charakteristische Länge größer als die lokale Gitterweite Δ ist. Ein Anhaltspunkt für die Wahl der Gitterweite ist das Kriterium, 80% der turbulenten kinetischen Energie aufzulösen. Die zugehörige Grenzwellenzahl $k_\Delta^{80\%}$ erfüllt also das Kriterium

$$\sum_{k=0}^{k=k_\Delta^{80\%}} \mathcal{E}(k) = 0.8K. \quad (2.16)$$

In Abbildung 2.1 ist $k_\Delta^{80\%}$ für das im vorigen Kapitel betrachtete Energiespektrum dargestellt. In aller Regel ist das Energiespektrum allerdings a-priori unbekannt, weswegen das Kriterium in der Praxis nur a-posteriori zur Verifizierung des Rechengitters angewendet werden kann. Löst man in der Strömungssimulation wesentlich weniger turbulente kinetische Energie auf, steigt der Anteil der zu modellierenden Turbulenz und auch die Anisotropie der unaufgelösten Wirbel. Es werden dann bessere Feinstrukturmodelle benötigt, um die statistischen Größen trotz der geringen Auflösung richtig zu berechnen. Löst man in der Simulation mehr turbulente kinetische Energie auf, strebt die LES im Grenzfall $k_\Delta \rightarrow 2\pi/l_\eta$ zur DNS-Lösung. Abbildung 2.2 zeigt den Einfluss der Filterweite auf eine Strömungssimulation. Man erkennt deutlich, dass bei Reduzierung der Filterweite kleinskaligere Wirbel aufgelöst werden. Es ist weiterhin bemerkenswert, dass der zuvor beobachtete Zusammenhang der Kolmogorov-Länge l_η und der Reynolds-Zahl (siehe Gl. 2.15) nicht für die Wellenzahl $k_\Delta^{80\%}$ gilt. Es kann sogar gezeigt werden, dass $k_\Delta^{80\%}$ für $Re \rightarrow \infty$ gegen einen Grenzwert strebt und die Kosten der LES damit wesentlich weniger stark von der Reynolds-Zahl abhängen als bei der DNS [58].

2.2.3 Filterung

Um das Prinzip der Skalentrennung anzuwenden, ist es erforderlich, die berechneten Größen räumlich zu filtern. Nach Leonard [122] können die gefilterten Größen über ein Faltungsintegral mit dem Filter \mathcal{G} berechnet werden:

$$\bar{\phi}(x) = \int_V \mathcal{G}(x - x') \phi(x') dx'. \quad (2.17)$$

Hierbei repräsentiert $\bar{\phi}$ und ϕ eine gefilterte und ungefilterte Größe an der Position x . Der Übersichtlichkeit halber wird hier eine eindimensionale Notation verwendet. Für alle in der vorliegenden Arbeit durchgeführten Simulationen wird ein Rechteckfilter verwendet:

$$\mathcal{G}(x - x') = \begin{cases} 1/\Delta & ; |x - x'| < \Delta/2 \\ 0 & ; \text{sonst} \end{cases}. \quad (2.18)$$

Dabei ist Δ die gewählte Filterweite. In der vorliegenden Arbeit wird diese durch das verwendete Rechengitter vorgegeben.

In kompressiblen Strömungen ist es außerdem von Vorteil, dichtegewichtete Größen zu betrachten:

$$\tilde{\phi} = \frac{\rho \bar{\phi}}{\bar{\rho}}. \quad (2.19)$$

Durch die Favre-Filterung lassen sich zusätzliche unaufgelöste Terme in den gefilterten Erhaltungsgleichungen vermeiden (siehe Kap. 2.2.4). Hierbei ist $\tilde{\phi}$ die Favre-gefilterte Größe. Mit dieser Definition lassen sich die Skalare und Vektorkomponenten im Strömungsfeld in einen gefilterten und einen SGS- oder Fluktuationsanteil zerlegen:

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'. \quad (2.20)$$

Der gefilterte Anteil beschreibt die Strömung auf den aufgelösten Skalen, deckt also alle Längenskalen ab, die größer als die gewählte Filterweite Δ sind. Abbildung 2.3 zeigt den Zusammenhang der eingeführten Größen für ein turbulentes, homogenes Strömungsfeld. Die mathematischen Eigenschaften des Filteroperators sowie weitere explizite Filterfunktionen sind bei Fröhlich [58] diskutiert. In dem Buch von Garnier [61] wird vertieft auf das Konzept der impliziten Filterung eingegangen, welches hier nicht näher erläutert wird.

2.2.4 Die gefilterten Erhaltungsgleichungen

In einer LES werden nur die gefilterten Größen direkt berechnet, wohingegen alle SGS-Größen modelliert werden. Durch Anwendung des oben beschriebenen Filters können die Erhaltungsgleichungen für die gefilterten Größen aus den Navier-Stokes-Gleichungen (siehe Kap. 2.1) hergeleitet werden.

Massenerhaltung:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.21)$$

Impulserhaltung:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}^{sgs}}{\partial x_j} \quad (2.22)$$

Speziestransport:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k)}{\partial x_i} = -\frac{\partial \bar{J}_{ik}}{\partial x_i} - \frac{\partial J_{ik}^{sgs}}{\partial x_i} + \bar{\omega}_k, \quad (2.23)$$

Energieerhaltung:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h})}{\partial x_i} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \tilde{u}_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial x_i} - \frac{\partial q_i^{sgs}}{\partial x_i} \quad (2.24)$$

Durch Anwendung des Filters (Gl. 2.17) entstehen im Vergleich zu den ungefilterten Gleichungen zusätzliche Terme, in denen sich der Einfluss der kleinskaligen Turbulenz auf die gefilterten Größen widerspiegelt. So finden sich in der gefilterten Momentengleichung der turbulente Scherspannungstensor

$$\tau_{ij}^{sgs} = \bar{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j), \quad (2.25)$$

in der Speziestransportgleichung der turbulente Fluss der betrachteten Spezies

$$J_{ik}^{sgs} = \bar{\rho}(\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) \quad (2.26)$$

und in der Energieerhaltung der turbulente Wärmestrom

$$q_i^{sgs} = \bar{\rho}(\widetilde{u_i h} - \tilde{u}_i \tilde{h}). \quad (2.27)$$

All diese zusätzlichen Terme müssen über ein geeignetes Feinstrukturmodell berechnet werden. Zwei werden im folgenden Kapitel 2.2.5 vorgestellt.

Eine weitere unbekannte Größe in der Speziestransportgleichung ist der gefilterte chemische Quellterm $\bar{\omega}_k$. Dessen Modellierung stellt eine große Herausforderung dar, weil er stark von der nichtlinearen Interaktion zwischen unaufgelöster Turbulenz und chemischen Zeit- und Längenskalen abhängt. Die Modellierung von $\bar{\omega}_k$ wird in Kapitel 4.3 näher thematisiert.

Des Weiteren sei angemerkt, dass die Filterung der Erhaltungsgleichungen weitere unaufgelöste Terme zur Folge hat, welche in den Gleichungen 2.21 - 2.24 vernachlässigt und nicht explizit aufgeführt sind, z.B. die SGS-Druckdilataion. Deren Einfluss ist jedoch meist vernachlässigbar, weswegen die gefilterten Gleichungen in der vorliegenden Form gängig sind. Selle et al. [204] weisen allerdings darauf hin, dass bei thermodynamischen Zuständen in der Nähe des kritischen Punkts aufgrund der starken Nichtlinearität in der Zustandsgleichung, die Differenz zwischen dem gefilterten Druck und dem Druck, der aus den gefilterten Größen mittels einer Zustandsgleichung berechnet werden kann, berücksichtigt werden sollte. Bei weiterhin starker Nichtlinearität der Transporteigenschaften kann außerdem die Differenz zwischen gefiltertem Wärmestrom und dem Wärmestrom, der aus den gefilterten Größen berechnet werden kann, eine wichtige Rolle spielen. Modelle für diese beiden Größen wurden in den Arbeiten von Taşkınoğlu und Bellan vorgeschlagen [218, 219]. In der vorliegenden Arbeit werden diese Korrekturen allerdings nicht verwendet.

2.2.5 Feinstrukturmodellierung

Die bei der Filterung entstandenen ungeschlossenen Terme (Gln. 2.25 - 2.27) bedürfen eines geeigneten Feinstrukturmodells. Dieses muss in geeigneter Weise den Einfluss der kleinskaligen Turbulenz auf die gefilterten Größen wiedergeben. Hierbei ist zu beachten, dass, wie in Kapitel 2.2.1 diskutiert, die Turbulenz in diesem Wellenzahlenbereich als nahezu isotrop angesehen werden kann und daher relativ einfache Modellierungen ausreichend sind. Das Modell ist im Wesentlichen für die korrekte Darstellung der Dissipation turbulenter Energie verantwortlich. Im Laufe der letzten Jahrzehnte wurden hierfür eine große Bandbreite an Methoden diskutiert. Eine Übersicht findet sich in den schon genannten Büchern von Fröhlich [58] und Pope [186]. In der vorliegenden Arbeit werden zwei Feinstrukturmodelle benutzt, welche beide zur Klasse der Wirbelviskositätsmodelle gehören. Diese basieren auf der Boussinesq-Approximation, wonach der turbulente Scherspannungstensor eine Funktion der Wirbelviskosität μ_{sgs} ist:

$$\tau_{ij}^{sgs} = -2\mu_{sgs} \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right). \quad (2.28)$$

Nach Einführung der turbulenten Schmidt- und Prandtl-Zahl kann auch der turbulente Massen- und Wärmefluss berechnet werden:

$$J_{ik}^{sgs} = -\frac{\mu_{sgs}}{Sc_{k,sgs}} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i}, \quad (2.29)$$

$$q_i^{sgs} = -c_p \frac{\mu_{sgs}}{Pr_{sgs}} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i}. \quad (2.30)$$

Falls nicht explizit abweichend notiert, wird hier angenommen, dass sowohl die turbulente Schmidt- als auch die turbulente Prandtl-Zahl den konstanten Wert Eins annehmen ($Pr_{sgs} = Sc_{k,sgs} = 1$). Dies ist eine gängige Annahme, auch wenn Experimente und direkte numerische Simulationen für die Prandtl-Zahl teils stark abweichende Werte im Bereich von $Pr_{sgs} = 0.35$ bis $Pr_{sgs} = 4$ nahe legen. In besonderen Fällen kann die turbulente Prandtl-Zahl sogar negative Werte annehmen [191].

Bei Verwendung einer konstanten Schmidt- und Prandtl-Zahl reduziert sich der Modellierungsaufwand auf eine geeignete Funktion für μ_{sgs} . Für die vorliegenden Simulationen wird das Modell von Smagorinsky [211] und das Modell von Vreman [228] verwendet.

Das Smagorinsky-Modell

Immer noch weit verbreitet, ist das schon 1963 eingeführte Feinstrukturmodell von Smagorinsky [211]. Anhand einer Dimensionsanalyse ergibt sich, dass die Wirbelviskosität proportional zum Produkt der SGS-Längen- und Geschwindigkeitsskala ist. Smagorinsky schlägt hier die Filterweite sowie den normierten Scherspannungstensor vor:

$$\mu_{sgs} = \bar{\rho} (C_S \Delta)^2 \sqrt{2 \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij}}. \quad (2.31)$$

Unter der Annahme des lokalen Gleichgewichts zwischen Produktion und Dissipation auf den feinen Skalen leitet Lilly [123] den Wert 0.185 für die Modellkonstante C_S her. In der Literatur finden sich allerdings auch abweichende Werte im Bereich von 0.1 für Scherströmungen bis hin zu 0.24 für a-posteriori-Vergleiche abklingender isotroper Turbulenz [58]. In der vorliegenden Arbeit wird der Wert $C_S = 0.17$ verwendet.

Das Vreman-Modell

Die Annahme des Gleichgewichts zwischen turbulenter Produktion und Dissipation ist nur bei genügend hohen Reynolds-Zahlen bzw. voll turbulenten Strömungen hinreichend erfüllt. Dies ist insbesondere in wandnahen Strömungen aber auch in laminaren und transitionellen Scherschichten nicht der Fall. Daher ergibt sich mit dem Smagorinsky-Modell in solchen Strömungen eine zu hohe Wirbelviskosität, was eine unphysikalisch hohe Dissipation zur Folge hat. Ein Modell, welches ähnlich kompakt ist, sich aber in laminaren Strömungen ausschaltet und auch in transitionellen Strömungen gute Ergebnisse liefert wurde von Vreman [228] vorgeschlagen:

$$\mu_{sgs} = \bar{\rho} C_V \sqrt{\frac{B_\beta}{\alpha_{ij}\alpha_{ij}}}, \quad (2.32)$$

mit

$$B_\beta = \beta_{11}\beta_{22} + \beta_{11}\beta_{33} + \beta_{22}\beta_{33} - \beta_{12}^2 - \beta_{13}^2 - \beta_{23}^2, \quad (2.33a)$$

$$\beta_{ij} = \Delta^2 \alpha_{ki} \alpha_{kj}, \quad (2.33b)$$

$$\alpha_{ij} = \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i}. \quad (2.33c)$$

Ähnlich wie bei der Herleitung von C_S kann die isotrope Turbulenz zur Bestimmung der Modellkonstante verwendet werden. Es ergibt sich $C_V = 0.07$.

2.2.6 Mittelung

Zur Auswertung turbulenter Strömungen ist es meist erforderlich, statistische Größen zu berechnen. Die Statistik der ersten Momente eines Skalars oder einer Vektorkomponente können dabei wie folgt berechnet werden:

$$\langle \phi \rangle = \frac{1}{\mathcal{T}} \int_{t=0}^{\mathcal{T}} \tilde{\phi}(t) dt. \quad (2.34)$$

Die zweiten Momente berechnen sich wie folgt:

$$\langle \phi' \phi' \rangle = \frac{1}{\mathcal{T}} \int_{t=0}^{\mathcal{T}} \left(\langle \phi \rangle - \tilde{\phi}(t) \right)^2 dt. \quad (2.35)$$

Das Zeitintervall für die Mittelung entspricht in der LES der Simulationszeit nach dem Abklingen der Artefakte aus der Strömungsinitialisierung. Es ist in aller Regel

durch die verfügbare Rechenzeit limitiert, muss jedoch so gewählt sein, dass sich die gemittelten Größen bei einer weiteren Mittelung nicht mehr wesentlich ändern:

$$\frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial t} \approx \frac{\partial \langle \phi' \phi' \rangle}{\partial t} \approx 0. \quad (2.36)$$

Kapitel 3

Thermodynamik realer Fluide

Zur Schließung der gefilterten Navier-Stokes Gleichungen (Gln. 2.21 - 2.24) müssen die thermodynamischen Zustandsgrößen anhand der Erhaltungsgrößen berechnet werden. Hierzu wird eine geeignete thermodynamische Zustandsgleichung benötigt. In vielen numerischen Anwendungen wird diesem Aspekt nicht viel Aufmerksamkeit gewidmet, da oft sehr einfache Formulierungen ausreichen, um Zustandsänderungen zu beschreiben. Bei niedrigen Drücken ist das ideale Gasgesetz ausreichend, bei inkompressiblen Strömungen können Änderungen des thermodynamischen Zustands teilweise komplett vernachlässigt werden. In Raketenbrennkammern und anderen kryogenen Hochdruckanwendungen ist eine genaue thermodynamische Modellierung jedoch ein ganz wesentlicher Bestandteil der Simulation, da hier, insbesondere in der Nähe des kritischen Punkts, die Kopplung der Zustandsgrößen stark nichtlinear ist. Eine Übersicht über die relevanten physikalischen Effekte und verschiedene Modellierungsansätze finden sich in den Büchern von Elliott und Lira [49], Lüdecke und Lüdecke [125] oder Poling et al. [183]. Im Folgenden beschränkt sich die Darstellung auf die in der vorliegenden Arbeit verwendete Modellierung.

3.1 Abgrenzung thermodynamischer Bereiche

Bei der Verbrennung in Raketen wird der Treibstoff oft bei kalten Temperaturen, Sauerstoff typischerweise bei 80 K, eingespritzt. Durch die Mischung mit dem warmen Fluid in der Brennkammer und durch die Wärmefreisetzung in der Flamme erwärmt sich der Treibstoff. Dabei werden je nach Einspritzbedingungen verschiedene thermodynamische Bereiche durchlaufen. Bei überkritischen Drücken gibt es allerdings in der Literatur keinen einheitlichen Standard für deren Abgrenzung zueinander und für deren Benennung [11, 15]. Im Folgenden werden daher die in dieser Arbeit verwendeten Definitionen erläutert.

Bei Drücken unterhalb des kritischen Drucks durchläuft eine Flüssigkeit beim Erwärmen klar voneinander getrennte Bereiche, deren Abgrenzung unstrittig ist. So erwärmt sich eine Flüssigkeit bei Energiezufuhr bis zum Erreichen der Siedetemperatur. Bei weiterer Energiezufuhr bilden sich Dampfblasen und es entsteht

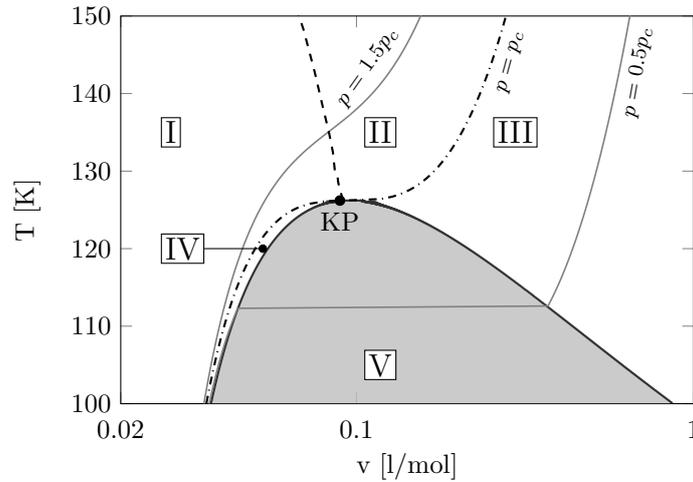


Abbildung 3.1: v - T -Zustandsdiagramm für N_2 . Die Bereiche transkritisch (I), überkritisch (II), gasförmig (III), flüssig (IV) und Nassdampfgebiet (V) sind durch Phasengrenze (—), Widom-Linie (---) und kritische Isobare (----) voneinander getrennt.

ein Gemisch zweier Phasen. Die Phasen sind durch eine scharfe Oberfläche, die sich aufgrund der Oberflächenspannung in der Flüssigphase bildet, voneinander getrennt. Bei fortschreitender Verdampfung expandiert der sogenannte Nassdampf bei konstantem Druck und konstanter Temperatur. Nachdem die zur Verdampfung notwendige Energiemenge (Verdampfungswärme) zugeführt wurde, liegt das Fluid gasförmig vor und kann durch weitere Energiezufuhr erwärmt werden. Der Prozess ist in Abbildung 3.1 dargestellt (Isobare bei $p = 0.5p_c$). Die durchlaufenen Zustände flüssig (IV), Nassdampf (V) und gasförmig (III) sind durch die Siede- und Taulinie voneinander getrennt.

Im kritischen Punkt (KP) laufen Siede- und Taulinie zusammen und sowohl die Oberflächenspannung als auch die Verdampfungswärme sind null. Bei überkritischen Drücken kann daher nicht mehr zwischen Flüssigkeit und Gas unterschieden werden und die Erwärmung verläuft kontinuierlich und homogen. Dennoch kann auch bei Drücken oberhalb von p_c eine Unterteilung vorgenommen werden. So führten Simeoni et al. [208] und Gorelli et al. [65] Dispersionsmessungen bei überkritischen Drücken durch und konnten einen scharfen Übergang von Bereichen hoher zu Bereichen niedriger oder verschwindender Dispersion nachweisen. Die Grenze bestätigt bei moderat überkritischen Drücken die Widom-Linie, welche als Verlängerung der Siede- und Taulinie ins Überkritische entlang maximaler isobarer Wärmekapazitäten beschrieben werden kann [230]. Die beiden durch die Widom-Linie getrennten Zustände werden von Simeoni et al. [208] im Englischen als *gas-like* und *liquid-like* beschrieben. Im Bereich der Strömungssimulation ist es jedoch üblicher, die Bereiche als transkritisch und überkritisch zu bezeichnen [24, 166], was in der vorliegenden Arbeit übernommen wird. Des Weiteren wird der Übergang vom transkritischen in den überkritischen Bereich häufig als Pseudo-Sieden und die zugehörige Temperatur als Pseudo-Siedetemperatur $T_{pb}(p)$ bezeichnet [166, 26].

Für die Anwendung relevanter als die Änderung der Dispersion ist die starke Änderung der thermodynamischen Zustandsgrößen beim Überschreiten der Widom-Linie. Ähnlich wie der unterkritische Phasenübergang von flüssig zu gasförmig, ist die Transition von transkritisch zu überkritisch durch einen starken Abfall der Dichte und der Transportgrößen Viskosität und thermische Leitfähigkeit gekennzeichnet. Der Übergang ist allerdings kontinuierlich. Wird ein Fluid transkritisch in die Brennkammer eingespritzt und überschreitet bei der Erwärmung die Widom-Linie wird im Folgenden von transkritischer Einspritzung oder Mischung gesprochen.

3.2 Reinstoffthermodynamik

Der thermodynamische Zustand eines Systems wird durch Zustandsgrößen wie der Temperatur T , dem Druck p oder dem Volumen v beschrieben. Diese sind durch Zustandsgleichungen miteinander verknüpft. So besitzt ein homogenes System, in dem nur ein Stoff vorkommt, zwei äußere Freiheitsgrade. Der thermodynamische Zustand ist also bei Kenntnis zweier intensiver Zustandsgrößen vollständig bestimmt und alle anderen intensiven Zustandsgrößen können berechnet werden. Zur Bestimmung der extensiven Zustandsgrößen wird zusätzlich noch eine Aussage über die Größe des Systems, beispielsweise die Masse, benötigt. Bei Zustandsgleichungen unterscheidet man zwischen der thermischen Zustandsgleichung, die die Verknüpfung der Zustandsgrößen Temperatur, Druck und molarem Volumen beschreibt, und der kalorischen Zustandsgleichung, die eine energetische Zustandsgröße, wie etwa molare Enthalpie h oder innere Energie e , mit zwei thermischen Zustandsgrößen verknüpft.

3.2.1 Die thermische Zustandsgleichung

In vielen technischen Anwendungen ist es ausreichend, den thermodynamischen Zustand eines Gases durch das ideale Gasgesetz

$$pv = \mathcal{R}T \quad (3.1)$$

zu beschreiben. Die Verknüpfung der thermischen Zustandsgrößen erfolgt dann einzig über die universelle Gaskonstante $\mathcal{R} = 8.3144 \text{ J}/(\text{mol K})$. Das ideale Gasgesetz basiert auf der Annahme, dass die Moleküle in einem System keine Kräfte aufeinander auswirken und sich frei im Raum bewegen können. Des Weiteren nehmen die Moleküle keinen Raum ein, sind also als punktförmig anzusehen. In der Realität existiert ein solches ideales Gas nicht, dennoch ist der durch Gleichung 3.1 beschriebene einfache Zusammenhang bei niedrigen Drücken eine gute Näherung für Gase.

Wie stark der tatsächliche thermodynamische Zustand vom idealen Gasgesetz abweicht, lässt sich durch die Berechnung des Kompressibilitätsfaktors

$$Z = \frac{pv}{\mathcal{R}T} \quad (3.2)$$

zeigen. Verhält sich das betrachtete Fluid wie ein ideales Gas gilt $Z = 1$. Der tatsächliche Wert kann allerdings stark von eins abweichen. So wird beispielsweise für Stickstoff am kritischen Punkt der Wert $Z_c = 0.289$ gemessen. Der Unterschied ist damit zu erklären, dass die Moleküle bei hohen Drücken verstärkt miteinander in Wechselwirkung treten. Um auch dann eine hinreichend genaue Beschreibung des thermodynamischen Zustands zu erhalten, müssen die auftretenden Kräfte zwischen den Molekülen sowie deren Eigenvolumen in der Zustandsgleichung berücksichtigt werden.

Es gibt eine Vielzahl thermischer Zustandsgleichungen, die je nach Grad der Vereinfachung teils sehr komplexe Formen annehmen können. Eine Sammlung findet sich beispielsweise bei Sengers et al. [205]. In Simulationen ist die Genauigkeit der Modellierung allerdings ebenso wichtig wie die numerische Effizienz. Einen guten Kompromiss stellt die Klasse der kubischen Zustandsgleichungen dar. Diese basieren auf dem Prinzip der korrespondierenden Zustände, das besagt, dass jedes Fluid nach geeigneter Normierung durch dieselbe Zustandsgleichung beschrieben werden kann. Als Referenzzustand für die Normierung wird der kritische Punkt verwendet, der durch den kritischen Druck p_c , der kritischen Temperatur T_c und dem kritischen Volumen v_c beschrieben ist. Die verwendeten Stoffwerte für alle in dieser Arbeit betrachteten Fluide sind in Anhang A aufgelistet.

Eine kubische Zustandsgleichung, die gerade in der Nähe des kritischen Punkts vergleichsweise gute Ergebnisse liefert, ist die Peng-Robinson Zustandsgleichung (PR-ZGL) [170]:

$$p = \frac{\mathcal{R}T}{v_{PR} - b} - \frac{a}{v_{PR}^2 + 2v_{PR}b - b^2}. \quad (3.3)$$

Sie enthält im Vergleich zum idealen Gasgesetz (Gl. 3.1) zwei zusätzliche Parameter. Durch die temperaturabhängige Funktion a werden intermolekulare Wechselwirkungen berücksichtigt, durch den Parameter b das Eigenvolumen der Moleküle:

$$a = 0.457 \frac{\mathcal{R}^2 T_c^2}{p_c} \left(1 + \kappa \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right)^2, \quad (3.4)$$

$$b = 0.0778 \frac{\mathcal{R}T_c}{p_c}. \quad (3.5)$$

Beide Funktionen sind empirisch und mit den kritischen Größen des beschriebenen Fluids normiert. Die Funktion $\kappa = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2$ berücksichtigt zusätzlich die Abweichung der Molekülform von der einer perfekten Kugel. ω ist der azentrische Faktor.

3.2.2 Volumenkorrekturmethode

Zur Bestimmung der beiden Parameter a und b (Gln. 3.4-3.5) in der PR-ZGL werden nur zwei kritische Größen verwendet, die kritische Temperatur und der kritische Druck. Das kritische Volumen wird nicht berücksichtigt. Der damit einhergehende Fehler lässt sich quantifizieren, wenn man den Kompressibilitätsfaktor (Gl. 3.2) am kritischen Punkt berechnet. Für Stickstoff ergibt sich beispielsweise der Wert

$Z_c^{PR} = 0.3074$, was im Vergleich zum experimentellen Ergebnis ($Z_c = 0.289$) immer noch eine deutliche Abweichung darstellt. Eine detaillierte Analyse kubischer Zustandsgleichungen finden sich bei Martin [128] oder Frey et al. [57].

Um die Genauigkeit kubischer Zustandsgleichungen zu erhöhen, schlug Martin [129] das Konzept der Volumenkorrektur vor. Die Grundidee ist es, den thermodynamischen Zustand auf der Volumenachse bei konstanter Temperatur und konstantem Druck um ein Inkrement v_{vk} zu verschieben. Somit kann die fehlende Berücksichtigung des kritischen Volumens teilweise kompensiert werden. Das korrigierte Volumen ergibt sich dann aus dem Anteil der kubischen Zustandsgleichung (hier PR-ZGL) und dem Volumeninkrement v_{vk} zu

$$v = v_{PR} + v_{vk}(T, v_{PR}). \quad (3.6)$$

v_{vk} ist im allgemeinsten Fall eine Funktion der Temperatur und des unkorrigierten molaren Volumens. v_{PR} kann durch die Lösung der PR-ZGL (Gl. 3.3) bestimmt werden.

Volumenkorrekturen können wie von Matheis et al. [131] vorgeschlagen, je nach Art der funktionalen Abhängigkeit in drei Kategorien unterteilt werden.

- Typ I: v_{vk} ist konstant.
- Typ II: v_{vk} ist temperaturabhängig ($v_{vk} = f(T)$).
- Typ III: v_{vk} ist temperatur- und volumenabhängig ($v_{vk} = f(T, v_{PR})$).

Eine Volumenkorrektur vom Typ I wurde beispielsweise von Pénélox [169] vorgeschlagen, Beispiele für den Typ II finden sich bei Ahlers und Gmehling [6], Lin und Duan [124] oder Baled et al. [10]. Temperatur- und volumenabhängige Volumenkorrekturen wurden von Chou und Prausnitz [29], Frey et al. [57], Harstad et al. [75] sowie Abudour et al. [5] entwickelt. Die beiden letzteren Korrekturen kommen in der vorliegenden Arbeit zum Einsatz und werden im Folgenden näher vorgestellt.

Harstad-Korrektur

Statt direkt eine Funktionsvorschrift für das Volumeninkrement v_{vk} zu entwickeln, die die thermische Zustandsgleichung korrigiert, schlagen Harstad et al. [75] eine Korrelation für den Referenzzustand der molaren Gibbs-Energie vor:

$$g^\circ = \mathcal{R}T_c \left(a_H + \frac{b_H}{2T_r} - c_H T_r \ln(T_r) + 2d_H \sqrt{T_r} + e_H T_r \right). \quad (3.7)$$

T_r ist die reduzierte Temperatur ($T_r = T/T_c$) und die Funktionen $a_H - e_H$ sind druckabhängige Polynome dritter Ordnung (siehe Anhang A). Die vorgeschlagene Funktion ist also sowohl druck- als auch temperaturabhängig und enthält 20 empirische Parameter, die an Referenzdaten angepasst werden müssen. Harstad et al. [75] schlagen Werte für einige technische relevante Stoffe vor, die in Anhang A angegeben sind. Von den hier verwendeten Stoffen stehen die Koeffizienten für die Stoffe CH_4 , O_2 , H_2 und N_2 zur Verfügung.

Das zur Berechnung des korrigierten molaren Volumens (Gl. 3.6) benötigte Volumeninkrement v_{vk} wird durch Ableitung des idealen Referenzzustands der Gibbs-Energie berechnet:

$$v_{vk} = \left. \frac{\partial g^\circ}{\partial p} \right|_T. \quad (3.8)$$

Diese Methode ist numerisch effizient und verbessert die Genauigkeit der PR-ZGL im transkritischen Bereich. Des Weiteren ist die Harstad-Korrektur thermodynamisch konsistent. Diese Eigenschaft wird in Abschnitt 3.2.3 noch genauer diskutiert. Nachteilig sind jedoch die große Anzahl an empirischen Parametern, die nur für eine geringe Anzahl an Spezies zur Verfügung stehen.

Abudour-Korrektur

Abudour et al. [5] schlagen eine verallgemeinerte Form der Volumenkorrekturmethode von Chou und Prausnitz [29] vor. Diese basiert auf der Einführung des dimensionslosen Abstands

$$d = - \frac{v_{PR}^2}{\mathcal{R}T_c} \left. \frac{\partial p}{\partial v_{PR}} \right|_T \quad (3.9)$$

zwischen dem kritischen Punkt und der durch den Fluidzustand laufenden Isothermen. Das Volumeninkrement lässt sich dann folgendermaßen berechnen:

$$v_{vk} = c + \delta_c \left(\frac{0.35}{0.35 + d} \right). \quad (3.10)$$

Die Funktion

$$\delta_c = \frac{\mathcal{R}T_c}{p_c} \left(Z_c^{PR} - Z_c \right) \quad (3.11)$$

ist proportional zum Fehler des mit der PR-ZGL berechneten kritischen Kompressibilitätsfaktors. Unabhängig von der betrachteten Spezies nimmt dieser den Wert $Z_c^{PR} = 0.3074$ an, wohingegen der tatsächliche Wert Z_c variieren kann. Die Funktion c ist folgendermaßen gegeben:

$$c = \frac{\mathcal{R}T_c}{p_c} \left(c_1 - (0.004 + c_1) e^{-2d} \right), \quad (3.12)$$

mit

$$c_1 = 0.4266Z_c - 0.1101. \quad (3.13)$$

Die Abudour-Korrektur enthält außer den kritischen Größen keine zusätzlichen stoffspezifischen Parameter und ist numerisch effizient. Ein Nachteil ist allerdings, dass die Abudour-Korrektur nicht thermodynamisch konsistent verwendet werden kann, was im folgenden Abschnitt näher beschrieben ist.

3.2.3 Die kalorische Zustandsgleichung

Um den thermodynamischen Zustand vollständig beschreiben zu können, wird zusätzlich zur thermischen eine kalorische Zustandsgleichung benötigt. Sie verknüpft die energetischen Zustandsgrößen, wie die molare innere Energie e , Enthalpie h oder Gibbs-Energie g , mit den thermischen Zustandsgrößen. Viele kalorische Zustandsgrößen sind relativ definiert und können in einen idealen Referenzzustand und einen druckabhängigen Korrekturteil zerlegt werden. Für Details sei auf die Bücher von Elliott und Lira [49] sowie von Poling et al. [183] verwiesen. Für die Enthalpie ergibt sich beispielsweise

$$h(T, p) = h^\circ(T) + \Delta h^R(T, p). \quad (3.14)$$

Die ideale Referenzenthalpie h° wird bei niedrigem Druck ausgewertet und kann mit den 9-koeffizientigen NASA-Polynomen [63, 64], wie in Anhang A gezeigt, berechnet werden. Der Realanteil Δh^R kann unter Verwendung der thermodynamischen Fundamentalgleichung und der Maxwell-Beziehungen bestimmt werden:

$$\Delta h^R(T, p) = p v - \mathcal{R}T + \int_{\infty}^v \left[T \frac{\partial p}{\partial T} \Big|_v - p \right] dv. \quad (3.15)$$

Bei Verwendung der unkorrigierten PR-ZGL lässt sich das Integral auf der rechten Seite von Gleichung 3.15 analytisch auswerten und der Realanteil kann als Funktion der thermischen Zustandsgrößen geschrieben werden:

$$\Delta h_{PR}^R(T, p) = p v_{PR} - \mathcal{R}T + \frac{1}{2b\sqrt{2}} \left[a - T \frac{\partial a}{\partial T} \right] \ln \left[\frac{v_{PR} + b(1 - \sqrt{2})}{v_{PR} + b(1 + \sqrt{2})} \right]. \quad (3.16)$$

Dies gilt analog auch für alle anderen kalorischen Größen, beispielsweise für die innere Energie Δe^R oder die Gibbs-Energie Δg^R . Die entsprechenden Zusammenhänge sind in Anhang B gezeigt.

In dieser Form ist die Berechnung der kalorischen und der thermischen Zustandsgrößen konsistent. Soll diese Konsistenz auch bei Verwendung einer Volumenkorrekturmethode erhalten bleiben, muss die Verschiebung des thermodynamischen Zustands durch das Volumeninkrement v_{vk} auch bei der Berechnung der kalorischen Zustandsgrößen berücksichtigt werden. Genauer gesagt muss bei der Auswertung des Realanteils sowohl der Volumenanteil aus der PR-ZGL als auch der der Volumenkorrektur v_{vk} berücksichtigt werden. Die konsistente Integration des Realanteils bei Verwendung von Volumenkorrekturmethode wurde erstmals von Kutney et al. [118] thematisiert und später von Matheis et al. [131] für verschiedene Volumenkorrekturen, auch für die hier verwendete Abudour-Korrektur, untersucht. Sie zeigen, dass durch die Substitution $v = v_{PR} + v_{vk}$ und durch Anwendung der mathematischen Beziehung

$$\frac{\partial p}{\partial T} \Big|_v = \frac{\partial p}{\partial T} \Big|_{v_{PR}} - \frac{\partial v}{\partial T} \Big|_{v_{PR}} \cdot \frac{\partial p}{\partial v_{PR}} \Big|_T \cdot \frac{\partial v_{PR}}{\partial v} \Big|_T \quad (3.17)$$

das Integral in Gleichung 3.15 wie folgt aufgeteilt werden kann:

$$\begin{aligned}
\Delta h^R = p v - \mathcal{R}T + & \underbrace{\int_{\infty}^{v_{PR}} \left[T \frac{\partial p}{\partial T} \Big|_{v_{PR}} - p \right] dv_{PR}}_{(I)} \dots \\
& - \underbrace{\int_{\infty}^{v_{PR}} \left[T \frac{\partial v_{vk}}{\partial T} \Big|_{v_{PR}} \cdot \frac{\partial p}{\partial v_{PR}} \Big|_T \right] dv_{PR}}_{(II)} \dots \\
& + \underbrace{\int_{\infty}^{v_{PR}} \left[T \frac{\partial p}{\partial T} \Big|_{v_{PR}} - p \right] \frac{\partial v_{vk}}{\partial v_{PR}} \Big|_T}_{(III)} dv_{PR}.
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Der erste Term auf der rechten Seite (I) ist der Beitrag der unkorrigierten PR-ZGL. Das Integral kann ohne Berücksichtigung der Volumenkorrekturmethode gelöst werden. Die beiden anderen Integrale (II und III) beinhalten jeweils partielle Ableitungen des Volumeninkrements v_{vk} . Ob die Integrale analytisch integriert werden können, hängt von der Formulierung der Volumenkorrektur ab. So sind beide Terme bei Verwendung von Volumenkorrekturen vom Typ I null. Ist v_{vk} nur eine Funktion der Temperatur (Typ II), ist die partielle Ableitung $\partial v_{vk} / \partial v_{PR} |_T$ null und Term III hat folglich keine Bedeutung. Bei Volumenkorrekturen, die sowohl temperatur- als auch volumenabhängig sind (Typ III), müssen beide zusätzlichen Integrale ausgewertet werden, um eine konsistente Beschreibung des thermodynamischen Zustands zu erreichen.

Bisher konnte bei Verwendung der Abudour-Korrektur keine analytische Lösung für die beiden Integrale II und III in Gleichung 3.18 gefunden werden. Des Weiteren zeigt sich, dass eine numerische Integration für die Anwendung in der LES zu teuer ist. Es war daher im Rahmen dieser Arbeit nicht möglich, die Abudour-Korrektur in konsistenter Weise effizient in der LES zur Laufzeit auszuwerten. Eine konsistente Anwendung wäre allerdings durch eine Tabellierung der thermodynamischen Zustandsgrößen denkbar. Bei Verwendung der Harstad-Korrektur muss Gleichung 3.18 nicht ausgewertet werden, da sich das Volumeninkrement direkt als partielle Ableitung aus der Korrelation für die Gibbs-Energie ergibt. Die Methode ist daher in sich konsistent.

3.2.4 Bewertung der thermodynamischen Modellierung

Zur Bewertung der Volumenkorrekturen werden die Ergebnisse der Dichteberechnung sowie die für Enthalpie und isobare Wärmekapazität mit den verfügbaren Referenzdaten vom *National Institute of Standards and Technology* (NIST) [1] verglichen. Hierfür werden die PR-ZGL und die beiden Volumenkorrekturen für die in der vorliegenden Arbeit relevanten Stoffe entlang zweier Isobaren bei $p = 1.2 p_c$ und $p = 2 p_c$ ausgewertet. Der gewählte Temperaturbereich orientiert sich an der kritischen Temperatur, kann aber aufgrund der in den Modellierungen angegebenen Gültigkeitsgrenzen nicht für alle betrachteten Stoffe einheitlich gewählt werden.

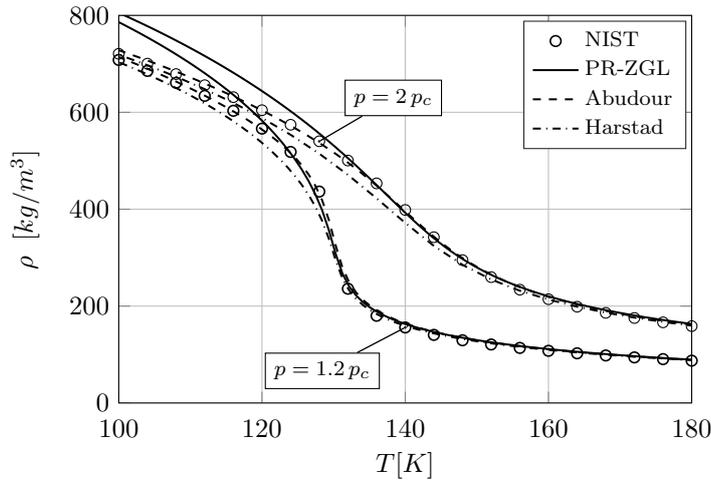


Abbildung 3.2: Dichteverlauf von N_2 bei $p = 1.2 p_c$ und $p = 2 p_c$: Vergleich verschiedener thermischer Zustandsgleichungen.

In Abbildung 3.2 sind die Ergebnisse für die Dichte von Stickstoff gezeigt. Der Übergang von transkritisch zu überkritisch ist von einem starken Abfall der Dichte gekennzeichnet, wobei der Gradient mit zunehmenden Druck abnimmt. Die Temperatur, bei der der Gradient maximal ist, ist durch die Widom-Linie beschrieben. Dieser Bereich des starken Dichteabfalls wird von der PR-ZGL gut beschrieben, jedoch weicht das Ergebnis bei niedrigeren Temperaturen deutlich von den Referenzdaten ab. Die Genauigkeit der Dichteberechnung ist jedoch gerade in diesem Bereich für die numerische Berechnung der Verbrennung in Raketenbrennkammern besonders wichtig, da der Treibstoff bei diesen Bedingungen eingespritzt wird. Ungenauigkeiten in der Zustandsgleichung wirken sich somit, je nach Wahl der Randbedingung, auf den Massenstrom, die Einspritztemperatur oder die Geschwindigkeit aus. Die beiden Volumenkorrekturen kompensieren diese Abweichung, wobei die Abudour-Korrektur besser mit der Referenz übereinstimmt als die Harstad-Korrektur. Das hier gezeigte Ergebnis für Stickstoff ist repräsentativ für viele andere Stoffe. In Anhang C sind die Dichteverläufe für H_2 , O_2 , N_2 , H_2O und CO_2 gezeigt.

Die Ergebnisse für die Enthalpie und die isobare Wärmekapazität sind in Abbildung 3.3 dargestellt. Die Enthalpie erfährt beim Durchlaufen der Widom-Linie eine starke Änderung, die sich unmittelbar auf die isobare Wärmekapazität auswirkt. Diese hat beim niedrigeren Druck ($p = 1.2 p_c$) ein markantes Maximum, welches sich bei höherem Druck gemäß dem Verlauf der Widom-Linie zu höheren Temperaturen verschiebt und weniger stark ausgeprägt ist. Sowohl der Verlauf der Enthalpie als auch der Wärmekapazität wird von der PR-ZGL gut wiedergegeben. Hier wird der ideale Referenzzustand mit den 9-koeffizientigen NASA-Polynomen [63, 64] (Anhang A) berechnet. Berechnet man den idealen Referenzzustand mit der Harstad-Korrektur, ergibt sich bei kalten Temperaturen ein zu starker Enthalpieabfall, der sich in einer überhöhten Wärmekapazität in diesem Bereich niederschlägt.

Eine quantitativere Evaluierung der thermodynamischen Modellierung kann durch die Berechnung des mittleren Fehlers $\bar{\epsilon}$ und der Standardabweichung σ im

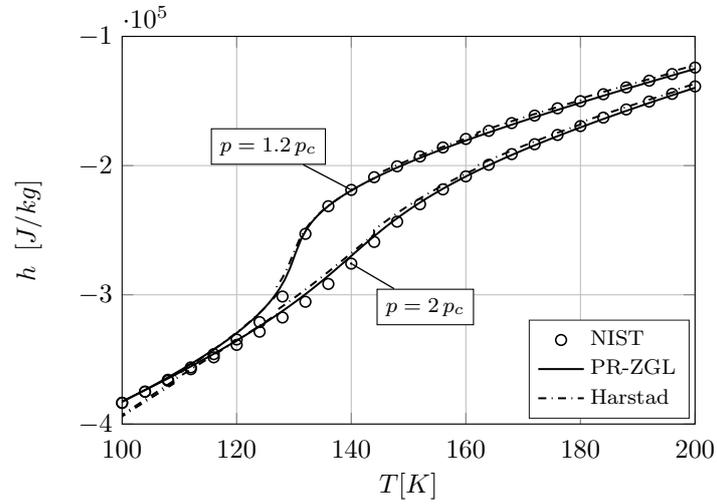
Bezug auf die Referenzwerte von NIST [1] erreicht werden:

$$\epsilon_i = \frac{\phi_{NIST}(p, T) - \phi_{ZGL}(p, T)}{\phi_{NIST}(p, T)}, \quad (3.19)$$

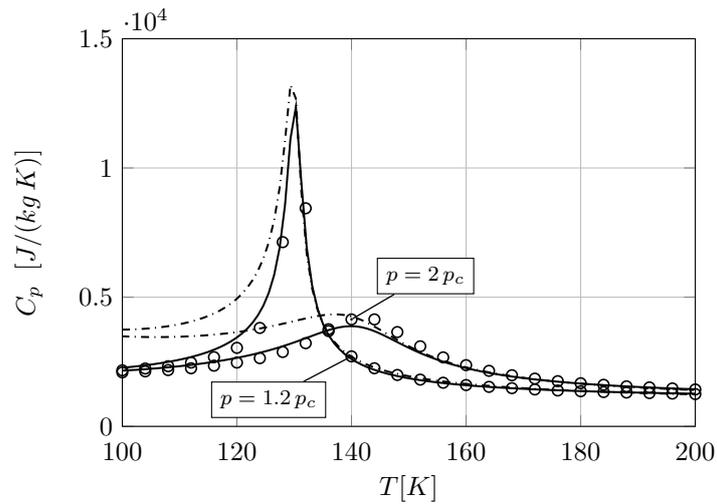
$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \epsilon_i, \quad (3.20)$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\epsilon_i - \bar{\epsilon})^2}. \quad (3.21)$$

Die Ergebnisse für die Dichteberechnung sind für die wichtigsten in der vorliegenden Arbeit verwendeten Stoffe in Tabelle 3.1 zusammengefasst. Auch hier zeigt



(a) Enthalpie



(b) Isobare Wärmekapazität

Abbildung 3.3: Enthalpie und isobare Wärmekapazität von N_2 bei $p = 1.2 p_c$ und $p = 2 p_c$: Vergleich der PR-ZGL und der Harstad-Korrektur.

		PR-ZGL	Abudour	Harstad
CH ₄ $T \in [100, 350]$	$\max(\epsilon_i)(\%)$	12.72	8.38	13.12
	$\bar{\epsilon}(\%)$	-4.78	-1.57	0.31
	$\sigma(\%)$	4.45	1.52	3.26
CO ₂ $T \in [226, 604]$	$\max(\epsilon_i)(\%)$	10.49	6.92	-
	$\bar{\epsilon}(\%)$	0.002	-0.34	-
	$\sigma(\%)$	2.56	1.45	-
H ₂ O $T \in [300, 1260]$	$\max(\epsilon_i)(\%)$	27.46	11.24	-
	$\bar{\epsilon}(\%)$	9.22	-0.01	-
	$\sigma(\%)$	9.5	3.9	-
O ₂ $T \in [80, 280]$	$\max(\epsilon_i)(\%)$	12.44	8.13	9.45
	$\bar{\epsilon}(\%)$	-5.38	-1.68	0.2
	$\sigma(\%)$	4.07	1.87	2.39
N ₂ $T \in [80, 252]$	$\max(\epsilon_i)(\%)$	13.37	7.55	10.79
	$\bar{\epsilon}(\%)$	-4.19	-1.26	0.42
	$\sigma(\%)$	4.13	1.4	2.35
H ₂ $T \in [60, 300]$	$\max(\epsilon_i)(\%)$	5.91	3.57	2.79
	$\bar{\epsilon}(\%)$	-1.4	-0.69	-0.13
	$\sigma(\%)$	1.22	0.79	0.6

Tabelle 3.1: Maximale, mittlere und Standardabweichung der Dichteberechnung mit verschiedenen Zustandsgleichungen für zwei Isobaren bei $p = 1.2 p_c$ und $p = 2 p_c$. Die Werte beziehen sich auf die Referenzdaten von NIST [1].

sich, dass die Abudour-Korrektur deutlich bessere Ergebnisse liefert als die unkorrigierte PR-ZGL oder die Harstad-Korrektur. Mit der Ausnahme von H₂ ist sowohl der maximale Fehler als auch die Standardabweichung geringer als bei den anderen Modellierungen. Die Harstad-Korrektur liefert gerade für H₂ und N₂ gegenüber der PR-ZGL deutlich bessere Ergebnisse, was im Wesentlichen an der Korrektur der Dichte im Bereich geringer Temperaturen liegt. Sie ist aber im Bereich der Widom-Linie weniger genau als die Abudour-Korrektur (siehe Anhang C). Für H₂O und CO₂ liegen mit der Harstad-Korrektur keine Ergebnisse vor, da für diese Stoffe keine Koeffizienten vorhanden sind.

Die Ergebnisse für die Enthalpie sind analog in Tabelle 3.2 zusammengefasst. Für die Abudour-Korrektur liegen keine Ergebnisse vor, da eine analytische Lösung des Realanteils der kalorischen Zustandsgleichung nicht existiert und eine numerische Integration in der LES nicht in Frage kommt. Matheis et al. [131] zeigen jedoch, dass die Berücksichtigung der Abudour-Korrektur zu unphysikalischen Verläufen der kalorischen Größen führen kann. Die Abweichungen bei der Enthalpieberechnung mit der Harstad-Korrektur und der PR-ZGL sind generell geringer als die zuvor beobachteten Abweichungen bei der Dichteberechnung. Es zeigt sich aber, dass, wie auch für N₂ (siehe Abb. 3.3), die Korrelation von Harstad weniger gut mit der Referenz übereinstimmt als die NASA-Polynome. Eine Ausnahme ist wiederum H₂, für das die Harstad-Korrektur im betrachteten Bereich sehr gute Ergebnisse liefert.

		PR-ZGL	Harstad
CH ₄ $T \in [100, 350]$	$\max(\epsilon_i)(\%)$	0.684	0.893
	$\bar{\epsilon}(\%)$	0.151	-0.039
	$\sigma(\%)$	0.186	0.293
CO ₂ $T \in [226, 604]$	$\max(\epsilon_i)(\%)$	1.136	-
	$\bar{\epsilon}(\%)$	0	-
	$\sigma(\%)$	0.417	-
H ₂ O $T \in [300, 1260]$	$\max(\epsilon_i)(\%)$	1.584	-
	$\bar{\epsilon}(\%)$	-0.283	-
	$\sigma(\%)$	0.562	-
O ₂ $T \in [80, 280]$	$\max(\epsilon_i)(\%)$	4.916	5.899
	$\bar{\epsilon}(\%)$	1.585	1.028
	$\sigma(\%)$	1.748	1.912
N ₂ $T \in [80, 252]$	$\max(\epsilon_i)(\%)$	3.261	8.736
	$\bar{\epsilon}(\%)$	-0.111	-0.013
	$\sigma(\%)$	0.898	2.464
H ₂ $T \in [60, 300]$	$\max(\epsilon_i)(\%)$	8.665	3.378
	$\bar{\epsilon}(\%)$	-1.217	0.247
	$\sigma(\%)$	1.871	0.756

Tabelle 3.2: Maximale, mittlere und Standardabweichung der Enthalpieberechnung mit verschiedenen Zustandsgleichungen für zwei Isobaren bei $p = 1.2 p_c$ und $p = 2 p_c$. Die Werte beziehen sich auf die Referenzdaten von NIST [1].

Der Vergleich der beiden Volumenkorrekturmethode und der PR-ZGL mit den Referenzdaten von NIST [1] zeigt, dass die Abudour-Korrektur durchweg die besten Ergebnisse bei der Berechnung der Dichte liefert. Die Harstad-Korrektur kompensiert zwar auch die Abweichung der PR-ZGL bei niedrigen Temperaturen, erreicht aber nicht die gleiche Genauigkeit. Die Abudour-Korrektur hat jedoch wiederum den Nachteil, dass sie in der LES nicht thermodynamisch konsistent verwendet werden kann. In den Arbeiten von Matheis et al. [131] konnten jedoch keine durch die Inkonsistenz hervorgerufene numerischen Artefakte beobachtet werden. Gleichzeitig ist die Übereinstimmung bei den kalorischen Größen bei Vernachlässigung der Volumenkorrektur sehr gut, wohingegen für die Harstad-Korrektur teils deutliche Abweichungen beobachtet werden können. Eine pauschale Wertung der betrachteten Methoden wäre jedoch, trotz der diskutierten Ergebnisse, irreführend. Es muss vielmehr je nach Anwendungsfall entschieden werden welcher Modellierungsaspekt (Genauigkeit der Dichteberechnung, thermodynamische Konsistenz oder numerische Effizienz) ausschlaggebend ist.

3.3 Mehrstoffthermodynamik

Bisher wurden nur Zustandsgleichungen für Einzelstoffe gezeigt. Verhält sich eine Mischung mehrerer Stoffe wie ein ideales Gas, geht man also davon aus, dass keine

Wechselwirkung zwischen den Molekülen stattfindet, können auch die Mischungsgrößen durch eine mit dem Molenbruch gewichtete Mittelung der Einzelstoffgrößen berechnet werden. Für eine beliebige Mischungsgröße ϕ gilt dann

$$\phi = \sum_{k=1}^N x_k \phi_k, \quad (3.22)$$

wobei x_k der molare Anteil der Spezies k in der Mischung und ϕ_k die partielle molare Zustandsgröße der Komponente k ist. Bei idealen Gasen entspricht ϕ_k der Reinstoffzustandsgröße und kann direkt über die ideale Zustandsgleichung berechnet werden.

Betrachtet man jedoch Fluide, bei denen molekulare Wechselwirkungen nicht vernachlässigbar sind, kann ϕ_k nicht allein über die Reinstoffzustandsgleichung bestimmt werden. Bei realen Mischungen hängen die partiellen molaren Größen also im Gegensatz zu idealen Mischungen von der Zusammensetzung ab und können nur über die partielle Ableitung des Gemischzustands nach dem Molanteil berechnet werden. Die Gemischgrößen können aber auch ohne Kenntnis der partiellen molaren Größen durch Anwendung des erweiterten Korrespondenzprinzip berechnet werden. Dieses besagt, dass sich eine Mischung durch geeignete Berechnung der Koeffizienten über die gleiche Zustandsgleichung wie der Reinstoff beschreiben lässt [125].

3.3.1 Mischungsregeln

Peng-Robinson-Zustandsgleichung

Zur Auswertung der PR-ZGL für Mischungen müssen geeignete Mischungsregeln für die Koeffizienten a und b in Gleichung 3.3 gefunden werden. Hierzu werden die von Harstad et al. [75] vorgeschlagenen Mischungsregeln verwendet:

$$a = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i x_j a_{ij}, \quad (3.23)$$

$$a_{ij} = 0.4572 \left(1 + k_{ij} \left(1 - \sqrt{T/T_{c,ij}} \right) \right)^2 \frac{(\mathcal{R}T_{c,ij})^2}{p_{c,ij}}, \quad (3.24)$$

$$b = \sum_{i=1}^N x_i b_i. \quad (3.25)$$

Der Koeffizient b wird dabei durch die gewichtete Mittelung der Einzelstoffparameter bestimmt. Zur Berechnung des Koeffizienten a wird eine quadratische Mischungsregel verwendet. Die kritischen Größen in den Mischungsregeln werden dabei wie folgt berechnet:

$$T_{c,ij} = \sqrt{T_{c,i} T_{c,j}} (1 - \kappa_{ij}), \quad (3.26)$$

$$v_{c,ij} = \frac{1}{8} \left(v_{c,i}^{1/3} + v_{c,j}^{1/3} \right)^3, \quad (3.27)$$

$$Z_{c,ij} = \frac{1}{2} (Z_{c,i} + Z_{c,j}), \quad (3.28)$$

$$p_{c,ij} = \frac{\mathcal{R}T_{c,ij}Z_{c,ij}}{v_{c,ij}}, \quad (3.29)$$

$$\omega_{ij} = 0.5 (\omega_i + \omega_j), \quad (3.30)$$

$$k_{ij} = 0.37464 + 1.54226\omega_{ij} - 0.26992\omega_{ij}^2. \quad (3.31)$$

Der Koeffizient κ_{ij} ist der binäre Interaktionsparameter. Dieser wird hier mangels Messdaten für alle Stoffkombinationen vernachlässigt ($\kappa_{ij} = 0$).

Harstad-Korrektur

Die Harstad-Korrektur kann sehr einfach auf Mischungen erweitert werden [75]. Da hier nur der ideale Referenzzustand bei niedrigem Druck korrigiert wird, ist es ausreichend die Korrelation für die Mischung durch Mittelung der Einzelstoffkorrelationen zu berechnen:

$$g^\circ = \sum_{i=1}^N x_i g_i^\circ, \quad (3.32)$$

$$v_{vk} = \sum_{i=1}^N x_i \left. \frac{\partial g_i^\circ}{\partial p} \right|_T. \quad (3.33)$$

Abudour-Korrektur

Bei der Abudour-Korrektur sind die Mischungsregeln hingegen komplexer, da das Volumeninkrement v_{vk} durch den Abstand zwischen dem kritischen Punkt der Mischung und der durch den Fluidzustand laufenden Isothermen modelliert wird. Abudour et al. [4] benutzen zur Berechnung des kritischen Punkts der Mischung die von Chueh und Prausnitz [30] vorgeschlagenen Mischungsregeln:

$$\theta_i = \frac{x_i v_{c,i}^{2/3}}{\sum_{i=1}^N x_i v_{c,i}^{2/3}}, \quad (3.34)$$

$$\omega_m = \sum_{i=1}^N x_i \omega_i, \quad (3.35)$$

$$T_{c,m} = \sum_{i=1}^N \theta_i T_{c,i}, \quad (3.36)$$

$$v_{c,m} = \sum_{i=1}^N \theta_i v_{c,i}, \quad (3.37)$$

$$p_{c,m} = (0.2905 - 0.085\omega_m) \frac{\mathcal{R}T_{c,m}}{v_{c,m}}. \quad (3.38)$$

Die dimensionslose Abstandsfunktion d (Gl. 3.9) und die Funktion δ_c (Gl. 3.11) kann dann für die Mischung berechnet werden. Für die Korrelation c_1 (Gl. 3.13) schlagen Abudour et al. [4] eine ideale Mischung vor:

$$c_1 = \sum_{i=1}^N x_i (0.4266Z_{c,i} - 0.1101). \quad (3.39)$$

Mit diesen Mischungsregeln kann das Volumeninkrement v_{vk} (Gl. 3.10) ausgewertet werden. Der von Chou und Prausnitz [29] eingeführte Helmholtz-Term zur Berechnung der dimensionslosen Abstandsfunktion d wird hier aus Effizienzgründen vernachlässigt.

In Abbildung 3.4 sind die Dichteverläufe dreier Isothermen bei $p = 5$ MPa für eine binäre N_2/H_2 -Mischung gezeigt. Bei idealer Mischung (Gl. 3.22) wären die Dichteverläufe im Mischungsraum gerade Verbindungslinien zwischen den Werten der Einzelstoffe. Die starke Abweichung von diesem idealen Verlauf wird von den drei hier betrachteten Methoden gut wiedergegeben. Wie schon bei der Evaluierung der Reinstoffzustandsgleichungen in Abschnitt 3.2.4 zeigt sich, dass das Ergebnis der PR-ZGL von den Referenzdaten abweicht, wohingegen die beiden Volumenkorrekturen deutlich bessere Ergebnisse liefern. Wiederum stimmt das Ergebnis der Abudour-Korrektur besser mit den Referenzdaten von NIST [1] überein als das der Harstad-Korrektur.

Die korrespondierenden Verläufe der Enthalpie und der isobaren Wärmekapazität sind in Abbildung 3.5 gezeigt. Man kann beobachten, dass sich das Maximum der Wärmekapazität abhängig von der Temperatur im Mischungsraum verschiebt. Dies wird sowohl von der unkorrigierten PR-ZGL als auch von der Harstad-Korrektur gut wiedergegeben, allerdings weicht das Ergebnis der Volumenkorrekturmethode bei stickstoffreicher Mischung von den Referenzdaten ab.

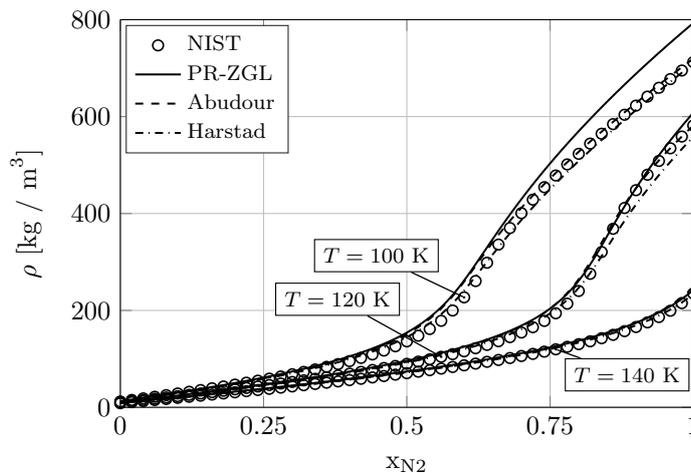
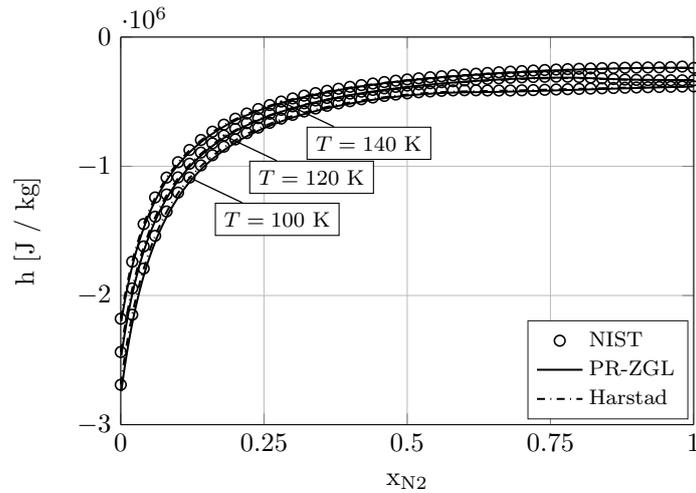
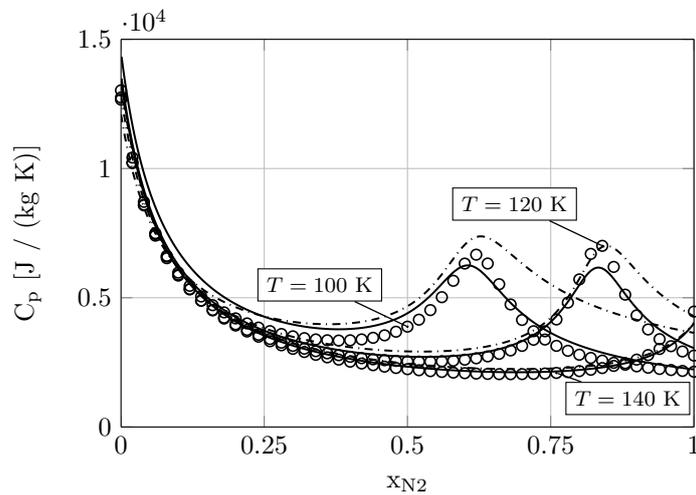


Abbildung 3.4: Dichteverlauf in einer binären N_2/H_2 -Mischung bei dem Druck $p = 5$ MPa und den drei Temperaturen $T = 100$ K, $T = 120$ K und $T = 140$ K: Vergleich verschiedener thermischer Zustandsgleichungen.



(a) Enthalpie



(b) Isobare Wärmekapazität

Abbildung 3.5: Enthalpie und isobare Wärmekapazität in einer binären N_2/H_2 -Mischung bei dem Druck $p = 5$ MPa und den drei Temperaturen $T = 100$ K, $T = 120$ K und $T = 140$ K: Vergleich der PR-ZGL und der Harstad-Korrektur.

3.3.2 Phasengleichgewicht in binären Mischungen

Wie schon in Abbildung 3.4 durch das Verschieben des C_p -Maximums angedeutet, ändert sich die Lage des kritischen Punkts und damit des Zweiphasengebiets in Abhängigkeit von der Zusammensetzung. Dabei können kritische Drücke erreicht werden, die die der Einzelstoffe um ein Vielfaches übersteigen. Durch die binäre Mischung zweier Fluide kann es zur Phasentrennung kommen, obwohl der Druck überkritisch bezüglich der Reinstoffe ist. Es bildet sich eine Flüssigphase, in der beide Komponenten gemischt vorliegen und die eine Oberflächenspannung aufweist, und eine Gasphase, in der wiederum beide Komponenten jedoch bei anderer Zusammensetzung als in der Flüssigphase, vorliegen. Kennt man die Phasengrenzen, kann

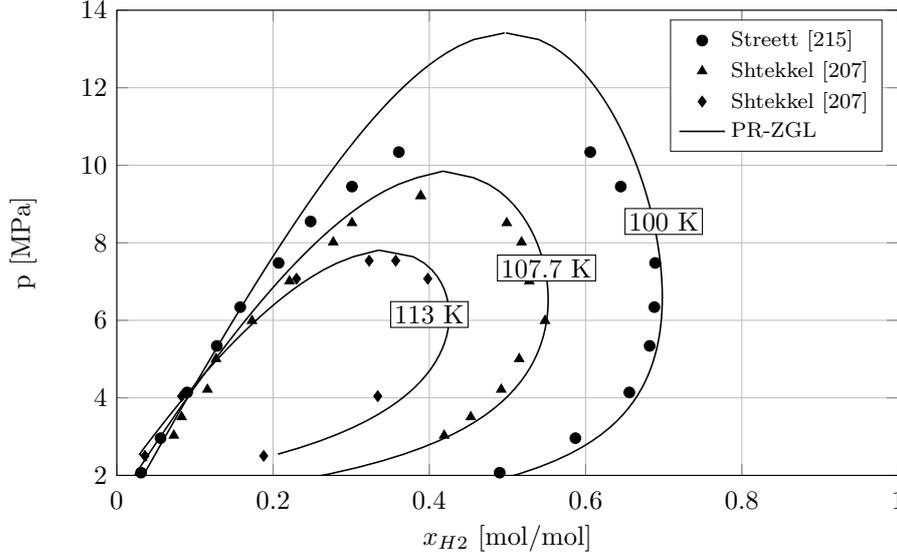


Abbildung 3.6: Phasengleichgewicht in einer binären N_2/H_2 -Mischung bei den drei Temperaturen $T = 100$ K, $T = 107.7$ K und $T = 113$ K.

die Zusammensetzung in Flüssig- und Gasphase über das Hebelgesetz bestimmt werden [49].

Eine Methode, die Phasengrenzen in binären Mischungen zu berechnen, beruht auf der Annahme, dass Flüssig- und Gasphase sowohl im thermischen, mechanischen als auch im chemischen Gleichgewicht sind. Letzteres bedeutet, dass das chemische Potential beider Phasen identisch ist, was über die Gleichheit der Fugazitäten ausgedrückt werden kann. Die Fugazität ist ein Maß für das Bestreben der Moleküle in die jeweils andere Phase zu wechseln. Sind die Fugazitäten der Einzelstoffe in beiden Phasen gleich, befindet sich das Fluid folglich im chemischen Gleichgewicht:

$$\varphi_{f,\alpha} x_{f,\alpha} = \varphi_{g,\alpha} x_{g,\alpha}, \quad (3.40)$$

$$\varphi_{f,\beta} x_{f,\beta} = \varphi_{g,\beta} x_{g,\beta}. \quad (3.41)$$

Hierbei ist $\varphi_{f,\alpha}$ der Fugazitätskoeffizient und $x_{f,\alpha}$ der Molanteil von Komponente α in der Flüssigphase. Die Fugazitätskoeffizienten entsprechen im Wesentlichen dem Realanteil des chemischen Potentials und können wie die anderen kalorischen Größen (siehe Abs. 3.2.3) durch die thermodynamische Fundamentalgleichung ausgedrückt werden:

$$\mathcal{R}T \ln \varphi_\alpha = \int_{\infty}^v \left[\frac{\mathcal{R}T}{v} - \frac{\partial p}{\partial x_\alpha} \Big|_{T,v,x_{i \neq \alpha}} \right] dv - \mathcal{R}T \ln(Z). \quad (3.42)$$

Das Integral kann mit der PR-ZGL ausgewertet werden:

$$\begin{aligned} \ln \varphi_\alpha = & \frac{2 \sum x_i a_{i\alpha} - a \frac{b_\alpha}{b}}{2\sqrt{2}b\mathcal{R}T} \ln \left[\frac{v + (1 - \sqrt{2})b}{v + (1 + \sqrt{2})b} \right] \\ & - \ln \left[\frac{p(v-b)}{\mathcal{R}T} \right] + \frac{b_\alpha}{b} \left(\frac{pv}{\mathcal{R}T} - 1 \right). \end{aligned} \quad (3.43)$$

Das durch die Gleichungen 3.40 und 3.41 beschriebene System kann iterativ gelöst werden, um die Phasengrenze zu bestimmen. Binäre Systeme haben drei Freiheitsgrade, weswegen das Zweiphasengebiet einen dreidimensionalen Raum aufspannt. Drei projizierte Phasengrenzen bei konstanter Temperatur einer N_2/H_2 -Mischung sind in Abbildung 3.6 gezeigt. Die Ergebnisse der PR-ZGL sind mit Messdaten verglichen, die von der Dortmund Datenbank¹ bezogen wurden. Bei 100 K erstreckt sich das Zweiphasengebiet in den Messungen bis zu einem Druck von ca. 10.5 MPa, was den kritischen Druck beider Einzelstoffe deutlich übersteigt ($p_{c,N_2} \approx 3.4$ MPa und $p_{c,H_2} \approx 1.3$ MPa). Es zeigt sich, dass das Ergebnis der PR-ZGL bis zu Drücken von ca. 8 MPa gut mit den Messungen übereinstimmt, bei höheren Drücken gibt es teils deutliche Abweichungen. Die Ergebnisse hängen dabei stark von der Wahl des binären Interaktionsparameters κ_{ij} in den Mischungsregeln (Gl. 3.26) ab und können durch die Verwendung angepasster Werte verbessert werden. Die Kammerdrücke in den später untersuchten Anwendungen liegen jedoch in einem Bereich, in dem die PR-ZGL auch ohne Anpassung von κ_{ij} gute Ergebnisse liefert.

Es ist derzeit strittig, ob bei Einspritzvorgängen in Raketenbrennkammern oder auch in Dieselmotoren durchweg vom chemischen Gleichgewicht ausgegangen werden kann. Dahms und Oefelein [40, 41] zweifeln daran, dass eine Mischung beim Erreichen eines Zustands, der nach Gleichgewichtsberechnung im Zweiphasengebiet liegt, sofort zerfällt und eine Oberfläche ausbildet. Sie schlagen daher einen Grenzwert für die Knudsen-Zahl als Kriterium für die Phasentrennung vor, also ein bestimmtes Verhältnis der mittleren freien Weglänge der Moleküle und der Dicke der Phasengrenze. Interessant ist auch die Betrachtung der Zeitskalen, die bei der Phasentrennung auftreten. Sind diese in der gleichen Größenordnung wie die der turbulenten Mischung oder der Diffusion, ist eine Gleichgewichtsbetrachtung nicht ausreichend. Jarczyk [89] zeigte jedoch für binäre O_2/H_2 -Mischungen, dass der Zerfall in weiten Teilen des Zweiphasengebiets nahezu instantan abläuft und die Zeitskalen nur in beschränkten Gebieten in unmittelbarer Nähe zur Phasengrenze für die Strömung relevante Werte annimmt.

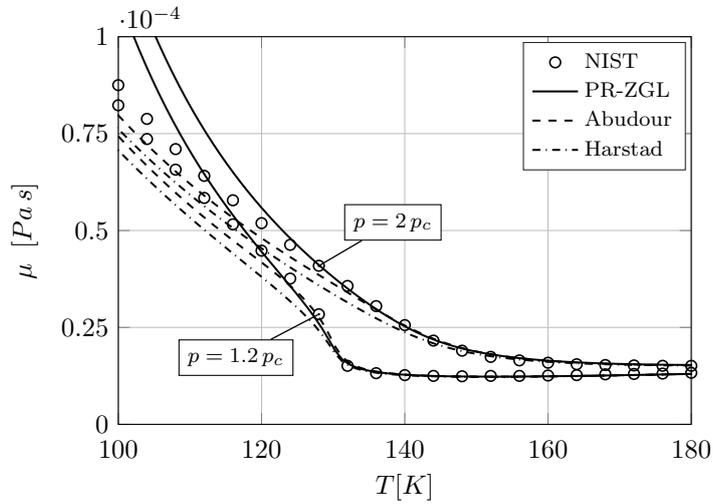
3.4 Transporteigenschaften

Auch die Transporteigenschaften eines Fluids oder einer Mischung sind bei hohen Drücken stark von der Molekülwechselwirkung beeinflusst. Beim Übergang von überkritisch nach transkritisch steigt die Viskosität eines Stoffes beispielsweise stark an und erreicht Werte, wie man sie bei Flüssigkeiten findet. Eine empirische Korrelation, die das nichtlineare Verhalten der thermischen Leitfähigkeit und der Viskosität gut beschreibt, wurde von Chung et al. [31] vorgeschlagen.

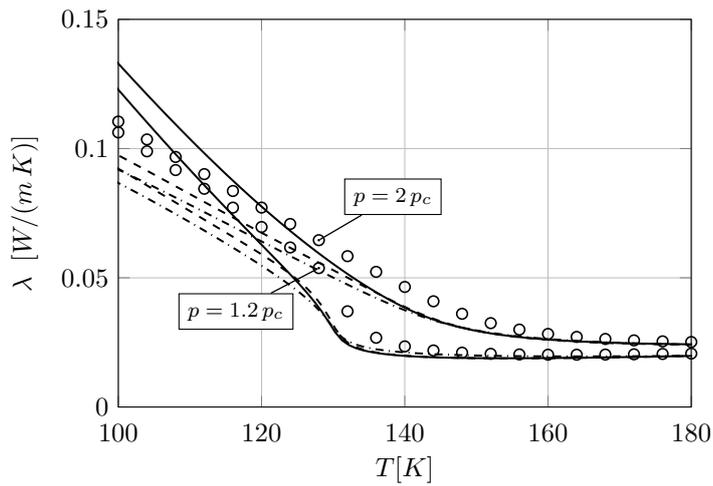
In Abbildung 3.7 sind beispielhaft die Verläufe der thermischen Leitfähigkeit λ und der Viskosität μ für Stickstoff gezeigt. Da die Dichte direkt in die Korrelation von Chung einfließt, haben auch die Volumenkorrekturen einen Einfluss auf die Berechnung der Transportgrößen. Es zeigt sich, dass mit der korrigierten Dichte

¹DDBST GmbH 2015: <http://www.ddbst.com/>

gerade im transkritischen Bereich deutlich genauere Ergebnisse erzielt werden.



(a) Viskosität



(b) Thermische Leitfähigkeit

Abbildung 3.7: Viskosität und thermische Leitfähigkeit von N_2 bei $p = 1.2 p_c$ und $p = 2 p_c$: Validierung des Transportmodells von Chung et al. [31] bei Verwendung verschiedener thermischer Zustandsgleichungen.

Kapitel 4

Verbrennungsmodellierung

In diesem Kapitel werden neben den Grundlagen der Verbrennung Ansätze zur Modellierung turbulenter Flammen in der LES vorgestellt. Letzteres erfordert zum einen eine Beschreibung der chemischen Reaktionen auf den in der Simulation aufgelösten Skalen, zum anderen eine geeignete Modellierung der Interaktion zwischen Turbulenz und Chemie auf den unaufgelösten Skalen. Hierzu werden in der vorliegenden Arbeit zwei Ansätze verwendet: der Flamelet-Ansatz und die Eulerian-stochastic-fields-Methode (ESF-Methode).

Aufgrund der starken Nichtlinearität der chemischen Reaktionen ist die Modellierung der Turbulenz-Chemie-Interaktion auf den unaufgelösten Skalen vor dem Hintergrund beschränkter Rechenleistung ausgesprochen komplex. Um geeignete und effiziente Modelle zu finden ist es daher sinnvoll, je nach den dominierenden physikalischen Vorgängen zwischen unterschiedlichen Flammenformen zu unterscheiden. So spricht man von vorgemischter Verbrennung, wenn Brennstoff und Oxidator vor der Zündung gemischt und der Flamme gemeinsam zugeführt werden. Alternativ können die Reaktanten getrennt voneinander gelagert und der Flamme separat zugeführt werden. In diesem Fall spricht man von nicht-vorgemischter Verbrennung. In der vorliegenden Arbeit wird ausschließlich auf nicht-vorgemischte Verbrennung eingegangen, weswegen Vormischflammen nicht weiter thematisiert werden. Die getrennte Lagerung von Oxidator und Brennstoff ist aus Sicherheitsgründen von

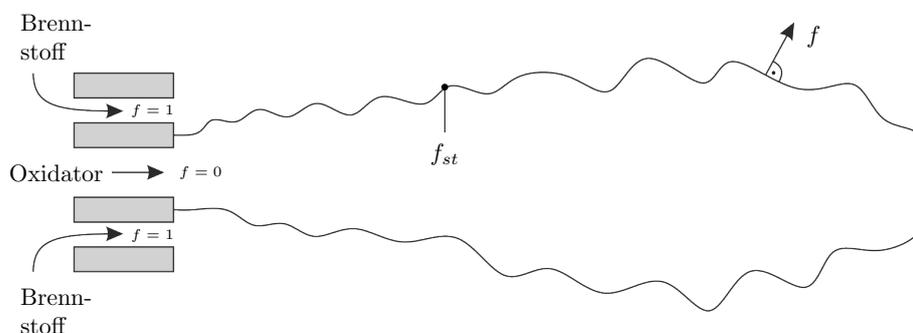


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung der nicht-vorgemischten Verbrennung.

Vorteil, was insbesondere bei der Verbrennung in Raketenbrennkammern ausschlaggebend ist. Auch in Fluggasturbinen und in der automotorischen Anwendung wird in aller Regel nicht-vorgemischt verbrannt. Der konditionierende Prozess für die Verbrennung ist die diffusive Mischung des Oxidators und des Brennstoffs zu einem brennfähigen Gemisch, weswegen nicht-vorgemischte Flammen auch häufig als Diffusionsflammen bezeichnet werden. Abbildung 4.1 zeigt eine schematische Darstellung einer Diffusionsflamme. Die Position der Flamme ist durch den stöchiometrischen Mischungsbruch f_{st} gekennzeichnet, $f = 0$ und $f = 1$ markieren reinen Oxidator bzw. reinen Brennstoff. Neben den Reinformen, vorgemischte und nicht-vorgemischte Verbrennung, existieren auch Mischformen, wie etwa die partiell vorgemischte Verbrennung.

Aufgrund der großen Bedeutung der Verbrennung in technischen Prozessen, ist die Verbrennungsmodellierung ein stark besetztes Forschungsfeld. Die Relevanz des Themas spiegelt sich auch in der großen Anzahl an wissenschaftlichen Publikationen und Ansätzen wieder. Eine gute Übersicht der gängigen Modellierungen bieten die Bücher von Poinsoot und Veynante [182], Kuo und Acharya [117] sowie Warnatz et al. [229].

4.1 Turbulente Flammen

Bei der turbulenten nicht-vorgemischten Verbrennung bildet sich zwischen Oxidator und Brennstoff eine Flamme aus, deren Form maßgeblich von den lokalen Strömungsverhältnissen beeinflusst wird. So findet in turbulenten Strömungen eine Interaktion zwischen den Wirbeln und der Flamme statt, die zu chemischen Nichtgleichgewichtseffekten bis hin zum Verlöschen der Flamme führen kann. Der Einfluss der Turbulenz auf die lokale Flammenstruktur kann durch einen Vergleich der relevanten chemischen und turbulenten Längen- und Zeitskalen analysiert werden.

4.1.1 Skalen turbulenter nicht-vorgemischter Verbrennung

Zum Vergleich der Zeitskalen wird die Damköhler-Zahl

$$Da = \frac{\tau_s}{\tau_c} \quad (4.1)$$

eingeführt, welche das Verhältnis zwischen der charakteristischen Zeitskala der Strömung und der Reaktionen beschreibt. Die chemische Zeitskala τ_c ist von den an der Verbrennung beteiligten Reaktionen und der lokalen Temperatur abhängig. Zur Abschätzung der charakteristischen Strömungszeitskala τ_s wird bei nicht-vorgemischter Verbrennung die Diffusionsgeschwindigkeit in der Flamme gewählt. Diese kann durch die skalare Dissipationsrate

$$\tau_s \approx \frac{1}{\chi_{st}} \quad (4.2)$$

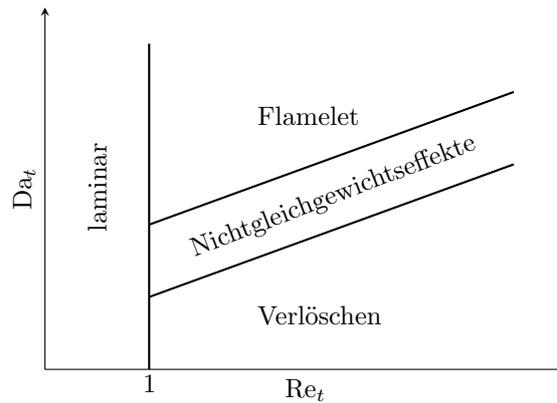


Abbildung 4.2: Bereiche turbulenter nicht-vorgemischter Verbrennung als Funktion der turbulenten Damköhler-Zahl und der turbulenten Reynolds-Zahl nach Poinsoot und Veynante [182].

angenähert werden. χ_{st} ist dabei als inverse Zeitskala der Diffusion zu verstehen und ist ein Maß für die Streckung der Flamme. Im Gegensatz zur Vormischverbrennung ist die Zeitskala der Strömung bei nicht-vorgemischter Verbrennung nicht eindeutig definiert. χ_{st} hängt von den lokalen Begebenheiten im Strömungsfeld ab und ändert sich somit zeitlich wie räumlich. Eine a-priori Abschätzung der Damköhler-Zahl ist daher schwer. Dennoch ist die Damköhler-Zahl eine wichtige Kennzahl, um Bereiche turbulenter Verbrennung abzugrenzen.

Im Falle einer großen Damköhler-Zahl sind die chemischen Reaktionen schnell und die Flamme passt sich sofort an Änderungen im Strömungsfeld bzw. an Änderungen der skalaren Dissipationsrate an. Dies ist eine Voraussetzung für den weit verbreiteten Flamelet-Ansatz, welcher in Kapitel 4.3.2 genauer beschrieben wird. Liegt die chemische Zeitskala in der selben Größenordnung wie die der Strömung, kann sich die Flamme nicht sofort an Änderungen im Strömungsfeld anpassen und es treten Nichtgleichgewichtseffekte auf. Bei Damköhler-Zahlen unterhalb eines gewissen Grenzwertes kommt es zum Verlöschen der Flamme. Die strömungsbedingten Änderungen der lokalen Mischung sind dann so schnell, dass eine stabile Verbrennung nicht möglich ist.

Die zeitlichen und räumlichen Änderungen in turbulenten Strömungen machen eine a-priori Abschätzung des zu erwartenden Zustands schwer. Eine Annäherung wird in der DNS-Studie von Cuenot und Poinsoot [38] vorgestellt, in der die verschiedenen Bereiche genauer abgegrenzt werden. Eine qualitative Abgrenzung stellt Abbildung 4.2 dar, in der die drei oben genannten Bereiche als Funktion der turbulenten Reynolds-Zahl (Gl. 2.15) und der turbulenten Damköhler-Zahl

$$Da_t = \frac{\tau_t}{\tau_c} = 2\sqrt{Re_t}Da \quad (4.3)$$

eingezeichnet sind. τ_t ist die charakteristische turbulente Zeitskala.

4.1.2 Besonderheiten transkritischer Verbrennung

Der Druck in Raketenbrennkammern ist sehr hoch und die Eigenschaften der eingespritzten Treibstoffe sind von Realgaseffekten geprägt. Beides kann die Verbrennung in vielfältiger Weise beeinflussen. Im Folgenden ist aufgelistet, welche physikalischen Prozesse und Eigenschaften sich bei transkritischer Einspritzung auf die Verbrennung auswirken können.

- Bei der nicht-vorgemischten Verbrennung ist die Gemischbildung von der Rate abhängig, mit der Oxidator und Brennstoff ineinander diffundieren. Die Transporteigenschaften der Treibstoffe sind im transkritischen Bereich stark temperaturabhängig (siehe Abb. 3.7). Viskosität und thermische Leitfähigkeit steigen bei Temperaturen unterhalb der Pseudo-Siedetemperatur stark an.
- Beim Überschreiten der Widom-Linie treten sehr hohe Wärmekapazitäten auf. Bei der Erwärmung des Oxidators in der Brennkammer wird daher in diesem Bereich ein höherer Energieeintrag benötigt, was zu einer Verzögerung der Zündung führen kann.
- Neben einer Beeinflussung der molekularen Prozesse, nehmen die Realgaseffekte auch durch die Beeinflussung des turbulenten Strömungsfelds Einfluss auf die Verbrennung. Insbesondere von der für transkritische Bedingungen typische hohe Dichtestratifikation in der Scherschicht wird das Anwachsen turbulenter Fluktuationen beeinflusst, was wiederum ausschlaggebend für die Durchmischung und damit die Effizienz der Verbrennung ist.
- Die Flammendicke ist umgekehrt proportional zur Wurzel des Drucks, wohingegen die volumetrische Wärmefreisetzung mit der Wurzel des Drucks ansteigt. Auch die maximale Flammentemperatur und die Resistenz der Flamme gegenüber Streckung steigen mit dem Druck.
- Die hohen Drücke können sich auf die Reaktionskinetik auswirken.

Welcher der Punkte einen signifikanten Einfluss auf die Flamme hat, hängt stark vom untersuchten Anwendungsfall ab.

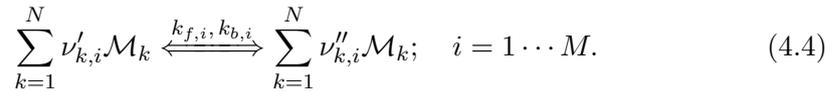
4.2 Chemische Reaktionskinetik

Verbrennung bezeichnet ganz allgemein die exotherme Reaktion eines Brennstoff-Oxidator-Gemischs. Den Zustand in der ausreagierten Mischung, also die chemische Zusammensetzung des verbrannten Gases und die während der Reaktion frei werdende Wärme, kann man mit Hilfe thermodynamischer Beziehungen unter der Voraussetzung chemischen Gleichgewichts bestimmen. Dieser Gleichgewichtszustand kann sich in turbulenten Flammen allerdings nur einstellen, wenn die Reaktionen schneller ablaufen als die Transportprozesse in der Strömung, die Damköhler-Zahl also groß ist. Das ist oftmals nicht gegeben und es interessiert nicht nur der Endzustand der Verbrennung sondern auch der Weg dahin, also die zeitliche Entwicklung

jeder einzelnen an der Reaktion beteiligten Spezies. Die Grundlage zur Beschreibung des Reaktionsraums oder der Mannigfaltigkeit ist die Reaktionskinetik.

4.2.1 Berechnung der Reaktionsraten

Der Ablauf einer chemischen Reaktion kann über einen Reaktionsmechanismus beschrieben werden. Dieser bildet die Gesamtheit aller im System zugelassenen chemischen Reaktionen ab. In der vorliegenden Arbeit wird ausschließlich die Verbrennung von Methan und Sauerstoff betrachtet, weswegen hier nur auf Reaktionsmechanismen für diese Treibstoffkombination eingegangen wird. Ein detaillierter Mechanismus ist der des *Gas Research Institute* in der Version 3.0 (GRI-3.0) [212]. Der GRI-3.0-Mechanismus besteht aus 325 Einzelreaktionen ($M = 325$), an denen insgesamt 53 Spezies ($N = 53$) beteiligt sind. Er wird oft als Referenz verwendet. Seine direkte Lösung in der CFD ist aber für technische Anwendungen zu aufwendig. Die Reaktionen können folgendermaßen dargestellt werden:



Dabei symbolisiert \mathcal{M}_k die Spezies k und $\nu_{k,i}$ den zugehörigen Stöchiometrikoeffizienten der jeweiligen Reaktion i . Der Index \star' zeigt an, dass es sich um ein Edukt handelt, der Index \star'' , dass es sich um ein Produkt handelt. Die einzelnen Reaktionen können sowohl vorwärts als auch rückwärts ablaufen und k_f und k_b sind die zugehörigen Reaktionsgeschwindigkeiten. k_f und k_b sind stark temperaturabhängig und können durch den Arrhenius-Ansatz [8] beschrieben werden:

$$k_f = AT^{b_A} e^{-E_a/(\mathcal{R}T)}. \quad (4.5)$$

Neben der universellen Gaskonstante \mathcal{R} und der Temperatur T , beinhaltet Gleichung 4.5 die Aktivierungsenergie E_a , den präexponentiellen Faktor A und den Temperaturexponenten b_A . Die Aktivierungsenergie stellt die Energieschwelle dar, die zum Start der Reaktion überwunden werden muss. Alle drei Faktoren sind für jede Reaktion im Mechanismus angegeben und die Geschwindigkeit der Rückwärtsreaktion k_b kann über die Annahme des chemischen Gleichgewichts zwischen Vorwärts- und Rückwärtsreaktion mit Hilfe thermodynamischer Beziehungen berechnet werden. Eine detailliertere Beschreibung des Arrhenius-Ansatzes findet sich beispielsweise bei Kuo [116].

Sind die Reaktionsgeschwindigkeiten bekannt, kann für jede Einzelreaktion die Reaktionsrate bestimmt werden:

$$r_i = k_{f,i} \prod_{k=1}^N c_k^{\nu'_{k,i}} - k_{b,i} \prod_{k=1}^N c_k^{\nu''_{k,i}}. \quad (4.6)$$

Hierbei werden Spezieskonzentrationen verwendet:

$$c_k = Y_k \frac{\rho}{W_k}. \quad (4.7)$$

Der Exponent der Konzentration $\nu_{k,i}$ in Gleichung 4.6 wird auch als Reaktionsordnung bezeichnet. Dieser entspricht bei detaillierten Mechanismen dem Stöchiometrikoeffizienten. Bei reduzierten Reaktionsmechanismen (siehe Kap. 4.2.2) können diese jedoch angepasst werden, um die Vorhersage für Eigenschaften wie Zündverzug oder Flammgeschwindigkeit zu verbessern.

Die zeitliche Änderung einer Spezieskonzentration ergibt sich dann aus der Summe aller Reaktionen:

$$\frac{dc_k}{dt} = \sum_{i=1}^M (\nu''_{k,i} - \nu'_{k,i}) r_i. \quad (4.8)$$

Letztlich kann der für die Speziestransportgleichung 2.8 benötigte Quellterm berechnet werden:

$$\dot{\omega}_k = W_k \frac{dc_k}{dt}. \quad (4.9)$$

Das durch den Reaktionsmechanismus aufgespannte Gleichungssystem 4.8 entspricht mathematisch gesehen einem System gewöhnlicher Differentialgleichungen. Die Anzahl der Gleichungen entspricht der Anzahl der Spezies, die Anzahl der Summanden entspricht der Anzahl der beteiligten Reaktionen. Je größer also der verwendete Reaktionsmechanismus ist, desto aufwendiger wird seine numerische Lösung. In der vorliegenden Arbeit wird hierfür ein implizites Euler-Verfahren verwendet [71].

4.2.2 Reduzierte Reaktionsmechanismen

Bei numerischen Simulationen reagierender Strömungen ist die Berechnung des Reaktionsmechanismus häufig der rechenintensivste Teil. Besonders bei der Verbrennung von höheren Kohlenwasserstoffen, wie etwa Propan oder n-Dodekan, ist die Berechnung eines detaillierten Mechanismus, der alle relevanten Reaktionen beinhaltet, mit derzeitig zur Verfügung stehenden Rechnern nicht möglich. Auch bei einfacheren Kohlenwasserstoffen wie Methan ist die Verwendung des GRI-3.0-Mechanismus nur für kleine Probleme realisierbar. Der hohe numerische Aufwand begründet sich vor allem durch die Steifigkeit und die Größe des Gleichungssystems sowie durch die große Anzahl zusätzlicher Speziestransportgleichungen. Will man technisch relevante Verbrennungsprozesse simulieren, ist es daher oftmals unumgänglich Vereinfachungen einzuführen, um den numerischen Aufwand zu senken.

In den letzten Jahrzehnten wurden daher eine Vielzahl reduzierter Reaktionsmechanismen für verschiedene Kohlenwasserstoffe vorgeschlagen. Das Ziel der Reduktion ist es, die Anzahl der Spezies im Mechanismus zu reduzieren, dabei aber die wesentlichen Eigenschaften des vollen Mechanismus zu erhalten. Das funktioniert meist nur in ausgewählten Bereichen, d. h. bei definierten Drücken und Zusammensetzungen, zufriedenstellend. Zur Reduktion der Reaktionsmechanismen gibt es verschiedene Ansätze, die beispielsweise bei Smooke [213] näher beschrieben sind.

	Reaktion	A	b_A	E_a	Ordnungen
1:	$\text{CH}_4 + 0.5 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + 2 \text{H}_2$	3.06×10^{10}	0	30×10^3	$[\text{CH}_4]^{0.5} [\text{O}_2]^{1.3}$
2:	$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + 3 \text{H}_2$	3.84×10^9	0	30×10^3	$[\text{CH}_4] [\text{H}_2\text{O}]$
3:	$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	2.01×10^9	0	20×10^3	$[\text{CO}] [\text{H}_2\text{O}]$
4:	$\text{H}_2 + 0.5 \text{O}_2 \leftrightarrow \text{H}_2\text{O}$	8.03×10^{16}	-1	40×10^3	$[\text{H}_2]^{0.3} [\text{O}_2]^{1.55}$
5:	$\text{O}_2 \leftrightarrow 2 \text{O}$	1.5×10^9	0	113×10^3	$[\text{O}_2]$
6:	$\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H} + \text{OH}$	2.3×10^{22}	-3	120×10^3	$[\text{H}_2\text{O}]$

Tabelle 4.1: Erweiterter Jones-Lindstedt Mechanismus nach Frassoldati et al. [56] mit den Arrhenius Konstanten: $k_f = A T^b \exp(E_a/(RT))$. Die Einheiten sind in cal, l, mol und s angegeben.

Ein stark reduzierter, sogenannter globaler Reaktionsmechanismus zur Beschreibung der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen wurde von Jones und Lindstedt vorgestellt (JL-Mechanismus) [97]. Er besteht aus $M = 4$ Reaktionen und $N = 6$ Spezies und ist gerade bei atmosphärischen Flammen weit verbreitet. Bei höheren Drücken und bei der Verwendung von unverdünntem Oxidator, wie in Raketebrennkammern üblich, werden jedoch Dissoziationsreaktionen wichtig, die im JL-Mechanismus nicht berücksichtigt sind. Frassoldati et al. [56] schlagen daher vor, den JL-Mechanismus um zwei Reaktionen zu erweitern, die die Dissoziation von Wasser und Sauerstoff berücksichtigen. Der resultierende Mechanismus (JL-R-Mechanismus) enthält 3 zusätzliche Spezies: die Radikale OH , O und H . Außerdem schlagen Frassoldati et al. [56] modifizierte Arrheniuskoeffizienten für die schon im JL-Mechanismus enthaltenen Reaktionen vor. Die $M = 6$ Reaktionen des adaptierten Mechanismus sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst. Die Reaktionsordnungen (siehe Gl. 4.6) sind angepasst und weichen bei einigen Reaktionen vom Stöchiometrikoeffizienten der Spezies ab.

Ein recht neuer, vielversprechender Ansatz, um die Effizienz bei der Lösung des Reaktionsmechanismus zu steigern, ist der Einsatz von Grafikprozessoren (GPU für engl. *Graphics Processing Unit*) anstatt der normalerweise verwendeten Hauptprozessoren (CPU für engl. *Central Processing Unit*). Deren Eigenschaft, Daten massiv parallel zu verarbeiten, kann ausgenutzt und die Rechenzeit so um bis zu zwei Größenordnungen verringert werden [51, 206]. Um die GPU-Architektur effizient nutzen zu können, bedarf es jedoch spezieller Algorithmen, die auf die verwendeten Rechner abgestimmt werden müssen und deren Kopplung mit etablierten CFD-Verfahren oftmals nicht ohne Weiteres realisierbar ist. In der vorliegenden Arbeit wird daher auf konventionelle, CPU-basierte Lösungsverfahren zurückgegriffen.

4.3 LES turbulenter nicht-vorgemischter Verbrennung

Gemäß dem Prinzip der Skalentrennung werden in der LES die gefilterten Erhaltungsgleichungen für die auf dem Rechengitter aufgelösten Skalen berechnet, wohingegen die Fluktuation auf den unaufgelösten Skalen modelliert werden (siehe Kap. 2.2). Folglich wird in der Transportgleichung für den gefilterten Speziesmassenbruch (Gl. 2.23) der gefilterte Reaktionsquellterm $\bar{\omega}_k$ benötigt. Kennt

man die statistische Verteilung der in dem betrachteten Filtervolumen vorliegenden Zustände, kann $\bar{\omega}_k$ durch Integration über den thermochemischen Zustandsraum Ψ berechnet werden:

$$\bar{\omega}_k = \int_{\Psi} \dot{\omega}_k(\Psi) \tilde{\mathcal{P}}_{sgs}(\Psi) d\Psi. \quad (4.10)$$

Dabei ist $\tilde{\mathcal{P}}_{sgs}$ die gefilterte Verbund-Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF für engl. *Probability density function*) der Skalarfelder und $\dot{\omega}_k$ ist der ungefilterte Quellterm, welcher, wie oben beschrieben, über die Lösung eines Reaktionsmechanismus berechnet werden kann. Die Berechnung des gefilterten Quellterms stellt insbesondere vor dem Hintergrund limitierter Rechenzeit eine große Herausforderung dar und ist Gegenstand vieler Forschungsarbeiten. Eine Übersicht aktueller Ansätze bietet das von Echehki und Mastorakos editierte Buch [47]. Die Schwierigkeiten liegen insbesondere in der stark nichtlinearen Abhängigkeit des chemischen Reaktionsquellterms von Zusammensetzung und Temperatur sowie der hohen Dimensionalität des Problems begründet. Eine realistische Beschreibung der gefilterten PDF ist daher ein wichtiger Bestandteil der Modellierung turbulenter Flammen. Gleichzeitig sind sowohl die PDF-Modellierung als auch die Auswertung der Reaktionskinetik sehr rechenintensiv, was Vereinfachungen bzw. Reduktionsansätze in den meisten Anwendungen unumgänglich macht. Im Folgenden werden zwei unterschiedliche Modellierungen vorgestellt: Die Eulerian-stochastic-fields-Methode (ESF-Methode) und der Flamelet-Ansatz.

4.3.1 Die Eulerian-stochastic-fields-Methode

Ein Ansatz, um die chemischen Reaktionen auf den unaufgelösten Skalen zu beschreiben, ist es, die gefilterte Verbund-PDF der Skalarfelder $\tilde{\mathcal{P}}_{sgs}$ im Strömungsfeld zu transportieren. Die zeitliche Änderung der PDF kann dabei über eine Transportgleichung beschrieben werden, welche den Vorteil hat, dass der chemische Quellterm in geschlossener Form auftritt und für ihn kein weiteres Schließungsmodell benötigt wird. Im Folgenden werden die Grundlagen solcher Transportgleichungs-PDF-Verfahren (TPDF-Verfahren) vorgestellt und ein Modell zu deren Anwendung in der LES, die ESF-Methode, näher beschrieben. Eine detailliertere Beschreibung von TPDF-Verfahren finden sich in dem Buch von Pope [186] oder in den Übersichtsartikeln von Pope [187] und Haworth [76].

Grundlagen TPDF-Verfahren

Die momentane Verbund-PDF der Skalarfelder kann wie folgt ausgedrückt werden:

$$\mathcal{F}(\Psi; x, t) = \prod_{\alpha=1}^{N_s} \delta(\Psi_{\alpha} - \phi_{\alpha}(x, t)). \quad (4.11)$$

Sie beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass ein Strömungszustand $\phi(x, t)$ an einem Ort und zu einer Zeit im Strömungsfeld eintritt. Hierbei ist δ die Delta-Funktion, N_s gibt die Anzahl der Skalarfelder an. Bei reagierenden Strömungen ist man gewöhnlich ausschließlich an der Verbund-PDF interessiert, die den zur Berechnung der

Reaktionsquellterme notwendigen Zustandsraum beschreibt. Dieser umfasst neben einer Energievariable (hier die Enthalpie) die Spezieszusammensetzung, also die Massenbrüche aller an den Reaktionen beteiligter Spezies ($\phi = (h, Y_1, Y_2, \dots, Y_M)^T$).

Zur Berechnung der gefilterten Größen ist es zusätzlich notwendig die Verbund-PDF \mathcal{F} räumlich zu filtern. Analog zu dem in Kapitel 2.2.3 gezeigten Vorgehen kann die Favre-gefilterte Verbund-PDF über Faltung mit dem räumlichen Filter \mathcal{G} bestimmt werden:

$$\tilde{\mathcal{P}}_{sgs}(\Psi; x, t) = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_V [\mathcal{G}(x - x') \times \rho(x - x') \mathcal{F}(\Psi; x', t)] dx'. \quad (4.12)$$

Die Transportgleichung für $\tilde{\mathcal{P}}_{sgs}$ kann durch Bildung des totalen Differentials und Einsetzen der Energieerhaltung sowie der Speziestransportgleichung hergeleitet werden:

$$\begin{aligned} & \overbrace{\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathcal{P}}_{sgs}}{\partial t}}^{\text{I}} + \overbrace{\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\mathcal{P}}_{sgs}}{\partial x_j}}^{\text{II}} - \overbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial \tilde{\mathcal{P}}_{sgs}}{\partial x_i} \right)}^{\text{III}} + \overbrace{\sum_{\alpha=1}^{N_s} \frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} (\bar{\rho} \tilde{\omega}_\alpha \tilde{\mathcal{P}}_{sgs})}^{\text{IV}} \\ & = - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\bar{\rho} \tilde{u}_i - \bar{\rho} \tilde{u}_i) |_{\phi=\Psi} \tilde{\mathcal{P}}_{sgs} \right]}_{\text{V}} \\ & \quad - \underbrace{\sum_{\alpha=1}^{N_s} \sum_{\beta=1}^{N_s} \frac{\partial^2}{\partial \Psi_\alpha \partial \Psi_\beta} \left[\left(\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \phi_\beta}{\partial x_i} \right) |_{\phi=\Psi} \right] \tilde{\mathcal{P}}_{sgs}}_{\text{VI}}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Eine ausführliche Herleitung findet sich bei Gao und O'Brien [60] sowie in dem Buch von Gerlinger [62]. Die Terme auf der linken Seite von Gleichung 4.13 treten in geschlossener Form auf und müssen nicht weiter modelliert werden. Sie beschreiben die zeitliche Änderung (I), den konvektiven (II) und diffusiven (III) Transport auf den aufgelösten Skalen sowie die Änderung durch chemische Reaktionen (IV). Insbesondere werden keine weiteren Modelle zur Berechnung des chemischen Reaktionsquellterm $\tilde{\omega}_\alpha$ benötigt. Die beiden Terme auf der rechten Seite beschreiben den turbulenten Transport durch die unaufgelösten Geschwindigkeitsfluktuationen (V) und die molekulare Mischung (VI). Beide Terme treten in ungeschlossener Form auf und müssen modelliert werden. Der turbulente Transport wird dabei typischerweise über einen Gradienten-Diffusions-Ansatz beschrieben [85]:

$$- \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\bar{\rho} \tilde{u}_i - \bar{\rho} \tilde{u}_i) |_{\phi=\Psi} \tilde{\mathcal{P}}_{sgs} \right] = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_{sgs}}{Sc_{sgs}} \frac{\partial \tilde{\mathcal{P}}_{sgs}}{\partial x_i} \right). \quad (4.14)$$

Die Wirbelviskosität μ_{sgs} kann über eines der in Kapitel 2.2.5 vorgestellten Feinstrukturmodelle berechnet werden. Für den molekularen Mischungsterm existieren viele Modelle, welche jedoch alle nur bedingt gute Ergebnisse liefern [55]. In der vorliegenden Arbeit wird das IEM-Modell (engl. für *Interaction by Exchange with the Mean*) nach Villermaux und Devillon [227] verwendet, das unabhängig auch von Dopazo und O'Brien [46] unter dem Namen *Linear Mean-Square Estimation*

(LMSE) formuliert wurde:

$$\begin{aligned}
& - \sum_{\alpha=1}^{N_s} \sum_{\beta=1}^{N_s} \frac{\partial^2}{\partial \Psi_\alpha \partial \Psi_\beta} \left[\left(\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \phi_\beta}{\partial x_i} \Big|_{\phi=\Psi} \right) \tilde{\mathcal{P}}_{sgs} \right] = \\
& - \frac{1}{\tau_{sgs}} \sum_{\alpha=1}^{N_s} \frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left[\bar{\rho} (\Psi_\alpha - \tilde{\phi}_\alpha) \tilde{\mathcal{P}}_{sgs} \right].
\end{aligned} \tag{4.15}$$

Das IEM- oder LMSE-Modell beschreibt die Relaxation von $\tilde{\mathcal{P}}_{sgs}$ zum gefilterten Zustand und wurde in einer Vielzahl numerischer Arbeiten verwendet [85, 19, 76]. τ_{sgs} ist die Zeitskala der turbulenten Mischung. In der vorliegenden Arbeit wird diese mit dem von Mustata et al. [154] vorgeschlagenen Ansatz modelliert:

$$\frac{1}{\tau_{sgs}} = C_d \frac{\mu + \mu_{sgs}}{\bar{\rho} \Delta^2}. \tag{4.16}$$

C_d ist eine Konstante und hat den Wert 2.

Monte-Carlo Partikelverfahren

Zur numerischen Lösung der Transportgleichung für die gefilterte Verbund-PDF (Gl. 4.13) werden meist stochastische Monte-Carlo-Verfahren verwendet, welche maßgeblich von der Forschergruppe um Pope [185, 187] etabliert wurden. Die PDF wird dabei aus einer ausreichend großen Anzahl an Partikeln rekonstruiert. Diese können sowohl aus einer rein Eulerschen Betrachtungsweise [185] als auch aus einer Lagrangschen Betrachtungsweise [187, 190] heraus beschrieben werden. Bei den Euler-Methoden verharren die Partikel in einem Kontrollvolumen, bei der Lagrange-Methode bewegen sich die Partikel im Strömungsfeld. Beide Methoden wurden erfolgreich in LES [85, 190], RANS [153] sowie in gekoppelten RANS/LES-Verfahren [51] angewendet. Die Umsetzung bedingt jedoch eine hybride Code-Architektur, was zum einen Konsistenzprobleme zwischen dem Partikel- und dem Strömungsfeld verursachen kann [153, 27], zum anderen einen erheblichen Implementierungsaufwand bedeutet. Des Weiteren wird eine große Anzahl an Partikeln benötigt, um die PDF ausreichend genau zu beschreiben. Dies macht die Verwendung von Partikelverfahren numerisch sehr aufwendig.

Stochastische Felder

Eine Alternative zu den Partikelverfahren wurde von Valiño [225] vorgeschlagen und später von Sabel'nikov [196] vertieft. Hier wird die gefilterte Verbund-PDF durch kontinuierliche Felder repräsentiert, deren zeitliche Änderung durch eine stochastische Differentialgleichung beschrieben wird:

$$\tilde{\mathcal{P}}_{sgs}(\Psi; x, t) = \frac{1}{N_\zeta} \sum_{n=1}^{N_\zeta} \prod_{\alpha=1}^{N_s} \delta(\Psi_\alpha - \zeta_\alpha^n(x, t)). \tag{4.17}$$

Für jedes der $1 \leq \alpha \leq N_s$ durch die Verbund-PDF beschriebenen Skalarfelder werden $1 \leq n \leq N_\zeta$ stochastische Felder ζ_α^n eingeführt. Die stochastische Differentialgleichung der Felder wird hier in Itô-Form ausgedrückt:

$$\begin{aligned}
& \underbrace{d(\bar{\rho}\zeta_\alpha^n)}_{\text{I}} + \underbrace{\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \zeta_\alpha^n}{\partial x_i} dt}_{\text{II}} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_{sgs}}{Sc_{sgs}} \right) \frac{\partial \zeta_\alpha^n}{\partial x_i} \right] dt}_{\text{III}} \\
& = \underbrace{\bar{\rho} \sqrt{\frac{2}{\bar{\rho}} \left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_{sgs}}{Sc_{sgs}} \right) \frac{\partial \zeta_\alpha^n}{\partial x_j} dW_i^n}}_{\text{IV}} \\
& \quad - \underbrace{\frac{\bar{\rho}}{2\tau_{sgs}} (\zeta_\alpha^n - \tilde{\phi}_\alpha) dt}_{\text{V}} + \underbrace{\bar{\rho} \omega_\alpha^n (\zeta_\alpha^n) dt}_{\text{VI}}.
\end{aligned} \tag{4.18}$$

Für Details zu stochastischen Differentialgleichungen sei auf das Buch von Øksendal [161] verwiesen. Neben der zeitlichen Änderung (I), dem konvektiven (II) und diffusiven Transport (III) enthält die Differentialgleichung 4.18 den stochastischen Term (IV), die molekulare Mischung (V) und den chemischen Quellterm (VI). Der stochastische Prozess wird durch einen vektoriellen Wiener-Prozess

$$dW_i^n = \gamma_i^n \sqrt{dt} \quad ; \quad \gamma_i^n \in \{1; -1\} \tag{4.19}$$

beschrieben, welcher für jedes Feld n verschieden und ortsunabhängig ist. Der Zufallsvektor γ_i^n ist dichotomisch und die Summe über seine Elemente ist 0. Der stochastische Term ist proportional zur Wurzel des totalen Diffusionskoeffizienten, also der Summe aus molekularer und turbulenter Viskosität. Avdic [9] schlagen hingegen vor, nur die turbulente Diffusivität zur Berechnung des stochastischen Prozesses zu verwenden, da eine Berücksichtigung der molekularen Viskosität zu unphysikalischen Schwankungen in laminaren Strömungen führt. Vor dem Hintergrund, dass die in dieser Arbeit untersuchten Flammen stark turbulent sind, wird die Original-Formulierung von Valiño [225] (Gl. 4.18) verwendet. Die molekulare Mischung (V) wird über den IEM- oder LMSE-Ansatz (Gl. 4.15) modelliert, der chemische Quellterm tritt in geschlossener Form auf.

Die stochastischen Felder stellen keine physikalische Strömungsrealisierung dar. Sie repräsentieren vielmehr in ihrer Gesamtheit ein stochastisches System, das die PDF-Transportgleichung (Gl. 4.13) wiedergibt. Sind die stochastischen Felder bekannt, können die gefilterten Skalare sowie die höheren Momente rekonstruiert werden:

$$\tilde{\phi}_\alpha = \frac{1}{N_\zeta} \sum_{n=1}^{N_\zeta} \zeta_\alpha^n, \tag{4.20}$$

$$\phi_\alpha'^2 = \frac{1}{N_\zeta} \sum_{n=1}^{N_\zeta} \zeta_\alpha^{n2} - \tilde{\phi}_\alpha^2. \tag{4.21}$$

Die ESF-Methode wurde im Wesentlichen von der Gruppe um Jones für die LES weiterentwickelt und angewendet. Beispiele hierfür sind die Simulationen für

nicht-vorgemischte Verbrennung [154, 95], Zündung [94, 96] und vorgemischter Verbrennung unter Drall [93]. In den jüngsten Arbeiten wurde die Methode auch zur Simulation einer industrienahen Gasturbine [20, 21] sowie thermoakustischer Instabilitäten [92] verwendet. Die guten Ergebnisse in diesen Simulationen zeigen, dass die Methode in der Lage ist die Verlösch- und Rekombinationseffekte in Scherschichten und in wandnahen Strömungen wiederzugeben. Ein Nachteil der Methode ist jedoch der hohe numerische Aufwand, der mit der mehrmaligen Berechnung des Reaktionsmechanismus pro Zeitschritt verbunden ist. Trotz der gesteigerten Effizienz im Vergleich zu Partikelverfahren, ist die ESF-Methode daher numerisch sehr aufwändig. Um diesen Aufwand zu reduzieren, koppelten Kulkarni und Polifke [113] sowie Avdic [9] die ESF-Methode mit einer Tabellierung des chemischen Reaktionsquellterms. Hierdurch kann der Rechenaufwand reduziert werden, allerdings geht auch die Nichtlinearität des Reaktionsmechanismus teilweise verloren.

In der vorliegenden Arbeit wird bei Verwendung der ESF-Methode auf eine Tabellierung verzichtet und der Reaktionsmechanismus während der Simulation integriert. Es werden, wie in den Arbeiten von Jones et al. [94, 96, 93], $N_\zeta = 8$ stochastische Felder pro Skalarfeld verwendet.

Eine Validierung wurde anhand einer partiell vorgemischten Diffusionsflamme (Sandia Flamme D [13, 3]) durchgeführt. Ein Vergleich zwischen den vorhandenen experimentellen Messungen und den Simulationsergebnissen ist in Anhang D gezeigt.

4.3.2 Der Flamelet-Ansatz

Ein weit verbreiteter Ansatz, turbulente nicht-vorgemischte Verbrennung zu modellieren, ist der Flamelet-Ansatz, welcher hauptsächlich von der Gruppe um Peters entwickelt wurde [171, 172, 173]. Er wurde in zahlreichen Arbeiten sowohl in der RANS als auch in der LES verwendet. Beispiele für Simulationen bei unterkritischen Drücken sind die Arbeiten von Pitsch und Steiner [179], von Kemenov et al. [104] oder von Fureby [59]. Dass der Flamelet-Ansatz auch auf Strömungen in Raketenbrennkammern übertragbar ist, wurde von Lacaze und Oefelein [119] gezeigt. Anwendungen im RANS-Kontext finden sich in den Arbeiten von Cutrone et al. [39], Kim et al. [106] und Pohl et al. [181].

Grundidee

Der stationäre Flamelet-Ansatz basiert auf der Annahme, dass jedes Flammenelement in einer turbulenten Strömung die Struktur einer laminaren gestreckten Diffusionsflamme (Flamelet) aufweist. Somit lässt sich die turbulente Flamme als ein Ensemble von Flamelets beschreiben, welche mit der Strömung interagieren. Das hat den großen Vorteil, dass sich die Flamelets schon vorab berechnen und anhand geeigneter Parameter tabellieren lassen, wodurch die numerisch aufwendige Lösung des Reaktionsmechanismus während der LES umgangen wird. Der Flamelet-Ansatz stützt sich darauf, dass die Reaktionen in dünnen Schichten ablaufen, in denen die

chemischen Zeitskalen deutlich geringer sind als die der Strömung ($Da \gg 1$, siehe Abb. 4.2). In diesem Fall ist die Diffusion von Brennstoff und Oxidator ratenbestimmend für die Verbrennung. Die turbulenten Wirbel können die Flamme zwar strecken und damit ihre Form, insbesondere die Flammendicke, beeinflussen, jedoch werden im Rahmen des Flamelet-Ansatzes daraus resultierende Nichtgleichgewichtseffekte, wie etwa lokales Verlöschen und anschließendes Wiederzünden, nicht wiedergegeben. Auch den Effekt der Flammenwinkelung auf die Flammenstruktur wird nicht abgebildet. Der Gültigkeitsbereich des Flamelet-Ansatzes konnte allerdings in den Folgejahren der ersten Anwendung durch Erweiterungen ausgedehnt werden. Hier sei insbesondere auf die Einführung einer Reaktionsfortschrittsvariable [177] sowie transients Flamelets [135] zur Beschreibung von Zündverzug und Verlöschen verwiesen. Auch die Einführung nicht-adiabater Flamelets [127] zur Berücksichtigung von Strahlung oder Wandwärmeverlusten ist eine signifikante Weiterentwicklung.

Beim Flamelet-Ansatz nach Peters [171] wird jedes Flammenelement der Strömung durch eine gestreckte Diffusionsflamme beschrieben. Die Kopplung zwischen turbulenter Strömung und Flamelet erfolgt dabei im Wesentlichen über den dimensionslosen Mischungsbruch f . Dieser repräsentiert den lokalen Brennstoffanteil in einer Mischung und ist so definiert, dass er bei reinem Brennstoff den Wert 1, bei reinem Oxidator den Wert 0 annimmt:

$$f = \frac{\dot{m}_{Br}}{\dot{m}_{Br} + \dot{m}_{Ox}}. \quad (4.22)$$

Der Mischungsbruch bei stöchiometrischer Mischung wird oft verwendet, um die Position der Flamme in einer turbulenten Strömung zu markieren. Bei reiner CH_4/O_2 - Verbrennung ergibt sich $f_{st} = 0.2$.

Ein weiterer wichtiger Parameter ist die skalare Dissipationsrate

$$\chi = 2D_f |\nabla f|^2. \quad (4.23)$$

Sie kann als eine inverse Diffusionszeitskala betrachtet werden und wird verwendet, um die Flammenstreckung abzubilden. D_f ist der Diffusionskoeffizient von f .

Die Gegenstromdiffusionsflamme

Beim Flamelet-Ansatz wird die Flamme als Ansammlung gestreckter Diffusionsflammen oder Flamelets betrachtet, die vor der eigentlichen Strömungssimulation berechnet werden können. Bei nicht-vorgemischter Verbrennung wird hierfür in aller Regel die laminare Gegenstromdiffusionsflamme verwendet. Eine schematische Darstellung ist in Abbildung 4.3.2 gezeigt. Oxidator und Brennstoff strömen durch gegenüberliegende Düsen und formen eine stationäre Diffusionsflamme in ihrer Mitte. Diese Konfiguration bildet auf der Symmetrieachse ein Flammenelement der turbulenten Strömung ab, weswegen man hier nicht am zweidimensionalen Strömungsfeld sondern ausschließlich an der Lösung auf der Symmetrieachse interessiert ist. Wie von Peters [171, 173] gezeigt, lassen sich die Erhaltungsgleichungen für die

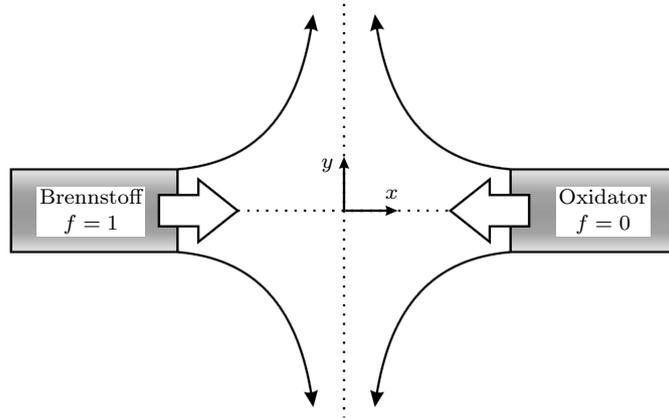


Abbildung 4.3: Schematische Darstellung einer laminaren Gegenstromdiffusionsflamme.

Gegenstromdiffusionsflamme auf ein eindimensionales System reduzieren. Des Weiteren lässt sich die Raumrichtung mittels geeigneter Koordinatentransformation durch den Mischungsbruch ersetzen. Die sogenannten stationären Flamelet-Gleichungen können dann im Mischungsbruchraum ausgedrückt werden:

$$\rho \frac{\chi_{st}}{2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial f^2} + \dot{\omega}_k = 0, \quad (4.24)$$

$$\rho \frac{\chi_{st}}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial f^2} + \frac{1}{c_p} \frac{\partial c_p}{\partial f} \frac{\partial T}{\partial f} \right) + \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^n h_k \dot{\omega}_k = 0. \quad (4.25)$$

Hierbei wurden gleiche Diffusionskoeffizienten für alle Spezies angenommen ($Le_k = 1$). h_k ist die spezifische Enthalpie der Spezies k . Der chemische Quellterm $\dot{\omega}_k$ kann durch Lösung des Reaktionsmechanismus berechnet werden. Des Weiteren wird davon ausgegangen, dass die Flammenfront dünn ist und die skalare Dissipationsrate am stöchiometrischen Punkt der Flamme berechnet werden kann:

$$\chi_{st} = 2D_f |\nabla f|_{st}^2. \quad (4.26)$$

Um die Streckung der Flamme durch die turbulente Strömung zu berücksichtigen, werden auch die Flamelet-Gleichungen für unterschiedliche Streckungsraten gelöst. Da die Streckung direkt mit der skalaren Dissipationsrate verknüpft ist, kann sie in der Berechnung durch die Wahl von χ_{st} in den Flamelet-Gleichungen festgelegt werden. Der Wertebereich ist dabei zum einen vom Limit der ungestreckten Flamme ($\chi_{st} \approx 0$) und zum anderen durch die Verlöschgrenze ($\chi_{st} = \chi_{ext}$) begrenzt. Um beim Bild der Gegenstromdiffusionsflamme zu bleiben, kann die Streckungsrate als Abstand der beiden Düsen bei gleichbleibendem Oxidator- und Brennstoffmassenstrom verstanden werden. Bei hohen Streckungsraten oder kleinem Düsenabstand sinkt die Verweildauer der Reaktanten in der Flamme, was bei Überschreiten des Grenzwerts χ_{ext} zum Verlöschen der Flamme führt. Liegen Flamelet-Lösungen für eine ausreichend große Zahl an Dissipationsraten zwischen diesen beiden Grenzen vor, kann das Ergebnis als Tabelle in der Form $T(f, \chi_{st})$, $Y_k(f, \chi_{st})$ hinterlegt werden.

Zur Lösung des durch die Flamelet-Gleichungen (Gln. 4.24 - 4.25) beschriebenen Problems stehen mehrere spezialisierte numerische Lösungsverfahren zur Verfügung. In der vorliegenden Arbeit wurde der maßgeblich von Pitsch entwickelte Löser *Flamemaster*¹ [178] verwendet. Bei der Berechnung der Flamelets wurden Realgaseffekte vernachlässigt und die Schließung der Flamelet-Gleichungen erfolgt über das ideale Gasgesetz. Diese Annahme wurde von Pohl et al. [181] sowie von Ribert et al. [194] für LOx/GH₂-Flammen bei überkritischen Drücken überprüft. Die Ergebnisse zeigen, dass die Flammenstruktur nur unwesentlich von der thermodynamischen Modellierung beeinflusst ist.

Filterung der Flamelet-Tabellen

In der LES werden nur die gefilterten Größen explizit berechnet und stehen zur Interpolation der Flamelet-Tabellen zur Verfügung. Es ist daher notwendig, das Ergebnis der Flamelet-Rechnungen zusätzlich mit einer Favre-gefilterten Verbund-PDF $\tilde{\mathcal{P}}_{sgs}(f, \chi_{st})$ für Mischungsbruch und skalare Dissipation zu filtern:

$$\tilde{Y}_k = \int_0^\infty \int_0^1 Y_k(f, \chi_{st}) \tilde{\mathcal{P}}_{sgs}(f, \chi_{st}) df d\chi_{st}, \quad (4.27)$$

$$\tilde{T} = \int_0^\infty \int_0^1 T(f, \chi_{st}) \tilde{\mathcal{P}}_{sgs}(f, \chi_{st}) df d\chi_{st}. \quad (4.28)$$

Wird weiterhin angenommen, dass die beiden Größen f und χ_{st} statistisch unabhängig sind, kann die Verbund-PDF aufgeteilt werden:

$$\tilde{\mathcal{P}}_{sgs}(f, \chi_{st}) = \tilde{\mathcal{P}}_{sgs}(f) \tilde{\mathcal{P}}_{sgs}(\chi_{st}). \quad (4.29)$$

Wenn auch oft diskutiert, ist die Annahme der statistischen Unabhängigkeit von f und χ_{st} für turbulente Strömungen gängig [48, 171, 172].

Im Gegensatz zu den TPDF-Methoden, die in Kapitel 4.3.1 beschrieben sind, wird zur Integration der Flamelet-Tabellen meist auf angenommene Verteilungen zurückgegriffen. So schlägt Effelsberg und Peters [48] beispielsweise eine logarithmische Normalverteilung für die PDF der skalaren Dissipationsrate vor. Häufig wird allerdings auf eine einfache Delta-Funktion zurückgegriffen:

$$\tilde{\mathcal{P}}_{sgs}(\chi_{st}) = \delta(\chi_{st} - \tilde{\chi}_{st}). \quad (4.30)$$

Dies stellt zwar eine, wenn auch gängige, Vereinfachung dar, hat aber den Vorteil, dass sich die Dimensionalität der Tabellierung reduziert.

Für die PDF des Mischungsbruchs wird eine β -Verteilung angenommen:

$$\tilde{\mathcal{P}}_{sgs}(f) = f^{\alpha-1} (1-f)^{\beta-1} \frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}. \quad (4.31)$$

¹www.itv.rwth-aachen.de/downloads/flamemaster/

Γ steht für die Eulersche Gammafunktion, α und β definieren die Form der PDF und sind abhängig vom gefilterten Mischungsbruch und dessen Varianz $\widetilde{f''^2}$:

$$\alpha = \widetilde{f} \left(\frac{\widetilde{f}(1-\widetilde{f})}{\widetilde{f''^2}} - 1 \right), \quad (4.32)$$

$$\beta = (1-\widetilde{f}) \left(\frac{\widetilde{f}(1-\widetilde{f})}{\widetilde{f''^2}} - 1 \right). \quad (4.33)$$

Nach der Integration können Spezieszusammensetzung und Temperatur in der Form $\widetilde{T}(\widetilde{f}, \widetilde{f''^2}, \widetilde{\chi}_{st})$, $\widetilde{Y}_k(\widetilde{f}, \widetilde{f''^2}, \widetilde{\chi}_{st})$ hinterlegt werden.

Die Strömungsgleichungen

Zur Verknüpfung der turbulenten Flammelemente mit den zuvor berechneten Flamelets muss in der LES der Mischungsbruch, dessen Varianz und die lokale skalare Dissipationsrate zur Verfügung stehen. Für den Mischungsbruch wird hierfür eine zusätzliche Transportgleichung gelöst:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \widetilde{f})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \widetilde{u}_i \widetilde{f})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left((D_f + D_f^{sgs}) \frac{\partial \widetilde{f}}{\partial x_i} \right). \quad (4.34)$$

Da der Mischungsbruch ein passiver Skalar ist, enthält Gleichung 4.34 keinen Quellterm und kann über ein Feinstrukturmodell (siehe Kap. 2.2.5) geschlossen werden. Der molekulare und der turbulente Diffusionskoeffizient D_f und D_f^{sgs} werden unter der Annahme einer konstanten Schmidt-Zahl berechnet:

$$D_f = \frac{\mu}{Sc}, \quad D_f^{sgs} = \frac{\mu_{sgs}}{Sc_{sgs}}. \quad (4.35)$$

Zur Berechnung der Varianz des Mischungsbruchs auf den unaufgelösten Skalen wird häufig auf algebraische Modelle, wie etwa dem der Skalenähnlichkeit von Cook and Riley [37] oder dem Equilibriumsansatz von Pierce und Moin [176], zurückgegriffen. Der von Knudsen et al. [111] durchgeführte Vergleich algebraischer SGS-Modelle für turbulente nicht-vorgemischte Verbrennung zeigt allerdings, dass Transportgleichungsmodelle im Vergleich zu DNS-Ergebnissen deutlich bessere Ergebnisse liefern können. In der vorliegenden Arbeit wird daher eine Transportgleichung für die Varianz des Mischungsbruchs gelöst:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\bar{\rho} \widetilde{f''^2})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \widetilde{u}_i \widetilde{f''^2})}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left((D_f + D_f^{sgs}) \frac{\partial \widetilde{f''^2}}{\partial x_i} \right) \\ &\quad - 2\bar{\rho} \widetilde{\chi}_{st} + 2 \left(D_f + D_f^{sgs} \right) \left(\frac{\partial \widetilde{f}}{\partial x_i} \right)^2. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Die skalare Dissipationsrate wird hingegen durch ein algebraisches Modell berechnet. Dieses setzt sich aus dem aufgelösten Mischungsbruchgradienten und

einem modellierten Feinstrukturanteil zusammen [82, 45]:

$$2\bar{\rho}\tilde{\chi}_{st} = 2D_f \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_i} \right)^2 + C_\chi D_f^{sgs} \frac{\tilde{f}''^2}{\Delta^2}. \quad (4.37)$$

Δ ist die lokale Filterweite und C_χ eine Modellkonstante mit dem Wert 2. Es wird weiterhin angenommen, dass die skalare Dissipation am Punkt der stöchiometrischen Mischung mit dem lokalen Mischungsbruchgradienten berechnet werden kann. Dies setzt voraus, dass die Flamme dünn und relevante Dissipationsraten nur in der Nähe der Stöchiometrie erreicht werden.

Bei Verwendung des idealen Gasgesetzes kann neben der Spezieszusammensetzung auch die Temperatur aus den Flamelet-Tabelle interpoliert werden. Die Energieerhaltung ist durch die Flamelet-Gleichungen (Gln. 4.24 - 4.25) sichergestellt und thermodynamisch mit dem Strömungsfeld konsistent. Dies ändert sich allerdings bei Verwendung einer kubische Zustandsgleichung. Durch die Druckabhängigkeit der kalorischen Zustandsgleichung (Gl. 3.14) ist die Energieerhaltung in der LES bei Verwendung der tabellierten Temperatur aufgrund des im turbulenten Strömungsfeld veränderlichen Drucks verletzt. Eine Möglichkeit der Verletzung der Energieerhaltung zu begegnen, ist die Einführung einer zusätzlichen Dimension in den Flamelet-Tabellen für den Druck. Dies bringt zum einen eine Vervielfachung des benötigten Arbeitsspeichers mit sich, zum anderen kann die Energieerhaltung aufgrund der Interpolationsungenauigkeit wiederum nicht vollständig gewährleistet werden. Wie von Lacaze und Oefelein [119] vorgeschlagen, wird in der vorliegenden Arbeit darauf verzichtet die Temperatur aus der Flamelet-Tabelle zu interpolieren. Stattdessen wird die Energieerhaltungsgleichung 2.24 gelöst und die Temperatur aus der transportierten Energie, der interpolierten Spezieszusammensetzung und dem berechneten Druck anhand der in Kapitel 3 beschriebenen thermodynamischen Beziehungen ermittelt. Dabei wird der Einfluss der Druckschwankungen auf die innere Struktur der Flamme vernachlässigt.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde eine Erweiterung für den quelloffenen Strömungslöser OpenFOAM entwickelt, die es ermöglicht die Flamelet-Gleichungen zu lösen, die resultierenden Tabellen zu integrieren und in RANS- sowie LES-Rechnungen zu verwenden. Ein Idealgas-Derivat der Implementierung wurde unter dem Namen *flameletFoam* veröffentlicht [146] und im Internet zum freien Download zur Verfügung gestellt². Wie auch für die Implementierung der ESF-Methode, wurde die Implementierung des Flamelet-Ansatz anhand einer partiell vorgemischten Diffusionsflamme (Sandia Flamme D [13, 3]) validiert. Ein Vergleich zwischen den vorhandenen Messergebnissen und der Simulation ist in Anhang D gezeigt.

²www.openfoamwiki.net/index.php/Extend-bazaar/solvers/combustion/flameletFoam

Kapitel 5

Numerische Methoden

5.1 Druckkorrekturverfahren

Für die Simulationen in den nachfolgenden Kapiteln wird der quelloffene Strömungslöser OpenFOAM¹ in der Version 2.3.0 verwendet. OpenFOAM verwendet ein Finite-Volumen-Verfahren zur Diskretisierung der Strömungsgleichungen und unterstützt unstrukturierte Netze. Eine Übersicht über viele der zur Verfügung stehenden Diskretisierungsverfahren und numerischen Lösungsansätze sowie eine Fehlerabschätzung der Methoden sind in der Arbeit von Jasak [91] gezeigt. Neuere Zusammenfassungen, die den aktuellen Entwicklungsstand abbilden, finden sich in der offiziellen Dokumentation [2] sowie in den Büchern von Maric et al. [126] und Moukalled et al. [144]. Für die Simulationen in dieser Arbeit werden zur räumlichen Diskretisierung zentrale Differenzen zweiter Ordnung verwendet. Unphysikalische Oszillationen werden mit der von van Leer [121] vorgeschlagenen Flusslimitierung gedämpft. Zur zeitlichen Diskretisierung wird ein implizites Euler-Verfahren erster Ordnung verwendet.

In Raketenbrennkammern werden die Treibstoffe subsonisch eingespritzt und erst in der Schubdüse auf Überschallgeschwindigkeit beschleunigt. Die Mach-Zahl der in dieser Arbeit untersuchten Anwendungen ist daher klein und die Strömung nur schwach kompressibel. Eine direkte Lösung der gefilterten Navier-Stokes-Gleichungen kann bei diesen Bedingungen numerisch ineffizient sein, da das Gleichungssystem steif wird. Dies liegt insbesondere daran, dass die Massenerhaltung zur kinematischen Randbedingung degeneriert und die Kontinuitätsgleichung nicht geeignet ist, um das dynamische Verhalten der Strömung zu beschreiben [52]. Aus diesem Grund müssen bei Verwendung direkter Lösungsmethoden sehr kleine Zeitschritte gewählt oder geeignete Prädiktionierungsverfahren verwendet werden. In dieser Arbeit wird daher auf ein druckbasiertes Lösungsverfahren zurückgegriffen, wodurch zum einen die Steifigkeit der Strömungsgleichungen reduziert wird und zum anderen größere Zeitschritte verwendet werden können. Das Verfahren basiert auf dem PISO-Algorithmus (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*). Statt

¹www.openfoam.com

die gefilterte Kontinuitätsgleichung direkt zu lösen, wird die Massenerhaltung in die diskretisierte Impulserhaltungsgleichung eingesetzt, um eine Poisson-Gleichung für den Druck herzuleiten. Diese wird gelöst und das Geschwindigkeitsfeld sowie die Dichte werden mit dem berechneten Druck korrigiert. Der Schritt wird wiederholt, bis die Massenerhaltung gewährleistet ist und alle Felder konvergiert sind. Das Verfahren wurde von Issa [83] für inkompressible Strömungen entwickelt und später für kompressible Anwendungen erweitert [84].

In druckbasierten Lösungsverfahren wird oft impliziert, dass der thermodynamische Zustand durch das ideale Gasgesetz beschrieben werden kann. Ist dies nicht der Fall, muss die Herleitung der Druckgleichung überarbeitet werden. Jarczyk und Pfitzner [87] schlagen einen für die PR-ZGL adaptierten Lösungsalgorithmus vor, der sich von der Formulierung von Issa et al. [84] im Wesentlichen durch folgende Punkte unterscheidet:

- In der Herleitung der Druckgleichung wird ein funktionaler Zusammenhang zwischen Dichte- und Druckänderung benötigt. Bei idealen Gasen sind die beiden Größen direkt proportional, wohingegen die PR-ZGL einen nichtlinearen Zusammenhang beschreibt. Jarczyk und Pfitzner [87] schlagen daher eine Taylor-Entwicklung für die Dichte zur Linearisierung der PR-ZGL vor.
- Bei hohen Drücken sind die Zustandsgrößen, auch die kalorischen, druckabhängig. Es ist daher notwendig deren Berechnung und die Lösung der Energieerhaltungsgleichung in die Druckkorrekturschleife einzubinden.
- In dem hier verwendeten Lösungsverfahren werden die einzelnen Gleichungen getrennt voneinander berechnet, d. h. während der Lösung einer Gleichung bleiben alle anderen Lösungsgrößen konstant. Die Druckkorrekturgleichung wird daher bei konstanter Enthalpie gelöst. Die thermodynamischen Ableitungen in der Druckgleichung müssen folglich bei isenthalper Bedingung berechnet werden. Dies gilt insbesondere für die Kompressibilität $\psi_h = \partial\rho/\partial p|_h$ (siehe Anhang B).

Die Druckgleichung kann dann, wie von Jarczyk und Pfitzner [87] gezeigt, wie folgt hergeleitet werden:

$$\frac{\partial (\bar{\rho}^0 - \psi_h^0 \bar{p}^0)}{\partial t} + \frac{\partial \psi_h^0 \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \frac{H_p}{A_p} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\bar{\rho}}{A_p} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \right) = 0. \quad (5.1)$$

Der Index 0 steht für den Entwicklungspunkt der Taylorreihe, welche zur Linearisierung der PR-ZGL verwendet wird. Hierzu wird die Lösung des vorhergehenden Zeitschritts verwendet. A_p ist die Koeffizientenmatrix, H_p der Quellterm der diskretisierten Impulsgleichung. Der erste Term auf der linken Seite von Gleichung 5.1 erfüllt genau die ideale Gasgleichung, kann aber bei Verwendung einer kubischen Zustandsgleichung nicht vernachlässigt werden.

5.2 Die Strömungslöser

In OpenFOAM stehen zusätzlich zu den numerischen Verfahren eine breite Basis an physikalischen Modellen zur Verfügung, die aufgrund der objektorientierten Programmierung vergleichsweise einfach ergänzt werden kann. So wurde in der Arbeit von Jarczyk [89] die zur Verfügung stehende thermodynamische Modellierung um die PR-ZGL für Mischungen erweitert. Aufbauend auf dieser Implementierung wird OpenFOAM in der vorliegenden Arbeit um die in Kapitel 3.2.2 vorgestellte Abudour-Korrektur sowie um die ESF-Methode (Kapitel 4.3.1) und den Flamelet-Ansatz (Kapitel 4.3.2) erweitert. Die entwickelten Strömungslöser werden im folgenden Kapitel vorgestellt.

5.2.1 RGFoam

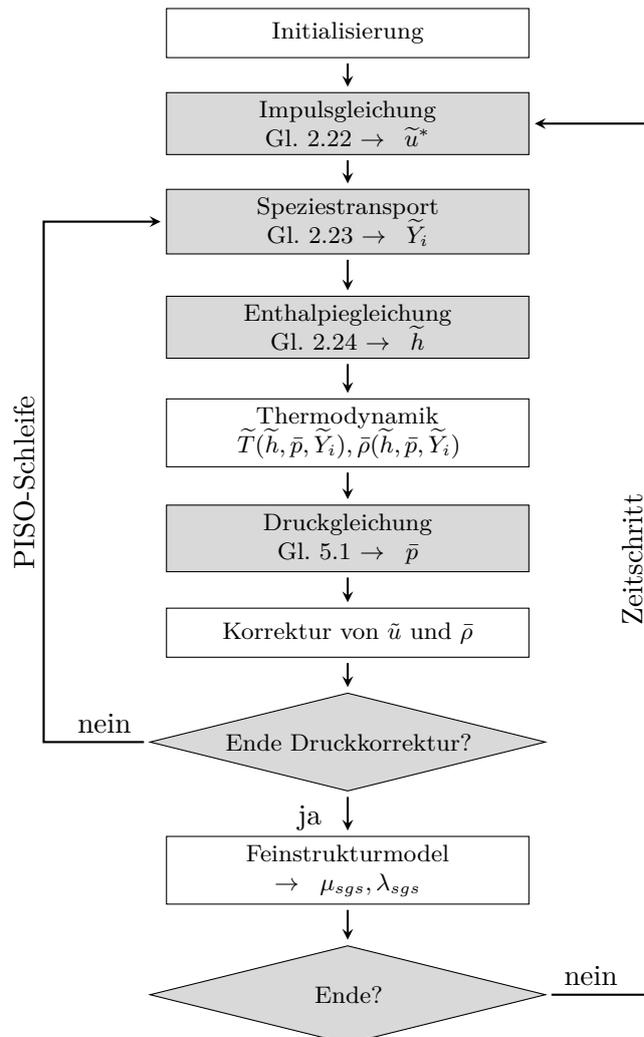


Abbildung 5.1: Lösungsalgorithmus RGFoam.

Für inerte Mehrkomponentenströmungen wird der Löser RGFoam verwendet. Die wichtigsten Lösungsschritte sind in Abbildung 5.1 skizziert. Weiße Rechtecke stehen dabei für die Ausführung expliziter Rechenoperationen, wohingegen Graue die iterative Lösung einer Differentialgleichung anzeigen.

Zu Beginn eines Zeitschritts wird die Impulserhaltungsgleichung mit dem Druck und der Dichte aus dem vorhergehenden Zeitschritt gelöst und somit ein Zwischenergebnis für das neue Geschwindigkeitsfeld \tilde{U}^* berechnet. Mit dem sich ergebenden Fluss wird die Speziestransport- und die Enthalpiegleichung gelöst. Anhand der neuen Zusammensetzung \tilde{Y}_i und der Enthalpie \tilde{h} werden im nächsten Schritt die anderen benötigten thermodynamischen Zustandsgrößen berechnet. Die Berechnung der Temperatur erfolgt iterativ. Dabei wird ein stabiles Verfahren benötigt, da insbesondere in der Nähe des kritischen Punkts große Gradienten auftreten (siehe Abbildung 3.3). Effiziente, jedoch nur bedingt stabile Methoden wie das Newton-Verfahren, können daher in den hier betrachteten Anwendungen nicht verwendet werden. Stattdessen wird auf das Verfahren von Dekker [43] zurückgegriffen, das die Bisektionsmethode mit dem Sekanten-Verfahren kombiniert, und auch in der Nähe des kritischen Punkts konvergiert. Nach der iterativen Bestimmung der Temperatur können die anderen, zur Lösung des Gleichungssystems benötigten Größen, Dichte ρ , isenthalpe Kompressibilität ψ_h , Viskosität μ und thermische Leitfähigkeit λ mit den in Kapitel 3 gezeigten Zusammenhängen berechnet werden.

Nun wird ein neuer Druck durch die Lösung der Druckkorrekturgleichung 5.1 berechnet und der numerische Fluss so korrigiert, dass die Massenerhaltung gewährleistet ist. In einem weiteren Schritt werden das Geschwindigkeitsfeld sowie die Dichte mit dem neuen Druck korrigiert. Bei der Betrachtung idealer Gase ist es ausreichend die letzten beiden Schritte mehrmals zu wiederholen, um eine ausreichende Kopplung von Geschwindigkeit, Druck und Dichte zu erzielen. Durch die starke Kopplung der thermodynamischen Zustandsgrößen und der Druckabhängigkeit der Enthalpie ist es bei überkritischen Strömungen jedoch notwendig die PISO-Schleife zu erweitern. So werden die Spezies- und die Enthalpiegleichung in die Druckkorrekturschleife eingebunden und folglich auch die Berechnung der thermodynamischen Größen wiederholt. Nur so kann bei den hier untersuchten Testfällen eine ausreichende Kopplung der Strömungsfelder und letztlich ein konvergentes Löserverhalten erzielt werden.

Für alle hier betrachteten Testfälle wird die PISO-Schleife in jedem Zeitschritt dreimal durchlaufen. Danach werden die Feinstrukturgrößen μ_{sgs} und λ_{sgs} bestimmt und der nächste Zeitschritt berechnet.

5.2.2 RGflameletFoam

Der in Kapitel 4.3.2 vorgestellte Flamelet-Ansatz für reale Fluide wird in dem Löser RGflameletFoam umgesetzt. Der verwendete Algorithmus ist in Abbildung 5.2 skizziert.

Nach Berechnung des vorläufigen Geschwindigkeitsfelds \tilde{U}^* wird hier statt der

Speziestransportgleichung die Transportgleichung für den Mischungsbruch \tilde{f} gelöst. Mit dem neuen Mischungsbruchfeld wird daraufhin die skalare Dissipationsrate $\tilde{\chi}_{st}$ berechnet und anschließend die Transportgleichung für die Varianz des Mischungsbruchs \tilde{f}''^2 gelöst. Im Rahmen des Flamelet-Ansatzes definieren diese drei Größen die lokale Flammenstruktur. Die lokale Spezieszusammensetzung kann somit aus den im Vorfeld erstellten Flamelet-Tabellen entnommen werden.

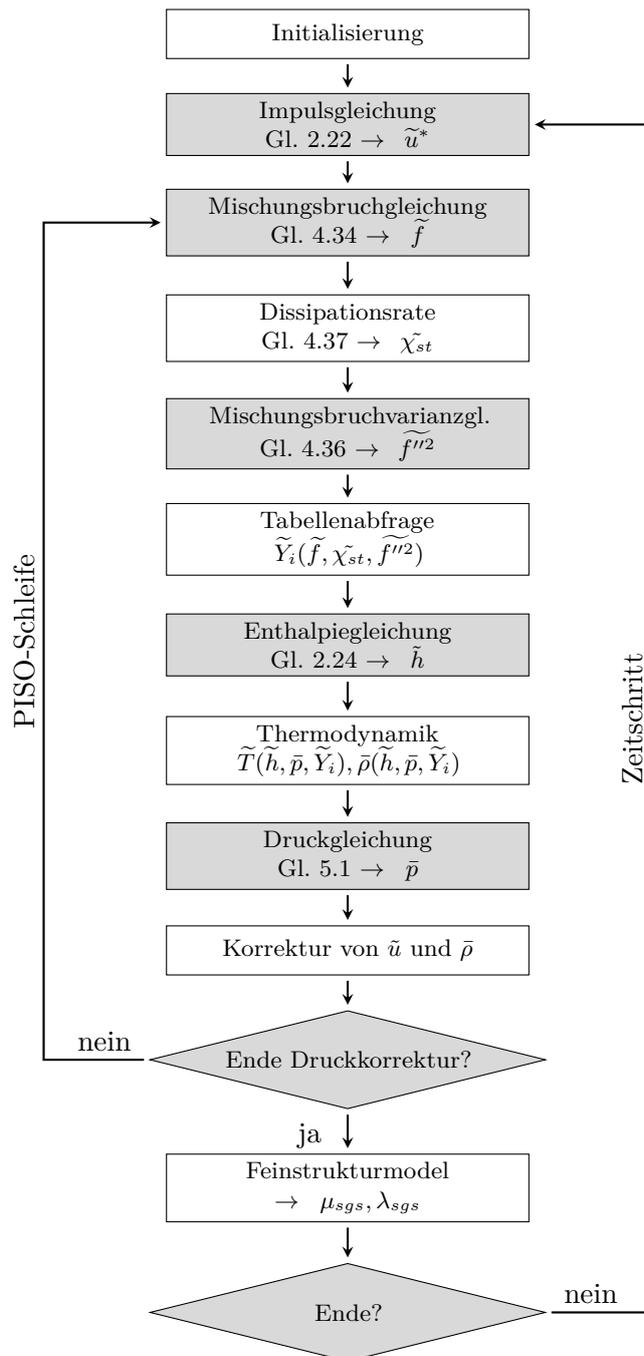


Abbildung 5.2: Lösungsalgorithmus RGflameletFoam

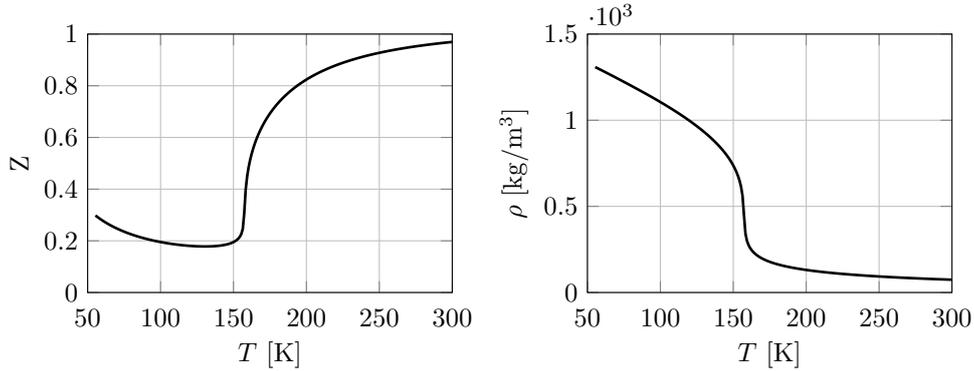


Abbildung 5.3: Dichte und Kompressibilitätsfaktor als Funktion der Temperatur für O_2 bei $p = 5.61$ MPa.

Zur Abfrage der benötigten Strömungsgrößen werden dreidimensionalen Tabellen verwendet, deren Stützstellen beliebig verteilt werden können. Somit kann die Tabellenaufösung in Bereichen starker Gradienten, insbesondere in der Nähe der stöchiometrischen Mischung, verfeinert werden, um den Interpolationsfehler zu verringern. Das Tabellenelement, in dem sich der zu den berechneten Werten von \tilde{f} , $\tilde{\chi}_{st}$ und \tilde{f}''^2 passende Zustand befindet, wird durch die Bisektionsmethode bestimmt. Anschließend wird die Zusammensetzung \tilde{Y}_i durch eine trilineare Interpolation ermittelt.

Wie in Kapitel 4.3.2 diskutiert, ist es bei der Verwendung einer kubischen Zustandsgleichung aus Gründen der Energieerhaltung notwendig, eine separate Erhaltungsgleichung für die Enthalpie zu lösen, anstatt die Temperatur direkt aus den Flamelet-Tabellen zu beziehen. Die Temperatur wird dann, wie zuvor beschrieben, iterativ mit der transportierten Enthalpie \tilde{h} , der tabellierten Zusammensetzung \tilde{Y}_i und dem Druck bestimmt. Die anderen thermodynamischen Größen können wiederum über die Zustandsgleichung berechnet werden. Die Lösung der Druckkorrekturgleichung, die Flusskorrektur und die Neuberechnung des Geschwindigkeitsfelds laufen wie im zuvor vorgestellten Löser RG Foam ab. Auch hier wird die PISO-Schleife erweitert und die Berechnung der Größen \tilde{f} , $\tilde{\chi}_{st}$ und \tilde{f}''^2 sowie die Tabellenabfrage werden in jeder Druckkorrekturschleife neu ausgeführt.

Künstliche numerische Dissipation

Ein Merkmal der Verbrennung in Raketenbrennkammern sind die hohen Gradienten, die im Strömungsfeld auftreten. Bei transkritischer Einspritzung liegen die typischen Einspritztemperaturen des Oxidators im Bereich $80 \text{ K} < T < 120 \text{ K}$ und die Dichte übersteigt oftmals $\rho \approx 1000 \text{ kg/m}^3$. Gleichzeitig werden in der Flamme bei der Verwendung von Methan als Treibstoff Temperaturen in einer Größenordnung von $T \approx 3500 \text{ K}$ erreicht und die Dichte sinkt auf Werte um $\rho \approx 1 \text{ kg/m}^3$. Insbesondere die extremen Dichtegradienten können zu Überschwingern bei der Berechnung der numerischen Flüsse führen. Bei der Simulation der transkritischen Einspritzung wird daher oft auf spezielle Dämpfungsmethoden zurückgegriffen. Schmitt et al. [199] stabilisieren beispielsweise ihre Simulationen in Bereichen hoher

Dichtegradienten durch die Einführung einer künstlichen Viskosität, deren Größe sich nach dem lokalen Dichtegradienten richtet. Auch Terashima et al. [221] beschäftigen sich mit der Entwicklung geeigneter Dämpfungsmethoden zur stabilen Gleichungsdiskretisierung in Realgasströmungen.

In der vorliegenden Arbeit wird daher bei den Simulationen, in denen der Flamelet-Ansatz verwendet wird, eine künstliche numerische Dissipation in die Enthalpie- und Mischungsbruchgleichung eingeführt. Das Vorgehen orientiert sich dabei im Wesentlichen an den Arbeiten von Cook [36] und Kawai et al. [100]. Der turbulente Wärmestrom q_i^{sgs} in der gefilterten Enthalpiegleichung 2.24 sowie der Diffusionskoeffizient D_f^{sgs} in der gefilterten Transportgleichung für den Mischungsbruch 4.34 wird mit der künstlichen Viskosität μ^* beaufschlagt:

$$q_i^{sgs} = -C_p \left(\frac{\mu_{sgs}}{Pr_{sgs}} + \mu^* \right) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i}, \quad (5.2)$$

$$D_f^{sgs} = \frac{\mu_{sgs}}{Sc_{sgs}} + \mu^*. \quad (5.3)$$

Die numerische Viskosität μ^* soll möglichst nur in den Bereichen, in denen Überschwinger bei der Diskretisierung auftreten, ungleich null sein. Da die Überschwinger bei den hier betrachteten Strömungen im Wesentlichen auf hohe Dichtegradienten zurückzuführen sind, wird die Dichteänderung häufig als Sensor für μ^* verwendet. Es hat sich allerdings gezeigt, dass die Dämpfung hierdurch auch in Bereichen, in denen keine numerischen Überschwinger auftreten, aktiv ist. Ein Sensor, der den Bereich, in dem die numerische Dissipation benötigt wird, besser beschreibt, ist der Kompressibilitätsfaktor Z (Gl. 3.2). In Abbildung 5.3 ist ein Vergleich der Verläufe von Kompressibilitätsfaktor und Dichte für O_2 bei $p = 5.61$ MPa gezeigt. Der Kompressibilitätsfaktor erfährt bei der Pseudo-Siedetemperatur eine starke Änderung und nähert sich mit steigender Temperatur asymptotisch dem Wert 1 an. Oberhalb einer Temperatur, die in etwa der dreifachen kritischen Temperatur der betrachteten Spezies entspricht, ist der Kompressibilitätsfaktor nahezu konstant. Bei Verwendung des Kompressibilitätsfaktors als Sensor ist die numerische Viskosität daher nur bei kalten Temperaturen, insbesondere in der Nähe der Widom-Linie aktiv.

Folgende Formulierung wird in der vorliegenden Arbeit für die numerische Viskosität verwendet:

$$\mu^* = C_\mu \bar{\rho} a_s \Delta^2 \left| \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right|. \quad (5.4)$$

a_s ist die Schallgeschwindigkeit, die, wie in Anhang B gezeigt, berechnet werden kann. Δ ist die lokale Filterweite und C_μ eine Modellkonstante. In den nachfolgenden Simulationen wird der Wert $C_\mu = 0.01$ verwendet.

5.2.3 RGstochasticFieldsFoam

Der Löser `RGstochasticFieldsFoam` ermöglicht die Simulation turbulenter Realgasverbrennung mit der in Kapitel 4.3.1 vorgestellten ESF-Methode. Der Algorithmus ist in Abbildung 5.4 gezeigt.

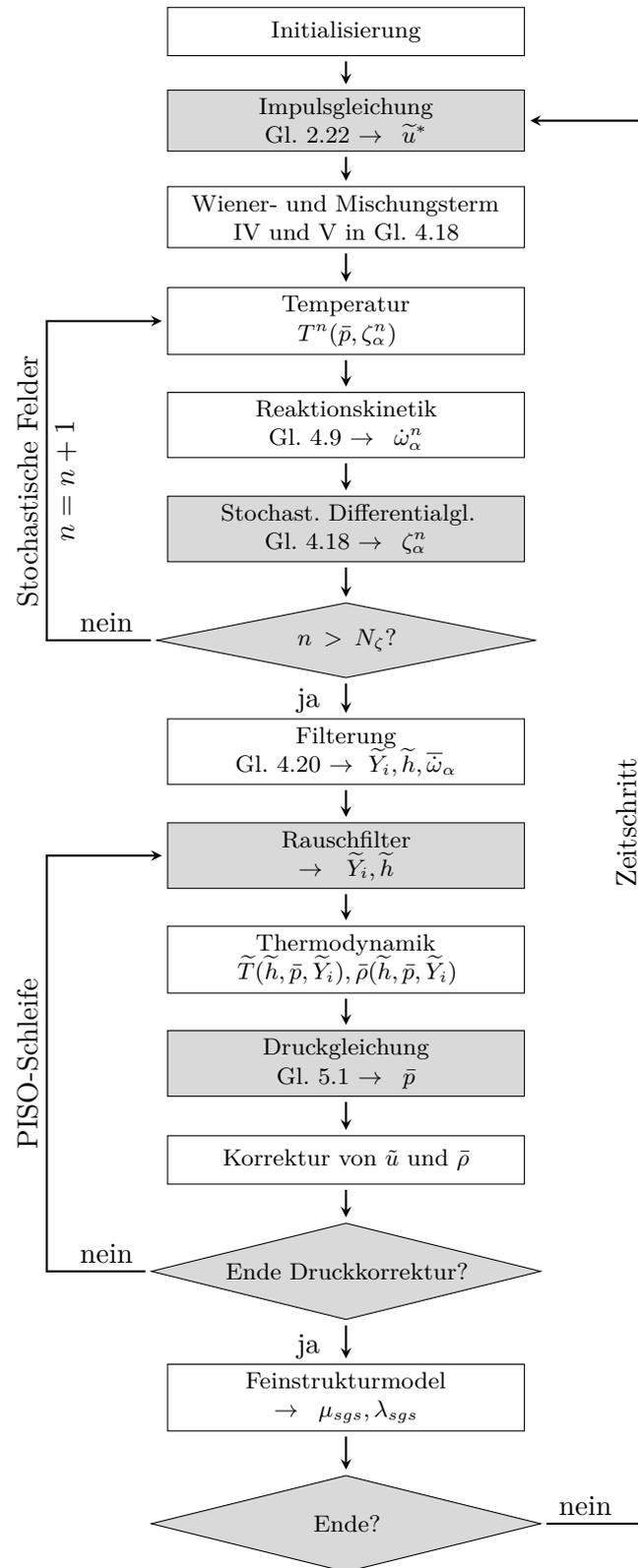


Abbildung 5.4: Lösungsalgorithmus RGstochasticFieldsFoam

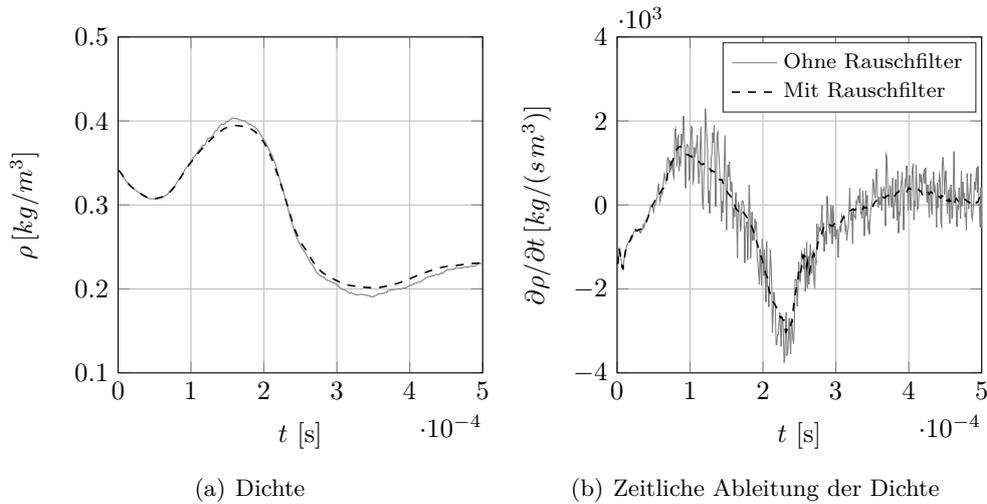


Abbildung 5.5: Dichtesignal und dessen zeitliche Ableitung in einer turbulenten Diffusionsflamme: Verifizierung des Rauschfilters.

Zu Beginn der Rechnung werden die stochastischen Skalarfelder ζ_α^n mit den gefilterten Speziesmassenbrüchen und der gefilterten Enthalpie initialisiert, d. h. alle N_ζ stochastische Felder eines Skalars α sind gleich, die PDF hat die Form einer Delta-Funktion. Nach der Lösung der Impulserhaltungsgleichung werden der Wiener-Prozess und der molekulare Mischungsterm zur Lösung der Differentialgleichung 4.18 berechnet. Dies geschieht vor der Lösung der stochastischen Differentialgleichung, um sicherzustellen, dass die Summe des dichotomischen Zufallsvektors η_i^n null ist.

Danach wird sequentiell für alle N_ζ Sets an stochastischen Feldern die zugehörige Temperatur berechnet, die Reaktionsraten bestimmt und anschließend die stochastische Differentialgleichung gelöst. Die berechnete Temperatur T^n ist nicht als physikalischer Wert zu verstehen, kann aber den korrespondierenden stochastischen Feldern zugeordnet werden. Sie wird benötigt, um im darauffolgenden Schritt die Reaktionsraten $\dot{\omega}_\alpha^n$ zu berechnen. Hierzu wird der zugrunde liegende Reaktionsmechanismus, wie in Kapitel 4.2 beschrieben, integriert. Im Anschluss kann die stochastische Differentialgleichung 4.18 für alle N_s Skalarfelder (Spezies und Enthalpie) eines stochastischen Sets n gelöst werden. Die Schritte Temperaturberechnung, Bestimmung der Reaktionsraten und Lösung der stochastischen Differentialgleichung werden dann für die übrigen stochastischen Felder wiederholt.

Nun können die gefilterten Werte der Speziesmassenbrüche, der Enthalpie und der Reaktionsquellterme durch Mittelung über alle stochastischen Felder berechnet werden (Gl. 4.20). Wie in Kapitel 4.3.1 beschrieben, sind die stochastischen Felder zwar kontinuierlich und stetig differenzierbar im Raum, allerdings nicht stetig differenzierbar in der Zeit. Dies schlägt sich in einem hochfrequenten Rauschen in den aus den stochastischen Feldern abgeleiteten Größen nieder und kann unter Umständen zu einem instabilen Löserverhalten führen. Aus diesem Grund wird, wie von Prasad [189] vorgeschlagen, ein Rauschfilter zwischengeschaltet. Hierzu

wird zunächst der gefilterte chemische Quellterm

$$\bar{\omega}_\alpha = \frac{1}{N_\zeta} \sum_{n=1}^{N_\zeta} \dot{\omega}_\alpha(\zeta_\alpha^n) \quad (5.5)$$

berechnet. Anschließend werden die Transportgleichungen für die gefilterten Skalarfelder \tilde{Y}_i (Gl. 2.23) und \tilde{h} (Gl. 2.24) mit Hilfe des gefilterten chemischen Quellterms gelöst. Die Initialisierung der Gleichungen erfolgt dabei über die Mittelung der stochastischen Felder (Gl. 4.20), wobei die Werte zu Beginn des aktuellen Zeitschritts verwendet werden. Nach der Lösung der gefilterten Transportgleichung stehen wiederum alle Größen zur Verfügung, um die thermodynamischen Zustandsgrößen zu berechnen. Eine genauere Beschreibung des Vorgehens sowie eine Abschätzung des Fehlers, der mit der Filterung einhergeht, findet sich bei Prasad [189].

Das Rauschen, welches insbesondere in den zeitlichen Ableitungen der thermodynamischen Größen auftritt, kann dadurch merklich gedämpft und die Stabilität verbessert werden. In Abbildung 5.5 sind das ungefilterte sowie das gefilterte Dichtesignal und dessen zeitliche Ableitung gezeigt. Die Werte stammen aus der in Anhang D vorgestellten LES einer turbulenten Diffusionsflamme (Sandia Flamme D). Der eingebaute Rauschfilter dämpft die starken Fluktuationen in der zeitlichen Ableitung, ohne den zeitlichen Verlauf selbst signifikant zu beeinflussen.

Die anschließende Druckkorrektur wird analog zu den beiden zuvor vorgestellten Lösungsalgorithmen durchgeführt. Die erweiterte PISO-Schleife beinhaltet hierbei die Lösung der gefilterten Transportgleichungen, welche bei jeder Iteration mit den stochastischen Feldern initialisiert werden.

Kapitel 6

Simulationsergebnisse

6.1 Trans- und überkritische N_2 - Einspritzung

In diesem Kapitel wird der Einfluss der Volumenkorrekturmethode und der Feinstrukturmodellierung in der LES transkritischer Einspritzung untersucht. Hierzu wird ein Testfall verwendet, der im Vergleich zu industriellen Raketenbrennkammern deutlich weniger komplex ist. So können einzelne physikalische Effekte isoliert betrachtet werden. Bei dem Einzelinjektor-Testfall wird transkritischer Stickstoff in eine Druckkammer eingespritzt, die mit warmem Stickstoff gefüllt ist. Die thermodynamischen Zustände bei der Einspritzung ähneln denen in Raketenbrennkammern, chemische Reaktionen und Mehrstoff-Mischungseffekte werden allerdings von der Betrachtung ausgeschlossen. Dies hat zum einen den Vorteil, dass der Effekt der Fluideigenschaften bei transkritischer Einspritzung auf das Mischungsverhalten eines Strahls isoliert und mit überschaubarem numerischen Aufwand untersucht werden kann. Zum anderen sind inerte Strömungen experimentell leichter zugänglich und es stehen in der Literatur quantitative Messungen zur Bewertung der LES-Ergebnisse zur Verfügung.

6.1.1 Beschreibung des Testfalls

Der untersuchte Testfall wurde auf dem zweiten *International Workshop on Rocket Combustion Modeling* [220] vorgestellt und dort von anderen teilnehmenden Gruppen simuliert. Die hier zur Bewertung der LES-Ergebnisse verwendeten Messdaten entstammen einer späteren Publikation von Mayer et al. [138], in der die Messreihe ausgeweitet und die Messtechnik detaillierter beschrieben wurde. In den Experimenten wird gekühlter Stickstoff in eine mit warmem Stickstoff ($T_k = 298$ K) gefüllte Kammer eingespritzt. Die Einspritzgeschwindigkeiten werden zwischen 1.8 m/s und 5.4 m/s, die Kammerdrücke zwischen 3.95 MPa und 5.98 MPa variiert. Die Mischung in der Kammer findet also bei überkritischem Druck statt ($p_k > p_{c, N_2} = 3.4$ MPa). Die Temperatur des eingespritzten Stickstoffs wird im Bereich von 122 K bis 140 K verändert, was zur Folge hat, dass einige Betrieb-

	Case 3	Case 4
u_{in} [m/s]	4.9	5.4
p_k [MPa]	3.97	3.98
T_{in} [K]	126.9	137.0
ρ_{in}^1 [kg/m ³]	457.82	164.37
\dot{m}_{in}^1 [g/s]	8.53	3.37
Re^1 [-]	1.62×10^5	1.53×10^5
Ma^1 [-]	0.019	0.027

Tabelle 6.1: Experimentelle Randbedingungen von Mayer et al. [138].

spunkte im transkritischen, andere im überkritischen Bereich liegen (Abb. 3.1). Der Durchmesser des Injektors beträgt $D = 2.2$ mm. Die Kammer ist mit einem optischen Zugang ausgestattet, was den Einsatz der Raman-Spektroskopie zur Dichtemessung ermöglicht.

Es werden zwei der von Mayer et al. untersuchten Betriebspunkte simuliert: Case 3 und Case 4. Die Notation wird dabei unübersetzt aus der Originalveröffentlichung übernommen. Die gemessenen Betriebsbedingungen sind in Tabelle 6.1 zusammengefasst. Sowohl der Kammerdruck als auch die Einspritzgeschwindigkeit ist bei beiden Testfällen nahezu gleich. Den Hauptunterschied stellt die Temperaturdifferenz am Einlass dar. In Case 3 ist die Einspritztemperatur so gewählt, dass der Stickstoff im transkritischen Zustand vorliegt, die Temperatur also knapp unter der Pseudo-Siedetemperatur von hier $T_{pb} = 129.6$ K liegt. Die thermodynamischen Eigenschaften ähneln somit denen einer Flüssigkeit. In Case 4 ist die Einspritztemperatur um 10 K höher. Der Stickstoff ist folglich überkritisch und seine Eigenschaften ähneln denen eines Gases.

Trotz der Verwendung moderner Messtechnik geben Mayer et al. [138] an, dass die Messung der Einlasstemperatur mit einer recht großen Messungenauigkeit behaftet ist. Diese resultiert zum einen aus der Störung des Strömungsfelds bei der Verwendung nicht berührungsfreier Messmethoden, zum anderen aus dem Wärmeeintrag im Injektor. In der Nähe der Widom-Linie sind Zustandsgrößen, wie beispielsweise die Dichte, jedoch stark von der Temperatur abhängig und Ungenauigkeiten bei der Messung können sich erheblich auf den daraus berechneten Massenstrom auswirken. Für die LES wird daher eine alternative Methode zur Bestimmung der Einspritztemperatur verwendet. Aus den Dichtemessungen im Kern des Strahls kann die Dichte am Einlass abgeschätzt werden. Für Case 3 ergibt sich $\rho_{3,in}^{Fit} = 398$ kg/m³, statt der sich aus der Temperaturmessung ergebenden $\rho_{3,in} = 457.82$ kg/m³ (siehe Tabelle 6.1). Zusammen mit dem gemessenen Kammerdruck kann dann eine Einspritztemperatur berechnet werden. In Abbildung 6.1 ist der Dichteverlauf entlang einer Isobaren beim Kammerdruck von Case 3 zusammen mit der gemessenen und der berechneten Einspritztemperatur gezeigt. Legt man der Berechnung die Referenzdaten von NIST zugrunde, ergibt sich $T_{3,in}^{Fit} = 128.53$ K. Die Differenz zur gemessenen Einspritztemperatur beträgt lediglich $\Delta T = 1.55$ K,

¹Die Werte wurden mit Daten des NIST [1] berechnet.

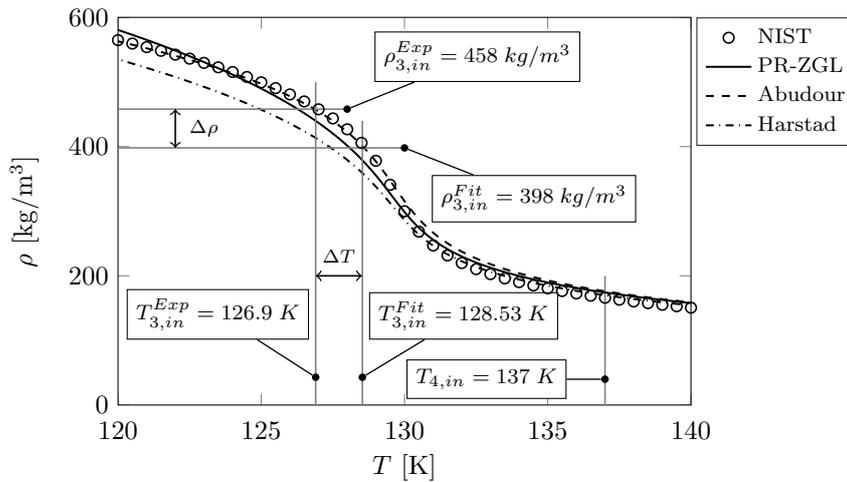


Abbildung 6.1: Thermodynamischer Zustand am Einlass der trans- und überkritischen N₂ - Einspritzung.

die zugehörige Dichtedifferenz jedoch $\Delta\rho = 59.8 \text{ kg/m}^3$. Durch die Verwendung der angepassten Einspritztemperatur kann die Inkonsistenz zwischen den gemessenen Randbedingungen und der im Strömungsfeld gemessenen Dichte vermieden und die thermodynamische Modellierung besser bewertet werden. So würde beispielsweise eine thermische Zustandsgleichung, deren Ergebnis für die Dichte am Einlass um $\Delta\rho = 59.8 \text{ kg/m}^3$ zu hoch ist, die Messdaten im Strömungsfeld genau treffen.

6.1.2 Beschreibung der numerischen Simulation

Für die Simulation der transkritischen Stickstoff-Einspritzung wird der Strömungslöser RGFoam verwendet. Im Unterschied zu dem in Kapitel 5.2.1 beschriebenen Algorithmus wird allerdings keine Speziestransportgleichung gelöst, da es sich bei dem betrachteten Testfall um ein Einstoffsystem handelt.

Rechengitter

Zur Vernetzung der Kammer wird ein strukturiertes Gitter verwendet. In Bereichen, in denen starke Gradienten auftreten, insbesondere in der Scherschicht zwischen dem eingespritzten transkritischen und dem umgebenden überkritischen Stickstoff, wird das Gitter kontinuierlich verfeinert. Die radiale Auflösung in der Scherschicht beträgt $6.2\mu\text{m}$. Insgesamt besteht das Gitter aus 4.21×10^6 Zellen. 1840 Zellen entfallen auf den Injektorquerschnitt. Das Gitter ist in Abbildung 6.2 dargestellt.

Um zu überprüfen, ob die Auflösung des beschriebenen Gitters für eine aussagekräftige Bewertung der getesteten Modellierungen ausreichend ist, wird zunächst eine Gitterstudie durchgeführt. Hierzu wird die Auflösung des in Abbildung 6.2 dargestellten Gitters in alle Raumrichtungen gleichmäßig vergrößert bzw. verfeinert. Das grobe Gitter besteht aus 2.12×10^6 , das feine Gitter aus 8.38×10^6 Zellen. In

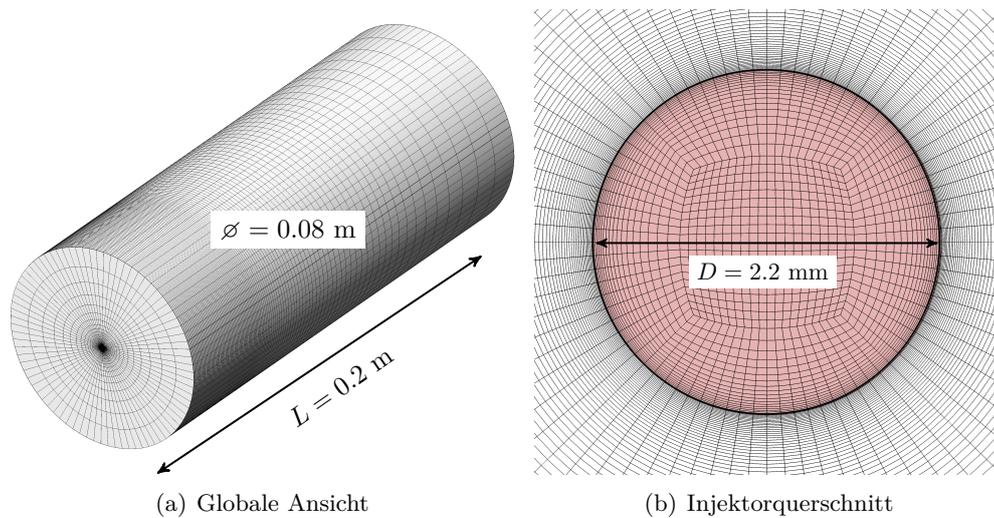


Abbildung 6.2: Rechengitter für die LES trans- und überkritischer N_2 - Einspritzung.

Abbildung 6.3 werden die Simulationsergebnisse unterschiedlicher Gitterauflösungen anhand der Dichteverläufe auf der Symmetrieachse verglichen. In der Gitterstudie wird Case 3 betrachtet, da zu erwarten ist, dass hier die Ergebnisse aufgrund des größeren Dichtegradients im Strömungsfeld sensibler auf Änderungen der numerischen Auflösung reagieren. Abbildung 6.3 zeigt, dass der steile Dichteabfall nach Aufbrechen des Strahls mit dem feineren Gitter besser aufgelöst werden kann und sich der Zerfall des dichten Kerns mit zunehmender Auflösung leicht stromaufwärts verschiebt. Der Unterschied zwischen den Ergebnissen mit dem Basisgitter und denen mit dem verfeinerten Gitter sind jedoch gering, weswegen für die nachfolgenden Rechnungen das Gitter mit 4.21×10^6 Zellen verwendet wird.

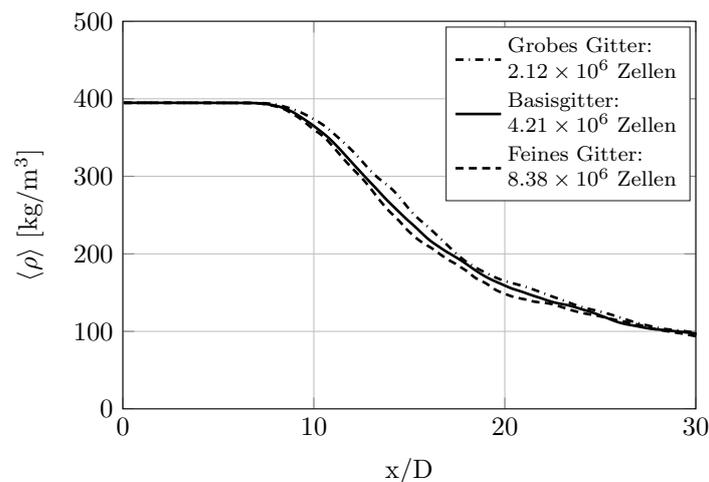


Abbildung 6.3: Gemitteltetes Dichteprofil auf der Symmetrieachse von Case 3: Gitterstudie.

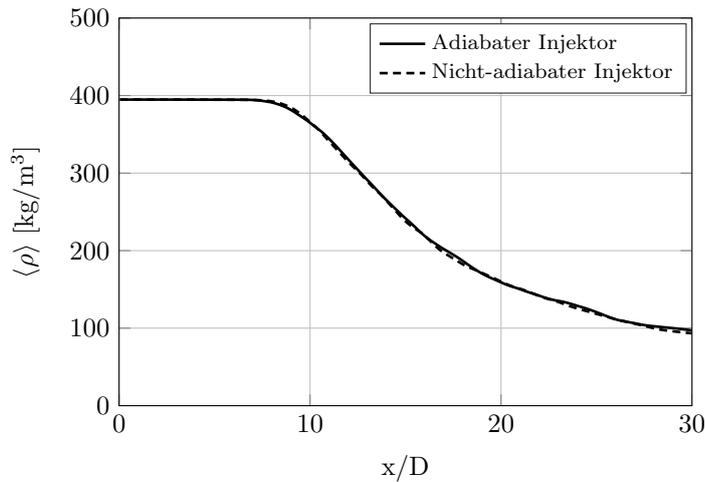


Abbildung 6.4: Gemittetes Dichteprofil auf der Symmetrieachse von Case 3: Einfluss des Wärmeeintrags im Injektor.

Einströmrandbedingung

Das Ergebnis der LES einer Freistrahlsströmung kann stark von der Wahl der turbulenten Einströmrandbedingung abhängen. Wird das Wirbelwachstum in der Scherschicht eines Strahls durch die einströmende Turbulenz beeinflusst, ist eine möglichst realistische Modellierung des Geschwindigkeitsprofils am Einlass wichtig, um das Aufbrechen und letztlich die Strahllänge richtig vorherzusagen [108]. Dies gilt insbesondere für Strömungen, in denen die Scherung zwischen eingespritztem und umgebendem oder auch koaxial eingespritztem Fluid gering ist.

Für die nachfolgenden Simulationen wird das Geschwindigkeitsprofil des einströmenden Stickstoffs durch eine separate inkompressible LES einer vollturbulenten Rohrströmung simuliert. Der Durchmesser des Rohrs stimmt mit dem des Injektors überein ($D = 2.2$ mm) und die Länge des Segments ist $x/D = 10$. Die Randbedingungen an den beiden Rohrenden sind zyklisch. Der Druckgradient wird so eingestellt, dass die Reynolds-Zahl im Rohr dem im Experiment gemessenen Wert entspricht (siehe Tabelle 6.1). Das Gitter besteht aus $450 \times 40 \times 120$ Zellen in Axial-, Radial- und Umfangsrichtung und die Auflösung wird zur Wand hin kontinuierlich verfeinert.

Während der Simulation werden zweidimensionale Profile des turbulenten Geschwindigkeitsfelds aus der Rohrströmung extrahiert. Die Daten werden zeitaufgelöst in einer Datenbank hinterlegt und später auf den Einlassrand der LES der Stickstoff-Einspritzung interpoliert. Die Interpolation ist linear in den zwei Raumrichtungen und linear in der Zeit. Im Vergleich zu anderen Methoden, wie etwa der Verwendung eines mittleren Geschwindigkeitsprofils mit überlagerter synthetischer Turbulenz [108, 90, 174], ist die separate Simulation der Injektorströmung numerisch aufwendig. Unsicherheiten können, was diesen Modellierungsaspekt angeht, so allerdings weitgehend vermieden werden.

	T_{in} , [K]	Feinstrukturmodell	ZGL
Case 3-1	128.53 ¹	Vreman	Abudour-Korrektur
Case 3-2	126.90 ²	Vreman	Abudour-Korrektur
Case 3-3	128.53	Vreman	Harstad-Korrektur
Case 3-4	128.53	Vreman	PR-ZGL
Case 3-5	128.53	Smagorinsky	Abudour-Korrektur
Case 4-1	137.00 ²	Vreman	Abudour-Korrektur

Tabelle 6.2: Randbedingungen für die LES trans- und überkritischer N_2 - Einspritzung.

Ein weiterer Aspekt bei der Modellierung der Einlassrandbedingung ist der Effekt des Wärmeeintrags im Injektor. Sind die Zufuhrleitungen, in denen der gekühlte Stickstoff zur Kammer befördert wird, nicht vollständig adiabatisch, wärmt sich der Stickstoff in Wandnähe auf und expandiert. Wie groß der Wärmestrom sein muss, um das Strömungsfeld signifikant zu beeinflussen, wurde von Banuti und Hannemann [12] für die verschiedenen Konfigurationen der Messreihe von Mayer et al. [138] untersucht. Die Analyse zeigt, dass der Wärmeeintrag, der zu einer Beeinflussung des Strahlaufbruchs benötigt wird, bei Case 4 deutlich geringer ist als bei Case 3. Das ist mit der hohen Wärmekapazität im Bereich der Pseudo-Siedetemperatur zu erklären, welche nur bei transkritischer Einspritzung durchlaufen wird. Bei Case 3 ist daher ein vergleichsweise hoher Wärmeeintrag nötig, um den Stickstoff im Injektor zu erwärmen. Das bestätigt auch Abbildung 6.4, in der die Verläufe der gemittelten Dichte in der Kammer bei adiabater und nicht-adiabater Injektorströmung verglichen sind. Die nicht-adiabate Injektorströmung wird hierbei durch eine separate LES berechnet. Die zeitaufgelösten Temperatur- und Geschwindigkeitsprofile werden an der Position $L/D = 10$ aus dieser Rohrströmung extrahiert und als Randbedingung für die N_2 - Einspritzung verwendet. Es wird angenommen, dass die Wandtemperatur des Injektors konstant $T = 240$ K beträgt. Für Case 3 ist kein Einfluss auf den Strahlaufbruch festzustellen.

Übersicht über die berechneten Konfigurationen

In diesem Kapitel sollen Modelle für die unaufgelöste Turbulenz sowie für die Beschreibung des thermodynamischen Zustands im Kontext der transkritischen Einspritzung bewertet werden, weswegen mehrere Simulationen zur Untersuchung der genannten Einflüsse durchgeführt werden. Die berechneten Konfigurationen sind in Tabelle 6.2 zusammengefasst. Durch einen Vergleich der Testfälle Case 3-1 (Abudour-Korrektur) mit Case 3-3 (Harstad-Korrektur) und Case 3-4 (PR-ZGL) kann der Effekt der thermodynamischen Modellierung, insbesondere der der Volumenkorrekturmethode, bewertet werden. Weiterhin wird durch den Vergleich von Case 3-1 (Vreman) mit Case 3-5 (Smagorinsky) der Einfluss der Feinstrukturmodellierung untersucht. Zusätzlich wird durch einen Vergleich der Testfälle

¹Berechnete Einströmtemperatur

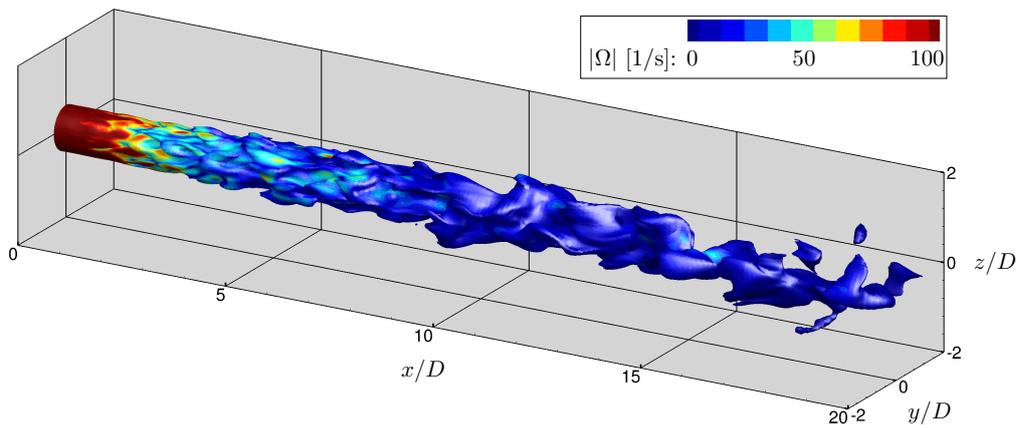
²Gemessene Einströmtemperatur

Case 3-1 ($T_{in} = 128.53$ K) und Case 3-2 ($T_{in} = 126.9$ K) der Einfluss der Einspritztemperatur verdeutlicht. In all diesen Simulationen wird Stickstoff transkritisch eingespritzt. Wie sich der Strahl bei überkritischen Bedingungen verhält, wird durch die Simulation von Case 4-1 gezeigt.

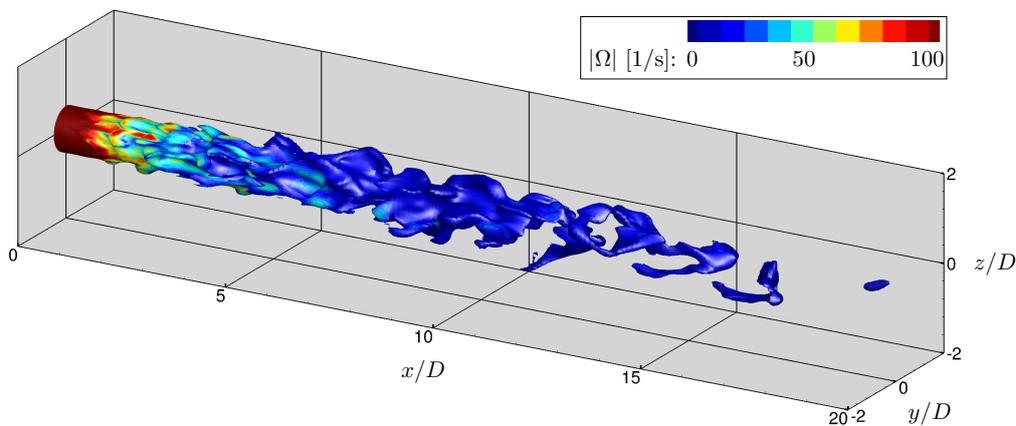
6.1.3 Ergebnisse

Momentaufnahmen des Strömungsfelds

Zur Visualisierung des dichten Strahlkerns sind in Abbildung 6.5 die Dichte-Isoflächen einzelner Strömungsrealisierungen gezeigt. Als Grenzwert wird das arithmetische Mittel der Dichte am Einlass und der des in der Kammer befindlichen warmen Stickstoffs benutzt ($\hat{\rho} = 0.5(\bar{\rho}_{in} + \bar{\rho}_{\infty})$). Die Oberfläche ist mit dem Betrag der Wirbelstärke ($|\Omega| = |\nabla \times \tilde{u}|$) eingefärbt.

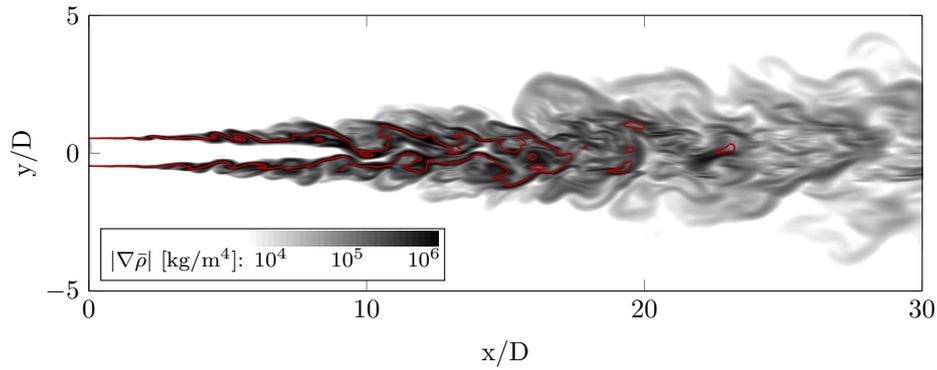


(a) Case 3-1

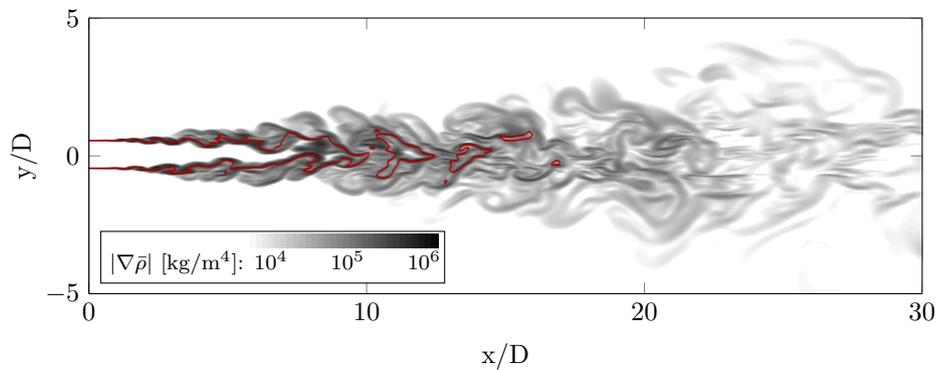


(b) Case 4-1

Abbildung 6.5: Dichte-Isoflächen bei $\hat{\rho} = 0.5(\bar{\rho}_{in} + \bar{\rho}_{\infty})$. Die Oberflächen sind mit dem Betrag der Wirbelstärke eingefärbt.



(a) Case 3-1



(b) Case 4-1

Abbildung 6.6: Momentaufnahme des Dichtegradients. Die rote Linie markiert die mittlere Dichte $\hat{\rho} = 0.5(\bar{\rho}_{in} + \bar{\rho}_{\infty})$.

Auch wenn die Betrachtung einzelner Strömungsrealisierungen qualitativ ist, eignet sie sich dennoch gut, um charakteristische Unterschiede zwischen der transkritischen (Case 3) und der überkritischen (Case 4) Einspritzung darzustellen. Im Fall transkritischer Einspritzung bleibt die Strahloberfläche auch einige Injektordurchmesser stromab der Einspritzung ungestört und glatt, bevor sich durch die Scherung

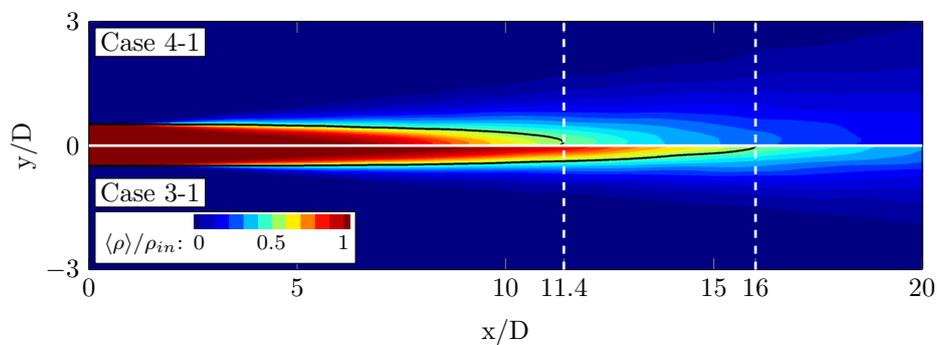


Abbildung 6.7: Normierte Dichte. Die schwarze Linie markiert die mittlere Dichte $\hat{\rho} = 0.5(\bar{\rho}_{in} + \bar{\rho}_{\infty})$, die weiße gestrichelte Linie die Länge des Strahlkerns.

zwischen eingespritztem und umgebendem Fluid Kelvin-Helmholtz-Instabilitäten ausprägen und die Oberfläche perturbieren. Diese wachsen langsam an und brechen bei $x/D \approx 10$ auf, wodurch die Strömung in den vollturbulenten Zustand übergeht. Der Bereich unmittelbar stromab des Injektors zeichnet sich durch eine hohe Scherung, aber geringe Geschwindigkeitsfluktuation aus. Dies spiegelt sich auch in der Wirbelstärke wieder, die wegen des großen Geschwindigkeitsgradienten senkrecht zur Strahloberfläche in diesem Bereich maximal ist.

Ein Vergleich der beiden Testfälle zeigt, dass das Wirbelwachstum bei transkritischer Einspritzung deutlich später beginnt als bei überkritischer Einspritzung. Aufgrund der bei transkritischer Einspritzung höheren Dichtestratifikation in der Scherschicht werden Störungen gehemmt und die Strahloberfläche bleibt länger ungestört als bei überkritischer Einspritzung. Diese Beobachtung deckt sich mit den Arbeiten von Zong et al. [233, 232] und denen von Schmitt et al. [202]. Die starke, durch den Dichtegradienten hervorgerufene Anisotropie der Strömung lenkt turbulente Fluktuationen an der Strahloberfläche von der radialen zur axialen Richtung um. Zusätzlich ist der Massenstrom bei Case 3 durch die höhere Dichte am Einlass größer als der bei Case 4 (siehe Tabelle 6.1). Beide Effekte, die gehemmte Wirbelentwicklung und der größere Massenstrom, führen letztlich dazu, dass die Durchmischung bei transkritischer Einspritzung langsamer ist und der Strahl später aufbricht.

Das zeigt sich auch in Abbildung 6.6, in der der Dichtegradient in einer Schnittebene durch das Rechengebiet dargestellt ist. Die rote Linie korrespondiert wiederum mit der mittleren Dichte $\hat{\rho}$ und visualisiert die Länge des Strahlkerns. In beiden Testfällen lösen sich Pakete des dichten Stickstoffs vom zusammenhängenden Kern. Diese werden von der Strömung stromab transportiert, erwärmen sich langsam und lösen sich schließlich auf. Die axiale Position, an der sich der dichte Stickstoff vom Kern löst, ist nahezu konstant und liegt bei $x/D \approx 15$ für Case 3 und $x/D \approx 10$ für Case 4. Quantitativ kann die Strahllänge anhand der gemittelten sowie normierten Dichte, wie in Abbildung 6.7 gezeigt, ermittelt werden. Als Grenzwert für die Strahllänge wird der Punkt gewählt, an dem die mittlere Dichte $\hat{\rho}$ die Symmetrieachse schneidet. Bei Case 4 ergibt sich eine Strahllänge von $x/D = 11.4$. Bei Case 3 ist der Strahl etwa 40% länger und die mittlere Dichte schneidet die Symmetrieachse bei $x/D = 16$.

Beim Überschreiten der Widom-Linie ändern sich die Eigenschaften des eingespritzten Stickstoffs stark. Kleine Temperaturänderungen bewirken eine deutliche Änderung von beispielsweise der Dichte oder der Enthalpie. Dies ist in Abbildung 6.8 durch die Betrachtung der isobaren Wärmekapazität veranschaulicht. Bei Case 3 wird die Pseudo-Siedetemperatur T_{pb} bei der Mischung des eingespritzten transkritischen Stickstoffs mit dem warmen Stickstoff in der Kammer durchschritten. An diesem Punkt erreicht C_p ein Maximum (siehe Abb. 3.3) und der transkritische Strahlkern wird von einer Schicht hoher isobarer Wärmekapazität umschlossen. Es wird ein hoher Energieeintrag benötigt, um den kalten Stickstoff zu erwärmen, was wiederum eine zusätzliche Stabilisierung des transkritischen Strahls zur Folge hat. Ist wie in Case 4 die Einspritztemperatur größer als T_{pb} , sind die im Strömungsfeld erreichten Wärmekapazitäten deutlich geringer.

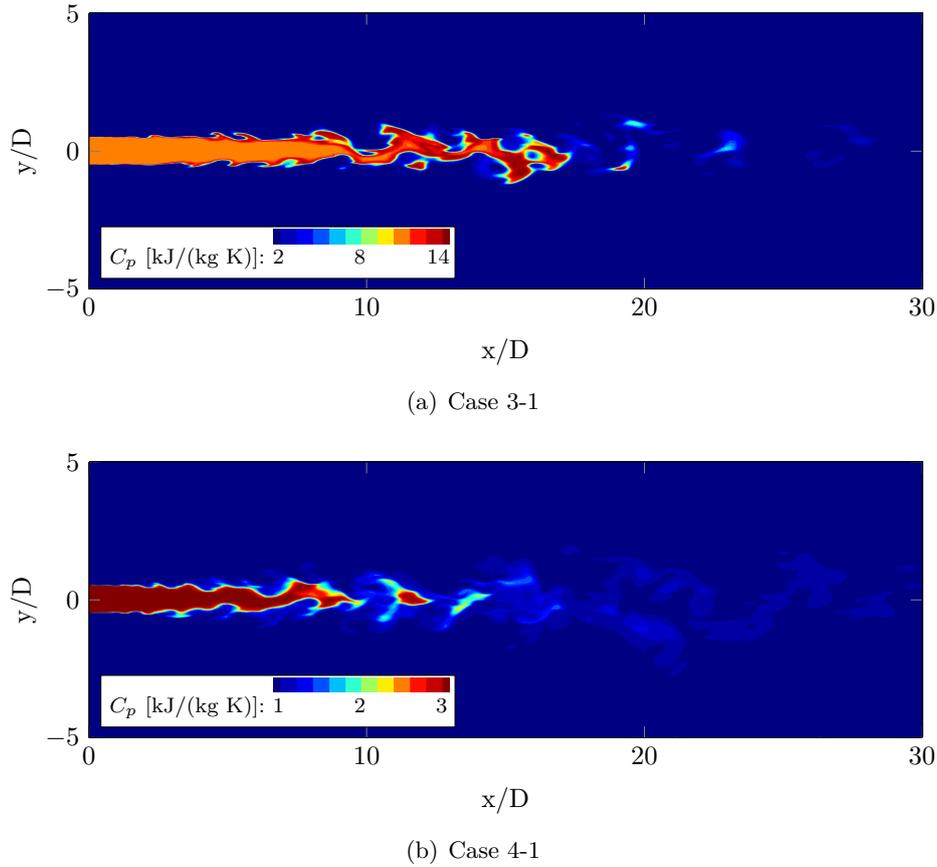


Abbildung 6.8: Momentaufnahme der isobaren Wärmekapazität.

Vergleich mit dem Experiment

Um die Simulationsergebnisse mit den Dichtemessungen auf der Symmetrieachse zu vergleichen, werden sie zeitlich gemittelt (siehe Kapitel 2.2.6). Die Mittelung wird gestartet, nachdem sich das Strömungsfeld voll ausgebildet hat und dann für $\Delta t = 0.18\text{s} \approx 400 D/U_{in}$ fortgeführt, um eine ausreichend genaue Statistik zu erhalten.

Der von Mayer et al. [138] gemessene Dichteverlauf bei Case 3 ist im Bereich $x/D < 10$, abgesehen von der experimentellen Streuung, nahezu konstant. Auf das Plateau folgt ein starker Dichteabfall im Bereich $10 < x/D < 17$. Danach sinkt die Dichte weniger stark, bis ihr Wert letztlich den der Umgebung erreicht.

In Abbildung 6.9 sind die Messdaten mit den Ergebnissen der beiden numerischen Konfigurationen Case 3-1 und Case 3-2 verglichen. Die beiden Rechnungen unterscheiden sich nur hinsichtlich der Einspritztemperatur. Bei Case 3-1 wurde die aus den Dichtemessungen im Strahlkern berechnete Einspritztemperatur $T_{3,in}^{Fit} = 128.53\text{ K}$, bei Case 3-2 die von Mayer et al. gemessene Einspritztemperatur $T_{3,in}^{Exp} = 126.9\text{ K}$ verwendet. Der Temperaturunterschied wirkt sich deutlich auf den Verlauf der Dichteprofile aus. Es ist hervorzuheben, dass sich der Unterschied nicht

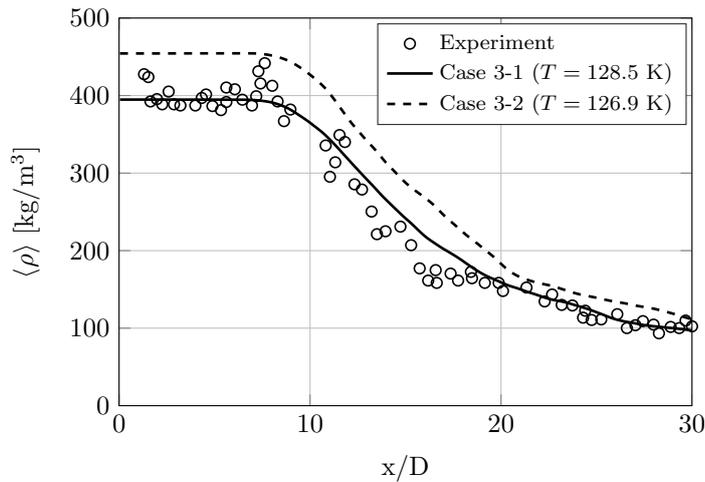


Abbildung 6.9: Gemittetes Dichteprofil auf der Symmetrieachse von Case 3: Einfluss der Einströmtemperatur.

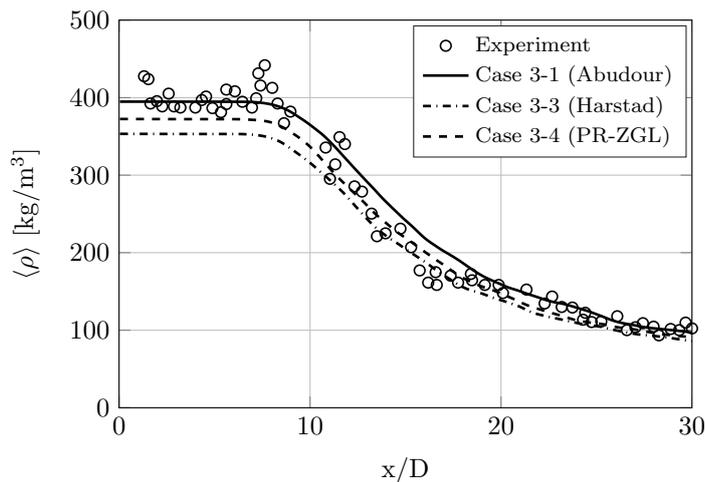


Abbildung 6.10: Gemittetes Dichteprofil auf der Symmetrieachse von Case 3: Einfluss der Zustandsgleichung.

auf den Bereich vor dem Strahlerfall beschränkt, in dem er eine unmittelbare Folge der Temperaturdifferenz am Einlass ist. Auch im vollturbulenten Bereich, in dem sich der Stickstoff bereits erwärmt hat und die Kopplung zwischen Temperatur und Dichte weniger stark ist, bleibt ein deutlicher Unterschied zwischen den Dichteprofilen erhalten. Dies zeigt, dass die Temperaturänderung am Einlass nicht nur die Dichte selbst, sondern auch das Strömungsfeld, hauptsächlich aufgrund des geänderten Massenstroms, beeinflusst. Bei transkritischer Einspritzung ist die genaue Kenntnis der Einströmtemperatur daher ein wichtiger Aspekt, wenn man aus einem Vergleich zwischen Experiment und LES Rückschlüsse auf die Qualität der Modellierung ziehen will. Für die folgenden Vergleiche wird daher die berechnete Einströmtemperatur $T_{3,in}^{Fit}$ verwendet.

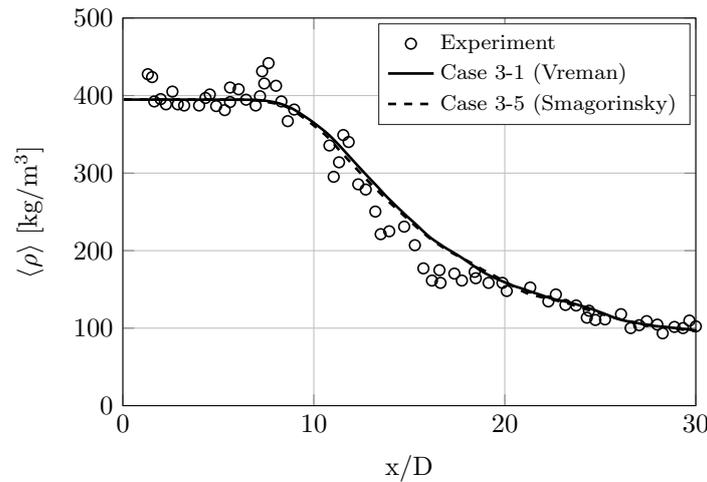


Abbildung 6.11: Gemitteltetes Dichteprofil auf der Symmetrieachse von Case 3: Einfluss der Feinstrukturmodellierung.

Der Vergleich mit den Messdaten zeigt, dass mit der berechneten Einströmtemperatur (Case 3-1) sehr gute Ergebnisse erzielt werden. Sowohl die berechnete Position des Strahlerfalls bei $x/D \approx 10$, als auch die der Änderung des axialen Dichtegradients bei $x/D \approx 17$ stimmen mit dem Experiment überein. Leichte Abweichungen ergeben sich lediglich im transitionellen Bereich ($10 < x/D < 17$), wo im Experiment ein steilerer Dichteabfall gemessen wurde.

Auf der Basis der Ergebnisse von Case 3-1 wird nun der Einfluss der thermodynamischen Modellierung untersucht. Hierfür werden in Abbildung 6.10 die Dichteverläufe, die sich bei Verwendung der Harstad-Korrektur (Case 3-3) und der unkorrigierten PR-ZGL (Case 3-4) ergeben, mit dem Ergebnis der Abudour-Korrektur (Case 3-1) verglichen. Es zeigt sich, dass der Verlauf des Dichteprofiles stark von der Genauigkeit der Zustandsgleichung abhängt. Die Ergebnisse der Abudour-Korrektur stimmen deutlich besser mit den Messdaten überein als die der beiden anderen Modellierungen. Die Verwendung der Harstad-Korrektur hat hier im Vergleich zur unkorrigierten PR-ZGL sogar einen nachteiligen Effekt auf das Simulationsergebnis. Insbesondere beeinflusst die Volumenkorrektur, wie auch die Änderung der Einströmtemperatur, das Strömungsfeld in Bereichen, in denen der unmittelbare Einfluss auf die Dichte verschwindet, das Volumeninkrement v_{vk} also null ist. Das kann zum einen mit dem sich durch die thermodynamische Modellierung ändernden Massenstrom, zum anderen mit dem Zusammenspiel zwischen Turbulenz und Dichtegradient an der Strahloberfläche erklärt werden. Auf Letzteres wird im folgenden Abschnitt näher eingegangen.

Neben dem Einfluss der thermodynamischen Modellierung wird nun untersucht, welchen Effekt die Feinstrukturmodellierung auf den Strahlerfall hat. In Abbildung 6.11 sind die Ergebnisse der Basiskonfiguration (Case 3-1), in der das Vreman-Modell verwendet wurde, mit der Rechnung verglichen, in der das Smagorinsky-Modell verwendet wurde (Case 3-5). Der gemittelte Dichteverlauf ist in beiden Simulationen nahezu deckungsgleich. Das deutet darauf hin, dass

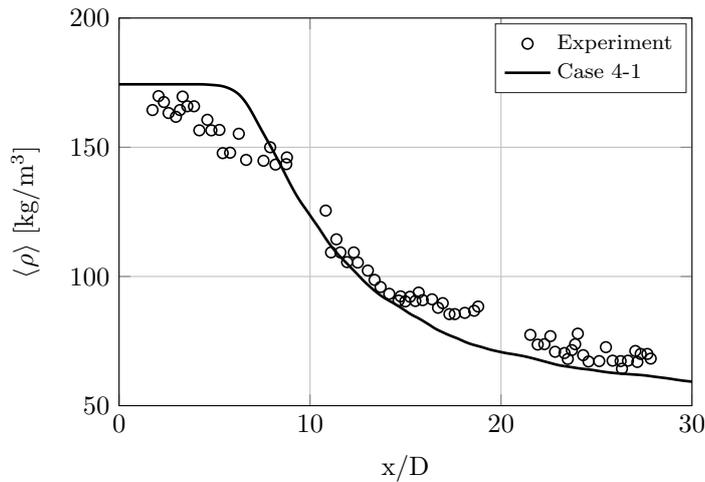


Abbildung 6.12: Gemitteltetes Dichteprofil auf der Symmetrieachse von Case 4.

die Feinstrukturmodellierung keinen wesentlichen Einfluss auf das Anwachsen der Kelvin-Helmholtz-Instabilität in der Scherschicht hat. Die Längenskalen in den Wirbeln sind groß genug, um von dem Rechengitter in der LES aufgelöst zu werden. Der Effekt der Feinstrukturmodellierung auf den Dichteverlauf erscheint daher zweitrangig im Vergleich zum wesentlich größeren Einfluss der thermodynamischen Modellierung.

Zusätzlich zu den Ergebnissen für die transkritische Einspritzung ist in Abbildung 6.12 der Dichteverlauf für den überkritischen Testfall (Case 4) dargestellt. Die Dichte am Injektor ist deutlich kleiner als bei Case 3 und sinkt im Experiment unmittelbar hinter dem Injektor ab. Das fehlende Dichte-Plateau, dass bei Case 3 im vorderen Bereich des Strahls deutlich erkennbar ist, wird von Banuti und Hanemann [12] mit dem Wärmeeintrag im Injektor erklärt. Auch im weiteren Verlauf des Dichteprofiles sind Unterschiede zur transkritischen Einspritzung erkennbar. So fällt die gemittelte Dichte bei Case 4 bis zum Erreichen des Umgebungswerts kontinuierlich ab. Die bei Case 3 beobachtete Änderung des axialen Dichtegradienten bei $x/D \approx 17$ ist hier nicht vorhanden.

Die Simulationsergebnisse stimmen auch hier gut mit den Messdaten überein. Sowohl die Länge des Strahls als auch der Bereich des Strahlzerfalls zwischen $7 < x/D < 15$ werden gut reproduziert. Da der Wärmeeintrag am Injektor hier nicht berücksichtigt wird, ist in den Simulationsergebnissen ein Plateau der gemittelten Dichte unmittelbar hinter dem Injektor erkennbar. Im vollturbulenten Bereich weiter stromab liegt die berechnete Dichte geringfügig unter den gemessenen Werten, was auf eine etwas zu hohe Durchmischung schließen lässt.

Turbulenz

Um den Einfluss der Thermodynamik auf das Strömungsfeld bei transkritischer Einspritzung weiter zu untersuchen, werden die gemittelten Reynoldsspannungen

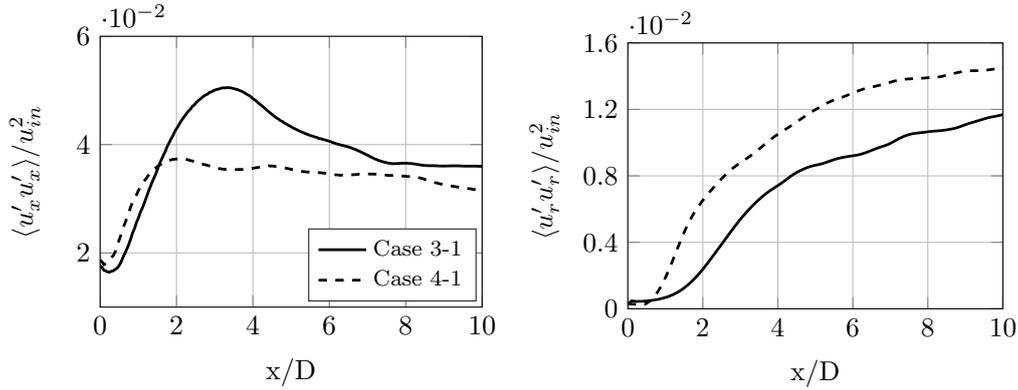


Abbildung 6.13: Gemittelte Maximalwerte der radialen und axialen Komponente des Reynoldsschen Spannungstensors auf der Symmetrieachse: Vergleich der trans- und überkritischen Einspritzung.

im Bereich des Strahlkerns ($x/D < 10$) ausgewertet. Hierzu wird das Strömungsfeld nicht nur zeitlich, sondern auch räumlich in Umfangsrichtung gemittelt. Die Reynoldsspannungen werden ausschließlich anhand der aufgelösten Turbulenz berechnet (Gl. 2.35). Der modellierte Feinstrukturanteil wird vernachlässigt. Von besonderem Interesse ist die Turbulenzentwicklung an der Strahloberfläche, da die dort entstehenden Wirbel entscheidend für den Aufbruch und damit für die Länge des Strahls sind. Es wird daher die maximale Reynoldsspannung in injektorparallelen Ebenen ermittelt und der Wert als Funktion des Abstands zum Injektor aufgetragen. Da das Maximum der Reynoldsspannungskomponenten im Bereich des intakten Kerns auf der Strahloberfläche liegt, kann so die Entwicklung der zum Strahlaufbruch führenden Instabilitäten analysiert werden.

In Abbildung 6.13 sind die axiale und die radiale Komponente des in Polarkoordinaten transformierten Reynoldsschen Spannungstensors gezeigt. Die Werte sind mit der Einströmgeschwindigkeit normiert und es werden die Ergebnisse der transkritischen Einspritzung (Case 3) mit denen der überkritischen Einspritzung (Case 4) verglichen. Unmittelbar stromab des Injektors bleibt die radiale Komponente der Reynoldsspannung unverändert. Sie behält den Wert bei, der durch die als Randbedingung verwendete Rohrströmung festgelegt ist. Bei Case 4 beginnt das Wirbelwachstum, das sich in einem steilen Anstieg von $\langle u'_r u'_r \rangle$ niederschlägt, deutlich früher als bei Case 3. Auch ist der Anstieg steiler, was mit der geringeren Dichtestratifikation in der Scherschicht erklärt werden kann. Wie bereits von Zong et al. [233, 232] beschrieben, werden durch den starken Dichtegradienten an der Strahloberfläche bei Case 3 Fluktuationen in radiale Richtung gedämpft, wohingegen Fluktuationen in axiale Richtung angefacht werden. Dies kann auch in den hier gezeigten Ergebnissen beobachtet werden. Während bei Case 4 das Wachstum der axialen Reynoldsspannung $\langle u'_x u'_x \rangle$ bereits bei $x/D \approx 1.5$ abebbt, steigt $\langle u'_x u'_x \rangle$ bei Case 3 bis $x/D \approx 3$ an und erreicht deutlich höhere Werte. Bei der radialen Komponente der Reynoldsspannung $\langle u'_r u'_r \rangle$ ist der Trend umgekehrt. Hier werden bei überkritischer Einspritzung höhere Werte erreicht.

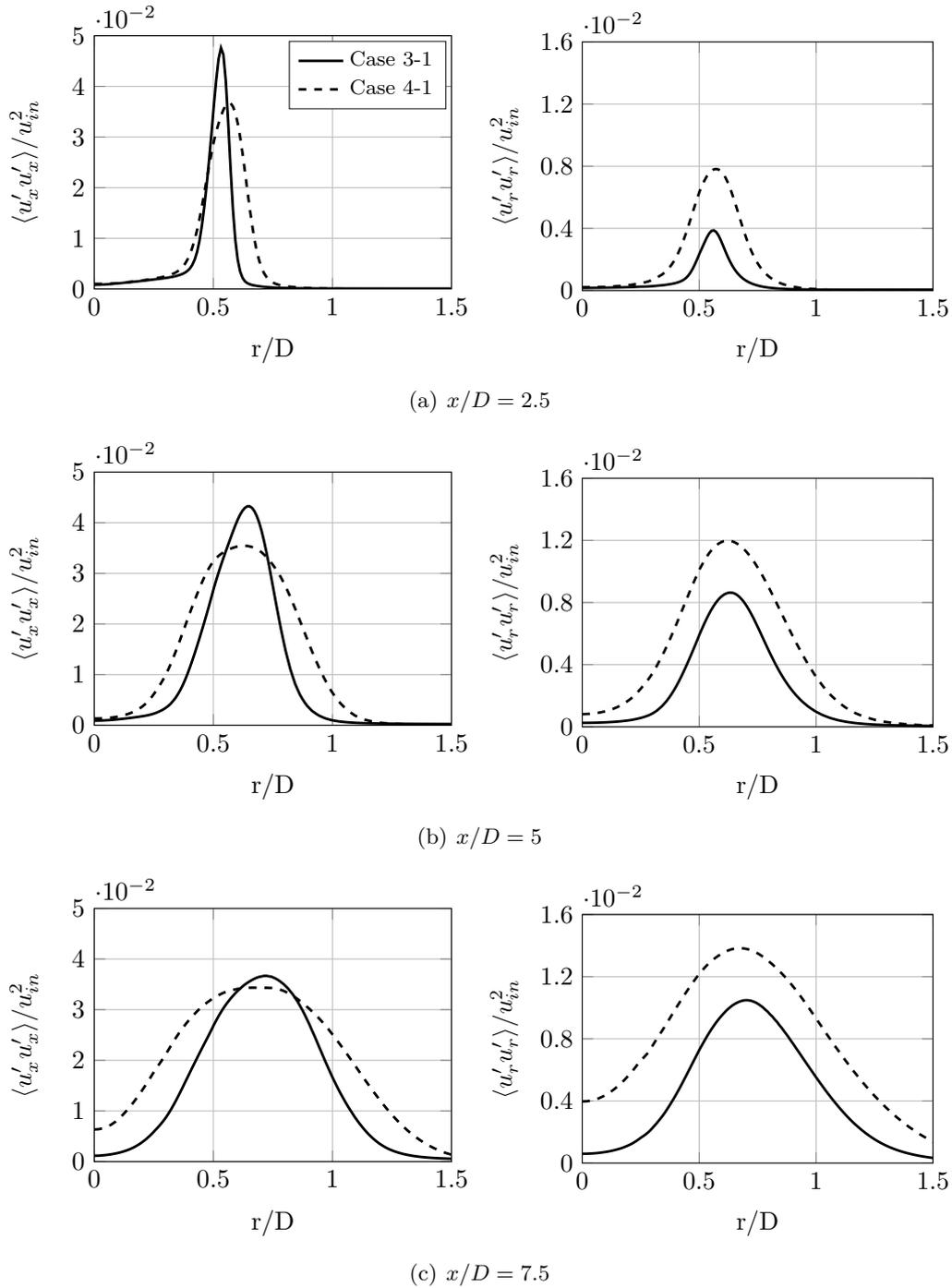


Abbildung 6.14: Gemittelte radiale und axiale Komponente des Reynoldsschen Spannungstensors als Funktion des Abstands von der Symmetrieachse: Vergleich der trans- und überkritischen Einspritzung. Gezeigt sind die Profile an den drei axialen Positionen $x/D = 2.5, 5$ und 7.5 .

Ergänzend zu den Maximalwerten werden die Reynoldsspannungen in Abbildung 6.14 an drei axialen Positionen als Funktion des Abstands von der Symmetrieachse aufgetragen. Die zuvor beschriebenen Effekte sind auch hier deutlich sichtbar.

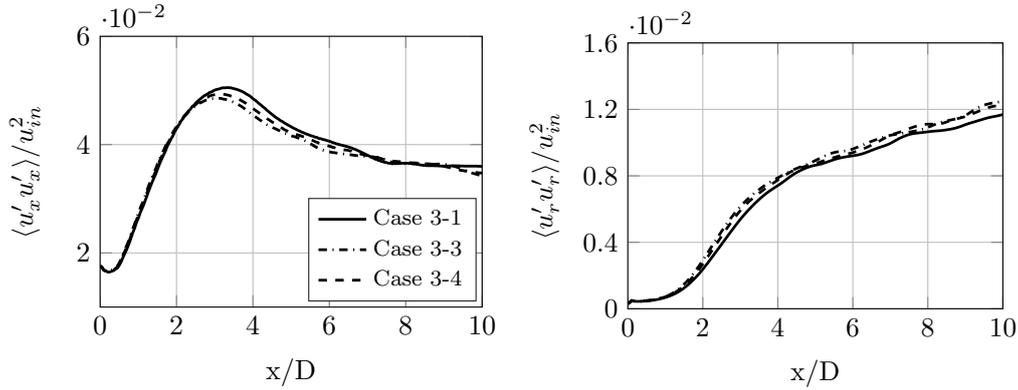


Abbildung 6.15: Gemittelte Maximalwerte der radialen und axialen Komponente des Reynoldsschen Spannungstensors auf der Symmetrieachse von Case 3: Einfluss der Zustandsgleichung.

Schon bei der injektornächsten Position $x/D = 2.5$ zeigt sich, dass die Scherschicht aufgrund der geringeren Dichtestratifikation bei überkritischer Einspritzung schneller aufweitet. Auch die Dämpfung der radialen Komponente ist deutlich geringer und der erreichte Maximalwert ist etwa doppelt so groß wie bei transkritischer Einspritzung. Die Diagramme an den beiden Positionen $x/D = 5$ und $x/D = 7.5$ verdeutlichen die weitere Entwicklung der Turbulenz im Strömungsfeld. Durch das Anwachsen der Kelvin-Helmholtz-Instabilität wird turbulente kinetische Energie zunehmend von der axialen, in die radiale Richtung umverteilt, was sich im Ansteigen der radialen und Absinken der axialen Reynoldsspannung zeigt. Außerdem verschiebt sich die Position des Maximums weg von der Symmetrieachse. Das wird durch die Aufweitung des Strahls verdeutlicht. Bei Case 4 ist der Strahlkern an der Position $x/D = 7.5$ bereits aufgebrochen und die Fluktuationen erreichen die Symmetrieachse (siehe Abb. 6.12). Bei Case 3 (siehe Abb. 6.9) findet der Übergang in den transitionellen Bereich der Strömung statt.

Das beschriebene Zusammenspiel von Dichtestratifikation und turbulenter Fluktuation kann auch bei einem Vergleich der thermodynamischen Modellierungen beobachtet werden. In Abbildung 6.15 sind die Maximalwerte radialer und axialer Reynoldsspannung der Rechnungen mit der Abudour-Korrektur (Case 3-1), der Harstad-Korrektur (Case 3-3) und der unkorrigierten PR-ZGL (Case 3-4) analog zu Abbildung 6.13 aufgetragen. Der Verlauf der axialen Reynoldsspannung liegt bei Case 3-1, dem Testfall, der die höchste Dichtestratifikation aufweist, über dem der beiden anderen Rechnungen. Genau umgekehrt verhält es sich für die radiale Komponente der Reynoldsspannung. Das bestätigt, dass die Dämpfung der radialen und die Anfachung der axialen Turbulenz vom Dichteunterschied zwischen eingespritztem und umgebendem Fluid abhängt.

In Abbildung 6.16 sind die Ergebnisse der Rechnungen mit den Feinstrukturmodellen von Vreman [228] (Case 3-1) und Smagorinsky [211] (Case 3-5) verglichen. Der wesentliche Unterschied zwischen den beiden Modellen besteht in der Berechnung der Dissipation in laminaren und transitionellen Strömungen. Es ist bekannt, dass mit der Formulierung von Smagorinsky zu hohe turbulente Viskositäten in

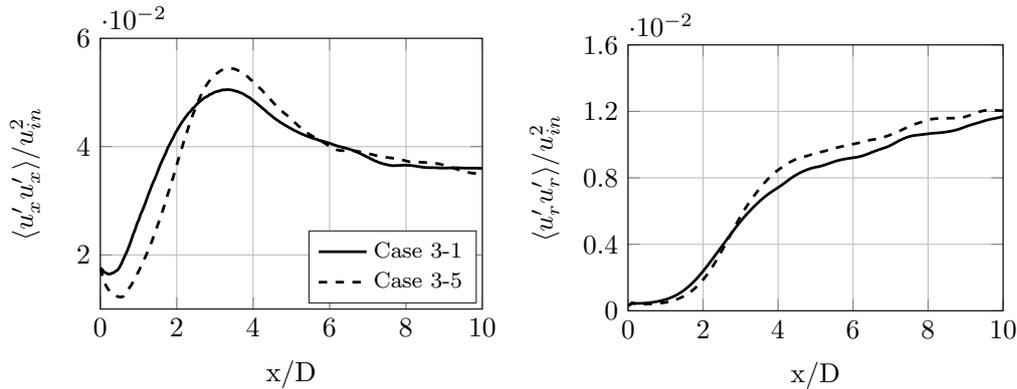


Abbildung 6.16: Gemittelte Maximalwerte der radialen und axialen Komponente des Reynoldsschen Spannungstensors auf der Symmetrieachse von Case 3: Einfluss der Feinstrukturmodellierung.

wandnahen Strömungen berechnet werden [58]. Das Modell von Vreman ist nicht wesentlich komplexer als das von Smagorinsky und daher numerisch ebenso effizient, hat aber den Vorteil, dass μ_{sgs} in wandnahen Strömungen gegen null geht. Im hier betrachteten Testfall wirkt sich der Unterschied der beiden Formulierungen auf die modellierte Turbulenz in der Scherschicht aus. Während die Wirbelviskosität μ_{sgs} in diesem Bereich bei Verwendung des Vreman-Modells sehr kleine Werte annimmt, erreicht sie bei Verwendung des Smagorinsky-Modells ein Maximum. Die dadurch induzierte zusätzliche Dissipation bewirkt eine Aufweitung der Scherschicht, mit der Folge, dass der Dichtegradient auf der Oberfläche stromab stärker absinkt als bei Verwendung des Vreman-Modells. Das Ergebnis ist eine geringere Dämpfung der radialen Fluktuationen, was sich in Abbildung 6.16 im Verlauf von $\langle u'_r u'_r \rangle$ widerspiegelt.

6.1.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde der Einfluss der thermodynamischen und der Feinstrukturmodellierung in der LES trans- und überkritischer Einspritzung untersucht und die Ergebnisse mit den zur Verfügung stehenden Dichtemessungen von Mayer et al. [138] verglichen. Des Weiteren wurde das Zusammenspiel zwischen dem starken Dichtegradienten auf der Strahloberfläche und dem Wachstum der zur Transition führenden Kelvin-Helmholtz-Instabilitäten untersucht.

Die Untersuchungen haben gezeigt, dass die Einspritztemperatur bei transkritischen Bedingungen eine wichtige Rolle spielt und deren genaue Kenntnis die Voraussetzung für einen aussagekräftigen Vergleich zwischen Experiment und Simulation ist. Vor dem Hintergrund, dass die Temperatur am Einlass eine experimentell schwer zugängliche Größe ist und die Messwerte daher einer großen Streuung unterliegen, wurde in der LES auf eine berechnete Einströmtemperatur zurückgegriffen, die auf den Dichtemessungen im Strahlkern und dem Kammerdruck basiert. Mit dieser berechneten Einlasstemperatur und der hochgenauen Volumenkorrektur von

Abudour et al. [5] konnte sowohl für den transkritischen Testfall (Case 3) als auch für den überkritischen Testfall (Case 4) eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen erzielt werden.

Anhand eines Vergleichs der gemittelten Reynoldsspannungen in der Scherschicht wurde der Einfluss des thermodynamischen Zustands im eingespritzten Stickstoff auf das Wirbelwachstum untersucht. Dabei konnte gezeigt werden, dass der ausgeprägte Dichtegradient, der sich bei transkritischer Einspritzung auf der Strahloberfläche einstellt, turbulente Fluktuationen senkrecht zur Oberfläche dämpft und die kinetische Energie in axiale Richtung umleitet. So werden in Case 3 aufgrund der höheren Dichtestratifikation größere Werte für die axiale Komponente des Reynoldsschen Spannungstensors erreicht als in Case 4. Für die radiale Komponente verhält es sich aufgrund der Dämpfung umgekehrt.

Ausgehend vom Case 3 wurde der Einfluss der Volumenkorrekturmethode auf den gemittelten Dichteverlauf und auf die Entwicklung der Fluktuationen in der Scherschicht untersucht. Dabei zeigt sich, dass die Wahl der thermodynamischen Modellierung einen erheblichen Einfluss auf den Strahlzerfall hat. Mit der Abudour-Korrektur konnte die beste Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt werden. Numerische Artefakte, die auf die Inkonsistenz zwischen der thermischen und der kalorischen Zustandsgleichung zurückzuführen wären (Kapitel 3.2.4), konnten nicht beobachtet werden. Für die folgenden Simulationen wird daher ausschließlich die Volumenkorrektur von Abudour et al. [5] verwendet.

Des Weiteren wurden die Ergebnisse zweier Feinstrukturmodelle, dem Vreman-Modell und dem Smagorinsky-Modell, verglichen. Die gemittelten Dichteverläufe sind nahezu deckungsgleich, was eine untergeordnete Rolle der Feinstrukturmodellierung auf die Entwicklung der großskaligen Kelvin-Helmholtz-Instabilität indiziert. Beim Vergleich der Reynoldsspannungen auf der Strahloberfläche sind jedoch Unterschiede erkennbar. Insbesondere weitet sich die Scherschicht aufgrund der höheren Dissipation bei Verwendung des Smagorinsky-Modells schneller auf, was sich in einer geringeren Dämpfung der radialen Fluktuationen äußert. Für die Simulationen in den nächsten beiden Kapiteln wird daher auf das Vreman-Modell zurückgegriffen.

6.2 Koaxiale LN₂/GH₂ - Einspritzung

Im vorhergehenden Kapitel wurde die transkritische Einspritzung von Stickstoff in eine mit warmem Stickstoff gefüllte Kammer untersucht. Anhand dieser vereinfachten Konfiguration konnte die Sensitivität der LES-Ergebnisse hinsichtlich verschiedener Einflussparameter untersucht und eine geeignete Modellierung identifiziert werden. Diese wird nun verwendet, um einen komplexeren Testfall zu simulieren. Es wird ein für Raketenbrennkammern üblicher Koaxialinjektor betrachtet, durch dessen zentrales Rohr trans- oder überkritischer Stickstoff und koaxial dazu warmer Wasserstoff eingespritzt wird. Im Gegensatz zur zuvor untersuchten Stickstoff-Einspritzung treten in der Scherschicht zum einen Mischungseffekte und zum anderen für Raketenbrennkammern typische Scherraten auf. Durch die Verwendung von Stickstoff als Oxidatorersatz sind chemische Reaktionen ausgeschlossen und es ist möglich die Mischung bei transkritischen Bedingungen isoliert zu betrachten. Ferner ermöglicht der Ausschluss chemischer Reaktionen den Einsatz genauerer Messmethoden, wodurch ein quantitativer Vergleich der LES-Ergebnisse mit experimentellen Daten möglich ist.

6.2.1 Beschreibung des Testfalls

Experimentelle Konfiguration

Die zum Vergleich mit der LES verwendeten experimentellen Daten entstammen der Messreihe von Oswald et al. [165]. Im Experiment wird gekühlter Stickstoff durch das innere Rohr eines Koaxialinjektors in eine mit warmem Stickstoff gefüllte Kammer eingespritzt. Druck und Temperatur in der Kammer werden durch ein Ventil und eine elektrische Heizung konstant bei $p_k = 4$ MPa und $T_k = 298$ K gehalten. Der Druck ist somit höher als der kritische Druck der beiden Einzelstoffe ($p_{c, N_2} = 3.4$ MPa und $p_{c, H_2} = 1.3$ MPa). Durch den Ringspalt wird Wasserstoff mit wesentlich höherer Geschwindigkeit eingespritzt, sodass in der Scherschicht hohe Geschwindigkeits- und Dichtegradienten auftreten. Der innere Durchmesser des Koaxialinjektors beträgt $D = 1.9$ mm, die Ringspaltweite beträgt $\Delta D_{H_2} = 0.5$ mm. Der Post zwischen den beiden Einlässen hat eine Dicke von $\Delta D_p = 0.25$ mm. Die Testkammer ist zylindrisch ($D_k = 10$ cm) und verfügt über einen optischen Zugang, sodass zweidimensionale Raman-Messungen durchgeführt und die Partialdichten von Stickstoff und Wasserstoff bestimmt werden konnten. Details zur verwendeten Messtechnik sind auch in den Folgeveröffentlichungen von Oswald und Schik [164] und Oswald et al. [166] beschrieben.

In der Messreihe wurden verschiedene Betriebspunkte untersucht, in denen die Temperatur des Stickstoffs am Einlass T_{N_2} und die Geschwindigkeit des Wasserstoffs u_{H_2} variiert wurden. In dieser Arbeit wurden zwei der von Oswald et al. untersuchten Testfälle numerisch untersucht. Die experimentellen Randbedingungen der beiden Testfälle sind in Tabelle 6.3 zusammengefasst. Der wesentliche Unterschied zwischen den Konfigurationen E4 und D4 ist die Temperatur des eingespritzten Stickstoffs. Liegt diese bei E4 deutlich unterhalb der Pseudo-Siedetemperatur von

		D4	E4
N ₂	u_{in} [m/s]	5	5
	T_{in} [K]	140	118
	ρ_{in}^1 [kg/m ³]	150.7	584.4
	Re^1 [-]	1.14×10^5	1.16×10^5
H ₂	u_{in} [m/s]	60	120
	T_{in} [K]	270	270
	ρ_{in}^1 [kg/m ³]	3.5	3.5
	Re^1 [-]	0.72×10^5	1.44×10^5
Kammer	p_k [MPa]	4	4
	T_k [K]	293	293
	j^1 [-]	3.34	3.45

Tabelle 6.3: Experimentelle Randbedingungen von Oswald et al. [165].

$T_{pb} = 129.75$ K, liegt sie bei D4 darüber. Bei E4 wird der Stickstoff also transkritisch und bei wesentlich höherer Dichte eingespritzt als bei D4. Interessanterweise hat die Temperaturdifferenz zwischen E4 und D4 kaum einen Einfluss auf die Reynoldszahl, da sich die dynamische Viskosität nahezu im gleichen Maße ändert wie die Dichte.

Ein weiterer Unterschied zwischen Testfall E4 und D4 ist die Geschwindigkeit, mit der Wasserstoff eingespritzt wurde. Diese ist bei E4 doppelt so hoch wie bei D4 und damit so gewählt, dass das Impulsstromverhältnis $j = (\rho_{H_2} u_{H_2}^2) / (\rho_{N_2} u_{N_2}^2)$ in beiden Testfällen nahezu identisch ist. Dies ist insofern interessant, da j nach klassischen Korrelationen für Koaxialeinspritzung ein Maß für die Länge des Strahlkerns ist [42].

Thermodynamischer Zustand

Vor der Diskussion der LES-Ergebnisse werden zunächst die thermodynamischen Zustände analysiert, die bei der binären Mischung von Stickstoff und Wasserstoff bei den hier relevanten Bedingungen auftreten. Hierzu ist eine Betrachtung der Exzessgrößen hilfreich. Die Exzessenthalpie

$$\Delta h = h(T, p, x) - \sum x_i h_i(T, p) \quad (6.1)$$

berechnet sich beispielsweise aus der Differenz zwischen der Enthalpie der Mischung h (Gl. 3.14) und der Summe der Einzelstoffenthalpien h_i . Bei Vernachlässigung molekularer Wechselwirkungen (ideales Gas) ist die Exzessenthalpie null. Bei Auftreten nichtlinearer Mischungseffekte kann Δh sowohl positive als auch negative Werte annehmen. Bei einigen Stoffkombinationen ändert sich das Vorzeichen auch in Abhängigkeit von der Zusammensetzung. Bei der Mischung von N₂ und H₂ treten ausschließlich positive Exzessenthalpien auf, was eine endotherme Mischung

¹Die Werte wurden mit Daten des NIST [1] berechnet.

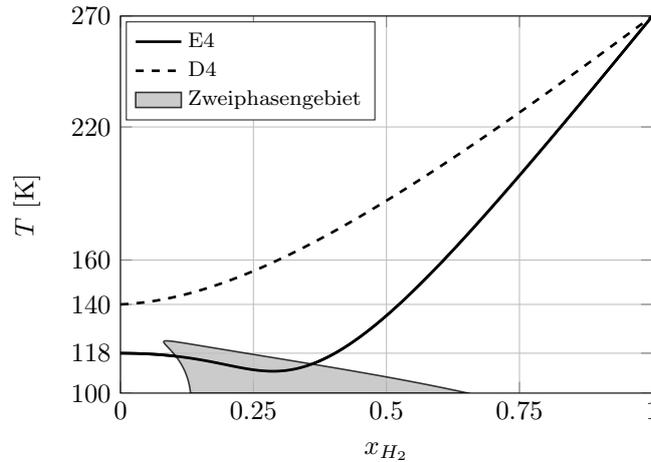


Abbildung 6.17: Adiabate Mischungstemperatur der binären N₂/H₂ - Mischung bei $p = 4$ MPa.

anzeigt. Ohne Energiezufuhr von außen, sinkt daher die Temperatur beim Mischen der beiden Stoffe.

Übertragen auf den Testfall von Oswald et al. ist daher zu erwarten, dass in der Scherschicht stromab des Koaxialinjektors eine mischungsbedingte Abkühlung stattfindet. Um diesen Effekt a-priori zu quantifizieren, wird die adiabate Mischung von N₂ und H₂ bei konstantem Druck ($p_k = 4$ MPa) betrachtet. Die Temperaturen der Einzelstoffe vor der Mischung werden dabei entsprechend der im Experiment gemessenen Einspritztemperaturen gewählt. Vor der Mischung liegt Stickstoff also bei $T_{N_2} = 118$ K (E4) bzw. $T_{N_2} = 140$ K (D4) vor, Wasserstoff bei $T_{H_2} = 270$ K. Betrachtet man eine adiabate Mischung bei konstantem Druck, bleibt die Enthalpie im System während der Mischung unverändert und entspricht der Summe der Einzelstoffenthalpien. Die adiabate Mischungstemperatur kann dann anhand der bekannten Enthalpie und des Drucks mit Hilfe von Gleichung 3.14 als Funktion der Zusammensetzung berechnet werden.

Der Verlauf der adiabaten Mischungstemperatur ist in Abbildung 6.17 als Funktion des H₂-Stoffmengenanteils x_{H_2} dargestellt. Bei der idealen Mischung der beiden Stoffe wäre die Mischungstemperatur eine gerade Verbindungslinie zwischen den Temperaturen der Einzelstoffe. Im Vergleich dazu ist hier eine deutliche Abkühlung zu beobachten. Bei Testfall E4 liegt das Minimum $T = 109.9$ K unterhalb der Temperatur der Reinstoffe und wird bei $x_{H_2} = 0.29$ erreicht.

Wie in Kapitel 3.3 diskutiert, kann der kritische Druck in Mischungen deutlich über dem der Reinstoffe liegen. In den Experimenten von Shtekkel et al. [207], die in Abbildung 3.6 dargestellt sind, wurde für die binäre N₂/H₂ - Mischung bei $T = 113$ K ein maximaler kritischer Druck von $p_c = 7.5386$ MPa gemessen. Der Wert übersteigt den Kammerdruck in dem Experiment von Oswald et al. [165] deutlich, was, berücksichtigt man die bei der adiabaten Mischung auftretenden Temperaturen, das Auftreten einer Phasentrennung indiziert. Daher wurde die Phasengrenze wie in Kapitel 3.3.2 beschrieben mit der PR-ZGL unter der Voraussetzung

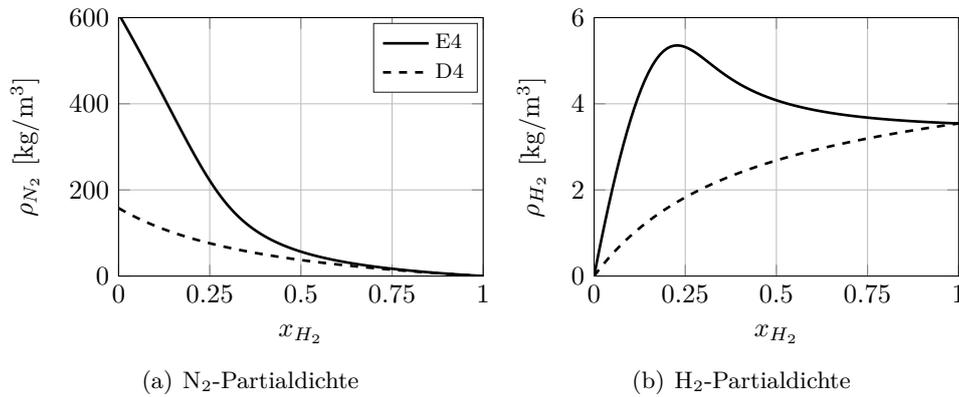


Abbildung 6.18: Partialdichten der adiabaten N₂/H₂ - Mischung bei p = 4 MPa.

gleicher Fugazitäten in der Flüssig- und Gasphase berechnet. Das Ergebnis ist in Abbildung 6.17 zusammen mit der adiabaten Mischungstemperatur dargestellt. Es zeigt sich, dass bei der adiabaten Mischung Zustände erreicht werden, die innerhalb des Zweiphasengebiets liegen. Eine gesonderte Modellierung des Phasenzerfalls wird allerdings im Rahmen dieser Arbeit nicht berücksichtigt.

Nichtlineare Mischungseffekte können auch bei anderen Zustandsgrößen beobachtet werden. In Abbildung 6.18 sind die Partialdichten der beiden untersuchten Stoffe als Funktion von x_{H₂} dargestellt. Es zeigt sich, dass die Wasserstoff-Partialdichte Werte erreicht, die die des Reinstoffs übersteigen. Das Maximum ist $\rho_{H_2} = 5.36 \text{ kg/m}^3$ und wird bei x_{H₂} = 0.23, also bei stickstoffreicher Mischung, erreicht. Die turbulente Mischung im Experiment verläuft jedoch weder adiabatisch, noch ist sie isobar. Dennoch hilft die Betrachtung der adiabaten Mischung bei der Analyse transkritischer Scherschichten. Wie im Folgenden gezeigt wird, stellt die adiabate Mischungstemperatur einen Grenzfall für die in der LES erreichten thermodynamischen Zustände dar.

6.2.2 Beschreibung der numerischen Simulation

Alle Simulationen werden mit dem in Kapitel 5.2.1 vorgestellten Strömungslöser RG Foam durchgeführt.

Rechengitter

Das Rechengebiet wird mit einem strukturierten Gitter vernetzt. In der Scherschicht zwischen kaltem Stickstoff und warmem Wasserstoff wird die Auflösung kontinuierlich verfeinert, um die großen Gradienten besser auflösen zu können. Das Rechengebiet und eine Detailansicht des Gitters am Injektor sind in Abbildung 6.19 dargestellt. Der Durchmesser und die Länge der Kammer ist in der Simulation kleiner als im Experiment. Die Abmaße sind jedoch so gewählt, dass eine durch diese Änderung hervorgerufene Beeinflussung des Strahls ausgeschlossen werden

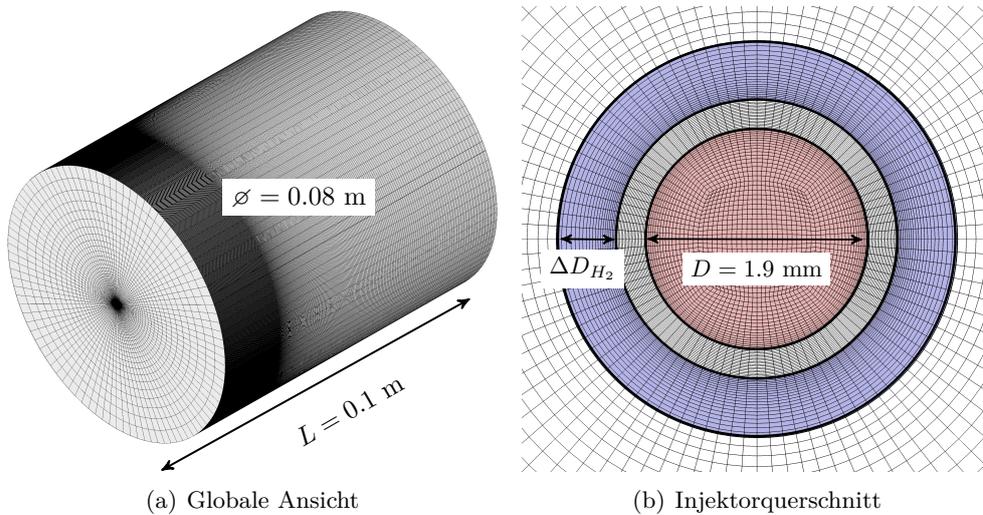


Abbildung 6.19: Rechengitter für die LES koaxialer N₂/H₂ - Einspritzung.

kann. Am Injektor beträgt die axiale Zellgröße $\Delta x = 0.08$ mm. Auf den Querschnitt des Koaxialinjektors (Stickstoff- und Wasserstoffeinlass sowie Post) entfallen 6048 Zellen und der minimale radiale Zellabstand am Post beträgt $\Delta r = 0.0125$ mm. Insgesamt werden 4.4×10^6 Zellen zur Vernetzung der Kammer verwendet.

Um zu überprüfen, ob die Netzqualität für die LES ausreichend ist, wird zunächst eine Gitterstudie durchgeführt. Hierzu wird das zuvor beschriebene Gitter in alle Raumrichtungen gleichmäßig um den Faktor 2 vergrößert und verfeinert. Das grobe Gitter besteht aus 0.58×10^6 und das feine Gitter aus 18.66×10^6 Zellen. Die Gitterstudie wird für Testfall E4 durchgeführt, da hier aufgrund der niedrigeren Einspritztemperatur höhere Dichtegradienten auftreten und eine größere Gittersensitivität zu erwarten ist. In Abbildung 6.20 sind die Ergebnisse der gemittelten Dichte auf der Symmetrieachse gezeigt. Wie schon bei der in Kapitel 6.1 betrachteten Stickstoff-Einspritzung, führt eine Erhöhung der Gitterauflösung dazu, dass sich die Position, an der der Strahlkern aufbricht, stromauf verschiebt. Die Verkürzung des Strahlkerns nimmt dabei mit steigender Gitterauflösung ab. Für die nachfolgenden Simulationen wird das Basisgitter verwendet, da der Unterschied zum feinem Gitter klein genug und das Ergebnis auch bei Verwendung von 4.4×10^6 Zellen aussagekräftig ist.

Modellierung

In der vorangegangenen Untersuchung trans- und überkritischer Einspritzung von Stickstoff (siehe Kap. 6.1) konnte gezeigt werden, dass das LES-Ergebnis bei Einspritztemperaturen unterhalb der Pseudo-Siedetemperatur eine hohe Sensitivität gegenüber der thermodynamischen Modellierung aufweist. Die Abudour-Korrektur [5] ist in diesem Bereich deutlich genauer als beispielsweise die unkorrigierte PR-ZGL. Im transkritischen Testfall E4 werden ähnliche Zustände erreicht, weswegen für die nachfolgenden Simulationen die Abudour-Korrektur verwendet wird.

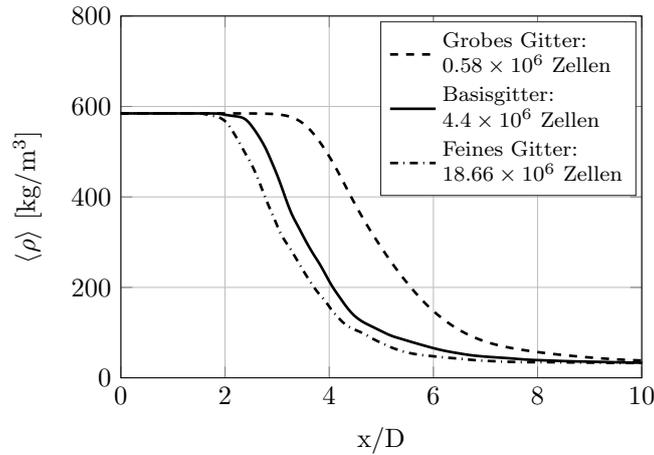


Abbildung 6.20: Gemittelte Dichte auf der Symmetrieachse von Testfall E4: Gitterstudie.

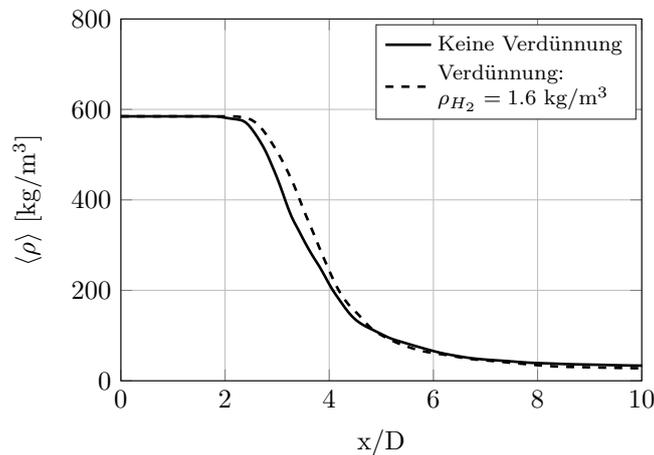


Abbildung 6.21: Gemittelte Dichte auf der Symmetrieachse von Testfall E4: Einfluss der Wasserstoff-Einlagerung.

Des Weiteren hat sich gezeigt, dass die durch das Smagorinsky-Modell induzierte Dissipation in der laminaren und transitionellen Scherschicht zu einer unphysikalischen Aufweitung des Strahls führen kann. Für die Simulation koaxialer Einspritzung wird daher das Vreman-Modell verwendet (siehe Kap. 2.2.5), um den Einfluss der Turbulenz auf den unaufgelösten Skalen abzubilden.

Zur Generierung des turbulenten Geschwindigkeitsfelds am Einlass wird wiederum eine separate inkompressible LES der Strömung im Injektor durchgeführt. Hierzu wird sowohl die Strömung des Wasserstoffs im Ringspalt als auch die des Stickstoffs im zentralen Rohr des Koaxialinjektors betrachtet. Die Randbedingungen in Strömungsrichtung sind zyklisch und die verwendeten Rechnetze bestehen aus 2×10^6 Zellen für die Stickstoff-Strömung und 1.6×10^6 Zellen für die Wasserstoff-Strömung. Die extrahierten Geschwindigkeitsprofile werden wie in Kapitel 6.1.2 beschrieben auf das Rechengitter des Testfalls von Oswald et al. interpoliert.

	\dot{m}_{N_2} [g/s]	T_{N_2} [K]	ρ_{N_2} [kg/m ³] ¹	u_{N_2} [m/s]	J [-]
E4	8.29	118.0	584.4	5.0	3.45
E4-Fit	8.29	128.8	390.2	7.5	2.30
D4	2.14	140.0	150.7	5.0	3.34
D4-Fit	2.14	158.8	106.8	7.1	2.37

Tabelle 6.4: Randbedingungen für die LES koaxialer N₂/H₂ - Einspritzung.

Im Experiment wurde die Testkammer vor dem Start der Einspritzung mit reinem Stickstoff geflutet, um klar definierte Randbedingungen zu generieren. Es konnte jedoch beobachtet werden, dass sich die Zusammensetzung des Atmosphärgases in der Kammer im Laufe des Experiments durch zunehmende Einlagerung des eingespritzten Wasserstoffs ändert [165]. Zum Zeitpunkt der Messung wurde in der Kammer eine Wasserstoff-Partialdichte von $\rho_{H_2} \approx 1.6 \text{ kg/m}^3$ beobachtet. Um zu überprüfen, ob die Verdünnung einen Einfluss auf die Strahlausbreitung hat, wurde die Zusammensetzung in der Kammer entsprechend geändert und das gemittelte Strömungsfeld mit dem Ergebnis aus der Rechnung mit unverdünntem Kammergas verglichen. In Abbildung 6.21 sind die gemittelten Dichten auf der Symmetrieachse für Testfall E4 dargestellt. Es zeigt sich, dass eine Verdünnung mit $\rho_{H_2} \approx 1.6 \text{ kg/m}^3$ keinen wesentlichen Einfluss auf den Strahlzerfall hat. In den nachfolgenden Rechnungen wird das Rechengebiet daher mit reinem Stickstoff initialisiert.

Übersicht über die berechneten Konfigurationen

Wie schon in den Experimenten von Mayer et al. [138] ist die Messung der Einströmtemperatur mit einer gewissen Unsicherheit behaftet. Oswald et al. [165] messen die Temperatur mit Hilfe von Thermoelementen in der Injektorströmung 20 mm stromauf des Kammereintritts. Dort ist die Strömung gut zugänglich und eine Beeinflussung des Strahls durch die Messtechnik ist weitgehend ausgeschlossen. Es ist jedoch wahrscheinlich, dass sich die Strömung zwischen der Messposition und dem Injektoraustritt weiter erwärmt.

Im vorangegangenen Kapitel hat sich gezeigt, dass bei transkritischer Einspritzung schon kleine Temperaturänderungen am Einlass den Strahlzerfall erheblich beeinflussen können. Aus diesem Grund wird, wie auch bei der Stickstoff-Einspritzung in Kapitel 6.1.1, die Einspritztemperatur des Stickstoffs aus der Dichtemessung im Strahlkern und dem Kammerdruck ermittelt. Da hier aus dem Experiment zusätzlich der Massenstrom bekannt ist, wird dieser bei der Anpassung der Einspritztemperatur konstant gehalten. Folglich wird zusätzlich zur Temperatur auch die Geschwindigkeit, mit der der Stickstoff in die Kammer strömt, angepasst. Die Randbedingungen für die durchgeführten Simulationen sind in Tabelle 6.4 zusammengefasst. Für die Konfigurationen D4-Fit und E4-Fit wurden jeweils angepasste turbulente Einströmprofile erzeugt.

¹Die Werte wurden mit Daten des NIST [1] berechnet.

6.2.3 Ergebnisse

Momentaufnahmen des Strömungsfelds

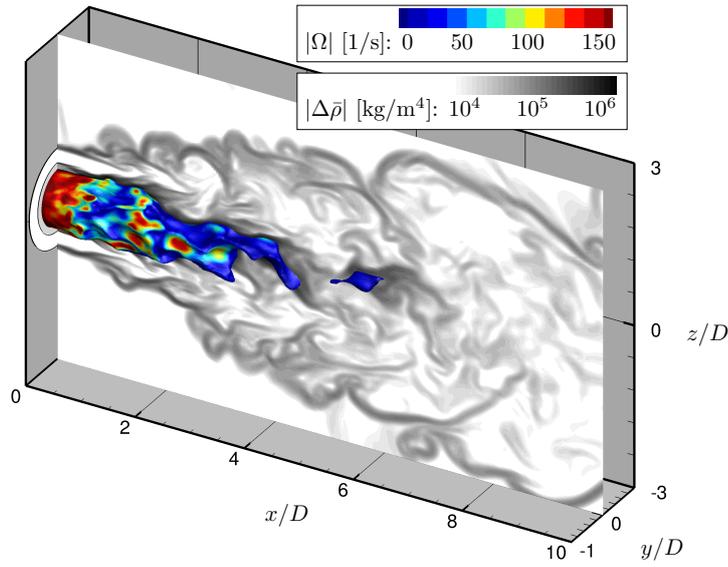
Zur Visualisierung der Strömung sind in Abbildung 6.22 die Dichte-Isoflächen für E4 und D4 gezeigt. Als Grenzwert wird das arithmetische Mittel zwischen der Dichte am N_2 - Einlass und der am H_2 - Einlass verwendet. Die Oberfläche ist mit dem Betrag der Wirbelviskosität eingefärbt. Zusätzlich ist die turbulente Mischung durch den Betrag des Dichtegradienten in einer Schnittebene bei $y = 0$ dargestellt.

Es zeigt sich, dass bei beiden Testfällen der durch die Isofläche markierte Strahlkern bereits bei $x/D \approx 4$ aufbricht. Er ist somit wesentlich kürzer als bei der zuvor betrachteten Stickstoff-Einspritzung (Abb. 6.5). Dies liegt vor allem an der großen Geschwindigkeitsdifferenz zwischen dem langsam eingespritzten Stickstoff und dem wesentlich schnelleren Wasserstoff. Durch die große Scherung werden Instabilitäten generiert, die den dichten Kern bereits unmittelbar hinter dem Injektoraustritt perturbieren, was sich in Abbildung 6.5 in einer Wellung der Dichte-Isofläche und einer Änderung der Wirbelstärke niederschlägt. Radiale Geschwindigkeitsfluktuationen wachsen schnell an, die entstehenden Wirbel brechen auf und führen schließlich zum Übergang in einen vollturbulenten Strömungszustand.

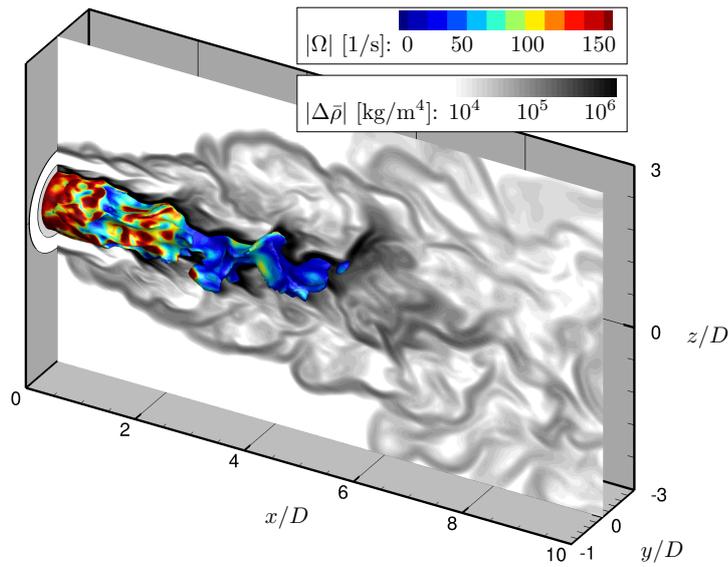
In Kapitel 6.1 hat sich gezeigt, dass die Dichtestratifizierung in der Scherschicht wesentlich zur Stabilisierung des Strahls beiträgt und der Kern bei transkritischer Einspritzung später aufbricht als bei überkritischer Einspritzung. Bei den beiden hier untersuchten Konfigurationen ist die Position des Strahlzerfalls hingegen nahezu identisch. Sowohl beim transkritischen Testfall E4 als auch beim überkritischen Testfall D4 ist stromab der Position $x/D \approx 4$ kein zusammenhängender Strahlkern erkennbar. Dem stabilisierenden Effekt der höheren Dichtestratifikation steht in Testfall E4 jedoch eine größere destabilisierend wirkende Scherung entgegen, die auf den im Vergleich zu D4 doppelt so schnell eingespritzten Wasserstoff zurückzuführen ist. Das drückt sich auch im Impulsstromverhältnis j aus, welches für D4 und E4 nahezu identisch ist.

In Abbildung 6.23 ist eine Momentaufnahme der Temperatur in einer Schnittebene bei $y = 0$ gezeigt. Temperaturen, die unter der Einspritztemperatur des Stickstoffs liegen, sind farblich markiert. Bei E4 tritt in der Scherschicht eine merkliche Abkühlung auf und der Stickstoffkern ist von einer Schicht umschlossen, in der die Temperatur mischungsbedingt unter den Wert am Einlass sinkt. Die kälteste Temperatur ist $T = 109.9$ K und stimmt mit dem der a-priori berechneten adiabaten Mischung überein (Abb. 6.17). Bei Testfall D4 ist die mischungsbedingte Abkühlung weniger stark und die Temperatur sinkt nicht unter den Wert des Reinstoffs.

In Abbildung 6.24 sind die zugehörigen Wasserstoff-Partialdichten gezeigt. Werte, die den am Wasserstoffeinlass ($\rho_{H_2} = 3.53$ kg/m³) übersteigen, sind farblich markiert. Hier äußern sich die nichtlinearen Mischungseffekte bei Testfall E4 in einem Anstieg der Wasserstoff-Partialdichte. Das Maximum beträgt $\rho_{H_2} = 5.53$ kg/m³ und stimmt wiederum mit dem a-priori berechneten Wert überein. Bei Testfall D4 wird der am Einlass erreichte Wert nicht überschritten.



(a) D4



(b) E4

Abbildung 6.22: Dichte-Isolflächen bei $\hat{\rho} = 0.5 (\bar{\rho}_{N_2} + \bar{\rho}_{H_2})$ mit Dichtegradient in der $y = 0$ Schnittebene. Die Oberflächen sind mit dem Betrag der Wirbelstärke eingefärbt.

Dieser Effekt wird auch in Abbildung 6.25 deutlich, in der die in der LES auftretenden Zustände in ein Zustandsdiagramm eingetragen sind. Die Daten entstammen der Strömungsrealisierung, die in Abbildung 6.23 dargestellt ist. Zusätzlich zu den LES-Ergebnissen sind die adiabate Mischungstemperatur und das Zweiphasengebiet aus Abbildung 6.17 eingezeichnet. Der untere Ast der adiabaten Mischung korre-

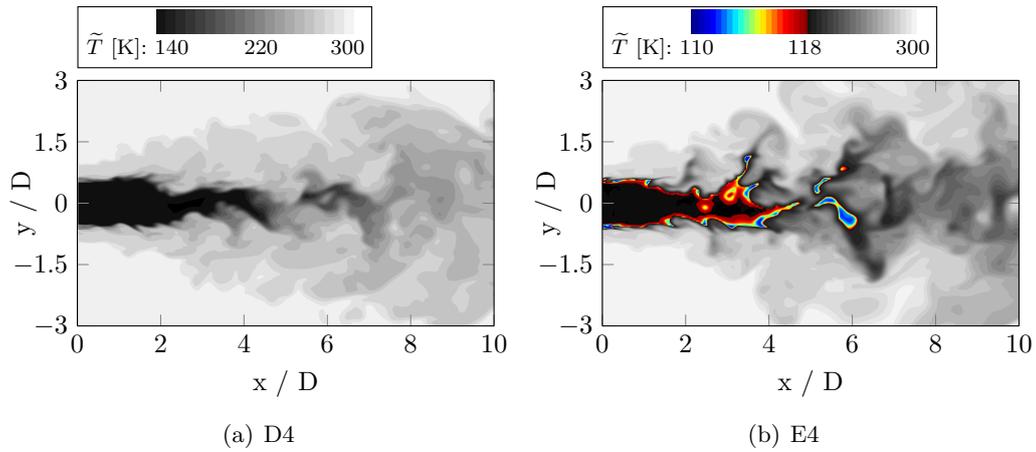


Abbildung 6.23: Momentaufnahme der Temperatur.

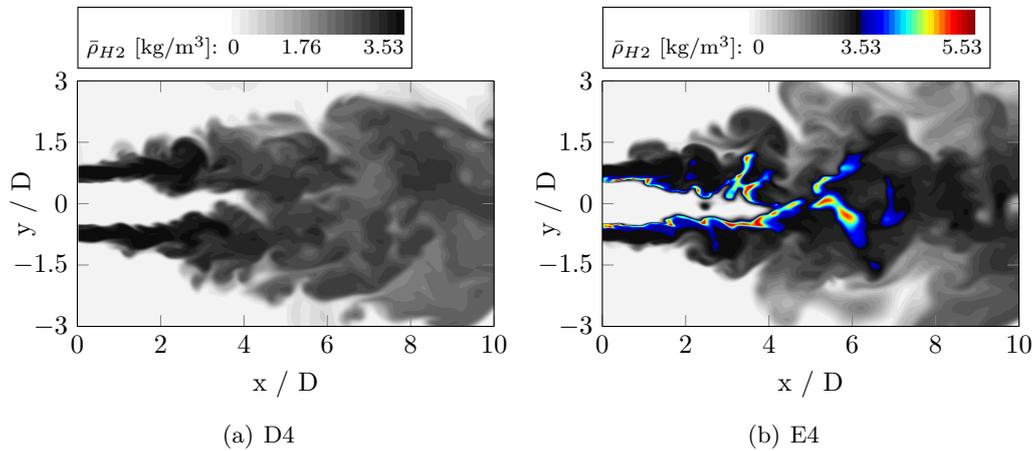
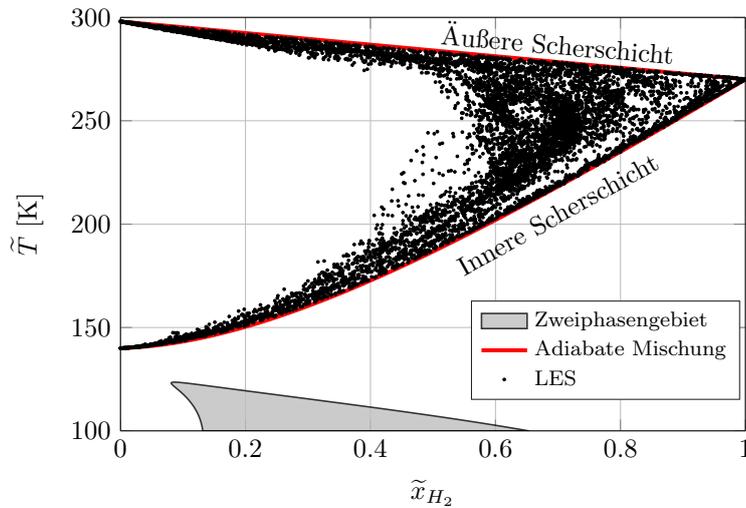


Abbildung 6.24: Momentaufnahme der Wasserstoff-Partialdichte.

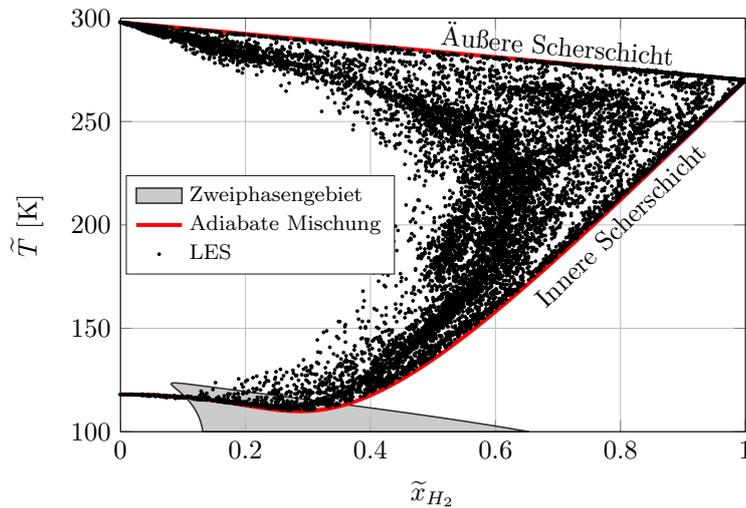
spondiert zur inneren Scherschicht, die sich hinter dem Post des Koaxialinjektors zwischen den beiden eingespritzten Fluiden ausbildet. Der obere Ast bildet die Zustände ab, die in der äußeren Scherschicht bei der Mischung des eingespritzten Wasserstoffs und des warmen Stickstoffs in der Kammer auftreten.

Bei beiden Testfällen ist die adiabate Mischung eine Grenze für die in der LES erreichten Zustände. In der äußeren Scherschicht stellt die adiabate Mischungstemperatur eine Grenzlinie maximaler Enthalpie dar. Die Zustände in der LES haben eine geringere Enthalpie. Bei der inneren Scherschicht verhält es sich umgekehrt. Hier stellt die adiabate Mischung eine Untergrenze für die Enthalpie dar. Die einseitige Abweichung von der adiabaten Mischung kann auf die turbulente Durchmischung zwischen dem kalten eingespritzten und dem warmen, in der Kammer befindlichen Stickstoff zurückgeführt werden.

Weiter zeigt Abbildung 6.25, dass in der LES bei Testfall E4 Zustände erreicht werden, die deutlich im Zweiphasengebiet liegen. Bei D4 wird das Zweiphasengebiet hingegen nicht geschnitten.



(a) D4



(b) E4

Abbildung 6.25: Zustandsdiagramm für die in der LES berechneten Temperaturen im Mischungsraum mit adiabater Mischungstemperatur und Zweiphasengebiet.

Vergleich mit dem Experiment

Für den quantitativen Vergleich mit dem Experiment, werden die gefilterten Strömungsfelder zeitlich gemittelt (siehe Kapitel 2.2.6). Die Zeitspanne für die Mittelung beträgt $\Delta t = 10\text{ms} \approx 26D/u_{N_2}$.

In Abbildung 6.26 sind die gemittelten Verläufe der Partialdichten von Wasserstoff und Stickstoff auf der Symmetrieachse des Strahls dargestellt. Bei Testfall E4 kann man bei den Messergebnissen von Oswald et al. [165] ein Plateau konstanter Stickstoff-Partialdichte zwischen $0 < x/D < 2.5$ beobachten. Es folgt ein recht langer Abfall bis bei $x/D \approx 10$ der Wert der durchmischten Strömung erreicht wird.

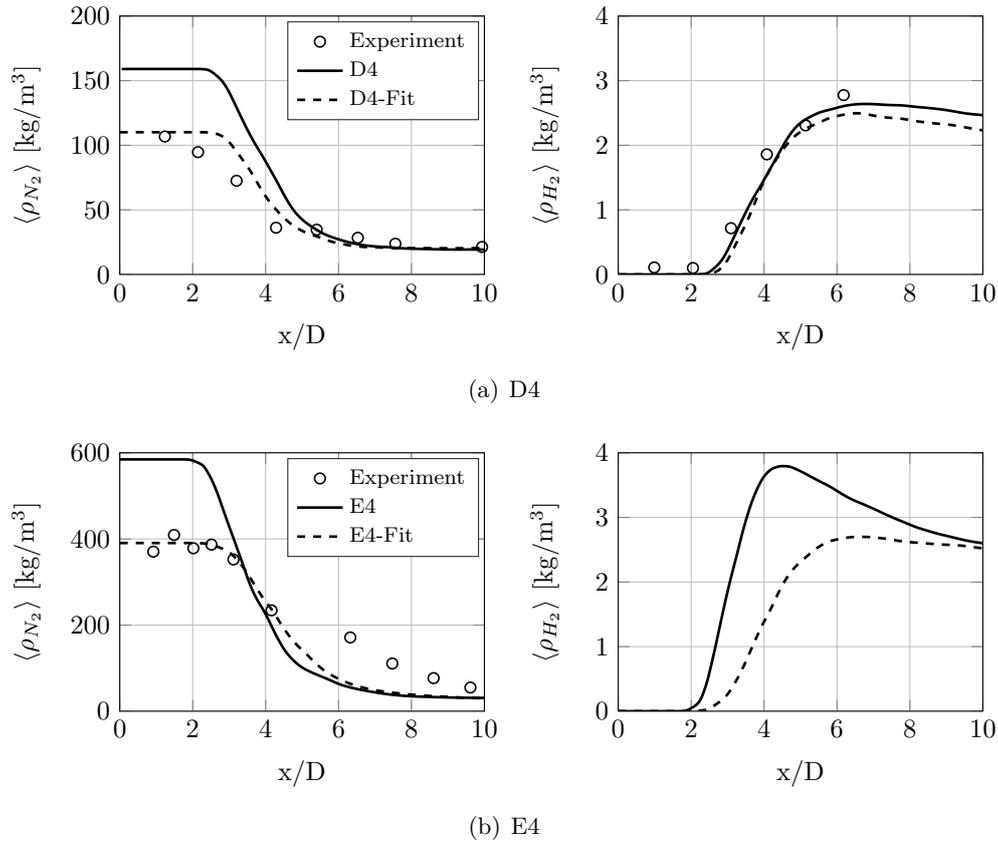


Abbildung 6.26: Gemittelte Partialdichten von Wasserstoff und Stickstoff auf der Symmetrieachse.

Bei Testfall D4 ist das Plateau der Stickstoff-Partialdichte weniger deutlich. Auch der Abfall ist wesentlich steiler und endet bereits bei $x/D \approx 4$. Der zugehörige Verlauf der Wasserstoff-Partialdichte wurde aus den von Oswald et al. [166] veröffentlichten zweidimensionalen Messungen extrahiert. Die Dichte ρ_{H_2} steigt im Bereich $2 < x/D < 6$ stark an. Für den Testfall E4 stehen keine Messungen der Wasserstoff-Partialdichte auf der Symmetrieachse zur Verfügung.

Der Vergleich zwischen den Simulationsergebnissen und dem Experiment zeigt, dass bei Verwendung der gemessenen Einspritztemperaturen (Konfiguration E4 und D4) ein deutlicher Versatz zwischen der gemessenen und der berechneten Stickstoff-Partialdichte am Einlass und folglich im Bereich des Strahlkerns besteht. Die Dichtedifferenz beträgt bei E4 $\Delta\rho_{N_2} \approx 200 \text{ kg/m}^3$ und bei D4 $\Delta\rho_{N_2} \approx 50 \text{ kg/m}^3$. Sie ist auf Unsicherheiten bei der Bestimmung der Einspritztemperatur zurückzuführen.

Trotz des Unterschieds zwischen experimentell gemessener und berechneter Dichte am Einlass, stimmt die Position, an der der Strahlkern aufbricht, im Experiment und in der LES gut überein. Bei D4 zeigt sich die gute Übereinstimmung insbesondere in den Ergebnissen für die Wasserstoff-Partialdichte. Hier wird die Position, bei der Wasserstoff die Symmetrieachse erreicht, nahezu perfekt getroffen.

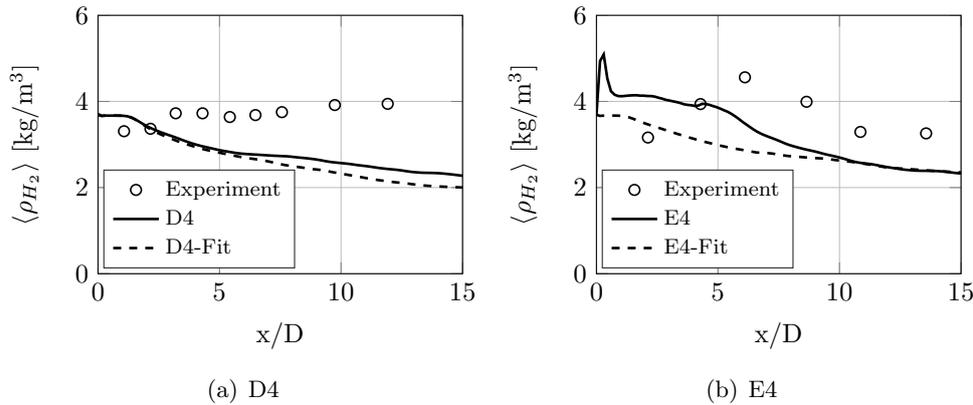


Abbildung 6.27: Maximale gemittelte Wasserstoff-Partialdichte als Funktion des Abstands vom Injektor.

Abweichungen zum Experiment treten bei E4 im Bereich des Strahlzerfalls auf. Im Experiment wird ein langsamer Abfall der Dichte zwischen $2.5 < x/D < 10$ gemessen, wohingegen sich der kalte Stickstoff in der LES wesentlich schneller mischt und die Dichte bereits bei $x/D \approx 6$ den Wert der Umgebung erreicht.

Vergleicht man die Ergebnisse der Simulationen mit angepasster Einspritztemperatur (D4-Fit und E4-Fit) mit denen der Simulationen mit gemessener Einspritztemperatur (D4 und E4), fällt auf, dass sich die Verläufe der Stickstoff-Partialdichte, abgesehen von der Dichtedifferenz im Strahlkern, nur unwesentlich unterscheiden. Bei Testfall D4 sind die Position des Strahlauflaufs sowie die Länge des Dichteabfalls nahezu identisch. Bei Testfall E4 ist der Kern bei Verwendung der angepassten Temperatur etwas länger und der Abfall weniger steil. Der geringe Unterschied zwischen den Verläufen der Stickstoff-Partialdichte ist insofern bemerkenswert, da die Erhöhung der Einspritztemperatur bei Konstanzhaltung des Massenstroms mit einer deutlichen Verringerung des Impulsstromverhältnisses einhergeht (siehe Tab. 6.4). Bei Testfall D4 beträgt die Änderung 29%, bei Testfall E4 33%. Nach klassischen Korrelationen für koaxiale Einspritzung, wie beispielsweise der von Davis und Chehoudi [42], skaliert die Länge des Strahlkerns umgekehrt proportional mit der Wurzel des Impulsstromverhältnisses. Man würde also erwarten, dass sich der Strahlzerfall bei Anpassung der Einspritztemperatur stromab verschiebt, was jedoch in der Simulation bei D4 nicht und bei E4 nur geringfügig eintritt.

Der Unterschied, der mit der Änderung der Einspritztemperatur einhergeht, zeigt sich deutlicher am Verlauf der Wasserstoff-Partialdichte für E4. Bei Verwendung der nicht angepassten Temperatur tritt ein Überschwinger bei $x/D \approx 4$ auf. Das Maximum des gemittelten Werts übersteigt an dieser Stelle den Wert am Einlass, was, wie zuvor diskutiert (Abb. 6.18), auf nichtlineare Mischungseffekte zurückzuführen ist. Bei den Ergebnissen für die Konfiguration E4-Fit, bei der die Stickstoff-Einspritztemperatur um $\Delta T = 10.8$ K höher gewählt und die Abweichung von der idealen Mischung daher geringer ist, tritt dieser Effekt wie auch bei den Simulationen zu Testfall D4 nicht auf.

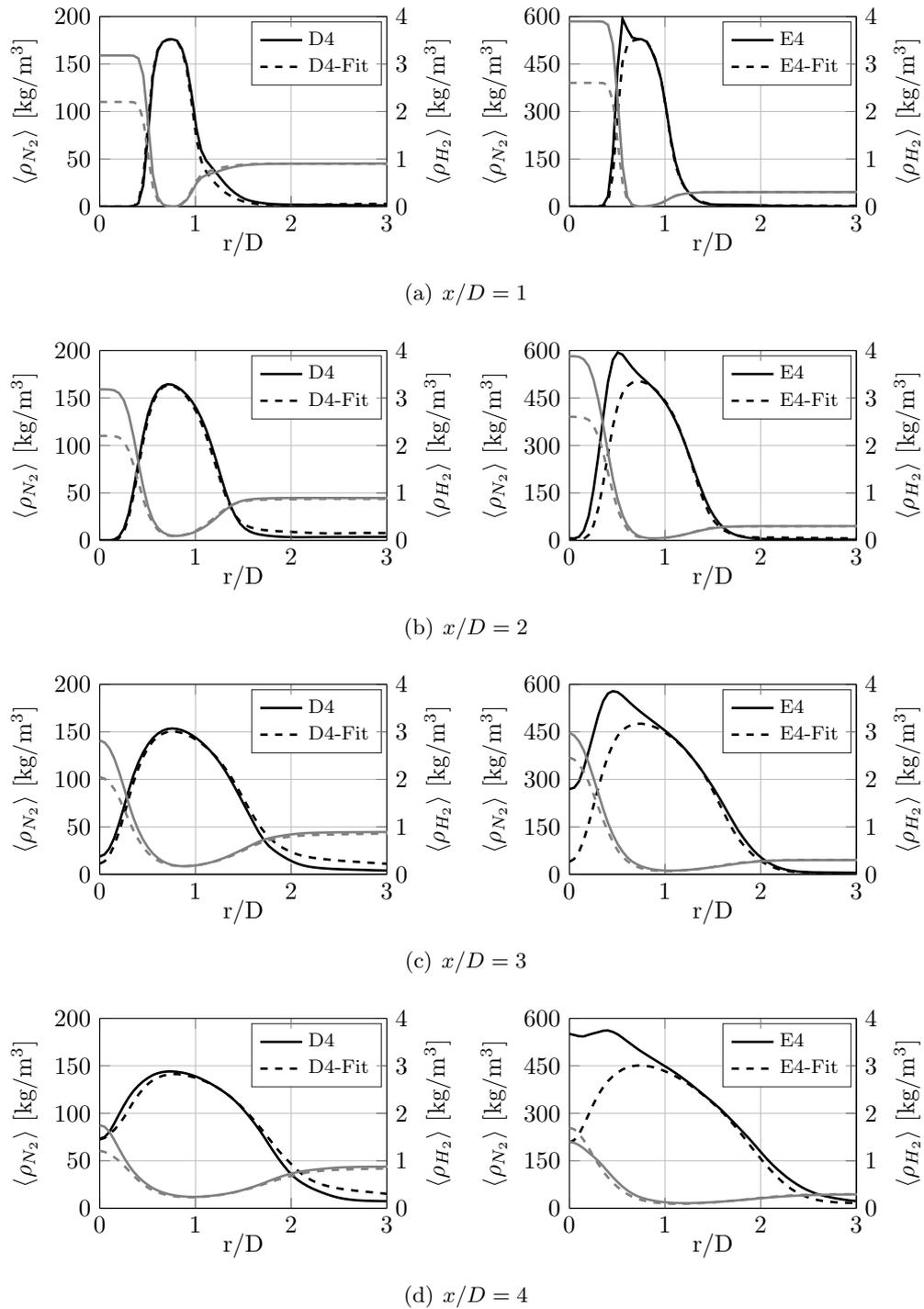


Abbildung 6.28: Gemittelte Partialdichten von Wasserstoff und Stickstoff als Funktion des Abstands von der Symmetrieachse an den vier axialen Positionen $x/D = 1, 2, 3$ und 4 . Grau: $\langle \rho_{N_2} \rangle$; Schwarz: $\langle \rho_{H_2} \rangle$.

Der Anstieg von $\langle \rho_{H_2} \rangle$ wurde auch in den Experimenten von Oswald et al. [165] beobachtet. Die Maximalwerte der Wasserstoff-Partialdichte in injektorparallelen Ebenen sind in Abbildung 6.27 als Funktion des Injektorabstands aufgetragen. Es

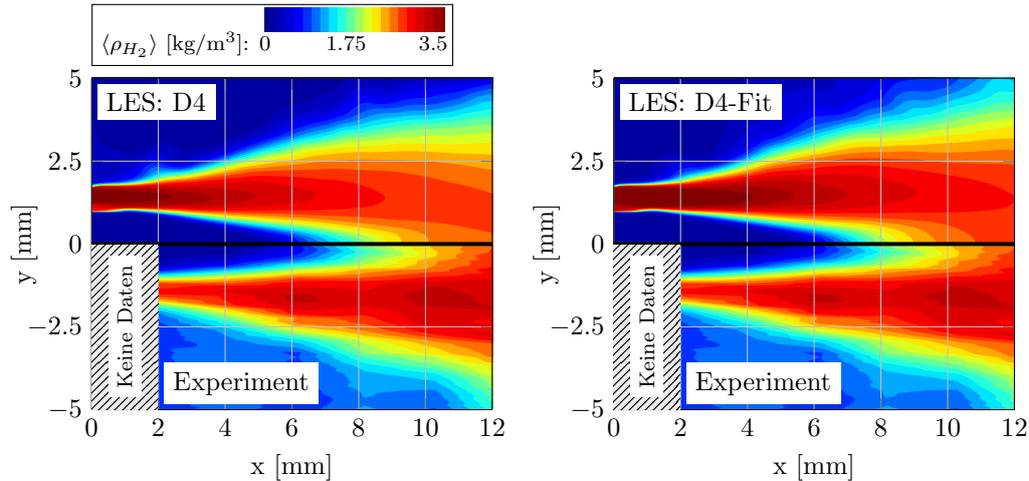


Abbildung 6.29: Vergleich der gemessenen und der berechneten Wasserstoff-Partialdichten in der Schnittebene bei $z = 0$ mm.

ist interessant, dass für E4 im Experiment ein qualitativ ähnlicher Anstieg der Wasserstoff-Partialdichte beobachtet werden kann wie in der LES. Der Verlauf der gemessenen Maximalwerte unterscheidet sich allerdings teils deutlich vom Simulationsergebnis. Eine Bewertung ist dadurch erschwert, dass die radiale Position, an der die Maximalwerte im Experiment auftreten, unbekannt ist. Eine Zuordnung der Abweichung ist daher nicht möglich.

Der bei E4 beobachtete Anstieg der Wasserstoff-Partialdichte in der Scherschicht wird auch in Abbildung 6.28 deutlich, in der die radialen Profile von $\langle \rho_{H_2} \rangle$ und $\langle \rho_{N_2} \rangle$ an vier axialen Positionen aufgetragen sind. Während der Verlauf der Wasserstoff-Partialdichte bei E4 auf der Innenseite der Scherschicht ein deutliches Maximum aufzeigt, das den Wert am Einlass übersteigt, fällt $\langle \rho_{H_2} \rangle$ bei E4-Fit nach Erreichen des Werts $\rho_{H_2} = 3.53$ kg/m³ ab und der Verlauf ist dem vom überkritischen Testfall D4 sehr ähnlich. Vom Unterschied zwischen E4 und E4-Fit bei der Wasserstoff-Partialdichte kann jedoch nicht unmittelbar auf Unterschiede im Strömungsfeld geschlossen werden. Die radiale Ausbreitung der Stickstoff-Partialdichte verläuft bei E4 und E4-Fit nahezu identisch. Ebenso verhält es sich für D4 und D4-Fit. Hier hat die Änderung der Einspritztemperatur von Stickstoff bei Konstanthaltung des Massenstroms keinen signifikanten Effekt auf die Strahlausbreitung.

Ein weiterer Vergleich zwischen Experiment und LES ist in Abbildung 6.29 gezeigt. Die zweidimensionalen Messergebnisse der Wasserstoff-Partialdichte für Testfall D4 in den unteren Hälften der Darstellung entstammen der Publikation von Oswald et al. [166]. Die quantitativen Messergebnisse wurden von Oswald [163] im Rahmen der Zusammenarbeit im SFB-TRR 40 für diese Arbeit zur Verfügung gestellt. Die direkte Gegenüberstellung der zweidimensionalen Ergebnisse zeigt, dass das in der LES berechnete Strömungsfeld sehr gut mit dem Experiment übereinstimmt. Sowohl der berechnete Öffnungswinkel als auch die Länge des Stickstoffkerns stimmen mit den Messungen überein. Zwischen den beiden Konfigurationen D4 und D4-Fit besteht kein signifikanter Unterschied.

6.2.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde die koaxiale Einspritzung von trans- und überkritischem Stickstoff und überkritischem Wasserstoff untersucht. Die LES-Ergebnisse wurden mit den Messergebnissen von Oschwald et al. [165] verglichen. Dabei wurden insbesondere die thermodynamischen Effekte der nichtlinearen Mischung in der Scherschicht und deren Einfluss auf die Strömung untersucht.

Eine a-priori Studie der bei der Mischung auftretenden thermodynamischen Zustände hat gezeigt, dass bei transkritischer Einspritzung des Stickstoffs eine Abkühlung in der Scherschicht zu erwarten ist. Aufgrund nichtlinearer Mischungseffekte sinkt die Temperatur bei adiabaten Bedingungen unter die Temperatur der Reinstoffe. Mit den experimentellen Randbedingungen des transkritischen Testfalls E4 ergeben sich dabei Zustände, die im Zweiphasengebiet liegen. Die Mischung kann also lokal unterkritisch sein. Eine Phasentrennung in eine flüssige und eine dampfförmige Phase ist bei diesen Einspritzbedingungen wahrscheinlich. Eine gesonderte Modellierung des transkritischen Phasenzufalls wurde in der LES im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht berücksichtigt. Wird Stickstoff, wie in Testfall D4, überkritisch eingespritzt, ist die Nichtlinearität der Mischung weniger stark ausgeprägt und die Abkühlung der Mischung geringer. Auch treten bei diesem Testfall keine Zustände auf, die innerhalb des Zweiphasengebiets liegen.

Ein Vergleich zwischen den LES-Ergebnissen und der adiabaten Mischung hat gezeigt, dass die adiabate Mischungstemperatur eine Grenzlinie im Zustandsraum beschreibt, die in der turbulenten Strömung nicht überschritten wird. In der inneren Scherschicht der Strömung beschreibt sie eine Temperaturuntergrenze, in der äußeren Mischungsschicht zwischen koaxial eingespritztem Wasserstoff und umgebendem Stickstoff eine Temperaturobergrenze. Die durch die adiabate Mischung antizipierte mischungsbedingte Abkühlung bei Testfall E4 wurde in der LES auch quantitativ reproduziert. Der transkritische Stickstoffkern ist von einer Mischungsschicht umschlossen, in der die Temperatur unter den Wert des eingespritzten Stickstoffs fällt. Dort werden Zustände erreicht, die bei Annahme des thermodynamischen Gleichgewichts instabil sind.

Ein Vergleich mit den verfügbaren Messdaten zeigt, dass die Position des Strahlauflaufs in der LES sehr gut wiedergegeben wird. Abweichungen treten bei E4 im Bereich des Strahlzerfalls auf. Der berechnete Dichteabfall ist deutlich steiler als der im Experiment gemessene. Für den überkritischen Testfall D4 stehen zusätzlich zweidimensionale Messergebnisse für die gemittelte Wasserstoff-Partialdichte zur Verfügung. Ein Vergleich mit den LES-Ergebnissen zeigt, dass neben der Position des Strahlauflaufs auch die radiale Ausbreitung und die Mischung stromab des Auflaufs gut wiedergegeben werden.

6.3 Mascotte V04: Transkritische LO_x/GCH₄ - Verbrennung

Anhand der zuvor gezeigten inerten Testfälle konnte die Wechselwirkung zwischen Realgaseffekten und turbulenter Strömung bei transkritischen Einspritzbedingungen untersucht und geeignete Modelle zu deren Beschreibung identifiziert werden. In diesem Kapitel wird nun die koaxiale Einspritzung und Verbrennung von transkritischem Sauerstoff und überkritischem Methan betrachtet. Im Vergleich zu klassischen Raketentreibstoffen wie Wasserstoff oder Kerosin, bietet Methan einige Vorteile, die dessen Untersuchung im Hinblick auf die Anwendung in Trägerraketen interessant machen. Zu nennen wären hier der im Vergleich zu Kerosin höhere spezifische Impuls und die besseren Kühleigenschaften [22]. Auch ist die Verarbeitung und Lagerung von Methan im Vergleich zu Wasserstoff deutlich einfacher und aufgrund der höheren Dichte reduziert sich das Volumen der Treibstofftanks [109]. Da Methan bisher jedoch noch nicht in Trägerraketen eingesetzt wurde, existiert vergleichsweise wenig Erfahrung zu dessen Verhalten bei transkritischer Verbrennung. Auch in der Strömungssimulation müssen die für die LO_x/GH₂ - Verbrennung etablierten Modellierungen im Hinblick auf die Anwendung zur Simulation der LO_x/GCH₄ - Verbrennung überprüft werden. Sowohl die der Verbrennung zugrunde liegende Reaktionskinetik als auch die thermodynamischen Eigenschaften unterscheiden sich und beeinflussen die in der Strömung auftretenden charakteristischen Zeit- und Längenskalen. Daher werden hier zwei Verbrennungsmodelle, der Flamelet-Ansatz und die ESF-Methode, hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit zur Simulation transkritischer Methan-Flammen getestet.

6.3.1 Beschreibung des Testfalls

Den im Folgenden vorgestellten Simulationen liegt die Messreihe von Singla et al. [209] zugrunde, die am Mascotte-Prüfstand der ONERA durchgeführt wurde. Der ursprünglich zur Untersuchung der LO_x/GH₂ - Verbrennung konzipierte Aufbau wurde von Singla et al. erweitert (V04), um Methan als Treibstoff verwenden zu können. Im Experiment werden, bezogen auf den Sauerstoff, sowohl über- als auch unterkritische Kammerdrücke untersucht. Die Temperatur des koaxial eingespritzten Methans wird so variiert, dass sowohl überkritische als auch transkritische Einspritzbedingungen vorliegen. Die Brennkammer ist quadratisch, 400 mm lang und hat eine Kantenlänge von 50 mm. Ein 75 mm langes verschiebbares Fenster in der Kammerwand ermöglicht die Messung der spontanen OH*- und CH*-Strahlung.

Für den Vergleich mit der Simulation wird der Betriebspunkt G2 ausgewählt, für den die experimentellen Randbedingungen in Tabelle 6.5 zusammengefasst sind. Der Kammerdruck $p_k = 5.61$ MPa liegt bei dieser Konfiguration über dem kritischen Druck der beiden eingespritzten Stoffe ($p_{c,O_2} = 5.04$ MPa und $p_{c,CH_4} = 4.6$ MPa). Die Einspritztemperatur von Sauerstoff liegt unterhalb der Pseudo-Siedetemperatur ($T_{in,O_2} < T_{pb,O_2} = 157.4$ K), die von Methan liegt darüber ($T_{in,CH_4} > T_{pb,CH_4} = 197.2$ K). Folglich besteht ein großer Dichteunterschied zwischen dem transkritischen Oxidator und dem überkritischen Methan. Die Ein-

LOx	\dot{m}_{in} [g/s]	44.4
	T_{in} [K]	85
	ρ_{in}^1 [kg/m ³]	1177
GCH ₄	\dot{m}_{in} [g/s]	143.1
	T_{in} [K]	288
	ρ_{in}^1 [kg/m ³]	42
Kammer	p_k [MPa]	5.61

Tabelle 6.5: Experimentelle Randbedingungen von Singla et al. [209].

spritzbedingungen sind denen in einer regenerativ gekühlten Brennkammer nachempfunden, bei der der kryogene Sauerstoff der Brennkammer direkt zugeführt wird, wohingegen Methan zunächst zur Kühlung der Brennkammerwand verwendet und anschließend warm eingespritzt wird.

6.3.2 Beschreibung der numerischen Simulation

Zur Simulation der LOx/GCH₄ - Verbrennung werden zwei Verbrennungsmodelle verwendet, denen jeweils ein eigener Lösungsalgorithmus zu Grunde liegt. Simulationen, in denen die Flamelet-Modellierung verwendet wird, werden mit dem in Kapitel 5.2.2 vorgestellten Strömungslöser RGflameletFoam durchgeführt. Simulationen mit der ESF-Methode werden mit dem Strömungslöser RGstochasticFieldsFoam aus Kapitel 5.2.3 durchgeführt.

Rechengitter

Das Rechengebiet wird strukturiert vernetzt. Im inneren Bereich wird ein \mathcal{O} -Gitter verwendet, um den runden Injektor aufzulösen. Zur Wand hin geht die Gittertopologie kontinuierlich auf den quadratischen Querschnitt der Kammer über. Um den Rechenaufwand zu reduzieren, wird das Rechengebiet im Vergleich zum Experiment verkürzt. Die Länge ($L = 150$ mm) ist jedoch so gewählt, dass die Flamme nicht mit dem Ausströmrand interagiert. Es wird angenommen, dass alle Wände adiabat sind. Das Rechengitter ist in Abbildung 6.30 dargestellt.

Die genaue Geometrie des bei Mascotte V04 verwendeten Injektors ist nicht publiziert, weswegen für die hier vorgestellten Simulationen plausible Werte angenommen werden. Diese orientieren sich an den Maßen des Injektors, der in den Vorgängerversionen des Mascotte-Prüfstands (V01 - V03) verwendet wurde. Der Innendurchmesser wird mit $D_{LOx} = 4.4$ mm angenommen. Die Breite des Posts zwischen LOx- und CH₄-Einlass wird mit $\Delta D_p = 0.6$ mm, die des CH₄-Ringspalts mit $\Delta D_{CH_4} = 2.2$ mm abgeschätzt. Des Weiteren wird davon ausgegangen, dass der Injektor 8.6 mm in die Kammer ragt. Die verwendete Geometrie ist in Abbildung 6.31 dargestellt. Die sich mit diesem Injektor ergebenden Kennzahlen der Einspritzung sind in Tabelle 6.6 zusammengefasst.

¹Die Werte wurden mit Daten des NIST [1] berechnet.

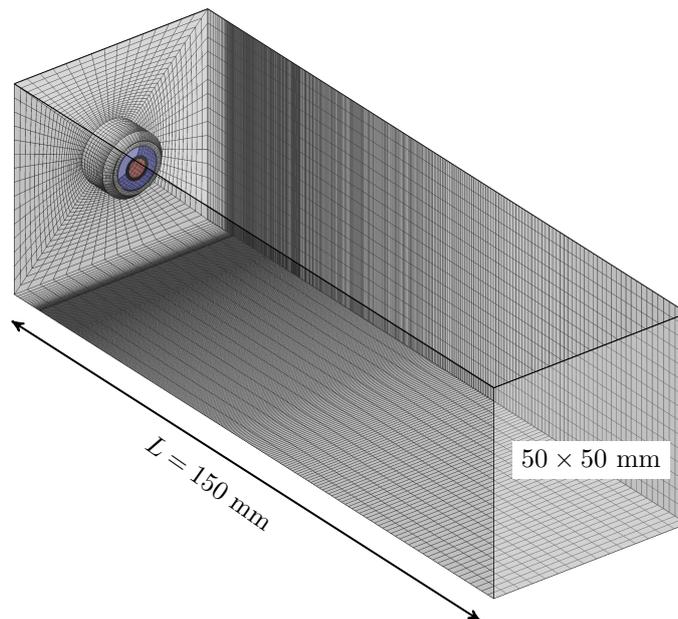
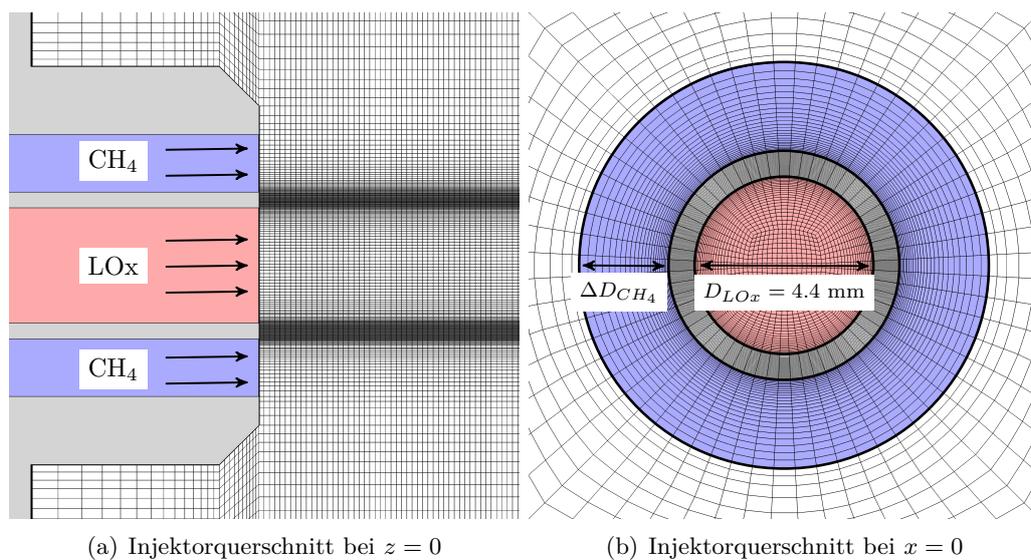


Abbildung 6.30: Rechengitter für die LES transkritischer LO_x/GCH₄ - Verbrennung: Globale Ansicht.

Für die Rechnungen werden zwei verschiedene Gitterauflösungen verwendet. Das Basisgitter besteht aus 2×10^6 Gitterzellen. Der Injektor-Post ist mit 24 Zellen aufgelöst, was einem radialen Zellabstand von $\Delta r = 0.025$ mm entspricht. Der Zellabstand in axialer Richtung am Injektor beträgt $\Delta x = 0.2$ mm. Das besser aufgelöste Gitter wird ausgehend vom Basisgitter in alle Raumrichtung um den Faktor 2 verfeinert und besteht folglich aus 16×10^6 Gitterzellen.



(a) Injektorquerschnitt bei $z = 0$

(b) Injektorquerschnitt bei $x = 0$

Abbildung 6.31: Rechengitter für die LES transkritischer LO_x/GCH₄ - Verbrennung: Detailansicht Injektor.

LOx	u_{in} [m/s]	2.5
	Re^1	5.36×10^4
	Ma^1	0
GCH ₄	u_{in} [m/s]	63.2
	Re^1	9.69×10^5
	Ma^1	0.15
Kammer	j^1	23.2

Tabelle 6.6: Kennzahlen der Einspritzung für die LES transkritischer LOx/GCH₄ - Verbrennung bei der gewählten Injektorgeometrie.

Übersicht über die berechneten Konfigurationen

Das Ziel der folgenden Rechnungen ist zum einen die Validierung der Simulationsverfahren anhand der experimentellen Messungen und zum anderen eine Bewertung der beiden Verbrennungsmodellierungen hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit in der LES transkritischer Methan-Verbrennung. Die hierzu verwendeten Konfigurationen sind in Tabelle 6.7 zusammengefasst. Bei G2-01 wird der in Kapitel 4.3.2 beschriebene Flamelet-Ansatz, bei G2-02 die in Kapitel 4.3.1 beschriebene ESF-Methode verwendet. Für den Vergleich der beiden Modelle wird das grobe Gitter verwendet, da die Verwendung des feinen Gitters mit der ESF-Methode aufgrund beschränkter Computerressourcen nicht möglich war. Bei Verwendung der Flamelet-Modellierung ist der Rechenaufwand deutlich geringer, da die Reaktionsraten nicht während der Laufzeit berechnet werden, sondern die Flammenstruktur aus der vorab erstellten Flamelet-Bibliothek interpoliert wird. Mit dieser Methode können auch Simulationen mit dem feinen Gitter durchgeführt werden (G2-03).

	Gitterauflösung	Verbrennungsmodell
G2-01	2×10^6	Flamelet
G2-02	2×10^6	ESF
G2-03	16×10^6	Flamelet

Tabelle 6.7: Randbedingungen für die LES der LOx/GCH₄ - Verbrennung.

Flammenstruktur

Bei Verwendung der Flamelet-Modellierung (G2-01 und G2-03) wird die Zusammensetzung in der Flamme vorab berechnet und anhand der drei Parameter Mischungsbruch f , dessen Varianz $\widehat{f''^2}$ und der skalaren Dissipationsrate χ_{st} tabelliert. Zur Generierung der Tabellen werden die Flamelet-Gleichungen (Gln. 4.24 - 4.25) für verschiedene skalare Dissipationsraten mit dem von Pitsch entwickelten Programm Flamemaster [178] gelöst. Hierzu wird der in Kapitel 4.2.2 beschriebene reduzierte Mechanismus von Frassoldati et al. [56] (JL-R-Mechanismus) verwendet.

¹Die Werte sind mit Daten des NIST [1] berechnet.

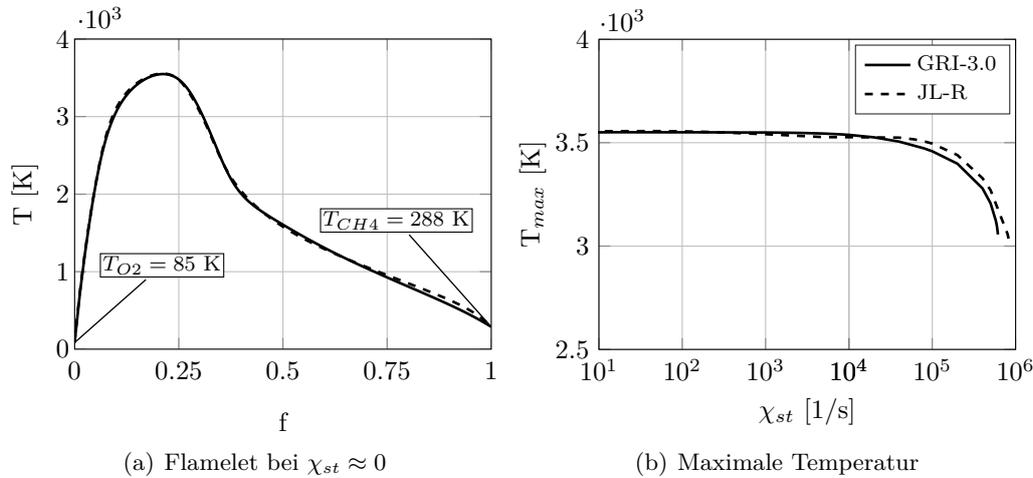


Abbildung 6.32: Flamelet-Ergebnis für die Temperatur in einer LO_x/GCH₄-Flamme: Vergleich zwischen GRI-3.0 und JL-R.

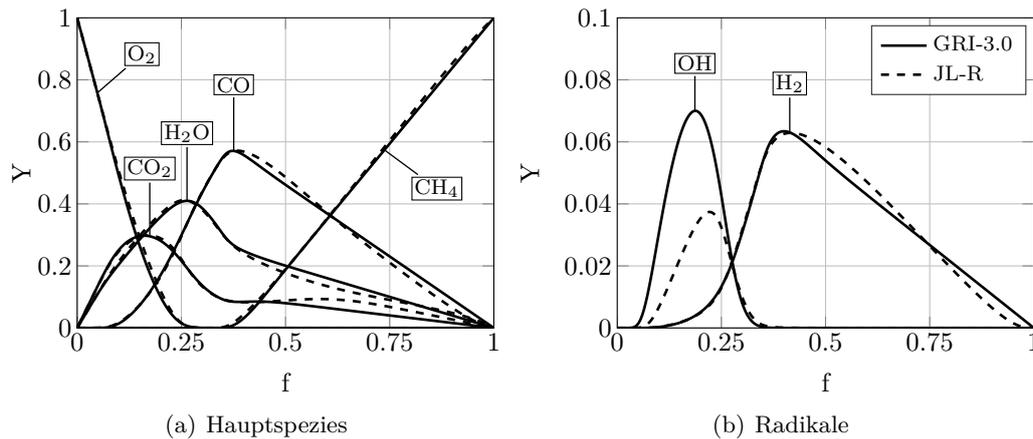


Abbildung 6.33: Flamelet-Ergebnis für die Zusammensetzung in einer LO_x/GCH₄-Flamme bei $\chi_{st} \approx 0$: Vergleich zwischen GRI-3.0 und JL-R.

Die thermodynamische Modellierung, die der Flamelet-Rechnung zu Grunde liegt, basiert auf dem idealen Gasgesetz, da sich der Einfluss der Realgaseffekte aufgrund des schnellen Temperaturanstiegs in der Flamme auf einen schmalen Bereich nahe des Einlasses beschränkt [181].

In Abbildung 6.32(a) ist der Temperaturverlauf im Mischungsbruchraum dargestellt, der sich aus der Flamelet-Rechnung bei kleiner skalarer Dissipation $\chi_{st} \approx 0$ ergibt. Die Ergebnisse des reduzierten Mechanismus stimmen gut mit denen des vollen Mechanismus (GRI-3.0) überein. Die maximale Temperatur beim stöchiometrischen Mischungsbruch $f_{st} = 0.2$ beträgt bei Verwendung des JL-R-Mechanismus $T_{max} = 3555$ K, bei Verwendung des GRI-3.0 $T_{max} = 3548$ K. In Abbildung 6.32(b) sind die maximalen Temperaturen als Funktion der skalaren Dissipationsrate aufgetragen. Auch hier stimmen die Ergebnisse des vollen und des reduzierten Mechanismus gut überein. Die skalare Dissipationsrate, bei der die Flamme verlöscht, ist

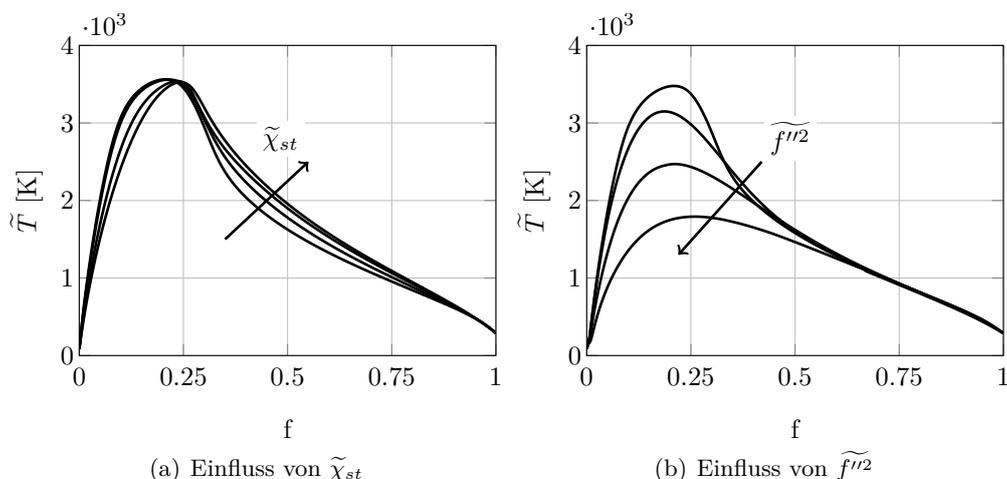


Abbildung 6.34: Flamelet-Ergebnis für die Temperatur in einer LOx/GCH₄-Flamme: Einfluss der skalaren Dissipationsrate und der Mischungsbruchvarianz.

bei Verwendung des JL-R-Mechanismus $\chi_{ext} \approx 8 \times 10^5$ 1/s und bei Verwendung des GRI-3.0-Mechanismus $\chi_{ext} \approx 6 \times 10^5$ 1/s. Die Verläufe von Methan und Sauerstoff sowie der Hauptreaktionsprodukte sind in Abbildung 6.33(a), die Radikale in Abbildung 6.33(b) dargestellt. Das Ergebnis des reduzierten Mechanismus ist auch hier zufriedenstellend, einzig die Konzentration von OH wird zu niedrig berechnet.

Zur Erstellung der Flamelet-Bibliothek, die in den Simulationen G2-01 und G2-03 verwendet wird, werden 1003 Punkte zur Diskretisierung des Mischungsbruchraums verwendet. Die Auflösung ist im Bereich hoher Dichtegradienten sowie in der Nähe des stöchiometrischen Mischungsbruchs verfeinert. Es werden 20 Flamelets für verschiedene skalare Dissipationsraten im Bereich zwischen $0 < \chi_{st} < 10^4$ erstellt. Der Bereich erstreckt sich nicht bis zur Verlöschgrenze bei $\chi_{ext} \approx 8 \times 10^5$ 1/s, da sich gezeigt hat, dass die in der LES erreichten Werte $\tilde{\chi}_{st} \approx 5000$ 1/s nicht wesentlich übersteigen. Die Tabellen werden anschließend mit einer β -PDF integriert, wobei 21 äquidistant verteilte Werte für die normierte Varianz des Mischungsbruchs verwendet werden. Die Auflösung der Flamelet-Bibliothek ergibt sich somit zu $20 \times 21 \times 1003$ für die drei Parameter $\tilde{\chi}_{st}$, \tilde{f}''^2 und \tilde{f} .

In Abbildung 6.34 ist der Einfluss der skalaren Dissipationsrate und der Mischungsbruchvarianz auf die gefilterte Temperatur dargestellt. Der gewählte Bereich entspricht dabei den in der Simulation auftretenden Werten und ist somit relevant für die anschließende Auswertung. In Abbildung 6.34(a) variiert die skalare Dissipationsrate zwischen $\tilde{\chi}_{st} = 10$ 1/s und $\tilde{\chi}_{st} = 10^4$ 1/s. Wie bereits in Abbildung 6.32(b) dargestellt, führt eine Erhöhung der Streckungsrate in diesem Bereich zu keiner nennenswerten Änderung der Maximaltemperatur. Es zeigt sich jedoch, dass sich deren Position im Mischungsbruchraum zur brennstoffreichen Seite verschiebt. Weiterhin ist bei steigender skalarer Dissipationsrate ein Temperaturanstieg bei $f > f_{st}$ zu beobachten. In Abbildung 6.34(b) zeigt sich, dass die gefilterte Temperatur im Bereich des stöchiometrischen Mischungsbruchs bei steigender Varianz abfällt.

Modellierung

Wie auch bei der in Kapitel 6.2 untersuchten koaxialen LN₂/GH₂ - Einspritzung, wird für die hier gezeigten Simulationen das Feinstrukturmodell von Vreman [228] verwendet (siehe Kap. 2.2.5). Die thermodynamischen Zustandsgrößen werden mit der Volumenkorrekturmethode von Abudour et al. [4] (Kap. 3.3) berechnet. Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass bei Verwendung des Flamelet-Modells (G2-01 und G2-03) zwar eine ideale Zustandsgleichung zur Berechnung der Flamelet-Tabellen verwendet wird, in der LES Realgaseffekte jedoch berücksichtigt werden. Der thermodynamische Zustand wird mit der Volumenkorrektur von Abudour anhand der tabellierten Spezieszusammensetzung, der transportierten Enthalpie und des Drucks berechnet.

Wie auch bei den vorangegangenen Simulationen wird das turbulente Einströmprofil generiert, indem separate Simulationen für die Strömung im GCH₄ - Ringspalt und im zentralen LO_x - Rohr durchgeführt werden. Das Rechengitter, das für den Ringspalt verwendet wird, besteht aus 1.6×10^6 Gitterzellen. Für die Rohrströmung werden 2×10^6 Zellen verwendet. In beiden Rechnungen werden zyklische Randbedingungen in Strömungsrichtung benutzt und die Länge des Rechengebiets entspricht $L = 10D_h$, wobei D_h der hydraulischen Durchmesser ist. Die aus den Simulationen extrahierten Geschwindigkeitsprofile werden wie in Kapitel 6.1.2 beschrieben in einer Datenbank hinterlegt und zur Laufzeit auf die Einlassränder des Rechengitters, das für den Mascotte-Testfall verwendet wird, interpoliert.

Bei den Flamelet-Rechnungen (G2-01 und G2-03) ist es zur Stabilisierung der Rechnung nötig, die turbulente Viskosität in der Enthalpiegleichung und der Transportgleichung für den Mischungsbruch, wie in Kapitel 5.2.2 beschrieben, mit der künstlichen Viskosität μ^* zu beaufschlagen. Dies ist bei Verwendung der ESF-Methode (G2-02) nicht erforderlich. Hier werden $N_\zeta = 8$ stochastische Felder zur Beschreibung der Verbund-PDF des thermochemischen Zustandsraums verwendet. Beiden Methoden liegt der JL-R-Mechanismus zugrunde und abgesehen von der unterschiedlichen Verbrennungsmodellierung und der Verwendung der numerischen Dissipation in den Flamelet-Rechnungen sind alle Simulationsparameter in G2-01 und G2-02 identisch.

6.3.3 Ergebnisse

Momentaufnahmen des Strömungsfelds

Zur qualitativen Darstellung der LES-Ergebnisse und zur Beschreibung der charakteristischen Merkmale des Mascotte-Testfalls werden zunächst Momentaufnahmen des Strömungsfelds aus der Simulation G2-03 gezeigt. Eine dreidimensionale Visualisierung der Flamme ist in Abbildung 6.35 gezeigt. Die dargestellte Oberfläche korrespondiert zur Position an der im Strömungsfeld der stöchiometrische Mischungsbruch $\tilde{f}_{st} = 0.2$ erreicht wird und ist mit der dort vorliegenden Temperatur eingefärbt. Im vorderen Bereich, unmittelbar stromab des Koaxialinjektors, sind

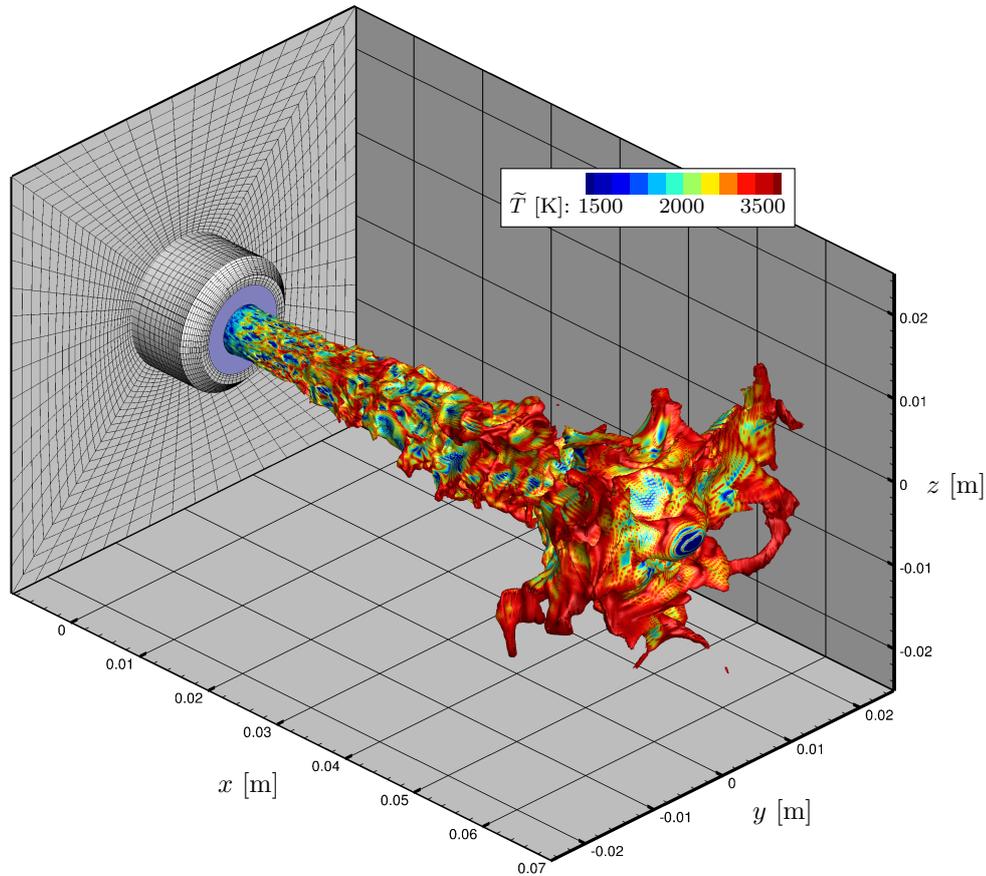


Abbildung 6.35: Konfiguration G2-03: Momentaufnahme der stöchiometrischen Isofläche ($\tilde{f}_{st} = 0.2$). Die Oberfläche ist mit der Temperatur eingefärbt.

kleinskalige Perturbationen zu beobachten. Hier liegen die Temperaturen aufgrund der vergleichsweise hohen Mischungsbruchvarianz deutlich unterhalb der maximalen Temperatur, die in den Flamelet-Tabellen hinterlegt ist. Weiter stromab wachsen die Wirbel an und die Flamme breitet sich in radiale Richtung aus. Die Temperaturen sind hier höher als im Bereich unmittelbar hinter dem Einlass. Bei etwa $x \approx 60$ mm ist schließlich eine schlagartige Expansion der Flamme zu beobachten stromab derer keine Reaktionen mehr stattfinden.

Diese charakteristische Flammenform ist das Ergebnis der Wechselwirkung zwischen der Flamme und der Brennkammerwand. Dies wird in Abbildung 6.36 deutlich, in der die gemittelte axiale Geschwindigkeitskomponente in einer Ebene bei $z = 0$ dargestellt ist. Aufgrund der starken Expansion des kalt eingespritzten Treibstoffs in der Flamme beschleunigt das Abgas und breitet sich in radialer Richtung aus. Bei etwa $x \approx 60$ mm trifft das schnelle Fluid auf die Wand und wird umgelenkt. Ein Teil des Abgases strömt zurück in Richtung des Injektors und bildet das für Brennkammern typische Rezirkulationsgebiet zwischen Injektor und Brennkammerwand. Beim Mascotte-Testfall bildet sich darüber hinaus ein zweites Rezirkulationsgebiet stromab der Flamme, in dessen Kern die gemittelte axiale Geschwindigkeit $\langle \tilde{U} \rangle \approx -20$ m/s beträgt. Warmes Abgas strömt hier der Flamme

entgegen, was letztlich zur oben beschriebenen pilzartigen Form der Flamme führt.

Die berechnete Flammenform ist auch in Abbildung 6.37 durch Momentaufnahmen des Mischungsbruchs, der Temperatur und der skalaren Dissipationsrate gezeigt. In der Scherschicht zwischen dem zentral eingespritzten Oxidator und dem koaxial eingespritzten Methan bilden sich Wirbel aus, die stromab anwachsen bis sie durch die Expansion des Oxidators bei $x \approx 60$ mm zur Wand umgelenkt werden. Anhand der Darstellung des Mischungsbruchs kann man, wie auch in den Experimenten von Mayer et al. [137], fingerförmige Strukturen flüssigen Sauerstoffs beobachten, die sich vom dichten Kern lösen. Die weiße Linie markiert die Position, an der die Widom-Linie überschritten wird, die Temperatur also die Pseudo-Siedetemperatur von Sauerstoff $T_{pb, O_2} = 157.4$ K erreicht. Aufgrund des starken Dichteabfalls, der mit dem Überschreiten der Widom-Linie einhergeht, tritt hier die größte Expansion auf. Der von der Linie umschlossene Bereich zeichnet sich durch eine hohe Dichte von $\rho > 441$ kg/m³ aus. In Abbildung 6.37(c) ist die skalare Dissipationsrate in logarithmischer Skalierung dargestellt. Die maximalen Werte treten unmittelbar hinter dem Koaxialinjektor auf und sinken mit zunehmender Aufweitung der Flamme ab. Am Flammenende bei $x \approx 65$ mm erreicht die skalare Dissipationsrate in der Mitte der Brennkammer nochmals hohe Werte, da das rückströmende Abgas hohe Streckungen induziert. Dies spiegelt sich auch in der Temperatur in Abbildung 6.37(b) wieder. Die Flamme ist an dieser Stelle, wie auch unmittelbar am Injektor, sehr dünn.

In Abbildung 6.38 ist die Dichte sowie die künstliche numerische Viskosität gezeigt. Es zeigt sich, dass μ^* nur im Bereich um den dichten Sauerstoffkern aktiv ist. Im restlichen Strömungsfeld, insbesondere an der Flammenfront, deren Position durch die weiße Linie markiert ist, findet keine zusätzliche Dämpfung statt.

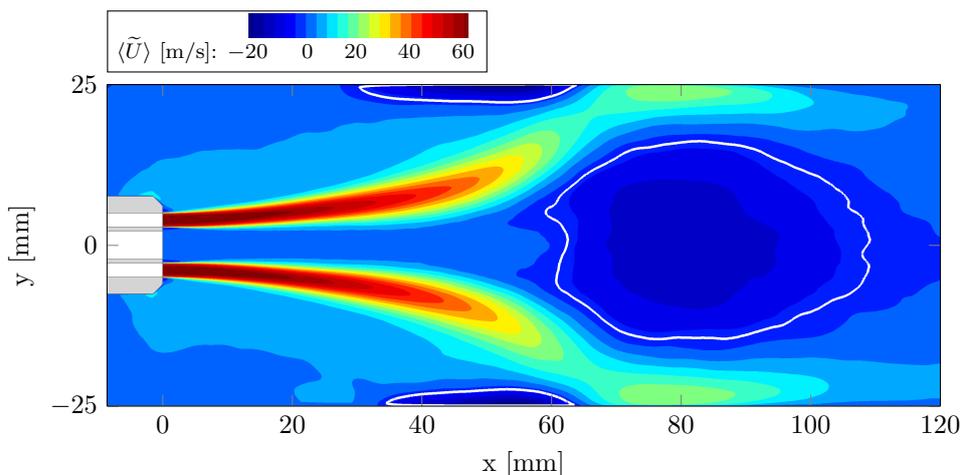
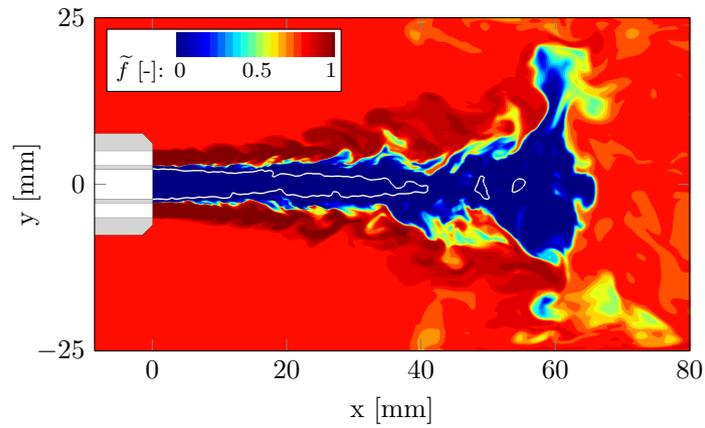
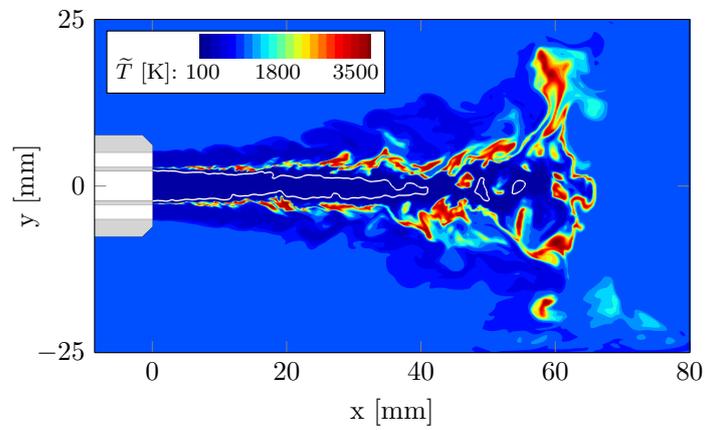


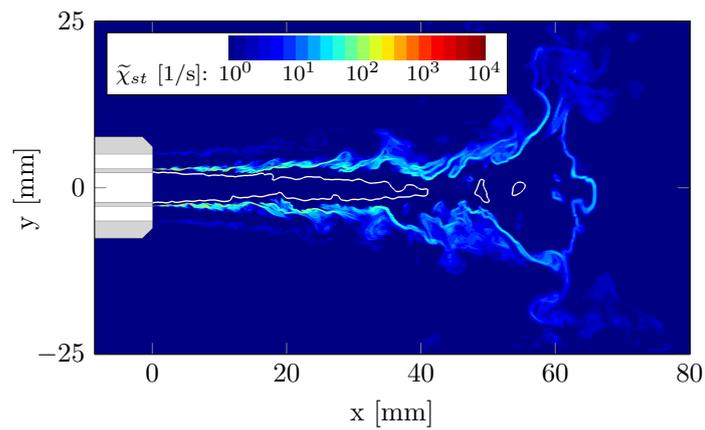
Abbildung 6.36: Konfiguration G2-03: Gemittelte axiale Geschwindigkeit in einer Ebene bei $z = 0$. Die weiße Linie markiert die Rezirkulationszonen ($\langle \tilde{U} \rangle = 0$ m/s).



(a) Mischungsbruch

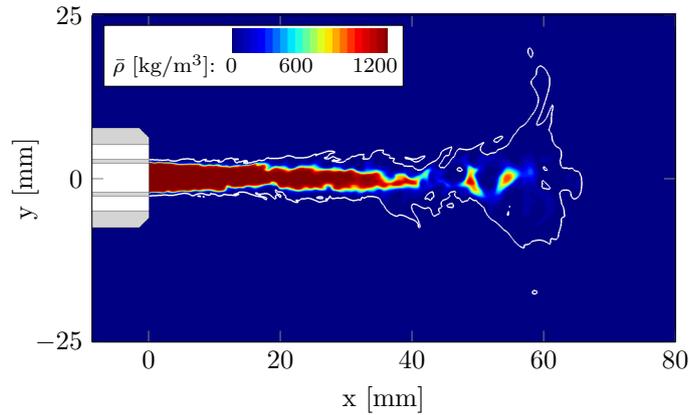


(b) Temperatur

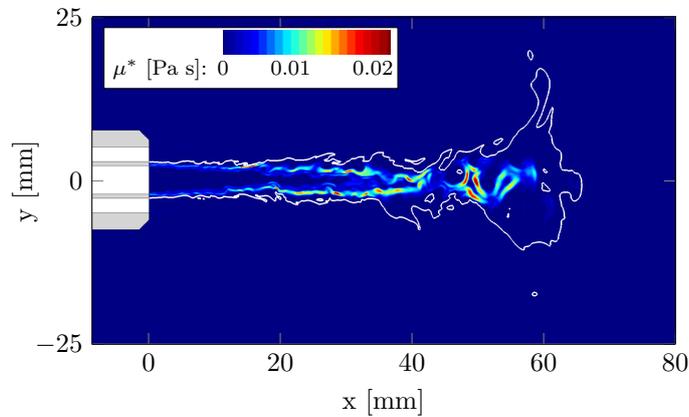


(c) Skalare Dissipationsrate

Abbildung 6.37: Konfiguration G2-03: Momentaufnahme der Flamme in einer Ebene bei $z = 0$. Die weiße Linie markiert die Pseudo-Siedetemperatur von Sauerstoff $T_{pb, O_2} = 157.4$ K.



(a) Dichte



(b) Numerischen Viskosität

Abbildung 6.38: Konfiguration G2-03: Momentaufnahme der Dichte und der künstlichen numerischen Viskosität in einer Ebene bei $z = 0$. Die weiße Linie markiert die stöchiometrische Mischung $\tilde{f}_{st} = 0.2$.

Vergleich der Verbrennungsmodelle

Um den Einfluss der Verbrennungsmodellierung zu bewerten, werden nun die Ergebnisse der Konfigurationen G2-01 (Flamelet-Ansatz) und G2-02 (ESF-Methode) verglichen. Hierfür werden die Felder zeitlich gemittelt. Die Zeitspanne beträgt $\Delta t = 0.1 \text{ s} \approx 57 u_{LOx}/D_{LOx}$.

In Abbildung 6.39 sind die gemittelten Temperaturfelder der beiden Simulationen gegenübergestellt. Im vorderen Bereich der Flamme sind die Ergebnisse sehr ähnlich ($0 \text{ mm} < x < 20 \text{ mm}$). Wie auch in der Momentaufnahme in Abbildung 6.37(b) zu sehen ist, ist die Flamme in diesem Bereich nicht gefaltet. Weiter stromab werden die Unterschiede zwischen den beiden Modellierungen deutlicher. Im Bereich $20 \text{ mm} < x < 40 \text{ mm}$ ist bei der Konfiguration G2-02 eine stärkere radiale Expansion der Flamme zu beobachten. Auch weitet sich die Flammenfront stärker auf als bei der Rechnung mit dem Flamelet-Ansatz. Des Weiteren ist die maximale

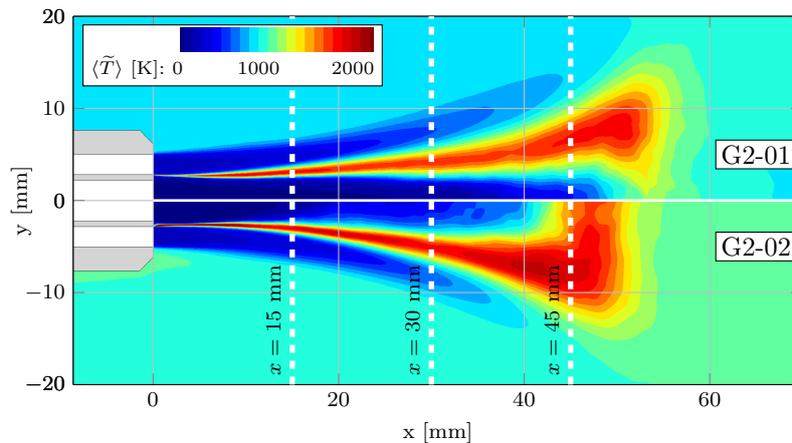


Abbildung 6.39: Konfiguration G2-03: Gemittelte axiale Geschwindigkeit in einer Ebene bei $z = 0$.

Temperatur in der Flamme bei Verwendung der ESF-Methode höher. Die beschriebenen Unterschiede deuten darauf hin, dass die Umsatzrate des Oxidators bei Konfiguration G2-02 höher ist. Das spiegelt sich auch in der Länge der Flamme wieder, die bei Verwendung der ESF-Methode geringer ist.

Ein quantitativer Vergleich zwischen den beiden Modellierungen ist in Abbildung 6.40 anhand der gemittelten Temperatur und der gemittelten Temperaturfluktuation gezeigt. Die Profile werden entlang der in Abbildung 6.39 eingezeichneten Schnittachsen aus dem gemittelten Strömungsfeld extrahiert. Zur Berechnung der Fluktuationen wird hier nur der auf dem Rechengitter aufgelöste Beitrag berücksichtigt (Gl. 2.35).

Am Temperaturverlauf bei $x = 15$ mm sind noch die vom Injektor aufgeprägten Profile erkennbar. Die niedrige Temperatur in der Mitte der Brennkammer korrespondiert zum transkritisch eingespritzten Sauerstoff, die Temperaturspitze zur Flamme, die sich in der Scherschicht zwischen Treibstoff und Oxidator ausbildet, und der Temperaturabfall bei $y \approx 5$ mm zum bei $T = 288$ K eingespritzten Methan. Weiter außen befindet sich warmes Abgas, mit dem die Kammer zu Beginn der Simulation initialisiert wird. Wie zuvor beschrieben, sind die beiden Ergebnisse in diesem Bereich sehr ähnlich. Die Temperaturprofile sind nahezu identisch und bei den Fluktuationen sind nur leichte Unterschiede im Bereich des Strahlkerns und der Flamme zu erkennen. Deutlicher werden die Unterschiede bei $x = 30$ mm. Die Position der Flamme liegt bei G2-02 weiter außen und das Temperaturmaximum ist höher. Auch ist bei Verwendung der ESF-Methode bei dieser Position bereits ein deutlicher Anstieg der gemittelten Temperatur bei $y = 0$ mm, also im Sauerstoffkern, zu erkennen. Das zeigt sich auch im Verlauf der Temperaturfluktuation, die für G2-02 im Oxidatorkern bei 652 K liegt. Die Entwicklung setzt sich stromab fort und der Unterschied zwischen den Temperaturen in der Kammermitte ist bei $x = 45$ mm noch größer. An dieser Position ist bei Verwendung der ESF-Methode der Oxidator bereits vollständig aufgebraucht und die Schnittachse verläuft durch die injektorparallele Flamme am Ende der Reaktionszone. Dementsprechend homo-

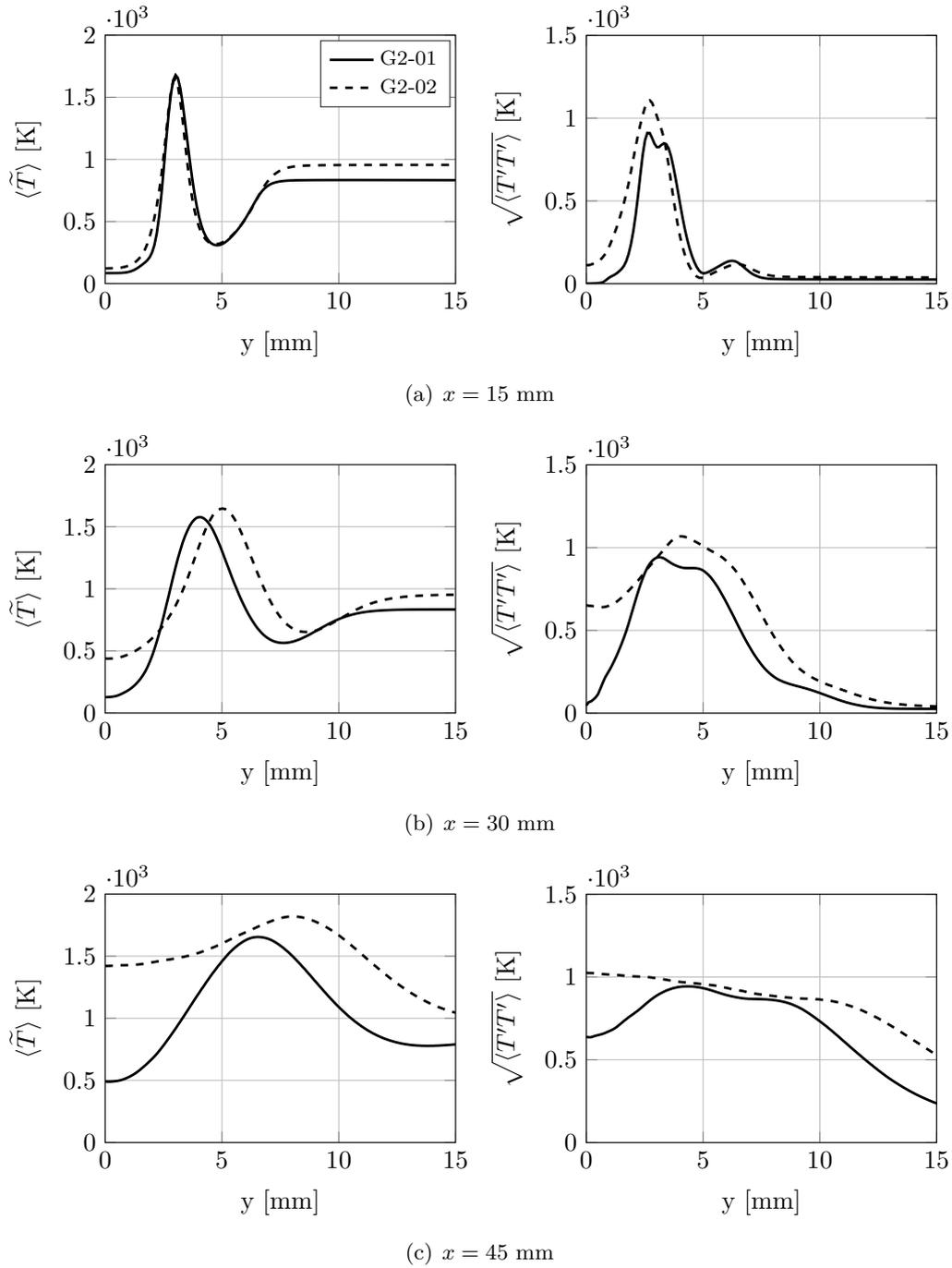


Abbildung 6.40: Gemittelte Temperatur und Temperaturschwankung in radialer Richtung. Gezeigt sind die Profile an den drei axialen Positionen $x = 15$ mm, 30 mm und 45 mm.

gen sind die Verläufe der Temperatur und ihrer Fluktuation. Bei Verwendung des Flamelet-Modells ist die Verbrennung an dieser Position noch nicht abgeschlossen und die Temperatur im oxidatorreichen Kern deutlich geringer als in der Flamme. Die zwei Maxima der gemittelten Temperaturfluktuation zu beiden Seiten der

Flamme sind bei G2-01 an allen drei Positionen zu beobachten.

Eine weitere Vergleichsmöglichkeit bietet die Analyse der Ergebnisse im Zustandsraum. Hierzu werden in Abbildung 6.41 die in der LES berechneten gefilterten Temperaturen über den zugehörigen Mischungsbruch aufgetragen. Die Daten entstammen injektorparallelen Schnittebenen bei $x = 15$ mm, 30 mm und 45 mm und wurden aus 5 statistisch unabhängigen Strömungsrealisierungen extrahiert. Um die beiden Rechnungen vergleichen zu können, wurde der Mischungsbruch anhand des gefilterten Methan- und Sauerstoff-Massenbruchs berechnet:

$$\tilde{f} = \frac{s\tilde{Y}_{CH_4} - \tilde{Y}_{O_2} + Y_{O_2}^{in}}{sY_{CH_4}^{in} + Y_{O_2}^{in}}. \quad (6.2)$$

Das stöchiometrische Massenverhältnis ist bei der Verbrennung reinen Methans und reinen Sauerstoffs $s = 4$. Der Massenbruch am Oxidator- und am Treibstoff-Einlass ist jeweils eins ($Y_{O_2}^{in} = Y_{CH_4}^{in} = 1$).

Bei Verwendung der ESF-Methode sind im vorderen Bereich der Flamme bei $x = 15$ mm deutliche Nichtgleichgewichtseffekte zu beobachten. Auch in der Nähe des stöchiometrischen Mischungsbruch stellen sich Zustände ein, in denen die Flamme lokal verlöscht und die Temperatur sehr niedrig ist. Dieser Effekt nimmt mit größer werdendem Abstand zum Injektor ab. An der Position $x = 45$ mm tritt kaum noch Verlöschen auf und die Zustände liegen nah bei der Gleichgewichtslösung. Es ist auch bemerkenswert, dass die gefilterte Temperatur in der Flamme an allen drei Positionen den Maximalwert der laminaren Flamelet-Rechnung $T \approx 3550$ K erreicht (Abb. 6.32). Dies indiziert, dass sich die Verbund-PDF in den betroffenen Rechenzellen auf eine Delta-Funktion reduziert bzw. alle N_ζ stochastischen Felder nahezu identisch zu dem korrespondierenden gefilterten Wert sind.

In den Ergebnissen der Simulation G2-01 übersteigt die Temperatur in der Flamme an keiner der drei gezeigten Positionen den Wert $T \approx 3250$ K. Die Differenz zum Ergebnis aus den laminaren Flamelet-Rechnungen ist nicht auf die Streckung in der turbulenten Flamme zurückzuführen, da sich, wie in Abbildung 6.32(b) gezeigt, erst ab einer skalaren Dissipationsrate von $\tilde{\chi}_{st} > 10^5$ eine merkliche Absenkung der Maximaltemperatur einstellt. Die Dissipationsraten in der turbulenten Strömung liegen eine Größenordnung darunter. Die Differenz zwischen der in der laminaren Flamelet-Rechnung und der in der LES erreichten Maximaltemperatur geht daher im Wesentlichen auf den Effekt der Feinstrukturmodellierung zurück. Durch die Verwendung der angenommenen β -Verteilung für die Feinstruktur-PDF tritt also eine Absenkung der gefilterten Temperatur auf, die so bei Verwendung einer Transport-PDF (G2-02) nicht beobachtet wird. Der Effekt der Streckung ist allerdings im Bereich $0.3 < \tilde{f} < 0.5$ zu beobachten, wo eine im Vergleich zu den umliegenden Bereichen erhöhte Streuung der gefilterten Temperatur zu beobachten ist (siehe Abb. 6.34(a)). Auch wird das lokale Verlöschen, das mit der ESF-Methode bei $x = 15$ mm auftritt, nicht im selben Maße wiedergegeben. Dieser Effekt kann allerdings nicht allein auf die Unterschiede bei der Feinstrukturmodellierung zurückgeführt werden. Vielmehr handelt es sich um einen chemischen Nichtgleichgewichtseffekt, der bei Verwendung einer Tabellierung nicht vollständig wiedergegeben werden kann.

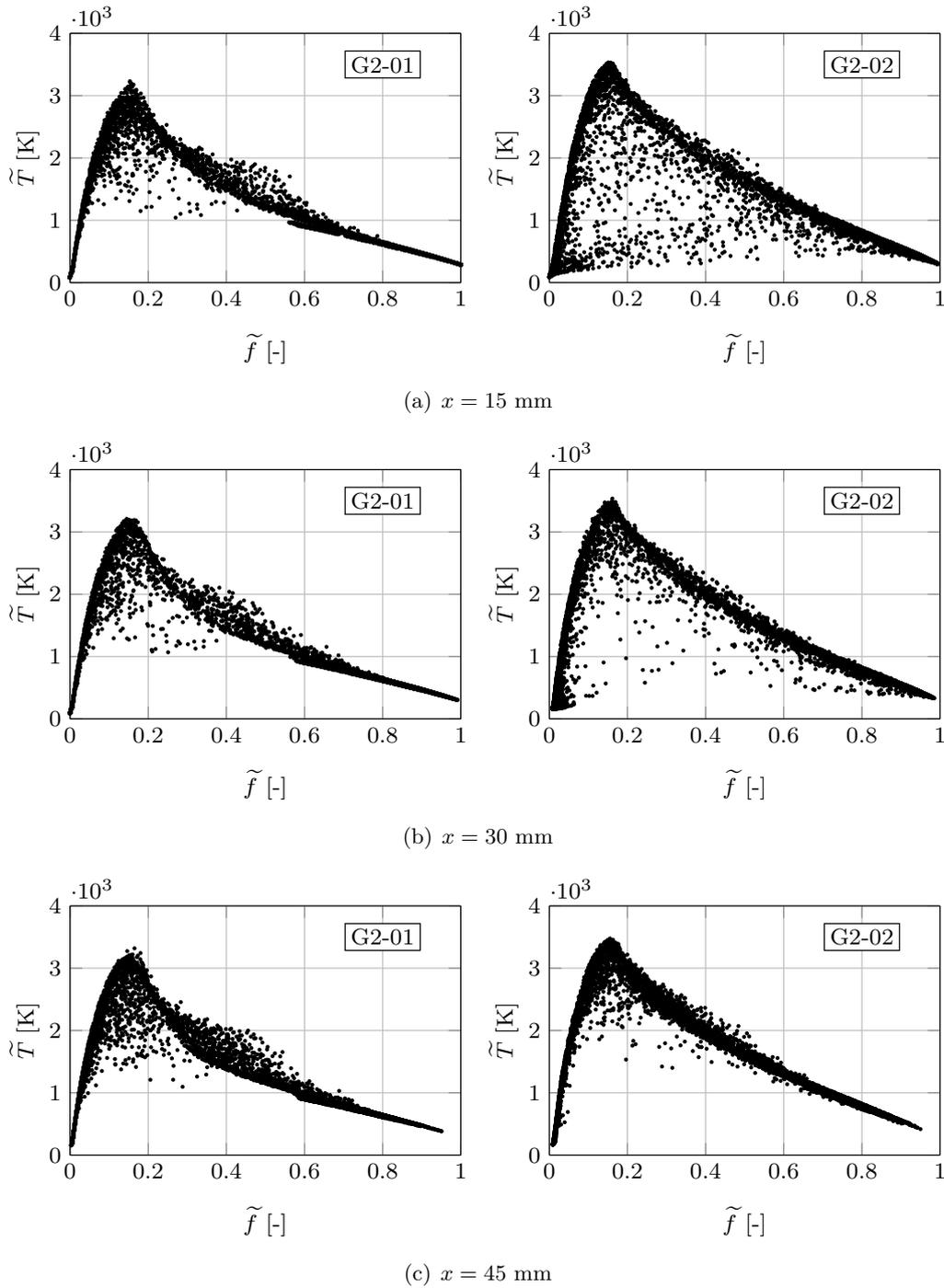


Abbildung 6.41: Zustandsdiagramm für die in der LES berechneten Temperaturen im Mischungsbruchraum. Gezeigt sind die Ergebnisse an den drei axialen Positionen $x = 15 \text{ mm}$, 30 mm und 45 mm .

Bei der Bewertung der Verbrennungsmodelle ist zu berücksichtigen, dass für den Vergleich ein recht grobes Rechengitter verwendet wird. Die Feinstrukturmodellierung hat folglich einen starken Einfluss auf das Ergebnis und die Unterschiede

zwischen den Modellierungen kommen stärker zum tragen. Ein Vergleich der beiden Modellierungen bei besserer Auflösung wäre daher wünschenswert. Aufgrund des großen Rechenaufwands, der mit der Verwendung der ESF-Methode einhergeht, war dies allerdings mit den zur Verfügung stehenden Rechenkapazitäten nicht möglich.

Neben der Genauigkeit der beiden Verbrennungsmodelle ist ihre numerische Effizienz ein wichtiges Kriterium für die Anwendbarkeit in der LES. Hier unterscheiden sich die beiden betrachteten Methoden deutlich. Während bei Verwendung des Flamelet-Ansatzes die Flammenstruktur in Tabellen hinterlegt ist, müssen die chemischen Reaktionen bei Verwendung der ESF-Methode zur Laufzeit berechnet werden. Die beim Flamelet-Ansatz benötigte Rechenkapazität richtet sich daher im Wesentlichen nach der Anzahl der Spezies im System sowie der Auflösung der Flamelet-Tabellen. Bei der ESF-Methode sind die Komplexität des Reaktionsmechanismus sowie die Anzahl der stochastischen Felder N_ζ ausschlaggebend. Mit den bei G2-01 und G2-02 gewählten Konfigurationen ist die Simulation mit der ESF-Methode in etwa um den Faktor 4 langsamer. Für die zur Mittelung verwendete Simulationsdauer von $\Delta t = 0.1$ s ergibt sich bei Verwendung des Flamelet-Ansatzes ein Rechenbedarf von 1×10^5 CPU-Stunden. Bei Verwendung der ESF-Methode werden bei gleicher Simulationsdauer etwa 4×10^5 CPU-Stunden benötigt. Die Rechnungen wurden auf dem Höchstleistungsrechner SuperMUC¹ (Phase 2) durchgeführt, der am Leibnitz-Rechenzentrum in Garching bei München betrieben wird.

Berechnung der OH*-Strahlung

In den Experimenten von Singla et al. [209] wurde die spontane OH*-Strahlung gemessen, welche hier zum Vergleich mit den LES-Ergebnissen herangezogen wird. Die Chemolumineszenz ist jedoch eine Größe, die in der Simulation nicht ohne

¹www.lrz.de/services/compute/supermuc/

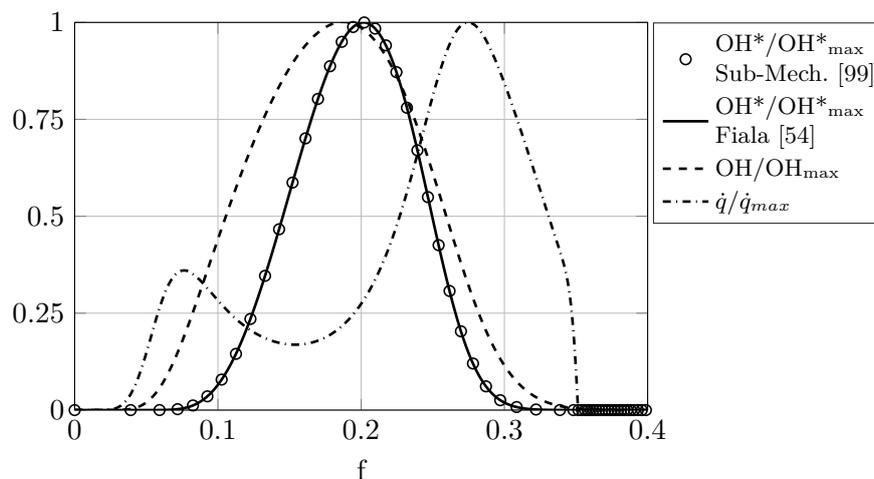


Abbildung 6.42: Flamelet-Ergebnis für die normierten OH und OH* Profile sowie für die normierte Wärmefreisetzung.

weitere Modellierung zugänglich ist. Oft wird daher zum Vergleich der in der CFD berechnete OH-Massenbruch [39] oder, sollte dieser bei Verwendung globaler Reaktionsmechanismen nicht verfügbar sein, die Wärmefreisetzung verwendet [200]. Dass die OH*-Strahlung allerdings unter Umständen einen anderen Eindruck von der Flammenform vermitteln kann als der OH-Massenbruch oder die Wärmefreisetzung, zeigen Fiala und Sattelmayer [53, 54]. Unter der Annahme, dass in Raketenbrennkammern aufgrund der hohen Temperaturen in der Flamme nur die thermische Anregung für die OH*-Strahlung relevant ist, schlagen sie folgende Modellierung vor:

$$c_{OH^*} = c_{OH} \exp\left(\frac{-\Delta g_m^0}{RT}\right). \quad (6.3)$$

Dabei sind c_{OH^*} und c_{OH} die Stoffkonzentrationen (Gl. 4.7) von OH und OH*. Die freie molare Standardenthalpie

$$\Delta g_m^0 = (h c_0 N_A) / \lambda^* \quad (6.4)$$

kann mit der Planck-Konstanten h , der Lichtgeschwindigkeit c_0 und der Avogadro-Konstanten N_A ermittelt werden. Fiala und Sattelmayer schlagen für die Wellenlänge des Übergangs von OH den Wert $\lambda^* = 308$ nm vor. Die OH*-Konzentration in Gleichung 6.3 ist nur vom OH-Massenbruch und der Temperatur abhängig und aufgrund des einfachen Zusammenhangs numerisch effizient bestimmbar.

Um zu überprüfen, ob die Methode von Fiala und Sattelmayer bei den vorliegenden Bedingungen verwendet werden kann, wird die OH*-Strahlung zunächst in einer laminaren Gegenstromdiffusionsflamme berechnet. Zur Validierung der Modellierung wird zusätzlich der Reaktionsmechanismus von Kathrotia et al. [99] verwendet, der einen Sub-Mechanismus zur Berechnung der OH*-Strahlung enthält. In Abbildung 6.42 sind die normierten Ergebnisse der beiden Methoden zur Berechnung von OH* sowie der Verlauf des OH-Massenbruchs und der Wärmefreisetzung dargestellt. Die Methode von Fiala und Sattelmayer liefert in der Gegenstromdiffusionsflamme nahezu identische Ergebnisse wie der Sub-Mechanismus von Kathrotia et al. [99]. Der Verlauf des normierten OH-Massenbruchs ist im Vergleich etwas flacher und deckt einen breiteren Bereich im Mischungsbruchraum ab. Der Verlauf der Wärmefreisetzung unterscheidet sich deutlich von dem der OH*-Strahlung.

In Abbildung 6.43 sind die gemittelte OH*-Strahlung und der gemittelte Massenbruch der Spezies OH gegenübergestellt. Hierfür werden die Ergebnisse der Simulation G2-03 verwendet. Um die beiden Größen miteinander vergleichen zu können, sind sie mit dem in der Strömung auftretenden Maximalwert normiert. Unterschiede zeigen sich vor allem im Bereich der starken Expansion bei $x \approx 60$. Die OH*-Strahlung hat hier ihr Maximum und der Bereich, in dem die Verbrennung stattfindet, erscheint deutlich größer als in der Darstellung des OH-Massenbruchs. Bei Letzterem tritt das Maximum in der Scherschicht unmittelbar am Injektor auf und die Flamme erscheint etwas kürzer.

Dass die mit der Methode von Fiala und Sattelmayer berechnete OH*-Strahlung in der injektornahen Scherschicht gegen null geht, ist damit zu erklären, dass in diesem Bereich die Temperatur in der Flamme recht niedrig ist. Die Exponentialfunktion in Gleichung 6.3 und folglich die OH*-Strahlung gehen gegen null.

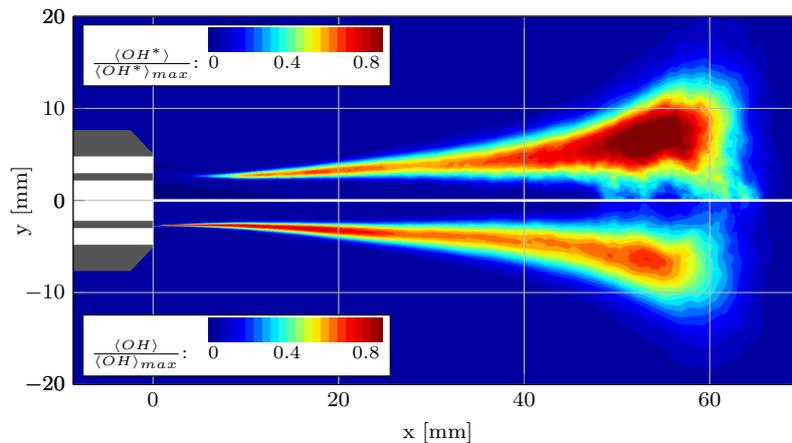


Abbildung 6.43: Konfiguration G2-03: Vergleich zwischen der mit der Methode von Fiala und Sattelmayer [53] berechneten OH^* -Strahlung und dem OH -Massenbruch in einer Ebene bei $z = 0$. Die Felder sind mit ihrem Maximalwert normiert.

Allerdings kann bei niedrigen Temperaturen die chemische Bildung von OH^* eine größere Rolle spielen als die thermische Anregung [99]. Dies wird in der Modellierung nicht berücksichtigt.

Vergleich mit dem Experiment

In Abbildung 6.44 werden die verfügbaren experimentellen Messdaten mit den LES-Ergebnissen der drei untersuchten Konfigurationen verglichen. Jeweils der untere Teil der Darstellungen zeigt die OH^* -Strahlung aus den Experimenten von Singla et al. [209]. Hierbei wurde eine Abel-Transformation auf das entlang der Sichtlinie integrierte Messsignal angewendet, um die gezeigten gemittelten Daten in der Schnittebene zu erhalten. Da das Fluid insbesondere im Bereich des dichten Sauerstoffkerns optisch dick ist, unterliegt diese Methode einer gewissen Unsicherheit. In der LES wurden die gezeigten Daten direkt auf der dargestellten Schnittebene gemittelt. Weiterhin wurde der von den Experimentatoren für die Darstellung der Messergebnisse gewählte Wertebereich nicht veröffentlicht, weswegen hier zum Vergleich ein Wertebereich angenommen wird. Die in der LES berechnete OH^* -Strahlung ist wie auch in Abbildung 6.43 mit dem Maximalwert im Strömungsfeld normiert. Die normierten Werte sind im Bereich von 0.15 bis 0.8 farbig, die unterhalb von 0.15 grau dargestellt.

Die experimentell gemessene Flammenform weist die zuvor beschriebenen charakteristischen Eigenschaften auf. Im vorderen Bereich zwischen $0 \text{ mm} < x < 40 \text{ mm}$ ist der Öffnungswinkel nahezu konstant und die Flamme breitet sich langsam in radialer Richtung aus. Bei $x \approx 45 \text{ mm}$ ist eine stärkere Expansion zu beobachten, auf die ein abruptes Ende der Verbrennung folgt. Stromab von $x = 60 \text{ mm}$ wird im Experiment keine OH^* -Strahlung detektiert, was anzeigt, dass ab dieser Position keine Reaktionen mehr stattfinden und der Oxidator vollständig verbrannt ist.

Diese charakteristischen Eigenschaften werden in den LES-Ergebnissen qualita-

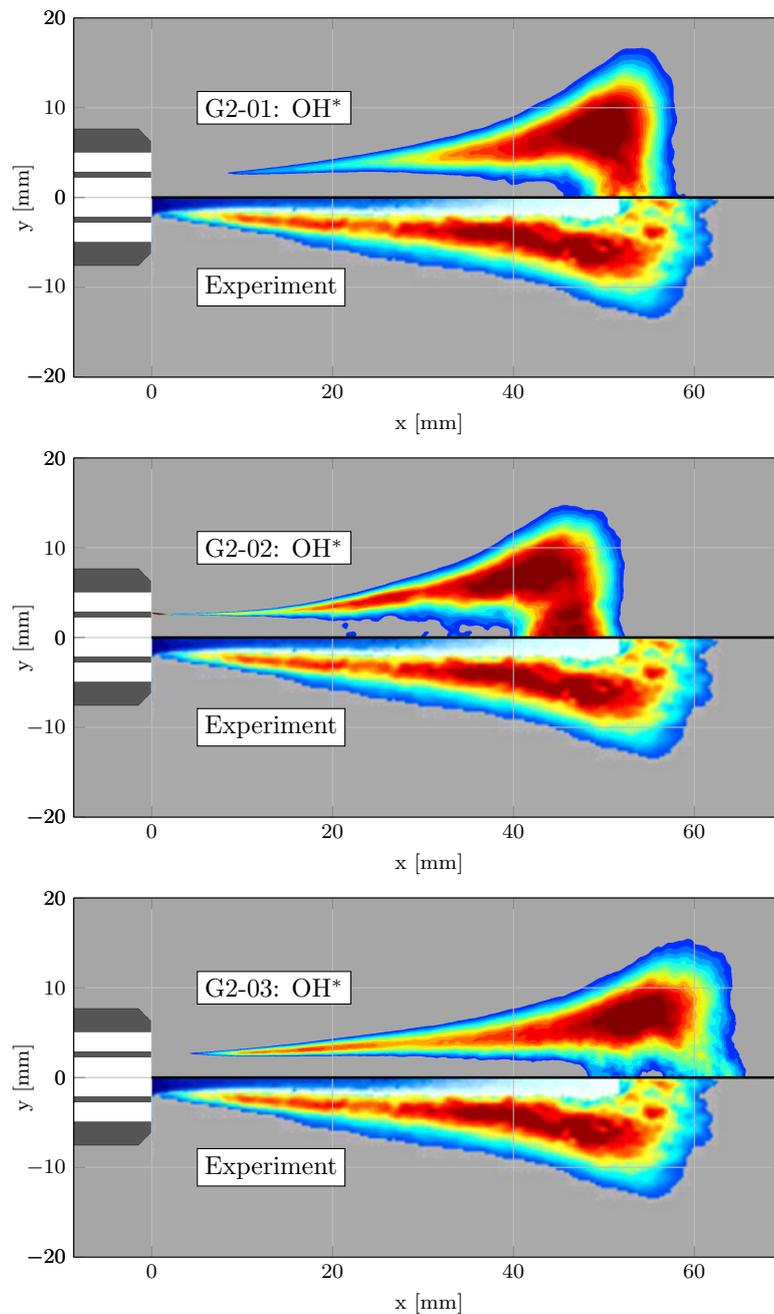


Abbildung 6.44: Vergleich zwischen der gemessenen und der normierten OH*-Strahlung aus der LES. Die Messdaten im jeweils unteren Teil der Abbildungen entstammen der Arbeit von Singla et al. [209].

tiv gut wiedergegeben. In allen drei Konfigurationen ist die Expansion im hinteren Teil der Flamme und das anschließende abrupte Ende der Reaktionen zu beobachten. Quantitative Abweichungen zur experimentell gemessenen Flammenform können insbesondere bei den beiden Konfigurationen G2-01 und G2-02, bei denen das größere Rechengitter verwendet wird, beobachtet werden. In beiden Simulationen ist die Flamme kürzer als im Experiment und die Expansion im hinteren Bereich

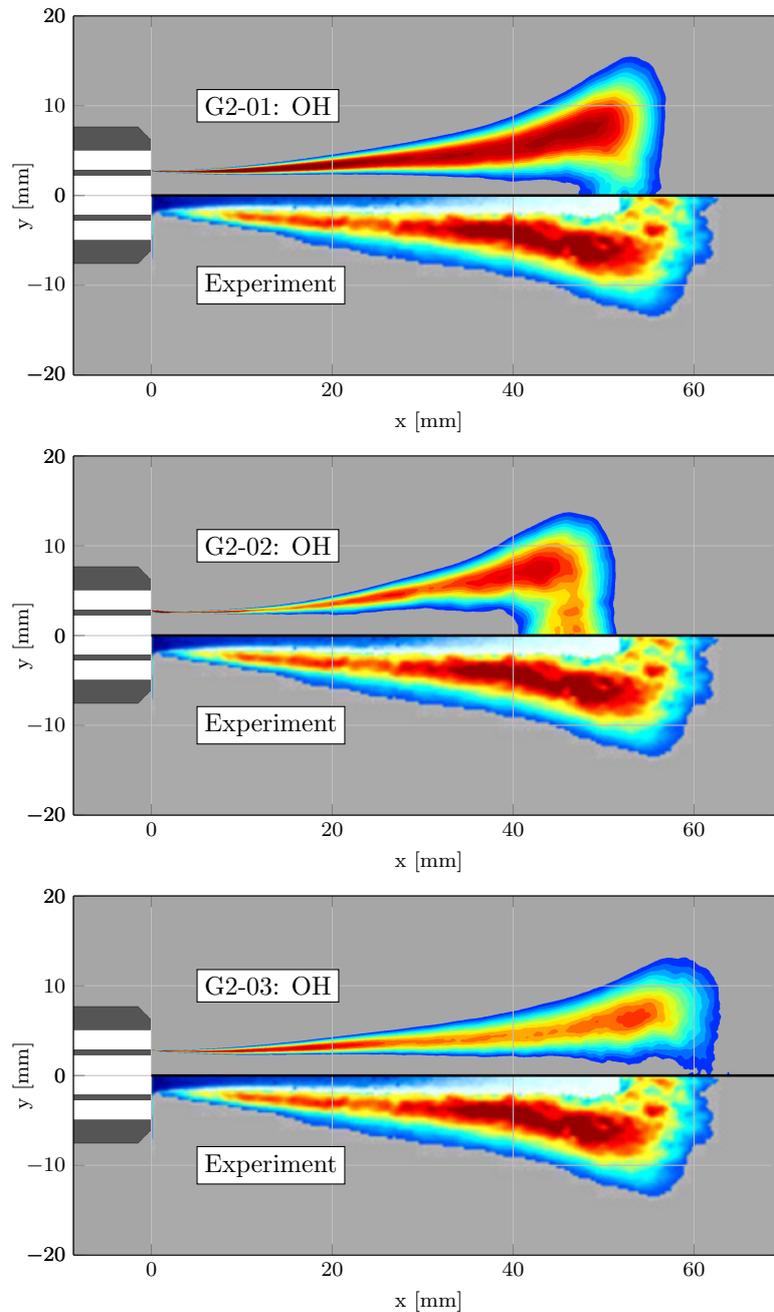


Abbildung 6.45: Vergleich zwischen der gemessenen OH*-Strahlung und dem gemittelten OH-Massenbruch aus der LES. Die Messdaten im jeweils unteren Teil der Abbildungen entstammen der Arbeit von Singla et al. [209]

stärker ausgeprägt. Bei Verwendung des besser aufgelösten Gitters (G2-03) ist die OH*-Strahlung hingegen homogener über die Länge der Flamme verteilt. Der Abschnitt des konstanten Öffnungswinkels zwischen $0 \text{ mm} < x < 40 \text{ mm}$ ist hier besser getroffen. Auch die Stärke der Expansion im hinteren Bereich der Flamme und deren Länge passen sehr gut zu den Messwerten.

In Abbildung 6.45 sind zusätzlich die gemittelten OH-Massenbrüche mit den Experimenten von Singla et al. [209] verglichen. Im Gegensatz zu der von der OH*-Strahlung beschriebenen Flammenform indizieren die Ergebnisse des Massenbruchs, dass auch in der injektornahen Scherschicht Reaktionen stattfinden. Gerade bei der Konfiguration G2-01 sind die Unterschiede deutlich. Die Ergebnisse von G2-03 stimmen wiederum gut mit dem Experiment überein.

6.3.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde die Verbrennung von transkritisch eingespritztem Sauerstoff und überkritisch eingespritztem Methan untersucht. Besonderes Augenmerk bei der Auswertung der Simulationsergebnisse galt dabei dem Effekt der Verbrennungsmodellierung. Hierzu wurden zwei Modelle, der Flamelet-Ansatz und die ESF-Methode, miteinander verglichen.

Die Simulationsergebnisse zeigen, dass sich in dem untersuchten Testfall ein Rezirkulationsgebiet hinter der Flamme ausbildet. Warmes Abgas wird in der Kammermitte entgegen der Einspritzrichtung transportiert und strömt der Flamme entgegen, welche hierdurch eine pilzartige Form annimmt. Im vorderen Bereich, unmittelbar hinter dem Koaxialinjektor, weitet sie sich mit nahezu konstantem Öffnungswinkel langsam aus. Unter dem Eindruck des entgegenströmenden Abgases, schließt sich diesem Bereich eine starke radiale Expansion an, stromab derer die Verbrennung abrupt endet.

Der Vergleich zwischen den beiden Verbrennungsmodellierungen zeigt, dass die Flamme bei Verwendung der Flamelet-Modellierung leicht länger und die radiale Expansion weniger ausgeprägt ist, was auf einen geringeren chemischen Umsatz im vorderen Bereich der Flamme schließen lässt. Auch sind die maximalen Temperaturen in der Flamme im Vergleich zur Simulation mit der ESF-Methode niedriger. Dies ist auf die Unterschiede bei der Modellierung der gefilterten Verbund-PDF zurückzuführen. Auf dem vergleichsweise groben Gitter hat die SGS-Modellierung einen signifikanten Einfluss auf die gefilterte Zusammensetzung und die Temperatur in der Flamme. Weiterhin tritt bei Verwendung der ESF-Methode im injektornahen Bereich lokales Verlöschen auf, was bei Verwendung der Flamelet-Modellierung nicht im gleichen Maße wiedergegeben wird.

Trotz der genannten Abweichungen unterscheiden sich die Simulationsergebnisse beider Verbrennungsmodelle nicht wesentlich. Die charakteristischen Eigenschaften der Flamme sowie ihre Form sind in beiden Simulationen ähnlich. Bei Verwendung des Flamelet-Ansatzes ist die Flamme etwas länger, was besser zur experimentell gemessenen Flammenform passt. Berücksichtigt man den numerischen Mehraufwand der ESF-Methode, spricht dies bei der hier betrachteten Konfiguration für die Verwendung der effizienteren Flamelet-Methode.

Die Simulationsergebnisse wurden weiterhin mit der gemessenen OH*-Strahlung von Singla et al. [209] verglichen. In der LES wurde hierfür die Methode von Fiala und Sattelmayer [53] verwendet, um OH* aus dem OH-Massenbruch und der

Temperatur zu berechnen. Der Vergleich zeigt, dass bei Verwendung des groben Gitters die berechnete Flammenlänge etwas zu kurz und die radiale Expansion im hinteren Bereich der Flamme zu stark ist. Bei Verwendung des feinen Gitters stimmen Simulationsergebnis und Messung sehr gut überein.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Entwicklung von LES-Verfahren zur numerischen Simulation der Einspritzung und Verbrennung in Raketenbrennkammern. Im Fokus der Untersuchungen stehen die thermodynamischen Eigenschaften der Treibstoffe bei trans- und überkritischen Einspritzbedingungen und deren Einfluss auf die turbulente Durchmischung und Verbrennung von Methan. Es werden geeignete Modellierungen zur Beschreibung des thermodynamischen Zustands, der turbulenten Strömung sowie der Verbrennung identifiziert und zur Simulation inerter sowie reagierender Testfälle angewendet. Die LES-Ergebnisse werden mit verfügbaren experimentellen Validierungsdaten verglichen und bewertet.

In Raketenbrennkammern werden die Treibstoffe in der Regel bei trans- oder überkritischen Bedingungen eingespritzt. Das ideale Gasgesetz ist in diesem Bereich nicht anwendbar und das thermodynamische Verhalten der Fluide muss mit komplexeren Zustandsgleichungen beschrieben werden, die die Realgasereffekte bei überkritischen Drücken in geeigneter Weise wiedergeben. Im Hinblick auf die Anwendbarkeit in der numerischen Strömungssimulation stellt sich die Herausforderung, eine Zustandsgleichung zu finden, die numerische Effizienz und Modellierungsgenauigkeit vereint. Häufig werden kubische Zustandsgleichungen verwendet, deren Genauigkeit allerdings nicht in allen thermodynamischen Bereichen zufriedenstellend ist. Eine Verbesserung kann durch die Verwendung von Volumenkorrekturmethode erzielt werden. Zwei Verfahren werden daher in der vorliegenden Arbeit hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit zur Simulation der Strömung in Raketenbrennkammern bewertet. Die kürzlich vorgestellte Methode von Abudour et al. [4] wird als besonders vorteilhafter Kompromiss zwischen Genauigkeit und zusätzlichem Rechenaufwand identifiziert.

Realgasereffekte können sich in vielfältiger Weise auf die turbulente Verbrennung bei überkritischen Drücken auswirken. Zum einen verändern sich bei transkritischer Einspritzung die Stoffeigenschaften der Treibstoffe und damit der diffusive Transport. Zum anderen wird die turbulente Durchmischung von Oxidator und Brennstoff durch die hohe Dichtestratifikation beeinflusst. Die Gültigkeit von Verbrennungsmodellierungen, die sich im Kontext atmosphärischer Flammen bewährt haben, muss daher bei transkritischen Bedingungen überprüft werden. In der vorliegenden Arbeit

werden zwei Ansätze zur Beschreibung der turbulenten Verbrennung mit der auf der Volumenkorrekturmethode von Abudour basierenden thermodynamischen Modellierung gekoppelt. Als numerisch effizienter Ansatz wird die Flamelet-Modellierung, zur genaueren Beschreibung der Interaktion zwischen unaufgelöster Turbulenz und chemischer Reaktion die Eulerian-stochastic-fields-Methode verwendet.

Die zur Anwendung der genannten Modelle in der LES entwickelten Strömungslöser basieren auf der Arbeit von Jarczyk [89], die ein druckbasiertes LES-Verfahren für inerte Realgasströmungen entwickelt und in die quelloffene Simulationsumgebung OpenFOAM implementiert hat. Die auf der Peng-Robinson-Zustandsgleichung basierende thermodynamische Modellierung wird im Rahmen der vorliegenden Arbeit um die Volumenkorrekturmethode von Abudour et al. [4] erweitert und mit der Flamelet-Modellierung sowie der Eulerian-stochastic-fields-Methode gekoppelt.

Die entwickelten LES-Verfahren werden verwendet, um drei verschiedene Einspritzkonfigurationen bei überkritischen Drücken zu simulieren. Bei jedem dieser Testfälle steht ein anderer Teilaspekt der physikalischen Modellierung im Mittelpunkt der Untersuchung. Der erste Testfall konzentriert sich auf den Einfluss der Realgaseffekte auf den Strahlzerfall bei der inerten Einspritzung von trans- und überkritischem Stickstoff in eine mit warmem Stickstoff gefüllte Kammer. Die Konfiguration entspricht den Experimenten von Mayer et al. [138] und es stehen Messungen der spontanen Raman-Streuung zur quantitativen Bewertung der Simulationsergebnisse zur Verfügung. Es wird eine Sensitivitätsstudie durchgeführt, um den Einfluss verschiedener Simulationsparameter bewerten zu können. Es zeigt sich, dass die Genauigkeit der thermodynamischen Modellierung sowie der Zustand des eingespritzten Fluids entscheidend sind, wohingegen die Modellierung der unaufgelösten Turbulenz eine weniger wichtige Rolle spielt. Des Weiteren wird die durch den in der Scherschicht auftretenden starken Dichtegradienten hervorgerufene Stabilisierung des Strahls anhand einer Analyse der einzelnen Komponenten des Reynoldsschen Spannungstensors untersucht. Bei transkritischer Einspritzung werden die turbulenten Fluktuationen, die senkrecht zur Strahloberfläche stehen, gedämpft, solche, die parallel zur Strahloberfläche stehen, angefacht.

Im zweiten Testfall wird die koaxiale Einspritzung von transkritischem Stickstoff und überkritischem Wasserstoff untersucht. Die Konfiguration orientiert sich an den Experimenten von Oswald et al. [165], die Messungen der spontanen Raman-Streuung durchgeführt haben und somit einen quantitativen Vergleich zwischen Experiment und LES ermöglichen. Im Gegensatz zur zuvor beschriebenen Konfiguration treten in der Scherschicht zum einen hohe Scherraten und zum anderen nichtlineare Mischungseffekte auf, deren Einfluss auf die Strömung mit den entwickelten LES-Methoden analysiert wird. In den Ergebnissen ist eine deutliche Abkühlung in der turbulenten Scherschicht zu beobachten und eine Analyse der dort erreichten Zustände zeigt, dass eine Phasentrennung wahrscheinlich ist. Der kritische Druck der Mischung übersteigt lokal den Druck in der Kammer und die Strömungszustände liegen im Zweiphasengebiet. Eine Auftrennung in Flüssigkeit und Dampf wird in der vorliegenden Arbeit jedoch aufgrund des großen numerischen Aufwands, der damit verbunden ist, nicht berücksichtigt. Im Experiment werden die Mischungseffekte anhand der gemessenen Wasserstoff-Partialdrücken

sichtbar, die in der Scherschicht den Wert am Einlass übersteigen. Dieser Effekt kann in der LES qualitativ wiedergegeben werden und auch die gemessene Länge des Strahlkerns stimmt mit der in der Simulation berechneten gut überein.

Im dritten Testfall wird die Verbrennung von transkritischem Sauerstoff und überkritischem Methan bei für Raketenbrennkammern repräsentativen Bedingungen untersucht. Die der LES zugrunde liegende Konfiguration ist von Singla et al. [209] am Mascotte-Prüfstand der ONERA experimentell untersucht worden. Zur Bewertung der LES-Ergebnisse stehen Messungen der gemittelten OH^* -Strahlung zur Verfügung. Der Fokus der in dieser Arbeit durchgeführten numerischen Untersuchungen liegt insbesondere auf der Bewertung des Flamelet-Ansatzes und der Eulerian-stochastic-fields-Methode hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit zur Simulation der Methan-Verbrennung bei transkritischen Einspritzbedingungen. In einem Vergleich der beiden Methoden werden Unterschiede sichtbar, die auf die verschiedene Genauigkeit der Modellierungen zurückzuführen sind. Jedoch unterscheiden sich die berechneten Flammenformen nicht grundlegend, was bei Berücksichtigung des hohen numerischen Aufwands, der mit der Verwendung der Eulerian-stochastic-fields-Methode einhergeht, für den Einsatz des Flamelet-Ansatzes spricht. Die Flammenform ist durch die Ausbildung eines Rezirkulationsgebiets im hinteren Bereich der Brennkammer geprägt. Das rückströmende Abgas führt zu einer starken Expansion im hinteren Bereich der Flamme und einem abrupten Ende der chemischen Reaktionen. Diese charakteristische Eigenschaft wird von beiden Modellen wiedergegeben. Insbesondere bei Verwendung der Flamelet-Modellierung und eines hoch aufgelösten Rechengitters stimmen die LES-Ergebnisse sehr gut mit der gemessenen OH^* -Strahlung überein.

Die Simulationsergebnisse dieser Arbeit und die entwickelten LES-Verfahren bieten die Grundlage für viele weitere Untersuchungen. So zeigt sich bei der Simulation der koaxialen Einspritzung, dass aufgrund nichtlinearer Mischungseffekte auch bei einem bezüglich der Einzelstoffe überkritischem Kammerdruck eine Phasentrennung auftreten kann. Der Einfluss, den dieser Effekt auf die Entwicklung der Strömung hat, ist a-priori schwer einzuschätzen. Eine genauere Untersuchung durch eine geeignete Modellierung in der LES wäre ein interessantes Forschungsgebiet. Als erster Ansatzpunkt ist in binären Systemen eine Tabellierung des thermodynamischen Gleichgewichtszustands denkbar. Weiterhin ist die vertiefte Untersuchung des Zusammenspiels zwischen Thermodynamik, Verbrennung und Turbulenz in der LES wünschenswert. Die Betrachtung einer einfachen generischen Testkonfiguration, für die die Filterweite und damit der Anteil der zu modellierenden Skalen in einem größeren Bereich variiert werden kann, könnte helfen, ein besseres Verständnis für die Feinstrukturmodellierung zu entwickeln. Neben den genannten grundlagenorientierten Untersuchungen wäre auch eine Betrachtung anwendungsnaher Konfigurationen interessant. So könnten die entwickelten numerischen Verfahren zur Simulation der transkritischen Verbrennung in Multiinjektor-Konfigurationen verwendet werden. Im Hinblick auf die Simulation industrienaher Brennkammern wäre zur Senkung des Rechenbedarfs eine Kopplung der in der vorliegenden Arbeit entwickelten LES-Verfahren mit RANS-Methoden denkbar.

Anhang A

Modellkoeffizienten und Stoffdaten

Kritische Größen

In Tabelle A.1 sind die für die thermodynamische Modellierung benötigten Stoffdaten aufgelistet. Die Werte sind dem Buch von Poling et al. [183] entnommen.

	T _c [K]	p _c [MPa]	v _c [cm ³ /mol]	Z _c	ω	W [g/mol]
CH ₄	190.4	4.6	98.63	0.287	0.011	16.04
CO ₂	304.12	7.374	94.07	0.274	0.225	44.01
H ₂ O	647.3	22.12	55.95	0.23	0.344	18.02
O ₂	154.58	5.043	73.37	0.288	0.022	32
N ₂	126.19	3.4	89.41	0.289	0.037	28.01
H ₂	33.19	1.315	66.93	0.319	-0.214	2.016
OH	443.7	8.54	134.41	0.311	0.329	17.007
O	367.4	7.6	125.07	0.311	0	15.999
H	404.3	8.82	118.59	0.311	0	1.008

Tabelle A.1: Stoffdaten der verwendeten Spezies.

Koeffizienten der NASA-Polynome

Zur Berechnung des idealen Referenzzustands der kalorischen Zustandsgrößen werden bei Verwendung der PR-ZGL und der Abudour-Korrektur die 9-koeffizientigen NASA-Polynome nach Goos et al. [64] verwendet:

$$c_p^\circ = \mathcal{R} \left(a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} + a_3 + a_4 T + a_5 T^2 + a_6 T^3 + a_7 T^4 \right), \quad (\text{A.1})$$

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8	a_9	
CH ₄	$T \leq 1000\text{K}$	-1.76685100E+05	2.78615102E+03	-1.20257785E+01	3.91761929E-02	-3.61905443E-05	2.02685304E-08	-4.97670549E-12	-2.33131436E+04	8.90432276E+01
	$T > 1000\text{K}$	3.73004276E+06	-1.38350149E+04	2.04910709E+01	-1.96197476E-03	4.72731304E-07	-3.72881469E-11	1.62373721E-15	7.53206691E+04	-1.21912489E+02
CO ₂	$T \leq 1000\text{K}$	4.94365054E+04	-6.26411601E+02	5.30172624E+00	2.50381382E-03	-2.12730873E-07	-7.68998878E-10	2.84667780E-13	-4.52819846E+04	-7.04827944E+00
	$T > 1000\text{K}$	1.17696242E+05	-1.78879148E+03	8.29152319E+00	-9.22315678E-05	4.86367688E-09	-1.89105331E-12	6.33003659E-16	-3.90833505E+04	-2.65266928E+01
H ₂ O	$T \leq 1000\text{K}$	-3.94796083E+04	5.75573102E+02	9.31782653E-01	7.22271286E-03	-7.34255737E-06	4.95504349E-09	-1.33693325E-12	-3.30397431E+04	1.72420578E+01
	$T > 1000\text{K}$	1.03487210E+06	-2.41269856E+03	4.64611078E+00	2.29199831E-03	-6.83683048E-07	9.42646893E-11	-4.82238053E-15	-1.38428651E+04	-7.97814851E+00
O ₂	$T \leq 1000\text{K}$	-3.42556542E+04	4.84700097E+02	1.11901096E+00	4.29388924E-03	-6.83830052E-07	-2.02337270E-09	1.03904002E-12	-3.39145487E+03	1.84969947E+01
	$T > 1000\text{K}$	-1.03793902E+06	2.34483028E+03	1.81973204E+00	1.26784758E-03	-2.18806799E-07	2.05371957E-11	-8.19346705E-16	-1.68901093E+04	1.73871651E+01
N ₂	$T \leq 1000\text{K}$	2.21037150E+04	-3.81846182E+02	6.08279383E+00	-8.53091441E-03	1.38464619E-05	-9.62579362E-09	2.51970581E-12	7.10846086E+02	-1.07600374E+01
	$T > 1000\text{K}$	5.87712406E+05	-2.23924907E+03	6.06694922E+00	-6.13968550E-04	1.49180668E-07	-1.92310549E-11	1.06195439E-15	1.28321042E+04	-1.58664003E+01
H ₂	$T \leq 1000\text{K}$	4.07852321E+04	-8.00918604E+02	8.21470201E+00	-1.26971446E-02	1.75360508E-05	-1.20286027E-08	3.36809349E-12	2.68248487E+03	-3.04378884E+01
	$T > 1000\text{K}$	5.60812801E+05	-8.37150474E+02	2.97536453E+00	1.25224912E-03	-3.74071619E-07	5.93662520E-11	-3.60699410E-15	5.33982441E+03	-2.20277477E+00
OH	$T \leq 1000\text{K}$	-2.51176012E+03	1.00200647E+02	3.01176222E+00	1.63498343E-03	-3.30846245E-06	3.42402920E-09	-1.16985048E-12	2.95921560E+03	4.89223824E+00
	$T > 1000\text{K}$	1.01506100E+06	-2.50398393E+03	5.11068667E+00	1.33362531E-04	-8.35729831E-08	2.01593585E-11	-1.66182738E-15	2.01600907E+04	-1.09702891E+01
O	$T \leq 1000\text{K}$	-7.95361130E+03	1.60717779E+02	1.96622644E+00	1.01367031E-03	-1.11041542E-06	6.51750750E-10	-1.58477925E-13	2.84036244E+04	8.40424182E+00
	$T > 1000\text{K}$	2.61902026E+05	-7.298872203E+02	3.31717727E+00	-4.28133436E-04	1.03610459E-07	-9.43830433E-12	2.72503830E-16	3.39242806E+04	-6.67958535E-01
H	$T \leq 1000\text{K}$	0.00000000E+00	0.00000000E+00	2.50000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	2.54737080E+04	-4.46682858E-01
	$T > 1000\text{K}$	6.07877425E+01	-1.81935442E-01	2.50021182E+00	-1.22651286E-07	3.73287633E-11	-5.68774456E-15	3.41021020E-19	2.54748640E+04	-4.48191777E-01

Tabelle A.2: Koeffizienten zur Auswertung der NASA-Polynome.

		a _i	b _i	c _i	d _i	e _i
CH ₄	i = 0	1.4030E+01	-2.2038E+00	1.0979E+01	-1.8812E+01	8.1046E+00
	i = 1	-2.9945E+00	5.5502E-01	-1.0712E+00	3.4885E+00	-4.2320E+00
	i = 2	8.3379E-01	-1.4803E-01	3.0943E-01	-9.8823E-01	1.2112E+00
	i = 3	-6.1095E-02	1.0454E-02	-2.3410E-02	7.3672E-02	-9.1006E-02
O ₂	i = 0	-2.6627E-03	-2.6855E-02	3.5256E+00	0.0	-1.8844E+01
	i = 1	-5.5055E-02	3.8370E-02	2.3725E-02	0.0	4.8007E-02
	i = 2	1.0802E-02	-5.8455E-03	-4.0817E-03	0.0	-7.9077E-03
	i = 3	-3.3882E-04	1.7140E-04	1.3537E-04	0.0	2.5601E-04
N ₂	i = 0	8.5610E+00	-2.8734E+00	5.2085E+00	-7.3677E+00	-8.8583E+00
	i = 1	4.7709E-02	-9.3171E-03	4.9733E-03	-2.8200E-02	2.6602E-02
	i = 2	-1.3426E-03	4.4869E-04	-1.4035E-04	9.4103E-04	-7.7410E-04
	i = 3	3.8037E-05	-2.1032E-05	2.9341E-06	-2.1826E-05	1.6618E-05
H ₂	i = 0	-2.2570E+00	9.3200E+00	3.5559E+00	0.0	-4.2756E+00
	i = 1	8.9768E-02	-1.8230E-01	-2.0169E-03	0.0	-9.4720E-03
	i = 2	-2.0286E-03	4.1623E-03	9.2431E-05	0.0	3.6176E-04
	i = 3	1.3241E-05	-2.6840E-05	-6.8674E-07	0.0	-2.6171E-06

Tabelle A.3: Koeffizienten zur Auswertung der Harstad-Korrektur.

$$h^\circ = \mathcal{R}T \left(a_1 T^{-2} + \frac{a_2 \ln(T)}{T} + a_3 \dots + \frac{a_4 T}{2} + \frac{a_5 T^2}{3} + \frac{a_6 T^3}{4} + \frac{a_7 T^4}{5} + \frac{a_8}{T} \right), \quad (\text{A.2})$$

$$s^\circ = \mathcal{R} \left(-\frac{a_1 T^{-2}}{2} - a_2 T^{-1} + a_3 \ln(T) \dots + a_4 T + \frac{a_5 T^2}{2} + \frac{a_6 T^3}{3} + \frac{a_7 T^4}{4} + a_9 \right), \quad (\text{A.3})$$

$$g^\circ = h^\circ - T s^\circ, \quad (\text{A.4})$$

$$c_v^\circ = c_p^\circ - \mathcal{R}. \quad (\text{A.5})$$

Die Koeffizienten $a_1 - a_9$ können aus Tabelle A.2 entnommen werden.

Koeffizienten der Harstad-Korrektur

Bei Verwendung der Harstad-Korrektur [75] wird der ideale Referenzzustand zur Berechnung der kalorischen Zustandsgrößen durch eine druckabhängige Korrelation beschrieben:

$$c_p^\circ = \mathcal{R} \left(-\frac{b_H}{T_r^2} + c_H + \frac{d_H}{2} \sqrt{\frac{1}{T_r}} \right), \quad (\text{A.6})$$

$$h^\circ = \mathcal{R}T_c \left(a_H + \frac{b_H}{T_r} + c T_r + d_H \sqrt{T_r} \right), \quad (\text{A.7})$$

$$s^\circ = \mathcal{R} \left(\frac{b_H}{2T_r^2} - e_H + c_H (1 + \ln(T_r)) - \frac{d_H}{\sqrt{T_r}} \right), \quad (\text{A.8})$$

$$g^\circ = h^\circ - T s^\circ, \quad (\text{A.9})$$

$$c_v^\circ = c_p^\circ - \mathcal{R}. \quad (\text{A.10})$$

Die Koeffizienten $a_H - e_H$ sind druckabhängige Polynome dritter Ordnung:

$$\begin{aligned} a_H &= a_1 + a_2 p_r + a_3 p_r^2 + a_4 p_r^3, \\ b_H &= b_1 + b_2 p_r + b_3 p_r^2 + b_4 p_r^3, \\ c_H &= c_1 + c_2 p_r + c_3 p_r^2 + c_4 p_r^3, \\ d_H &= d_1 + d_2 p_r + d_3 p_r^2 + d_4 p_r^3, \\ e_H &= e_1 + e_2 p_r + e_3 p_r^2 + e_4 p_r^3. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Von denen in dieser Arbeit verwendeten Stoffe geben Harstad et al. [75] Werte für CH_4 , O_2 , N_2 und H_2 an. Diese sind in Tabelle A.3 zusammengefasst.

Anhang B

Thermodynamische Zusammenhänge

Im folgenden werden verschiedene thermodynamische Ableitungen und Beziehungen für kalorische Zustandsgrößen mit der PR-ZGL ausgewertet.

Innere Energie

Die innere Energie kann in einen idealen Referenzzustand und einen Realanteil zerlegt werden [183, 49]:

$$(e - e^\circ) = \int_{\infty}^v \left[T \left. \frac{\partial p}{\partial T} \right|_v - p \right] dv. \quad (\text{B.1})$$

Hierbei ist e die molare innere Energie und e° korrespondiert zum Wert bei Standardbedingungen ($p^\circ = 0.1 \text{ MPa}$). e° kann mit den 9-koeffizientigen NASA-Polynomen [64], das Integral auf der rechten Seite mit der PR-ZGL ausgewertet werden:

$$(e - e^\circ) = \frac{1}{2b\sqrt{2}} \left[a - T \frac{\partial a}{\partial T} \right] \ln \left[\frac{v + b(1 - \sqrt{2})}{v + b(1 + \sqrt{2})} \right]. \quad (\text{B.2})$$

Die Koeffizienten a und b sind in Abschnitt 3.2.1 definiert.

Enthalpie

Die Enthalpie kann analog berechnet werden:

$$\begin{aligned} (h - h^\circ) &= pv - \mathcal{R}T + \int_{\infty}^v \left[T \left. \frac{\partial p}{\partial T} \right|_v - p \right] dv \\ &= pv - \mathcal{R}T + \frac{1}{2b\sqrt{2}} \left[a - T \frac{\partial a}{\partial T} \right] \ln \left[\frac{v + b(1 - \sqrt{2})}{v + b(1 + \sqrt{2})} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Wärmekapazitäten

Die isobare Wärmekapazität ist die partielle Ableitung der Enthalpie nach der Temperatur und folgt daher direkt aus Gleichung B.3:

$$(c_p - c_p^\circ) = -\mathcal{R} - T \left[\frac{(\partial p / \partial T)_v^2}{(\partial p / \partial v)_T} - \frac{\partial^2 a}{\partial T^2} \frac{1}{2b\sqrt{2}} \ln \left[\frac{v + b(1 - \sqrt{2})}{v + b(1 + \sqrt{2})} \right] \right], \quad (\text{B.4})$$

mit

$$\left. \frac{\partial p}{\partial T} \right|_v = \frac{\mathcal{R}}{v - b} - \frac{\partial a / \partial T}{v^2 + 2vb - b^2}, \quad (\text{B.5})$$

$$\left. \frac{\partial p}{\partial v} \right|_T = -\frac{\mathcal{R}T}{(v - b)^2} + \frac{2a(v + b)}{(v^2 + 2vb - b^2)^2}. \quad (\text{B.6})$$

Die isochore Wärmekapazität ist die partielle Ableitung der inneren Energie nach dem Volumen und kann daher analog aus Gleichung B.1 berechnet werden:

$$(c_v - c_v^\circ) = -T \frac{\partial^2 a}{\partial T^2} \frac{1}{2b\sqrt{2}} \ln \left[\frac{v + b(1 - \sqrt{2})}{v + b(1 + \sqrt{2})} \right]. \quad (\text{B.7})$$

Kompressibilität

Die Kompressibilität ψ beschreibt, wie sich die Dichte in einem Fluid bei Änderung des Druckes verhält. Bei Verwendung eines druckbasierten Lösungsverfahrens wird die Kompressibilität zur Lösung der Druckkorrekturgleichung benötigt und normalerweise bei isothermen Bedingungen ausgewertet:

$$\psi_T = \left. \frac{\partial \rho}{\partial p} \right|_T = -\frac{1}{v^2} \left. \frac{\partial v}{\partial p} \right|_T. \quad (\text{B.8})$$

Die isotherme Kompressibilität ψ_T kann mit Gleichung B.6 berechnet werden.

In dem in Abschnitt 5.1 diskutierten adaptierten Druckkorrekturverfahren wird die Kompressibilität allerdings unter Konstanthaltung der Enthalpie ausgewertet:

$$\psi_h = \left. \frac{\partial \rho}{\partial p} \right|_h = -\frac{1}{v^2} \left. \frac{\partial v}{\partial p} \right|_h. \quad (\text{B.9})$$

Die partielle Ableitung des Volumens nach dem Druck bei konstanter Enthalpie kann durch die mathematische Beziehung

$$\left. \frac{\partial v}{\partial p} \right|_h = -\frac{(\partial h / \partial p)_v}{(\partial h / \partial v)_p}, \quad (\text{B.10})$$

mit

$$\left. \frac{\partial h}{\partial p} \right|_v = v + \frac{c_p^\circ - \mathcal{R}}{(\partial p / \partial T)_v} - \frac{T (\partial^2 a / \partial T^2)}{2b\sqrt{2} (\partial p / \partial T)_v} \ln \left[\frac{v + b(1 - \sqrt{2})}{v + b(1 + \sqrt{2})} \right], \quad (\text{B.11})$$

$$\frac{\partial h}{\partial v} \Big|_p = p + \frac{c_p^\circ - \mathcal{R}}{(\partial v / \partial T)_p} + \frac{a - T(\partial a / \partial T)}{(v^2 + 2bv - b^2)^2} \dots - \frac{T(\partial^2 a / \partial T^2)}{2b\sqrt{2}(\partial v / \partial T)_p} \ln \left[\frac{v + b(1 - \sqrt{2})}{v + b(1 + \sqrt{2})} \right], \quad (\text{B.12})$$

und

$$\frac{\partial v}{\partial T} \Big|_p = \frac{(\partial p / \partial T)_v}{(\partial p / \partial v)_T}, \quad (\text{B.13})$$

berechnet werden.

Schallgeschwindigkeit

Die Schallgeschwindigkeit ist eine intensive Zustandsgröße und entspricht der Wurzel aus der partiellen Ableitung des Drucks nach der Dichte bei isentropen Bedingungen:

$$a_s = \sqrt{\left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_s} = v \sqrt{\frac{c_p}{c_v} \left. \frac{\partial p}{\partial v} \right|_T}. \quad (\text{B.14})$$

a_s kann mit den Gleichungen B.4, B.6 und B.7 ausgewertet werden.

Anhang C

Validierung der thermodynamischen Modelle

Die in dieser Arbeit verwendete thermodynamische Modellierung wurde durch einen Vergleich mit den Referenzdaten vom NIST [1] für die wichtigsten hier verwendeten Stoffe validiert. Die Ergebnisse der PR-ZGL sowie der Abudour- und Harstad-Korrektur für die Dichte sind in Abbildung C.1 gezeigt. Die PR-ZGL weicht im transkritischen Bereich bei allen betrachteten Stoffe teils deutlich von der Referenz ab. Mit den beiden Volumenkorrekturmethode kann die Dichteberechnung deutlich verbessert werden, wobei die Abudour-Korrektur besser mit den Ergebnissen des NIST [1] übereinstimmt als die Harstad-Korrektur.

In Abbildung C.2 und C.3 sind die Enthalpie und die isobare Wärmekapazität gezeigt. Es zeigt sich, dass die Ergebnisse der PR-ZGL im betrachteten Bereich besser mit den Referenzdaten übereinstimmen als die der Harstad-Korrektur. Der Unterschied lässt sich auf die Berechnung des idealen Referenzzustands zurückführen. Dieser wird bei der Harstad-Korrektur durch eine druckabhängige Korrelation berechnet [75], wohingegen bei der PR-ZGL die 9-koeffizientigen NASA-Polynome verwendet werden.

Die Viskosität und die thermische Leitfähigkeit sind in Abbildung C.4 und C.5 gezeigt. Diese wurden mit der empirischen Modellierung von Chung et al. [31] berechnet. Der positive Effekt der Volumenkorrekturmethode spiegelt sich auch im Ergebnis für die Transportgrößen wieder, da die Dichte direkt in die Modellierung einfließt.

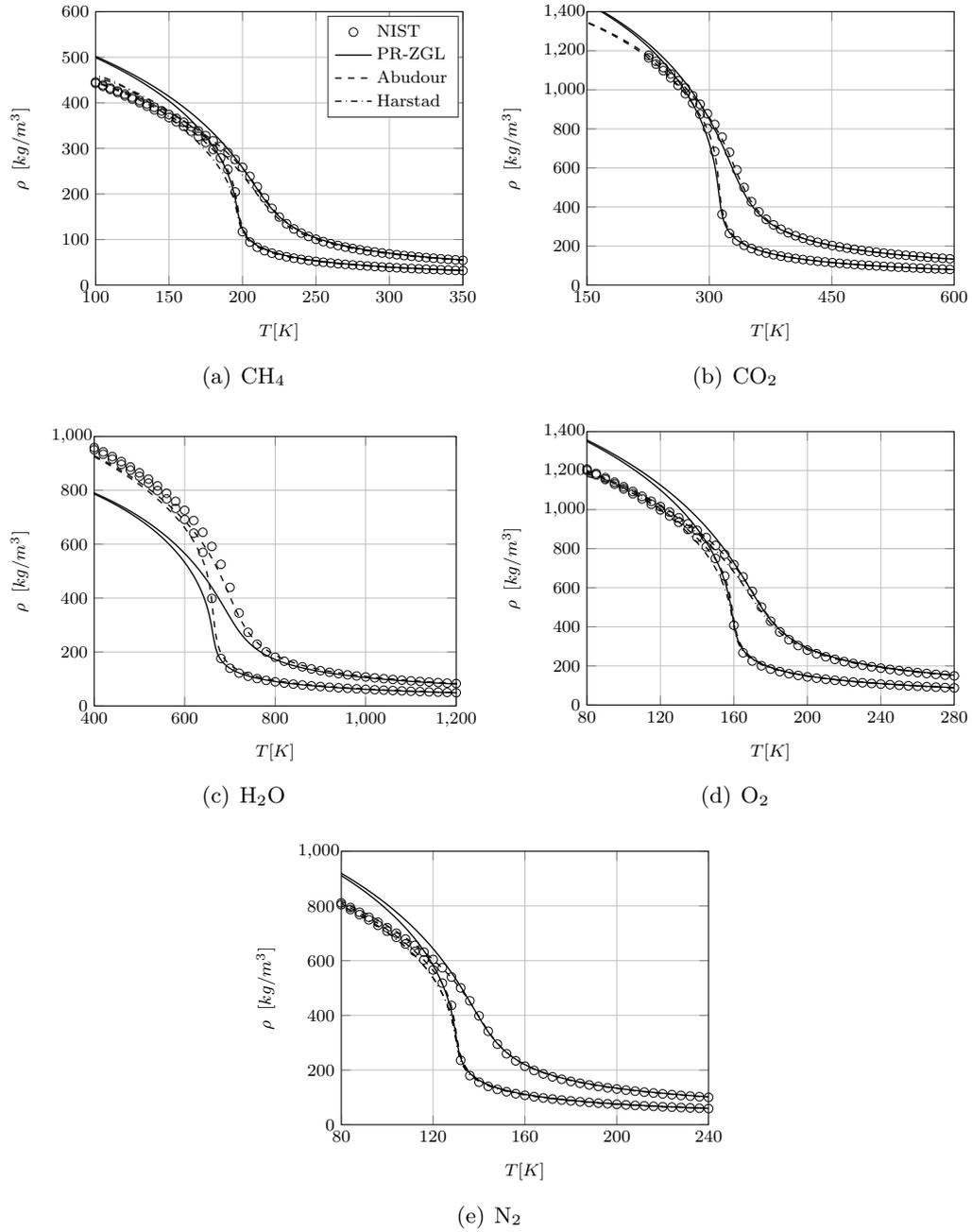


Abbildung C.1: Dichteverlauf verschiedener Spezies bei $p = 1.2 p_k$ und $p = 2 p_k$: Vergleich verschiedener thermischer Zustandsgleichungen.

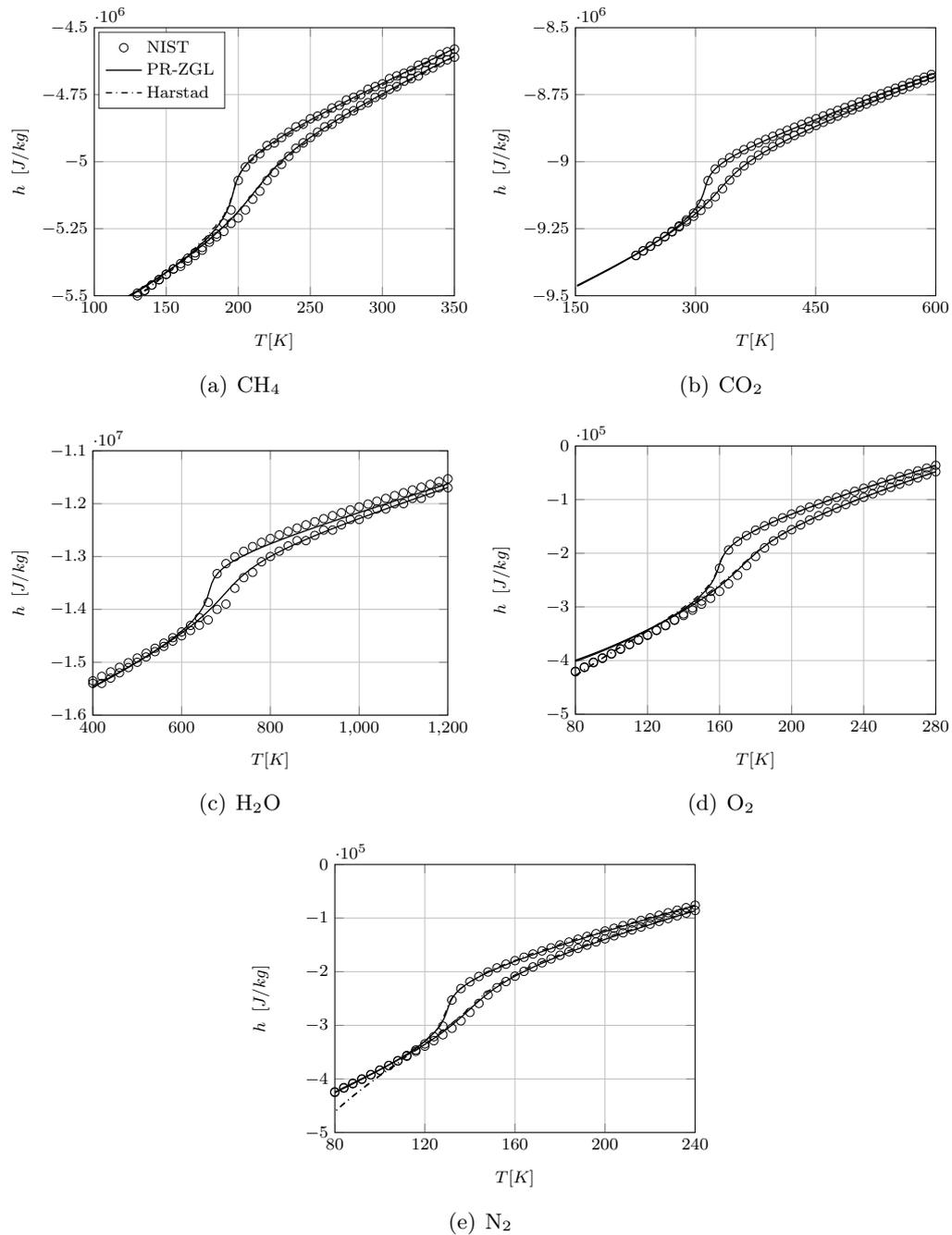


Abbildung C.2: Enthalpie verschiedener Spezies bei $p = 1.2 p_k$ und $p = 2 p_k$: Vergleich der PR-ZGL und der Harstad-Korrektur.

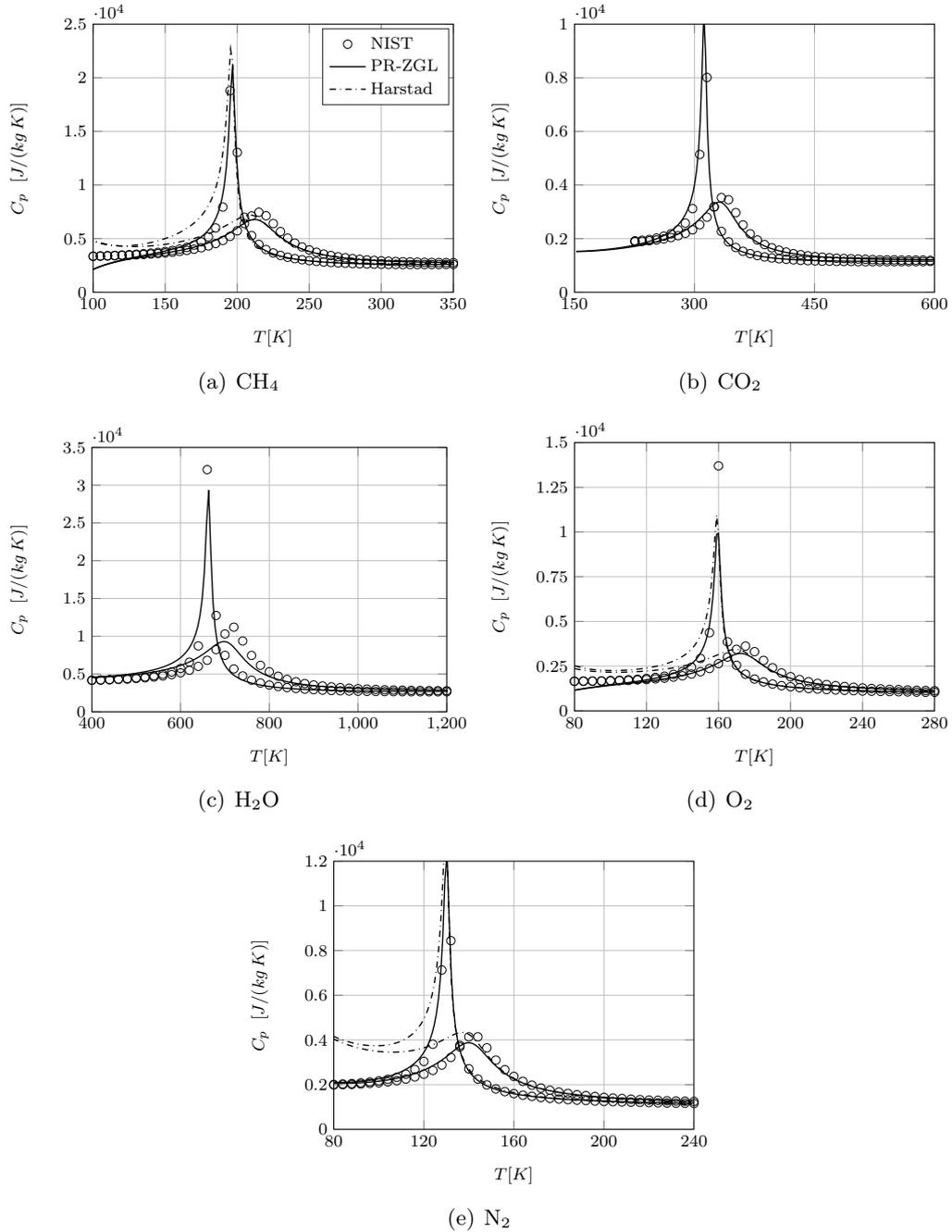


Abbildung C.3: Isobare Wärmekapazität verschiedener Spezies bei $p = 1.2 p_k$ und $p = 2 p_k$: Vergleich der PR-ZGL und der Harstad-Korrektur.

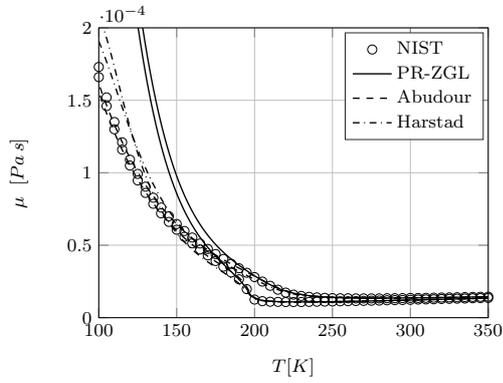
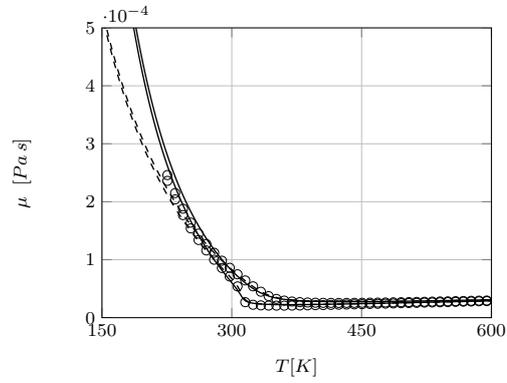
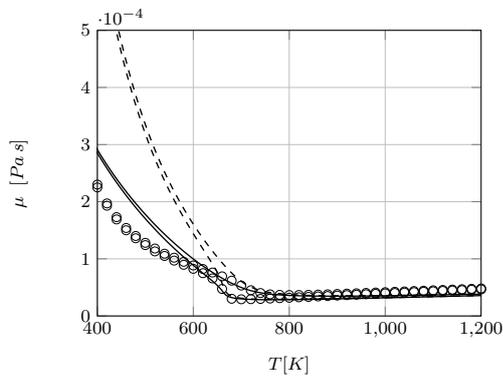
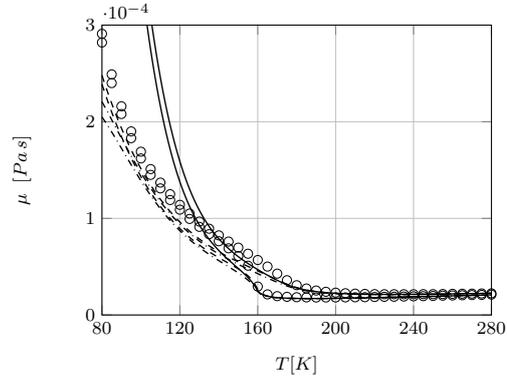
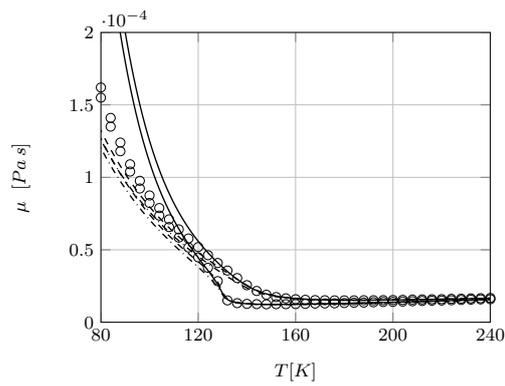
(a) CH₄(b) CO₂(c) H₂O(d) O₂(e) N₂

Abbildung C.4: Viskosität verschiedener Spezies bei $p = 1.2 p_k$ und $p = 2 p_k$: Validierung des Transportmodells von Chung et al. [31] bei Verwendung verschiedener thermischer Zustandsgleichungen.

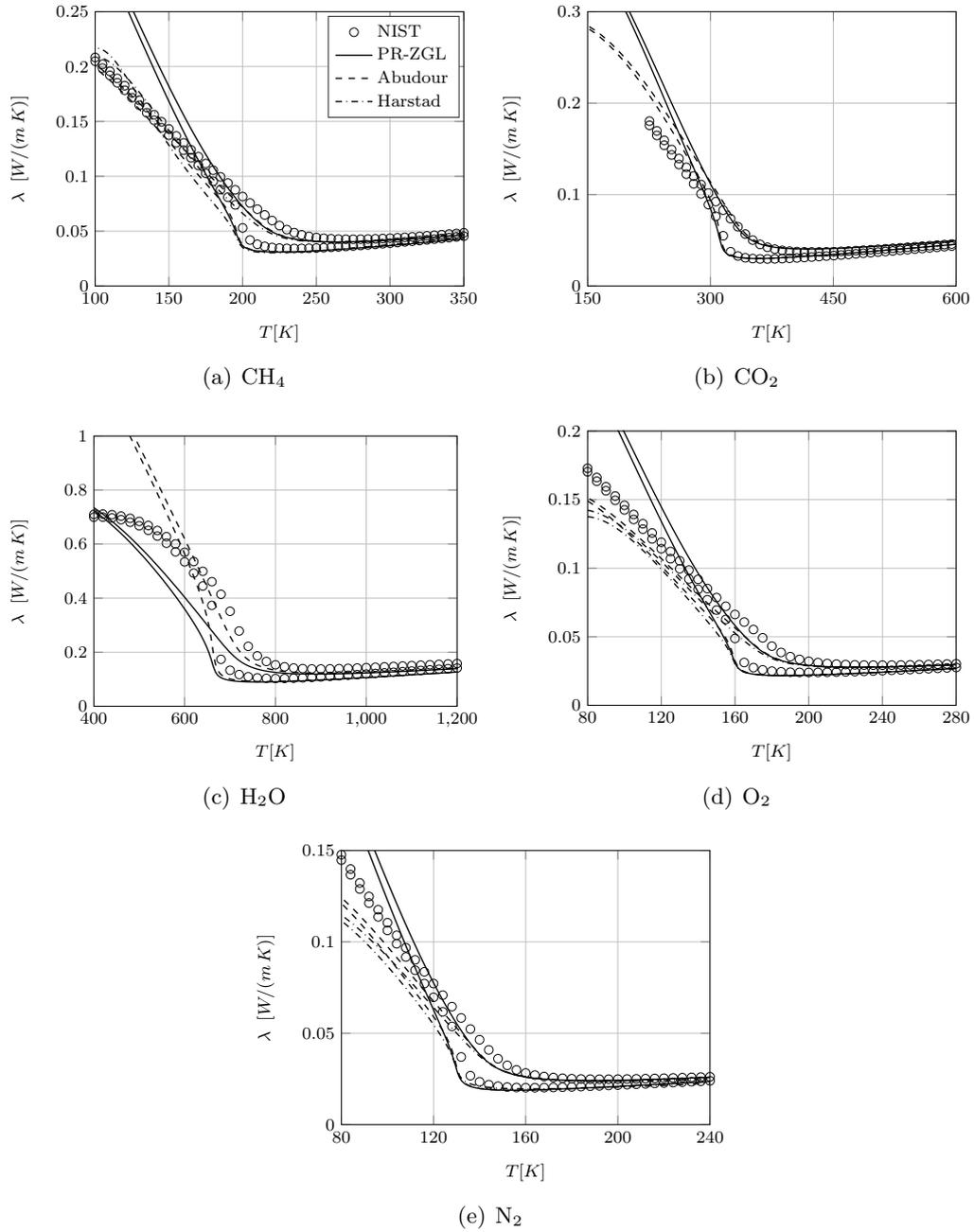


Abbildung C.5: Thermische Leitfähigkeit verschiedener Spezies bei $p = 1.2 p_k$ und $p = 2 p_k$: Validierung des Transportmodells von Chung et al. [31] bei Verwendung verschiedener thermischer Zustandsgleichungen.

Anhang D

Simulationsergebnisse Sandia Flamme D

Zur Validierung der ESF-Methode und des Flamelet-Ansatzes dienen die experimentellen Untersuchungen von Barlow et al. [13, 3]. Bei den Experimenten wird ein Gemisch von 25/75 Volumen-% Methan/Luft durch ein Rohr mit dem Durchmesser $D_F = 7.2$ mm und einer Geschwindigkeit von $u_{in} = 49.6$ m/s eingespritzt. Der Injektor ist umringt von einem zweiten Ringspaltinjektor mit einem Durchmesser von $D_P = 18.2$ mm. Durch ihn wird ein vorverbranntes Brennstoff/Luft Gemisch bei einem Mischungsbruch von $f = 0.271$ eingespritzt. Die Geschwindigkeit dieses Pilotstroms beträgt $u_p = 11.4$ m/s. Der Brennstoff- und Pilotstrom ist eingebettet von einem Luft-Coflow mit einer Geschwindigkeit von $u_{CF} = 0.9$ m/s. Die Randbedingungen sind in Tabelle D.1 zusammengefasst.

Das verwendete Rechengitter ist achsensymmetrisch und umfasst 2.3×10^6 Zellen. Die turbulenten Einströmrandbedingungen werden wie in Kapitel 6.1 beschrieben anhand einer separaten LES generiert. Bei Verwendung der ESF-Methode wird der in Kapitel 5.2.3 vorgestellte Strömungslöser RGstochasticFieldsFoam, bei Verwendung des Flamelet-Ansatzes wird der Strömungslöser RGflameletFoam aus Kapitel 5.2.2 verwendet. Da der Druck bei der hier untersuchten Flamme atmosphärisch ist ($p = 0.1$ MPa), wird das ideale Gasgesetz verwendet. Die unaufgelöste

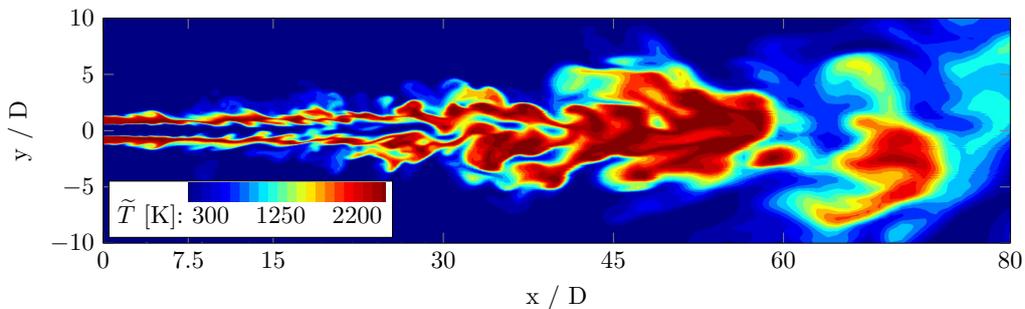


Abbildung D.1: Sandia Flamme D: Momentaufnahme der gefilterten Temperatur.

	Brennstoff	Pilot	Coflow
u [m/s]	49.6	11.4	0.9
T [K]	294	1888	294
f	1	0.271	0

Tabelle D.1: Experimentelle Randbedingungen von Barlow et al. [3].

Turbulenz wird mit dem Wirbelviskositätsmodell von Vreman [228] modelliert (siehe Kap. 2.2.5). Bei den Flamelet-Rechnungen werden die chemischen Reaktionen mit GRI-3.0-Mechanismus beschrieben. Bei den Simulationen mit der ESF-Methode war die Verwendung des vollen Mechanismus nicht möglich. Hier wird der Skelettmechanismus von Smooke [213] verwendet. Dieser umfasst 16 Reaktionskomponenten und 46 Reaktionen.

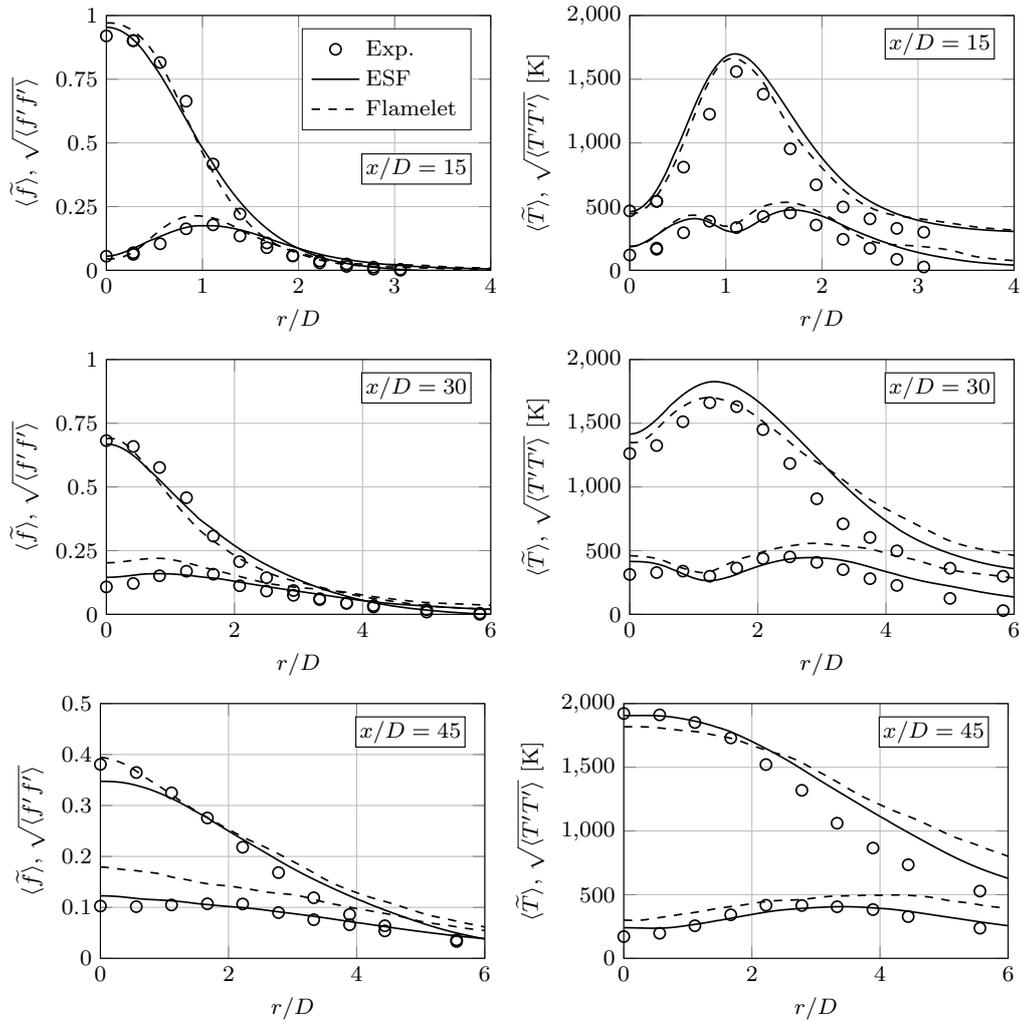


Abbildung D.2: Sandia Flamme D: Gemittelter Mischungsbruch und Temperatur sowie deren Varianzen an verschiedenen axialen Positionen als Funktion des Radius.

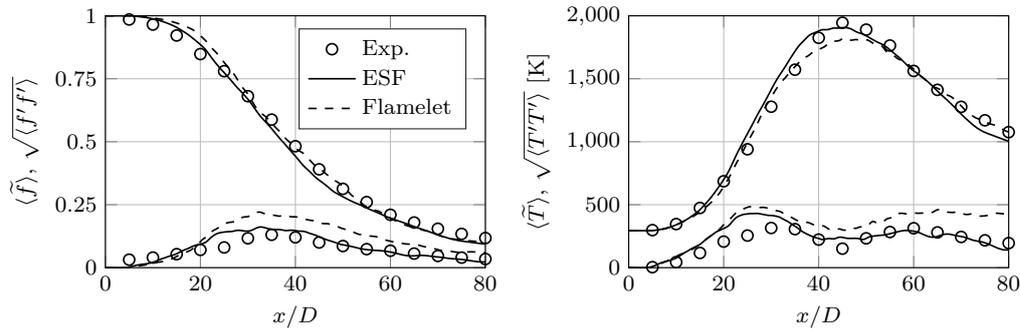


Abbildung D.3: Sandia Flamme D: Gemittelter Mischungsbruch und Temperatur sowie deren Varianzen auf der Symmetrieachse.

Abbildung D.1 zeigt eine Momentaufnahme des berechneten Temperaturfelds auf der z -Ebene des Rechengitters. Die zugehörigen gemittelten Ergebnisse für die Temperatur und den Mischungsbruch auf der Symmetrieachse finden sich in Abbildung D.3. Radiale Ergebnisse an drei verschiedenen Positionen im Strömungsfeld sind in Abbildung D.2 gezeigt. Generell ist die Übereinstimmung der numerischen Ergebnisse mit den verfügbaren Messergebnissen von Barlow et al. [13, 3] sehr gut. Mit beiden Methoden kann der Verlauf des Mischungsbruchs und der Temperatur wiedergegeben werden. Die zweiten Momente sind insbesondere bei Verwendung der ESF-Methode gut getroffen.

Literaturverzeichnis

- [1] *National Institute of Standards and Technology.* <http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>
- [2] *OpenFOAM User Guide.* <http://www.openfoam.org/docs/>
- [3] *Sandia Flame D experimental database.* <http://www.ca.sandia.gov/TNF/DataArch/FlameD.html>
- [4] ABUDOUR, A. M. ; MOHAMMAD, S. A. ; ROBINSON, R. L. ; GASEM, K. A. M.: Volume-translated Peng-Robinson equation of state for liquid densities of diverse binary mixtures. In: *Fluid Phase Equilibria* 349 (2013), S. 37–55
- [5] ABUDOUR, A. M. ; MOHAMMAD, S. A. ; ROBINSON, R. L. ; GASEM, K. A. M.: Volume-translated Peng-Robinson equation of state for saturated and single-phase liquid densities. In: *Fluid Phase Equilibria* 335 (2012), S. 74–87
- [6] AHLERS, J. ; GMEHLING, J. : Development of an universal group contribution equation of state: I. Prediction of liquid densities for pure compounds with a volume translated Peng–Robinson equation of state. In: *Fluid Phase Equilibria* 191 (2001), Nr. 1, S. 177–188
- [7] ANDERSON, J. D. ; WENDT, J. : *Computational fluid dynamics.* New York, USA : Mcgraw-Hill Professional, 1995
- [8] ARRHENIUS, S. : Über die Reaktionsgeschwindigkeit bei der Inversion von Rohrzucker durch Säuren. In: *Zeitschrift für Physikalische Chemie* 4 (1889), S. 226–248
- [9] AVDIĆ, A. : *Development and application of numerical methods for the simulation of advanced combustion processes within complex devices,* Technische Universität Darmstadt, Diss., 2014
- [10] BALED, H. ; ENICK, R. M. ; WU, Y. ; MCHUGH, M. A. ; BURGESS, W. ; TAPRIYAL, D. ; MORREALE, B. D.: Prediction of hydrocarbon densities at extreme conditions using volume-translated SRK and PR equations of state fit to high temperature, high pressure PVT data. In: *Fluid Phase Equilibria* 317 (2012), S. 65–76
- [11] BANUTI, D. T. : Crossing the Widom-line - supercritical pseudo-boiling. In: *Journal of Supercritical Fluids* 98 (2015), S. 12–16
- [12] BANUTI, D. T. ; HANNEMANN, K. : The absence of a dense potential core in supercritical injection : A thermal break-up mechanism. In: *Physics of Fluids (1994-present)* 28 (2016), Nr. 3, S. 035103
- [13] BARLOW, R. S. ; FRANK, J. H.: Effects of turbulence on species mass fractions in methane/air jet flames. In: *Symposium (International) on Combustion* Bd. 27, 1998, S. 1087–1095

- [14] BATCHELOR, G. K.: *The theory of homogeneous turbulence*. Cambridge University Press, 1953
- [15] BELLAN, J. : Theory, modeling and analysis of turbulent supercritical mixing. In: *Combustion Science and Technology* 178 (2006), Nr. 1-3, S. 253–281
- [16] BENMANSOUR, A. ; LIAZID, A. ; LOGERAIS, P.-O. ; DURASTANTI, J.-F. : A 3D numerical study of LO₂/GH₂ supercritical combustion in the ONERA-Mascotte test-rig configuration. In: *Journal of Thermal Science* 25 (2016), Nr. 1, S. 97–108
- [17] BORGHESI, G. ; BELLAN, J. : Models for the large eddy simulation equations to describe multi-species mixing occurring at supercritical pressure. In: *International Journal of Energetic Materials and Chemical Propulsion* 13 (2014), Nr. 5, S. 435–453
- [18] BORGHESI, G. ; BELLAN, J. : A priori and a posteriori investigations for developing large eddy simulations of multi-species turbulent mixing under high-pressure conditions. In: *Physics of Fluids (1994-present)* 27 (2015), Nr. 3, S. 035117
- [19] BORGHI, R. : Turbulent combustion modelling. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 14 (1988), Nr. 4, S. 245–292
- [20] BULAT, G. ; JONES, W. P. ; MARQUIS, A. ; SANDERSON, V. ; STOPPER, U. : Large eddy simulation of a gas turbine combustion chamber. In: *Proceedings of the Combustion Institute* Bd. 34, 2013, S. 3155–3164
- [21] BULAT, G. ; JONES, W. ; NAVARRO-MARTINEZ, S. : Large eddy simulations of isothermal confined swirling flow in an industrial gas-turbine. In: *International Journal of Heat and Fluid Flow* 51 (2015), S. 50–64
- [22] BURKHARDT, H. ; SIPPEL, M. ; HERBERTZ, A. ; KLEVANSKI, J. : Kerosene vS. methane: a propellant tradeoff for reusable liquid booster stages. In: *Journal of Spacecraft and Rockets* 41 (2004), Nr. 5, S. 762–769
- [23] CANDEL, S. ; HERDING, G. ; SNYDER, R. ; SCOUFLAIRE, P. ; ROLON, C. ; VINGERT, L. ; HABIBALLAH, M. ; GRISCH, F. ; PÉALAT, M. ; BOUCHARDY, P. ; STEPOWSKI, D. ; CESSOU, A. ; COLIN, P. : Experimental investigation of shear coaxial cryogenic jet flames. In: *Journal of Propulsion and Power* 14 (1998), Nr. 5, S. 826–834
- [24] CANDEL, S. ; JUNIPER, M. ; SINGLA, G. ; SCOUFLAIRE, P. ; ROLON, C. : Structure and dynamics of cryogenic flames at supercritical pressure. In: *Combustion Science and Technology* 178 (2006), Nr. 1-3, S. 161–192
- [25] CHEHROUDI, B. ; TALLEY, D. ; COY, E. : Visual characteristics and initial growth rates of round cryogenic jets at subcritical and supercritical pressures. In: *Physics of Fluids (1994-present)* 14 (2002), Nr. 2, S. 850–861
- [26] CHEHROUDI, B. : Recent experimental efforts on high-pressure supercritical injection for liquid rockets and their implications. In: *International Journal of Aerospace Engineering* 2012 (2012)
- [27] CHEN, J.-Y. : A Eulerian PDF scheme for LES of nonpremixed turbulent combustion with second-order accurate mixture fraction. In: *Combustion Theory and Modelling* 11 (2007), Nr. 5, S. 675–695
- [28] CHEN, J. Y. ; KOLLMAN, W. ; DIBBLE, R. W.: PDF modeling of turbulent methane-air non-premixed jet flames. In: *Combustion Science and Technology* 64 (1989), S. 315–346
- [29] CHOU, G. F. ; PRAUSNITZ, J. M.: A phenomenological correction to an equation of state for the critical region. In: *AIChE Journal* 35 (1989), Nr. 9, S. 1487–1496

- [30] CHUEH, P. L. ; PRAUSNITZ, J. M.: Vapor-liquid equilibria at high pressures: Calculation of critical temperatures, volumes, and pressures of nonpolar mixtures. In: *AIChE Journal* 13 (1967), Nr. 6, S. 1107–1113
- [31] CHUNG, T.-H. ; AJLAN, M. ; LEE, L. L. ; STARLING, K. E.: Generalized multiparameter correlation for nonpolar and polar fluid transport properties. In: *Industrial & Engineering Chemistry Research* 27 (1988), Nr. 4, S. 671–679
- [32] CISMONTI, M. ; MOLLERUP, J. : Development and application of a three-parameter RK-PR equation of state. In: *Fluid Phase Equilibria* 232 (2005), Nr. 1-2, S. 74–89
- [33] CLAPEYRON, B. : Mémoire sur la puissance motrice de la chaleur. In: *Journal de l'Ecole Polytechnique* 14 (1834), S. 153–190
- [34] CLARK, R. A. ; FERZIGER, J. H. ; REYNOLDS, W. C.: Evaluation of subgrid-scale models using an accurately simulated turbulent flow. In: *Journal of Fluid Mechanics* 91 (1979), Nr. 01, S. 1–16
- [35] CLEARY, M. J. ; KLIMENKO, A. Y.: A generalised multiple mapping conditioning approach for turbulent combustion. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 82 (2009), Nr. 4, S. 477–491
- [36] COOK, A. W.: Artificial fluid properties for large-eddy simulation of compressible turbulent mixing. In: *Physics of Fluids (1994-present)* 19 (2007), Nr. 5, S. 055103
- [37] COOK, A. W. ; RILEY, J. J.: A subgrid model for equilibrium chemistry in turbulent flows. In: *Physics of Fluids (1994-present)* 6 (1994), Nr. 8, S. 2868–2870
- [38] CUENOT, B. ; POINSOT, T. : Effects of curvature and unsteadiness in diffusion flames. Implications for turbulent diffusion combustion. In: *Symposium (International) on Combustion* Bd. 25, 1994, S. 1383–1390
- [39] CUTRONE, L. ; DE PALMA, P. ; PASCAZIO, G. ; NAPOLITANO, M. : A RANS flamelet-progress-variable method for computing reacting flows of real-gas mixtures. In: *Computers and Fluids* 39 (2010), Nr. 3, S. 485–498
- [40] DAHMS, R. N. ; OEFELEIN, J. C.: On the transition between two-phase and single-phase interface dynamics in multicomponent fluids at supercritical pressures. In: *Physics of Fluids (1994-present)* 25 (2013), Nr. 9, S. 092103
- [41] DAHMS, R. N. ; OEFELEIN, J. C.: Atomization and dense-fluid breakup regimes in liquid rocket engines. In: *Journal of Propulsion and Power* 31 (2015), Nr. 5, S. 1221–1231
- [42] DAVIS, D. W. ; CHEHROUDI, B. : Measurements in an acoustically driven coaxial jet under sub-, near-, and supercritical conditions. In: *Journal of Propulsion and Power* 23 (2007), Nr. 2, S. 364–374
- [43] DEKKER, T. J.: Finding a zero by means of successive linear interpolation. In: *Constructive aspects of the fundamental theorem of algebra*. Wiley, 1969, S. 37–51
- [44] DELPLANQUE, J. P. ; SIRIGNANO, W. A.: Numerical study of the transient vaporization of an oxygen droplet at sub- and super-critical conditions. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 36 (1993), Nr. 2, S. 303–314
- [45] DOMINGO, P. ; VERVISCH, L. ; VEYNANTE, D. : Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow. In: *Combustion and Flame* 152 (2008), Nr. 3, S. 415–432
- [46] DOPAZO, C. ; O'BRIEN, E. E.: An approach to the autoignition of a turbulent mixture. In: *Acta Astronautica* 1 (1974), Nr. 9, S. 1239–1266

- [47] ECHEKKI, T. (Hrsg.) ; MASTORAKOS, E. (Hrsg.): *Turbulent combustion modeling: Advances, new trends and perspectives*. Springer Science & Business Media, 2010
- [48] EFFELSBERG, E. ; PETERS, N. : Scalar dissipation rates in turbulent jets and jet diffusion flames. In: *Symposium (International) on Combustion* Bd. 22, 1989, S. 693–700
- [49] ELLIOTT, J. R. ; LIRA, C. T.: *Introductory chemical engineering thermodynamics*. Prentice Hill, 2012
- [50] ERLEBACHER, G. ; HUSSAINI, M. Y. ; SPEZIALE, C. G. ; ZANG, T. A.: Towards the large-eddy simulation of compressible turbulent flows. In: *Journal of Fluid Mechanics* 238 (1992), S. 155–185
- [51] FERRARO, F. ; GE, Y. ; PFITZNER, M. : Hybrid LES – RANS PDF method for nonpremixed reacting flow using GPU explicit ODE integration. In: *9th Mediterranean Combustion Symposium*, 2015
- [52] FERZIGER, J. H. ; PERIĆ, M. : *Computational methods for fluid dynamics*. Springer Berlin Heidelberg, 2002
- [53] FIALA, T. ; SATTELMAYER, T. : A posteriori computation of OH* radiation from numerical simulations in rocket combustion chambers. In: *5th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (EUCASS)*, 2013
- [54] FIALA, T. ; SATTELMAYER, T. : Assessment of existing and new modeling strategies for the simulation of OH* radiation in high-temperature flames. In: *CEAS Space Journal* (2015), S. 1–12
- [55] FOX, R. O. ; STILES, H. L.: *Computational models for turbulent reacting flows*. Cambridge University Press, 2003
- [56] FRASSOLDATI, A. ; CUOCI, A. ; FARAVELLI, T. ; RANZI, E. ; CANDUSSO, C. ; TOLAZZI, D. : Simplified kinetic schemes for oxy-fuel combustion. In: *1st International Conference on Sustainable Fossil Fuels for Future Energy*, 2009, S. 6–10
- [57] FREY, K. ; MODELL, M. ; TESTER, J. W.: Density-and-temperature-dependent volume translation for the SRK EOS: 1. Pure fluid. In: *Fluid Phase Equilibria* 279 (2009), Nr. 1, S. 56–63
- [58] FRÖHLICH, J. : *Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen*. Wiesbaden, Deutschland : Teubner Verlag, 2006
- [59] FUREBY, C. : A comparative study of flamelet and finite rate chemistry LES for a swirl stabilized flame. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 134 (2012), Nr. 4, S. 041503
- [60] GAO, F. ; O'BRIEN, E. : A large-eddy simulation scheme for turbulent reacting flows. In: *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics* 5 (1993), Nr. 6, S. 1282–1284
- [61] GARNIER, E. ; ADAMS, N. A. ; SAGAUT, P. : *Large eddy simulation for compressible flows*. Springer, 2009
- [62] GERLINGER, P. : *Numerische Verbrennungssimulation: Effiziente numerische Simulation turbulenter Verbrennung*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005
- [63] GOOS, E. ; BURCAT, A. ; RUSCIC, B. : New NASA thermodynamic polynomials database with active thermochemical tables updates. In: *Report ANL 5 20* (2005)
- [64] GOOS, E. ; BURCAT, A. ; RUSCIC, B. : *Extended third millennium ideal gas and condensed phase thermochemical database for combustion with updates from active thermochemical tables*. <http://burcat.technion.ac.il/dir>. Version: 2009

- [65] GORELLI, F. ; SANTORO, M. ; SCOPIGNO, T. ; KRISCH, M. ; RUOCCO, G. : Liquidlike behavior of supercritical fluids. In: *Physical Review Letters* 97 (2006), Nr. 24, S. 15–18
- [66] GOTTIPARTHI, K. C. ; SANKARAN, R. : Large eddy simulation of a supercritical fuel jet-in-cross-flow using GPU acceleration. In: *54th AIAA Aerospace Sciences Meeting: AIAA paper 2016-1939*, 2016
- [67] GROSS, J. ; SADOWSKI, G. : Perturbed-chain SAFT: An equation of state based on a perturbation theory for chain molecules. In: *Industrial & Engineering Chemistry Research* 40 (2001), Nr. 4, S. 1244–1260
- [68] GUEZENNEC, N. ; MASQUELET, M. ; MENON, S. : Large eddy simulation of flame-turbulence interactions in a LOX-CH₄ shear coaxial injector. In: *50th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition: AIAA paper 2012-1267*, 2012
- [69] HABIBALLAH, M. ; ORAIN, M. ; GRISCH, F. ; VINGERT, L. ; GICQUEL, P. : Experimental studies of high-pressure cryogenic flames on the Mascotte facility. In: *Combustion Science and Technology* 178 (2006), Nr. 1-3, S. 101–128
- [70] HAIDN, O. J. ; HABIBALLAH, M. : Research on high pressure cryogenic combustion. In: *Aerospace Science and Technology* 7 (2003), Nr. 6, S. 473–491
- [71] HAIRER, E. ; WANNER, G. : *Solving ordinary differential equations II: Stiff and differential-algebraic problems*. Springer Berlin Heidelberg, 1996
- [72] HAKIM, L. ; SCHMITT, T. ; DUCRUIX, S. ; CANDEL, S. : Dynamics of a transcritical coaxial flame under a high-frequency transverse acoustic forcing: Influence of the modulation frequency on the flame response. In: *Combustion and Flame* 162 (2015), Nr. 10, S. 3482–3502
- [73] HARDI, J. S. ; MARTINEZ, H. C. G. ; OSCHWALD, M. ; DALLY, B. B. : LOx jet atomization under transverse acoustic oscillations. In: *Journal of Propulsion and Power* 30 (2014), Nr. 2, S. 337–349
- [74] HARSTAD, K. ; BELLAN, J. : Interactions of fluid oxygen drops in fluid hydrogen at rocket chamber pressures. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 41 (1998), Nr. 22, S. 3551–3558
- [75] HARSTAD, K. G. ; MILLER, R. S. ; BELLAN, J. : Efficient high-pressure state equations. In: *AIChE Journal* 43 (1997), Nr. 6, S. 1605–1610
- [76] HAWORTH, D. C. : Progress in probability density function methods for turbulent reacting flows. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 36 (2010), Nr. 2, S. 168–259
- [77] HICKEL, S. ; ADAMS, N. A. ; DOMARADZKI, J. A. : An adaptive local deconvolution method for implicit LES. In: *Journal of Computational Physics* 213 (2006), Nr. 1, S. 413–436
- [78] HICKEL, S. ; EGERER, C. P. ; LARSSON, J. : Subgrid-scale modeling for implicit large eddy simulation of compressible flows and shock turbulence interaction. In: *Physics of Fluids (1994-present)* 26 (2014), Nr. 10, S. 106101
- [79] HICKEY, J.-P. ; IHME, M. : Large eddy simulation of supercritical mixing and combustion for rocket applications. In: *52nd Aerospace Sciences Meeting: AIAA paper 2014-0138*, 2014
- [80] HICKEY, J.-P. ; MA, P. C. ; IHME, M. ; THAKUR, S. S. : Large eddy simulation of shear coaxial rocket injector: Real fluid effects. In: *49th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference: AIAA paper 2013-4071*, 2013

- [81] HUO, H. ; YANG, V. : Subgrid-scale models for large-eddy simulation of supercritical combustion. In: *51st AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition: AIAA paper 2013-0706* (2013)
- [82] IHME, M. ; PITTSCH, H. : Prediction of extinction and reignition in nonpremixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model. 2. Application in LES of Sandia flames D and E. In: *Combustion and Flame* 155 (2008), Nr. 1-2, S. 90–107
- [83] ISSA, R. I.: Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. In: *Journal of Computational Physics* 62 (1985), Nr. 1, S. 40–65
- [84] ISSA, R. I.: Solution of the implicitly discretised reacting flow equations by operator-splitting. In: *Journal of Computational Physics* 93 (1991), Nr. 2, S. 388–410
- [85] JABERI, F. a. ; COLUCCI, P. J. ; JAMES, S. ; GIVI, P. ; POPE, S. B.: Filtered mass density function for large-eddy simulation of turbulent reacting flows. In: *Journal of Fluid Mechanics* 401 (1999), S. 85–121
- [86] JACOBSEN, R. T. ; STEWART, R. B.: Thermodynamic properties of nitrogen including liquid and vapor phases from 63K to 2000K with pressures to 10,000 bar. In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 2 (1973), Nr. 4, S. 757–922
- [87] JARCZYK, M. ; PFITZNER, M. : Large eddy simulation of supercritical nitrogen jets. In: *50th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition: AIAA paper 2012-1270*, 2012
- [88] JARCZYK, M. ; POHL, S. ; MÜLLER, H. ; PFITZNER, M. : CFD-simulation of LOX/H₂ injection and combustion at supercritical pressures. In: *ERCOTAC Bulletin 96: Reactive Flows and Combustion*. 2013
- [89] JARCZYK, M. : *Numerische Modellierung von turbulenten Strömungen realer Gasgemische*, Universität der Bundeswehr München, Diss., 2013
- [90] JARRIN, N. ; BENHAMADOUCHE, S. ; LAURENCE, D. ; PROSSER, R. : A synthetic-eddy-method for generating inflow conditions for large-eddy simulations. In: *International Journal of Heat and Fluid Flow* 27 (2006), Nr. 4, S. 585–593
- [91] JASAK, H. : *Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows*, Imperial College, London, UK, Diss., 1996
- [92] JONES, W. P. ; JURISCH, M. ; MARQUIS, A. J.: Examination of an oscillating flame in the turbulent flow around a bluff body with large eddy simulation based on the probability density function method. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 95 (2015), Nr. 2-3, S. 519–538
- [93] JONES, W. P. ; MARQUIS, a. J. ; PRASAD, V. N.: LES of a turbulent premixed swirl burner using the Eulerian stochastic field method. In: *Combustion and Flame* 159 (2012), Nr. 10, S. 3079–3095
- [94] JONES, W. P. ; NAVARRO-MARTINEZ, S. : Numerical study of n-heptane auto-ignition using LES-PDF methods. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 83 (2009), Nr. 3, S. 407–423
- [95] JONES, W. P. ; PRASAD, V. N.: Large eddy simulation of the Sandia flame series (D-F) using the Eulerian stochastic field method. In: *Combustion and Flame* 157 (2010), Nr. 9, S. 1621–1636
- [96] JONES, W. P. ; PRASAD, V. N.: LES-pdf simulation of a spark ignited turbulent methane jet. In: *Proceedings of the Combustion Institute* Bd. 33, 2011, S. 1355–1363
- [97] JONES, W. ; LINDSTEDT, R. : Global reaction schemes for hydrocarbon combustion. In: *Combustion and Flame* 73 (1988), Nr. 3, S. 233–249

- [98] JUNIPER, M. ; TRIPATHI, A. ; SCOUFLAIRE, P. ; ROLON, J.-c. ; CANDEL, S. : Structure of cryogenic flames at elevated pressures. In: *Proceedings of the Combustion Institute* Bd. 28, 2000, S. 1103–1109
- [99] KATHROTIA, T. ; FIKRI, M. ; BOZKURT, M. ; HARTMANN, M. ; RIEDEL, U. ; SCHULZ, C. : Study of the H+O+M reaction forming OH*: Kinetics of OH* chemiluminescence in hydrogen combustion systems. In: *Combustion and Flame* 157 (2010), Nr. 7, S. 1261–1273
- [100] KAWAI, S. ; SHANKAR, S. K. ; LELE, S. K.: Assessment of localized artificial diffusivity scheme for large-eddy simulation of compressible turbulent flows. In: *Journal of Computational Physics* 229 (2010), Nr. 5, S. 1739–1762
- [101] KAWAI, S. ; TERASHIMA, H. ; NEGISHI, H. : A robust and accurate numerical method for transcritical turbulent flows at supercritical pressure with an arbitrary equation of state. In: *Journal of Computational Physics* 300 (2015), S. 116–135
- [102] KEIZER, J. ; (Hrsg.): *Statistical thermodynamics of nonequilibrium processes*. Springer Science & Business Media, 1987
- [103] KELLER, B. R. ; GERLINGER, P. : Steady and unsteady numerical simulations of a methane combustion model chamber. <http://www.sfbtr40.de/index.php/de/publikationen/proceedings-of-the-summer-programs>. *Sonderforschungsbereich/Transregio 40 – Summer Program Report* (2015), S. 173–184
- [104] KEMENOV, K. A. ; WANG, H. ; POPE, S. B.: Modelling effects of subgrid-scale mixture fraction variance in LES of a piloted diffusion flame. In: *Combustion Theory and Modelling* 16 (2012), Nr. 4, S. 611–638
- [105] KIM, S. K. ; CHOI, H. S. ; KIM, Y. : Thermodynamic modeling based on a generalized cubic equation of state for kerosene/LOx rocket combustion. In: *Combustion and Flame* 159 (2012), Nr. 3, S. 1351–1365
- [106] KIM, T. ; KIM, Y. ; KIM, S.-K. : Real-fluid flamelet modeling for gaseous hydrogen/cryogenic liquid oxygen jet flames at supercritical pressure. In: *Journal of Supercritical Fluids* 58 (2011), Nr. 2, S. 254–262
- [107] KIM, T. ; KIM, Y. ; KIM, S. K.: Effects of pressure and inlet temperature on coaxial gaseous methane/liquid oxygen turbulent jet flame under transcritical conditions. In: *Journal of Supercritical Fluids* 81 (2013), S. 164–174
- [108] KLEIN, M. ; SADIKI, A. ; JANICKA, J. : A digital filter based generation of inflow data for spatially developing direct numerical or large eddy simulations. In: *Journal of Computational Physics* 186 (2003), Nr. 2, S. 652–665
- [109] KLEPIKOV, I. A. ; KATORGIN, B. I. ; CHVANOV, V. K.: New generation of rocket engines, operating by ecologically safe propellant ‘liquid oxygen and liquefied natural gas (methane)’. In: *Acta Astronautica* 41 (1997), Nr. 4-10, S. 209–217
- [110] KNAB, O. ; FREY, M. ; GÖRGEN, J. ; MAEDING, C. ; QUERING, K. ; WIEDMANN, D. : Progress in combustion and heat transfer modelling in rocket thrust chamber applied engineering. In: *45th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit: AIAA paper 2009-5477*, 2009
- [111] KNUDSEN, E. ; RICHARDSON, E. S. ; DORAN, E. M. ; PITSCH, H. ; CHEN, J. H.: Modeling scalar dissipation and scalar variance in large eddy simulation: Algebraic and transport equation closures. In: *Physics of Fluids (1994-present)* 24 (2012), Nr. 5, S. 055103
- [112] KOLMOGOROV, A. N.: The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers. In: *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 30 (1941), Nr. 4, S. 299–303

- [113] KULKARNI, R. M. ; POLIFKE, W. : LES of Delft-jet-in-hot-coflow (DJHC) with tabulated chemistry and stochastic fields combustion model. In: *Fuel Processing Technology* 107 (2013), S. 138–146
- [114] KUNZ, O. ; KLIMECK, R. ; WAGNER, W. ; JAESCHKE, M. : *The GERG-2004 wide-range equation of state for natural gases and other mixtures*. VDI Verlag, 2007
- [115] KUNZ, O. ; WAGNER, W. : The GERG-2008 wide-range equation of state for natural gases and other mixtures: an expansion of GERG-2004. In: *Journal of Chemical & Engineering Data* 57 (2011), Nr. 11, S. 3032–3091
- [116] KUO, K. K.: *Principles of combustion*. John Wiley & Sons, 2005
- [117] KUO, K. K. ; ACHARYA, R. : *Fundamentals of turbulent and multi-phase combustion*. John Wiley & Sons, 2012
- [118] KUTNEY, M. C. ; DODD, V. S. ; SMITH, K. A. ; HERZOG, H. J. ; TESTER, J. W.: A hard-sphere volume-translated van der Waals equation of state for supercritical process modeling 1. Pure components. In: *Fluid Phase Equilibria* 128 (1997), Nr. 1-2, S. 149–171
- [119] LACAZE, G. ; OEFELEIN, J. C.: A non-premixed combustion model based on flame structure analysis at supercritical pressures. In: *Combustion and Flame* 159 (2012), Nr. 6, S. 2087–2103
- [120] LAPENNA, P. E. ; CIOTTOLI, P. P. ; CRETA, F. : The effect of fuel composition on the non-premixed flame structure of LNG/LOx mixtures at supercritical pressure. In: *54th AIAA Aerospace Sciences Meeting: AIAA paper 2016-0690*, 2016
- [121] LEER, B. van: Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. In: *Journal of Computational Physics* 14 (1974), Nr. 4, S. 361–370
- [122] LEONARD, A. : Energy cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows. In: *Turbulent diffusion in environmental pollution* 18 (1974), S. 237–248
- [123] LILLY, D. K.: On the application of the eddy viscosity concept in the inertial sub-range of turbulence. In: *National Center for Atmospheric Research* 123 (1966)
- [124] LIN, H. ; DUAN, Y.-Y. : Empirical correction to the Peng–Robinson equation of state for the saturated region. In: *Fluid Phase Equilibria* 233 (2005), Nr. 2, S. 194–203
- [125] LÜDECKE, D. ; LÜDECKE, C. : *Thermodynamik: Physikalisch-chemische Grundlagen der thermischen Verfahrenstechnik*. Springer, 2000
- [126] MARIC, T. ; HOPKEN, J. ; MOONEY, K. : *Getting started with OpenFOAM technology*. Packt Publishing Limited, 2014
- [127] MARRACINO, B. ; LENTINI, D. : Radiation modelling in non-luminous nonpremixed turbulent flames. In: *Combustion Science and Technology* 128 (1997), Nr. 1-6, S. 23–48
- [128] MARTIN, J. J.: Equations of state - Applied thermodynamics symposium. In: *Industrial & Engineering Chemistry* 59 (1967), Nr. 12, S. 34–52
- [129] MARTIN, J. J.: Cubic Equations of State - Which? In: *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 18 (1979), Nr. 2, S. 81–97
- [130] MASQUELET, M. ; GUEZENNEC, N. ; MENON, S. : Numerical studies of mixing and flame-turbulence interactions in shear coaxial injector flows under trans-critical conditions. In: *50th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition: AIAA paper 2012-1269*, 2012

- [131] MATHEIS, J. ; MÜLLER, H. ; LENZ, C. ; PFITZNER, M. ; HICKEL, S. : Volume translation methods for real-gas computational fluid dynamics simulations. In: *Journal of Supercritical Fluids* 107 (2016), S. 422–432
- [132] MATHEIS, J. ; MÜLLER, H. ; PFITZNER, M. ; HICKEL, S. : Large eddy simulation of cryogenic coaxial LN₂/GH₂ injection under supercritical pressures. In: *International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP-9)*. Melbourne, Australien, 2015
- [133] MATSUYAMA, S. ; SHINJO, J. ; MIZOBUCHI, Y. : LES of high-frequency combustion instability in a rocket combustor. In: *51st AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition: AIAA paper 2012-1271*, 2013
- [134] MATSUYAMA, S. ; SHINJO, J. ; OGAWA, S. ; MIZOBUCHI, Y. : Large eddy simulation of LO_x/GH₂ shear-coaxial jet flame at supercritical pressure. In: *48th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition: AIAA Paper 2010-208*, 2010
- [135] MAUSS, F. ; KELLER, D. ; PETERS, N. : A lagrangian simulation of flamelet extinction and re-ignition in turbulent jet diffusion flames. In: *Symposium (International) on Combustion* 23 (1991), Nr. 1, S. 693–698
- [136] MAYER, W. ; SCHIK, A. ; SCH-ARING, M. ; FFLER ; TAMURA, H. : Injection and mixing processes in high-pressure liquid oxygen/gaseous hydrogen rocket combustors. In: *Journal of Propulsion and Power* 16 (2000), Nr. 5, S. 823–828
- [137] MAYER, W. ; SCHIK, A. ; VIELLE, B. ; CHAVEAU, C. ; GÖKALP, I. ; TALLEY, D. : Atomization and breakup of cryogenic propellants under high pressure subcritical and supercritical conditions. In: *Journal of Propulsion and Power* 14 (1998), Nr. 5, S. 835–842
- [138] MAYER, W. ; TELAAR, J. ; BRANAM, R. ; SCHNEIDER, G. ; HUSSONG, J. : Raman measurements of cryogenic injection at supercritical pressure. In: *Heat and Mass Transfer* 39 (2003), Nr. 8-9, S. 709–719
- [139] MAYER, W. ; TAMURA, H. : Propellant injection in a liquid oxygen/gaseous hydrogen rocket engine. In: *Journal of Propulsion and Power* 12 (1996), Nr. 6, S. 1137–1147
- [140] MENG, H. ; YANG, V. : A unified treatment of general fluid thermodynamics and its application to a preconditioning scheme. In: *Journal of Computational Physics* 189 (2003), Nr. 1, S. 277–304
- [141] MERY, Y. ; DUCRUIX, S. ; SCOUFLAIRE, P. ; CANDEL, S. : Injection coupling with high amplitude transverse modes: Experimentation and simulation. In: *Comptes Rendus Mécanique* 337 (2009), Nr. 6, S. 426–437
- [142] MÉRY, Y. ; HAKIM, L. ; SCOUFLAIRE, P. ; VINGERT, L. ; DUCRUIX, S. ; CANDEL, S. : Experimental investigation of cryogenic flame dynamics under transverse acoustic modulations. In: *Comptes Rendus Mécanique* 341 (2013), Nr. 1-2, S. 100–109
- [143] MILLER, R. ; HARSTAD, K. ; BELLAN, J. : Direct numerical simulation of supercritical mixing layers applied to heptane hydrogen. In: *Journal of Fluid Mechanics* 436 (2001), S. 1–39
- [144] MOUKALLED, F. ; MANGANI, L. ; DARWISH, M. : *The finite volume method in computational fluid dynamics: An advanced introduction with OpenFOAM® and Matlab (fluid mechanics and its applications)*. Springer, 2015
- [145] MÜLLER, H. ; PFITZNER, M. : Large Eddy Simulation turbulenter, nicht-vorgemischter Verbrennung unter Verwendung der Eulerian Stochastic Field Methode in OpenFOAM. In: *27. VDI Flammentag*. Clausthal, Deutschland, 2015

- [146] MÜLLER, H. ; FERRARO, F. ; PFITZNER, M. : Implementation of a steady laminar flamelet model for non-premixed combustion in LES and RANS simulations. In: *8th International OpenFOAM Workshop*. Jeju, Südkorea, 2013
- [147] MÜLLER, H. ; MATHEIS, J. ; PFITZNER, M. ; HICKEL, S. : Large-eddy simulation of coaxial LN₂/GH₂ injection at trans- and supercritical conditions. In: *Journal of Propulsion and Power* 32 (2016), Nr. 1, S. 46–56
- [148] MÜLLER, H. ; NIEDERMEIER, C. A. ; JARCZYK, M. ; PFITZNER, M. ; HICKEL, S. ; ADAMS, N. A.: Large-eddy simulation of trans- and supercritical injection. In: *EUCASS Book Series, Progress in Propulsion Physics*, im Druck
- [149] MÜLLER, H. ; NIEDERMEIER, C. A. ; JARCZYK, M. ; PFITZNER, M. ; HICKEL, S. ; ADAMS, N. A.: Large-eddy simulation of trans- and supercritical injection. In: *5th European Conference for Aerospace Sciences (EUCASS)*. München, Deutschland, 2013
- [150] MÜLLER, H. ; PFITZNER, M. : Large-eddy simulation of transcritical LO_x/CH₄ jet flames. In: *6th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (EUCASS)*. Krakau, Polen, 2015
- [151] MÜLLER, H. ; PFITZNER, M. ; MATHEIS, J. ; HICKEL, S. : Large-eddy simulation of coaxial LN₂/GH₂ injection at trans- and supercritical conditions. In: *53rd Aerospace Sciences Meeting: AIAA-paper 2015-0843*. Kissimmee, Florida, USA, 2015
- [152] MÜLLER, H. ; NIEDERMEIER, C. A. ; MATHEIS, J. ; PFITZNER, M. ; HICKEL, S. : Large-eddy simulation of nitrogen injection at trans- and supercritical conditions. In: *Physics of Fluids (1994-present)* 28 (2016), Nr. 1, S. 015102
- [153] MURADOGLU, M. ; POPE, S. B. ; CAUGHEY, D. A.: The hybrid method for the PDF equations of turbulent reactive flows: consistency conditions and correction algorithms. In: *Journal of Computational Physics* 172 (2001), Nr. 2, S. 841–878
- [154] MUSTATA, R. ; VALIÑO, L. ; JIMÉNEZ, C. ; JONES, W. P. ; BONDI, S. : A probability density function Eulerian Monte Carlo field method for large eddy simulations: Application to a turbulent piloted methane/air diffusion flame (Sandia D). In: *Combustion and Flame* 145 (2006), Nr. 1-2, S. 88–104
- [155] NIEDERMEIER, C. A. ; MÜLLER, H. ; JARCZYK, M. ; HICKEL, S. ; ADAMS, N. A. ; PFITZNER, M. : Large-eddy simulation of turbulent trans- and supercritical mixing. In: *AIAA Computational Fluid Dynamics Conference: AIAA paper 2013-2950*. San Diego, Kalifornien, USA, 2013
- [156] OEFELEIN, J. : Mixing and combustion of cryogenic oxygen-hydrogen shear-coaxial jet flames at supercritical pressure. In: *Combustion Science and Technology* 178 (2006), Nr. 1-3, S. 229–252
- [157] OEFELEIN, J. ; YANG, V. : Modeling high-pressure mixing and combustion processes in liquid rocket engines. In: *Journal of Propulsion and Power* 14 (1998), Nr. 5, S. 843–857
- [158] OEFELEIN, J. ; YANG, V. : Analysis of transcritical spray phenomena in turbulent mixing layers. In: *34th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit: AIAA Paper 1996-0085*, 1996
- [159] OKONG’O, N. ; BELLAN, J. : Direct numerical simulation of a transitional supercritical binary mixing layer: heptane and nitrogen. In: *Journal of Fluid Mechanics* 464 (2002), Nr. 1, S. 1–34
- [160] OKONG’O, N. ; HARSTAD, K. ; BELLAN, J. : Direct numerical simulations of O/H temporal mixing layers under supercritical conditions. In: *AIAA Journal* 10 (2002), Nr. 5, S. 914–926

- [161] ØKSENDAL, B. : *Stochastic differential equations*. Springer Berlin Heidelberg, 2003
- [162] OLDENHOF, E. ; WECKENMANN, F. ; LAMANNA, G. ; WEIGAND, B. ; BORK, B. ; DREIZLER, A. : Experimental investigation of isolated acetone droplets at ambient and near-critical conditions, injected in a nitrogen atmosphere. In: *Progress in Propulsion Physics* Bd. 4. EDP Sciences, 2013, S. 257–270
- [163] OSCHWALD, M. : *Email-Verkehr zu den Messergebnissen der koaxialen N₂/H₂-Einspritzung*. April 2014
- [164] OSCHWALD, M. ; SCHIK, A. : Supercritical nitrogen free jet investigated by spontaneous Raman scattering. In: *Experiments in Fluids* 27 (1999), Nr. 6, S. 497–506
- [165] OSCHWALD, M. ; SCHIK, A. ; KLAR, M. ; MAYER, W. : Investigation of coaxial LN₂-GH₂-injection at supercritical pressure by spontaneous Raman scattering. In: *35th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit: AIAA paper 99-2887*, 1999
- [166] OSCHWALD, M. ; SMITH, J. J. ; BRANAM, R. ; HUSSONG, J. ; SCHIK, A. ; CHEHROUDI, B. ; TALLEY, D. : Injection of fluids into supercritical environments. In: *Combustion Science and Technology* 178 (2006), Nr. 1-3, S. 49–100
- [167] PARK, T. S. ; KIM, S.-K. : A pressure-based algorithm for gaseous hydrogen/liquid oxygen jet flame at supercritical pressure. In: *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications* 67 (2015), Nr. 5, S. 547–570
- [168] PARK, T. S. : LES and RANS simulations of cryogenic liquid nitrogen jets. In: *Journal of Supercritical Fluids* 72 (2012), S. 232–247
- [169] PÉNELOUX, A. ; RAUZY, E. ; FRÉZE, R. : A consistent correction for Redlich-Kwong-Soave volumes. In: *Fluid Phase Equilibria* 8 (1982), Nr. 1, S. 7–23
- [170] PENG, D.-Y. ; ROBINSON, D. B. : A new two-constant equation of state. In: *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 15 (1976), Nr. 1, S. 59–64
- [171] PETERS, N. : Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 10 (1984), Nr. 3, S. 319–339
- [172] PETERS, N. : Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. In: *Symposium (International) on Combustion* Bd. 21, 1986, S. 1231–1250
- [173] PETERS, N. : *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, 2000
- [174] PETIT, X. ; RIBERT, G. ; LARTIGUE, G. ; DOMINGO, P. : Large-eddy simulation of supercritical fluid injection. In: *Journal of Supercritical Fluids* 84 (2013), S. 61–73
- [175] PETIT, X. ; RIBERT, G. ; DOMINGO, P. : Framework for real-gas compressible reacting flows with tabulated thermochemistry. In: *Journal of Supercritical Fluids* 101 (2015), S. 1–16
- [176] PIERCE, C. D. ; MOIN, P. : A dynamic model for subgrid-scale variance and dissipation rate of a conserved scalar. In: *Physics of Fluids (1994-present)* 10 (1998), Nr. 12, S. 3041–3044
- [177] PIERCE, C. ; MOIN, P. : Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. In: *Journal of Fluid Mechanics* 504 (2004), S. 73–97
- [178] PITSCH, H. : *Flamemaster*. <http://www.itv.rwth-aachen.de/downloads/flamemaster/>
- [179] PITSCH, H. ; STEINER, H. : Large-eddy simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame (Sandia flame D). In: *Physics of Fluids (1994-present)* 12 (2000), Nr. 10, S. 2541–2554

- [180] PITSCH, H. : Large-eddy simulation of turbulent combustion. In: *Annual Review of Fluid Mechanics* 38 (2006), S. 453–482
- [181] POHL, S. ; JARCZYK, M. ; PFITZNER, M. ; ROGG, B. : Real gas CFD simulations of hydrogen/oxygen supercritical combustion. In: *Progress in Propulsion Physics* Bd. 4. EDP Sciences, 2013, S. 583–614
- [182] POINSOT, T. ; VEYNANTE, D. : *Theoretical and numerical combustion*. RT Edwards, Inc., 2005
- [183] POLING, B. E. ; PRAUSNITZ, J. M. ; O'CONNELL, J. P.: *The properties of gases and liquids*. Mc Graw Hill, 2001
- [184] PONS, L. ; DARABIHA, N. ; CANDEL, S. ; RIBERT, G. ; YANG, V. : Mass transfer and combustion in transcritical non-premixed counterflows. In: *Combustion Theory and Modelling* 13 (2009), Nr. 1, S. 57–81
- [185] POPE, S. B.: A Monte Carlo method for the PDF equations of turbulent reactive flow. In: *Combustion Science and Technology* 25 (1981), Nr. 5-6, S. 159–174
- [186] POPE, S. B.: *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000
- [187] POPE, S. B.: PDF methods for turbulent reactive flows. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 11 (1985), Nr. 2, S. 119–192
- [188] POPE, S. B.: Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows. In: *New Journal of Physics* 6 (2004), Nr. 1, S. 35
- [189] PRASAD, V. N.: *Large eddy simulation of partially premixed turbulent combustion*, Imperial College, London, UK, Diss., 2011
- [190] RAMAN, V. ; PITSCH, H. ; FOX, R. O.: Hybrid large-eddy simulation/Lagrangian filtered-density-function approach for simulating turbulent combustion. In: *Combustion and Flame* 143 (2005), Nr. 1, S. 56–78
- [191] REMMLER, S. ; HICKEL, S. : Spectral eddy viscosity of stratified turbulence. In: *Journal of Fluid Mechanics* 755 (2014), S. R6
- [192] REYNOLDS, W. C.: The potential and limitations of direct and large eddy simulations. In: *Whither turbulence? Turbulence at the crossroads*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1990, S. 313–343
- [193] RIBERT, G. ; TAIEB, D. ; YANG, V. : Large-eddy simulation of a supercritical channel flow using a shock capturing numerical scheme. In: *Computers and Fluids* 117 (2015), S. 103–113
- [194] RIBERT, G. ; ZONG, N. ; YANG, V. ; PONS, L. ; DARABIHA, N. ; CANDEL, S. : Counterflow diffusion flames of general fluids: Oxygen/hydrogen mixtures. In: *Combustion and Flame* 154 (2008), Nr. 3, S. 319–330
- [195] RUIZ, A. M. ; LACAZE, G. ; OEFELEIN, J. C.: Numerical benchmark for high-Reynolds-number supercritical flows with large density gradients. In: *AIAA Journal* (2015)
- [196] SABEL'NIKOV, V. ; SOULARD, O. : Rapidly decorrelating velocity-field model as a tool for solving one-point Fokker-Planck equations for probability density functions of turbulent reactive scalars. In: *Physical Review E* 72 (2005), Nr. 1, S. 016301
- [197] SCHLICHTING, H. ; GERSTEN, K. : *Grenzschicht-theorie*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006

- [198] SCHMITT, T. ; HAKIM, L. ; BOILEAU, M. ; RUIZ, A. ; DUCRUIX, S. ; CUENOT, B. ; CANDEL, S. : Large-eddy simulation of a multiple injector cryogenic combustor under transcritical conditions and large amplitude high frequency modulations. In: *Proceedings of Space Propulsion*, 2014
- [199] SCHMITT, T. ; L., S. ; CUENOT, B. ; POINSOT, T. : Large-eddy simulation of transcritical flows. In: *Comptes rendus mécanique* 337 (2009), Nr. 6, S. 528–538
- [200] SCHMITT, T. ; MÉRY, Y. ; BOILEAU, M. ; CANDEL, S. : Large-eddy simulation of oxygen/methane flames under transcritical conditions. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 33 (2011), S. 1383–1390
- [201] SCHMITT, T. ; RODRIGUEZ, J. ; LEYVA, I. a. ; CANDEL, S. : Experiments and numerical simulation of mixing under supercritical conditions. In: *Physics of Fluids (1994-present)* 24 (2012), Nr. 5, S. 055104
- [202] SCHMITT, T. ; RUIZ, A. ; SELLE, L. ; CUENOT, B. : Numerical investigation of destabilization of supercritical round turbulent jets using large eddy simulation. In: *Progress in Propulsion Physics* Bd. 2. EDP Sciences, 2011, S. 225–238
- [203] SCHMITT, T. ; SELLE, L. ; RUIZ, A. ; CUENOT, B. : Large-eddy simulation of supercritical-pressure round jets. In: *AIAA Journal* 48 (2010), Nr. 9, S. 2133–2144
- [204] SELLE, L. C. ; OKONG'O, N. A. ; BELLAN, J. ; HARSTAD, K. G.: Modelling of subgrid-scale phenomena in supercritical transitional mixing layers: an a priori study. In: *Journal of Fluid Mechanics* 593 (2007), S. 57–91
- [205] SENEGERS, J. V. ; KAYSER, R. F. ; PETERS, C. J. ; WHITE, H. J.: *Equations of state for fluids and fluid mixtures*. Elsevier, 2000
- [206] SEWERIN, F. ; RIGOPOULOS, S. : A methodology for the integration of stiff chemical kinetics on GPUs. In: *Combustion and Flame* 162 (2015), Nr. 4, S. 1375–1394
- [207] SHTEKKEL, F. A. ; TSIN, N. M.: Determination of the composition diagram for the liquid–gas system methane–nitrogen–hydrogen. In: *Zhurnal Khimicheskoi Promyshlennosti* 16 (1939), S. 24–28
- [208] SIMEONI, G. G. ; BRYK, T. ; GORELLI, F. a. ; KRISCH, M. ; RUOCCO, G. ; SANTORO, M. ; SCOPIGNO, T. : The Widom line as the crossover between liquid-like and gas-like behaviour in supercritical fluids. In: *Nature Physics* 6 (2010), Nr. 7, S. 503–507
- [209] SINGLA, G. ; SCOUFLAIRE, P. ; ROLON, C. ; CANDEL, S. : Transcritical oxygen/transcritical or supercritical methane combustion. In: *Proceedings of the Combustion Institute* Bd. 30, 2005, S. 2921–2928
- [210] SINGLA, G. ; SCOUFLAIRE, P. ; ROLON, J. C. ; CANDEL, S. : Flame stabilization in high pressure LOx/GH2 and GCH4 combustion. In: *Proceedings of the Combustion Institute* Bd. 31, 2007, S. 2215–2222
- [211] SMAGORINSKY, J. : General circulation experiments with the primitive equations I. The basic experiment. In: *Monthly weather review* 91 (1963), Nr. 3, S. 99–164
- [212] SMITH, G. P. ; GOLDEN, D. M. ; FRENKLACH, M. ; MORIARTY, N. W. ; EITENEER, B. ; GOLDENBERG, M. ; BOWMAN, C. T. ; HANSON, R. K. ; SONG, S. ; GARDINER, W. C. ; LISSIANSKI, V. V. ; QIN, Z. : *Gas Research Institute*. <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/>
- [213] SMOOKE, M. D.: *Reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for methane-air flames: a topical volume*. Bd. 384. 1991
- [214] SOAVE, G. : Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state. In: *Chemical Engineering Science* 27 (1972), Nr. 6, S. 1197–1203

- [215] STREETT, W. B. ; CALADO, J. C. G.: Liquid-vapour equilibrium for hydrogen + nitrogen at temperatures from 63 to 110 K and pressures to 57 MPa. In: *Journal of Chemical Thermodynamics* 10 (1978), Nr. 11, S. 1089–1100
- [216] SUTHERLAND, W. : The viscosity of gases and molecular force. In: *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 36 (1893), Nr. 223, S. 507–531
- [217] TANI, H. ; TERAMOTO, S. ; OKAMOTO, K. : High-speed observations of cryogenic single and coaxial jets under subcritical and transcritical conditions. In: *Experiments in Fluids* 56 (2015), Nr. 4, S. 1–13
- [218] TAŞKINOĞLU, E. S. ; BELLAN, J. : A posteriori study using a DNS database describing fluid disintegration and binary-species mixing under supercritical pressure: heptane and nitrogen. In: *Journal of Fluid Mechanics* 645 (2010), S. 211–254
- [219] TAŞKINOĞLU, E. S. ; BELLAN, J. : Subgrid-scale models and large-eddy simulation of oxygen stream disintegration and mixing with a hydrogen or helium stream at supercritical pressure. In: *Journal of Fluid Mechanics* 679 (2011), S. 156–193
- [220] TELAAR, J. ; SCHNEIDER, G. ; HUSSONG, J. ; MAYER, W. : Cryogenic jet injection: test case RCM 1. In: *Proceedings 2nd international workshop on Rocket Combustion Modeling* (2001)
- [221] TERASHIMA, H. ; KAWAI, S. ; YAMANISHI, N. : High-resolution numerical method for supercritical flows with large density variations. In: *AIAA Journal* 49 (2011), Nr. 12, S. 2658–2672
- [222] TERASHIMA, H. ; KOSHI, M. : Unique characteristics of cryogenic nitrogen jets under supercritical pressures. In: *Journal of Propulsion and Power* 29 (2013), Nr. 6, S. 1328–1336
- [223] TERASHIMA, H. ; KOSHIT, M. : Numerical study on mixing characteristics of coaxial cryogenic N₂/H₂ injection under supercritical pressure. In: *52nd Aerospace Sciences Meeting: AIAA paper 2014-0307*, 2014, S. 2–11
- [224] URBANO, A. ; NASUTI, F. : Conditions for the occurrence of heat transfer deterioration in light hydrocarbons flows. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 65 (2013), S. 599–609
- [225] VALIÑO, L. : Field Monte Carlo formulation for calculating the probability density function of a single scalar in a turbulent flow. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 60 (1998), Nr. 2, S. 157–172
- [226] VAN DER WAALS, J. D.: Over de Continuïteit van den Gas-en Vloeïstofoestand. In: *Sijthoff* 1 (1873)
- [227] VILLERMAUX, J. ; DEVILLON, J. C.: Représentation de la coalescence et de la redispersion des domaines de ségrégation dans un fluide par un modèle d'interaction phénoménologique. In: *Proceedings of the 2nd International symposium on chemical reaction engineering.*, 1972
- [228] VREMAN, A. W.: An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow: Algebraic theory and applications. In: *Physics of Fluids (1994 - present)* 16 (2004), Nr. 10, S. 3670–3681
- [229] WARNATZ, J. ; MAAS, U. : *Technische Verbrennung: Physikalisch-Chemische Grundlagen, Modellbildung, Schadstoffentstehung*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013
- [230] WIDOM, B. ; DOMB, C. (Hrsg.) ; GREEN, M. S. (Hrsg.): *Phase transitions and critical phenomena*. Academic Press, 1972

-
- [231] YANG, V. : Modeling of supercritical vaporization, mixing, and combustion processes in liquid-fueled propulsion systems. In: *Proc. of the Combustion Institute* Bd. 28, 2000, S. 925–942
- [232] ZONG, N. ; YANG, V. : Cryogenic fluid jets and mixing layers in transcritical and supercritical environments. In: *Combustion Science and Technology* 178 (2006), Nr. 1-3, S. 193–227
- [233] ZONG, N. ; MENG, H. ; HSIEH, S. Y. ; YANG, V. : A numerical study of cryogenic fluid injection and mixing under supercritical conditions. In: *Physics of Fluids (1994-present)* 16 (2004), Nr. 12, S. 4248–4261